

Függvények közelítő numerikus módszerei

Modern Tudományos Programozás 2017

Berényi Dániel
Wigner FK GPU Labor

2017 november 21.

Ez az előadás John P. Boyd (University of Michigan)

Chebyshev and Fourier Spectral Methods

című könyve alapján készült.



Semmilyen formulát ne higgyünk el, akárhol lehet elírás.

Maximum az implementált kódnak lehet hinni, amire készültek ellenőrzések.

>>>Link lesz majd itt a Github repora<<<

Szeretnénk függvényeket kezelni a számítógépen.

A diszkrét függvények könnyűek, azok csak egy kupac szám,
de a folytonos függvényeket valahogy reprezentálni kell...

És utána?

És ha reprezentáltuk? A kívánság lista hosszú:

Szeretnénk:

- Integrálni
- Deriválni
- Interpolálni
- Illeszteni
- Differenciál egyenletet megoldani
- Stb.
- ...

A lehetőségek:

Használunk valamilyen szimbolikus rendszert:

- Előnyök: az átalakítások mentesek a numerikus hibáktól
- Hátrányok: a kiértékelési költségek teljesen kiszámíthatatlanok lehetnek (főképp nagyok), a formulák nagyon gyorsan kezelhetetlenül bonyolulttá válhatnak, vagy esetleg nem is létezhetnek

Használhatunk valamilyen numerikus reprezentációt:

- Előny: lényegesen gyorsabb kiértékelés, majdnem mindig elvégezhetőek, a komplexitásuk nem függ a függvénytől
- Hátrány: figyelni kell a numerikus hibákra

Numerikus reprezentációk:

Valahogy diszkretizálni kell a függvényeket, illetve a műveleteket.

Sok helyen csak a legáltalánosabb módszereket mondják el, pedig az általános igazság:

Minél többet tudunk a függvényünkről, annál jobb speciális módszereket találhatunk, amik számos szempontból hatékonyabbak, mint az általános módszerek.

Numerikus reprezentációk:

Most kifejezetten azokra a valós függvényekre akarunk fókuszálni, amelyek ideális esetben:

Az értelmezési tartományukon folytonosak és minden deriváltjuk létezik és folytonos, azaz nincsen bennük, vagy a határokon pólus, szakadás, stb.

Ha ez nem teljesül tökéletesen, akkor legalább az első néhány derivált legyen folytonos...

Numerikus reprezentációk:

De mielőtt függvényekről lehetne beszélni...

Lebegőpontos számábrázolás!

Lebegőpontos számábrázolás:

IEEE szabvány a tizedestörtekre:

Egyszeres pontosság, kb. 7 tizedes jegy

Kétszeres pontosság, kb. 16 tizedes jegy

Ezek vannak hardveresen támogatva, ha ennél több tizedesjegy kéne, bajban vagyunk.

Lebegőpontos számábrázolás:

IEEE szabvány a tizedestörtekre:

Az alapl műveletek és a legtöbb speciális függvény garantálva van, hogy minden jegyre pontos (kivéve, amikor mégsem).

De amikor halmozzuk a műveleteket, akkor elkezdjük veszteni a tizedes jegyeket!

Ezért, ameddig lehet, érdemes szimbolikusan átalakított formulákat használni és csak a legvégén áttérni numerikus reprezentációra.

Lehet persze trükközni, például [Kahan összegzés](#):

```
template<typename T, typename F>
auto KahanSum(int i0, int i1, F f)
{
    T sum = 0.0;  T c    = 0.0;
    for(int i=i0; i<i1; ++i)
    {
        T y = f(i) - c;
        T t = sum + y;
        c = (t - sum) - y;
        sum = t;
    }
    return sum;
}
```

Lehet persze trükközni, például [Kahan összegzés](#):

```
template<typename T, typename F>
auto KahanSum(int i0, int i1, F f)
{
    T sum = 0.0; T c = 0.0;
    for(int i=i0; i<i1; ++i)
    {
        T y = f(i) - c;
        T t = sum + y;
        c = (t - sum) - y;
        sum = t;
    }
    return sum;
}
```

Ha sum nagy, és y kicsi, akkor itt elvesztjük y utolsó jegyeit

(t - sum) levonja a nagy helyiértékű részét y-nak, majd y levonása visszaadja az elvesztett jegyeket.

Ehhez hasonló trükkökkel mind a négy alpművelet pontosságát meg lehet kétszerezni. Sőt, némi kitartással n szerezni, anélkül, hogy nagyon költséges tetszőleges pontosságú könyvtárakat használnánk.

Példák: [qd](#), [double-double](#)

Sokszor azonban a legnagyobb veszteség a hosszú összeadásoknál jelentkezik, így minimálisan elég, ha a Kahan összegzést ismerjük.

Megjegyzendő, hogy egyes optimalizációknál a fordító eltűntetheti a szükséges műveleteket, mert ő egzaktnak veszi (egyes beállítások mellett) az aritmetikát, pedig nem az.

Visszatérve:

Függvények és függvénytáblázatok reprezentálása:

1. Numerikus integrálás

Numerikus integrálásnál a következő problémát szeretnénk megoldani:

$$I = \int_a^b f(x) dx$$

Numerikus integrálásnál a következő problémát szeretnénk megoldani:

$$I = \int_a^b f(x) dx \approx \sum_{i=0}^N f(x_i) w_i$$

Numerikus integrálásnál a következő problémát szeretnénk megoldani:

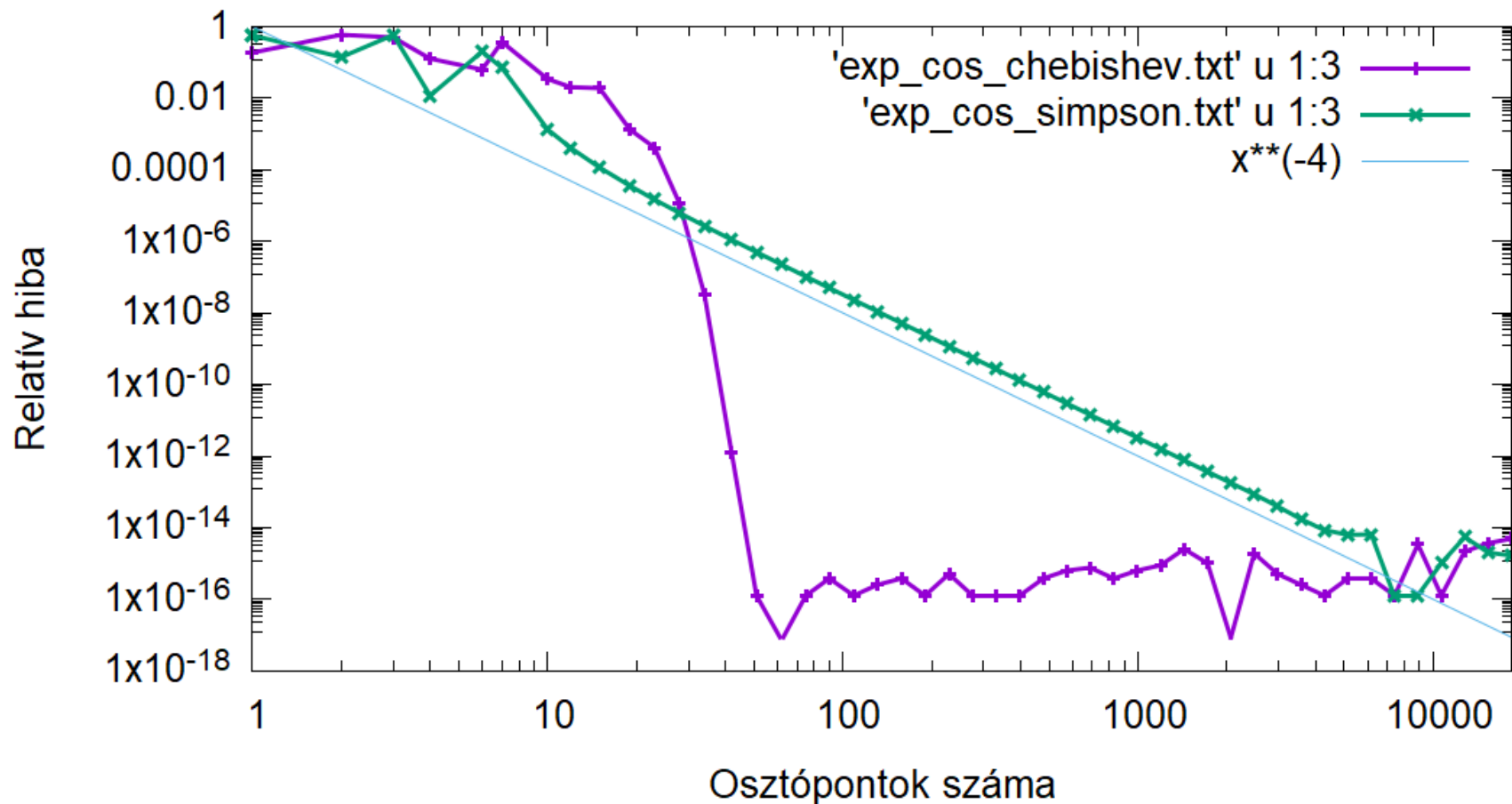
$$I = \int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=0}^N f(x_i)w_i$$

Tipikusan olyan módszereket szoktak ajánlani, amelyek egyenlő részekre osztják az integrálási tartományt, mint például a Simpson módszer:

$$I = \int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{6} \left(f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right)$$

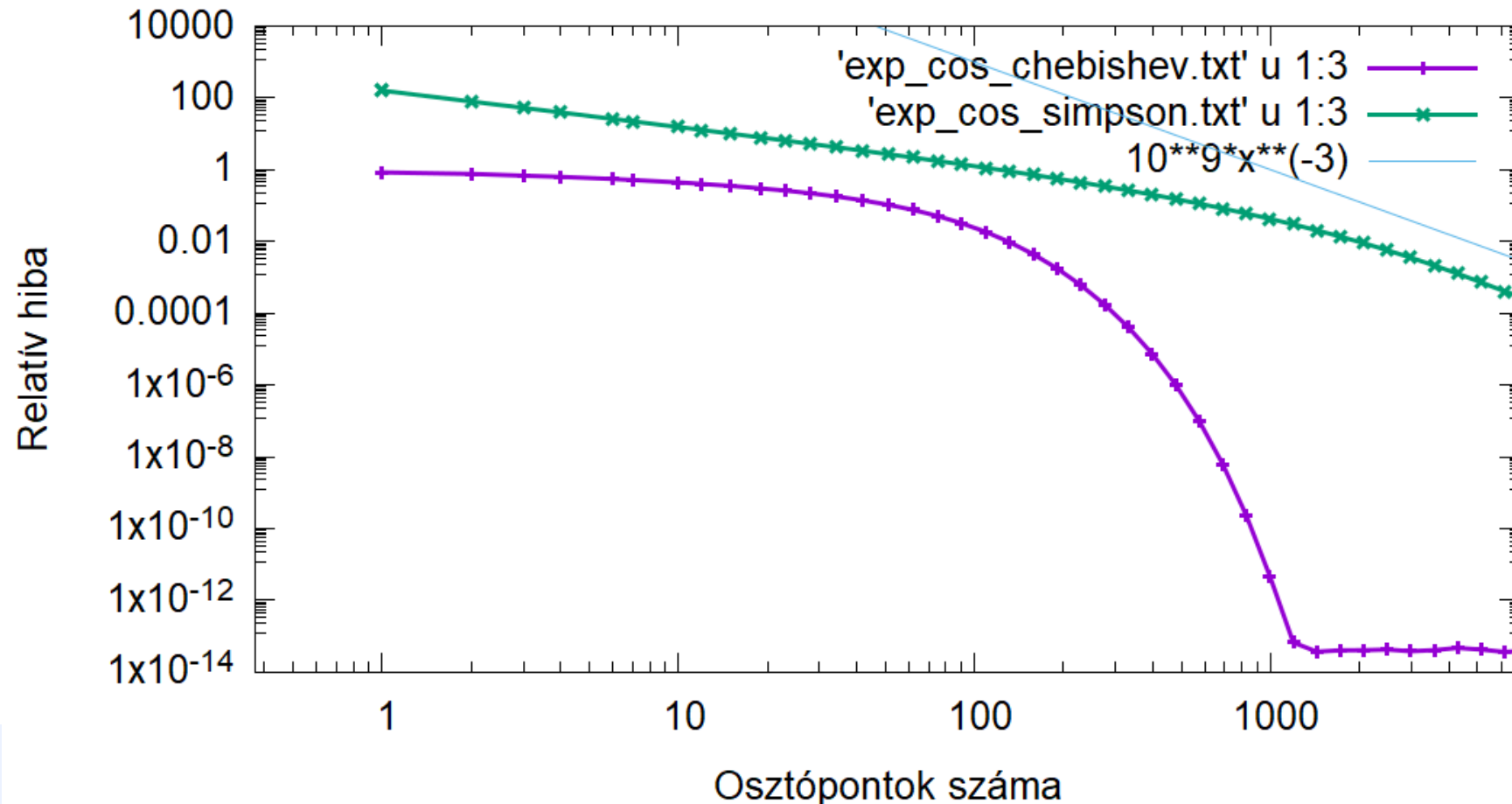
Numerikus integrálás

Azonban az általános módszerek konvergenciája nem túl jó,
például: $I = \int_0^2 e^{-x} \cos(10x)^2 dx$

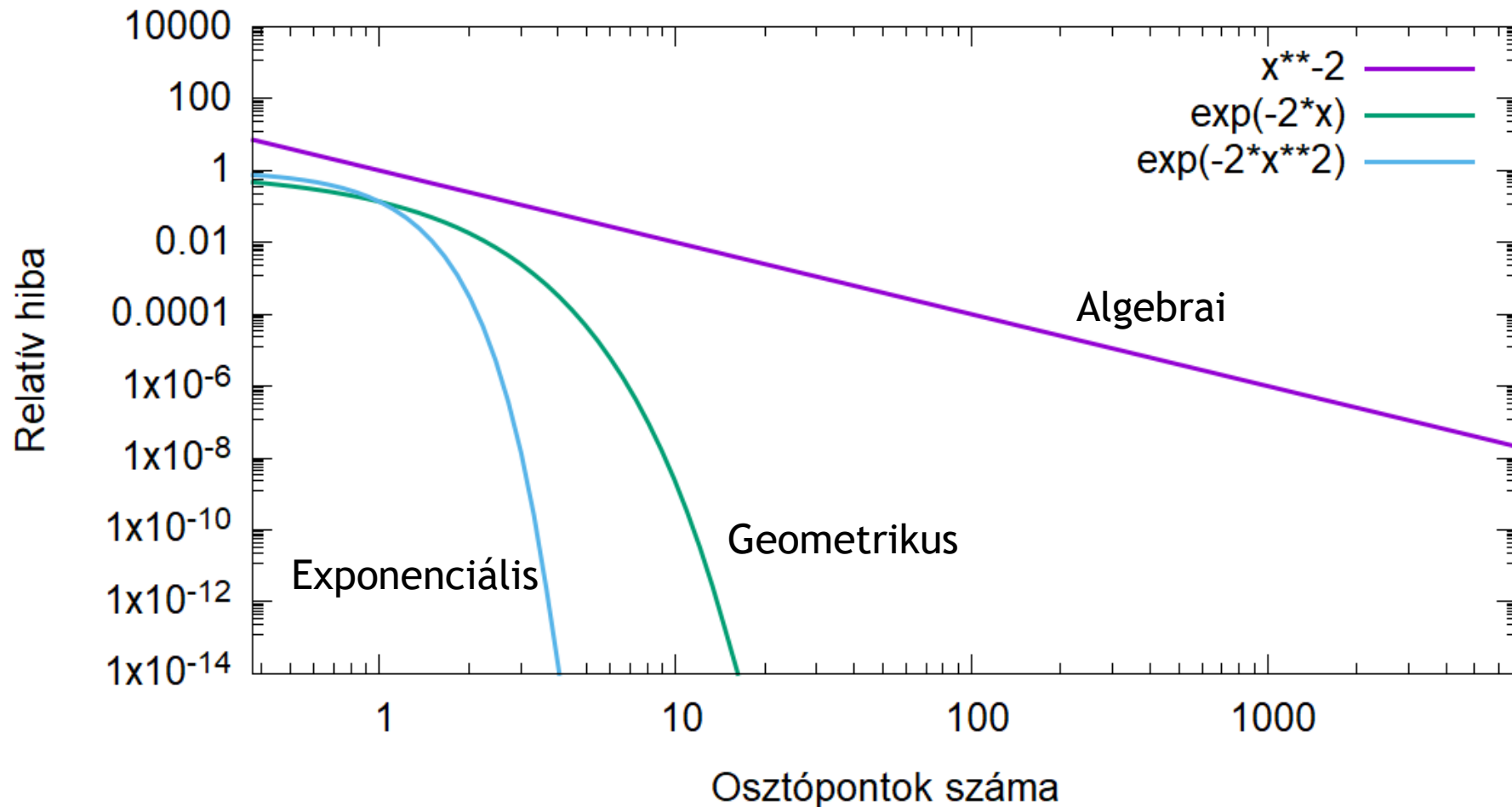


Numerikus integrálás

Azonban az általános módszerek konvergenciája nem túl jó,
például: $I = \int_0^2 \frac{x}{4.001-x^2} dx$



Konvergencia típusok:



Az egyenletes intervallumokra bontás nem minden függvényhez megfelelő.

Miért???

Az egyenletes intervallumokra bontás akkor jó választás, ha minden pont egyenértékű mértékben szorítja meg a függvényt.

Ez csak a periodikus függvényekre igaz!

Az egyenletes intervallumokra bontás akkor jó választás, ha minden pont egyenértékű mértékben szorítja meg a függvényt.

Mi történik, ha nem periodikus függvényekre az egyenletes felosztást erőltetjük?

Numerikus integrálás

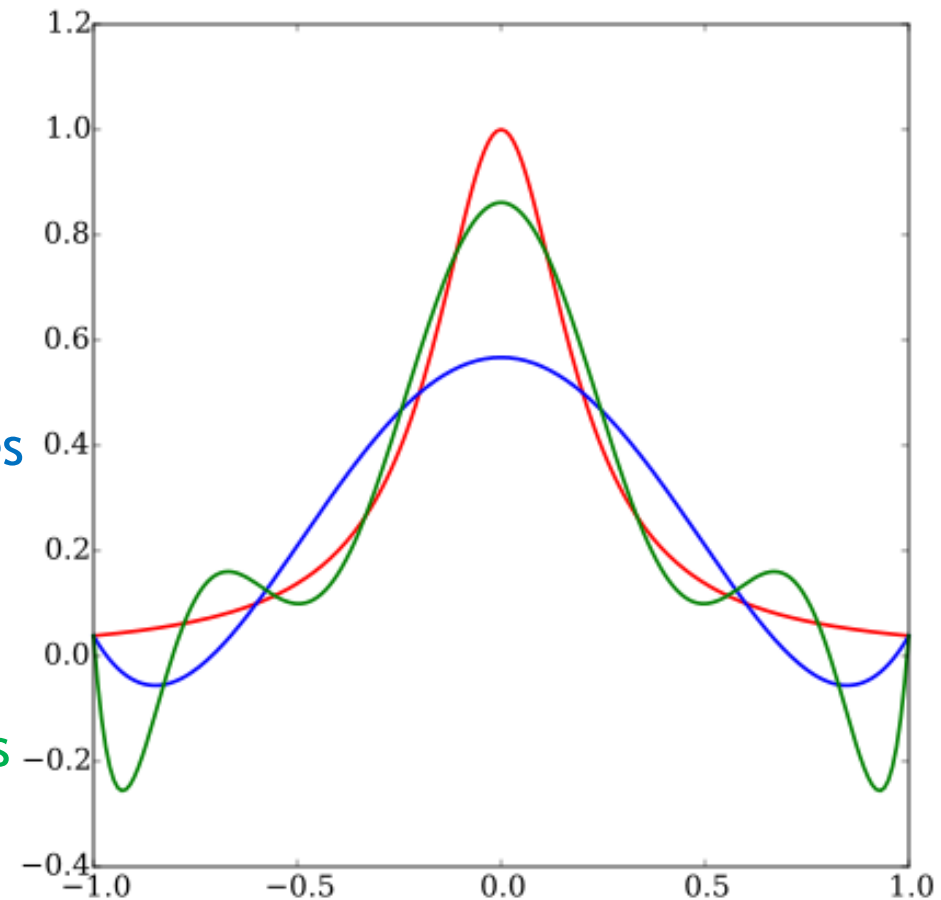
Mi történik, ha nem periodikus függvényekre az egyenletes felosztást erőltetjük?

Runge-jelenség:

Eredeti függvény

5-öd rendű polinom közelítés

9-ed rendű polinom közelítés



Az osztópontok kiválasztása megszorítja a bázist és lehet, hogy a megszorított bázis nem tudja jól reprezentálni a megoldást!

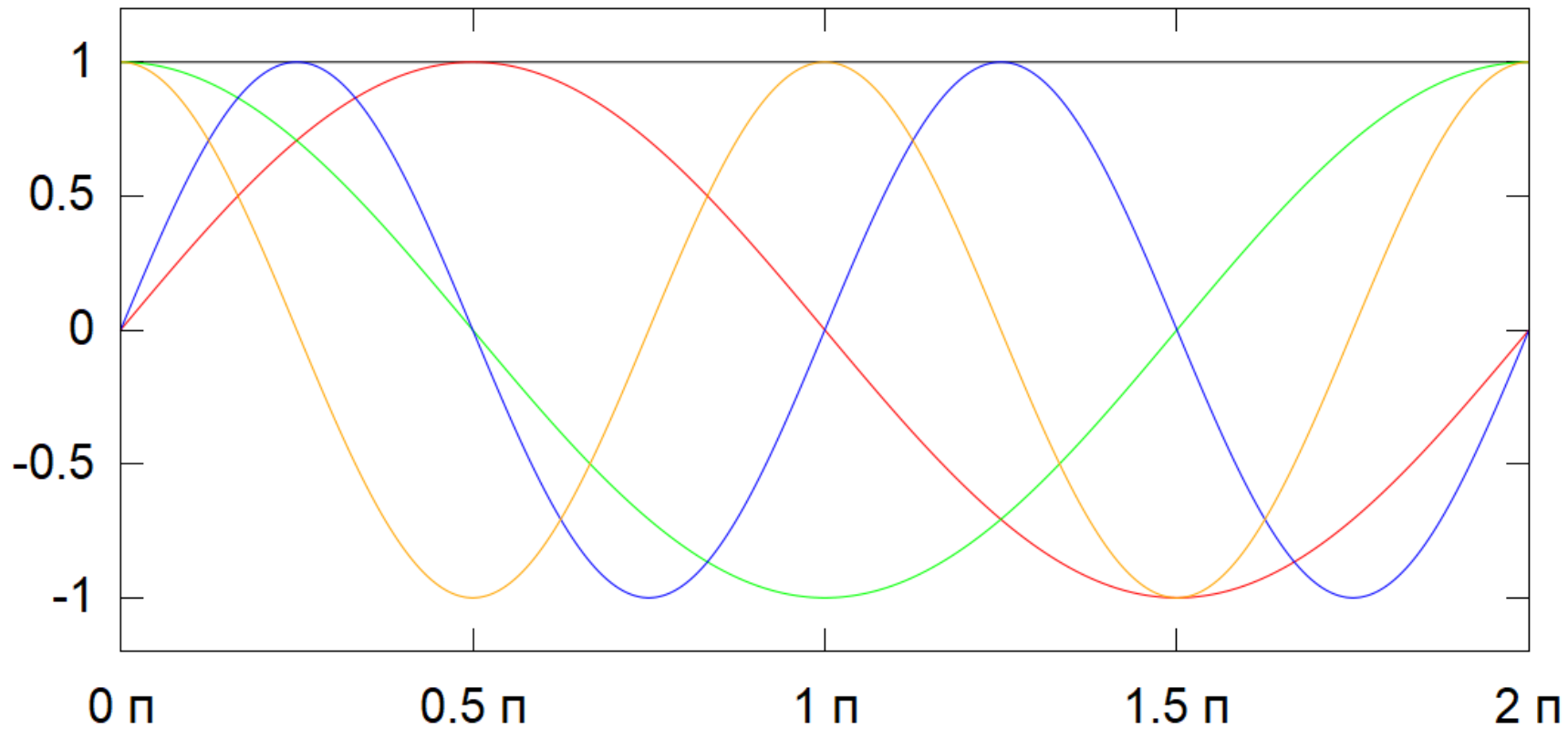
Ahhoz, hogy jobb konvergenciájú integrátorokat kapjunk, ki kell használni minden információt a problémáról, például a tartomány milyenségét, és a megfelelő osztópontokat és bázist kell választani.

Bázisok ($\Phi_i(x)$):

Periodikus tartomány:	Fourier
Véges tartomány:	Csebisev, Legendre, Gegenbauer polinomok
Félvégtesen tartomány:	Csebisev (transzformált), Laguerre
Végtesen tartomány:	Csebisev (transzformált), Hermite

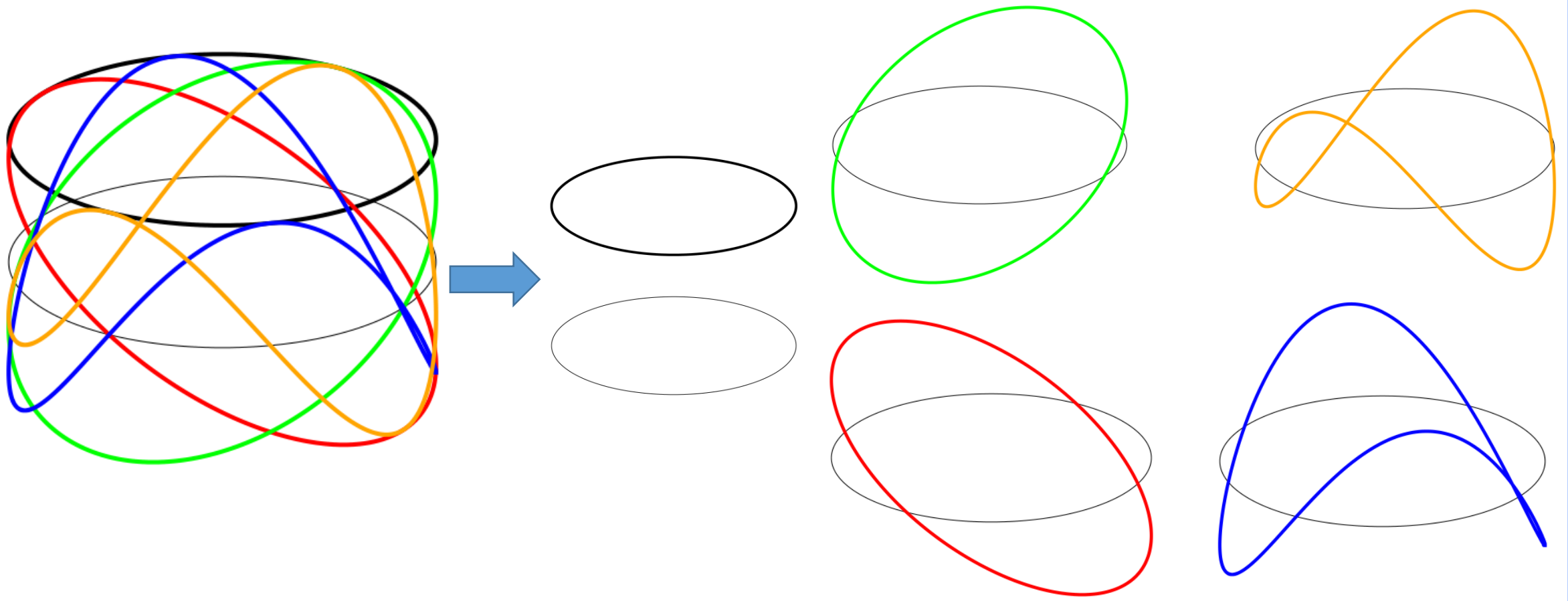
Bázisok

Fourier: $\Phi_k(x) = \{1 \cup \sin(kx) \cup \cos(kx)\}$

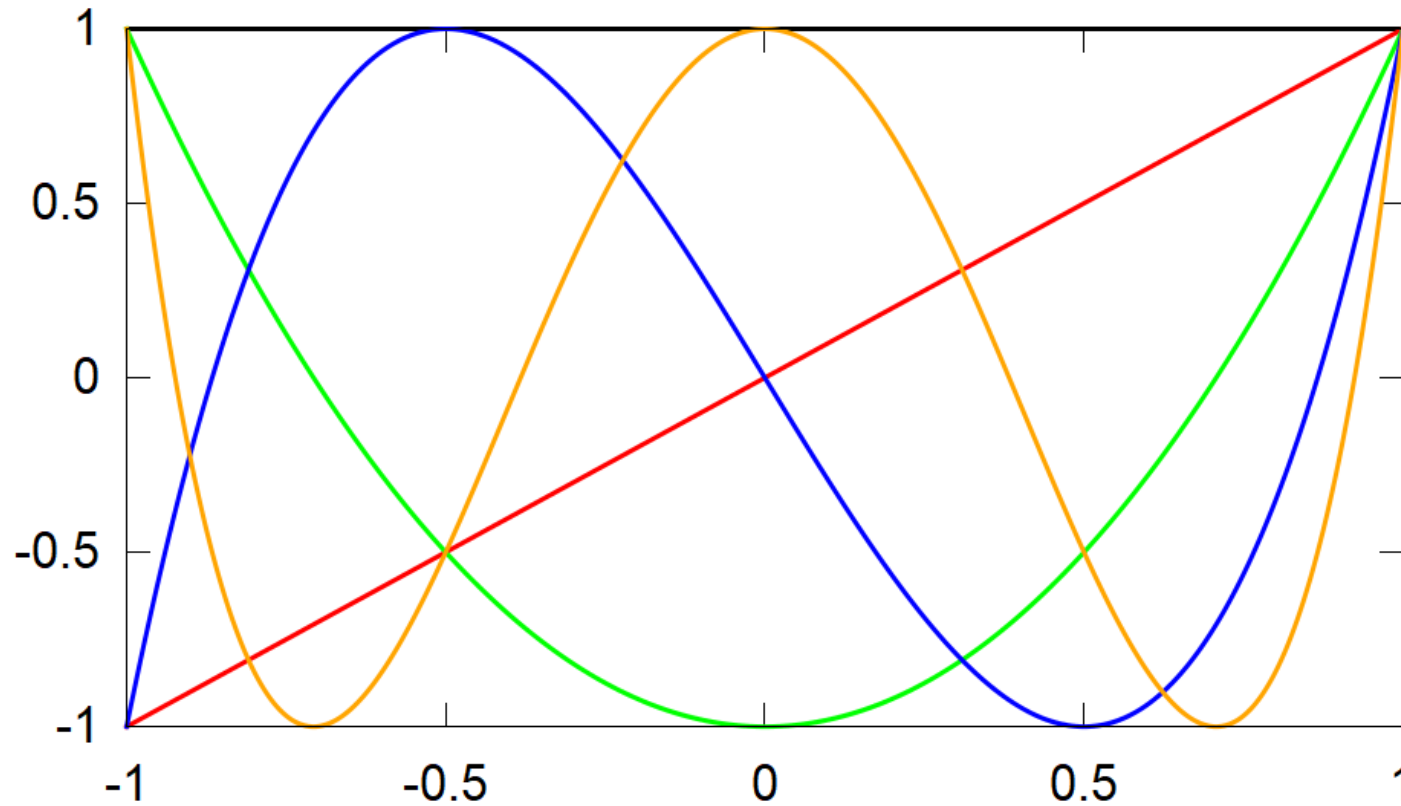


Bázisok

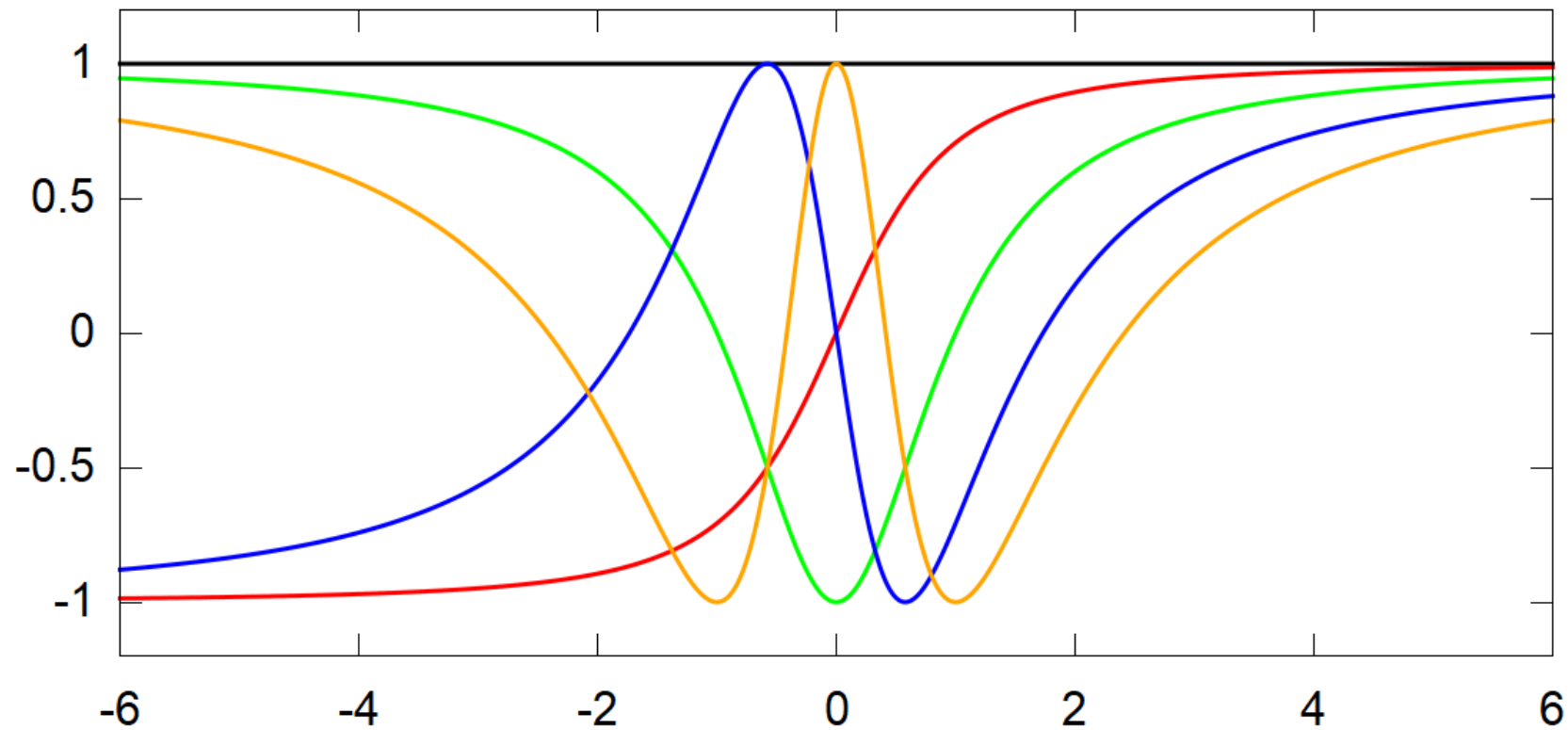
Fourier: $\Phi_k(x) = \{1 \cup \sin(kx) \cup \cos(kx)\}$



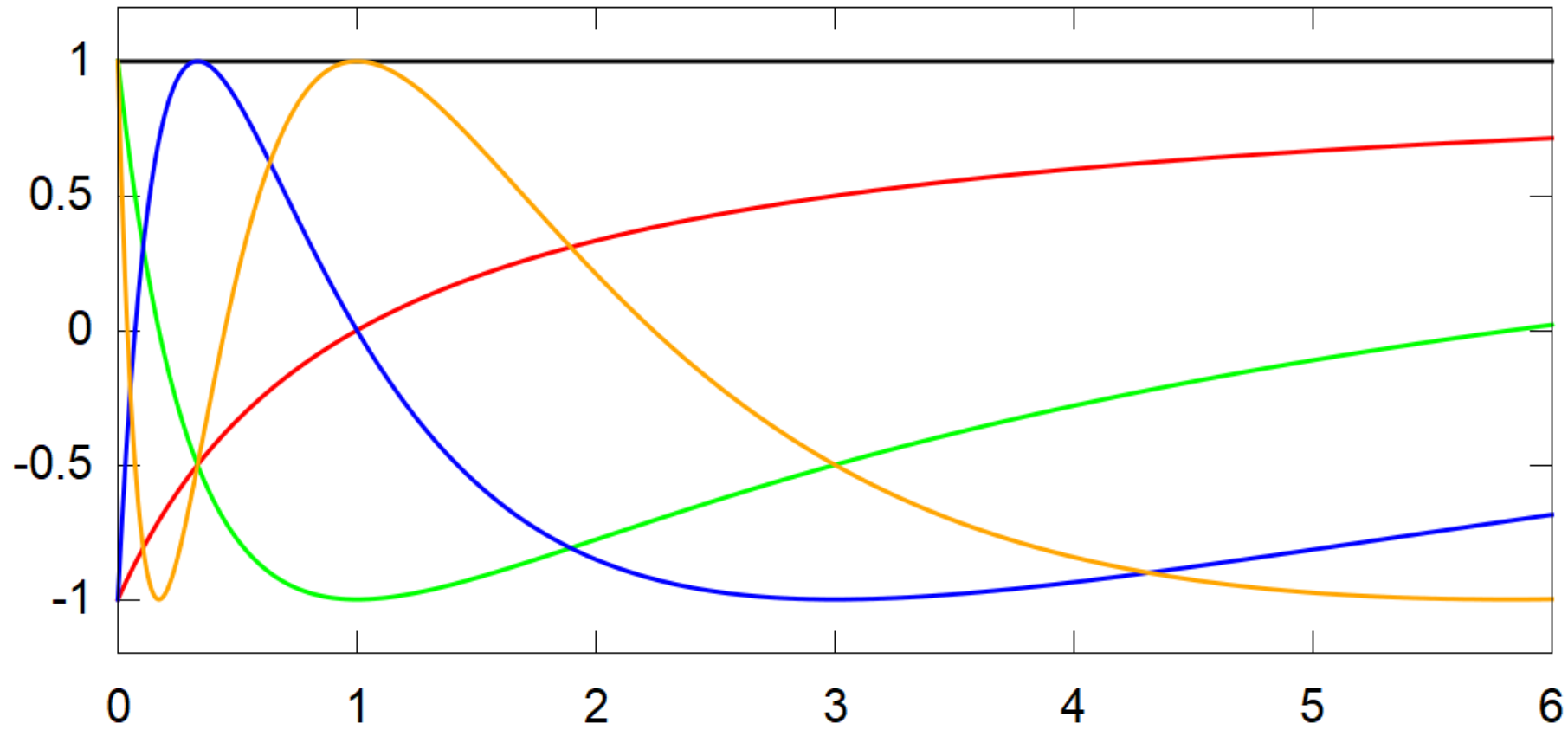
Csebishev: $\Phi_k(x) = \cos(k \arccos(x))$



Racionális Csebisev $[-\infty, +\infty]$: $\Phi_k(x) = \cos(k \operatorname{acot}(x/L))$



Racionális Csebisev $[0, +\infty]$: $\Phi_k(x) = \cos(2k \operatorname{acot}(\sqrt{x/L}))$



Numerikus integrálás

Integrálás a periodikus tartományon:

Integrálás a periodikus tartományon:

Téglalap (mid-point) rule:

$$I = \int_a^b f(x) dx \approx \frac{b-a}{N} \left[\sum_{k=0}^N f \left(a + \left(k - \frac{1}{2} \right) \frac{b-a}{N} \right) \right]$$

Trapéz szabály:

$$I = \int_a^b f(x) dx \approx \frac{b-a}{2N} \left[f(a) + f(b) + 2 \sum_{k=1}^{N-1} f \left(a + \frac{b-a}{N} k \right) \right]$$

Integrálás a periodikus tartományon:

Periodikus függvényekre ezek exponenciálisan [konvergálnak!!!](#)

(ha l -szer differenciálható az integrandus, akkor $err \approx O(N^{-(l+1)})$)

A legtöbb tankönyvben csak az van említve, hogy általános függvényekre $err \approx O(N^{-2})$ szerint konvergálnak...

Általános Kvadrátúra sémák

A kvadrátúrák a következő problémát oldják meg:

$$I = \int_a^b f(x)\rho(x)dx \approx \sum_{j=1}^N w_j f(x_j)$$

Ahol:

$f(x)$ egy adott integrálandó függvény

a, b az integrálási tartomány határai (esetleg végtelenek)

$\rho(x) \geq 0$ egy súlyfüggvény

w_j, x_j az integrálási tartományhoz tartozó súlyok és abszcisszák

Általános Kvadratura sémák

A megoldandó probléma:

$$I = \int_a^b f(x)\rho(x)dx \approx \sum_{j=1}^N w_j f(x_j)$$

A lényeges tulajdonság:

w_j és x_j független $f(x)$ -től, csak az integrálási tartománytól, $[a, b]$ -től és a súlyfüggvénytől, $\rho(x)$ -től függenek!

GAUSS-JACOBI Integrálási Tétel:

Ha az $N + 1$ darab “abszcisszát”, $\{x_i\}$ -t a $P_{N+1}(x)$ polinom gyökeinek választjuk, amely polinom az $N + 1$ -ed fokú tagja az $[a, b]$ intervallumon a $\rho(x)$ súlyfüggvénnyel ortogonális rendszert alkotó polinom rendszernek, $P_j(x)$ -nek, akkor az

$$\int_a^b f(x)\rho(x)dx \approx \sum_{i=1}^N w_i f(x_i)$$

kvadrátúra formula egzakt minden olyan $f(x)$ -re, amelyek legfeljebb $(2N + 1)$ -ed fokú polinomok.

Problémák:

Az abszcisszák esetenként transzcendentális függvények gyökei, amikre nincs zárt alak, csak numerikusan határozhatóak meg

Az osztópontok növelésével a korábbi sémák soha nem esnek egybe a későbbiekkel, így költséges az adaptív integrátorokhoz szükséges becslést kiszámolni.

Clenshaw és Curtis fedezte fel, hogyha nem a Gauss-i definíció szerinti abszcisszákat alkalmazzák, hanem a Csebisev polinomok extrémumait (Csebisev -Lobatto rács), akkor ugyan a kvadratura csak $N + 1$ -ed rendig lesz egzakt, de

- Az abszcisszák zárt alakban előállnak
- A kétszer akkora N -re kiértékelt függvényértékek közül minden másodikat felhasználva azonnal megkapható egy alacsonyabb rendű becslés

- Csebishev $[-1, 1]$

$$x_i = \cos\left(\frac{\pi i}{N+1}\right), \quad i = \{1, \dots, N\}$$

$$w_i = \frac{2}{N+1} \sin\left(\frac{\pi i}{N+1}\right) \sum_{k=1}^N \sin\left(\frac{\pi i k}{N+1}\right) \frac{1 - \cos(k\pi)}{k}$$

Clenshaw-Curtis kvadrátúra

- Csebishev $[0, \infty]$
- L egy megválasztandó skála

$$x_i = L \cot^2 \left(\frac{\pi i}{2(N+1)} \right), \quad i = \{1, \dots, N\}$$

$$w_i = \frac{4L}{N+1} \frac{\sin \left(\frac{\pi i}{N+1} \right)}{\left(1 - \cos \left(\frac{\pi i}{N+1} \right) \right)^2} \sum_{k=1}^N \sin \left(\frac{\pi i k}{N+1} \right) \frac{1 - \cos(k\pi)}{k}$$

Clenshaw-Curtis kvadrátúra

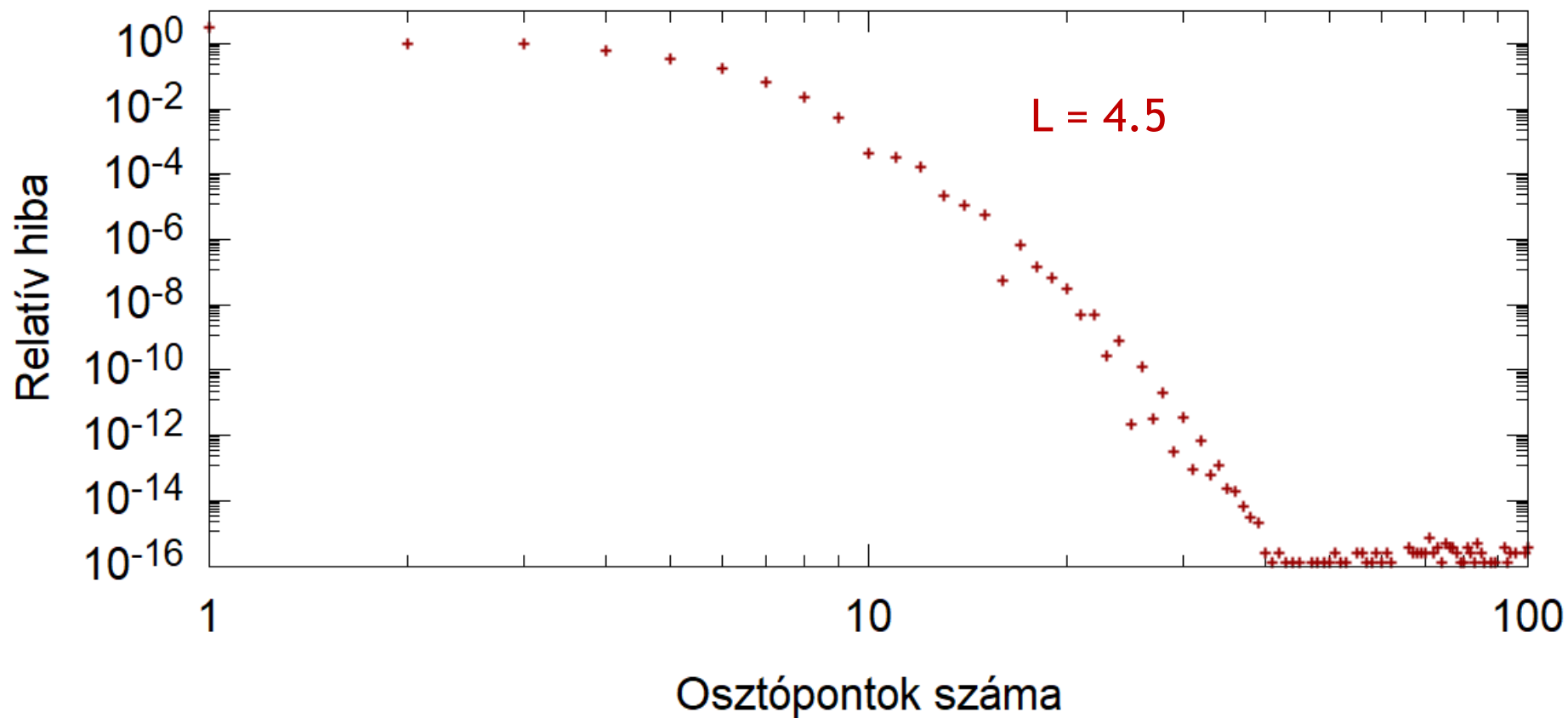
- Csebishev $[-\infty, \infty]$, ha a végtelenben 0-hoz tart a függvény
- L egy megválasztandó skála

$$x_i = L \cot\left(\frac{\pi i}{N+1}\right), \quad i = \{1, \dots, N\}$$

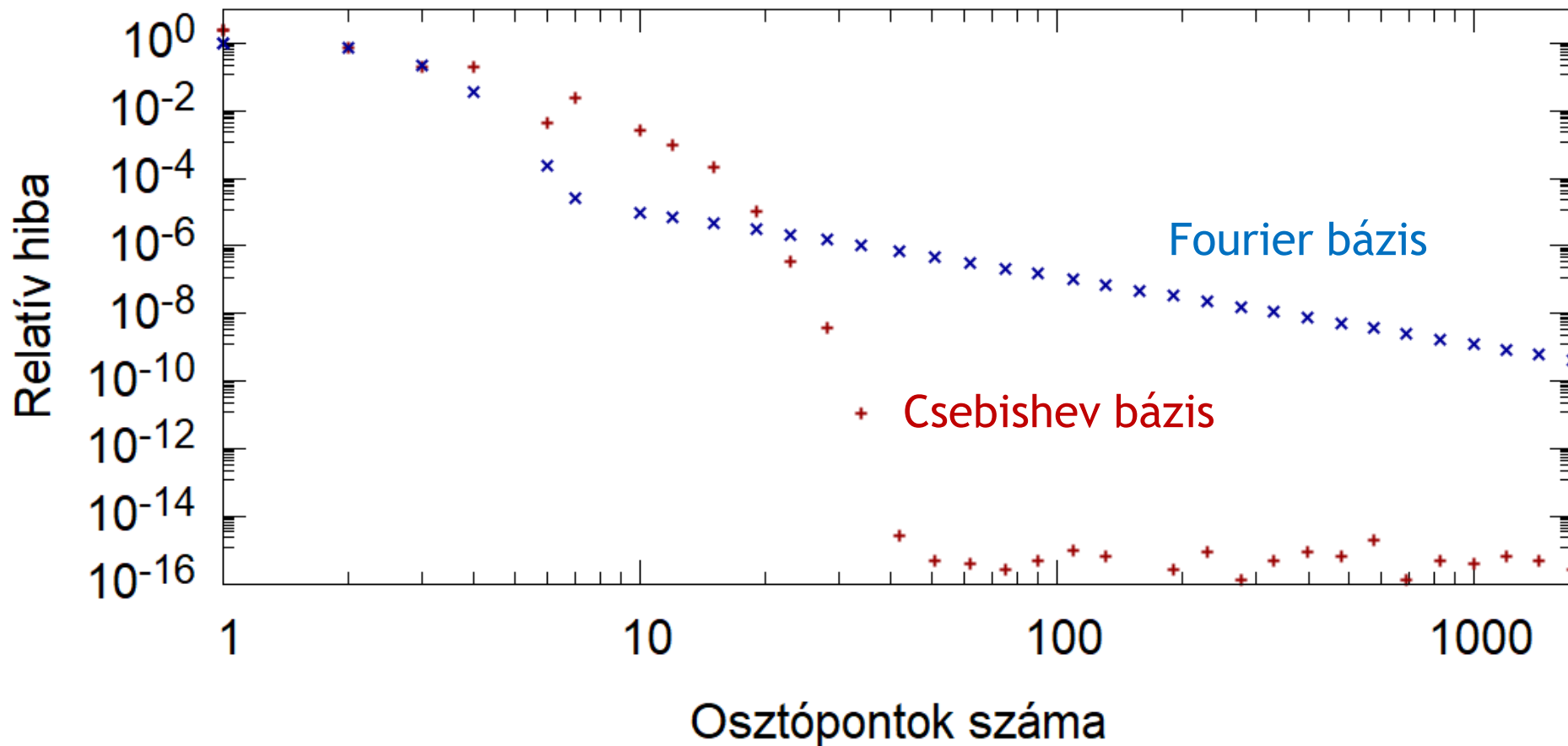
$$w_i = \frac{L\pi}{N+1} \frac{1}{\sin^2\left(\frac{\pi i}{N+1}\right)}$$

Példák

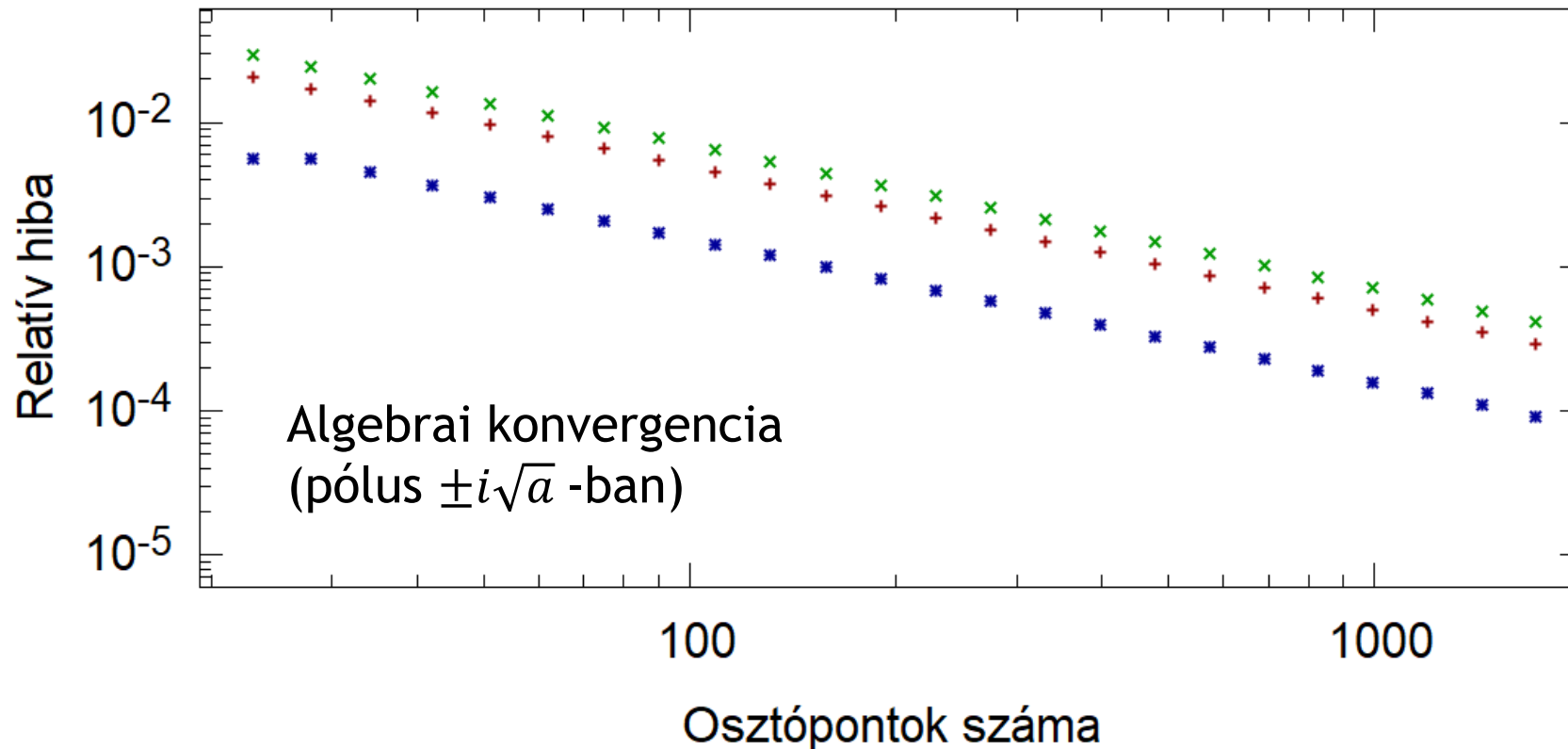
Sima ügy: $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi}$ Racionális Csebisev bázison:



Rejtett diszkontinuitás: $\int_{-\pi}^{\pi} e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi} \operatorname{erf}(\pi)$



Komplex pólusok: $\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{a+x^2} dx = \frac{\pi}{\sqrt{a}}$



$a = 2$

$a = 1$

$a = 0.1$

2. Interpoláció

Lineáris interpoláció

Lineáris interpoláció, adott (x_0, y_0) és (x_1, y_1)

Ekkor:

$$y(x) = y_0 c_0(x) + y_1 c_1(x)$$

$$\text{ahol } c_0(x) = 1 - \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} \text{ és } c_1(x) = 1 - \frac{x_1 - x}{x_1 - x_0}$$

Lagrange interpoláció

Lagrange interpoláció:

Általánosítsuk ugyan ezt magasabb fokszámú polinomokra

Lagrange interpoláció

Lagrange interpoláció, adott (x_i, y_i) , $i = 0 \dots n + 1$
ahol MINDEN x különböző!

Ekkor:

$$y(x) = \sum_i^n y_i c_i(x)$$

ahol:

$$c_i(x) = \prod_{\substack{0 \leq k \leq n \\ i \neq k}} \frac{x - x_k}{x_i - x_k}$$

Lagrange interpoláció

Lagrange interpoláció, adott (x_i, y_i) , $i = 0 \dots n + 1$
ahol MINDEN x különböző!

Ekkor:

$$y(x) = \sum_i^n y_i c_i(x)$$

ahol:

$$c_i(x) = \prod_{\substack{0 \leq k \leq n \\ i \neq k}} \frac{x - x_k}{x_i - x_k}$$

1 bemeneti x_i hiányzik minden c_i -ből!

A red arrow points from the text "1 bemeneti x_i hiányzik minden c_i-ből!" to the condition "i ≠ k" in the denominator of the product formula, which is circled in red.

Lagrange interpoláció

Adott (x_i, y_i) , $i = 0 \dots n + 1$

$$y(x) = \sum_i^n y_i c_i(x)$$

$$c_i(x) = \prod_{\substack{0 \leq k \leq n \\ i \neq k}} \frac{x - x_k}{x_i - x_k}$$

$$\begin{matrix} c_{i \neq k}(x_k) = 0 \\ c_{i = k}(x_k) = 1 \end{matrix} \longrightarrow c_i(x_k) = \delta_{ik}$$

Akkor most általánosítsuk az előzőeket különböző intervallumokra:

Kardinális függvények

A kardinális függvények definiáló tulajdonsága, hogy:

$$C_i(x_j) = \delta_{ij}$$

ahol x_j -k a korábban bevezetett abszcisszák, másnéven kollokációs pontok.

Trigonometrikus, periodikus eset:

$$x_i = \frac{2\pi i}{N}, \quad i = \{0, \dots, N - 1\}$$

$$C_i(x) = \frac{1}{N} \sin \left[\frac{N(x - x_i)}{2} \right] \cot \left[\frac{x - x_i}{2} \right]$$

Trigonometrikus, periodikus eset:

$$x_i = \frac{2\pi i}{N}, \quad i = \{0, \dots, N - 1\}$$

$$C_i(x) = \frac{1}{N} \sin \left[\frac{N(x - x_i)}{2} \right] \cot \left[\frac{x - x_i}{2} \right]$$

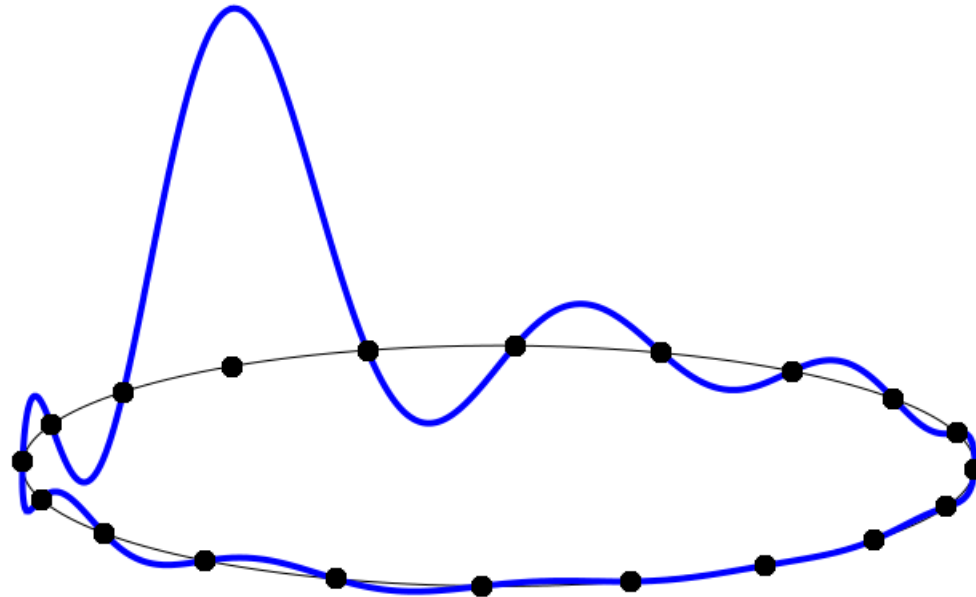


Ez az alak divergens $x = x_i$ -nél,
pedig a kifejezés értéke 1

Kardinális függvények

Trigonometrikus, periodikus eset:

$$C_i(x) = \frac{1}{N} \sin \left[\frac{N(x - x_i)}{2} \right] \cot \left[\frac{x - x_i}{2} \right]$$



Chebyshev $[-1, 1]$ végpontos eset:

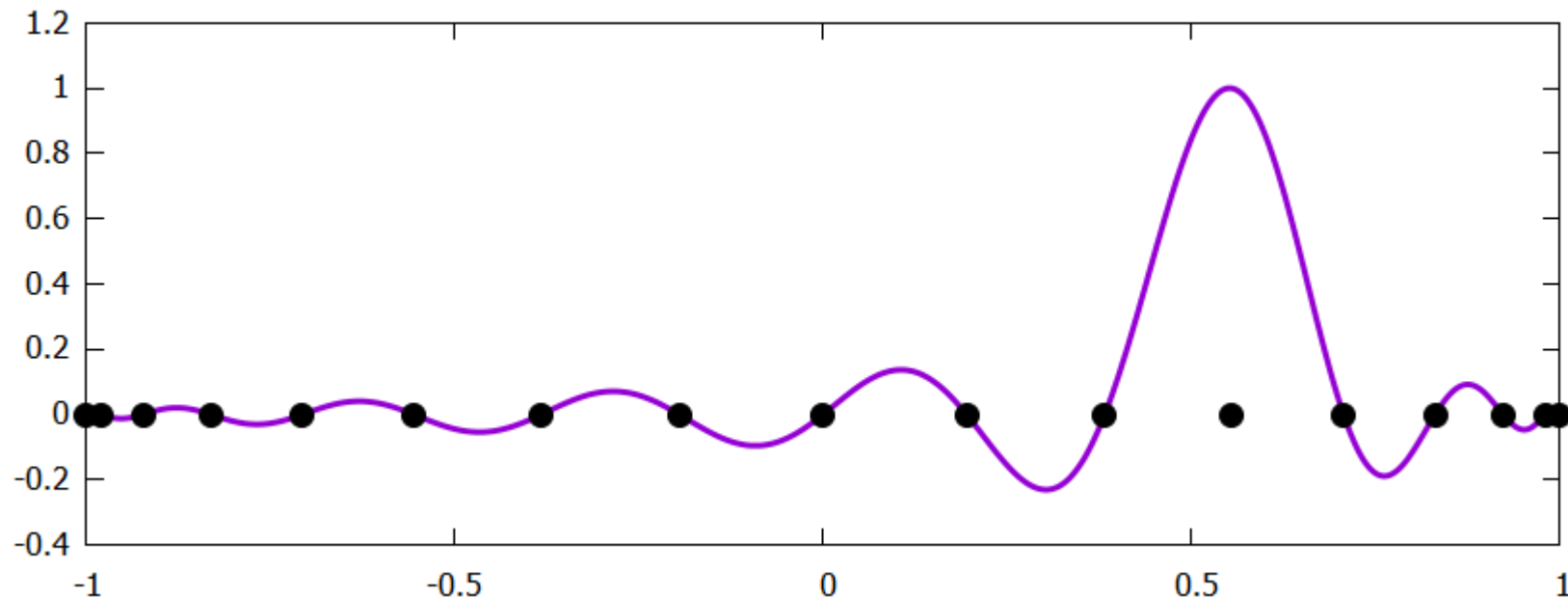
$$x_i = \cos\left(\frac{\pi i}{N}\right), \quad i = \{0, \dots, N\}$$

$$C_i(x) = \frac{2}{q_i N} \sum_k^N \frac{1}{q_k} T_k(x_i) T_k(x), \quad q_i = \begin{cases} 2 & i = 0, N \\ 1 & \text{else} \end{cases}$$

Kardinális függvények

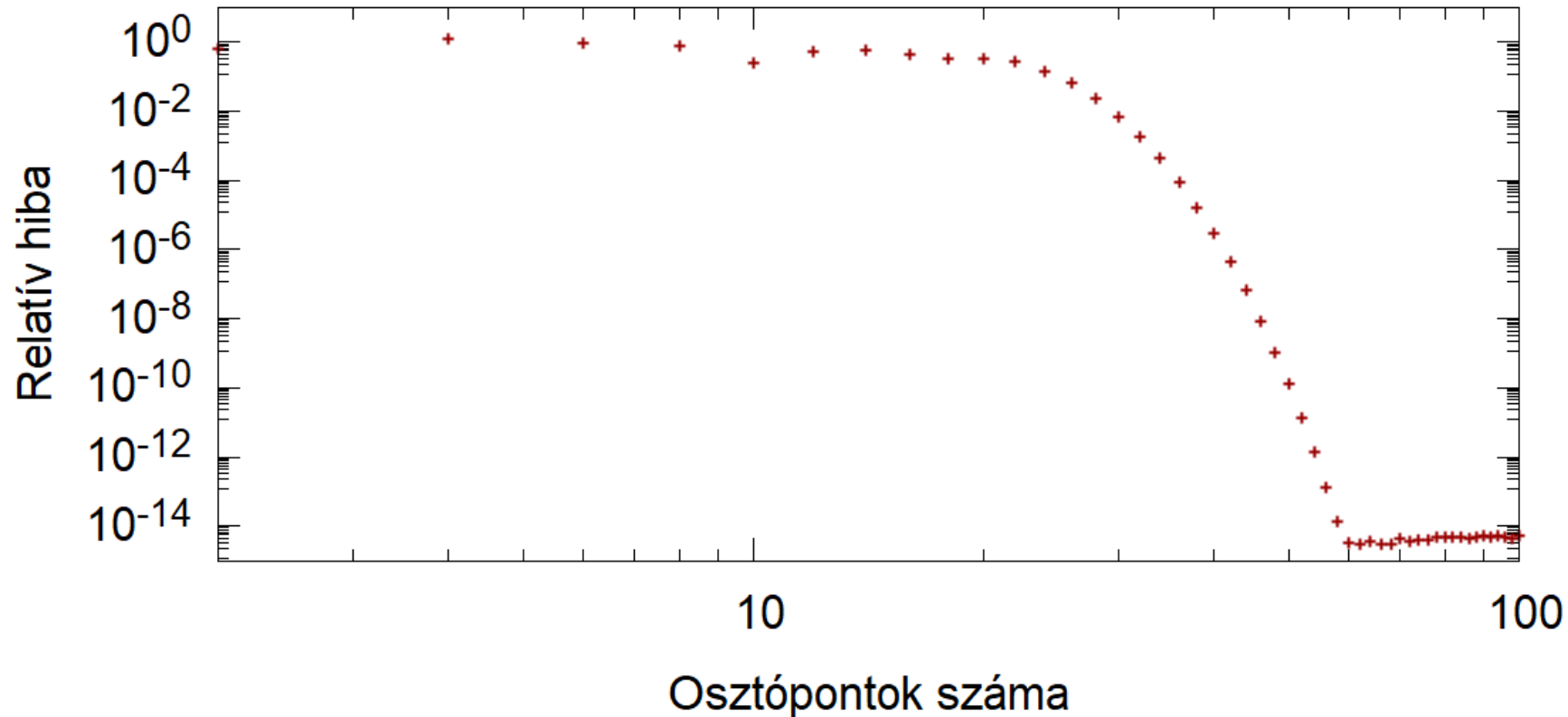
Chebyshev $[-1, 1]$ végpontos eset: $x_i = \cos\left(\frac{\pi i}{N}\right)$, $i = \{0, \dots, N\}$

$$C_i(x) = \frac{2}{q_i N} \sum_k^N \frac{1}{q_k} T_k(x_i) T_k(x), \quad q_i = \begin{cases} 2 & i = 0, N \\ 1 & \text{else} \end{cases}$$



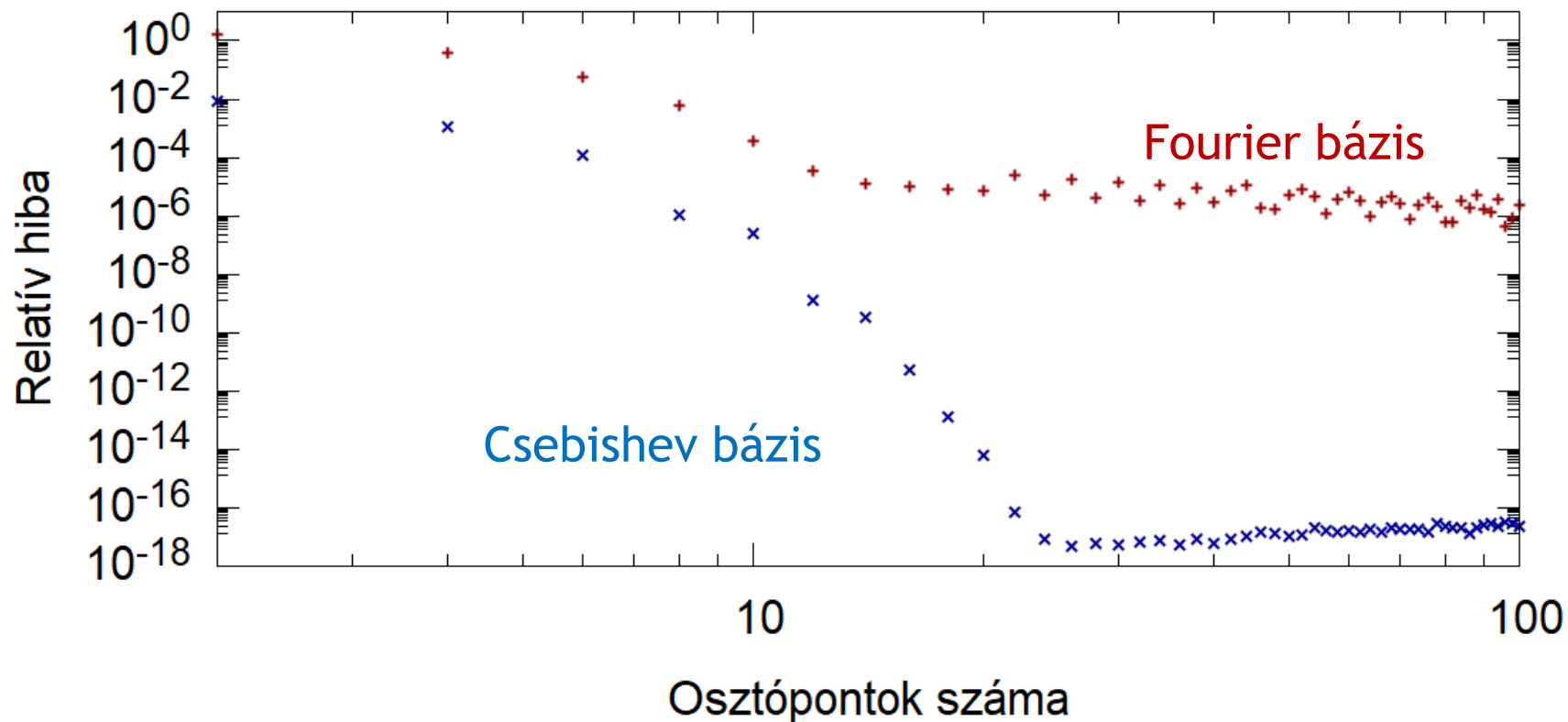
Kardinális függvények

Példa: Interpoláljuk a $f(x) = e^{-\left(\frac{x}{2}\right)^2} \cos(20x)$ függvényt a $[-1, 1]$ -en:



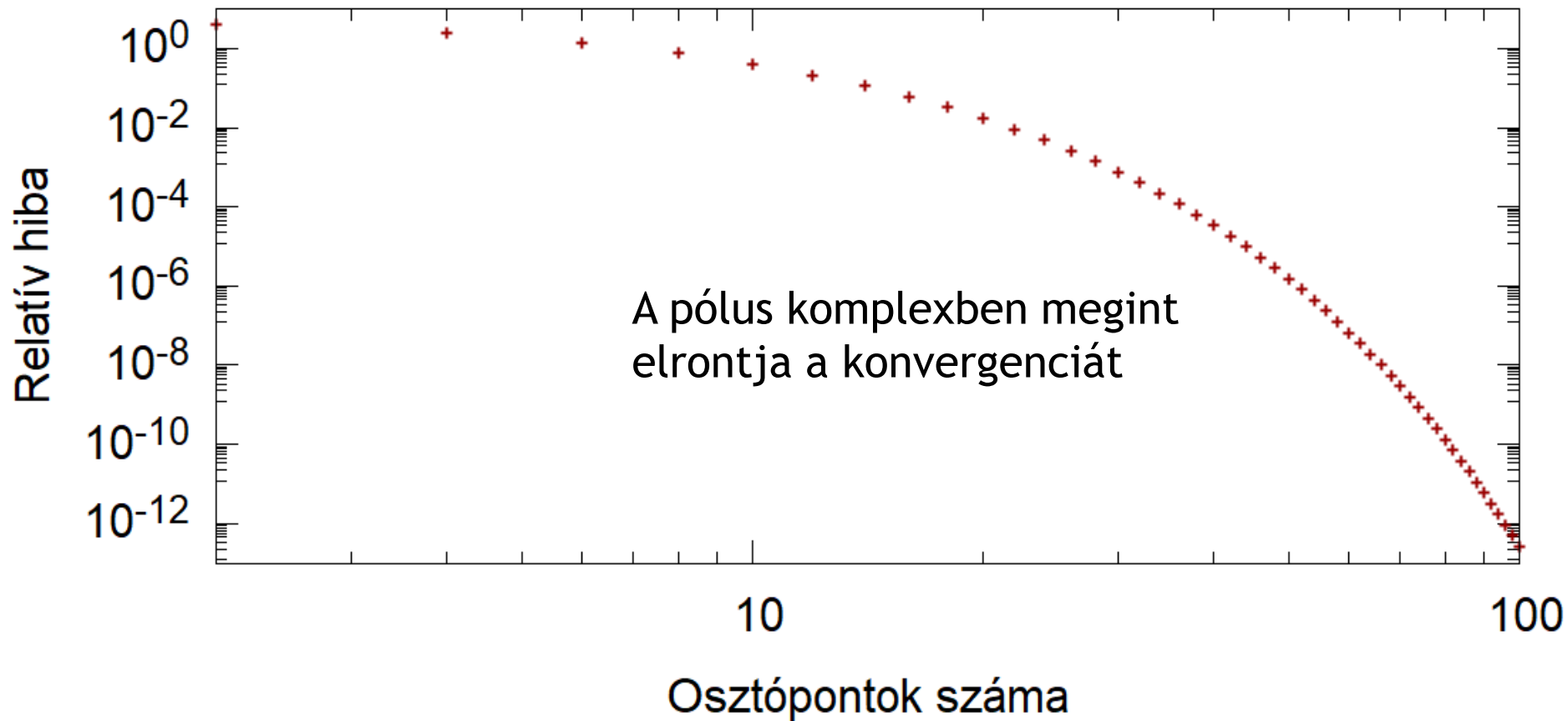
Kardinális függvények

Példa: Interpoláljuk a $f(x) = e^{-\left(\frac{x}{2}\right)^2}$ függvényt Fourier és Csebishev bázison:



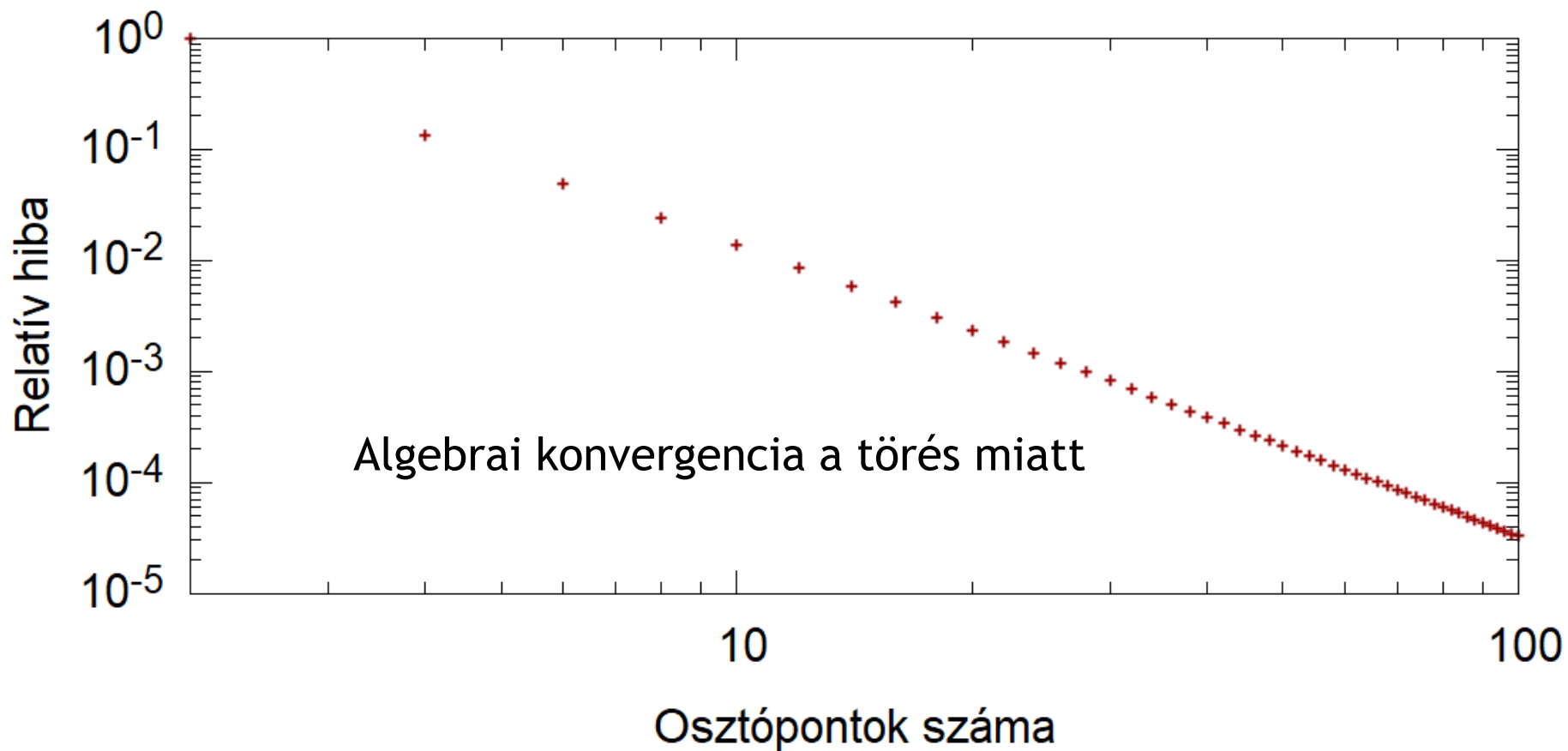
Kardinális függvények

Példa: Interpoláljuk a $f(x) = \frac{1}{0.1+x^2}$ függvényt a $[-1, 1]$ -en:



Kardinális függvények

Példa: Interpoláljuk a $f(x) = |x|$ függvényt a $[-1, 1]$ -en:



Kardinális függvények

Extra tulajdonság:

A kvadratura súlyok a kardinális függvények integráljai:

$$w_i = \int_a^b C_i(x) dx$$

Itt valami fura van...

- A kvadratura súlyok a kardinális függvények integráljai
- Az interpolációnál ugyan azokat az osztópontokat használtuk, mint a kvadratúráknál
- Az osztópontok ortogonális polinomok gyökei (szélsőértékei)

Interpolálhatnánk az ortogonális polinomjainkkal is, nem?

Interpolálhatnánk az ortogonális polinomjainkkal is, nem?

$$f(x) = \sum_i^N a_i \Phi_i(x)$$

Interpolálhatnánk az ortogonális polinomjainkkal is, nem?

$$f(x) = \sum_i^N a_i \Phi_i(x)$$

igen, de honnan kapjuk az együtthatókat?

Interpolálhatnánk az ortogonális polinomjainkkal is, nem?

$$f(x) = \sum_i^N a_i \Phi_i(x)$$

igen, de honnan kapjuk az együtthatókat? Vetítünk a bázisokra:

$$a_i = \frac{(f, \Phi_i)}{(\Phi_i, \Phi_i)}$$

$$a_i = \frac{(f, \Phi_i)_\Delta}{(\Phi_i, \Phi_i)_\Delta}, \quad (f, g)_\Delta = \sum_k^N w_k f(x_k) g(x_k)$$

Ez a folytonos ortogonalitási relációnak, azaz ennek:

$$(f, g) = \int_a^b f(x) g(x) \rho(x) dx$$
A red arrow originates from the right side of the integral equation and points upwards and to the left towards the discrete sum equation, indicating a relationship or approximation between the two.

a diszkrét változata, ahol az integrált kvadraturával végeztük el!
Továbbra is:

$$(\Phi_i, \Phi_k) = \delta_{ik} = (\Phi_i, \Phi_k)_\Delta$$

Ha ezeket egymásba helyettesítjük, akkor:

$$a_i = \frac{(f, \Phi_i)_\Delta}{(\Phi_i, \Phi_i)_\Delta} = \sum_j f(x_j) \Phi_i(x_j) w_j = \underline{\underline{\Phi f}}$$

Tehát:

Interpolálhatunk az ortogonális polinomjainkkal is, ha először áttértünk az együttható reprezentációra!

$$a_i = \sum_j f(x_j) \Phi_i(x_j) w_j$$

$$f(x) = \sum_i^N a_i \Phi_i(x)$$

A végtelen intervallumon a Whittaker-féle kardinális függvény hasznos:

$$x_j = j h, \quad j = \{0, \pm 1, \pm 2, \dots\}$$

$$C_k(x) = \frac{\sin\left(\pi \frac{x - kh}{h}\right)}{\pi \frac{x - kh}{h}} = \text{sinc}\left(\pi \frac{x - kh}{h}\right)$$

3. Deriválás

Ha van egy kifejtésünk, akkor deriválhatunk könnyen, úgy, hogy a bázisfüggvényeket deriváljuk!

Ha van egy kifejtésünk, akkor deriválhatunk könnyen, úgy, hogy a bázisfüggvényeket deriváljuk!

$$\partial_x f(x) = \partial_x \left(\sum_i^N f_i C_i(x) \right) = \sum_i^N f_i \partial_x C_i(x)$$

Hasonlóan, ha C_i helyett Φ_i szerepel.

A kardinális/bázisfüggvényeket sokszor kicsit trükkös,
nehézkes deriválni,

nagyon kell figyelni a kollokációs pontoknál levő
mesterséges szingularitásokra!

Például a trigonometrikus kardinális függvény:

$$C_i(x) = \frac{1}{N} \sin \left[\frac{N(x - x_i)}{2} \right] \cot \left[\frac{x - x_i}{2} \right]$$

első deriváltja:

$$\frac{dC_i(x)}{dx} = \frac{1}{2} \cos \left[\frac{N(x - x_i)}{2} \right] \cot \left[\frac{x - x_i}{2} \right] - \frac{1}{2N} \sin \left[\frac{N(x - x_i)}{2} \right] \frac{1}{\sin \left(\frac{x - x_i}{2} \right)^2}$$

Például a trigonometrikus kardinális függvény:

$$C_i(x) = \frac{1}{N} \sin \left[\frac{N(x - x_i)}{2} \right] \cot \left[\frac{x - x_i}{2} \right]$$

első deriváltja:

$$\frac{dC_i(x)}{dx} = \frac{1}{2} \cos \left[\frac{N(x - x_i)}{2} \right] \cot \left[\frac{x - x_i}{2} \right] - \frac{1}{2N} \sin \left[\frac{N(x - x_i)}{2} \right] \frac{1}{\sin \left(\frac{x - x_i}{2} \right)^2}$$
Two red arrows originate from the cotangent term in the first part of the derivative and the cosecant term in the second part. They point downwards and inwards towards a common point centered below the space between the two terms of the derivative.

Megint figyelni kell a divergenciákra $x = x_i$ -nél, pedig a kifejezés mindig véges!

Ezzel szemben az ortogonális polinom bázison:

$$\Phi_k(x) = \sin kx, \cos kx$$

első deriváltja:

$$\frac{d\Phi_k(x)}{dx} = k \cos kx, -k \sin kx$$

Csebisev esetben $[-1, 1]$ a kardinális függvényekkel:

$$C_i(x) = \frac{2}{q_i N} \sum_k^N \frac{1}{q_k} T_k(x_i) T_k(x)$$

$$\frac{dC_i(x)}{dx} = \frac{2}{q_i N} \sum_k^N \frac{1}{q_k} T_k(x_i) \frac{dT_k(x)}{dx}$$

Csebisev esetben $[-1, 1]$ a bázis függvényekkel:

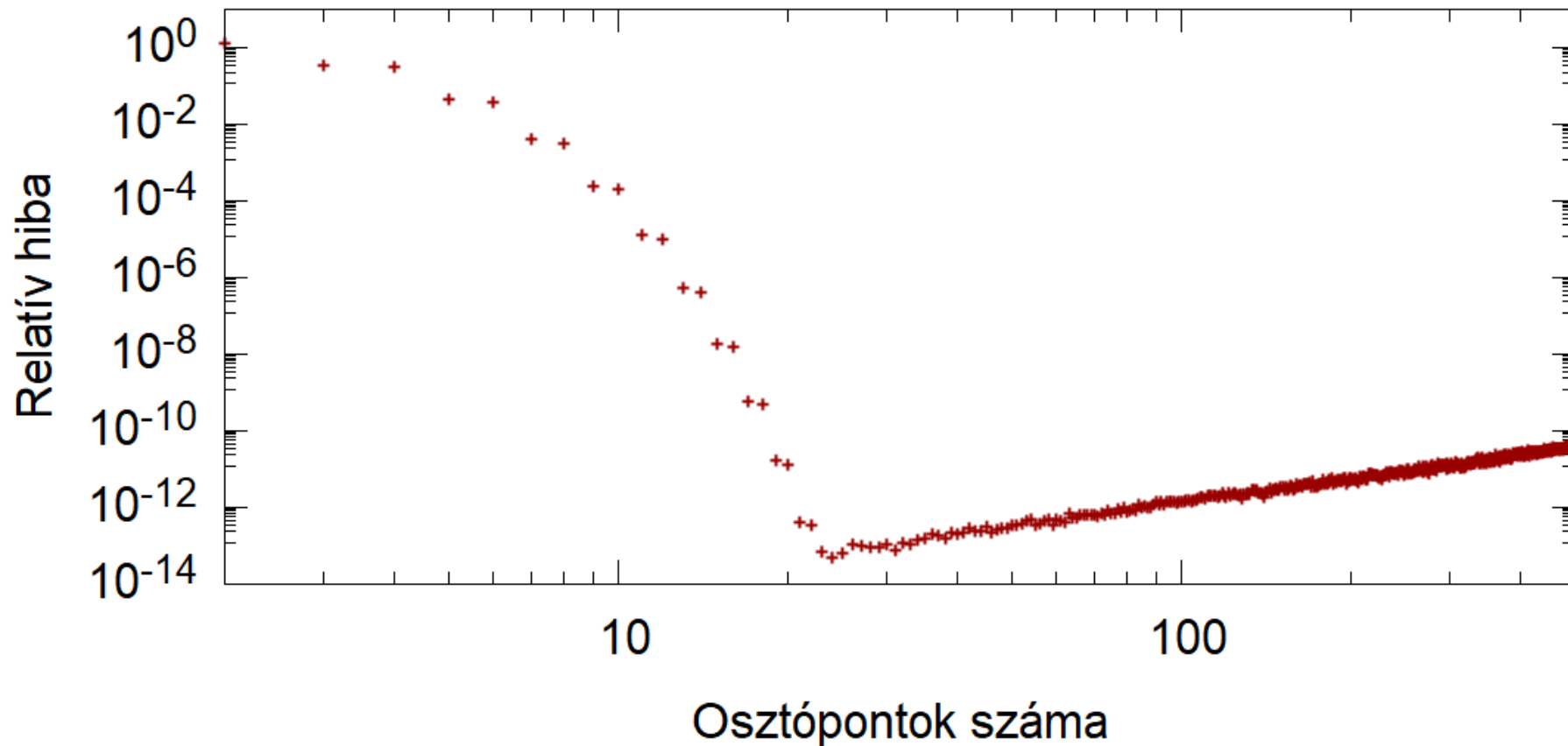
$$\Phi_k(x) = T_k(x) = \cos(k \arccos x)$$

$$\frac{d\Phi_k(x)}{dx} = \frac{k \sin(k \arccos x)}{\sin(\arccos x)}$$

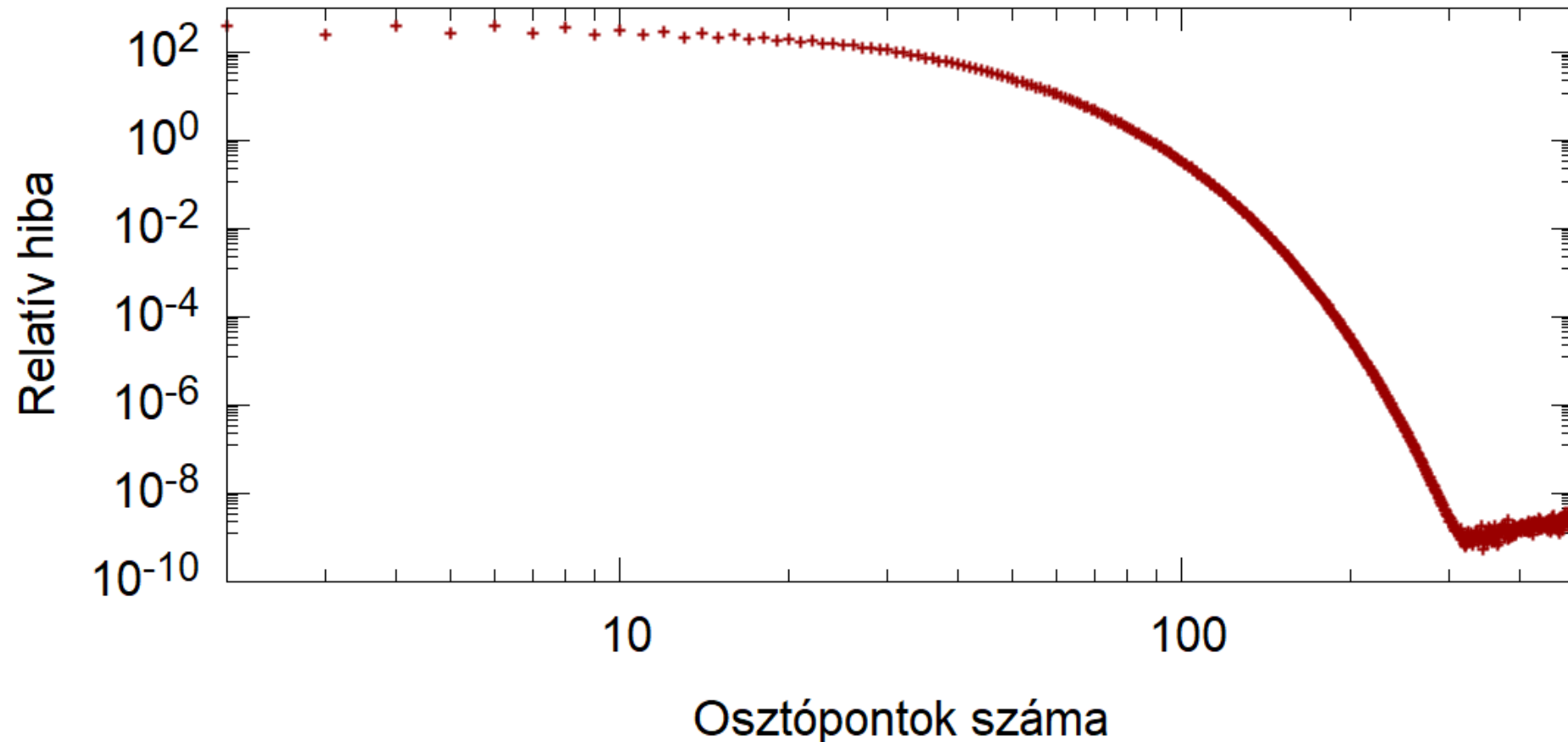


Megint: $x = x_0$ és $x = x_{N-1}$ -nél, ahol $x_l = \cos\left(\frac{\pi l}{N-1}\right)$ a nevező nulla, pedig a kifejezés értelmes $\left(\frac{d\Phi_k(x=x_0)}{dx} = k^2\right)$

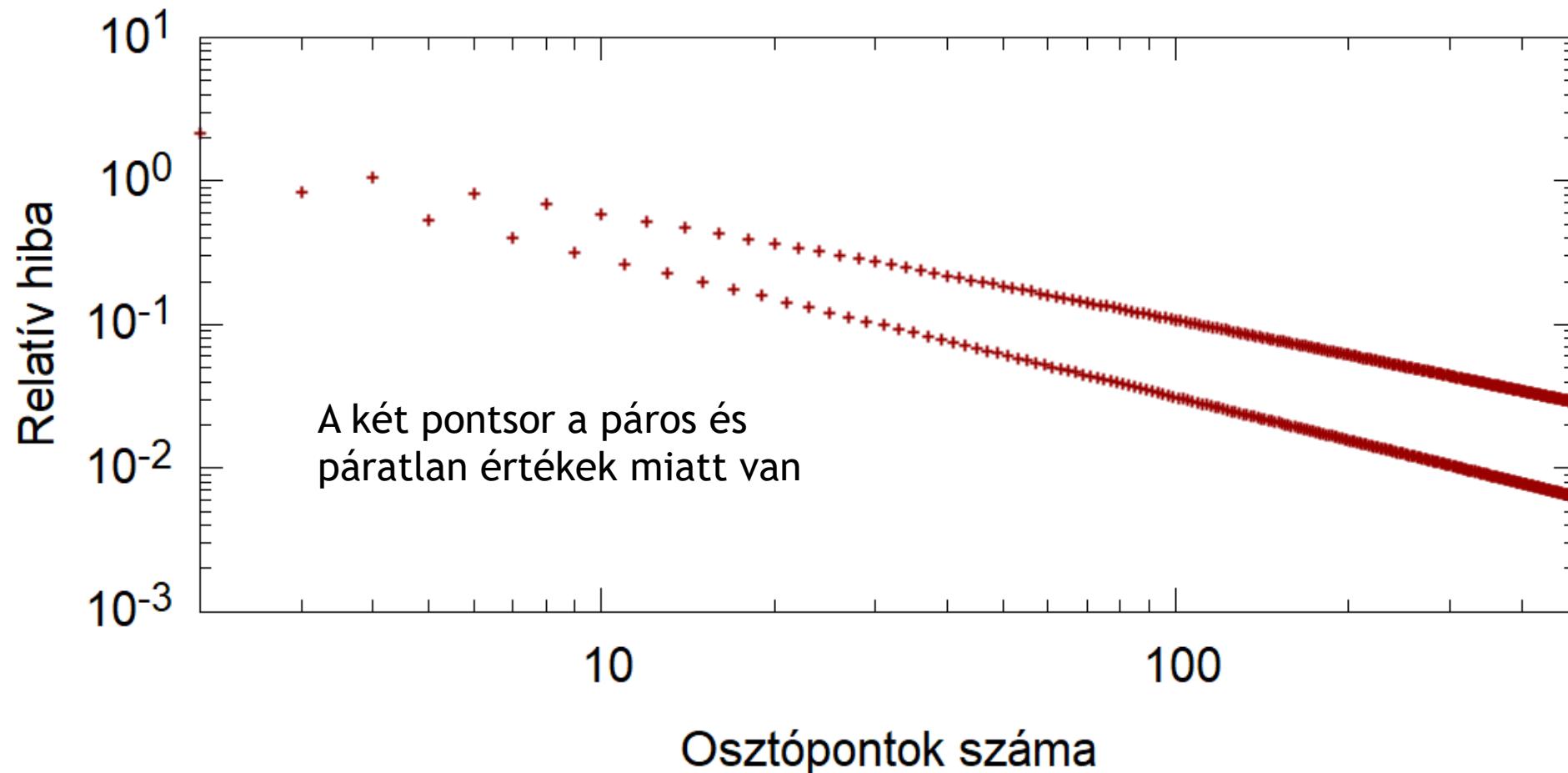
Példa: Spektrálkifejtve az $f(x) = e^{-\left(\frac{x}{2}\right)^2}$ függvényt a Csebishev bázison állítsuk elő a deriváltját!



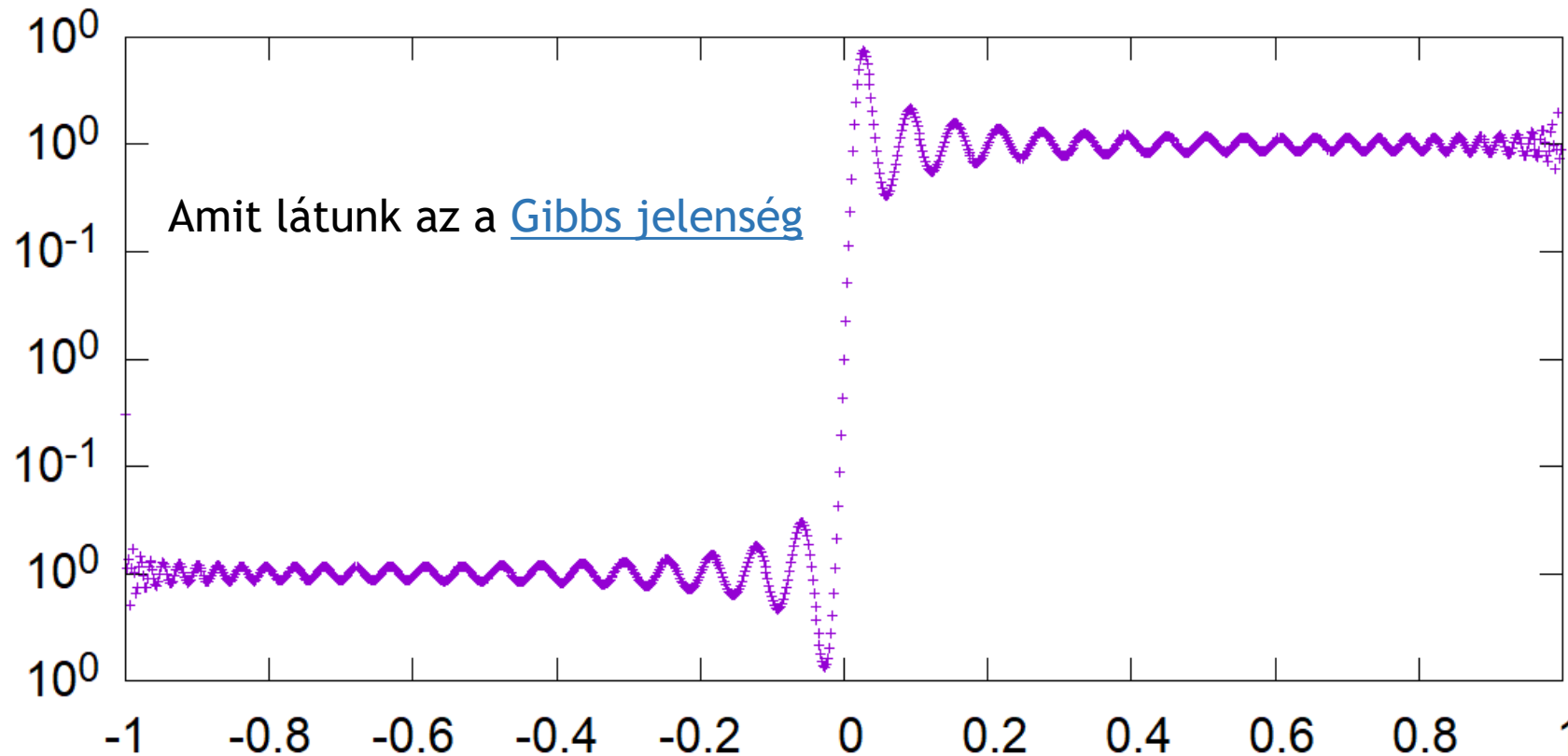
Példa: Spektrálkifejtve az $f(x) = \frac{1}{1.01-x^2}$ függvényt a Csebishev bázison állítsuk elő a deriváltját!



Példa: Spektrálkifejtve az $f(x) = |x|$ függvényt a Csebishev bázison állítsuk elő a deriváltját!



Példa: Spektrálkifejtve az $f(x) = |x|$ függvényt és rekonstruálva a deriváltat:



A Fourier és az abból származtatott bázisoknál a deriváltakat expliciten elő lehet (és érdemes) állítani.

A Gegenbauer polinom család általános tagjainál (Laguerre, Hermite, etc.) a deriváltak szintén az adott bázis elemeinek kombinációi, de nem lehet zárt alakban felírni őket.

Ilyenkor a 3 elemű rekurzióból számolhatóak, például Hermite esetén:

$$H_0 = 1, \quad H_1 = 2x, \quad H_{n+1} = 2xH_n - 2nH_{n-1}$$

$$\frac{dH_n}{dx} = 2nH_{n-1}$$

4. Integrálás (határozatlan)

Határozatlan integrál

Ha van egy kifejtésünk, akkor integrálhatunk könnyen, úgy, hogy a bázisfüggvényeket integráljuk!

$$\int f(x)dx = \int dx \left(\sum_i^N f_i C_i(x) \right) = \sum_i^N f_i \int C_i(x)dx$$

Hasonlóan, ha C_i helyett Φ_i szerepel.

Például a trigonometrikus kardinális függvény:

$$C_i(x) = \frac{1}{N} \sin \left[\frac{N(x - x_i)}{2} \right] \cot \left[\frac{x - x_i}{2} \right]$$

első integrálja:

$$\int C_i(x) dx = \frac{2}{N} \sin \left(\frac{x - x_i}{2} \right)$$

Határozatlan integrál

Csebisev esetben $[-1, 1]$ a kardinális függvényekkel:

$$C_i(x) = \frac{2}{q_i N} \sum_k^N \frac{1}{q_k} T_k(x_i) T_k(x)$$

$$\int C_i(x) dx = \frac{2}{q_i N} \sum_k^N \frac{1}{q_k} T_k(x_i) \int T_k(x) dx$$

Csebisev esetben $[-1, 1]$ a bázis függvényekkel:

$$\Phi_k(x) = T_k(x) = \cos(k \arccos x)$$

$$\int \Phi_k(x) dx = -\frac{k \sqrt{1-x^2}}{k^2-1} [\sin(k \arccos x) + x \cos(k \arccos x)]$$

5. Illesztés

Szeretnénk egy adatsorra illeszteni egy folytonos függvényt.

Legyen ez egy jól viselkedő függvény, báziskifejtett alakban: $f(x) = \sum_k a_k \Phi_k(x)$

Az adatsor zajt tartalmaz, ezért alacsonyabb foksámú kifejtést illesztünk, mint ahány pontunk van.

Az ember nagyon könnyen valami általános fitterhez nyúlna, azonban erre nincs szükség...

Lineáris illesztés

Adott N mintapont (x_i, y_i)

Az illesztendő függvény:

$$y(x) = ax + b$$

És minimalizáljuk a négyzetes eltérést:

$$E(a, b) = \sum_i (y_i - y(x_i))^2$$

$$\min_{\{a, b\}} \{ E(a, b) \} \iff \frac{\partial E}{\partial a} = 0, \quad \frac{\partial E}{\partial b} = 0$$

Spektrális illesztés

Adott N mintapont (x_i, y_i)

Legyen most az illesztendő függvény (K rendig kifejtve):

$$y(x) = \sum_k a_k \Phi_k(x)$$

És minimalizáljuk a négyzetes eltérést:

$$E(a_k) = \sum_i (y_i - y(x_i))^2$$

$$\min_{\{a_k\}} \{ E(a_k) \} \iff \frac{\partial E}{\partial a_k} = 0$$

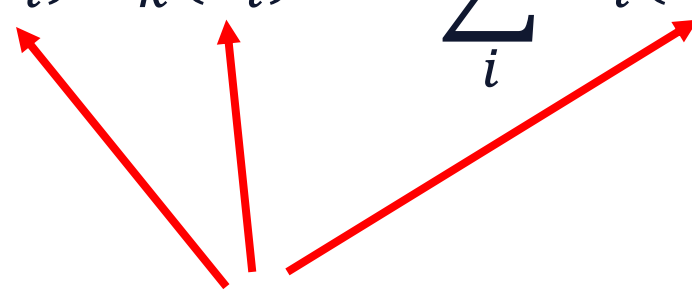
$$y(x) = \sum_k a_k \Phi_k(x)$$

Deriváljunk be a hibafüggvénybe:

$$\begin{aligned} \partial_{a_l} E(a_k) &= \partial_{a_l} \sum_i (y_i - y(x_i))^2 \\ &= -2 \sum_i (y_i - y(x_i)) \partial_{a_l} y(x_i) \\ &= -2 \sum_i (y_i - y(x_i)) \Phi_l(x_i) \\ &= 2 \sum_i \left(\left(\sum_k a_k \Phi_k(x_i) \right) - y_i \right) \Phi_l(x_i) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\partial_{a_l} E(a_k) &= 2 \sum_i \left(\left(\sum_k a_k \Phi_k(x_i) \right) - y_i \right) \Phi_l(x_i) \\ &= 2 \sum_k a_k \sum_i \Phi_l(x_i) \Phi_k(x_i) - 2 \sum_i \Phi_l(x_i) y_i \\ &= \sum_k a_k M_{kl} - y'_l\end{aligned}$$

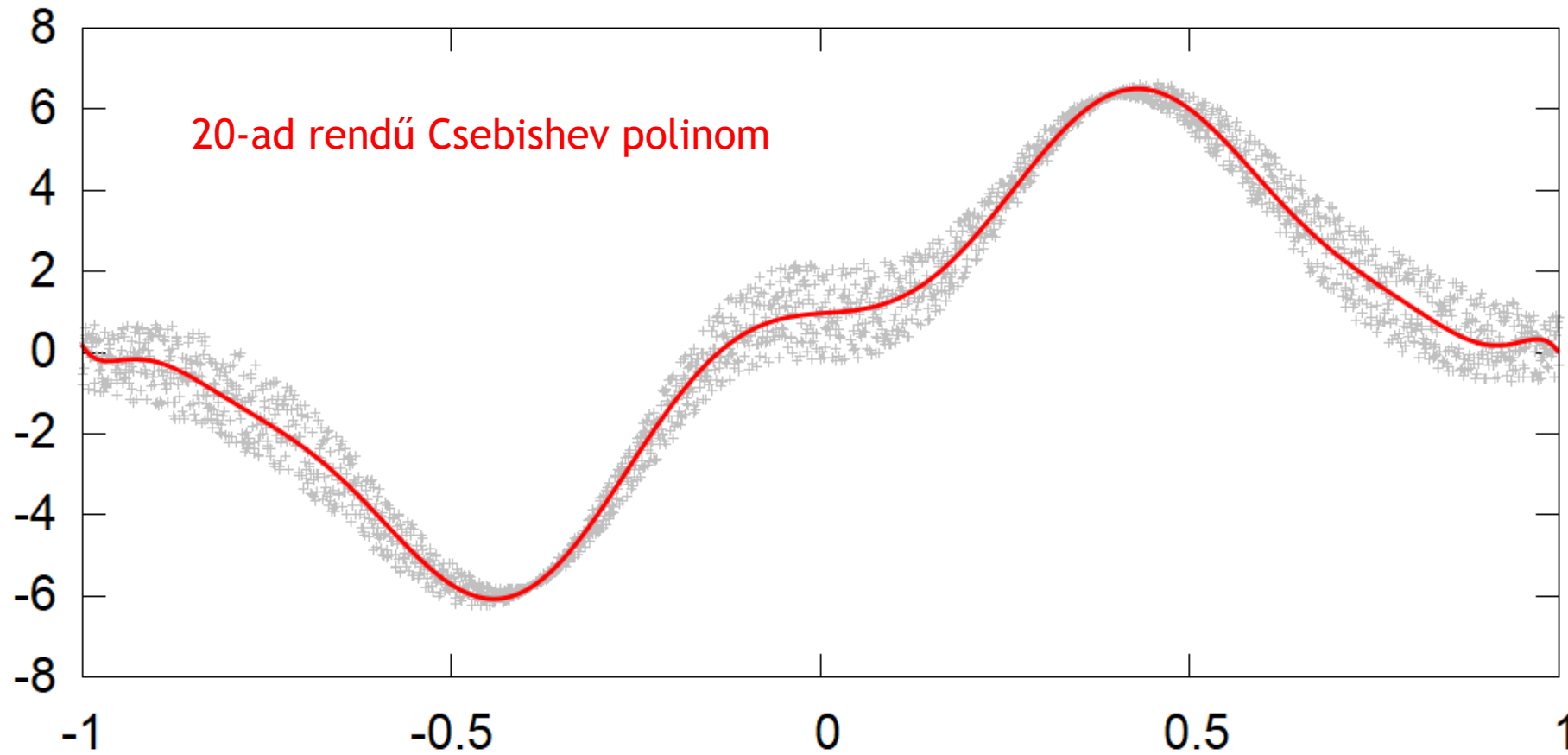
A minimumban ez = 0,
tehát egy K méretű lineáris rendszert kell csak megoldanunk!

$$\begin{aligned}\partial_{a_l} E(a_k) &= 2 \sum_i \left(\left(\sum_k a_k \Phi_k(x_i) \right) - y_i \right) \Phi_l(x_i) \\ &= 2 \sum_k a_k \sum_i \Phi_l(x_i) \Phi_k(x_i) - 2 \sum_i \Phi_l(x_i) y_i \\ &= \sum_k a_k M_{kl} - y'_l\end{aligned}$$


Figyelem, ezek az x_i -k nem kollokációs,
hanem tetszőleges pontok!

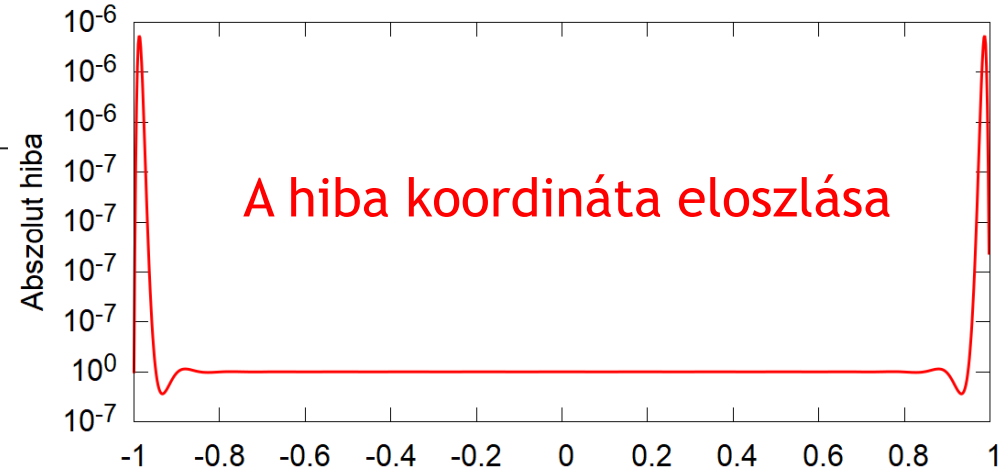
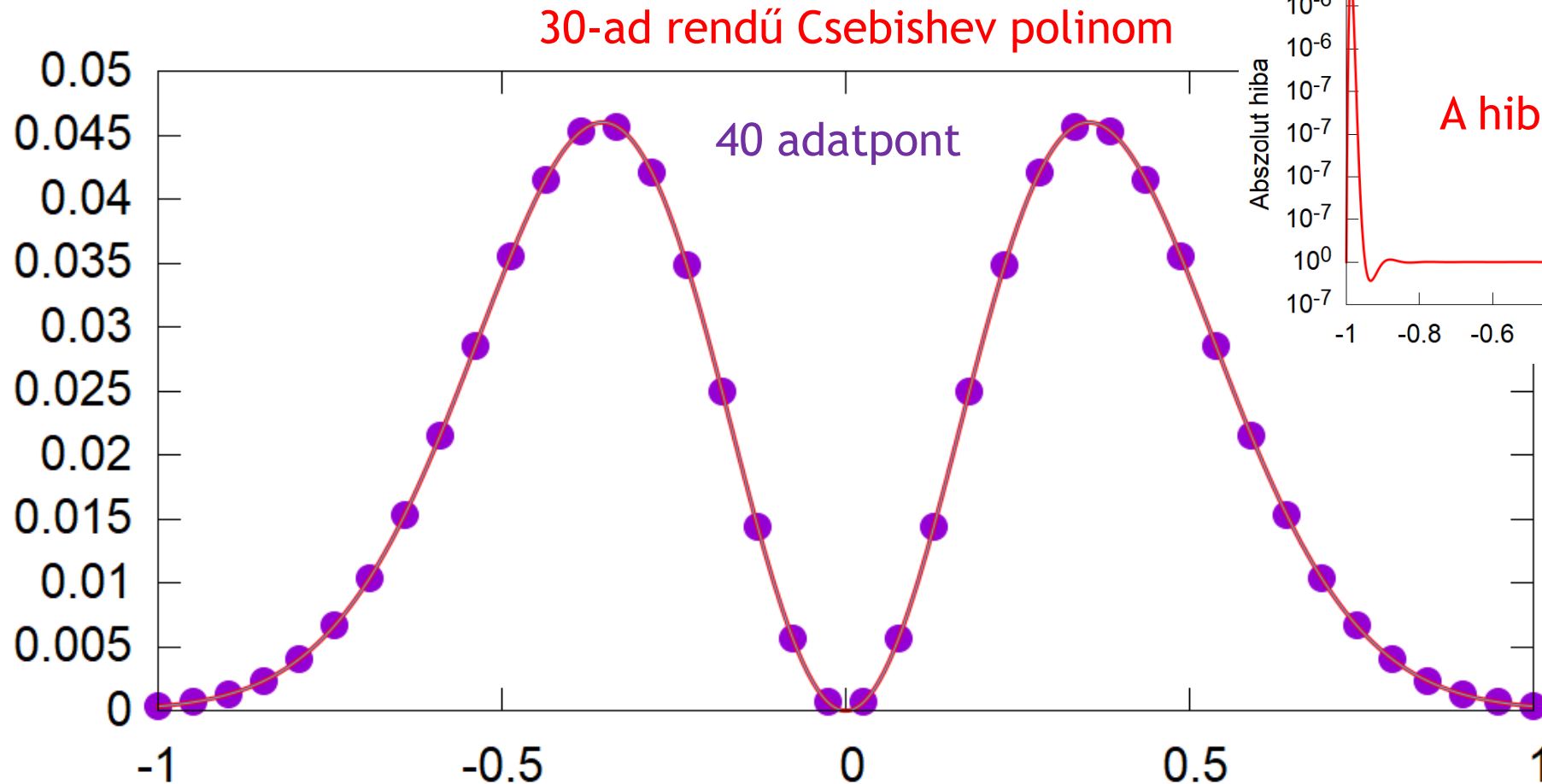
A minimumban ez = 0,
tehát egy K méretű lineáris rendszert kell csak megoldanunk!

Spektrális illesztés



Spektrális illesztés

Ha nincs zaj, akkor még jobb, pl. átinterpolálhatunk fixlépésközzről:



6. Differenciál egyenletek

Legyen adott egy differenciál egyenlet f -re:

$$D f(x) = g(x)$$

ahol g ismert függvény, D pedig valamilyen differenciál operátorokat tartalmazó kifejezés, pl.:

$$D = p\partial_x + q\partial_x^2$$

Differenciál egyenletek

Legyen adott egy differenciál egyenlet f -re:

$$D f(x) = g(x)$$

Hogyan oldjuk ezt meg?

Differenciál egyenletek

Legyen adott egy differenciál egyenlet f -re:

$$D f(x) = g(x)$$

Hogyan oldjuk ezt meg?

Fejtsük ki f -et a megfelelő bázison!

Differenciál egyenletek

Legyen adott egy differenciál egyenlet f -re:

$$D f(x) = g(x)$$

Hogyan oldjuk ezt meg?

$$f(x) = \sum_k a_k \Phi_k(x)$$

Differenciál egyenletek

$$D f(x) = g(x) \quad \leftarrow \quad f(x) = \sum_k a_k \Phi_k(x)$$

Jó, de ezzel sokkal előrébb nem vagyunk, ez még mindig egy függvény egyenlet:

$$\sum_k a_k D \Phi_k(x) = g(x)$$

$$\sum_k a_k D\Phi_k(x) = g(x)$$

Diszkretizáljuk a bázishoz tartozó kollokációs pontokon, $\{x_j\}$ -ken!

$$\sum_k a_k D\Phi_k(x) = g(x)$$

Diszkretizáljuk a bázishoz tartozó kollokációs pontokon, $\{x_j\}$ -ken:

$$\sum_k a_k [D\Phi_k](x_j) = g(x_j)$$

Differenciál egyenletek

$$\sum_k a_k [D\Phi_k](x_j) = g(x_j)$$

Ez már egy lineáris egyenletrendszer az együtthatókra, amit meg tudunk oldani!

Nézzük meg részletesebben a deriváló operátor hatását a bázisfüggvényekre:

$$[\partial_x \Phi_k(x)]_{x=x_l}$$

A bázisfüggvények és a deriváltjaik a kollokációs pontokban általában kivételesen egyszerű alakokba írhatóak
(mert ezek a pontok spec helyei a bázisnak!)

$$[\partial_x \Phi_k(x)]_{x=x_l}$$

Például Csebishev esetén:

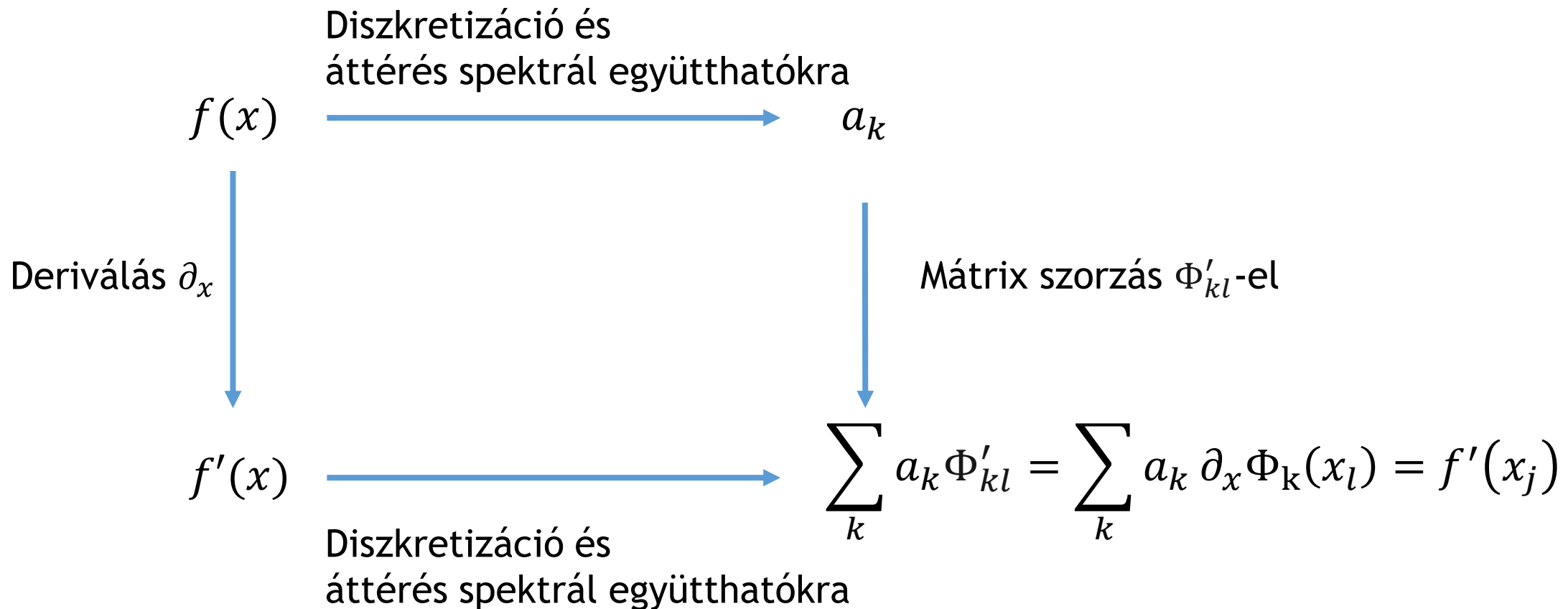
$$x_l = \cos\left(\frac{\pi l}{N-1}\right)$$

$$\Phi_k(x) = \cos(k \arccos x) \xrightarrow{x_l} \cos\left(\frac{\pi k l}{N-1}\right)$$

$$\partial_x \Phi_k(x) = \frac{k \sin(k \arccos x)}{\sin(\arccos x)} \xrightarrow{x_l} k \sin\left(\frac{\pi k l}{N-1}\right) \sin^{-1}\left(\frac{\pi l}{N-1}\right) = \Phi'_{kl}$$

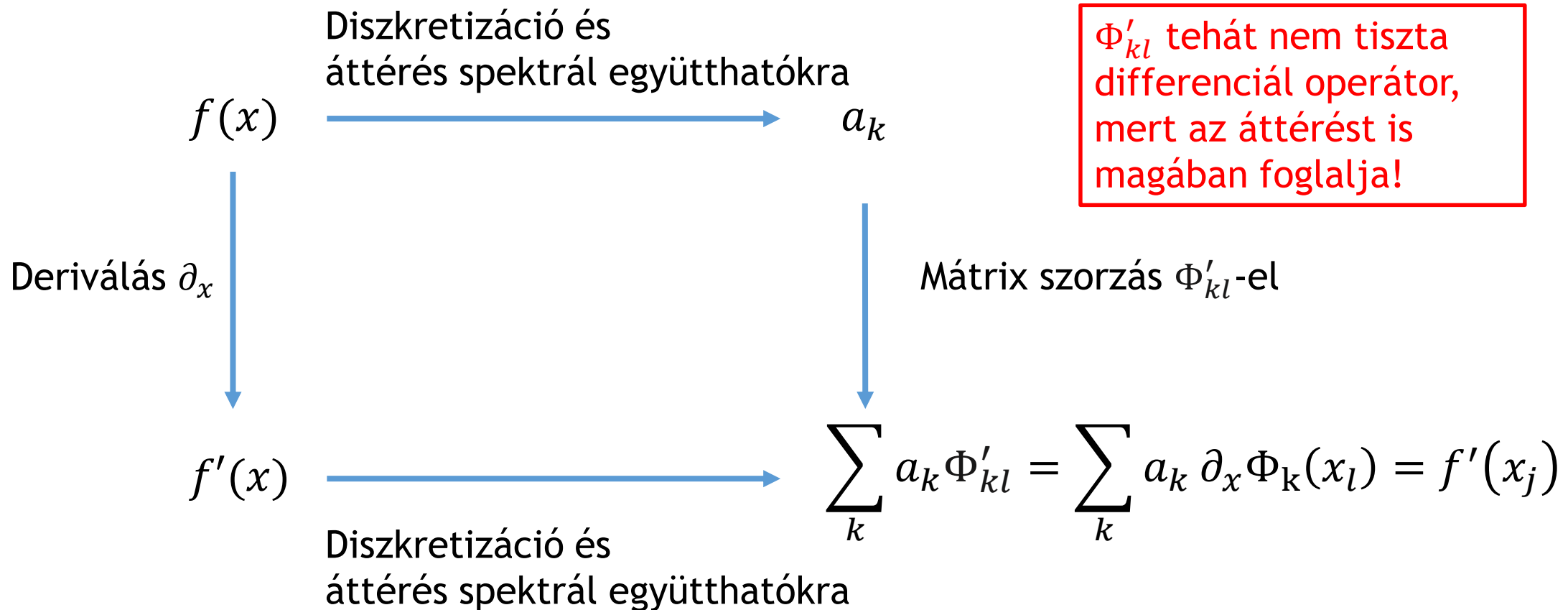
Differenciál operátorok

Ha megkonstruáltuk Φ'_{kl} -t, akkor az alábbiak kommutálnak:



Differenciál operátorok

Ha megkonstruáltuk Φ'_{kl} -t, akkor az alábbiak kommutálnak:



Sokkal érdekesebb kérdés azonban, hogy megtudjuk-e konstruálni azt a differenciál operátort, ami abban a térben marad, ahol az eredeti függvény volt?

Differenciál operátorok

Az áttérés spektrál együtthatókra tekinthető úgy, mint a Φ operátor diszkretizált változatának, Φ_{kl} -nek a hatása:

$$f(x_l) = f_l = \sum_k a_k \Phi_{kl} = \sum_k a_k \Phi_k(x_l)$$

Differenciál operátorok

Az áttérés spektrál együtthatókra tekinthető úgy, mint a Φ operátor diszkretizált változatának, Φ_{kl} -nek a hatása:

$$f(x_l) = f_l = \sum_k a_k \Phi_{kl} = \sum_k a_k \Phi_k(x_l)$$

Mivel a két reprezentáció ekvivalens, létezik az inverz Φ_{lm}^{-1} , amivel ha beszorzunk, és felösszegzünk l -re:

$$\sum_l f_l \Phi_{lm}^{-1} = \sum_k a_k \underbrace{\sum_l \Phi_{kl} \Phi_{lm}^{-1}}_{\delta_{km}} = a_m$$

$$f_l = \sum_k a_k \Phi_{kl}$$

Ez a kifejezés
a normál térben van felírva

$$\sum_l f_l \Phi_{lm}^{-1} = a_m$$

Ez viszont a spektrál térben

Ha a korábban felírt deriváló és áttérő operátort

$$f(x_l)' = f_l' = \sum_k a_k \Phi_{kl}'$$

beszorozzuk a visszatéréssel Φ_{lm}^{-1} , és felösszegzünk l -re:

$$\sum_l f_l' \Phi_{lm}^{-1} = \sum_k a_k \sum_l \Phi_{kl}' \Phi_{lm}^{-1} = \sum_k a_k D_{km}^{(a)}$$

Ha a korábban felírt deriváló és áttérő operátort

$$f(x_l)' = f_l' = \sum_k a_k \Phi_{kl}'$$

Ez a kifejezés
a normál térben van felírva

beszorozzuk a visszatéréssel Φ_{lm}^{-1} , és felösszegzünk l -re:

$$\sum_l f_l' \Phi_{lm}^{-1} = \sum_k a_k \sum_l \Phi_{kl}' \Phi_{lm}^{-1} = \sum_k a_k D_{km}^{(a)}$$

Ez viszont a spektrál térben!
Ezért a felső index D-nél!

Differenciál operátorok

Ha a ugyanezt fordítva csináljuk, azaz először áttérünk az eredeti függvényről spektrál együtthatókra Φ_{lm}^{-1} -el:

$$f(x_l) = f_l = \sum_k a_k \Phi_{kl}$$

$$\sum_l f_l \Phi_{lm}^{-1} = a_m$$

majd beszorozzuk az áttérő és deriváló mátrixsal Φ'_{mn} -el, felösszegzünk m-re:

$$\sum_l f_l \sum_m \Phi_{lm}^{-1} \Phi'_{mn} = \sum_l f_l D_{ln}^{(f)} = \sum_m a_m \Phi'_{mn} = f'_n$$

Differenciál operátorok

Ha a ugyanezt fordítva csináljuk, azaz először áttérünk az eredeti függvényről spektrál együtthatókra Φ_{lm}^{-1} -el:

$$f(x_l) = f_l = \sum_k a_k \Phi_{kl}$$

Ez a kifejezés
a normál térben van felírva

$$\sum_l f_l \Phi_{lm}^{-1} = a_m$$

Ez már spektrál térben

majd beszorozzuk az áttérő és deriváló mátrixsal Φ'_{mn} -el,
felösszegzünk m-re:

Ez viszont ismét normál térben!
Ezért a felső index D-nél!

$$\sum_l f_l \sum_m \Phi_{lm}^{-1} \Phi'_{mn} = \sum_l f_l D_{ln}^{(f)} = \sum_m a_m \Phi'_{mn} = f'_n$$

Összefoglalva, az adott térben maradó diszkretizált differenciál operátorok:

$$D_{ln}^{(f)} = \sum_m \Phi_{lm}^{-1} \Phi'_{mn}$$

$$D_{km}^{(a)} = \sum_l \Phi'_{kl} \Phi_{lm}^{-1}$$

Összefoglalva, az adott térben maradó diszkretizált differenciál operátorok:

$$D_{ln}^{(f)} = \sum_m \Phi_{lm}^{-1} \Phi'_{mn}$$

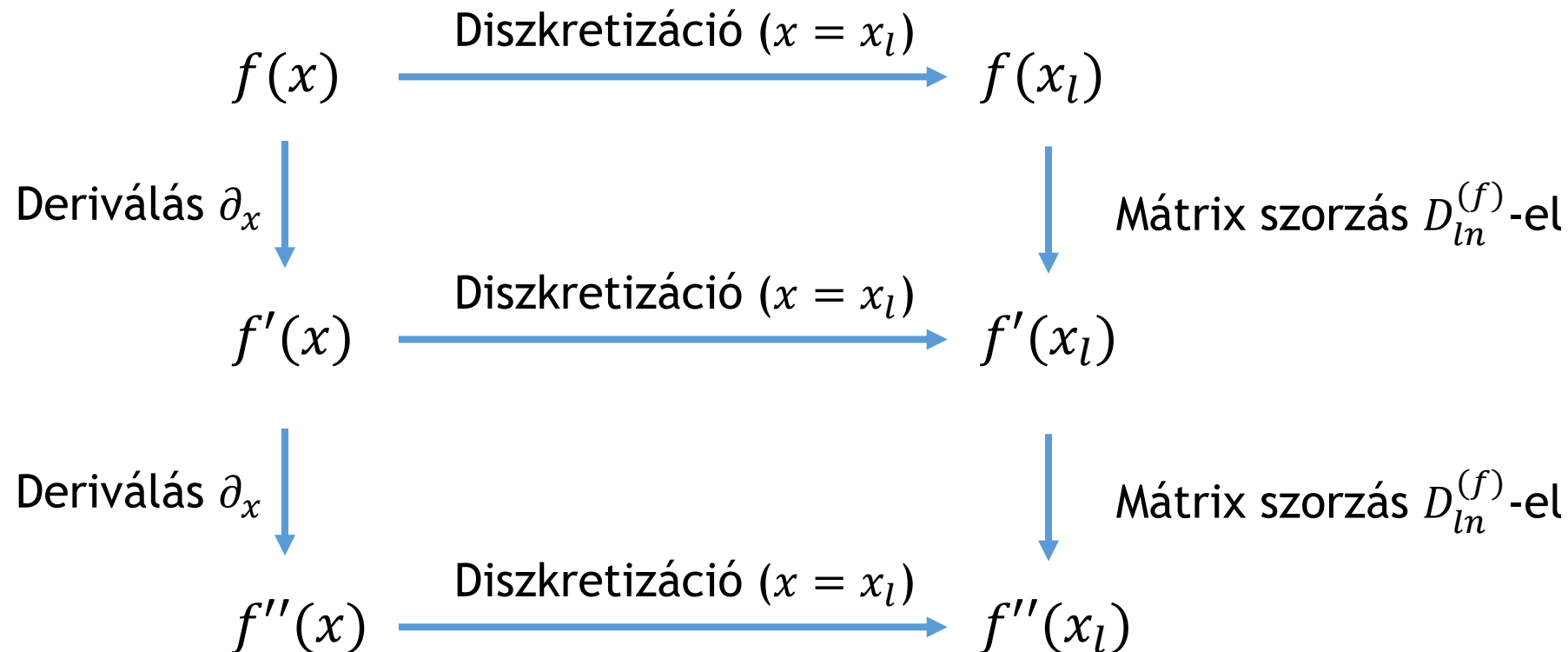
Ez a normál téren hat

$$D_{km}^{(a)} = \sum_l \Phi'_{kl} \Phi_{lm}^{-1}$$

Ez spektrál téren hat

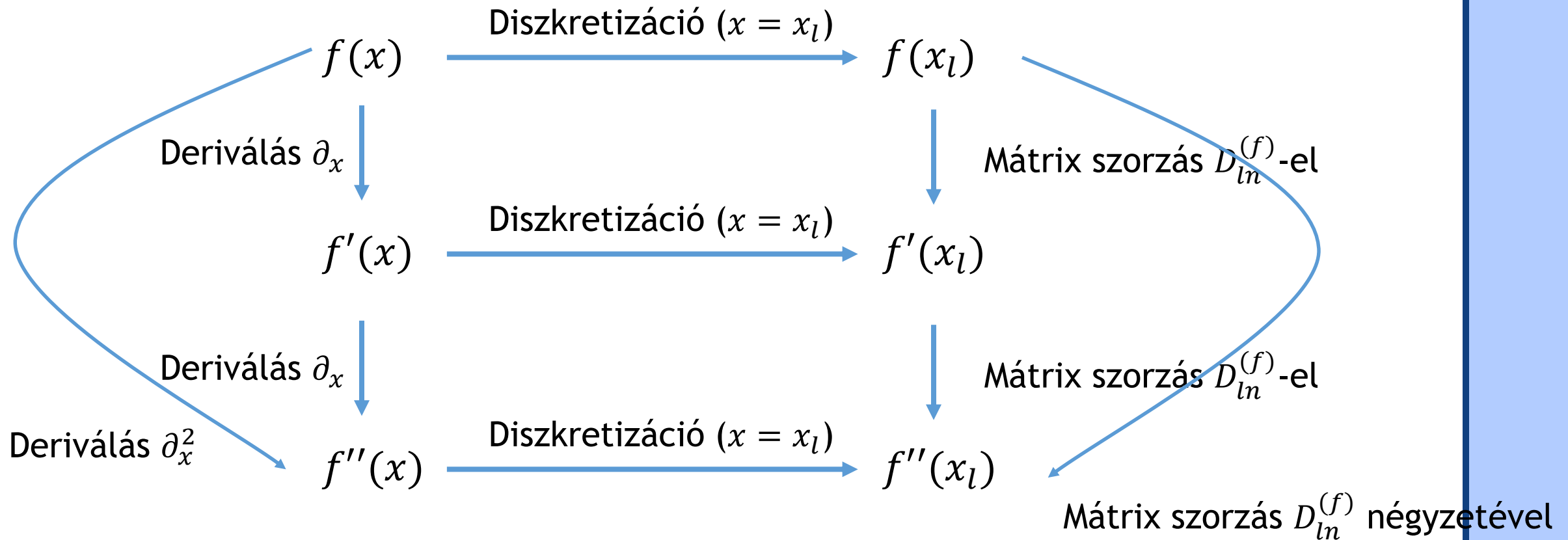
Differenciál operátorok

Ha megkonstruáltuk $D_{ln}^{(f)}$ -t, akkor az alábbiak kommutálnak:



Differenciál operátorok

Ha megkonstruáltuk $D_{ln}^{(f)}$ -t, akkor az alábbiak kommutálnak:



Differenciál egyenletek

Ez azt jelenti, hogy közvetlenül fel tudjuk írni egy differenciál operátor diszkretizált változatát, ami egy mátrix lesz:

$$L = p\partial_x + q\partial_x^2$$

$$L_{ln} = pD_{ln}^{(f)} + q\left(D_{ln}^{(f)}\right)^2$$

És $L f = g$ megoldását az inverze adja: $f = L^{-1}g$

Vagy ha az együttható térben akarjuk felírni:

$$L f = g \quad \leftarrow f = \sum_i a_i \Phi_{il}, \quad \{x_l\}$$

$$\sum_i a_i [L\Phi_i]_l = \sum_i a_i (L\Phi)_{il} = g_l$$

$$a_k = \sum_l (L\Phi)_{lk}^{-1} g_l$$

Mi van a határfeltételekkel?

Tekintsük a következő differenciál egyenletet a $[-1, 1]$ -en:

$$L f(x) = c \cdot f(x), \quad f(-1) = F$$

Tekintsük a következő differenciál egyenletet a $[-1, 1]$ -en:

$$L f(x) = c \cdot f(x), \quad f(-1) = F$$

átrendezve:

$$(L - c)f(x) = 0$$

$$L' f(x) = 0$$

$$L'f(x) = 0$$

Amikor az egyenletet diszkretizáljuk $\{x_l\} = \{-1, 0, 1\}$, és pl. spektrál térben oldjuk meg, akkor a következő alakot írjuk fel:

$$\begin{array}{l} x_l = -1 \\ x_l = 0 \\ x_l = 1 \end{array} \begin{bmatrix} L'_0(-1) & L'_1(-1) & L'_2(-1) \\ L'_0(0) & L'_1(0) & L'_2(0) \\ L'_0(1) & L'_1(1) & L'_2(1) \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Hiszen L'_{kl} utolsó indexe mindenképp a diszkretizációs teret indexeli!

$$L'f(x) = 0, \quad f(-1) = F$$

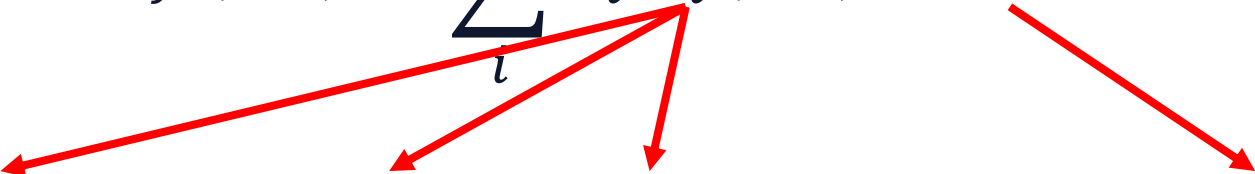
A határfeltétel $x = -1$ -ben szorítja meg a függvényt, de ennek van helye a mátrixban:

$$\begin{array}{l} x_l = -1 \\ x_l = 0 \\ x_l = 1 \end{array} \begin{bmatrix} L'_0(-1) & L'_1(-1) & L'_2(-1) \\ L'_0(0) & L'_1(0) & L'_2(0) \\ L'_0(1) & L'_1(1) & L'_2(1) \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$L'f(x) = 0, \quad f(-1) = F$$

A határfeltétel figyelembevételéhez egyszerűen ki kell cserélni az egyenlet mátrixának megfelelő sorát (és a jobboldalt!) a határfeltétel diszkretizált változatára:

$$f(-1) = \sum_i a_i \Phi_i(-1) = F$$


$$\begin{array}{l} x_l = -1 \\ x_l = 0 \\ x_l = 1 \end{array} \begin{bmatrix} \Phi_0(-1) & \Phi_1(-1) & \Phi_2(-1) \\ L'_0(0) & L'_1(0) & L'_2(0) \\ L'_0(1) & L'_1(1) & L'_2(1) \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} F \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$L'f(x) = 0, \quad f(-1) = F$$

Mire kell figyelni?

$$f(-1) = \sum_i a_i \Phi_i(-1) = F$$

$$[L'f](-1) = \sum_i a_i [L'\Phi_i](-1) = 0$$

Határfeltételek

$$L'f(x) = 0, \quad f(-1) = F$$

Mire kell figyelni?

$$f(-1) = \sum_i a_i \Phi_i(-1) = F$$

$$[L'f](-1) = \sum_i a_i [L'\Phi_i](-1) = 0$$

A mátrix sorainak lineárisan függetlennek kell lenniük, és a jobboldalakkal együtt nem tartalmazhatnak ellentmondást

Határfeltételek

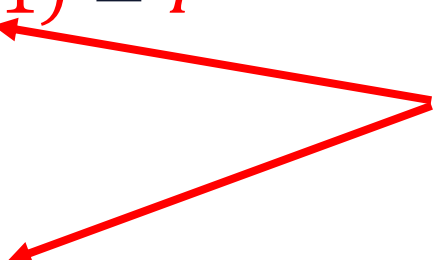
$$L'f(x) = 0, \quad f(-1) = F$$

Mire kell figyelni?

$$f(-1) = \sum_i a_i \Phi_i(-1) = F$$

$$[L'f](-1) = \sum_i a_i [L'\Phi_i](-1) = 0$$

Ez általában rendben van, mert
a deriváltak és a bázis
általában függetlenek



Határfeltételek

$$L'f(x) = 0,$$

$$f'(-1) = F$$

Mire kell figyelni?

De ha a határfeltételt a deriváltra szeretnénk kiróni...

$$f(-1) = \sum_i a_i \Phi'_i(-1) = F$$

...akkor már nagyon át kell látni a problémát, mert ezek már könnyen lehet, hogy összefüggnek

$$[L'f](-1) = \sum_i a_i [L'\Phi_i](-1) = 0$$

Mire kell még figyelni?

A kirótt feltételek nem mondhatnak ellent a bázisválasztásnak!

Pl.: periodikus bázis ($\forall i. \Phi_i(0) = \Phi_i(2\pi)$), de $f(0) \neq f(2\pi)$

Pl.: $\forall i. \Phi_i(\pm\infty) = 0$, de $f(\infty) \neq 0$

Mire kell még figyelni?

És fordítva:

Ha a bázis minden eleme teljesíti az elvárt határfeltételeket (vagy egy részüket), akkor azokat nem kell még külön kiróni.

7. Az ortogonális rendszerek általános elmélete

Ha van egy problémánk,
akkor először találjuk ki hozzá a megfelelő bázist!

Figyelem: a bázisnak ortogonálisnak kell lennie valamilyen
súlyfüggvényre nézve:

$$(\Phi_i, \Phi_j) = \int \Phi_i(x) \Phi_j(x) \rho(x) dx = \delta_{ij}$$

Ha van egy problémánk,
akkor először találjuk ki hozzá a megfelelő bázist!

- Válasszunk egyet a megfelelő létező bázisokból
- Kombináljunk újra meglevő bázisokat
- Konstruáljunk bázist numerikusan ortogonalizációval
(pl.: [Gram-Schmidt](#))

Az ortogonális rendszerek általános elmélete

Ha van egy problémánk,
akkor először találjuk ki hozzá a megfelelő bázist!

Ezzel célszerű kezdeni

Ez főleg határfeltételeknél hasznos

- Válasszunk egyet a megfelelő létező bázisokból
- Kombináljunk újra meglevő bázisokat
- Konstruáljunk bázist numerikusan ortogonalizációval
(pl.: [Gram-Schmidt](#))

Itt vigyázni kell a numerikával...

Az ortogonális rendszerek általános elmélete

Ha meg van a bázis az $[a, b]$ intervallumon: $\Phi_i(x)$, $i = 0 \dots N$,
akkor a kollokációs pontok:

$$\{x_i\}_1 = \{x : \Phi_{N+1}(x) = 0\}$$

vagy

$$\{x_i\}_2 = \left\{ x : \frac{d\Phi_{N+1}(x)}{dx} = 0 \right\} \cup a \cup b$$

$\{x_i\}_1$ a Gauss-i, $\{x_i\}_2$ a Lobatto rács

Az ortogonális rendszerek általános elmélete

Ha a normál térben akarunk dolgozni, akkor definiálhatjuk a kardinális függvényeket:

Gauss rács esetén:

$$C_j(x) = \frac{\Phi_{N+1}(x)}{\frac{d\Phi_{N+1}}{dx}(x_j)(x - x_j)}$$

Lobatto rács esetén:

$$C_j(x) = \frac{(1 - x^2) \frac{d\Phi_N}{dx}(x)}{\frac{d}{dx} \left[(1 - x_j^2) \frac{d\Phi_N}{dx}(x_j) \right] (x - x_j)}$$

Ha a normál térben akarunk dolgozni, akkor definiálhatjuk a kardinális függvényeket:

A kvadratura súlyok a kardinális függvények integráljai:

$$w_i = \int_a^b C_i(x) dx$$

Ha a spektrál térben akarunk dolgozni, akkor a spektrál együtthatók:

$$a_i = \frac{(f, \Phi_i)}{(\Phi_i, \Phi_i)}$$

Ahol $(\cdot, \cdot)$ továbbra is a belső szorzat (diszkrét változata).

Ortonormált bázis esetén a nevező 1.

Az ortogonális rendszerek általános elmélete

Ha a spektrál térben akarunk dolgozni, akkor a spektrál együtthatók:

$$a_i = \frac{(f, \Phi_i)}{(\Phi_i, \Phi_i)}$$

Továbbá, ha közvetlenül akarjuk megkonstruálni az áttérési mátrixot: $a_k = \sum_i M_{ki} f_i$

$$M_{ki} = \frac{\Phi_k(x_i) w_i}{(\Phi_k, \Phi_k)}$$

Az ortogonális rendszerek általános elmélete

Továbbá, ha közvetlenül akarjuk megkonstruálni az áttérési mátrixot: $a_k = \sum_i M_{ki} f_i$

$$M_{ki} = \frac{\Phi_k(x_i) w_i}{(\Phi_k, \Phi_k)}$$

amelynek inverze:

$$M_{ij}^{-1} = \Phi_j(x_i)$$

azaz: $f_i = \sum_j M_{ij}^{-1} a_j$

8. Mi van több dimenzióban?

A legtöbbször gond nélkül lehet direkt szorzat bázist választani, és teljesen függetlenül kezelni a különböző irányokat:

$$f(x_p, y_q) = f_{pq} = \sum_{ij} a_{ij} \Phi_{ip} \Psi_{jq}$$

Az integrátorok is egymásba ágyazhatóak:

$$\int dx \int dy f(x, y) = \sum_i w_i^{(x)} \sum_j w_j^{(y)} f(x_i, y_j)$$

A deriváltak is külön hatnak a bázisokon:

$$\partial_x \partial_y f(x, y) = \sum_{ij} a_{ij} \Phi'_{ip} \Psi'_{jq}$$

9. Parciális differenciál egyenletek

Parciális differenciál egyenletek

A több dimenziós megközelítés továbbra is működik, de nem mindig ezt akarjuk!

A több dimenziós megközelítés továbbra is működik, de nem mindig ezt akarjuk!

Például:

- Nem fér be a memóriába a nagy mátrix
- Nem ismert az egyik dimenzióban a tartomány, amin kifejtünk (például időléptetni akarunk egy bizonyos feltétel teljesüléséig)

Parciális differenciál egyenletek

Tekintsük a következő kezdőérték problémát:

$$\frac{df(x, t)}{dt} = -v \frac{df(x, t)}{dx}$$

$$f(x, 0) = e^{-x^2}$$

Hogyan oldjuk ezt meg?

Parciális differenciál egyenletek

Fejtsük ki a keresett függvényt csak x -ben:

$$f(x, t) = \sum_i a_i(t) \Phi_i(x)$$

Tehát az együtthatók időfüggőek lesznek,
de a helyfüggést a bázis kezeli!

Parciális differenciál egyenletek

Fejtsük ki a keresett függvényt csak x -ben:

$$f(x, t) = \sum_i a_i(t) \Phi_i(x)$$

A kezdőfeltétel az együtthatókra fog vonatkozni:

$$a_k(t = 0) = \sum_j e^{-x_j^2} \Phi_{jk}^{-1}$$

Parciális differenciál egyenletek

Végül írjuk át a differenciál egyenletet az együtthatókra:

$$\frac{df(x, t)}{dt} = -v \frac{df(x, t)}{dx}$$

Beírva a kifejtést $f(x, t) = \sum_i a_i(t) \Phi_i(x)$:

$$\sum_i \frac{da_i(t)}{dt} \Phi_i(x) = -v \sum_i a_i(t) \frac{d\Phi_i(x)}{dx}$$

Parciális differenciál egyenletek

Beírva a kifejtést $f(x, t) = \sum_i a_i(t) \Phi_i(x)$:

$$\sum_i \frac{da_i(t)}{dt} \Phi_i(x) = -v \sum_i a_i(t) \frac{d\Phi_i(x)}{dx}$$

Diszkretizálva $\{x_j\}$ -re:

$$\sum_i \frac{da_i(t)}{dt} \Phi_{ij} = -v \sum_i a_i(t) \frac{d\Phi_{ij}}{dx}$$

Parciális differenciál egyenletek

Diszkretizálva $\{x_j\}$ -re:

$$\sum_i \frac{da_i(t)}{dt} \Phi_{ij} = -v \sum_i a_i(t) \frac{d\Phi_{ij}}{dx}$$

Beszorozva Φ_{jk}^{-1} -el és kiszummázva j-re:

$$\frac{da_k(t)}{dt} = -v \sum_i a_i(t) \left[\sum_j \frac{d\Phi_{ij}}{dx} \Phi_{jk}^{-1} \right]$$

Parciális differenciál egyenletek

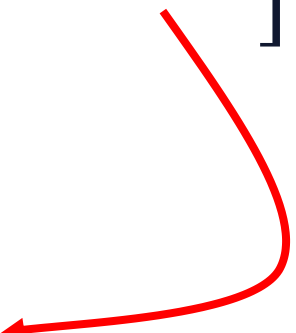
Beszorozva Φ_{jk}^{-1} -el és kiszummázva j-re:

$$\frac{da_k(t)}{dt} = -v \sum_i a_i(t) \left[\sum_j \frac{d\Phi_{ij}}{dx} \Phi_{jk}^{-1} \right]$$

Tömörebb jelöléssel:

$$\dot{a}_k = -v \sum_i a_i D_{ik}$$

Mert ez
időfüggetlen!

A red curved arrow originates from the text "Mert ez időfüggetlen!" and points to the term Φ_{jk}^{-1} in the equation above, indicating that this term is time-independent.

Parciális differenciál egyenletek

Tömörebb jelöléssel:

$$\dot{a}_k = -v \sum_i a_i D_{ik}$$

Ezt már egy szokványos közönséges differenciálegyenlet megoldóval, például valamelyik Runge-Kutta módszerrel meg tudjuk oldani.

Parciális differenciál egyenletek

Néha nem ennyire triviális formulák jönnek ki, tekintsük a következő jobboldalt:

$$\frac{df(x, t)}{dt} = a \frac{df(x, t)}{dx} + bg(t) + ch(x, t) + df(x, t)z(x, t)$$

Parciális differenciál egyenletek

$$\frac{df(x, t)}{dt} = a \frac{df(x, t)}{dx} + bg(t) + ch(x, t) + d f(x, t)z(x, t)$$

A spektrál kifejtés után:

$$\begin{aligned} \dot{a}_k &= -a \sum_i a_i D_{ik} + bg(t) \sum_j \Phi_{jk} + c \sum_j h(x_j, t) \Phi_{jk} + d \sum_i a_i \sum_j \Phi_{ij} z(x_j, t) \Phi_{jk}^{-1} \end{aligned}$$

Parciális differenciál egyenletek

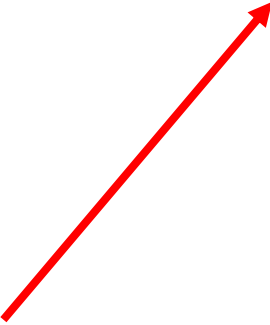
A spektrál kifejtés után:

$$\dot{a}_k = -a \sum_i a_i D_{ik} + b g(t) \sum_j \Phi_{jk} + c \sum_j h(x_j, t) \Phi_{jk} + d \sum_i a_i \sum_j \Phi_{ij} z(x_j, t) \Phi_{jk}^{-1}$$
A red arrow originates from the text below and points to the term $a_i D_{ik}$ in the equation.

Ez volt az előző eset:
minden időlépésben egy mátrix-vektor szorzat

Parciális differenciál egyenletek

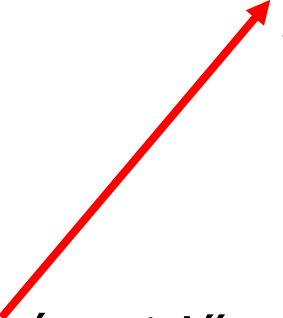
A spektrál kifejtés után:

$$\dot{a}_k = -a \sum_i a_i D_{ik} + b g(t) \sum_j \Phi_{jk} + c \sum_j h(x_j, t) \Phi_{jk} + d \sum_i a_i \sum_j \Phi_{ij} z(x_j, t) \Phi_{jk}^{-1}$$


Itt az együttható függvény időfüggő, de a koordinátától nem függ, ezért ez a bázis felösszegzése előre elvégezhető, és időlépésenként csak egy vektor-skalár szorzást kell kiszámolni

Parciális differenciál egyenletek

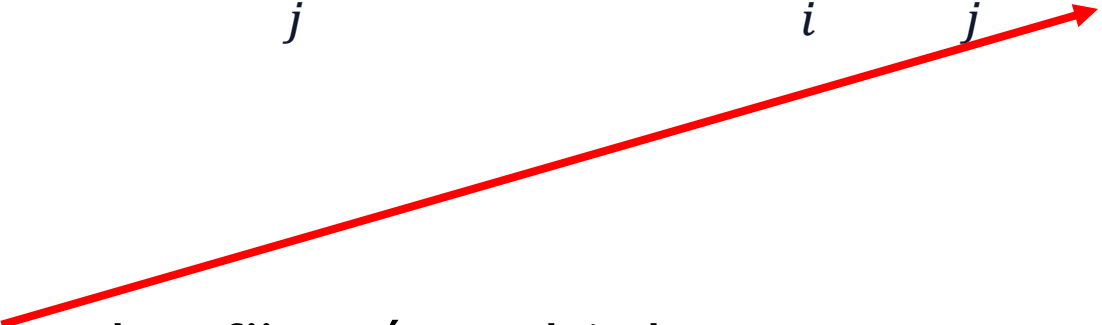
A spektrál kifejtés után:

$$\dot{a}_k = -a \sum_i a_i D_{ik} + b g(t) \sum_j \Phi_{jk} + c \sum_j h(x_j, t) \Phi_{jk} + d \sum_i a_i \sum_j \Phi_{ij} z(x_j, t) \Phi_{jk}^{-1}$$
A red arrow originates from the text block below and points to the term $h(x_j, t)$ within the summation $\sum_j h(x_j, t) \Phi_{jk}$ of the equation.

Itt az együttható függvény idő- és hely függő, ez ugyan olyan lesz, mint az első esetben: mátrix-vektor szorzás

Parciális differenciál egyenletek

A spektrál kifejtés után:

$$\dot{a}_k = -a \sum_i a_i D_{ik} + b g(t) \sum_j \Phi_{jk} + c \sum_j h(x_j, t) \Phi_{jk} + d \sum_i a_i \sum_j \Phi_{ij} z(x_j, t) \Phi_{jk}^{-1}$$
A red arrow originates from the text block below and points towards the double summation term $\sum_i a_i \sum_j \Phi_{ij} z(x_j, t) \Phi_{jk}^{-1}$ in the equation above.

Itt viszont még az ismeretlen függvénnyel is be van szorozva az általános együttható! Itt minden lépésben egy módosított mátrix-mátrix szorzás, és egy mátrix-vektor szorzást kell elvégeznünk!

Parciális differenciál egyenletek

Nézzük meg alaposabban ezt a tagot:

$$d f(x, t) z(x, t) \leftrightarrow d \sum_i a_i \sum_j \Phi_{ij} z(x_j, t) \Phi_{jk}^{-1}$$

Mi lenne, ha spektrál kifejtésénk z-t is?

$$f(x, t) = \sum_i a_i(t) \Phi_i(x)$$
$$z(x, t) = \sum_i \zeta_i(t) \Phi_i(x)$$

Parciális differenciál egyenletek

Nézzük meg alaposabban ezt a tagot:

$$d f(x, t) z(x, t) = d \sum_i a_i(t) \zeta_i(t) \Phi_i(x)$$

Diszkrétizálva $\{x_j\}$ -re, beszorozva Φ_{jk}^{-1} -el és kiszummázva j -re:

$$d \sum_i a_i \zeta_i \sum_j \Phi_{ij} \Phi_{jk}^{-1} = d \sum_i a_i \zeta_i$$

Parciális differenciál egyenletek

Tehát:

$$d f(x, t) z(x, t) \rightarrow d \sum_i a_i(t) \zeta_i(t)$$

Ez jól fest, de a kifejtést:

$$z(x, t) = \sum_i \zeta_i(t) \Phi_i(x)$$

nem mindig tudjuk kiszámolni előre!

Ha z nem függ t -től, akkor numerikusan meg tudjuk csinálni előre.

10. Összehasonlítás a véges differencia sémákkal

Összehasonlítás a véges diff sémákkal

A véges differencia sémák lokális polinom illesztéseket csinálnak minden pontban

A spektrális kifejtés annyira rendű véges diff sémának felel meg, ahány pontban diszkretizálunk

Összehasonlítás a véges diff sémákkal

Egy véges diff együttható mátrix így fest:



Egy spektrális együttható mátrix pedig így:



Összehasonlítás a véges diff sémákkal

Egy véges diff diszkretizáció sokkal kevesebbet követel meg a kifejtendő függvénytől, azonban kevésbé gyorsan is konvergál.

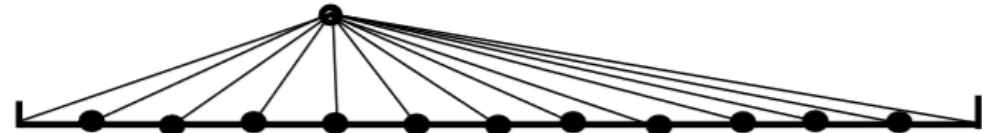
A spektrális módszerek több megszorítás mellett működnek jobban, költségesebbek, de ha minden teljesül, akkor nagyobb pontosságot tesznek elérhetővé.

Összehasonlítás a véges diff sémákkal

A véges differencia és a bemutatott spektrál kifejtés két véglet, az átmenetet közöttük a spektrális elem módszerek jelentik:

Spectral

One high-order polynomial for WHOLE domain



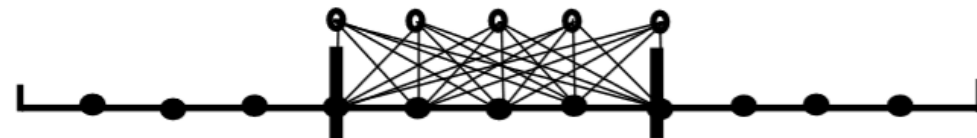
Finite Difference

Multiple Overlapping Low-Order Polynomials



Finite Element/Spectral Element

*Non-Overlapping Polynomials,
One per Subdomain*



11. Gyors transzformációk

Gyors transzformációk

FFT: Fast Fourier Transform

Bázis:

$$\Phi_k(x) = e^{-ikx}$$

Kollokációs pontok:

$$x_l = \frac{2\pi l}{N}$$

Függvény bázistranszformáltja:

$$f(x_l) = f_l = \sum_{k=0}^N a_k e^{-ik \frac{2\pi l}{N}}$$

FFT: Fast Fourier Transform

Az ötlet az, hogy a szumma átzárójelezhető,
és közös faktorkok emelhetőek ki, pl. $N=8$ esetén:

$$\begin{aligned} a_k &= f_0 + f_1 e^{-\frac{2i\pi k}{8} \cdot 1} + f_2 e^{-\frac{2i\pi k}{8} \cdot 2} + f_3 e^{-\frac{2i\pi k}{8} \cdot 3} + f_4 e^{-\frac{2i\pi k}{8} \cdot 4} + f_5 e^{-\frac{2i\pi k}{8} \cdot 5} + f_6 e^{-\frac{2i\pi k}{8} \cdot 6} + f_7 e^{-\frac{2i\pi k}{8} \cdot 7} \\ &= \left(f_0 + f_2 e^{-\frac{2i\pi k}{8} \cdot 2} + f_4 e^{-\frac{2i\pi k}{8} \cdot 4} + f_6 e^{-\frac{2i\pi k}{8} \cdot 6} \right) + e^{-\frac{2i\pi k}{8} \cdot 1} \cdot \left(f_1 + f_3 e^{-\frac{2i\pi k}{8} \cdot 2} + f_5 e^{-\frac{2i\pi k}{8} \cdot 4} + f_7 e^{-\frac{2i\pi k}{8} \cdot 6} \right) \\ &= \left(\left[f_0 + f_4 e^{-\frac{2i\pi k}{8} \cdot 4} \right] + e^{-\frac{2i\pi k}{8} \cdot 2} \cdot \left[f_2 + f_6 e^{-\frac{2i\pi k}{8} \cdot 4} \right] \right) + e^{-\frac{2i\pi k}{8} \cdot 1} \cdot \left(\left[f_1 + f_5 e^{-\frac{2i\pi k}{8} \cdot 4} \right] + e^{-\frac{2i\pi k}{8} \cdot 2} \cdot \left[f_3 + f_7 e^{-\frac{2i\pi k}{8} \cdot 4} \right] \right) \end{aligned}$$

FFT: Fast Fourier Transform

Az ötlet az, hogy a szumma átzárójelezhető, és közös faktorkok emelhetőek ki, pl. $N=8$ esetén:

$$\begin{aligned} a_k &= f_0 + f_1 e^{-\frac{2i\pi k}{8} \cdot 1} + f_2 e^{-\frac{2i\pi k}{8} \cdot 2} + f_3 e^{-\frac{2i\pi k}{8} \cdot 3} + f_4 e^{-\frac{2i\pi k}{8} \cdot 4} + f_5 e^{-\frac{2i\pi k}{8} \cdot 5} + f_6 e^{-\frac{2i\pi k}{8} \cdot 6} + f_7 e^{-\frac{2i\pi k}{8} \cdot 7} \\ &= \left(f_0 + f_2 e^{-\frac{2i\pi k}{8} \cdot 2} + f_4 e^{-\frac{2i\pi k}{8} \cdot 4} + f_6 e^{-\frac{2i\pi k}{8} \cdot 6} \right) + e^{-\frac{2i\pi k}{8} \cdot 1} \cdot \left(f_1 + f_3 e^{-\frac{2i\pi k}{8} \cdot 2} + f_5 e^{-\frac{2i\pi k}{8} \cdot 4} + f_7 e^{-\frac{2i\pi k}{8} \cdot 6} \right) \\ &= \left(\left[f_0 + f_4 e^{-\frac{2i\pi k}{8} \cdot 4} \right] + e^{-\frac{2i\pi k}{8} \cdot 2} \cdot \left[f_2 + f_6 e^{-\frac{2i\pi k}{8} \cdot 4} \right] \right) + e^{-\frac{2i\pi k}{8} \cdot 1} \cdot \left(\left[f_1 + f_5 e^{-\frac{2i\pi k}{8} \cdot 4} \right] + e^{-\frac{2i\pi k}{8} \cdot 2} \cdot \left[f_3 + f_7 e^{-\frac{2i\pi k}{8} \cdot 4} \right] \right) \end{aligned}$$

FFT: Fast Fourier Transform

Az ötlet az, hogy a szumma átzárójelezhető,
és közös faktorkok emelhetőek ki, pl. $N=8$ esetén:

$$\begin{aligned} a_k &= f_0 + f_1 e^{-\frac{2i\pi k}{8} \cdot 1} + f_2 e^{-\frac{2i\pi k}{8} \cdot 2} + f_3 e^{-\frac{2i\pi k}{8} \cdot 3} + f_4 e^{-\frac{2i\pi k}{8} \cdot 4} + f_5 e^{-\frac{2i\pi k}{8} \cdot 5} + f_6 e^{-\frac{2i\pi k}{8} \cdot 6} + f_7 e^{-\frac{2i\pi k}{8} \cdot 7} \\ &= \left(f_0 + f_2 e^{-\frac{2i\pi k}{8} \cdot 2} + f_4 e^{-\frac{2i\pi k}{8} \cdot 4} + f_6 e^{-\frac{2i\pi k}{8} \cdot 6} \right) + e^{-\frac{2i\pi k}{8} \cdot 1} \cdot \left(f_1 + f_3 e^{-\frac{2i\pi k}{8} \cdot 2} + f_5 e^{-\frac{2i\pi k}{8} \cdot 4} + f_7 e^{-\frac{2i\pi k}{8} \cdot 6} \right) \\ &= \left(\left[f_0 + f_4 e^{-\frac{2i\pi k}{8} \cdot 4} \right] + e^{-\frac{2i\pi k}{8} \cdot 2} \cdot \left[f_2 + f_6 e^{-\frac{2i\pi k}{8} \cdot 4} \right] \right) + e^{-\frac{2i\pi k}{8} \cdot 1} \cdot \left(\left[f_1 + f_5 e^{-\frac{2i\pi k}{8} \cdot 4} \right] + e^{-\frac{2i\pi k}{8} \cdot 2} \cdot \left[f_3 + f_7 e^{-\frac{2i\pi k}{8} \cdot 4} \right] \right) \end{aligned}$$

Gyors transzformációk

FFT: Fast Fourier Transform

A fenti zárójelek faktorai különbözően periodikusak (ahogy k fut 0-tól 7-ig):

Legbelül 2 a periódus, ezért $k=0, 2, 4, 6$ -ra pontosan ugyanazt a szummát kell kiszámolni, sőt $k=1, 3, 5, 7$ -re is, csak akkor egy mínusz előjellel.

A $[]$ - k között 4 a periódus, ezért $k=\{0, 4\}, \{1, 5\}, \{2, 6\}, \{3, 7\}$ csoportokra ugyan az a szumma, de a szorzó faktorok: $1, -1, -i, i$.

A $()$ -között 8 a periódus, tehát csak a $-1 \cdot$ szorzás marad meg.

Ezek kihasználásával lényegesen csökkenthető az elvégzendő szorzások (és exp számolások) száma.

FFT: Fast Fourier Transform

Összességében tehát az FFT nem más, mint a bázis transzformációs szumma egzakt átrendezése.

Talán nem meglepő módon ez csak periodikus függvényekre hatékony.

Azonban más bázisokra is léteznek gyors transzformációs módszerek:

A Csebisev bázis csak egy koordináta transzformációja a koszinusz bázisnak (a Fourier páros részének), ezért ez FFT-vel gyorsítható

Gyors transzformációk

Azonban más bázisokra is léteznek gyors transzformációs módszerek:

Továbbá:

Gyors Hermite transzformáció

Gyors Legendre transzformáció (FFT alapon)

Összefoglalás

A spektrális kifejtések megfelelően folytonos függvényekre sokkal jobb konvergenciát tudnak biztosítani, mint az általános véges differencia alapú módszerek.

Ideális esetben a lebegőpontos ábrázolás határáig el lehet jutni

Ahhoz, hogy a legtöbbet hozzuk ki egy spektrális módszerből

A problémának megfelelő bázist kell választanunk.

És a bázishoz tartozó formulákat, rutinokat kell használni.

Rejtett diszkontinuitás: $\int_{-\pi}^{\pi} e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi} \operatorname{erf}(\pi)$

