

○
Tudnivalók:

tan 2010/10/03

- 2 ZH
- Házi feladatok: pontverseny, az első 5-10 "jól jár"
- lesznek numerikus feladatok (OCTAVE)
- időpontok

Hétfő 10:00 -

Lukács A.

Kémia 058 (Ruff)

Csüt.

Nemes F.

Kémia 317

Első gyakorlat: matematikai ismeretek felfrissítése

Σ, Π : szumma (összeg) és produktum (szorzat)

• számsorozat: a_i ($i = 1, 2, \dots$)

azaz: a_1, a_2, a_3, \dots

összeg:

$$\sum_{i=1}^n a_i = a_1 + a_2 + a_3 + \dots + a_n = \sum_{i=1}^k a_k$$

az összegző index "átnevezhető"

szorzat:

$$\prod_{i=1}^n a_i = a_1 \cdot a_2 \cdot \dots \cdot a_n = \prod_{k=1}^n a_k$$

• 1. példa: binomiális tétel

$$(a+b)^n = \sum_{i=0}^n a^i b^{n-i} \binom{n}{i} =$$

$$= b^n + \binom{n}{1} a^1 b^{n-1} + \dots + \binom{n}{n-1} a^{n-1} b + a^n$$

$\binom{n}{k}$ definíciója: n körül k kiválasztása

$$(a+b)^n = \underbrace{(a+b)}_1 \cdot \underbrace{(a+b)}_2 \cdot \dots \cdot \underbrace{(a+b)}_n$$

$a^i b^{n-i}$: hányféleképpen választhatunk

n -ből i -helyen "a"-t (és a maradék

$n-i$ helyen b -t) \rightarrow Pascal Δ

2. Példa: számtani sorozat: $a_k = a + k \cdot b$

$$\sum_{k=1}^n a_k = n \cdot a + b \sum_{k=1}^n k$$

$$\sum_{k=1}^n k = 1 + 2 + \dots + (n-1) + n = \frac{n(n+1)}{2}$$

$(n+1)$ a összeg

3. Példa: Taylor-sor ha f f_0 x_0 -ban analitikus

$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x-x_0) + \frac{1}{2!} f''(x_0)(x-x_0)^2 + \dots$$

$$= \sum_{i=0}^{\infty} \frac{1}{i!} f^{(i)}(x_0)(x-x_0)^i$$

Deriváltak, Taylor-sorok

4. hatványfüggvény $f(x) = x^n$

$f'(x) = ?$

$$f'(x) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$

$$f(x+h) = (x+h)^n = x^n + nx^{n-1}h + \dots h^2 + \dots$$

$$\frac{f(x+h) - f(x)}{h} = nx^{n-1} + \dots h + \dots h^2 + \dots$$

határérték:

$$f'(x) = nx^{n-1}$$

$$(x^n)' = nx^{n-1}$$

exponenciális függvény:

$$f(x) = e^x = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} x^k \quad (\text{ca a definíció})$$

$$f'(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{k x^{k-1}}{k!} = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{x^{k-1}}{(k-1)!} = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{x^i}{i!} = e^x$$

$k=0$ -ra $a=0$ u.i. $k! = k(k-1)!$

hatványfü: $(x^\alpha)' = \alpha x^{\alpha-1}$

$$(1+x)^\alpha = 1 + \alpha 1^{\alpha-1} x + \frac{1}{2!} \alpha(\alpha-1) x^2 + \dots$$
$$= 1 + \alpha x + \frac{\alpha(\alpha-1)}{1 \cdot 2} x^2 + \dots$$

általános tag:

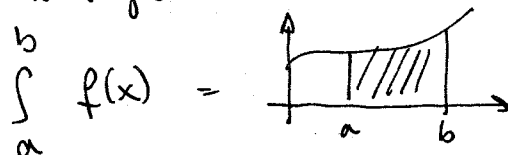
$$\frac{\alpha(\alpha-1) \cdot \dots \cdot (\alpha-k+1)}{\underbrace{1 \cdot 2 \cdot \dots \cdot k}_{k!}} x^k$$

magyon hasznos $\binom{n}{k}$ -hoz: $\frac{n(n-1) \dots (n-k+1)}{1 \cdot 2 \cdot \dots \cdot k}$

integrálás határozatlan integrál: "antiderivált"

$$F(x) = \int f(x) dx \quad \text{ha} \quad F'(x) = f(x)$$

határozott integrál:

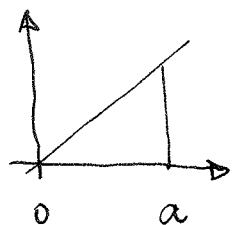


Newton-Leibniz-tétel

$$\int_a^b f(x) dx = F(b) - F(a)$$

ha $F'(x) = f(x)$

példa:



$$f(x) = \alpha x \rightarrow F(x) = \frac{\alpha}{2} x^2$$

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{\alpha}{2} b^2$$

hasonlóan $f(x) = x^n \rightarrow F(x) = \frac{1}{n+1} x^{n+1}$

$f(x) = e^x \rightarrow F(x) = e^x$

a gyakorlati feladatok megoldásában lesz sok integrál
 → érdemes begyakorolni

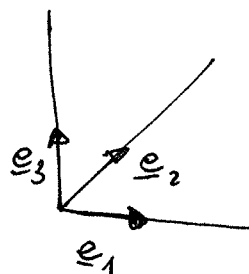
Vektorok

$\underline{a}, \underline{b}, \dots$

\underline{a} vektor kifejtése bázisban:

$$\underline{a} = \sum_{i=1}^3 a_i \underline{e}_i$$

$$|\underline{e}_i| = 1$$



Pitagorasz-tétel:

$$|\underline{a}| = \sqrt{\sum_{i=1}^n a_i^2} = \sqrt{a_1^2 + a_2^2 + a_3^2}$$

skalárszorzat:

$$\underline{a} \cdot \underline{b} = \sum_{i=1}^3 a_i \underline{e}_i \cdot \sum_{k=1}^3 b_k \underline{e}_k = \sum_{i,k=1}^3 a_i b_k \underbrace{\underline{e}_i \cdot \underline{e}_k}_{\delta_{ik}}$$

$$= \sum_{i=1}^3 a_i b_i$$

$$\delta_{ik} = \begin{cases} 1 & \text{ha } i=k \\ 0 & \text{egyébként} \end{cases}$$

$$\underline{a} \times \underline{b} = \sum_{i,k=1}^3 a_i b_k \underline{e}_i \times \underline{e}_k = \sum_{i,k=1}^3 a_i b_k \varepsilon_{ikl} \underline{e}_l$$

$$\underline{e}_i \times \underline{e}_k = \sum_{l=1}^3 \varepsilon_{ikl} \underline{e}_l$$

2 fontos tétel:

$$(\underline{a} \times \underline{b}) \times \underline{c} = \underline{b}(\underline{a} \cdot \underline{c}) - \underline{a}(\underline{b} \cdot \underline{c})$$

$$\varepsilon_{ijk} \varepsilon_{irs} = \delta_{kr} \delta_{js} - \delta_{ks} \delta_{jr}$$

$$(\underline{a} \times \underline{b}) \cdot \underline{c} = \underline{a} \cdot (\underline{b} \times \underline{c}) = \underline{b} \cdot (\underline{c} \times \underline{a})$$

Vektorok és mátrixok

sor-ostlop sorolás

spec. 2D: sík lineáris, az origót fixen hagyó

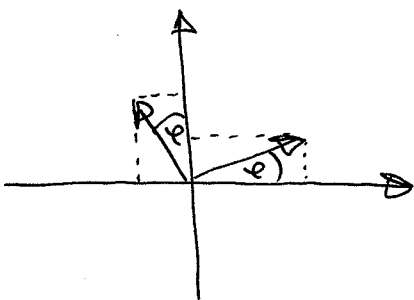
leképezései:

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} ax + by \\ cx + dy \end{pmatrix}$$

egységvektorok képei

$$\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \\ c \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b \\ d \end{pmatrix}$$

→ kitalálhatjuk egy forgatás mátrixát



$$R(\varphi) = \begin{pmatrix} \cos \varphi & -\sin \varphi \\ \sin \varphi & \cos \varphi \end{pmatrix}$$

HF

$$R(\varphi)^T R(\varphi) = \underline{I}$$

$$R(\varphi) R(\vartheta) = R(\varphi + \vartheta)$$

Vektor - integrálképletek

○ Vektoranalízis alapfogalmai

$$\underline{\nabla} = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right) \leftrightarrow \partial_i = \frac{\partial}{\partial x_i} \quad i = 1, 2, 3$$

$$x_1 = x, \quad x_2 = y, \quad x_3 = z$$

Gradiens: skálárból vektort

○ $\text{grad } \varphi = \nabla \varphi = \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x}, \frac{\partial \varphi}{\partial y}, \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right)$ gradienstvektor.

$\varphi = \varphi(x, y, z)$ skálár fu.

$\partial_i \varphi$

$$\nabla \varphi = \sum_{i=1}^n \frac{\partial \varphi}{\partial x_i} \underline{e}_i$$

Divergencia: vektorból skálárt

$$\text{div } \underline{v} = \nabla \cdot \underline{v} = \frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} + \frac{\partial v_z}{\partial z} = \partial_i v_i$$

$$\left(= \sum_{i=1}^n \frac{\partial v_i}{\partial x_i} \right)$$

Rotáció

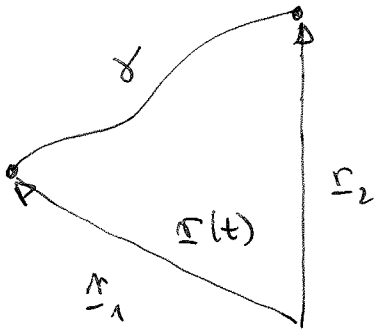
$$\text{rot } \underline{v} = \nabla \times \underline{v} = \begin{pmatrix} \partial_y v_z - \partial_z v_y \\ \partial_z v_x - \partial_x v_z \\ \partial_x v_y - \partial_y v_x \end{pmatrix}$$

Eikelt $\partial_k v_l$

$$\nabla \times \underline{v} = \sum_{i < j < k} \text{Eikelt } \partial_k v_l \underline{e}_i$$

Mi a jelentőségük?

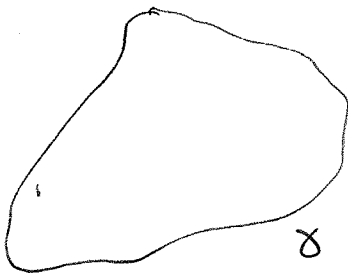
Integráltételek



$$\int_{\gamma} \nabla \varphi \, d\mathbf{r} = \varphi(\mathbf{r}_2) - \varphi(\mathbf{r}_1)$$

\Rightarrow gradiens integrálja csak a végponttól függ

Stokes - tétel



$$\oint_{\gamma} \underline{\mathbf{v}} \, d\mathbf{r} = \int_F \text{rot } \underline{\mathbf{v}} \, d\mathbf{A}$$

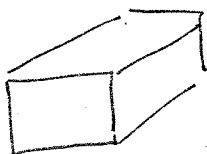
ahol F tetszőleges olyan felület, amelynek határa γ

Tétel: $\text{rot grad } \varphi = 0$

Mj: ha a tartomány olyan, hogy benne minden görve ponton húzható, akkor ott

fordítva is igaz: $\text{rot } \underline{\mathbf{v}} = 0 \Rightarrow \exists \varphi: \underline{\mathbf{v}} = \text{grad } \varphi$

Gauss - tétel



$$\oint_F \underline{\mathbf{v}} \, d\mathbf{A} = \int_V \text{div } \underline{\mathbf{v}} \, dV$$

ahol F felület a V térfogat határa

Differenciálegyenletek

5

elsőrendű $\dot{x} = f(x)$

másodrendű: $\ddot{x} = f(x, \dot{x})$

elsőrendű differenciálegyenlet korlátos megoldása:

$$t_b < t < t_w$$

→ felosztás $t_b = t_0, t_1, t_2, \dots, t_n = t_w$

$$x_{i+1} = x_i + f(x_i) \Delta t \quad \Delta t = \frac{t_b - t_w}{n}$$

"Euler módszer"

másodrendű egyenlet visszaírható elsőrendű egyenletre

$$\dot{x} = v$$

$$\dot{v} = f(x, v)$$

ilyen a mozgásegyenlet

Néhány analitikusan megoldható egyenlet

a) szétválasztható változójú

$$\dot{x} = f(x)$$

$$\frac{\dot{x}}{f(x)} = 1$$

$$\dot{x} = \frac{dx}{dt}$$

$$\frac{dx}{f(x)} = dt$$

$$\int \frac{dx}{f(x)} = t - t_0$$

b) lineáris egyenlet

$$\ddot{x} = -kx$$

próbafüggvény $f(t) = e^{i\omega t}$

$$\dot{f}(t) = i\lambda e^{i\omega t}$$

$$\ddot{f}(t) = -\lambda^2 e^{i\omega t}$$

$$-\omega^2 e^{i\omega t} = -kx$$

$$\omega^2 = k$$

$$\omega = \pm\sqrt{k}$$

általános megoldás: $Ae^{i\omega t} + Be^{-i\omega t}$

választhatunk két másikként lineárisan független megoldást

$$\cos(\omega t) = \frac{e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}}{2}$$

$$\sin(\omega t) = \frac{e^{i\omega t} - e^{-i\omega t}}{2i}$$

kezdeti feltételekhez való illesztés:

$$x(t) = C \cos(\omega t) + S \sin(\omega t)$$

$$\dot{x}(t) = -C\omega \sin(\omega t) + S\omega \cos(\omega t)$$

$$x(0) = C$$

$$\dot{x}(0) = S\omega$$

$$x(t) = x_0 \cos(\omega t) + \frac{v_0}{\omega} \sin(\omega t)$$