Optimalizációs és extrapolációs feladatok

Lóczi Lajos
LLoczi@inf.elte.hu
ELTE IK, Numerikus Analízis Tanszék

TKP-workshop
2022. január 13–14.

NATIONAL RESEARCH, D
AND INNOVATION
HUNGAR

I. Optimumszámítási feladatok – közös munka Hajder Leventével

$$\arg\min_n \left\| \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix} - \frac{1}{n^T w_5} \begin{bmatrix} n^T w_1 & n^T w_2 \\ n^T w_3 & n^T w_4 \end{bmatrix} \right.$$

ahol $n \in \mathbb{R}^3$ egységvektor

$$f(n) := \left(a_{11} - \frac{\langle n, w_1 \rangle}{\langle n, w_5 \rangle}\right)^2 + \left(a_{12} - \frac{\langle n, w_2 \rangle}{\langle n, w_5 \rangle}\right)^2 + \left(a_{21} - \frac{\langle n, w_3 \rangle}{\langle n, w_5 \rangle}\right)^2$$

Numerikusan a feladat viszonylag könnyen kezelhető (gradiens-módszer, Newton-iteráció)

Adható-e szimbolikus képlet az optimális n vektorra?

Standard technikákkal:
parciális deriváltak = 0 $\Rightarrow$ nemlineáris polinomiális egyenletrendszer

Ez utóbbi visszavezethető egy egyváltozós, magasabb fokú polinom gyökeinek megkeresésére: numerikus megoldás

Észrevétel: $f(\mu n) = f(n), \forall\, \mu \neq 0$

Így az $\|n\| = 1$ nemlineáris mellékfeltétel helyett vehetjük például az $n_3 = 1$, illetve az $n_3 = 0$ mellékfeltételeket.

Ezekben az esetekben a feladat könnyebben kezelhető szimbolikusan.

Ismét a standard technikákkal (parciális deriváltak = 0), n_1 kifejezhető:
$n_1 = \frac{\text{numer}_1}{\text{denom}_1}$, ahol

$$\text{numer}_1 := n_2^2\big(- a_{11}w_{51}w_{52}w_{12} + a_{11}w_{11}w_{52}^2 + a_{12}w_{21}w_{52}^2 + a_{21}w$$
$$a_{22}w_{41}w_{52}^2 - a_{12}w_{22}w_{51}w_{52} - a_{21}w_{32}w_{51}w_{52} - a_{22}w_{42}w_{51}w_{52}$$
$$w_{51}w_{12}^2 - w_{11}w_{52}w_{12} + w_{22}^2w_{51} + w_{32}^2w_{51} + w_{42}^2w_{51} -$$
$$w_{21}w_{22}w_{52} - w_{31}w_{32}w_{52} - w_{41}w_{42}w_{52}\big) +$$
$$n_2\big(- a_{11}w_{13}w_{52}w_{51} - a_{12}w_{23}w_{52}w_{51} - a_{21}w_{33}w_{52}w_{51} - a_{22}w_{43}w$$
$$a_{11}w_{12}w_{53}w_{51} - a_{12}w_{22}w_{53}w_{51} - a_{21}w_{32}w_{53}w_{51} - a_{22}w_{42}w_{53}w_{51} + 2a_{11}$$
$$2a_{12}w_{21}w_{52}w_{53} + 2a_{21}w_{31}w_{52}w_{53} + 2a_{22}w_{41}w_{52}w_{53} + 2w_{12}w_{13}w_{51} + 2$$
$$2w_{32}w_{33}w_{51} + 2w_{42}w_{43}w_{51} - w_{11}w_{13}w_{52} - w_{21}w_{23}w_{52} - w_{31}w_{33}w_{52} -$$
$$w_{11}w_{12}w_{53} - w_{21}w_{22}w_{53} - w_{31}w_{32}w_{53} - w_{41}w_{42}w_{53}\big) +$$
$$a_{11}w_{11}w_{53}^2 + a_{12}w_{21}w_{53}^2 + a_{21}w_{31}w_{53}^2 + a_{22}w_{41}w_{53}^2 - a_{11}w_{13}w_{51}w_{53} - a_{1}$$
$$a_{21}w_{33}w_{51}w_{53} - a_{22}w_{43}w_{51}w_{53} + w_{13}^2w_{51} + w_{23}^2w_{51} + w_{33}^2w_{51} + w$$
$$w_{11}w_{13}w_{53} - w_{21}w_{23}w_{53} - w_{31}w_{33}w_{53} - w_{41}w_{43}w_{53}$$

és

$$\text{denom}_1 := n_2\big(- a_{11}w_{51}w_{52}w_{11} + a_{11}w_{12}w_{51}^2 + a_{12}w_{22}w_{51}^2 + a_{21}w_{32}w_{51}^2 + a_{22}w$$
$$a_{12}w_{21}w_{51}w_{52} - a_{21}w_{31}w_{51}w_{52} - a_{22}w_{41}w_{51}w_{52} + w_{52}w_{11}^2 - w_{12}w_{51}w_{11} - w_{21}w$$
$$w_{31}w_{32}w_{51} - w_{41}w_{42}w_{51} + w_{21}^2w_{52} + w_{31}^2w_{52} + w_{41}^2w_{52}\big) -$$
$$a_{11}w_{51}w_{53}w_{11} + a_{11}w_{13}w_{51}^2 + a_{12}w_{23}w_{51}^2 + a_{21}w_{33}w_{51}^2 + a_{22}w_{43}w_{51}^2 - a_{12}w_{21}w$$

$$a_{21}w_{31}w_{51}w_{53} - a_{22}w_{41}w_{51}w_{53} + w_{53}w_{11}^2 - w_{13}w_{51}w_{11} - w_{21}w_{23}w_{51} -$$
$$w_{31}w_{33}w_{51} - w_{41}w_{43}w_{51} + w_{21}^2w_{53} + w_{31}^2w_{53} + w_{41}^2w_{53}.$$

Ezt visszahelyettesítve a másik parciális deriváltas egyenletbe, az n_2-re megoldható:
egy 5-ödfokú egyenlet árán.

Kulcsészrevétel: a kapott 19 paraméteres kifejezés faktorizálható.
(Ha az együtthatók lebegőpontos számok volnának: ez nem lenne igaz általában.)
(A Factor[] parancs kódja Wolfram-nyelven több mint félezer oldal.)

Így n_2-re a fokozatos egyszerűsítések után egy lineáris egyenlet adódik.

$n_2 = \frac{\text{numer}_2}{\text{denom}_2}$, ahol

$$\text{numer}_2 := a_{12}w_{22}w_{53}^2w_{11}^2 + a_{21}w_{32}w_{53}^2w_{11}^2 + a_{22}w_{42}w_{53}^2w_{11}^2 + w$$

$$w_{43}^2w_{52}w_{11}^2 - w_{22}w_{23}w_{53}w_{11}^2 - w_{32}w_{33}w_{53}w_{11}^2 - w_{42}w_{43}w_{53}w_{11}^2$$

$$a_{21}w_{33}w_{52}w_{53}w_{11}^2 - a_{22}w_{43}w_{52}w_{53}w_{11}^2 - a_{12}w_{12}w_{21}w_{53}^2w_{11} -$$

$$a_{21}w_{12}w_{31}w_{53}^2w_{11} - a_{11}w_{31}w_{32}w_{53}^2w_{11} - a_{22}w_{12}w_{41}w_{53}^2w_{11} - a_{11}w_{41}u$$

$$w_{12}w_{33}^2w_{51}w_{11} - w_{12}w_{43}^2w_{51}w_{11} + w_{13}w_{22}w_{23}w_{51}w_{11} + w_{13}w_{32}w_{33}w$$

$$2w_{13}w_{21}w_{23}w_{52}w_{11} - 2w_{13}w_{31}w_{33}w_{52}w_{11} - 2w_{13}w_{41}w_{43}w_{52}w_{11}$$

$$a_{11}w_{33}^2w_{51}w_{52}w_{11} - a_{11}w_{43}^2w_{51}w_{52}w_{11} + a_{12}w_{13}w_{23}w_{51}w_{52}w_{11} +$$

$$a_{22}w_{13}w_{43}w_{51}w_{52}w_{11} + w_{13}w_{21}w_{22}w_{53}w_{11} + w_{12}w_{21}w_{23}w_{53}w_{11}$$

$$w_{12}w_{31}w_{33}w_{53}w_{11} + w_{13}w_{41}w_{42}w_{53}w_{11} + w_{12}w_{41}w_{43}w_{53}w_{11} - 2$$

$$a_{12}w_{12}w_{23}w_{51}w_{53}w_{11} + a_{11}w_{22}w_{23}w_{51}w_{53}w_{11} - 2a_{21}w_{13}w_{32}w_{51}w_{53}u$$

$$a_{11}w_{32}w_{33}w_{51}w_{53}w_{11} - 2a_{22}w_{13}w_{42}w_{51}w_{53}w_{11} + a_{22}w_{12}w_{43}w_{51}w_{53}u$$

$$a_{12}w_{13}w_{21}w_{52}w_{53}w_{11} + a_{11}w_{21}w_{23}w_{52}w_{53}w_{11} + a_{21}w_{13}w_{31}w_{52}w_{53}w$$

$$a_{22}w_{13}w_{41}w_{52}w_{53}w_{11} + a_{11}w_{41}w_{43}w_{52}w_{53}w_{11} + a_{11}w_{12}w_{23}^2w$$

$$a_{12}w_{22}w_{33}^2w_{51}^2 + a_{11}w_{12}w_{43}^2w_{51}^2 + a_{12}w_{22}w_{43}^2w_{51}^2 + a_{21}w_{32}w_{43}^2u$$

$$a_{12}w_{12}w_{13}w_{23}w_{51}^2 - a_{11}w_{13}w_{22}w_{23}w_{51}^2 + a_{21}w_{13}^2w_{32}w_{51}^2 + a_{21}w_{23}^2w_3$$

$$a_{21}w_{22}w_{23}w_{33}w_{51}^2 - a_{11}w_{13}w_{32}w_{33}w_{51}^2 - a_{12}w_{23}w_{32}w_{33}w_{51}^2$$

$$a_{22}w_{23}^2w_{42}w_{51}^2 + a_{22}w_{33}^2w_{42}w_{51}^2 - a_{22}w_{12}w_{13}w_{43}w_{51}^2 - a_{2}$$

$$a_{22}w_{32}w_{33}w_{43}w_{51}^2 - a_{11}w_{13}w_{42}w_{43}w_{51}^2 - a_{12}w_{23}w_{42}w_{43}w_{51}^2 - a_{21}w_{33}u$$

$$a_{11}w_{12}w_{31}^2w_{53}^2 + a_{12}w_{22}w_{31}^2w_{53}^2 + a_{11}w_{12}w_{41}^2w_{53}^2 + a_{12}w_{22}w_{41}^2u$$

$$a_{21}w_{21}w_{22}w_{31}w_{53}^2 + a_{21}w_{21}^2w_{32}w_{53}^2 - a_{12}w_{21}w_{31}w_{32}w_{53}^2 - a$$

$$a_{22}w_{31}w_{32}w_{41}w_{53}^2 + a_{22}w_{21}^2w_{42}w_{53}^2 + a_{22}w_{31}^2w_{42}w_{53}^2 - a_{12}w_{21}w_{41}w_4$$

$$w_{21}w_{22}w_{33}^2w_{51} - w_{21}w_{22}w_{43}^2w_{51} - w_{31}w_{32}w_{43}^2w_{51} - w_{13}^2w_{21}w_{22}w$$

$$w_{13}^2w_{31}w_{32}w_{51} - w_{23}^2w_{31}w_{32}w_{51} + w_{12}w_{13}w_{31}w_{33}w_{51} + w_{22}w_{23}w_{31}w$$

$$w_{13}^2 w_{41} w_{42} w_{51} - w_{23}^2 w_{41} w_{42} w_{51} - w_{33}^2 w_{41} w_{42} w_{51} + w_{12} w_{13} w_{41} w_{43}$$

$$w_{32} w_{33} w_{41} w_{43} w_{51} + w_{21} w_{23} w_{42} w_{43} w_{51} + w_{31} w_{33} w_{42} w_{43} w_{51} + w$$

$$w_{23}^2 w_{31}^2 w_{52} + w_{21}^2 w_{33}^2 w_{52} + w_{13}^2 w_{41}^2 w_{52} + w_{23}^2 w_{41}^2 w_{52} + w_{33}^2 w$$

$$w_{31}^2 w_{43}^2 w_{52} - 2 w_{21} w_{23} w_{31} w_{33} w_{52} - 2 w_{21} w_{23} w_{41} w_{43} w_{52} - 2 w_{31} w_{33} w_{41}$$

$$a_{12} w_{21} w_{43}^2 w_{51} w_{52} - a_{21} w_{31} w_{43}^2 w_{51} w_{52} - a_{12} w_{13}^2 w_{21} w_{51} w_{52} + a$$

$$a_{21} w_{13}^2 w_{31} w_{51} w_{52} - a_{21} w_{23}^2 w_{31} w_{51} w_{52} + a_{21} w_{21} w_{23} w_{33} w_{51} w_{52} +$$

$$a_{12} w_{23} w_{31} w_{33} w_{51} w_{52} - a_{22} w_{13}^2 w_{41} w_{51} w_{52} - a_{22} w_{23}^2 w_{41} w_{51} w_{52}$$

$$a_{22} w_{21} w_{23} w_{43} w_{51} w_{52} + a_{22} w_{31} w_{33} w_{43} w_{51} w_{52} + a_{11} w_{13} w_{41} w_{43} w_{51} w$$

$$a_{21} w_{33} w_{41} w_{43} w_{51} w_{52} - w_{12} w_{13} w_{21}^2 w_{53} - w_{12} w_{13} w_{31}^2 w_{53} - w_{22} w_{23}$$

$$w_{22} w_{23} w_{41}^2 w_{53} - w_{32} w_{33} w_{41}^2 w_{53} + w_{21} w_{23} w_{31} w_{32} w_{53} + w_{21} w_{22} w_{31}$$

$$w_{21} w_{23} w_{41} w_{42} w_{53} + w_{31} w_{33} w_{41} w_{42} w_{53} + w_{21} w_{22} w_{41} w_{43} w_{53} + w_{31} w_{32} w$$

$$w_{31}^2 w_{42} w_{43} w_{53} + a_{12} w_{12} w_{13} w_{21} w_{51} w_{53} + a_{11} w_{13} w_{21} w_{22} w_{51} w_{53} -$$

$$a_{21} w_{12} w_{13} w_{31} w_{51} w_{53} + a_{21} w_{22} w_{23} w_{31} w_{51} w_{53} - 2 a_{21} w_{21} w_{23} w_{32} w_{51} w$$

$$a_{12} w_{23} w_{31} w_{32} w_{51} w_{53} + a_{21} w_{21} w_{22} w_{33} w_{51} w_{53} - 2 a_{11} w_{12} w_{31} w_{33} w_{51} w$$

$$a_{12} w_{21} w_{32} w_{33} w_{51} w_{53} + a_{22} w_{12} w_{13} w_{41} w_{51} w_{53} + a_{22} w_{22} w_{23} w_{41} w_{51} w$$

$$2 a_{22} w_{21} w_{23} w_{42} w_{51} w_{53} - 2 a_{22} w_{31} w_{33} w_{42} w_{51} w_{53} + a_{11} w_{13} w_{41} w_{42} w_{51} w$$

$$a_{21} w_{33} w_{41} w_{42} w_{51} w_{53} + a_{22} w_{21} w_{22} w_{43} w_{51} w_{53} + a_{22} w_{31} w_{32} w_{43} w_{51} w_{5}$$

$$2 a_{12} w_{22} w_{41} w_{43} w_{51} w_{53} - 2 a_{21} w_{32} w_{41} w_{43} w_{51} w_{53} + a_{12} w_{21}$$

$$a_{21} w_{31} w_{42} w_{43} w_{51} w_{53} - a_{11} w_{13} w_{21}^2 w_{52} w_{53} - a_{11} w_{13} w_{31}^2 w_{52} w_{53}$$

$$a_{11} w_{13} w_{41}^2 w_{52} w_{53} - a_{12} w_{23} w_{41}^2 w_{52} w_{53} - a_{21} w_{33} w_{4}^2$$

$$a_{21} w_{21} w_{23} w_{31} w_{52} w_{53} - a_{21} w_{21}^2 w_{33} w_{52} w_{53} + a_{12} w_{21} w_{31} w_{33} w_{52} w_{53}$$

$$a_{22} w_{31} w_{33} w_{41} w_{52} w_{53} - a_{22} w_{21}^2 w_{43} w_{52} w_{53} - a_{22} w_{31}^2 w_{43} w_{52} w_{53} +$$

$$a_{21} w_{31} w_{41} w_{43} w_{52} w_{53}$$

$$\text{denom}_2 := a_{12} w_{23} w_{52}^2 w_{11}^2 + a_{21} w_{33} w_{52}^2 w_{11}^2 + a_{22} w_{43} w_{52}^2 w_{11}^2 - w_{22} w$$

$$w_{42} w_{43} w_{52} w_{11}^2 + w_{22}^2 w_{53} w_{11}^2 + w_{32}^2 w_{53} w_{11}^2 + w_{42}^2 w_{53} w_{11}^2 -$$

$$a_{21}w_{32}w_{52}w_{53}w_{11}^2 - a_{22}w_{42}w_{52}w_{53}w_{11}^2 - a_{12}w_{13}w_{21}w_{52}^2w_{11} - a_{11}w_2$$

$$a_{21}w_{13}w_{31}w_{52}^2w_{11} - a_{11}w_{31}w_{33}w_{52}^2w_{11} - a_{22}w_{13}w_{41}w_{52}^2w_{11} - a_{11}w_4$$

$$w_{13}w_{22}^2w_{51}w_{11} - w_{13}w_{32}^2w_{51}w_{11} - w_{13}w_{42}^2w_{51}w_{11} + w_{12}w_{22}w_{23}w_{51}w_{11} +$$

$$w_{12}w_{42}w_{43}w_{51}w_{11} + w_{13}w_{21}w_{22}w_{52}w_{11} + w_{12}w_{21}w_{23}w_{52}w_{11} + w_{13}w$$

$$w_{12}w_{31}w_{33}w_{52}w_{11} + w_{13}w_{41}w_{42}w_{52}w_{11} + w_{12}w_{41}w_{43}w_{52}w_{11} + a_{12}w_{13}$$

$$2a_{12}w_{12}w_{23}w_{51}w_{52}w_{11} + a_{11}w_{22}w_{23}w_{51}w_{52}w_{11} + a_{21}w_{13}w_{32}w_{51}w_{52}w_{11} - 2a$$

$$a_{11}w_{32}w_{33}w_{51}w_{52}w_{11} + a_{22}w_{13}w_{42}w_{51}w_{52}w_{11} - 2a_{22}w_{12}w_{43}w_{51}w_{52}w_{11} + a$$

$$2w_{12}w_{21}w_{22}w_{53}w_{11} - 2w_{12}w_{31}w_{32}w_{53}w_{11} - 2w_{12}w_{41}w_{42}w_{53}w_{11} - a_{11}$$

$$a_{11}w_{32}^2w_{51}w_{53}w_{11} - a_{11}w_{42}^2w_{51}w_{53}w_{11} + a_{12}w_{12}w_{22}w_{51}w_{53}w_{11} + a_{21}w_1$$

$$a_{22}w_{12}w_{42}w_{51}w_{53}w_{11} + a_{12}w_{12}w_{21}w_{52}w_{53}w_{11} + a_{11}w_{21}w_{22}w_{52}w_{53}w_{11} + a_2$$

$$a_{11}w_{31}w_{32}w_{52}w_{53}w_{11} + a_{22}w_{12}w_{41}w_{52}w_{53}w_{11} + a_{11}w_{41}w_{42}w_{52}w_{53}w_{11} +$$

$$a_{11}w_{13}w_{32}^2w_{51}^2 + a_{12}w_{23}w_{32}^2w_{51}^2 + a_{11}w_{13}w_{42}^2w_{51}^2 + a_{12}w_{23}w_{42}^2w_{51}^2 + a$$

$$a_{12}w_{12}w_{13}w_{22}w_{51}^2 + a_{12}w_{12}^2w_{23}w_{51}^2 - a_{11}w_{12}w_{22}w_{23}w_{51}^2 - a_{21}w_{12}$$

$$a_{21}w_{22}w_{23}w_{32}w_{51}^2 + a_{21}w_{12}^2w_{33}w_{51}^2 + a_{21}w_{22}^2w_{33}w_{51}^2 - a_{11}w_{12}w_3$$

$$a_{12}w_{22}w_{32}w_{33}w_{51}^2 - a_{22}w_{12}w_{13}w_{42}w_{51}^2 - a_{22}w_{22}w_{23}w_{42}w_{51}^2 - a_{22}w_3$$

$$a_{22}w_{12}^2w_{43}w_{51}^2 + a_{22}w_{22}^2w_{43}w_{51}^2 + a_{22}w_{32}^2w_{43}w_{51}^2 - a_{11}w_{12}w_{42}w_{43}w_{51}^2 - a$$

$$a_{21}w_{32}w_{42}w_{43}w_{51}^2 + a_{11}w_{13}w_{21}^2w_{52}^2 + a_{11}w_{13}w_{31}^2w_{52}^2 + a_{12}w_{23}w_{31}^2w_{52}^2 +$$

$$a_{12}w_{23}w_{41}^2w_{52}^2 + a_{21}w_{33}w_{41}^2w_{52}^2 - a_{21}w_{21}w_{23}w_{31}w_{52}^2 + a_{21}w_{21}^2w_{33}w_{52}^2 - a$$

$$a_{22}w_{21}w_{23}w_{41}w_{52}^2 - a_{22}w_{31}w_{33}w_{41}w_{52}^2 + a_{22}w_{21}^2w_{43}w_{52}^2 + a_{22}w_{31}^2w_{43}w_{52}^2 -$$

$$a_{21}w_{31}w_{41}w_{43}w_{52}^2 - w_{21}w_{23}w_{32}^2w_{51} - w_{21}w_{23}w_{42}^2w_{51} - w_{31}w_{33}w_{42}^2w_{51} +$$

$$w_{12}^2w_{21}w_{23}w_{51} + w_{12}w_{13}w_{31}w_{32}w_{51} + w_{22}w_{23}w_{31}w_{32}w_{51} - w_{12}^2w_{31}w_{33}w_{51}$$

$$w_{21}w_{22}w_{32}w_{33}w_{51} + w_{12}w_{13}w_{41}w_{42}w_{51} + w_{22}w_{23}w_{41}w_{42}w_{51} + w_{32}w_{33}w_{41}w_{42}$$

$$w_{22}^2w_{41}w_{43}w_{51} - w_{32}^2w_{41}w_{43}w_{51} + w_{21}w_{22}w_{42}w_{43}w_{51} + w_{31}w_{32}w_{42}w_{43}w_{51}$$

$$w_{12}w_{13}w_{31}^2w_{52} - w_{22}w_{23}w_{31}^2w_{52} - w_{12}w_{13}w_{41}^2w_{52} - w_{22}w_{23}w_{41}^2w_{52} -$$

$$w_{21}w_{23}w_{31}w_{32}w_{52} + w_{21}w_{22}w_{31}w_{33}w_{52} - w_{21}^2w_{32}w_{33}w_{52} + w_{21}w_{23}w_{41}w_{42}w_{52}$$

$$w_{21}w_{22}w_{41}w_{43}w_{52} + w_{31}w_{32}w_{41}w_{43}w_{52} - w_{21}^2w_{42}w_{43}w_{52} - w_{31}^2w_{42}w_{43}w_{52} + a$$

$$2a_{11}w_{13}w_{21}w_{22}w_{51}w_{52} + a_{11}w_{12}w_{21}w_{23}w_{51}w_{52} + a_{21}w_{12}w_{13}w_{31}w_{51}w_{52} + a$$

$$a_{21}w_{21}w_{23}w_{32}w_{51}w_{52} - 2a_{11}w_{13}w_{31}w_{32}w_{51}w_{52} - 2a_{12}w_{23}w_{31}w_{32}w_{51}w_{52} - 2a$$

$$a_{11}w_{12}w_{31}w_{33}w_{51}w_{52} + a_{12}w_{22}w_{31}w_{33}w_{51}w_{52} + a_{12}w_{21}w_{32}w_{33}w_{51}w_{52} + a_2$$

$$a_{22}w_{22}w_{23}w_{41}w_{51}w_{52} + a_{22}w_{32}w_{33}w_{41}w_{51}w_{52} + a_{22}w_{21}w_{23}w_{42}w_{51}w_{52} + a_2$$

$$2a_{11}w_{13}w_{41}w_{42}w_{51}w_{52} - 2a_{12}w_{23}w_{41}w_{42}w_{51}w_{52} - 2a_{21}w_{33}w_{41}w_{42}w_{51}w_{52} - 2a$$

$$2a_{22}w_{31}w_{32}w_{43}w_{51}w_{52} + a_{11}w_{12}w_{41}w_{43}w_{51}w_{52} + a_{12}w_{22}w_{41}w_{43}w_{51}w_{52} + a$$

$$a_{12}w_{21}w_{42}w_{43}w_{51}w_{52} + a_{21}w_{31}w_{42}w_{43}w_{51}w_{52} + w_{12}^2w_{21}^2w_{53} + w_{12}^2w$$

$$w_{21}^2w_{32}^2w_{53} + w_{12}^2w_{41}^2w_{53} + w_{22}^2w_{41}^2w_{53} + w_{32}^2w_{41}^2w_{53} + w_{21}^2w_{42}^2w$$

$$2w_{21}w_{22}w_{31}w_{32}w_{53} - 2w_{21}w_{22}w_{41}w_{42}w_{53} - 2w_{31}w_{32}w_{41}w_{42}w_{53} -$$

$$a_{12}w_{21}w_{42}^2w_{51}w_{53} - a_{21}w_{31}w_{42}^2w_{51}w_{53} - a_{12}w_{12}^2w_{21}w_{51}w_{53} + a_{11}w$$

$$a_{21}w_{12}^2w_{31}w_{51}w_{53} - a_{21}w_{22}^2w_{31}w_{51}w_{53} + a_{21}w_{21}w_{22}w_{32}w_{51}w_{53} + a_1$$

$$a_{12}w_{22}w_{31}w_{32}w_{51}w_{53} - a_{22}w_{12}^2w_{41}w_{51}w_{53} - a_{22}w_{22}^2w_{41}w_{51}w_{53} -$$

$$a_{22}w_{21}w_{22}w_{42}w_{51}w_{53} + a_{22}w_{31}w_{32}w_{42}w_{51}w_{53} + a_{11}w_{12}w_{41}w_{42}w_{51}w_{53} +$$

$$a_{21}w_{32}w_{41}w_{42}w_{51}w_{53} - a_{11}w_{12}w_{21}^2w_{52}w_{53} - a_{11}w_{12}w_{31}^2w_{52}w_{53} -$$

$$a_{11}w_{12}w_{41}^2w_{52}w_{53} - a_{12}w_{22}w_{41}^2w_{52}w_{53} - a_{21}w_{32}w_{41}^2w_{52}w_{53} + a_{21}w$$

$$a_{21}w_{21}^2w_{32}w_{52}w_{53} + a_{12}w_{21}w_{31}w_{32}w_{52}w_{53} + a_{22}w_{21}w_{22}w_{41}w_{52}w_{53} +$$

$$a_{22}w_{21}^2w_{42}w_{52}w_{53} - a_{22}w_{31}^2w_{42}w_{52}w_{53} + a_{12}w_{21}w_{41}w_{42}w_{52}w_{53} + a$$

Mivel csak alapműveleteket használunk ⇒ gyors, robusztus algoritmus

II. Extrapolációs módszerek – közös munka Fekete Imrével és Havasi Ágnessel

Cél: új, előnyös tulajdonságokkal rendelkező numerikus módszerek konstruálása közönséges differenciálegyenlet-rendszerek megoldására

$$\begin{cases} y'(t) = f(t, y(t)) \\ y(0) = y_0 \end{cases}$$

Numerikus módszerek (diszkretizációk) két klasszikus osztálya:

- Runge–Kutta-módszerek (RK)
- lineáris többlépéses módszerek (LMM)

RK-módszerek

- egylépéses módszerek:

  KDE-rendszer → RK → elsőrendű rekurzió $y_{n+1} = y_n + h\,\Phi(y_n)$

- de többlépcsős módszerek: a $[t_n, t_{n+1}]$ intervallumban több közbenső függvénykiértékelést végzünk (Y_j)

$$\begin{cases} Y_i = y_n + \sum_{j=1}^{s} a_{i,j}\, h\, F_j \quad (1 \le i \le s) \\ y_{n+1} = y_n + \sum_{j=1}^{s} b_j\, h\, F_j \end{cases}$$

ahol $F_j = f(Y_j)$

Megadhatók Butcher-táblákkal:

$$\begin{array}{c|c} c & A \\ \hline & b^{\mathsf{T}} \end{array}$$

Példa: RK44

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1/2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad b^{\top} = (1/6, 1/3, 1/3, 1/6)$$

LMM

- többlépéses módszerek

  KDE-rendszer → RK → magasabb rendű rekurzió

- de egylépcsős módszerek

$$y_n = \sum_{j=1}^{k} \alpha_j y_{n-j} + \sum_{j=0}^{k} \beta_j h f(y_{n-j})$$

Példák: Adams–Bashforth-család

$$y_{n+1} = y_n + hf(t_n, y_n), \qquad \text{(This is the Euler method)}$$

$$y_{n+2} = y_{n+1} + h\left(\frac{3}{2}f(t_{n+1}, y_{n+1}) - \frac{1}{2}f(t_n, y_n)\right),$$

$$y_{n+3} = y_{n+2} + h\left(\frac{23}{12}f(t_{n+2}, y_{n+2}) - \frac{16}{12}f(t_{n+1}, y_{n+1}) + \frac{5}{12}f(t_n, y_n)\right),$$

$$y_{n+4} = y_{n+3} + h\left(\frac{55}{24}f(t_{n+3}, y_{n+3}) - \frac{59}{24}f(t_{n+2}, y_{n+2}) + \frac{37}{24}f(t_{n+1}, y_{n+1}) - \frac{9}{24}f(t_n, y_n)\right.$$

$$y_{n+5} = y_{n+4} + h\left(\frac{1901}{720}f(t_{n+4}, y_{n+4}) - \frac{2774}{720}f(t_{n+3}, y_{n+3}) + \frac{2616}{720}f(t_{n+2}, y_{n+2}) - \frac{1274}{720}\right.$$

Példák: Adams–Moulton-család

$$y_{n+1} = y_n + hf(t_{n+1}, y_{n+1}),$$ This is the backward Euler method

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{2}h\left(f(t_{n+1}, y_{n+1}) + f(t_n, y_n)\right),$$ This is the trapezoidal rule

$$y_{n+2} = y_{n+1} + h\left(\frac{5}{12}f(t_{n+2}, y_{n+2}) + \frac{8}{12}f(t_{n+1}, y_{n+1}) - \frac{1}{12}f(t_n, y_n)\right),$$

$$y_{n+3} = y_{n+2} + h\left(\frac{9}{24}f(t_{n+3}, y_{n+3}) + \frac{19}{24}f(t_{n+2}, y_{n+2}) - \frac{5}{24}f(t_{n+1}, y_{n+1}) + \frac{1}{24}f(t_n, y\right.$$

$$y_{n+4} = y_{n+3} + h\left(\frac{251}{720}f(t_{n+4}, y_{n+4}) + \frac{646}{720}f(t_{n+3}, y_{n+3}) - \frac{264}{720}f(t_{n+2}, y_{n+2}) + \frac{106}{720}f\right.$$

Példák: a BDF-család

- BDF1:

$$y_{n+1} - y_n = hf(t_{n+1}, y_{n+1})$$

(this is the backward Euler method)

- BDF2:

$$y_{n+2} - \frac{4}{3}y_{n+1} + \frac{1}{3}y_n = \frac{2}{3}hf(t_{n+2}, y_{n+2})$$

- BDF3:

$$y_{n+3} - \frac{18}{11}y_{n+2} + \frac{9}{11}y_{n+1} - \frac{2}{11}y_n = \frac{6}{11}hf(t_{n+3}, y_{n+3})$$

- BDF4:

$$y_{n+4} - \frac{48}{25}y_{n+3} + \frac{36}{25}y_{n+2} - \frac{16}{25}y_{n+1} + \frac{3}{25}y_n = \frac{12}{25}hf(t_{n+4}, y_{n+4})$$

- BDF5:

$$y_{n+5} - \frac{300}{137}y_{n+4} + \frac{300}{137}y_{n+3} - \frac{200}{137}y_{n+2} + \frac{75}{137}y_{n+1} - \frac{12}{137}y_n = \frac{60}{137}hf(t_{n+5}$$

- BDF6:

$$y_{n+6} - \frac{360}{147}y_{n+5} + \frac{450}{147}y_{n+4} - \frac{400}{147}y_{n+3} + \frac{225}{147}y_{n+2} - \frac{72}{147}y_{n+1} + \frac{10}{147}y_n =$$

Richardson-extrapoláció (RE) – konvergenciagyorsító eljárás

Tegyük fel, hogy adott egy (kis) paramétertől függő $\mathcal{A}$ algoritmus.

$\mathcal{A}(h)$ és például $\mathcal{A}\left(\frac{h}{2}\right)$ értékéből szeretnénk következtetni (extrapolálni) $\mathcal{A}(0)$ értékére.
Ez akkor lehetséges, ha $\exists$ aszimptotikus sorfejtés h-ban ($h \to 0$).

Például: legyen $h > 0$ a diszkretizációs lépésköz és tekintsünk egy RK-módszer által adott $y_0,\ y_1(h),\ \ldots, y_n(h)$ sorozatot.
Itt h helyett a $\frac{h}{2}$ paraméterértékkel is lefuttatjuk az RK-módszert:
$y_0,\ y_1\left(\frac{h}{2}\right),\ \ldots, y_{2n}\left(\frac{h}{2}\right)$ – feleakkora lépésközzel kétszer annyi darab lépésre van szükség.

A kapott $y_n(h)$ és $y_{2n}\left(\frac{h}{2}\right)$ értékek a pontos, de ismeretlen y megoldást (ugyanabban az időpontban) közelítik.
Észrevétel: $y_n(h)$ és $y_{2n}\left(\frac{h}{2}\right)$ alkalmas lineáris kombinációja jobb közelítést ad.

Oka: az RK-módszer globális hibájának (pontos érték – közelítő érték, sok lépés után)
$\exists$ h szerinti aszimptotikus sorfejtése,
amelyben ezzel az alkalmas lineáris kombinációval az első néhány tagot ki tudjuk nullázni.

Azaz: az $y_n(h)$ és $y_{2n}\left(\frac{h}{2}\right)$ értékekből extrapolálunk a $h \to 0$ határértékre (a pontos megoldás értékére).

Lásd: Havasi Ágnes előadása, RK+RE

Kétfajta RE is lehetséges:

• globális/passzív RE (GRE): csak a legutolsó elemeket ($y_n(h)$ és $y_{2n}\left(\frac{h}{2}\right)$) kombináljuk lineárisan
• lokális/aktív RE (LRE): menet közben lépésenként kombinálunk lineárisan

Technikailag az LRE-t nehezebb kezelni.
Például kiderül: az RK+LRE felfogható RK-módszerként, ami konvergens.
A konvergenciarend megállapítása RK-módszerek esetén nemtriviális.

Mi a helyzet, ha RK-módszer helyett egy LMM-mel nyerjük az y_n sorozatot, és erre alkalmazunk GRE-t?

Gautschi: Numerical Analysis

Theorem 6.3.5. *Assume that*

(1) $\boldsymbol{f}(x, \boldsymbol{y}) \in C^2$ *on* $[a, b] \times \mathbb{R}^d$;
(2) *the multistep method (6.2) is stable (i.e., satisfies the root condition) and has order* $p \geq 1$;
(3) *the exact solution* $\boldsymbol{y}(x)$ *of (6.1) is of class* $C^{p+2}[a, b]$;
(4) *the starting approximations (6.4) satisfy*

$$\boldsymbol{u}_s - \boldsymbol{y}(x_s) = O(h^{p+1}) \ \ as \ \ h \to 0, \ \ s = 0, 1, \ldots, k-1;$$

(5) $\boldsymbol{e}(x)$ *is the solution of the linear initial value problem*

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{e}}{\mathrm{d}x} = \boldsymbol{f}_y(x, \boldsymbol{y}(x))\boldsymbol{e} - \boldsymbol{y}^{(p+1)}(x), \ \ \boldsymbol{e}(a) = 0. \tag{6.106}$$

Then, for $n = 0, 1, 2, \ldots, N$,

$$\boldsymbol{u}_n - \boldsymbol{y}(x_n) = C_{k,p} h^p \boldsymbol{e}(x_n) + O(h^{p+1}) \ \ as \ \ h \to 0, \tag{6.107}$$

where $C_{k,p}$ *is the error constant of (6.2), that is,*

$$C_{k,p} = \frac{\ell_{p+1}}{\sum_{s=0}^{k} \beta_s}, \quad \ell_{p+1} = L \frac{t^{p+1}}{(p+1)!}. \tag{6.108}$$

Így egy p-edrendű LMM + GRE ötvözésével a konvergenciarend eggyel megjavítható.

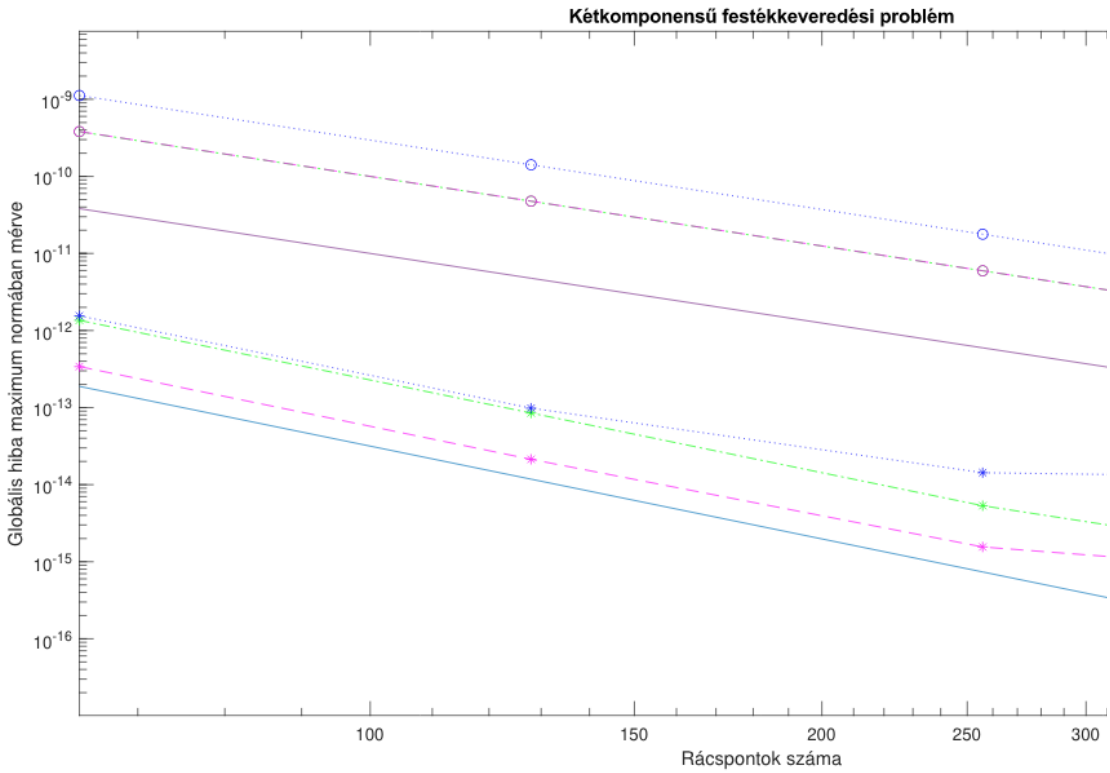
Példa: BDF2+GRE

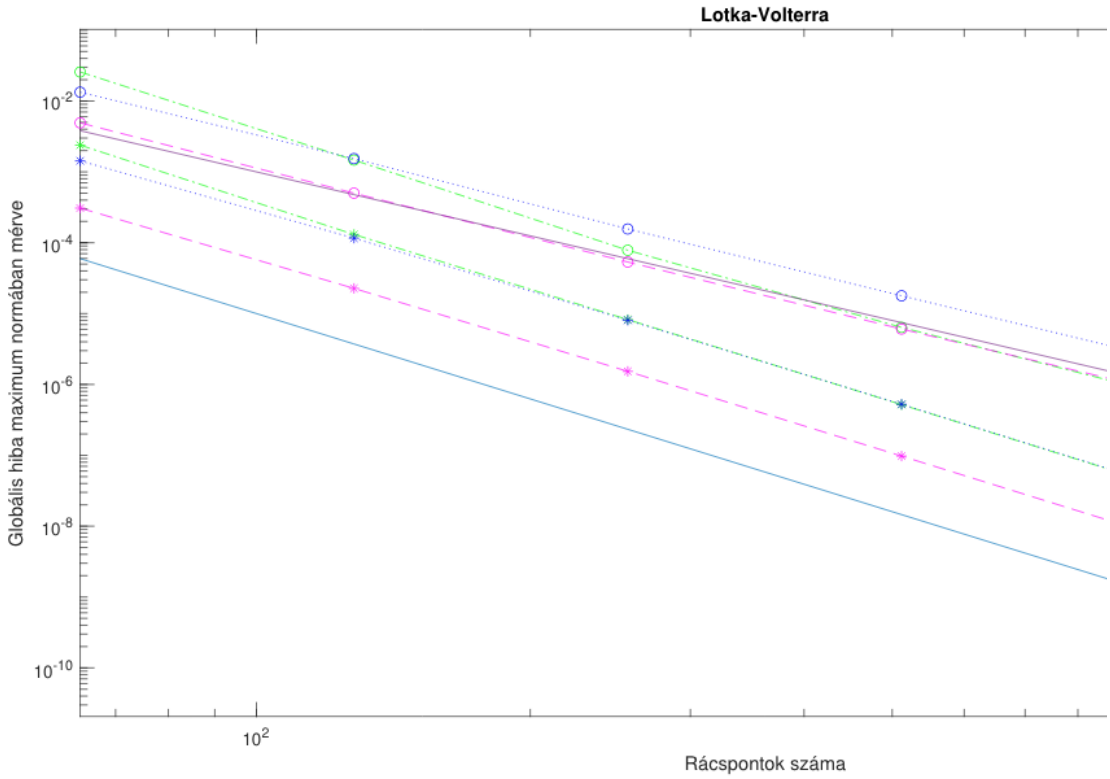
$$y_{n+2} - \frac{4}{3} y_{n+1} + \frac{1}{3} y_n = \frac{2}{3} h f(t_{n+2}, y_{n+2})$$
$$z_{n+2} - \frac{4}{3} z_{n+1} + \frac{1}{3} z_n = \frac{2}{3} \frac{h}{2} f(t_{n+2}, z_{n+2})$$

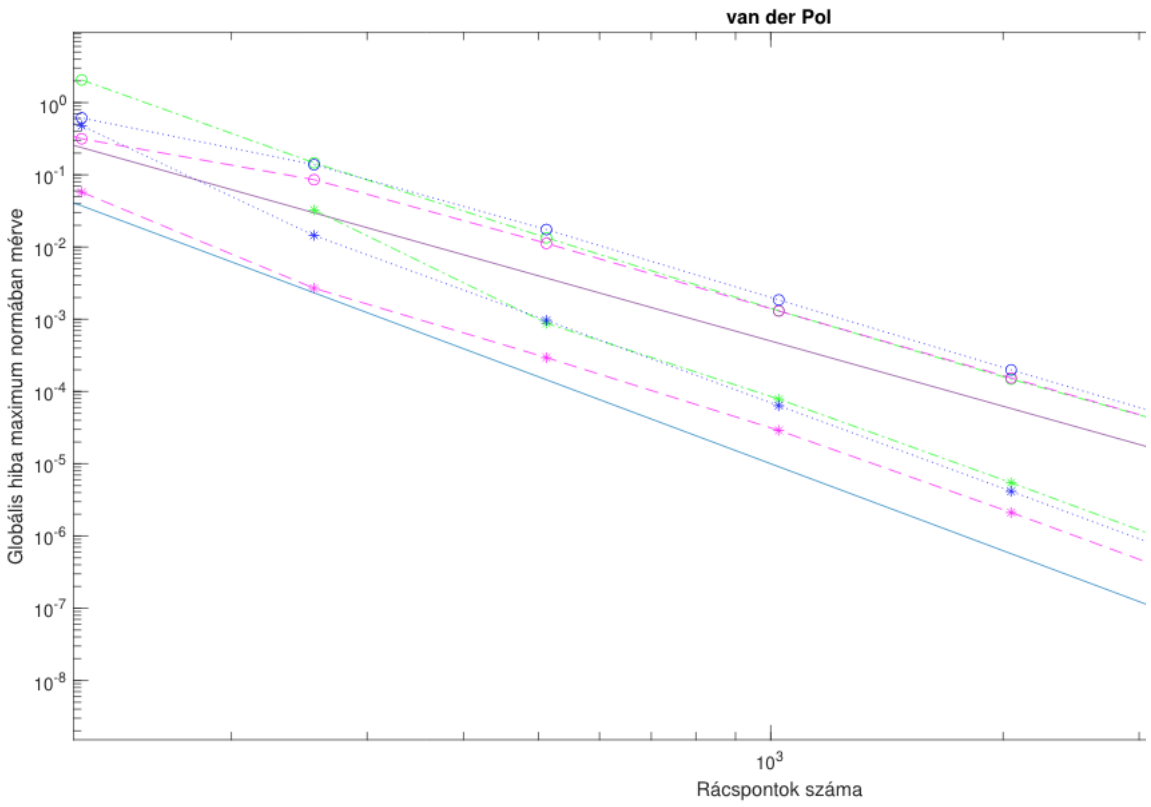
majd tekintsük a

$$\frac{4}{3} z_{2n} - \frac{1}{3} y_n$$

mennyiséget, ami a megoldás egy 3-adrendű közelítése lesz.




Lotka-Volterra
Globális hiba maximum normában mérve
10^{-2}
10^{-4}
10^{-6}
10^{-8}
10^{-10}
10^{2}
Rácspontok száma

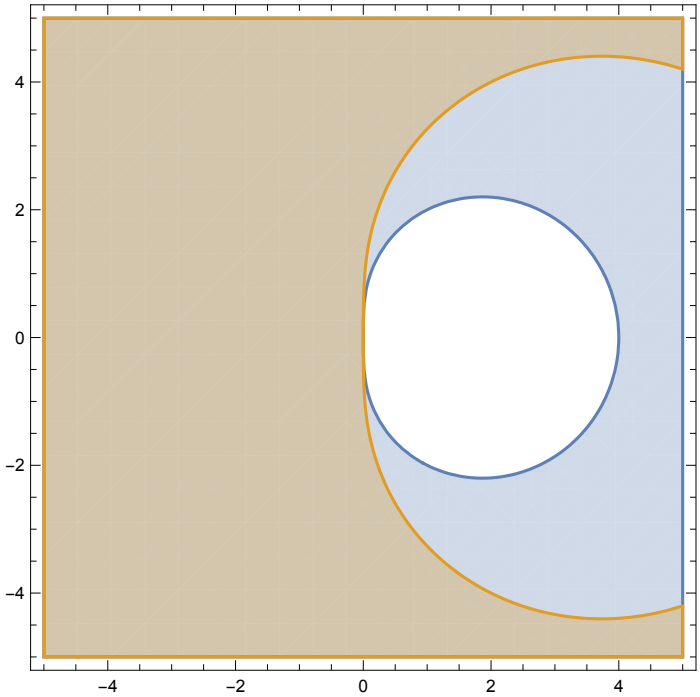

van der Pol
Globális hiba maximum normában mérve
10^{0}
10^{-1}
10^{-2}
10^{-3}
10^{-4}
10^{-5}
10^{-6}
10^{-7}
10^{-8}
10^{3}
Rácspontok száma

A konvergencia azonban nem minden.
Célszerű vizsgálni az abszolút stabilitási tartományt is (=lineáris stabilitás): a komplex sík azon $z = h\,\lambda$ pontjai, melyekre igaz, hogy a h lépésközű módszert az $f(t, y) = \lambda\, y$ jobboldalú tesztegyenletre alkalmazva a kapott rekurzió korlátos.

Miért fontos az abszolút stabilitási tartomány? Mert iránymutatást ad a h lépésköz praktikus megválasztását illetően – az absztrakt konvergenciaeredmények ugyanis csak a $h \to 0$ esetben érvényesek, és a szimulációkban a lépésköz mindig egy konkrét érték.

A BDF2+GRE abszolút stabilitási tartománya egyszerűen meghatározható.

Ez a módszer A-stabil ⟺ a bal komplex félsíkot tartalmazza ⇒
merev KDE-rendszerek esetén jól alkalmazható **és** 3-adrendben konvergens!
Megjegyzés. Dahlquist: ∄ 3-adrendben konvergens A-stabil LMM



Mi a helyzet az LMM+LRE kombinációval?

Példa: BDF2+LRE
input: $\left(y_n, y_{n+1}, w_{n+\frac{1}{2}}\right)$, output: $\left(y_{n+1}, y_{n+2}, w_{n+1+\frac{1}{2}}\right)$
az alábbi képletek alapján (csatolt nemlineáris rekurziók)

$$z_{n+2} - \frac{4}{3} y_{n+1} + \frac{1}{3} y_n = \frac{2}{3} h f(t_{n+2}, z_{n+2})$$

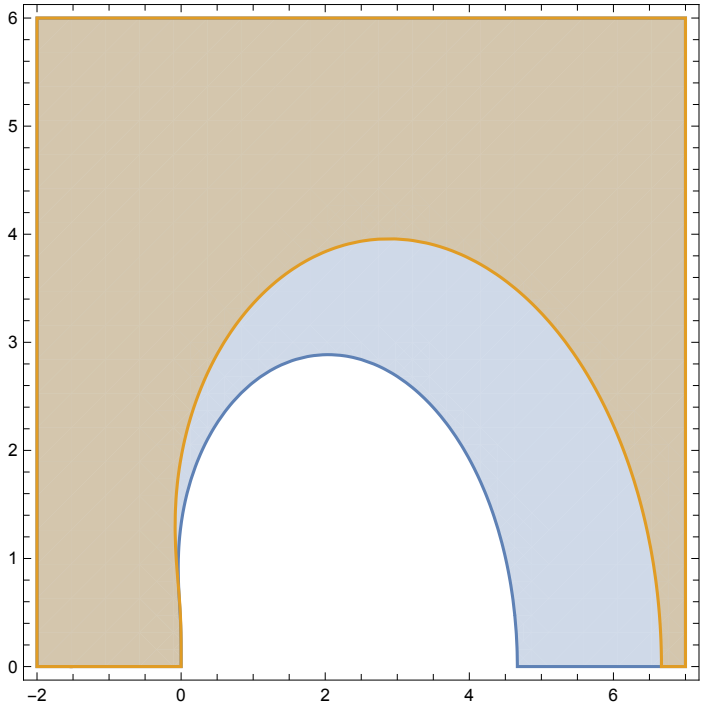
$$w_{n+\frac{3}{2}} - \frac{4}{3} y_{n+1} + \frac{1}{3} w_{n+\frac{1}{2}} = \frac{2}{3} \cdot \frac{h}{2} \cdot f(t_{n+\frac{3}{2}}, w_{n+\frac{3}{2}})$$

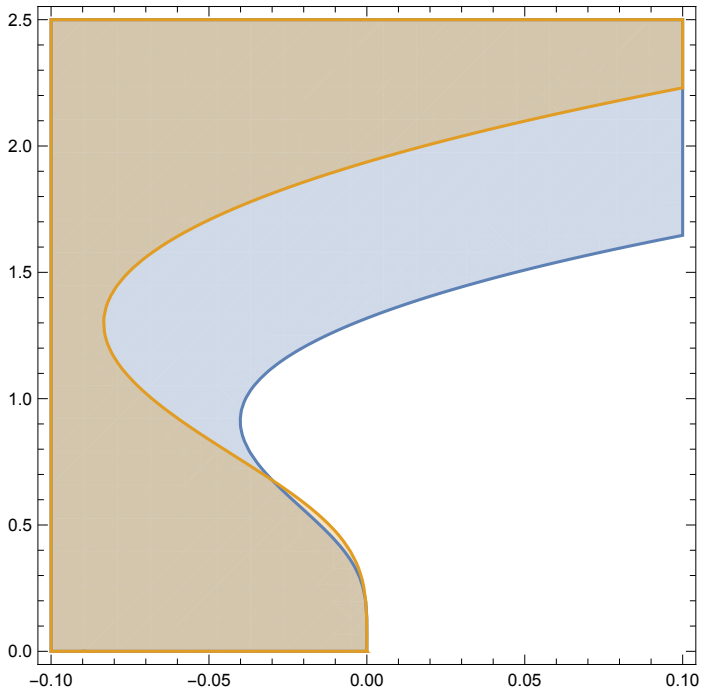
$$w_{n+2} - \frac{4}{3} w_{n+\frac{3}{2}} + \frac{1}{3} y_{n+1} = \frac{2}{3} \cdot \frac{h}{2} \cdot f(t_{n+2}, w_{n+2}),$$

— itt tehát a z-sorozat egy h-rács mentén fut, míg a w-sorozat egy $\frac{h}{2}$-rács pontjaiban –
majd

$$y_{n+2} := \frac{4}{3} w_{n+2} - \frac{1}{3} z_{n+2}$$

A BDF2+LRE-módszer abszolút stabilitási tartománya (kék) vs. BDF3 (sárga):
a kék tartomány “nagyobb”





Mi dönti el, hogy egy pontot beszínezünk-e vagy sem?
Az, hogy egy paraméteres harmadfokú polinom mindhárom gyöke a komplex egységkörben van-e
⇐ Schur–Cohn-redukció

Mi a helyzet a konvergenciával?
A BDF2+LRE-módszer nem tűnik se RK-módszernek, se LMM-nek.

Lineáris tesztfeladaton 3-adrendű a konvergenciája.

Friss megközelítés: a BDF2+LRE felfogható egy GLM-ként (general linear method).
A GLM az RK és az LMM-család közös általánosítása.

$$Y_i = \sum_{j=1}^{s} a_{ij} h F_j + \sum_{j=1}^{r} u_{ij} y_j^{[n-1]}, \quad i = 1, 2, \ldots, s,$$
$$y_i^{[n]} = \sum_{j=1}^{s} b_{ij} h F_j + \sum_{j=1}^{r} v_{ij} y_j^{[n-1]}, \quad i = 1, 2, \ldots, r.$$

Mi határoz meg egy GLM-et? Az (*A*, *U*, *B*, *V*) mátrixnégyes

A példánkban:

$$A = \begin{pmatrix} \frac{2}{3} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{3} & 0 \\ 0 & \frac{4}{9} & \frac{1}{3} \end{pmatrix}$$

$$U = \begin{pmatrix} -\frac{1}{3} & \frac{4}{3} & 0 \\ 0 & \frac{4}{3} & -\frac{1}{3} \\ 0 & \frac{13}{9} & -\frac{4}{9} \end{pmatrix}$$

$$B = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ -\frac{2}{9} & \frac{16}{27} & \frac{4}{9} \\ 0 & \frac{1}{3} & 0 \end{pmatrix}$$

$$V = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ \frac{1}{9} & \frac{40}{27} & -\frac{16}{27} \\ 0 & \frac{4}{3} & -\frac{1}{3} \end{pmatrix}$$

Ebből belátható, hogy a BDF2+LRE-módszer
prekonzisztens, konzisztens, lépcső-konzisztens és szigorúan 0-stabil ⇒ konvergens

Hányadrendben konvergens? J. C. Butcher által kifejlesztett kombinatorikus-algebrai jellemzés