A MÁTRIX-EXPONENCIÁLIS NUMERIKUS MEGHATÁROZÁSA ÉS BIOLÓGIAI ALKALMAZÁSA

Egyetemi doktori értekezés

ELLER JÓZSEF

Szeged, 1982

TARTALOMJEGYZÉK

1. Bevezetés 1

1.1. A probléma felvetése 3

1.2. Jelölések és elméleti alapok 7

2. Perturbáció-analizis 23

2.1. Perturbációs korlátok a mátrix-exponenciálisra . 24

2.2. A mátrix-exponenciális lokális érzékenységének jellemzése: az exponenciális kondiciós szám . . 40

2.3. Perturbációs korlátok a mátrix-exponenciális parciális deriváltjaira 48

3. Eljárások a mátrix-exponenciális kiszámitására 51

3.1. Taylor-sor és négyzetelés módszere 52

3.2. Spektrálfelbontás módszere 62

3.3. Minimálpolinom-módszer 66

4. Eljárások a mátrix-exponenciális paraméterek szerinti parciális deriváltjainak kiszámitására . . . 82

4.1. Taylor-sor és négyzetelés módszere 82

4.2. Spektrálfelbontás módszere 85

4.3. Minimálpolinom-módszer 89

5. Alkalmazás a biológiai rekesz-/kompartment-/ rendszerek modellezésében 93

5.1. A biológiai kompartment-analizis alapjai 94

5.2. Nemlineáris paraméterbecslési módszerek 105

5.3. Mátrix-exponenciális módszerek kompartment-rendszerre történő alkalmazásának speciális szempontjai 113

5.4. Példa a minimálpolinom-módszer alkalmazására . . 126

Irodalomjegyzék 129

MELLÉKLET

A minimálpolinom-módszer Fortran nyelvü programja I

M.1. A Krülov-módszer szubrutinjai I

M.2. A Kammler-módszer szubrutinja IX

M.3. ETAB: szubrutin exp(tA)b számolására XI

M.4. GRETAB: szubrutin exp(tA)b paraméterek szerinti parciális deriváltjainak számitására XIII

M.5. A tesztadatokon való futtatás leirása és eredményei XVI

1. BEVEZETÉS

Az értekezés tárgya $\exp(tA)$ /ill. $\exp(tA)\underline{b}$ /, valamint ennek az A mátrix valamely paramétere szerinti parciális deriváltja kiszámitására vonatkozó numerikus eljárások megadása ill. elemzése, ahol $\exp(tA)$ a jólismert hatványsorral definiált mátrix-exponenciális függvény. Foglalkozunk még ezen eljárásoknak az un. biológiai kompartment-rendszerekre való alkalmazásának kérdésével is.

Az értekezés felosztása a következő. Jelen első fejezet tartalmazza a problémafelvetést és az előzményeket, továbbá a jelöléseket és a gyakrabban használt elméleti eredményeket.

A második fejezetben a mátrix-exponenciálisnak és parciális deriváltjainak kis perturbációkra vonatkozó érzékenységét vizsgáljuk, melynek fontos szerepe van az egyes algoritmusok megitélése szempontjából. Itt egyrészt élesitjük az irodalomban található perturbációs korlátokat a mátrix-exponenciálisra vonatkozóan, másrészt az $\exp(tA)\underline{b}$ vektorra ill. $\exp(tA)$ paraméter szerinti deriváltjára is megadunk abszolut és relativ perturbációs korlátokat. Ezenkivül ez a fejezet a mátrix-exponenciálissal kapcsolatos kondiciós számokról is tartalmaz néhány uj eredményt.

A harmadik fejezetben három módszert irunk le, melyek részben $\exp(tA)$, részben $\exp(tA)\underline{b}$ kiszámitására alkalmasak. Mindhárom eljárást elemezzük hatékonyság, ill. pontosság szempontjából, rámutatva azok kényes pontjaira és alkalmazhatóságuk korlátaira. A négyzeteléssel kombinált Taylor-sor

módszerrel kapcsolatban bevezetjük egy mátrix hatványozásra vonatkozó kondiciós számát, amely lokálisan jellemzi az öröklött relativ hiba terjedését a mátrixhatványozás ill. négyzetelés során, és rámutatunk ennek kapcsolatára a Van Loan által bevezetett exponenciális kondiciós számmal. A spektrálfelbontás módszerénél a kerekitési hibák hatásának elemzésével alátámasztunk egy, az irodalomban bizonyitás nélkül közölt állitást a módszer pontosságával kapcsolatban. A harmadik eljárás, a minimálpolinom-módszer, általunk kidolgozott módszer, mely egy ismert alapötlet továbbfejlesztésére épül, és elsősorban $\exp(tA)\underline{b}$ kiszámitására alkalmas.

A negyedik fejezetben megadjuk a megelőző fejezet módszereinek kiterjesztését a mátrix-exponenciális paraméterek szerinti parciális deriváltjaira. Ezek közül a minimálpolinom-módszer továbbfejlesztése, valamint a spektrálfelbontási módszer kiterjesztése a második parciális deriváltakra saját eredményünk.

Az ötödik fejezetben először bemutatjuk a biológiai kompartment-/rekesz-/rendszerek analizisének alapproblémáit és módszereit /modell-egyenletek, identifikálhatóság, paraméterbecslés/, és megvizsgáljuk e rendszerek mátrixainak, az un. kompartment-mátrixoknak a spektrális és egyéb tulajdonságait. Itt néhány uj eredményt is bebizonyitunk a kompartment-mátrixokkal kapcsolatban. Ezután megvizsgáljuk az előző fejezetekben ismertetett módszerek kompartment-rendszerekre való alkalmazásának célszerü módjait, és megmutatjuk, hogy bizonyos esetekben egyes módszerek kompartment-mátrixra numerikusan igen stabilak. Igy például bebizonyitjuk, hogy

szinguláris kompartment-mátrixok exponenciálisának hatványozásra vonatkozó kondiciós száma ℓ_1-norma esetén mindig optimális. A fejezet végén egy számpéldán bemutatjuk a minimálpolinom-módszer alkalmazását kompartment-rendszerre.

Végül egy mellékletbem megadjuk a minimálpolinom-módszer Fortran nyelvü implementációjának leirását, valamint a program moduljainak és a futtatási eredményeknek a számitógépes listáját.

1.1. A probléma felvetése

A mérnöki tervezéstől az orvosbiológiai kutatásig a matematika számos alkalmazási területén merül fel az

$$\dot{\underline{x}} = A\,\underline{x} \quad , \quad \underline{x}(0) = \underline{b} \qquad /1.1.1./$$

lineáris állandóegyütthatós differenciálegyenletrendszer numerikus megoldásának igénye, ahol $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ valós mátrix és $\underline{b} \in \mathbb{R}^n$ valós vektor. E kezdetiérték-probléma megoldása formálisan az

$$\underline{x} = \exp(tA)\,\underline{b} \qquad /1.1.2./$$

alakban adható meg, ahol a mátrix-exponenciális, $\exp(tA)$ /melyet a későbbiekben néha e^{tA} alakban is irunk/, a mindig konvergens

$$\exp(tA) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{t^k}{k!} A^k \qquad /1.1.3./$$

mátrix-hatványsorral definiált.

A mátrix-exponenciális numerikus meghatározása iránt a

hatvanas évek vége óta egyre fokozódik az érdeklődés, és mérnöki folyóiratokban /pl. Proc. IEEE egy IEEE Trans. Aut. Control/ igen sok cikk jelent meg, melyek $\exp(tA)$ különféle előállitásait javasolták számitás céljára. E cikkek legtöbbjében a számitógép véges pontosságából adódó kerekitési hibákat - melyek $\exp(tA)$ számitásakor általában a legtöbb problémát okozzák a pontosság szempontjából [38] - teljesen figyelmen kivül hagyták. Az emlitett módszerek kritikus áttekintését adja Moler és Van Loan összefoglaló cikke [38], amely nagy vonalakban elemzi a módszereket a kerekitési hiba terjedése és hatékonyság szempontjából.

Bár matematikailag $\exp(tA)$ és $\exp(tA)\underline{b}$ kiszámitásának problémája ekvivalens, számitástechnikai szempontból célszerü a két számitási feladatot megkülönböztetni, ugyanis bizonyos módszerek a két feladat közül /memória- és müveletigény szempontjából/ az egyikre lényegesen hatékonyabbak, mint a másikra. E különbség nem mindig jut kifejezésre Moler és Van Loan emlitett cikkében, ahol bizonyos módszerek kevésbé hatékonynak nyilvánitásakor elsősorban $\exp(tA)$ meghatározását tartották szem előtt. Az általunk vizsgált módszerek közül müveletigény szempontjából a négyzcteléssel kombinált Taylor-sor módszer $\exp(tA)$, a -minimálpolinom-módszer $\exp(tA)\underline{b}$ kiszámitására hatékonyabb, mig a spektrálfelbontás módszere egyformán hatékony mindkét feladatra.

Paraméterek szerinti parciális deriváltak számitása

Egy másik számitási feladat, amely szintén sokszor fel-

merül a gyakorlatban, az /1.1.1/ kezdetiérték-probléma megoldásának az A mátrix bizonyos paraméterei szerinti parciális deriváltjainak kiszámitása. Tegyük fel, hogy A függ bizonyos paraméterektől és jelölje θ ezek bármelyikét /a további paraméterektől való függéstől pillanatnyilag eltekinthetünk/. Ekkor

$$A = A(\theta) \quad \text{és} \qquad \underline{x} = \underline{x}(t,\theta) \qquad /1.1.4/$$

és feladatunk

$$\underline{z} = \underline{z}(t,\theta) := \frac{\partial \underline{x}(t,\theta)}{\partial \theta} = \frac{\partial e^{tA(\theta)}}{\partial \theta} \qquad /1.1.5/$$

számitása a paraméter valamely rögzitett $\theta = \theta_0$ értéke mellett /az /1.1.5/ képletben a parciális deriválás komponensenként értendő/.

Az /1.1.5/ szerint definiált $\underline{z}(.)$ függvényt az $\underline{x}(.)$ függvény θ paraméteréhez tartozó <u>érzékenységi függvényének</u> nevezzük; ez bizonyos simasági feltételek esetén /melyek a gyakorlatban szinte mindig teljesülnek/ kielégiti az /1.1.1/ rendszerhez kapcsolódó

$$\dot{\underline{z}} = \frac{\partial A}{\partial \theta}\,\underline{x} + A\,\underline{z}\ , \quad \underline{z}(0) = \underline{0} \qquad /1.1.6/$$

un. <u>érzékenységi /variációs/ egyenletet</u>. Hasonlóképpen, a teljes mátrix-exponenciális parciális deriváltja, $Z = Z(t,\theta) := (\partial/\partial\theta)\exp(tA(\theta))$ kielégiti a

$$\dot{Z} = \frac{\partial A}{\partial \theta}\cdot e^{tA} + A\,Z\ , \quad Z(0) = O \qquad /1.1.7/$$

lineáris inhomogén mátrix-differenciálegyenletet.

Az érzékenységi függvény elnevezés abból ered, hogy $\underline{z}$ első rendben jellemzi $\underline{x}$ érzékenységét a θ paraméter egy rögzitett θ_0 körüli kis megváltozására vonatkozólag, a következő összefüggés szerint:

$$\underline{x}(t,\theta) - \underline{x}(t,\theta_0) = \underline{z}(t,\theta_0)\cdot(\theta-\theta_0) + o(\theta-\theta_0)$$

E szemléletes jelentésén kivül az érzékenységi függvény egy fontos alkalmazási területe az /1.1.1/ lineáris rendszerben szereplő A mátrix /általában egynél több/ paraméterei "legvalószinübb" értékeinek becslése gradiens-tipusu iterációs módszerrel /[2], 226.o./, mérési adatokhoz való illesztés utján. Ilyenkor az iteráció minden lépésében kiszámitandók az illesztendő függvény parciális deriváltjai, amelyhez viszont szükség van $\underline{x}$ paraméterek szerinti parciális deriváltjai kiszámitására. A paraméterbecslés problémájáról az 5. fejezetben, a kompartment-analizissel kapcsolatban ejtünk több szót.

Az érzékenységi egyenletek speciális szerkezete a numerikus megoldásnál lényegesen kihasználható. Az /1.1.1/ megoldására ill. $\exp(tA)$ kiszámitására kidolgozott módszerek továbbfejleszthetők a megfelelő parciális deriváltak kiszámitására vonatkozólag. Szemben a mátrix-exponenciális kiszámitásával foglalkozó publikációk nagy tömegével, a paraméterek szerinti deriváltakkal kapcsolatban viszonylag kevés cikk található, melyek nagyrészt a Taylor-soron ill. a spektrálfelbontáson alapuló módszereket irják le. Ezenkivül időfüggő lineáris differenciálegyenlet-rendszer esetére lineáris többlépéses numerikus integrálási módszert is javasoltak [36], amely azonban állandó együtthatós esetben kevésbé hatékony, mint más módszerek, elsősorban nagyobb müveletigénye miatt.

1.2. Jelölések és elméleti alapok

E pontban megadjuk a használt jelölés- és fogalomrendszert, valamint az ezzel kapcsolatos gyakrabban alkalmazott elméleti alapösszefüggéseket.

Jelölésjegyzék

Logikai és egyéb jelek:

$\forall$, $\exists$ - univerzális és egzisztenciális kvantor

$\Leftrightarrow$, $\Rightarrow$ - logikai ekvivalencia és implikáció

$\{\ \}$, $\in$ - halmaz és tartalmazás jele

$A \times B$ - az A és B halmaz Descartes-szorzata

$:=$ - definiáló egyenlőség

$\square$ - bizonyitás vége

Valós és komplex számok és függvények:

$\mathbb{R}$, $\mathbb{C}$ - valós ill. komplex számok halmaza

(a,b), $[a,b]$, $(a,b]$, $[a,b)$ - nyitott, zárt, balról nyitott ill. jobbról nyitott intervallum $\mathbb{R}$-ben

δ_{ij} - Kronecker-delta

$\operatorname{sgn}(.)$ - előjel-függvény /ha $x \in \mathbb{R}$ és $x<0$, $x=0$, $x>0$ akkor $\operatorname{sgn}(x)$ értéke rendre -1, 0, 1/

$|c|$ - a c valós vagy komplex szám abszolut értéke

$\bar{c}$, $\operatorname{Re} c$, $\operatorname{Im} c$ - a c komplex szám konjugáltja, valós része, ill. képzetes része

i - képzetes egység

$f(.): X \to Y$ - X-en értelmezett, Y-ba képező függvény

$\|.\|$ - norma

$\sigma(.)$ - kis ordó függvény. Ha $f(.): X \to Y$ és $g(.): X \to \mathbb{C}$

ahol X és Y normált terek, akkor

$$f(x)=o(g(x)),\ x\to a \iff \lim_{x\to a} \|f(x)\|/|g(x)| = 0$$

$O(.)$ - nagy ordó függvény. Az előző jelölések mellett

$$f(x)=O(g(x)),\ x\to a \iff \exists \delta>0\ \exists K\ \ \forall x\in X$$
$$\|x-a\|\le\delta \Rightarrow \|f(x)\| \le K|g(x)|$$

$$f(x)=O(g(x)) \iff \exists K\ \forall x\in X\ \ \|f(x)\|\le K|g(x)|$$

$\dot{f}(.)$, $(d/dt)f(.)$ - valós argumentum /általában "időparamé-ter", t vagy s/ szerinti deriváltfüggvény

$f^{(k)}(.)$, $(d/dt)^k f(.)$ - az $f(.)$ skaláris argumentumu függvény k-adik differenciálhányadosa /$k\ge 0$, egész/

$\frac{\partial f(.)}{\partial\theta}$, $(\partial/\partial\theta)f(.)$ - az $f(.)$ többváltozós függvény θ paramé-tere/változója/ szerinti parciális deriváltja

$[x_1,\dots,x_n]f(.)$ - az $f(.)$ valós vagy komplex változós függvény $x_1,\dots,x_n$ /nem feltétlenül különböző/ pontokhoz tartozó $(n-1)$-edrendü osztott diffe-renciája.

Vektorok és mátrixok:

$\mathbb{R}^n$, $\mathbb{C}^n$ - valós ill. komplex -elemü /oszlop/vektorok halmaza

$\mathbb{R}_+^n$ - $\mathbb{R}^n$ nemnegativ elemü vektorainak halmaza

$\underline{x}=(x_i)_n=[x_1,\dots,x_n]^T$ - n-elemü /valós vagy komplex/ oszlop vektor, melynek i-edik eleme x_i

$\underline{0}=(0)_n$ - n-elemü nullvektor

$\underline{1}=(1)_n$ - csupa egyesből álló un. összegző vektor

$\underline{e}_j=(\delta_{ij})_n$ - a j-edik n-elemü /természetes/ egységvektor

$\underline{x}^T=[x_1,\dots,x_n]$ - az $\underline{x}=(x_i)_n$ oszlopvektor transzponáltja; sorvektor

$\underline{x}^H = [\bar{x}_1, \dots, \bar{x}_n]$ - az $\underline{x} = (x_i)_n$ oszlopvektor Hermite-transzponáltja; sorvektor

$\|\underline{x}\|$ - az $\underline{x}$ vektor valamely normája

$\underline{x}(.) = (x_i(.))_n$ - vektorértékű $\mathbb{R}^n$-be vagy $\mathbb{C}^n$-be képező függvény

$\underline{x} \leq \underline{y}$ $(\underline{x} < \underline{y})$ - $\forall i$: $x_i \leq y_i$ $(x_i < y_i)$

$\mathbb{R}^{m\times n}$, $\mathbb{C}^{m\times n}$ - valós ill. komplex $m\times n$-es mátrixok halmaza

$A = (a_{ij})_{m\times n} = [\underline{a}_1, \dots, \underline{a}_n] = \begin{bmatrix} \underline{b}_1^T \\ \vdots \\ \underline{b}_m^T \end{bmatrix}$ - A valós vagy komplex $m\times n$-es mátrix, melynek (i,j) indexü eleme a_{ij}, j-edik oszlopa $\underline{a}_j = (a_{ij})_m$, i-edik sora pedig $\underline{b}_i^T = [a_{i1}, \dots, a_{in}]$

$O = (0)_{m\times n}$ - $m\times n$-es nullmátrix

$I = (\delta_{ij})_{n\times n}$ - $n\times n$-es egységmátrix

A^T, A^H - az A mátrix transzponáltja és Hermite-transzponáltja

$\|A\|$ - az A mátrix normája

$\mu(A)$ - az A mátrix logaritmikus normája

$\lambda(A)$, $\lambda_i(A)$ - az A mátrix tetszőleges ill. i-edik sajátértéke /valamely sorrend szerint/

$\rho(A)$ - az A mátrix spektrálsugara / $\rho(A) = \max\limits_{1\leq i\leq n} |\lambda_i(A)|$ /

$\alpha(A)$ - az A mátrix spektrális abszcisszája:

$$\alpha(A) := \max_{1\leq i\leq n} \operatorname{Re} \lambda_i(A) \qquad (A \in \mathbb{C}^{n\times n})$$

$q(A) := \mu(A) - \alpha(A)$ - az A mátrix logaritmikus inefficienciája

$tr(A)$ - az A mátrix nyoma

$det(A)$ - az A mátrix determinánsa

A^{-1} - A inverz mátrixa

$\varkappa(A)$ - az A mátrix /invertálásra vonatkozó/ kondiciós száma: $\varkappa(A) := \|A\| \cdot \|A^{-1}\|$

$e^A = \exp(A)$, $e^{tA} = \exp(tA)$ - az A négyzetes mátrix exponenciálisa, "mátrix-exponenciális"

$\nu(A,t)$ - az A négyzetes mátrix exponenciális kondiciós száma a t helyen

$\mathfrak{J}_m(\lambda)$ - m-edrendü λ sajátértékü /felső/ Jordan-mátrix; $\mathfrak{J}_m(\lambda) := (\lambda\delta_{ij} + \delta_{i,j+1})_{m\times m}$

$A \leq B$ $(A<B)$ - $\forall i \forall j : a_{ij} \leq b_{ij}$ $(a_{ij} < b_{ij})$, ahol A és B azonos méretü valós mátrixok

$X(.) = (x_{ij}(.))_{m\times n}$ - mátrixértékü, $\mathbb{R}^{m\times n}$-be vagy $\mathbb{C}^{m\times n}$-be képező függvény

Megállapodás. A d/dt, $\partial/\partial\theta$ és egyéb differenciáloperátorok és az integrál vektor- vagy mátrixértékü függvényekre való alkalmazása mindig elemenként értendő.

Mátrixok particionálása:

$$A = (a_{ij})_{m\times n} = \begin{bmatrix} A_{11} & \dots & A_{1\nu} \\ \vdots & & \vdots \\ A_{\mu 1} & \dots & A_{\mu\nu} \end{bmatrix} \qquad A_{k\ell} = \left(a_{ij}^{k\ell}\right)_{(r_{k+1}-r_k)\times(s_{\ell+1}-s_\ell)},$$
$$k = 1,\dots,\mu;\ \ell = 1,\dots,\nu;$$
$$r_1 = 0 < r_2 < \dots < r_\mu < r_{\mu+1} = m,$$
$$s_1 = 0 < s_2 < \dots < s_\nu < s_{\nu+1} = n$$

- az A mátrix particionált alakban való megadása; a particionálásban szereplő $A_{k\ell}$ mátrix $a_{ij}^{k\ell}$ eleme egybeesik az A mátrix $a_{r_k+i,\,s_\ell+j}$ elemével

$$A = A_1 \oplus \dots \oplus A_m := \begin{bmatrix} A_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & A_2 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & A_m \end{bmatrix} \qquad \left.\begin{array}{l} A_k = \left(a_{ij}^{(k)}\right)_{q_k\times q_k} \\ q_k \geq 1 \end{array}\right\} \quad k = 1,\dots,m$$

- az A $\sum_{k=1}^{m} q_k$ rendü négyzetes mátrix az $A_1,\dots,A_m$ négyzetes mátrixok direkt összege

A következő definicióban megadjuk azon mátrixosztályokat, amelyek a későbbiekben említésre kerülnek.

1.2.1. Definició. Legyen $A = (a_{ij})_{n\times n}$ /komplex/ négyzetes mátrix. Azt mondjuk, hogy

A szimmetrikus, ha $A^T = A$;

A hermitikus, ha $A^H = A$;

A ortogonális, ha $A^T A = I$;

A unitér, ha $A^H A = I$;

A normális, ha $A^H A = A A^H$;

A ferdén szimmetrikus, ha $A^T = -A$;

A permutációmátrix, ha létezik az $1,\dots,n$ számoknak egy olyan $i_1,\dots,i_n$ permutációja, hogy $A = [\underline{e}_{i_1},\dots,\underline{e}_{i_n}]$;

A diagonális, ha $A = (a_{ii}\,\delta_{ij})_{n\times n}$;

A felső trianguláris /felső háromszögmátrix/, ha $i>j$ esetén $a_{ij} = 0$;

A alsó trianguláris, ha A^T felső trianguláris;

A szigoruan felső trianguláris, ha $i\geq j$-re $a_{ij} = 0$;

A /felső/ Hessenberg-alaku, ha $i>j+1$ esetén $a_{ij} = 0$;

A kompanion- vagy Frobenius-mátrix, ha $1\leq i\leq n-1$ esetén $a_{ij} = \delta_{i+1,j}$, $j = 1,\dots,n$;

A nilpotens, ha $A^n = 0$;

A szinguláris, ha $\det(A) = 0$;

A nemnegativ /pozitiv/ elemü, ha $A\geq 0$ / $A>0$/;

A reducibilis, ha található olyan n-edrendü P permutációmátrix és olyan $B = (b_{ij})_{p\times p}$, $C = (c_{ij})_{p\times q}$, $D = (d_{ij})_{q\times q}$ mátrixok, hogy $p,q\geq 1$, $p+q = n$ és

$$P^{-1}AP = \begin{bmatrix} B & C \\ 0 & D \end{bmatrix};$$

A irreducibilis, ha nem reducibilis;

A lényegében nemnegativ, hogyha főátlón kivüli elemei mind nemnegativok;

A pozitiv /szemi-/definit, ha $A^H = A$ és $\forall i$: $\lambda_i(A) > 0$ (≥ 0);

A stabil tipusu, ha $\alpha(A) < 0$.

A mátrix sajátértékproblémája alatt sajátértékei ill. sajátvektorai meghatározásának feladatát értjük. Az alábbiakban a sajátértékproblémával kapcsolatos néhány alapvető klasszikus eredményt idézünk.

1.2.1. Schur-féle felbontási tétel /[41], 302. o./ Minden $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ mátrix unitér-hasonló egy felső háromszögmátrixhoz, azaz van olyan unitér $Q \in \mathbb{C}^{n\times n}$, felső trianguláris $R \in \mathbb{C}^{n\times n}$, hogy

$$A = Q R Q^H \qquad /1.2.1/$$

A /1.2.1/ előállitását A Schur-féle felbontásának nevezzük.

Megjegyzés. R főátlója A sajátértékeit tartalmazza, multiplicitásuknak megfelelő számban.

1.2.2. Jordan-féle kanonikus felbontási tétel /[41], 362. o./ Minden $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ mátrix hasonló Jordan-mátrixok direkt összegéhez, azaz van olyan $V \in \mathbb{C}^{n\times n}$ nemszinguláris mátrix, hogy

$$A = V \mathcal{J}_A V^{-1}, \qquad /1.2.2/$$

ahol

$$\mathcal{J}_A = \mathcal{J}_{m_1}(\lambda_1) \oplus \ldots \oplus \mathcal{J}_{m_k}(\lambda_k) \qquad /1.2.3/$$

és $m_1, \dots, m_k \geq 1, \quad \sum_{i=1}^{k} m_i = n.$

A $\mathcal{J}_A$ mátrixot A Jordan-féle kanonikus alakjának nevezzük. A $\lambda_i \ (i = 1, \dots, k)$ számok az A mátrix /nem feltétlenül különböző/ sajátértékei. A direkt összeg $\mathcal{J}_{m_i}(\lambda_i)$ mátrixait a kanonikus alak Jordan-féle blokkjainak nevezzük. A V mátrixnak a $\mathcal{J}_{m_i}(\lambda_i)$ blokk indexeihez tartozó oszlopait a λ_i sajátértékhez tartozó /jobboldali/ fővektoroknak, V^{-1} ugyanazon indexü sorainak Hermite-transzponáltjait pedig λ_i-hez tartozó baloldali fővektoroknak nevezzük. Ezek közül az első indexhez tartozó jobboldali és az utolsó indexhez tartozó baloldali fővektor rendre a λ_i sajátértékhez tartozó jobb- és baloldali sajátvektor.

1.2.2. Definició. Azt mondjuk, hogy az A mátrix λ sajátértéke defektiv, ha a $\mathcal{J}_A$ kanonikus alakban valamely λ -hoz tartozó Jordan-blokk rendje egynél nagyobb / $\exists \lambda_i = \lambda : m_i > 1$ /. Azt mondjuk, hogy az A mátrix defektiv, ha van defektiv sajátértéke; egyébként A-t nemdefektivnek vagy diagonalizálhatónak nevezzük.

1.2.3. Definició. Azt mondjuk, hogy az A mátrix derogatórius, ha Jordan-alakjában valamely többszörös sajátértékhez egynél több Jordan-blokk is tartozik; különben A nemderogatórius.

Egy mátrix karakterisztikus polinomja akkor és csak akkor esik egybe minimálpolinomjával, ha a mátrix nemderogatórius [53].

Most néhány mátrixosztály speciális spektrális tulajdonságait foglaljuk össze.

1.2.3. Tétel [41]. Ha $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ normális mátrix, akkor van olyan $Q \in \mathbb{C}^{n\times n}$ unitér és $\Lambda \in \mathbb{C}^{n\times n}$ diagonális mátrix, hogy

$$A = Q \Lambda Q^H \qquad /1.2.4/$$

Ha ezen tulmenően A hermitikus, akkor $\Lambda \in \mathbb{R}^{n\times n}$, azaz A sajátértékei valósak, és ha A még valós szimmetrikus mátrix is, akkor $Q \in \mathbb{R}^{n\times n}$ ortogonális. Ha A pozitiv szemidefinit/definit/, akkor sajátértékei nemnegativok/pozitivok/.

1.2.4. Tétel /[45], 453. o./. Legyen $A = (a_{ij})_{n\times n}$ kompanion-/Frobenius-féle/ mátrix. Akkor (i) A nemderogatórius; (ii) A karakterisztikus egyenlete: $\lambda^n - a_{nn}\lambda^{n-1} - \ldots - a_{n2}\lambda - a_{n1} = 0$.

Vektor- és mátrixnormák. Logaritmikus normák

1.2.4. Definició. A $\|.\| : \mathbb{C}^n \to [0,\infty)$ függvényt vektornormának nevezzük, ha teljesiti a következő feltételeket /"vektornormák axiómái"/:

(i) $\forall \underline{x} \in \mathbb{C}^n : \quad \|\underline{x}\| = 0 \iff \underline{x} = \underline{0}$

(ii) $\forall \underline{x} \in \mathbb{C}^n, \forall c \in \mathbb{C} : \quad \|c\underline{x}\| = |c| \cdot \|\underline{x}\|$

(iii) $\forall \underline{x}, \underline{y} \in \mathbb{C}^n : \quad \|\underline{x}+\underline{y}\| \le \|\underline{x}\| + \|\underline{y}\|$

A vektornormák axiomáiból következik, hogy egy vektornorma mindig folytonos függvény / $\|\underline{x}_n - \underline{x}\| \to 0 \Rightarrow \|\underline{x}_n\| \to \|\underline{x}\|$ /.

Amennyiben egy partikuláris normáról van szó, ugy azt alulindexezéssel jelezzük. Az alkalmazandó konkrét normák az un. ℓ_p-normák közül kerülnek ki, amelyek a következőképpen definiáltak:

$$\|\underline{x}\|_p := \left(\sum_{i=1}^{n} |x_i|^p\right)^{1/p}, \quad p \in [1,\infty)$$

$$\|\underline{x}\|_\infty := \lim_{p\to\infty} \|\underline{x}\|_p = \max_{1\le i\le n} |x_i| \qquad /1.2.5/$$

Az ℓ_p-normák közül csak a $p=1,2,\infty$ esetekhez tartozó "szumma"(ℓ_1), euklideszi(ℓ_2) és Csebisev-tipusu(ℓ_∞) normákat fogjuk alkalmazni. E vektornormák között $\forall \underline{x} \in \mathbb{C}^n$ esetén fennállnak az alábbi egyenlőtlenségek /[45], 621. o./:

$$\left.\begin{aligned} \|\underline{x}\|_\infty \le \|\underline{x}\|_1 &\le n\,\|\underline{x}\|_\infty \\ \|\underline{x}\|_\infty \le \|\underline{x}\|_2 &\le n^{1/2}\,\|\underline{x}\|_\infty \\ n^{-1/2}\|\underline{x}\|_1 \le \|\underline{x}\|_2 &\le \|\underline{x}\|_1 \end{aligned}\right\} \qquad /1.2.6/$$

Az /1.2.6/ egyenlőtlenségek az ℓ_1-, ℓ_2- és ℓ_∞-normák bizonyos egyenértéküségét, ekvivalenciáját fejezik ki. Ilyen értelemben bármely két vektornorma egyenértékü:

1.2.5. Vektornormák ekvivalenciatétele /[55], 40. o./. Bármely két $\mathbb{C}^n$-en értelmezett $\|.\|_*$ és $\|.\|_\#$ vektornorma ekvivalens, azaz léteznek olyan $b_{*\#}$, $c_{*\#}$ pozitiv konstansok, hogy

$$\forall \underline{x} \in \mathbb{C}^n: \qquad b_{*\#}\,\|\underline{x}\|_* \le \|\underline{x}\|_\# \le c_{*\#}\,\|\underline{x}\|_* \ .$$

Nyilvánvaló, hogy az ℓ_p-vektornormák invariánsak permutációval szemben. Ezenkivül az ℓ_2-vektornorma invariáns unitér/ortogonális/ transzformációkkal szemben is, ugyanis, ha Q unitér mátrix, akkor $\|Q\underline{x}\|_2^2 = \underline{x}^H Q^H Q \underline{x} = \underline{x}^H \underline{x} = \|\underline{x}\|_2^2$.

1.2.5. Definició. A $\|.\|: \mathbb{C}^{n\times n} \longrightarrow [0,\infty)$ függvény mátrixnorma, ha kielégiti az alábbi kikötéseket /"mátrixnormák axiómái"/:

(I) $\forall A \in \mathbb{C}^{n\times n}$: $\quad \|A\| = 0 \iff A = 0$

(II) $\forall A \in \mathbb{C}^{n\times n}$, $\forall c \in \mathbb{C}$: $\quad \|cA\| = |c|\cdot\|A\|$

(III) $\forall A, B \in \mathbb{C}^{n\times n}$: $\quad \|A+B\| \le \|A\| + \|B\|$

(IV) $\forall A, B \in \mathbb{C}^{n\times n}$: $\quad \|AB\| \le \|A\|\,\|B\|$

Mivel az $n\times n$-es mátrixok felfoghatók n^2-elemü vektorok-

nak, és az (I)-(III) axiómák pontosan megfelelnek a vektornormák (i)-(iii) axiómáinak, igy egyrészt a mátrixnorma is folytonos függvény, másrészt érvényes az 1.2.5. tétel megfelelője mátrixnormákra:

1.2.5'. Mátrixnormák ekvivalenciatétele /[55], 41. o./. Bármely két $\mathbb{C}^{n\times n}$-en értelmezett $\|.\|_*$ és $\|.\|_\#$ mátrixnorma ekvivalens, azaz léteznek olyan $\beta_{*\#}$, $\gamma_{*\#}$ pozitiv konstansok, hogy

$$\forall A \in \mathbb{C}^{n\times n}: \quad \beta_{*\#}\|A\|_* \le \|A\|_\# \le \gamma_{*\#}\|A\|_* .$$

Minden vektornormához hozzárendelhetünk egy mátrixnormát a következőképpen.

1.2.6. Definició. A $\|.\|$ vektornorma által indukált mátrixnormát a következőképpen értelmezzük:

$$\forall A \in \mathbb{C}^{n\times n}: \quad \|A\| := \sup_{\|\underline{x}\|=1} \|A\underline{x}\| .$$

Könnyen belátható, hogy egy indukált mátrixnorma teljesiti a mátrixnormák axiómáit, sőt még a következő összefüggések is igazak rá:

$$\|I\| = 1 \qquad /1.2.7/$$

$$\forall A \in \mathbb{C}^{n\times n}, \forall \underline{x} \in \mathbb{C}^n: \quad \|A\underline{x}\| \le \|A\|\,\|\underline{x}\| . \qquad /1.2.8/$$

1.2.7. Definició. Ha egy $\|.\|$ vektornorma és egy $\|.\|$ mátrixnorma együtt kielégiti /1.2.8/-at, akkor konzisztensnek /vagy kompatibilisnek/ nevezzük őket.

Minden $\|.\|$ mátrixnormához van vele konzisztens vektornorma; ilyen pl. az $\|\underline{x}\| := \|\underline{x}\,\underline{\xi}^H\|$ relációval definiált vektornorma, ahol $\underline{\xi} \neq \underline{0}$ /tetszőleges/ rögzitett vektor. Másrészt, ha egy mátrixnorma majorál egy vektornorma által indukált mátrixnormát, akkor konzisztens az illető vektornormával.

A mátrixnormák fontos tulajdonsága, hogy felső becslést adnak egy mátrix sajátértékeinek nagyságára:

$$\rho(A) := \max_{1\le i\le n} |\lambda_i(A)| \le \|A\| . \qquad /1.2.9/$$

Az ℓ_p-vektornormák által indukált mátrixnormákat ℓ_p-mátrixnormáknak nevezzük. Az ℓ_2-mátrixnormát <u>spektrálnormának</u> is szokás nevezni. A következő tételben összefoglaljuk a három kiválasztott ℓ_p-mátrixnorma kiszámitási módját.

<u>1.2.6. Tétel</u> /[45], 625. o./. Minden $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ mátrixra

$$\left.\begin{aligned} \|A\|_1 &= \max_{1\le j\le n} \sum_{i=1}^{n} |a_{ij}| = \|(\|Ae_i\|_1)_n\|_\infty \\ \|A\|_\infty &= \|A^T\|_1 = \max_{1\le i\le n} \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}| = \|(\|A^T e_i\|_1)_n\|_\infty \\ \|A\|_2 &= [\rho(A^H A)]^{1/2} = [\rho(AA^H)]^{1/2} \end{aligned}\right\} \qquad /1.2.10/$$

Az ℓ_p-mátrixnormákon kivül még két fontos mátrixnormát emlitünk meg, amelyek nem indukált mátrixnormák, de konzisztensek bizonyos ℓ_p-vektornormákkal.

<u>Euklideszi norma:</u> $\|A\|_E := \left(\sum_{i,j=1}^{n} |a_{ij}|^2\right)^{1/2} = \|(\|Ae_i\|_2)_n\|_2 .$

Az euklideszi mátrixnorma konzisztens az euklideszi vektornormával és teljesiti a következő relációkat:

$$\left.\begin{aligned} &\|I\|_E = n^{1/2} \\ &\forall A \in \mathbb{C}^{n\times n}: \ \|A\|_E = [\mathrm{tr}(A^H A)]^{1/2} = [\mathrm{tr}(AA^H)]^{1/2} \end{aligned}\right\} \qquad /1.2.11/$$

<u>Maximum-norma:</u> $\|A\|_M := n \max_{1\le i,j\le n} |a_{ij}| = n\,\|(\|Ae_i\|_\infty)_n\|_\infty .$

/Megjegyezzük, hogy van aki a maximum-norma elnevezést az ℓ_∞-mátrixnormára használja./ A maximum-norma konzisztens az ℓ_1-, ℓ_2- és ℓ_∞-vektornormák mindegyikével.

A fenti öt konkrét mátrixnorma mindegyike invariáns

permutációmátrixszal való balról vagy jobbról történő szorzásra nézve. Ezen tulmenően, az ℓ_2- és euklideszi mátrixnormák unitér /ortogonális/ mátrixszal történő balról vagy jobbról való szorzásra is invariánsak; azaz, ha Q unitér, akkor

$$\|QA\|_2 = \|AQ\|_2 = \|A\|_2 \quad \text{és} \quad \|QA\|_E = \|AQ\|_E = \|A\|_E \ .$$

A tekintett mátrixnormák között a következő relációk állnak fenn minden $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ esetén:

$$\left.\begin{array}{l} n^{-1/2}\|A\|_p \le \|A\|_2 \le \|A\|_E \le n^{1/2}\|A\|_p \\ n^{-1}\cdot\|A\|_M \le \|A\|_p \le \|A\|_M \le n\|A\|_p \end{array}\right\} p = 1, \infty$$

$$n^{-1/2}\|A\|_E \le \|A\|_2 \le \|A\|_E \le n^{1/2}\|A\|_2$$

$$n^{-1}\|A\|_\infty \le \|A\|_1 \le n\|A\|_\infty$$

$$n^{-1}\|A\|_M \le \|A\|_2 \le \|A\|_E \le \|A\|_M \le n\|A\|_2 \le n\|A\|_E \qquad /1.2.12/$$

1.2.8. Definició. Legyen $\|.\|$ egy olyan mátrixnorma, melyre $\|I\| = 1$. Ekkor az e mátrixnormához tartozó logaritmikus norma a következő határértékrelációval értelmezett:

$$\mu(A) := \lim_{h \to 0+} \frac{\|I + hA\| - 1}{h}$$

Az alábbi tételben a logaritmikus norma legfontosabb tulajdonságait foglaljuk össze.

1.2.7. Tétel [48]. Legyen $\mu(.)$ a $\|.\|$ mátrixnormához tartozó logaritmikus norma és legyen $A, B \in \mathbb{C}^{n\times n}$, $t \in \mathbb{R}$, $z \in \mathbb{C}$.

Akkor

(a) $\left(-\|A\| \le -\rho(A) \le\right) \alpha(A) \le \mu(A) \le \|A\|$

(b) $\mu(tA) = |t|\,\mu(\mathrm{sgn}(t)\cdot A)$

(c) $\mu(A+B) \le \mu(A) + \mu(B)$

(d) $\mu(A + zI) = \mu(A) + \mathrm{Re}\, z$

(e) $\mu(A) = \lim_{h \to 0+} (1/h)\, \ln \|\exp(hA)\|$

Amennyiben egy specifikus mátrixnormához tartozó loga-

ritmikus normát használunk, ugyanazzal az indexszel látjuk el, mint az illető mátrixnormát. A következő tétel az ℓ_1- ℓ_2- és ℓ_∞-mátrixnormákhoz tartozó logaritmikus normák kiszámitási módját adja meg.

1.2.8. Tétel [48].

$$\left.\begin{aligned} &\mu_1(A)=\max_{1\le j\le n}\left(\operatorname{Re} a_{jj}+\sum_{\substack{i=1\\ i\neq j}}^{n}|a_{ij}|\right) \\ &\mu_2(A)=\alpha\left(\frac{A^H+A}{2}\right) \quad \mu_\infty(A)=\mu_1(A^T) \end{aligned}\right\} \qquad /1.2.13/$$

Azt, hogy $\mu(A)$ mennyire éles felső becslése a sajátértékek valós részei maximumának, a $q(A):=\mu(A)-\alpha(A)$ un. logaritmikus inefficiencia adja meg. Az alábbi következmény szerint normális mátrix ℓ_2-norma szerinti logaritmikus inefficienciája minimális.

1.2.1. Következmény. Ha A normális mátrix, akkor

$$\mu_2(A)=\alpha(A) \quad \text{és} \quad q_2(A)=0$$

A mátrix-exponenciális és a lineáris állandóegyütthatós differenciálegyenletek

A lineáris állandóegyütthatós /valós vagy komplex/ differenciálegyenletek megoldása explicit alakban kifejezhető az /1.1.3/ hatványsorral definiált /más ekvivalens definiciók is lehetségesek/ mátrix-exponenciális segitségével. Hogy a későbbiekben a mátrix-exponenciálissal dolgozhassunk, a következő tételben felsoroljuk legfontosabb tulajdonságait.

1.2.9. Tétel 3,10 . Legyen $A,B,V\in\mathbb{C}^{n\times n}$, $c\in\mathbb{C}$, $t\in\mathbb{R}$ és m természetes szám. Akkor

(A) $\exp(cI)=\exp(c)\cdot I$, $\exp(0)=I$

(B) $[\exp(A)]^m=\exp(mA)$

(C) $[\exp(A)]^{-1} = \exp(-A)$

(D) $AB = BA \iff \exp(A+B) = \exp(A)\exp(B)$

(E) $\exp(cI+A) = \exp(c)\exp(A)$

(F) ha A nilpotens, $\exp(tA) = \sum_{i=0}^{n-1} (t^i/i!) A^i$

(G) ha $A = A_1 \oplus \ldots \oplus A_m$, akkor $\exp(A) = \exp(A_1) \oplus \ldots \oplus \exp(A_m)$

(H) ha $A = VBV^{-1}$, akkor $\exp(tA) = V\exp(tB)V^{-1}$

(I) $\exp(tA)$ akárhányszor differenciálható az idő szerint, és $(d/dt)^m \exp(tA) = A^m \exp(tA)$, $m = 0, 1, 2, \ldots$

Az (E)-(H) tulajdonságok alapján, a Jordan-féle felbontás ismeretében tetszőleges mátrix exponenciálisa explicite kifejezhető, felhasználva, hogy egy $\mathcal{J}_m(\lambda)$ Jordan-mátrix a λI skalármátrix és a $\mathcal{J}_m(0)$ nilpotens mátrix összege. Ezt az előállitást adja meg az alábbi tétel.

1.2.10. Tétel /[41], 398. o./. Ha $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ Jordan-féle kanonikus felbontása az 1.2.2. tétel szerint adott, akkor

$$e^{tA} = V\left[e^{t\mathcal{J}_{m_1}(\lambda_1)} \oplus \ldots \oplus e^{t\mathcal{J}_{m_k}(\lambda_k)}\right] V^{-1}, \qquad /1.2.14/$$

ahol egy $\mathcal{J}_m(\lambda)$ Jordan-mátrix exponenciálisa a következőképpen áll elő:

$$e^{t\mathcal{J}_m(\lambda)} = e^{t\lambda}\begin{bmatrix} 1 & \frac{t}{1!} & \frac{t^2}{2!} & \cdots & \frac{t^{m-1}}{(m-1)!} \\ & 1 & \frac{t}{1!} & \ddots & \vdots \\ & & \ddots & \ddots & \vdots \\ & & & \ddots & \frac{t}{1!} \\ 0 & & & & 1 \end{bmatrix} \qquad /1.2.15/$$

Az általános lineáris állandóegyütthatós mátrix-differenciálegyenlet a következőképpen irható fel:

$$\dot{X}(t) = AX(t) + F(t), \qquad /1.2.16/$$

ahol $X(.): \mathbb{R} \to \mathbb{C}^{n\times m}$ a keresett /differenciálható/ megoldásfüggvény, $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ a rendszer együtthatómátrixa és $F(.): \mathbb{R} \to \mathbb{C}^{n\times m}$ folytonos függvény /inhomogenitás/.

1.2.11. Tétel /konstansvariációs formula [10], 45. o./.

Az /1.2.16/ mátrix-differenciálegyenlet megoldása

$$X(t) = e^{tA} X(0) + \int_0^t e^{(t-s)A} F(s)\, ds \,. \qquad /1.2.17/$$

Magasabbrendü /skaláris/ lineáris állandóegyütthatós differenciálegyenletek megoldása is kifejezhető mátrix-exponenciális segitségével, ahol a mátrix speciális, Frobenius-tipusu mátrix. Tekintsük a

$$p(d/dt)\, x(t) = f(t) \qquad /1.2.18/$$

magasabbrendü inhomogén differenciálegyenletet, ahol $p(.)$ egy n-edfoku polinom:

$$p(\lambda) = \lambda^n + c_n \lambda^{n-1} + \ldots + c_2 \lambda + c_1 \qquad /1.2.19/$$

és $f(.): \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ folytonos függvény. A szokásos módon bevezetve az $\underline{x}(.) = \left(x^{(i-1)}(.)\right)_n$ vektorértékü függvényt, az /1.2.18/ egyenlettel ekvivalens

$$\dot{\underline{x}}(t) = C\, \underline{x}(t) + f(t)\, \underline{e}_n \qquad /1.2.20/$$

elsőrendü lineáris rendszerhez jutunk, melynek mátrixa a

$$C = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & \ldots & 0 \\ \vdots & 0 & 1 & 0 & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & & \ddots & 0 \\ 0 & \ldots & & 0 & 1 \\ -c_1 & -c_2 & \ldots & -c_{n-1} & -c_n \end{bmatrix} \qquad /1.2.21/$$

Frobenius-mátrix, amelyet a $p(.)$ polinom <u>kompanion-</u> vagy <u>kisérő mátrix</u>ának nevezünk. A konstansvariációs formula szerint /1.2.20/ megoldása

$$\underline{x}(t) = e^{tC}\, \underline{x}(0) + \int_0^t e^{(t-s)C}\, f(s)\, \underline{e}_n\, ds,$$

melyből

$$x(t) = \underline{e}_1^T e^{tC}\, \underline{x}(0) + \int_0^t \underline{e}_1^T e^{(t-s)C}\, \underline{e}_n\, f(s)\, ds \,. \qquad /1.2.22/$$

$\underline{x}(0) = \left(x^{(i-1)}(0)\right)_m$ rögzitésével, azaz a $0., 1., \ldots, (n-1).$ deriváltak kezdőértékeinek megadásával az /1.2.22/-ben megadott megoldás egyértelmüvé válik.

A konstansvariációs formula segitségével integrál-alakban állitható elő egy θ paramétertől függő, a $\theta = \theta_0$ hely egy környezetében folytonosan differenciálható $A = A(\theta)$ mátrix exponenciálisának a paraméter szerinti deriváltja a $\theta = \theta_0$ helyen. A közönséges differenciálegyenletek megoldásainak paraméter szerinti differenciálhatóságára vonatkozó tétel /lásd pl. [10], 22. o./ értelmében ugyanis

$Z(t, \theta_0) := (\partial/\partial\theta) \exp(tA(\theta))\Big|_{\theta=\theta_0}$ létezik és megoldása a

$$\dot{Z} = A(\theta_0) Z + \frac{\partial A}{\partial \theta}(\theta_0) \exp(tA(\theta_0)), \qquad Z(0, \theta_0) = 0$$

inhomogén egyenletnek, melynek megoldása a konstansvariációs formula alapján

$$Z(t,\theta_0) = \frac{\partial e^{tA(\theta)}}{\partial \theta}\Big|_{\theta=\theta_0} = \int_0^t e^{(t-s)A(\theta_0)} \frac{\partial A}{\partial \theta}(\theta_0)\, e^{sA(\theta_0)}\, ds. \qquad /1.2.23/$$

2. PERTURBÁCIÓ-ANALIZIS

A gyakorlati feladatokban a számitásokban részt vevő differenciálegyenlet-rendszer **A** mátrixa általában eleve pontatlanul adott; un. "öröklött hiba" terheli, amely lehet megfigyelési hiba, előző számitások során felgyülemlett hiba, stb. Ilyenkor fontos ismerni ezen öröklött hiba továbbterjedésének törvényszerüségeit, azaz, hogy a kiindulási adatok hibái milyen eltérést okozhatnak a számolt $\exp(tA)$ ill. $\exp(tA)\underline{b}$ eredményekben. E fejezetben éppen ezért azt vizsgáljuk meg, hogy az emlitett számitási feladatok menynyire érzékenyek a bemenőadatok perturbációjára. E vizsgálatok akkor is fontosak, ha a bemenő adatok pontosan ismertek, mivel számitógépi lebegőpontos aritmetikával való számolás esetén - mint azt Wilkinson megmutatta [52, 53]-, az alapmüveletek egy sorozatának elvégzéséből nyert, kerekitési hibákkal terhelt közelités ugy tekinthető, mintha az az eredeti adatok kis perturbáiójából /un. "ekvivalens perturbációjából"/ származó adatokon pontosan, kerekitési hiba nélkül elvégzett azonos müveletsorozat eredménye lenne.

Egy számitási eljárást akkor tekintünk numerikus szempontból stabilnak, ha a számitások során felhalmozódó kerekitési hibákhoz a bemenő adatoknak csak kismértékü ekvivalens perturbációja tartozik. Ha a szóbanforgó számitási feladat érzékeny a kiindulási adatok kis perturbációjára, akkor még numerikusan stabil eljárás alkalmazása mellett is eléggé nagy lehet a számolt megoldás pontatlansága, de ilyen esetben e

hiba - a véges pontosságu aritmetika használata miatt - elkerülhetetlen, együtt jár a feladat eredő érzékenységével. Amennyiben az alapfeladat nem érzékeny az input adatok kis megváltoztatására, csak numerikusan instabil módszer produkálhat nagymértékben pontatlan eredményt.

A hibaterjedés vizsgálatánál megkülönböztethetjük az abszolut ill. a relativ hiba terjedését. A mátrix-exponenciálisra Van Loan [50] és Kågström [27] adtak relativ ill. abszolut perturbációs korlátokat. Az általuk megadott korlátok élesitésén tul mi $\exp(tA)\underline{b}$-re, valamint a mátrix-exponenciális paraméter szerinti deriváltjára is megadjuk a megfelelő perturbációs korlátokat.

A relativ hibák terjedésének lokális jellemzésére Van Loan bevezette egy mátrix exponenciális kondiciós számát. Mi egyrészt élesitjük Van Loan egy ezzel kapcsolatos eredményét másrészt választ adunk Van Loan egy kérdésére az exponenciális kondiciós szám nagyságrendjével kapcsolatban.

2.1. Perturbációs korlátok a mátrix-exponenciálisra

A. A mátrix-exponenciálisra vonatkozó korlátok

A mátrix-exponenciálisra vonatkozó perturbációs korlátok megadásánál mindig magának a mátrix-exponenciálisnak a korlátaiból indulunk ki. Az általános és a [27, 50] cikkekben használt ℓ_2-normán kivül még más, az ℓ_2-nél könnyebben kiszámitható konkrét normára is megadjuk $\exp(tA)$ korlátait $(A \in \mathbb{C}^{n\times n})$. Ezenkivül bizonyos esetekben élesitjük az emlitett cikkekben megadott korlátokat.

A mátrix-exponenciális legegyszerübb, és talán legismertebb korlátja a logaritmikus normával adható meg.

2.1.1. Lemma /Dahlquist, vö. [48]/. Ha $\|I\|=1$, akkor

$$\|e^{tA}\| \leq e^{t\mu(A)} , \quad t \geq 0 . \qquad /2.1.1/$$

A későbbi fejezetekben szükségünk lesz e lemma alábbi következményére.

2.1.1. Következmény. $\|I\|=1$ esetén a következő három feltétel ekvivalens: (a) $\mu(A) \leq 0$ (b) $\|\exp(tA)\| \leq 1 \quad \forall t \in [0,\infty)$

(c) $\|\exp(tA)\|$ monoton nemnövő t-ben a $[0,\infty)$-en.

Bizonyitás. (a)$\Rightarrow$(b): a 2.1.1. lemma alapján nyilvánvaló.

(b)$\Rightarrow$(c): ha $0 \leq s \leq t$, akkor $\|e^{tA}\| \leq \|e^{(t-s)A}\| \cdot \|e^{sA}\| \leq \|e^{sA}\|$.

(c)$\Rightarrow$(a): a logaritmikus norma (e) tulajdonsága alapján

$\mu(A) = \lim_{h \to 0+} (1/h) \ln \|\exp(hA)\| \leq \lim_{h \to 0+} (1/h) \ln \|I\| = 0$. □

A 2.1.1. lemma gyakran nem ad megfelelően éles felső korlátot, főleg t nagyobb értékeire. Például stabil mátrix esetén előfordulhat az $\alpha(A) < 0 < \mu(A)$ szituáció, ami azt jelenti, hogy $t \to \infty$-re $\exp(t\mu(A)) \to \infty$, miközben $\|\exp(tA)\| \to 0$, vagyis ilyenkor a /2.1.1/ felső becslés elég nagy t-kre már teljesen értéktelen. Ilyen esetekben olyan becslésekre van szükség, melyek figyelembe veszik A sajátértékeit, ill. az $\alpha(A)$ spektrális abszcisszát.

Megjegyezzük, hogy a felső korlát exponenciálisának kitevőjében t-nek $\alpha(A)$-nál kisebb együtthatója nem szerepelhet, mivel

$$\|e^{tA}\| \geq \rho(e^{tA}) = e^{t\alpha(A)} , \quad t \geq 0 . \qquad /2.1.2/$$

Olyan felső korlátok, melyek $\alpha(A) < 0$ esetén nullához tartanak ha $t \to \infty$ /, $\exp(tA)$ azon előállitásai alapján nyerhetők, amelyek

tartalmazzák a sajátértékeket.

A mátrix-exponenciális Newton-féle, osztott differenciás előállitása alapján bizonyitható a következő.

2.1.2. Lemma / Былов és mások, [9], 131. o./. $\|I\|=1$ esetén

$$\|e^{tA}\| \le f_n(2\|A\|t)\, e^{t\alpha(A)} \quad , \quad t \ge 0, \qquad /2.1.3/$$

ahol $f_n(x)$ az e^x $(n-1)$-edfoku Taylor-polinomja:

$$f_n(x) := \sum_{i=0}^{n-1} \frac{x^i}{i!} \quad . \qquad /2.1.4/$$

Ezzel azonos nagyságrendő becslést nyert ℓ_2-normára a Schur-felbontás alapján Van Loan, amelyben a polinomiális tényező együtthatói kisebbek.

2.1.3. Lemma /Van Loan [50]/. Legyen az $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ mátrix Schur-felbontása $A = Q(\Lambda + U)Q^H$, ahol Q unitér, U szigoruan felső trianguláris és $\Lambda = (\lambda_i \delta_{ij})_{n\times n}$ diagonális. Akkor

$$\|e^{tA}\|_2 \le f_n(\|U\|_2 t)\, e^{t\alpha(A)} \quad , \quad t \ge 0, \qquad /2.1.5/$$

ahol az $f_n(.)$ polinom /2.1.4/ szerint definiált.

E lemmából a normák közti /1.2.12/ összefüggések és az $f_n(.)$ polinom monotonitásából adódik az alábbi.

2.1.2. Következmény. Legyen $\|.\|$ az euklideszi, ℓ_1- vagy ℓ_∞-normák bármelyike. Akkor a 2.1.3. lemma jelölései mellett

$$\|e^{tA}\| \le \sqrt{n}\, f_n(\|U\|_E t)\, e^{t\alpha(A)} \quad , \quad t \ge 0, \qquad /2.1.6/$$

ahol $\|U\|_E = \left(\|A\|_E^2 - \sum_{i=1}^{n} |\lambda_i|^2\right)^{1/2}$.

A /2.1.3/ korlátban szereplő polinomiális tényező a zérus mátrix kivételével, a /2.1.5-6/ korlátokban szereplő po-

linomok pedig a normális mátrixok kivételével mindig $(n-1)$-edfokuak. E fokszám általában csökkenthető a Jordan-féle kanonikus alak figyelembe vételével. Ha A Jordan-felbontása az 1.2.2. tétel szerint adott, akkor

$$\|\exp(tA)\| \leq \varkappa(V)\, \|\exp(t\mathcal{J}_A)\|, \qquad /2.1.7/$$

ahol $\varkappa(V) := \|V\|\cdot\|V^{-1}\|$ a V mátrix $\|.\|$ normához tartozó /közönséges/ kondiciós száma. Továbbá ℓ_p-normák esetén

$$\|e^{t\mathcal{J}_A}\|_p = \max_{1\leq i\leq k} \|e^{t\mathcal{J}_{m_i}(\lambda_i)}\|_p = \max_{1\leq i\leq k} e^{t\operatorname{Re}\lambda_i}\, \|e^{t\mathcal{J}_{m_i}(0)}\|_p \,. \qquad /2.1.8/$$

Látjuk, hogy $\exp(tA)$ /2.1.7-8/ alapján történő becsléséhez szükség van a szinguláris Jordan-mátrix exponenciálisának korlátjára. Ilyet ad meg a következő segédtétel.

2.1.4. Lemma. Legyen $f_m(\cdot)$ /2.1.4/ szerint definiált. Akkor $t\geq 0$-ra

$$\|e^{t\mathcal{J}_m(0)}\|_p \begin{cases} = f_m(t), & \text{ha } p=1 \text{ vagy } \infty; \\ \leq f_m(t), & \text{ha } p=2. \end{cases} \qquad /2.1.9/$$

Bizonyitás. $p=1$ vagy ∞ esetben az állitás leolvasható /1.2.15/-ről. $p=2$ esetben alkalmazzuk a 2.1.3. lemmát. Itt $\alpha(\mathcal{J}_m(0))=0$, $M=\mathcal{J}_m(0)$; utóbbi ℓ_2-normáját könnyü meghatározni, mivel

$$\mathcal{J}_m(0)^T \mathcal{J}_m(0) = \begin{bmatrix} 0 & & & \\ 1 & 1 & & 0 \\ & \ddots & \ddots & \\ 0 & & 1 & \end{bmatrix},$$

és igy $\|\mathcal{J}_m(0)\|_2 = [\rho(\mathcal{J}_m(0)^T\mathcal{J}_m(0))]^{1/2} = 1$. Ezután az állitás már következik a 2.1.3. lemmából. □

Most már könnyen igazolható az alábbi, Jordan-felbontáson alapuló korlát érvényessége.

2.1.5. Lemma. Legyen az $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ mátrix Jordan-felbontása az 1.2.2. tétel szerint adott és legyen $m = \max_{1\le i\le k} m_i$. Akkor

$$\|e^{tA}\|_p \le [\varkappa_p(V) f_m(t)] e^{t\alpha(A)}, \quad t \ge 0. \qquad /2.1.10/$$

ahol $p = 1, 2$ vagy ∞, és $f_m(.)$ /2.1.4/ szerint definiált.

Bizonyitás. /2.1.7-9/ alapján

$$\|e^{tA}\|_p \le \varkappa_p(V) \max_{1\le i\le k} e^{t\mathrm{Re}\lambda_i} f_{m_i}(t) \le \varkappa_p(V) f_m(t) e^{t\alpha(A)}. \quad \square$$

Az $f_m(t) \le m \max_{0\le i\le m-1}(t^i/i!)$ egyenlőtlenség alapján /2.1.10/-ből megkapjuk Van Loan ℓ_2-normára megadott korlátját.

2.1.3. Következmény. /Van Loan [50]/. A 2.1.5. lemma jelölései mellett

$$\|e^{tA}\|_p \le [m \varkappa_p(V) \max_{0\le i\le m-1}(t^i/i!)] e^{t\alpha(A)}, \quad t \ge 0. \qquad /2.1.11/$$

2.1.4. Következmény. Ha az A mátrix diagonalizálható a V mátrix segitségével /azaz $V^{-1}AV$ diagonális/, akkor

$$\|e^{tA}\|_p \le \varkappa_p(V) e^{t\alpha(A)}, \quad t \ge 0. \qquad /2.1.12/$$

ahol $p = 1, 2$ vagy ∞. Ha ezen tulmenően, A normális mátrix, akkor $\|\exp(tA)\|_2 = \exp(t\alpha(A)), t \ge 0$. /2.1.13/

Könnyen belátható, hogy még a 2.1.5. lemma sem ad mindig nagyságrendben pontos becslést. Ugyanis $\exp(t\mathcal{J}_A)$ maximum normája:

$$\|e^{t\mathcal{J}_A}\|_M = n \frac{t^{\bar m - 1}}{(\bar m - 1)!} e^{t\alpha(A)}, \quad \text{ha } t \text{ elég nagy,}$$

ahol $\bar m$ a maximális valós részü sajátértékekhez tartozó Jordan-blokkok rendjének maximuma /mivel elég nagy t-re $\mathcal{J}_A$ exponenciálisában a $(t^{\bar m-1}/(\bar m-1)!)\exp(t\lambda_i)$, $\mathrm{Re}\,\lambda_i = \alpha(A)$ alaku elemek dominálnak/. $\|\exp(t\mathcal{J}_A)\| \le \|V^{-1}\|\cdot\|\exp(tA)\|\cdot\|V\|$ alapján ebből következik, hogy elég nagy t-re

$$\frac{n}{\varkappa_M(V)} \frac{t^{\bar m-1}}{(\bar m-1)!} e^{t\alpha(A)} \le \|e^{tA}\|_M \le \varkappa_M(V)\, n \frac{t^{\bar m-1}}{(\bar m-1)!} e^{t\alpha(A)}, \qquad /2.1.14/$$

ami a mátrixnormák ekvivalenciatétele alapján azt jelenti, hogy bármely mátrixnorma esetén $\|\exp(tA)\|$ pontos nagyságrendje $\mathcal{O}\left(t^{\bar m-1}\exp(t\alpha(A))\right)$. Következő lemmánkban ilyen nagyságrendü felső becslést adunk meg.

2.1.6. Lemma. A 2.1.5. lemma jelölései mellett

$$\|e^{tA}\|_p \le \left[\varkappa_p(VD)\, f_{\bar m}(t)\right] e^{t\alpha(A)}, \quad t \ge 0. \qquad /2.1.15/$$

ahol $\bar m = \max\limits_{\mathrm{Re}\lambda_i=\alpha(A)} m_i$ és a D diagonális mátrix a következő:

$$D = D_1 \oplus \ldots \oplus D_k, \quad D_r = \left(d_r^{i-1}\delta_{ij}\right)_{m_r \times m_r}$$

és

$$d_r = \begin{cases} 1, & m_r \le \bar m; \\ \min\{\alpha(A) - \mathrm{Re}\,\lambda_r, 1\}, & m_r > \bar m; \end{cases} \quad r = 1, \ldots, k. \qquad /2.1.16/$$

Bizonyitás. A 2.1.5. lemma bizonyitásához hasonlóan eljárva,

$$\|e^{tA}\|_p \le \varkappa_p(VD) \max_{1\le r\le k} e^{t\,\mathrm{Re}\lambda_r} \|e^{tD_r^{-1}J_{m_r}(0)D_r}\|_p .$$

Itt $D_r^{-1} J_{m_r}(0) D_r = d_r J_{m_r}(0)$, és a 2.1.4. lemma alkalmazásával, D_r és $\bar m$ definiciója alapján azt kapjuk, hogy

$$e^{t\,\mathrm{Re}\lambda_r} \|e^{t d_r J_{m_r}(0)}\|_p \le e^{t\,\mathrm{Re}\lambda_r} f_{m_r}(t d_r) \le \begin{cases} e^{t\alpha(A)} f_{\bar m}(t), & m_r \le \bar m, \\ e^{t[\mathrm{Re}\lambda_r + d_r]}, & m_r > \bar m. \end{cases}$$

Viszont $m_r > \bar m$ esetben $d_r \le \alpha(A) - \mathrm{Re}\,\lambda_r$ miatt

$$e^{t[\mathrm{Re}\lambda_r + d_r]} \le e^{t\alpha(A)} \le e^{t\alpha(A)} f_{\bar m}(t) . \quad \square$$

A fenti lemmában önkényesnek tünik, hogy $m_r > \bar m$ esetén d_r definiciójában a sajátértékekre vonatkozó $\alpha(A) - \mathrm{Re}\,\lambda_r$ eltérést éppen az 1 számhoz viszonyitjuk. Ez azonban abból adódik, hogy a Jordan-féle kanonikus alak definiciója is vala-

melyest önkényes: ha ugy definiálnánk, hogy a főátló feletti 1-eseket egy $\varepsilon>0$ számmal helyettesitenénk, akkor d_r definiciója $m_r>\bar{m}$ esetén $d_r = \min\{[\alpha(A)-\mathrm{Re}\lambda_r]/\varepsilon, 1\}$ lenne, és a fenti becslésben $f_{\bar{m}}(t)$ helyett $f_{\bar{m}}(t\varepsilon)$ szerepelne. Az elemzést tovább finomithatnánk a Golub és Wilkinson által definiált kvázi-Jordan-alak [18] alkalmazásával, melyben a főátló feletti 1-esek helyén tetszőleges nemzérus számok állhatnak.

A D diagonális mátrix megjelenése a /2.1.15/ becslésben legfeljebb $\varkappa_p(D)$-szeresére növelheti a $\varkappa_p(V)$ kondiciós számot, ahol

$$\varkappa_p(D) = \max_{1\le r\le k} d_r^{1-m_r} . \qquad /2.1.17/$$

Erre nézve a következő becslés adható: ha

$$d := \min_{1\le r\le k} d_r \qquad /2.1.18/$$

és m a 2.1.5. lemma szerint definiált, akkor

$$\varkappa_p(VD) \le \varkappa_p(V) \max_{1\le r\le k} d_r^{1-m_r} \le \varkappa_p(V) d^{1-m} . \qquad /2.1.19/$$

$d \ll 1$ esetén a $\varkappa_p$ kondiciós szám jelentős romlása várható.

2.1.5. Következmény. Ha $A\in\mathbb{C}^{n\times n}$ maximális valós részü sajátértékei nemdefektivek, akkor a 2.1.6. lemma jelöléseivel

$$\|e^{tA}\|_p \le \varkappa_p(VD)\, e^{t\alpha(A)} , \quad t\ge 0 . \qquad /2.1.20/$$

Utóbbival azonos nagyságrendü korlátot /2.1.12/-ben adtunk, azon erősebb kikötés mellett, hogy A nemdefektiv.

Végül megadunk még egy becslést $\exp(tA)$-ra, amely nagyságrendben kevésbé jó ugyan, mint az előbbi becslések nagy része, de a benne szereplő $\varepsilon>0$ szabad paraméter választható ugy, hogy stabil mátrix esetén a felső korlát nullához tart-

son /ha $t \to \infty$/. Ilyen tipusu korlátot Kågström közölt [27] ℓ_2-norma esetén, de az ő becslésében szereplő diagonális mátrix /a triviális esetektől eltekintve/ gyengébben kondicionált, mint az alábbiakban megadott.

2.1.7. Lemma. Legyen ε tetszőleges pozitiv szám. A 2.1.5. lemma jelölései mellett

$$\|e^{tA}\|_p \le \varkappa_p(VD)\, e^{t[\alpha(A)+\varepsilon]}, \quad t \ge 0, \qquad /2.1.21/$$

ahol $D = D_1 \oplus \ldots \oplus D_k$ olyan diagonális mátrix, melyben

$$D_r = (d_r^{i-1}\delta_{ij})_{m_r \times m_r} \quad \text{és} \quad d_r = \begin{cases} 1, & m_r = 1 \\ \min\{\alpha(A) - \mathrm{Re}\,\lambda_r + \varepsilon, 1\}, & m_r > 1 \end{cases} \qquad /2.1.22/$$

$$r = 1, \ldots, k.$$

A lemma bizonyitása hasonló a 2.1.6. lemma bizonyitásához, ill. annál egyszerübb.

Az előzőekben $\exp(tA)$-ra megadott korlátokat összehasonlitva megállapithatjuk, hogy t kis /0-hoz közeli/ értékeire a Jordan-felbontáson alapuló korlátok kevésbé jók, mint a többi, mivel a $\varkappa(V)$ ill. $\varkappa(VD)$ kondiciós számok általában 1-nél nagyobbak, viszont ℓ_p-norma esetén $\|\exp(tA)\|_p \approx 1$, ha $t \approx 0$. Másrészt nagy t-re a Jordan-tipusu becslések /kivéve /2.1.21/-et/ általában élesebbek, mint a többi /mivel általában $\alpha(A) < \mu(A)$ ill. $m_1 \overline{m} < n$ /.

A továbbiakban legyen $g(.) : [0,\infty) \to \mathbb{R}$ olyan monoton nemcsökkenő függvény, β olyan valós szám és $\|.\|$ olyan norma, melyekkel fennáll a következő reláció:

$$\|\exp(tA)\| \le g(t)\exp(t\beta), \quad t \ge 0, \qquad /2.1.23/$$

ahol $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ adott. Vegyük észre, hogy a mátrix-exponenciálisra eddig megadott összes becslésünk /2.1.23/ alaku, ahol $g(.)$ nemnegativ együtthatós polinom. A /2.1.1/ és /2.1.21/ becslésekben $g(t) \equiv g$ konstans és $\beta \ge \alpha(A)$, mig a többiben

$g(.)$ általában nemkonstans polinom és $\beta = \alpha(A)$.

Perturbációs korlátok a mátrix-exponenciálisra

A következőkben a

$$H(t) := e^{t(A+E)} - e^{tA} \qquad /2.1.24/$$

eltérés-mátrix becslése lesz a célunk, ahol az $E = (e_{ij})_{n\times n}$ mátrix az A mátrix egy perturbációja. Ehhez $H(t)$ következő integrál-előállitásából indulunk ki:

$$H(t) = \int_0^t e^{(t-s)A} E\, e^{s(A+E)}\, ds, \qquad /2.1.25/$$

melyet egyszerüen ugy kaphatunk meg, ha a $\dot{H}(t) = A\,H(t) + E\exp(t[A+E])$ differenciálegyenletre alkalmazzuk a konstans-variációs formulát. Hogy /2.1.25/-ből becsülhessük $H(t)$-t, szükségünk van $\exp(t[A+E])$ valamilyen becslésére. Ilyet az alábbi segédtétel felhasználásával nyerünk.

2.1.8. Lemma /Bellman-Gronwall-egyenlőtlenség; vö. [10], 19. o./.

Legyenek $u(.): \mathbb{R}\to\mathbb{R}$, $v(.): \mathbb{R}\to\mathbb{R}$ és $w(.): \mathbb{R}\to[0,\infty)$ folytonos függvények, melyekre

$$u(t) \le v(t) + \int_0^t w(s)\,u(s)\,ds, \quad \forall\, t\in[0,\infty).$$

Akkor

$$u(t) \le v(t) + \int_0^t v(s)\,w(s)\,e^{\int_s^t w(\tau)\,d\tau}\,ds, \quad \forall\, t\in[0,\infty).$$

A 2.1.8. lemma segitségével $\exp(tA)$ /2.1.23/ alaku általános becsléséből $\exp(t[A+E])$ alábbi korlátja adódik.

2.1.9. Lemma. Tegyük fel, hogy /2.1.23/ fennáll. Akkor

$$\|e^{t(A+E)}\| \le g(t)\exp\left(t\beta + \|E\|\int_0^t g(s)ds\right), \quad t\ge 0. \qquad /2.1.26/$$

Bizonyitás. $\exp(t[A+E]) = \exp(tA) + H(t)$ és /2.1.25/ alapján

$$\|e^{t(A+E)}\| \le \|e^{tA}\| + \int_0^t \|e^{(t-s)A}\| \, \|E\| \, \|e^{s(A+E)}\| \, ds$$

$$\le g(t) e^{t\beta} + \int_0^t g(t-s) e^{(t-s)\beta} \, \|E\| \, \|e^{s(A+E)}\| \, ds$$

$$\le g(t) \, e^{t\beta} \left[1 + \int_0^t \|E\| \cdot g(s) \cdot \left(\|e^{s(A+E)}\| / [g(s) e^{\beta s}] \right) ds \right]$$

ahol felhasználtuk a /2.1.23/-ban szereplő $g(.)$ függvény monotonitását és pozitivitását / $g(t) \ge g(0) \ge \|I\| > 0$ /. Legyen most

$$u(t) := \|e^{t(A+E)}\| / [g(t) e^{t\beta}], \quad w(t) = \|E\| \, g(t), \quad t \ge 0.$$

Ekkor

$$u(t) \le 1 + \int_0^t w(s) \, u(s) \, ds, \quad t \ge 0,$$

és igy a Bellman-Gronwall-egyenlőtlenség következtében

$$u(t) \le 1 + \int_0^t w(s) \exp\left(\int_s^t w(\tau) d\tau \right) ds = \exp\left(\int_0^t w(s) ds \right), \quad t \ge 0;$$

utóbbiból $u(.)$ és $w(.)$ definiciója alapján éppen /2.1.26/ adódik.

Most már kimondhatjuk azt a tételt, amely a mátrix-exponenciális minden egyes /2.1.23/ alaku korlátjához megad egy megfelelő perturbációs korlátot.

2.1.1. Tétel. Tegyük fel, hogy érvényes /2.1.23/, azaz

$$\|e^{tA}\| \le g(t) \, e^{t\beta}, \quad t \ge 0,$$

ahol $g(.)$ monoton nemcsökkenő függvény. Akkor $t \ge 0$-ra

$$\|H(t)\| = \|e^{t(A+E)} - e^{tA}\| \le g(t) \, e^{t\beta} \left[\exp\left(\|E\| \int_0^t g(s) ds \right) - 1 \right]. \quad /2.1.28/$$

Bizonyitás. /2.1.25/, /2.1.26/ és $g(.)$ monotonitása alapján

$$\|H(t)\| \le \int_0^t g(t-s)\, e^{(t-s)\beta}\, \|E\|\, g(s)\, e^{s\beta} \exp\left(\|E\| \int_0^s g(\tau)\,d\tau\right) ds$$

$$\le g(t)\, e^{t\beta} \int_0^t \|E\|\, g(s) \exp\left(\|E\| \int_0^s g(\tau)\,d\tau\right) ds$$

$$= g(t)\, e^{t\beta} \left[\exp\left(\|E\| \int_0^t g(s)\,ds\right) - 1\right]. \quad \square$$

A 2.1.1. tételből $g(.)$ monotonitását és az exponenciális függvényre vonatkozó elemi egyenlőtlenséget felhasználva azonnal megkaphatók az alábbi gyengébb becslések.

2.1.6. Következmény. /Kågström [27], Van Loan [50]/. A 2.1.1. tétel feltevései mellett

$$\|H(t)\| \le e^{t\beta}\, \|E\| \cdot g(t) \cdot \int_0^t g(s)\,ds \cdot \exp\left(\|E\| \int_0^t g(s)\,ds\right), \quad t \ge 0 \qquad /2.1.29/$$

$$\|H(t)\| \le e^{t\beta}\, g(t) \left[\exp\left(\|E\|\, t \cdot g(t)\right) - 1\right] \qquad /2.1.30/$$

$$\le \|E\|\, t\, [g(t)]^2 \exp\left(t\left[\beta + \|E\|\, g(t)\right]\right), \quad t \ge 0 \qquad /2.1.31/$$

A fenti becslések közül /2.1.30/-at Kågström, /2.1.31/-et pedig Van Loan adta meg. Ha $g(t) \equiv$állandó, akkor az általunk megadott /2.1.28/ perturbációs korlát meegyezik a Kågström által adottal, különben viszont élesebb annál. Mivel konkrét /2.1.23/ alaku becslések esetén $g(.)$ mindig polinom, igy az általunk adott /2.1.28-29/ korlátok kiszámitása nem nehezebb, mint a /2.1.30-31/ korlátok kiszámitása, mivel csak polinomot kell integrálni.

A mátrix-exponenciálisra előzőleg megadott becslésekből a 2.1.1. tétel segitségével pl. a következő perturbációs korlátok származtathatók /mindenütt $t \ge 0$ /:

$$/2.1.1/ \Longrightarrow \|H(t)\| \le e^{t\mu(A)}\left[e^{t\|E\|} - 1\right] \le t\|E\|\, e^{t[\mu(A)+\|E\|]} \qquad /2.1.32/$$

$$/2.1.3/ \Longrightarrow \|H(t)\| \le f_n(2\|A\|t)\, e^{t\alpha(A)}\left[e^{\|E\| \int_0^t f_n(2\|A\|s)\,ds} - 1\right] \qquad /2.1.33/$$

/2.1.5/ $\Rightarrow$ $\|H(t)\|_2 \le f_n(\|u\|_2 t)\, e^{t\alpha(A)} \left[e^{\|E\|_2 \int_0^t f_n(\|u\|_2 s)ds} - 1 \right]$ /2.1.34/

/2.1.10/ $\Rightarrow$ $\|H(t)\|_p \le \varkappa_p(V) f_m(t)\, e^{t\alpha(A)} \left[e^{\|E\|_p \varkappa_p(V) \int_0^t f_m(s)ds} - 1 \right]$ /2.1.35/

/2.1.19/ $\Rightarrow$ $\|H(t)\|_p \le \varkappa_p(V) f_{\bar m}(td)\, e^{t\alpha(A)} \left[e^{\|E\|_p \varkappa_p(V) \int_0^t f_{\bar m}(s)ds} - 1 \right]$ /2.1.36/

/2.1.21/ $\Rightarrow$ $\|H(t)\|_p \le \varkappa_p(VD)\, e^{t[\alpha(A)+\varepsilon]} \left[e^{t\|E\|_p \varkappa_p(VD)} - 1 \right]$

$\le t\|E\|_p [\varkappa_p(VD)]^2 e^{t[\alpha(A)+\varepsilon+\|E\|_p \varkappa_p(VD)]}$ /2.1.37/

E perturbációs korlátok közül t kis értékei /$t \approx 0$/ esetén általában a /2.1.32-34/ korlátok a jobbak; a /2.1.35-37/ Jordan-tipusu korlátok csak akkor jók, ha $\varkappa_p \approx 1$.

t nagy értékei /$t \to \infty$/ esetén egy érdekes jelenséget figyelhetünk meg: $\exp(tA)$ nagyságrendben legélesebb korlátaiból származtatott /2.1.33-36/ perturbációs korlátok - a legkedvezübb speciális esetek kivételével /amikor $g(.)$ konstans/ - a legrosszabbak, mivel exponenciálisnál nagyobb nagyságrendben tartanak a végtelenbe, ha $t \to \infty$. Ez a helyzet /2.1.36/-nál, ha A-nak van defektiv $\alpha(A)$ valós részü sajátértéke /$\bar m > 1$/, /2.1.35/-nél, ha A defektiv /$m > 1$/, /2.1.34/-nél, ha A nemnormális /$u \neq 0$/ és /2.1.33/-nál, ha $A \neq 0$. Ezzel szemben a /2.1.32/ korlát stabil mátrix esetén 0-hoz tart, ha $\mu(A) < 0$ és $\|E\| < -\mu(A)$, és hasonlóképpen a /2.1.37/ korlát is nullához tart $\alpha(A) < 0$ esetén, ha $\varepsilon < -\alpha(A)$, valamint $\|E\|_p < -[\alpha(A)+\varepsilon]/\varkappa_p(VD)$. A /2.1.32-37/ perturbációs korlátok közül tehát $t \to \infty$-re általános Jordan-alakot feltételezve /2.1.37/ a legjobb /ha ε elég kicsi/, ha viszont a maximális valós részü sajátértékek nemdefektivek, akkor általában /2.1.36/ a legjobb.

Relativ hibák becslése

A perturbált A mátrix exponenciálisának relativ hibája alatt a

$$\phi(t) := \frac{\|H(t)\|}{\|e^{tA}\|} = \frac{\|e^{t(A+E)} - e^{tA}\|}{\|e^{tA}\|} \qquad /2.1.38/$$

/normafüggő/ mennyiséget értjük [50]. Speciális mátrixnorma használata esetén megfelelő alulindexezést alkalmazunk. $\phi(.)$ általában nemkorlátos $[0,\infty)$-en; korlátossága az E perturbációmátrixtól függ. A

$$\left| \phi(t) - \frac{\|e^{t(A+E)}\|}{\|e^{tA}\|} \right| \leq 1$$

reláció mutatja, hogy $\phi(t)$ pontosan akkor korlátos, amikor az $\|\exp(t[A+E])\| / \|\exp(tA)\|$ hányados $t \in [0,\infty)$ /. Viszont mindig megadható olyan tetszőlegesen kis normáju E mátrix, hogy $\alpha(A+E) > \alpha(A)$, és ekkor $\phi(.)$ nemkorlátos. Ebből következik, hogy $\phi(.)$ tetszőleges olyan becslése, amely az E mátrixnak csak a normájától függ, szükségképpen nemkorlátos $[0,\infty)$-en.

$H(t)$-nek a 2.1.1. tétel szerinti korlátaiból közvetlenül kaphatunk $\phi(t)$-re is korlátot /2.1.2/ alapján:

$$\phi(t) \leq g(t)\, e^{t[\beta-\alpha(A)]} \left[\exp\left(\|E\| \int_0^t g(s)\,ds\right) - 1\right] \quad , t \geq 0. \qquad /2.1.39/$$

Az ilymódon nyerhető konkrét korlátokat itt nem részletezzük.

Normális mátrixok esete

Az előzőekben megadott korlátok és perturbációs korlátok főként nemnormális mátrixok esetén érdekesek. Ha az A mátrix normális, azaz $AA^H = A^H A$, akkor a helyzet nagymértékben leegyszerüsödik és kedvezőbbé válik. Ilyenkor ugyanis /2.1.13/ szerint $\|\exp(tA)\|_2 = \exp(t\alpha(A))$, és igy a 2.1.1. tétel ér-

telmében $t \geq 0$ -ra

$$\|H(t)\|_2 \leq e^{t\alpha(A)}\left[e^{t\|E\|_2}-1\right] \leq t\|E\|_2\, e^{t[\alpha(A)+\|E\|_2]}, \qquad /2.1.40/$$

valamint

$$\phi_2(t) \leq e^{t\|E\|_2}-1 \leq t\|E\|_2\, e^{t\|E\|_2} . \qquad /2.1.41/$$

E becslések az általános esetre megadott korlátok optimumát képezik.

A normális mátrixok osztálya magában foglalja például a valós ortogonális, szimmetrikus és ferdén szimmetrikus mátrixokat ill. ezek komplex megfelelőit. Sajnos a legtöbb gyakorlati problémában fellépő differenciálegyenlet-rendszer mátrixa nem normális mátrix, és igy általában nem érvényesek a /2.1.40-41/ optimális relációk.

Perturbációs korlátok $\dot{\underline{x}} = A\underline{x}$, $\underline{x}(0) = \underline{b}$ megoldására

A mátrix-exponenciálisra vonatkozó korlátok és perturbációs korlátok segitségével már könnyen adhatók megfelelő korlátok az

$$\underline{x}(t) := e^{tA}\,\underline{b} \qquad /2.1.42/$$

vektorra. Magának $\underline{x}(t)$-nek a felső becslése /kompatibilis vektor- és mátrixnormát feltételezve/ visszavezethető $\exp(tA)$ becslésére

$$\|\underline{x}(t)\| \leq \|e^{tA}\|\,\|\underline{b}\| \qquad /2.1.43/$$

alapján. Az ilymódon kapható, nagyságrendben legélesebb becslés $\|\underline{b}\|\, g(t) \exp(t\alpha(A))$ alaku, ahol $g(.)$ polinom.

Megjegyezzük, hogy a $\underline{b}$ speciális választása mellett /ha $\underline{b}$ ortogonális az $\alpha(A)$ valós részü sajátértékekhez tartozó baloldali fővektorokra/ $\underline{x}(t)$ exponenciális nagyságrendje kisebb, mint $\exp(t\alpha(A))$. Mivel ez ritkán előforduló speciális

eset, igy ennek elemzésébe nem megyünk bele.

A

$$\underline{h}(t) := e^{t(A+E)}(\underline{b}+\underline{f}) - e^{tA}\underline{b} = H(t)(\underline{b}+\underline{f}) + e^{tA}\underline{f} \qquad /2.1.44/$$

eltérés becslése, ahol $\underline{f}$ a $\underline{b}$ perturbáló vektora, ugyszintén visszavezethető $\exp(tA)$ és $H(t)$ becslésére:

$$\|\underline{h}(t)\| \le \|H(t)\|\,\|\underline{b}+\underline{f}\| + \|e^{tA}\|\,\|\underline{f}\|$$

$$\le \|e^{tA}\|\left[\phi(t)\left(\|\underline{b}\|+\|\underline{f}\|\right)+\|\underline{f}\|\right] \qquad /2.1.43/$$

Konkrét korlátok $H(t)$ és $\exp(tA)$ konkrét korlátainak az utóbbi egyenlőtlenségbe való helyettesitésével nyerhetők.

A relativ hibát itt a

$$\varphi(t) := \|\underline{h}(t)\| / \|\underline{x}(t)\| \qquad /2.1.44/$$

hányadossal definiáljuk. Ennek becsléséhez szükségünk van $\|\underline{x}(t)\|$ alsó korlátjára, amelyet a következőképpen kaphatunk meg:

$$\|\underline{x}(t)\| \ge \|e^{-tA}\underline{x}(t)\| / \|e^{-tA}\| = \|\underline{b}\| / \|e^{-tA}\|. \qquad /2.1.45/$$

/2.1.43-45/ alapján a $\varphi(t)$ relativ hiba becslése

$$\varphi(t) \le \varkappa(e^{tA})\left[\phi(t)\left(1+\frac{\|\underline{f}\|}{\|\underline{b}\|}\right)+\frac{\|\underline{f}\|}{\|\underline{b}\|}\right] \qquad /2.1.46/$$

ahol $\varkappa(\exp(tA)) = \|\exp(-tA)\|\cdot\|\exp(tA)\|$ a mátrix-exponenciális /invertálásra vonatkozó/ kondiciós száma.

A relativ hiba /2.1.46/ korlátja három részre bonatható. A csak az A mátrix perturbációjából származó relativ hiba korlátja $\varkappa(\exp(tA))\,\phi(t) \ge \phi(t)$. A csak a $\underline{b}$ kezdeti vektor perturbációjából származó relativ hiba korlátja arányos a vektor relativ hibájával, és az arányossági tényező ismét $\varkappa(\exp(tA))$. Végül a kétféle perturbáció együttes hatásából származó relativ hiba korlátjának $\varkappa(\exp(tA))\,\phi(t)\,\|\underline{f}\|/\|\underline{b}\|$

tekinthető; ez mind $\exp(tA)$, mind $\underline{b}$ relativ hibájával arányos és az arányossági tényező megint $\varkappa(\exp(tA))$.

Felmerül a kérdés, hogy milyen nagyságrendü a /2.1.46/-ban szereplő $\varkappa(\exp(tA))$ tényező. Egy egyszerü alsó korlátja /2.1.2/-ből

$$\varkappa(e^{tA}) \geq e^{t[\alpha(-A)+\alpha(A)]}, \quad t \geq 0. \qquad /2.1.47/$$

Ebből az egyenlőtlenségből $\alpha(-A)+\alpha(A) = \max_{1\leq i\leq n} \mathrm{Re}\,\lambda_i(A) - \min_{1\leq i\leq n} \mathrm{Re}\,\lambda_i(A) \geq 0$ alapján látható, hogy a $\varphi(t)$ relativ hiba korlátja általában sokkal nagyobb $\Phi(t)$-énél, ugyanis, ha van A-nak két különböző valós részü sajátértéke, akkor $\varkappa(\exp(tA)) \to \infty$ $t \to \infty$.

$\varkappa_p(\exp(tA))$ nagyságrendben pontos felső becslését például a 2.1.6. lemma alapján kaphatjuk:

$$\varkappa_p(e^{tA}) \leq \left[\varkappa_p(VD_{-1}) f_{\bar{m}_{-1}}(t)\, \varkappa_p(VD_1) f_{\bar{m}_1}(t)\right] e^{t[\alpha(-A)+\alpha(A)]}, \quad t \geq 0, \qquad /2.1.48/$$

ahol $\bar{m}_\sigma$ és D_σ rendre az $\bar{m}$ számnak és a D diagonális mátrixnak a $\sigma \cdot A$ mátrixhoz tartozó értékét jelöli, $\sigma = -1, 1$ -re. Az, hogy /2.1.48/ nagyságrendben pontos, /2.1.14/ segitségével láthatjuk be, ugyanis alkalmazva /2.1.14/-et $(-A)$-ra, kapjuk:

$$\varkappa_M(e^{tA}) \geq \left[\frac{n}{\varkappa_M(V)}\right]^2 \frac{t^{\bar{m}_{-1}+\bar{m}_1-2}}{(\bar{m}_{-1}-1)!\,(\bar{m}_1-1)!}\, e^{t[\alpha(-A)+\alpha(A)]}, \quad t \geq 0. \qquad /2.1.49/$$

Összevetve /2.1.49/-et /2.1.48/-cal /ahol $f_{\bar{m}_{-1}}(.) \cdot f_{\bar{m}_1}(.)$ $\bar{m}_{-1}+\bar{m}_1-2$ fokszámu polinom/, a mátrixnormák ekvivalenciatétele alapján következik, hogy bármely mátrixnorma esetén $\varkappa(e^{tA})$ pontos nagyságrendje $O\left(t^{\bar{m}_{-1}+\bar{m}_1-2} \exp(t[\alpha(-A)+\alpha(A)])\right)$. Ezzel lényegében következő tételünket is igazoltuk, amelyben pontosan megadjuk azt a mátrixosztályt, melyre $\varkappa(\exp(tA))$ korlátos, ha $t \in [0, \infty)$.

2.1.2. Tétel. $\varkappa(\exp(tA)) = \|\exp(tA)\|\,\|\exp(-tA)\|$ akkor és csak akkor korlátos $t \in [0, \infty)$ -en, ha az A mátrix diagonalizálható és minden sajátértékének valós része azonos.

A tétel feltétele igen erős megszoritást jelent, igy általában $\varkappa(e^{tA}) \to \infty$ /$t \to \infty$/ érvényes. De pl. teljesül az emlitett feltétel ferdén hermitikus /ferdén szimmetrikus valós/ mátrixokra, melyek normálisak /tehát diagonizálhatók/ és minden sajátértékük valós része nulla; vagy pl. 2x2-es valós mátrixra, melynek sajátértékei komplex konjugáltak.

2.2. A mátrix-exponenciális lokális érzékenységének jellemzése: az exponenciális kondiciós szám

A kondiciós szám /meghatározottsági szám/ fogalma a numerikus analizisben a lineáris egyenletrendszerek megoldásával ill. a mátrixinvertálással kapcsolatban alakult ki [52]. Egy A nemszinguláris mátrix invertálásra vonatkozó kondiciós száma, $\varkappa(A) = \|A\|\,\|A^{-1}\|$ első rendben megadja, hogy a perturbált $A+E$ mátrix kis

$$\varepsilon = \frac{\|E\|}{\|A\|} \qquad /2.2.1/$$

relativ hibája hányszoros relativ hibát eredményez az inverz mátrixban. Ugyanis $\varepsilon < 1/\varkappa(A)$ /≤ 1/ esetén, vagyis, ha $A+E$ relativ hibája nem tul nagy, érvényes az

$$\frac{\|(A+E)^{-1} - A^{-1}\|}{\|A^{-1}\|} \leq \varepsilon \frac{\varkappa(A)}{1 - \varepsilon\varkappa(A)} \qquad /2.2.2/$$

egyenlőtlenség, melyben a jobboldal gyakorlatilag $\varepsilon\varkappa(A) + O(\varepsilon^2)$. Ez azt jelenti, hogy ha a $\varkappa(A)$ szám nagy, akkor az A mátrix elemeinek viszonylag kis perturbációja is igen nagy

relativ hibát okozhat az inverz mátrixban. Ilyen esetben az A mátrixot gyengén meghatározottnak /ill-conditioned/ nevezzük /az invertálásra nézve/.

A számitási feladatok meghatározottságának, kondiciójának egy általános elméletét Rice dolgozta ki [44]. Rice elmélete alapján Van Loan [50] definiálta egy A mátrix kondiciós számát $\exp(tA)$ kiszámitására vonatkozóan. A továbbiakban e fogalmat és Van Loan ezzel kapcsolatos eredményeit ismertetjük, ill. kiegészitjük saját eredményeinkkel.

2.2.1. Definició /Van Loan [50]/. Az $A\in\mathbb{C}^{n\times n}$ mátrix t helyen vett exponenciális kondiciós száma alatt a

$$\nu(A,t) := \lim_{\delta\to 0+} \nu^{(\delta)}(A,t) \qquad /2.2.3/$$

határértéket értjük, ahol

$$\nu^{(\delta)}(A,t) := \sup_{\|E\|\le\delta\|A\|} \frac{\|e^{t(A+E)} - e^{tA}\|}{\delta\|e^{tA}\|} . \qquad /2.2.4/$$

Valamely partikuláris norma használatakor ν-re ugyanolyan alulindexezést alkalmazunk, mint az illető normára.

A definició geometriai értelmezése a következő: $r=\delta\|\exp(tA)\|\nu^{(\delta)}(A,t)$ a sugara azon legszükebb, $\exp(tA)\in\mathbb{C}^{n\times n}$ középpontu gömbnek, amely tartalmazza a $\{B\in\mathbb{C}^{n\times n} \mid \|B-A\|\le\delta\|A\|\}$ gömb $B\to\exp(tB)$ leképezés szerinti képhalmazát. Ha A elemeinek viszonylag kis változásai relative nagy változásokat okoznak $\exp(tA)$ elemeiben, akkor $\nu^{(\delta)}(A,t)$ ennek megfelelően nagy lesz.

A következő tétel a definiciónál jobban használható előállitását adja meg egy mátrix exponenciális kondiciós számának. Emlékeztetünk arra, hogy egy $F: X\to Y$ operátor Frèchet-deriváltja az $A\in X$ helyen egy olyan $D(F(A)): X\to Y$

lineáris operátor, melyre $F(A+E)-F(A)=\mathcal{D}(F(A))E+\sigma(E)$, ha

2.2.1. Tétel /Van Loan [50]/. Ha $\mathcal{D}(e^{tA})$ jelöli a $B\to e^{tB}$ leképezés Frechet-deriváltját a $B=A$ helyen, akkor

$$\nu(A,t)=\frac{\|A\|}{\|e^{tA}\|}\|\mathcal{D}(e^{tA})\|, \qquad /2.2.5/$$

ahol

$$\|\mathcal{D}(e^{tA})\|=\sup_{\|E\|=1}\left\|\int_0^t e^{(t-s)A}E\,e^{sA}\,ds\right\|. \qquad /2.2.6/$$

2.2.1. Következmény. /Van Loan [50]/. $t\geq 0$-ra

$$\nu(A,t)\geq t\frac{\|A\|}{\|I\|}, \qquad /2.2.7/$$

és ha A normális mátrix, akkor $\nu_2(A,t)=t\|A\|_2$.

Bizonyitás. $\nu(A,t)\geq\frac{\|A\|}{\|e^{tA}\|}\left\|\int_0^t e^{(t-s)A}\left[\frac{I}{\|I\|}\right]e^{sA}ds\right\|=t\|A\|$. □

és normális mátrix esetén /2.1.2/ alapján

$$\nu_2(A,t)\leq\frac{\|A\|_2}{\|e^{tA}\|_2}\int_0^t\|e^{(t-s)A}\|_2\|e^{sA}\|_2\,ds=t\|A\|_2. \quad \square$$

A 2.2.1. következmény értelmében a mátrix-exponenciális kiszámitására vonatkozólag a legjobban meghatározott mátrixosztály a normális mátrixoké, mivel ezek exponenciális kondiciós száma a lehető legkisebb (ℓ_2-norma használata esetén). Sajnos a mátrix-inverzió problémájával szemben itt elég nehéz kérdés azon mátrixok jellemzése, melyek gyengén meghatározottak olyan értelemben, hogy a $\nu(A,t)$ kondiciós szám nagy. Van Loan megmutatta [50], hogy olyan szigoruan trianguláris mátrixokra, melyek $(n-1)$-edik hatványa nemzérus, $\nu(A,t)$ $O(t^n)$ nagyságrendü nagy t-re, szemben a normális mátrixok

esetén érvényes $O(t)$ nagyságrenddel. Általános jellegü feltételt azonban mindeddig nem adtak és nincs még tisztázva $\nu(A,t)$ és A spektrális strukturájának kapcsolata sem [50]. Mi az alábbi tételben az A mátrix Jordan-féle kanonikus felbontása segitségével olyan alsó és felső korlátot adunk meg $\nu(A,t)$-re, amely pontosan meghatározza annak nagyságrendjét elég nagy t-re. Ez a nagyságrend $O(t^{\bar m})$, ahol $\bar m$ A maximális valós részü sajátértékeihez tartozó Jordan-blokkok rendjének maximuma.

2.2.2. Tétel. A 2.1.6. lemma jelölései mellett

$$\frac{\|A\|_p}{\bar m\,\varkappa_p(VD)[\varkappa_p(V)]^2}\,\frac{\max\limits_{1\le j\le 2\bar m-1}(t^j/j!)}{\max\limits_{0\le j\le \bar m-1}(t^j/j!)} \le \nu_p(A,t) \le$$

/2.2.8/

$$\le \|A\|_p\,[\bar m\,\varkappa_p(VD)]^2\varkappa_p(V)\max_{0\le j\le \bar m-1}(t^j/j!)\quad,\ t\ge 0.$$

Bizonyitás. Először a felső becslést igazoljuk, amelyhez következő alsó korlátját használjuk:

$$\|e^{tA}\|_p = \|Ve^{tJ_A}V^{-1}\|_p \ge \|e^{tJ_A}\|_p/\varkappa_p(V) = \max_{1\le i\le k} e^{t\mathrm{Re}\lambda_i}\|e^{tJ_{m_i}(0)}\|_p/\varkappa_p(V),$$

és mivel $\|\exp(tJ_{m_i}(0))\|_p \ge \|\exp(tJ_{m_i}(0))\|_M/m_i = \max\limits_{0\le j\le m_i-1}(t^j/j!)$,

igy

$$\varkappa_p(V)\|e^{tA}\|_p \ge \max_{m_i\ge\bar m} e^{t\mathrm{Re}\lambda_i}\max_{0\le j\le m_i-1}(t^j/j!) \ge \max_{m_i\ge\bar m} e^{t\mathrm{Re}\lambda_i}\max_{0\le j\le\bar m-1}(t^j/j!) = e^{t\alpha(A)}\max_{0\le j\le\bar m-1}(t^j/j!).$$

Most a 2.1.6. lemma alkalmazásával, $f_{\bar m}(.)$ monotonitása alapján

$$\nu_p(A,t) \le \frac{\|A\|_p}{\|e^{tA}\|_p}\int_0^t \|e^{(t-s)A}\|_p\,\|e^{sA}\|_p\,ds$$

$$\le \frac{\|A\|_p\int_0^t \varkappa_p(VD)f_{\bar m}(t-s)e^{(t-s)\alpha(A)}\varkappa_p(VD)f_{\bar m}(s)e^{s\alpha(A)}ds}{[\varkappa_p(V)]^{-1}\max\limits_{0\le j\le\bar m-1}t^j/j!\ e^{t\alpha(A)}}$$

$$\le \|A\|_p\,\varkappa_p(V)\,t\,[\varkappa_p(VD)f_{\bar m}(t)]^2/\max_{0\le j\le\bar m-1}(t^j/j!)\quad,$$

melyből $f_{\bar m}(t) \le \bar m \max\limits_{0\le j\le \bar m-1} (t^j/j!)$ alapján adódik a /2.2.8/-ban szereplő felső korlát.

Az alsó korlát levezetéséhez először alulról becsüljük a $D(e^{tA})$ Frèchet-derivált normáját. Legyen $E = F/\|F\|_p$, ahol

$$F := V(F_1 \oplus \ldots \oplus F_k)V^{-1} \qquad \text{és} \qquad F_j := \delta_{\bar i j}\, \underline{e}_{m_j}\underline{e}_1^T \in \mathbb{R}^{m_j\times m_j},\ j=1,\ldots,k,$$

és $\bar i$ egy olyan Jordan-blokk indexe A kanikus alakjában, melyre $m_{\bar i} = \bar m$ és $\mathrm{Re}\,\lambda_{\bar i} = \alpha(A)$ /ilyen van $\bar m$ definiciója miatt/. Ekkor

$$\|F\|_p \le \varkappa_p(V) \max_{1\le j\le k} \|F_j\|_p = \varkappa_p(V)\,\|\underline{e}_{m_{\bar i}}\underline{e}_1^T\|_p = \varkappa_p(V),$$

és

$$\|D(e^{tA})\|_{(p)} \ge \Big\|\int_0^t e^{(t-s)A}\frac{F}{\|F\|}e^{sA}\,ds\Big\|_p =$$

$$= \|V\int_0^t e^{(t-s)J_A}[F_1\oplus\ldots\oplus F_k]e^{sJ_A}\,ds\,V^{-1}\|_p/\|F\|_p \ge$$

$$\ge \Big\|\int_0^t e^{(t-s)J_{\bar m}(\lambda_{\bar i})}\,\underline{e}_{\bar m}\underline{e}_1^T\,e^{sJ_{\bar m}(\lambda_{\bar i})}\,ds\Big\|_p/[\varkappa_p(V)]^2 =$$

$$= \|\Psi(t)\|_p\, e^{t\alpha(A)}/[\varkappa_p(V)]^2,$$

ahol

$$\Psi(t) = (\psi_{ij}(t))_{\bar m\times\bar m} := \int_0^t e^{(t-s)J_{\bar m}(0)}\,\underline{e}_{\bar m}\underline{e}_1^T\,e^{sJ_{\bar m}(0)}\,ds,$$

és

$$\psi_{ij}(t) = \int_0^t \frac{(t-s)^{\bar m-i}}{(\bar m-i)!}\,\frac{s^{j-1}}{(j-1)!}\,ds = \frac{t^{\bar m-i+j}}{(\bar m-i+j)!}, \qquad i,j = 1,\ldots,\bar m.$$

Utóbbi alapján $\|\Psi(t)\|_p$ tovább becsülhető alulról

$$\|\Psi(t)\|_p \ge \frac{1}{\bar m}\|\Psi(t)\|_M = \max_{1\le j\le 2\bar m-1}(t^j/j!)$$

szerint. Ezzel már adódik $\nu_p(A,t)$ alsó becslése:

$$\nu_p(A,t) = \frac{\|A\|_p}{\|e^{tA}\|_p}\|D(e^{tA})\|_p \ge \frac{\|A\|_p\, e^{t\alpha(A)}\,[\varkappa_p(V)]^{-2}}{\varkappa_p(VD)\,f_{\bar m}(t)\,e^{t\alpha(A)}}\max_{1\le j\le 2\bar m-1}(t^j/j!),$$

ahol ismét $f_{\bar m}(t) \le \bar m \max\limits_{0\le j\le \bar m-1}(t^j/j!)$ alkalmazásával kapjuk a tételben megadott alsó korlátot. □

Ha $t \ge 2\bar m - 1$, akkor a 2.2.2. tételben szereplő alsó és felső korlát egyaránt konstans$\cdot t^{\bar m}$ alaku, ami a mátrixnormák ekvivalenciája alapján azt jelenti, hogy bármely norma esetén $\nu(A,t)$ pontos nagyságrendje $O(t^{\bar m})$.

A 2.2.2. tételben megadott korlátok kis t-re általában nem élesek, főleg ha a $\varkappa_p(V)$ ill. $\varkappa_p(VD)$ kondiciós számok nagyok. Ilyenkor kis t-re $\nu(A,t)$-nek jobb alsó becslését adja /2.2.7/; alkalmas felső becslést pedig a következőképpen nyerhetünk. Tegyük fel, hogy érvényes /2.1.23/. Ekkor

$$\nu(A,t) \le \frac{\|A\|}{\|e^{tA}\|}\int_0^t \|e^{(t-s)A}\|\,\|e^{sA}\|\,ds \le \frac{\|A\|}{e^{t\alpha(A)}}\int_0^t g(t-s)e^{(t-s)\beta}g(s)e^{s\beta}\,ds$$

$$= \|A\|\int_0^t g(t-s)g(s)\,ds\; e^{t[\beta-\alpha(A)]}$$

Ebből $\exp(tA)$ megfelelő korlátai alapján közvetlenül adódnak az alábbi becslések.

2.2.3. Tétel. A /2.1.1-3/ és /2.1.5/ lemmák jelölései mellett

(i) $\nu(A,t) \le \|A\|\, t \exp(t\, q_1(A))$, $t \ge 0$,

/ahol $q_1(A) := \mu(A) - \alpha(A)$ az A mátrix logaritmikus ineffi-cienciája/;

(ii) $\nu(A,t) \le \|A\| \int_0^t f_n(2\|A\|(t-s))\, f_n(2\|A\|s)\,ds$, $t \ge 0$;

(iii) $\nu_2(A,t) \le \|A\|_2 \int_0^t f_n(\|U\|_2(t-s))\, f_n(\|U\|_2 s)\,ds$, $t \ge 0$;

(iv) $\nu_p(A,t) \le \|A\|_p [\varkappa_p(V)]^2 \int_0^t f_m(t-s)\, f_m(s)\,ds$, $t \ge 0$.

Itt a (iv) Jordan-tipusu korlát ismét csak akkor jó kis t-re, ha $\varkappa_p(V) \approx 1$.

A relativ hiba összefüggése az exponenciális kondiciós számmal

A mátrix exponenciális kondiciós számával kapcsolatban Van Loan fő eredménye a mátrix-inverzióra vonatkozó /2.2.2/ egyenlőtlenség egy analogonjának megtalálása. Ennek ismertetéséhez vezessük be a kovetkező függvényeket:

$$\hat{\nu}(A,t) := \max_{0\le s\le t} \nu(A,s) , \qquad \vartheta(A,t) := \|A\| \int_0^t \varkappa(e^{sA})\, ds ; \qquad /2.2.9/$$

mindkettő $\nu(A,t)$ felső korlátja. Egyrészt $\nu(A,t) \le \hat{\nu}(A,t)$ nyilvánvaló, másrészt

$$\nu(A,t) = \frac{\|A\|}{\|e^{tA}\|} \sup_{\|E\|=1} \left\| e^{tA} \int_0^t e^{-sA} E\, e^{sA}\, ds \right\| \le \|A\| \sup_{\|E\|=1} \left\| \int_0^t e^{-sA} E\, e^{sA}\, ds \right\|$$

$$\le \|A\| \int_0^t \|e^{-sA}\| \, \|e^{sA}\|\, ds = \vartheta(A,t) .$$

E jelölésekkel Van Loan eredménye a következő.

2.2.4. Tétel. /Van Loan [50]/. Ha $\varepsilon := \|E\|/\|A\| < 1/\vartheta(A,t)$, $t \ge 0$, akkor

$$\phi(t) = \frac{\|e^{t(A+E)} - e^{tA}\|}{\|e^{tA}\|} \le \varepsilon \frac{\hat{\nu}(A,t)}{1 - \varepsilon \vartheta(A,t)} \qquad /2.2.10/$$

E tételnek az /2.2.2/ egyenlőtlenséggel való formai analógiája mellett két szépséghibája is van. Az egyik, hogy A bármilyen kicsiny pozitiv ε relativ hibája esetén a /2.2.10/ egyenlőtlenség csak egy véges $[0, t_\varepsilon)$ intervallumon érvényes, ahol a t_ε végpontot $\vartheta(A,t) \nearrow \infty$ /$t \to \infty$/ miatt egyértelmüen meghatározza a $\vartheta(A,t_\varepsilon) = 1/\varepsilon$ reláció. A másik, lényegesebb hiányosság az, hogy a /2.2.10/-ben szereplő korlát kis ε-ra $\varepsilon \hat{\nu}(A,t) + O(\varepsilon^2)$, holott a mátrix-inverzióval kapcsolatban e pont elején mondottak alapján azt várnánk, hogy $\phi(t)$ korlát-

jában az elsőrendü tag $\varepsilon\,\nu(A,t)$ legyen. Ez az elvárás jogos, és következő tételünkben mindkét emlitett problémát kiküszöböltük.

2.2.5. Tétel. Legyen $\phi(t) := \|e^{t(A+E)} - e^{tA}\| / \|e^{tA}\|$, $\varepsilon := \|E\|/\|A\|$.

Akkor $t \geq 0$-ra

$$\phi(t) \leq \varepsilon\,\nu(A,t) + \varepsilon^2\,\hat{\nu}(A,t)\,\vartheta(A,t)\,e^{\varepsilon\vartheta(A,t)} . \qquad /2.2.11/$$

Bizonyitás. $\phi(t) = \|\int_0^t e^{(t-s)A}\,E\,e^{s(A+E)}\,ds\| / \|e^{tA}\| \leq$

$$\leq \frac{\|\int_0^t e^{(t-s)A}\,E\,e^{sA}\,ds\|}{\|e^{tA}\|} + \frac{\|e^{tA}\int_0^t e^{-sA}\,E\,[e^{s(A+E)} - e^{sA}]\,ds\|}{\|e^{tA}\|}$$

$$\leq \varepsilon\,\nu(A,t) + \varepsilon\|A\| \int_0^t \|e^{-sA}\|\,\|e^{s(A+E)} - e^{sA}\|\,ds =$$

$$= \varepsilon\,\nu(A,t) + \varepsilon\|A\| \int_0^t \varkappa(e^{sA})\,\phi(s)\,ds$$

Innét a Bellman-Gronwall-egyenlőtlenség /2.1.8. lemma/ alkalmazásával kapjuk, hogy

$$\phi(t) \leq \varepsilon\,\nu(A,t) + \varepsilon^2\|A\| \int_0^t \nu(A,s)\,\varkappa(e^{sA})\,\exp\left(\varepsilon\|A\| \int_s^t \varkappa(e^{\tau A})\,d\tau\right) ds$$

Ebből $\hat{\nu}(A,t)$ és $\vartheta(A,t)$ tulajdonságai alapján

$$\phi(t) \leq \varepsilon\,\nu(A,t) + \varepsilon\,\hat{\nu}(A,t) \int_0^t \varepsilon\|A\|\,\varkappa(e^{sA})\,\exp\left(\varepsilon\|A\| \int_s^t \varkappa(e^{\tau A})\,d\tau\right) ds$$

$$= \varepsilon\,\nu(A,t) + \varepsilon\,\hat{\nu}(A,t)\left[\exp\left(\varepsilon\|A\| \int_0^t \varkappa(e^{sA})\,ds\right) - 1\right]$$

$$\leq \varepsilon\,\nu(A,t) + \varepsilon^2\,\hat{\nu}(A,t)\,\vartheta(A,t)\,\exp\left(\varepsilon\vartheta(A,t)\right). \quad \square$$

Az inverz mátrixra vonatkozó /2.2.2/ egyenlőtlenség egy ujabb formai analogonját kapjuk, ha bevezetjük a

$$\hat{\hat{\nu}}(A,t,\varepsilon) := \nu(A,t) + \varepsilon\,\vartheta(A,t)\left[\hat{\nu}(A,t) - \nu(A,t)\right] \qquad /2.2.12/$$

jelölést. Látható, hogy fennáll $\hat{\hat{\nu}}(A,t) \geq \nu(A,t)$, $t \geq 0$.

2.2.2. Következmény. Ha $\varepsilon := \|E\|/\|A\| < 1/\vartheta(A,t)$, $t \geq 0$, akkor

$$\phi(t) := \frac{\| e^{t(A+E)} - e^{tA} \|}{\| e^{tA} \|} \leq \varepsilon \frac{\hat{\hat{\nu}}(A,t,\varepsilon)}{1-\varepsilon\vartheta(A,t)} \qquad /2.2.13/$$

Bizonyitás. Alkalmazzuk a /2.2.11/-ben szereplő összeg második tagjában az $\exp(h) \leq 1/(1-h)$ egyenlőtlenséget, ahol $h = \varepsilon\vartheta(A,t) \in [0,1)$ és hozzuk a két tagot közös nevezőre. □

Megjegyzés. A 2.2.2. következmény még mindig erősebb, mint Van Loan eredménye /2.2.4. tétel/, mivel $\varepsilon < 1/\vartheta(A,t)$ miatt

$$\hat{\hat{\nu}}(A,t,\varepsilon) = [1-\varepsilon\vartheta(A,t)]\nu(A,t) + \varepsilon\vartheta(A,t)\hat{\nu}(A,t) \leq \hat{\nu}(A,t), \quad t \geq 0.$$

Ezenkivül az utóbbiban szereplő korlát $\varepsilon\nu(A,t) + O(\varepsilon^2)$ $/\varepsilon \to 0/$ mivel $\hat{\nu}(A,t,\varepsilon) = \nu(A,t) + O(\varepsilon)$.

2.3. Perturbációs korlátok a mátrix-exponenciális parciális deriváltjaira

E pontban a mátrix-exponenciálisnak az A mátrix paraméterei szerinti parciális deriváltjaira adunk perturbációs korlátokat. Ilyen jellegü eredményeket az irodalomban nem találtunk.

Tegyük fel tehát, hogy $A(.): \mathbb{R}^\nu \to \mathbb{C}^{n\times n}$ folytonosan differenciálható paraméter-függvény. Ekkor $\exp(tA(.))$ parciális deriváltja az r-edik paraméter szerint egy rögzitett $\underline{\theta}_0$ helyen /1.2.23/ szerint

$$Z(t) := \left.\frac{\partial e^{tA(\underline{\theta})}}{\partial\theta_r}\right|_{\underline{\theta}=\underline{\theta}_0} = \int_0^t e^{(t-s)A(\underline{\theta}_0)} \frac{\partial A}{\partial\theta_r}(\underline{\theta}_0) e^{sA(\underline{\theta}_0)}\, ds.$$

A továbbiakban az egyszerüség kedvéért hagyjuk el a paraméterfüggés jelölését /mivel $\underline{\theta}_0$ rögzitett/ és legyen

$$A := A(\underline{\theta}_0) \ , \qquad B := \frac{\partial A}{\partial \theta_r}(\underline{\theta}_0) \ .$$

E jelölésekkel

$$Z(t) = \int_0^t e^{(t-s)A} B e^{sA} ds \qquad /2.3.1/$$

Tegyük most fel, hogy az A mátrixot E-vel, B-t pedig F-fel perturbáljuk. Célunk a $Z(t)$ és perturbáltja közti

$$G(t) = \int_0^t e^{(t-s)(A+E)}(B+F)e^{s(A+E)} ds - \int_0^t e^{(t-s)A} B e^{sA} ds \qquad /2.3.2/$$

eltérés-mátrix becslése lesz. Ehhez a következő lemmát használjuk fel.

2.3.1. Lemma. Ha $\|e^{tA}\| \le g(t) e^{t\beta}$, ahol $g(.)$ monoton nemcsökkenő $[0,\infty)$-en, akkor $t \ge 0$ -ra

$$\|G(t)\| \le \exp\left(t\beta + \|E\| \int_0^t g(s) ds\right) \int_0^t g(t-s) g(s) ds \cdot \left[\|F\| + 2\|E\|\|B\| \int_0^t g(s) ds\right] \qquad /2.3.3/$$

Bizonyitás. Egyszerü átalakitással kapjuk, hogy

$$G(t) = \int_0^t e^{(t-s)(A+E)} F e^{s(A+E)} ds + \int_0^t e^{(t-s)(A+E)} B H(s) ds + \int_0^t H(s) B e^{(t-s)A} ds,$$

ahol $H(.)$ /2.1.24/ szerint definiált. Innét normákra áttérve, a feltevések és a 2.1.1. tétel alkalmazásával kapjuk, hogy

$$\begin{aligned}
G(t) &\le \|F\| \int_0^t g(t-s) e^{(t-s)\beta} e^{\|E\| \int_0^{t-s} g(\tau) d\tau} g(s) e^{s\beta} e^{\|E\| \int_0^s g(\tau) d\tau} ds \\
&+ \|B\| \int_0^t g(t-s) e^{(t-s)\beta} e^{\|E\| \int_0^{t-s} g(\tau) d\tau} g(s) e^{s\beta} \left[e^{\|E\| \int_0^s g(\tau) d\tau} - 1\right] ds \\
&+ \|B\| \int_0^t g(s) e^{s\beta} \left[e^{\|E\| \int_0^s g(\tau) d\tau} - 1\right] g(t-s) e^{(t-s)\beta} ds \le \\
&\le \|F\| e^{t\beta} e^{\|E\| \int_0^t g(s) ds} \int_0^t g(t-s) g(s) ds \\
&+ \|B\| e^{t\beta} \int_0^t g(t-s) g(s) \left[e^{\|E\| \int_0^t g(\tau) d\tau} - 1\right] ds \\
&+ \|B\| e^{t\beta} \left[e^{\|E\| \int_0^t g(s) ds} - 1\right] \int_0^t g(t-s) g(s) ds =
\end{aligned}$$

$$= e^{t\beta} e^{\|E\| \int_0^t g(s)ds} \int_0^t g(t-s)\, g(s)ds \left[\|F\| + 2\|E\|\|B\| \int_0^t g(s)\, ds \right]. \quad \square$$

A 2.3.1. lemma azt mutatja, hogy nagy t-re / $g(s) \geq 1$ miatt/ a hiba/korlát/ nagyságát $\|F\|$ nemigen befolyásolja, az elsősorban $\|E\|$ ill. $\|B\|$ nagyságától függ. A mátrix-exponenciális esetéhez hasonlóan itt is minden olyan perturbációs korlát, melyben $g(.)$ nemkonstans polinom, igen gyorsan tart a végtelenbe, ha $t \to \infty$ /az $E = 0$ triviális esetet kivéve/.

Konkrét perturbációs korlátokat a mátrix-exponenciálisra vonatkozó korlátokból közvetlenül nyerhetünk a 2.3.1. lemma alkalmazásával; ezekre itt nem térünk ki, csupán megemlitjük, hogy ha A normális mátrix, akkor az optimális

$$\|G(t)\|_2 \leq t\left(\|F\|_2 + 2t\|E\|_2\|B\|_2\right) e^{t[\alpha(A)+\|E\|_2]}, \quad t \geq 0 \qquad /2.3.4/$$

becslés érvényes.

3. ELJÁRÁSOK A MÁTRIX-EXPONENCIÁLIS KISZÁMITÁSÁRA

E fejezetben három módszert vizsgálunk meg a mátrix-exponenciális/$\exp(tA)$/ ill. $\exp(tA)\underline{b}$ kiszámitására: a négyzeteléssel kombinált Taylor-soros módszert, a spektrálfelbontás módszerét, valamint a minimálpolinom-módszert. A müvelet- ill. memóriaigény szempontjából az első módszer csak $\exp(tA)$ számitására hatékony, a harmadik $\exp(tA)\underline{b}$ számitására, a második mindkettőre, azonban gyengén meghatározott sajátérték-probléma esetén pontatlan.

Vizsgálatunkban kitérünk az emlitett három módszer alkalmazhatóságának feltételeire, elemezzük a kerekitési hibák hatását és észrevételeket teszünk a pontosság szempontjából fontos számitási részletekkel kapcsolatban is.

Az emlitett módszereken kivül számos más eljárás ismeretes: Moler és Van Loan összefoglaló cikke [38] 19 "kétes értékü" /dubious/ módszert különböztet meg. Ezek az emlitett három módszeren kivül magukban foglalják a diszkretizációs módszereket, Padé-approximációt, racionális Csebisev-approximációt, különféle interpolációs polinomok/Lagrange, Newton, Hermite/ alkalmazását, hasonlósági transzformációt speciális alaku /Jordan, trianguláris, blokk trianguláris, Frobenius/ mátrixokra, stb. E további módszerek tulajdonságaira ill. kritikájára vonatkozóan a [38] cikkre utalunk.

3.1. Taylor-sor és négyzetelés módszere

Ebben a pontban először a Taylor-sor-módszerrel és a négyzeteléssel kapcsolatos numerikus problémákat tárgyaljuk. Ezután a Taylor-soros módszerrel kapott közelités hibájának a négyzetelés során való terjedésének jellemzésére definiáljuk egy mátrix hatványozásra vonatkozó kondiciós számát és elemezzük annak tualjdonságait, rámutatva a Van Loan által bevezetett exponenciális kondiciós számmal való kapcsolatára.

A Taylor-sor-módszer és módositásai

Az egyik legkézenfekvőbb módszer $\exp(tA)$ számitására - melyet többen is ajánlottak az alkalmazási irodalomban [6,14, 30, 31, 35] - a definiáló mátrix-hatványsor egy véges részletösszegével való közelités:

$$e^{tA} \approx f_N(tA) := \sum_{i=0}^{N-1} \frac{(tA)^i}{i!} \qquad /3.1.1/$$

E közelités képlethibájára nézve könnyen beláthatók a következő egyenlőtlenségek /feltéve, hogy $N+1 > \|tA\|$ /:

$$\|e^{tA} - f_N(tA)\| \begin{cases} \leq e^{\|tA\|} - f_N(\|tA\|) \\ \leq \dfrac{\|(tA)^N\|}{N!} \dfrac{1}{1 - \dfrac{\|tA\|}{N+1}} \end{cases} \leq \frac{\|tA\|^N}{N!} \frac{1}{1 - \frac{\|tA\|}{N+1}} \,. \qquad /3.1.2/$$

A /3.1.2/ becslést figyelembe véve $\exp(tA)$ elvileg tetszőleges pontossággal meghatározható, ha a hatványsorból számitásba vett tagok N számát elég nagyra választjuk.

Azonban a módszer e formájában nem tekinthető egy gyakorlati módszernek $\|tA\|>1$ esetben. Ennek egyik oka, hogy N-t általában viszonylag nagyra kell választani a pontossági kritérium kielégitése érdekében, és emiatt a módszer sok mátrixmüveletet igényel. Például a legegyszerübb $tA=(-6)\in\mathbb{R}^{1\times1}$ skaláris esetben az $\varepsilon=0.0001$ relativ pontosság eléréséhez legalább $N=27$ tag figyelembe vételére van szükség, ami soknak minősithető, tekintve, hogy $\|tA\|=6$ nem tul nagy 1-hez képest.

Talán az előzőnél is sulyosabb problémát jelent $\|tA\|>1$ esetben a sorösszegzésnél fellépő jegyveszteség, amely a számoláshoz felhasznált számitógépi lebegőpontos aritmetika végességéből adódik. Ugyanis ilyenkor az összegzésben szereplő $(tA)^i/i!$ mátrixok normája /i növekedésével/ általában először növekszik és csak azután csökken. A $(tA)^i/i!$ mátrixszal végzett összeadás során ennek elemeihez viszonyitva kis helyiértékü jegyek elvesznek. Ez a jegyveszteség jelentős hibát okoz abban az esetben, ha valamely i-re $\|(tA)^i/i!\| >> \|\exp(tA)\|$, mivel ekkor a végeredménynek /relative/ nagyobb helyiértékü jegyeit érinti. E probléma elsősorban a gyakorlatban legfontosabb stabil tipusu mátrixoknál jelentkezik, mivel ezeknél $\exp(tA)\to0$ /$t\to\infty$/ miatt $\|tA\|>>1$ esetén $\|\exp(tA)\|<<1$. Ilyen mátrixoknál tA egymást követő hatványaiban az elemek gyakran ellenkező előjelüek, ami növeli a jegyveszteséget. A Taylor-soros módszer gyengéit jól illusztrálja a [38] cikkben közölt 2x2-es példamátrix, amelynél az $p_N(tA)$ részletösszeg-sorozat /gépi/ konvergenciájához N=59 tagra volt szükség és a kapott végeredmény egyetlen értékes jegyet sem tartalmazott, sőt bizonyos elemei nagyságrendben ill. előjelben is eltértek a helyes eredménytől.

Az emlitett problémák miatt a Taylor-sor módszert csak akkor célszerü alkalmazni $\exp(tA)$ számitására, ha $\|tA\| \leq 1$. Hogyha ez a feltétel nem teljesül, akkor a módszert csak valamilyen módositott formában érdemes alkalmazni, ahol a módositás lényege a feladat visszavezetése egy olyan mátrix exponenciálisának kiszámitására melynek normája már nem nagyobb egynél. Ward [51] a mátrix-exponenciális tulajdonságai alapján az alábbi három normaredukáló eljárást javasolta:

(i) [spektrumeltolás] Ha $A_1 = A - (tr(A)/n)\,I$, akkor

$$\sum_{i=1}^{n} |\lambda_i(A_1)|^2 \leq \sum_{i=1}^{n} |\lambda_i(A)|^2 \quad \text{és} \quad e^{tA} = e^{t\cdot\frac{tr(A)}{n}} \cdot e^{tA_1} \qquad /3.1.3/$$

/E transzformáció alapján remélhető, hogy $\rho(A_1) \leq \rho(A)$ és $\|tA_1\| \leq \|tA\|$. /

(ii) [kiegyensulyozás] Legyen $A_2 = D_1^{-1} A_1 D_1$, ahol $\|D_1^{-1} A_1 D_1\| = \min_{D \text{ diagonális}} \|D^{-1} A_1 D\|$. Akkor

$$e^{tA_1} = D_1 e^{tA_2} D_1^{-1}. \qquad /3.1.4/$$

A gyakorlatban nem fontos a pontosan minimalizáló D_1 mátrix megkeresése, hanem megfelel pl. a Parlett-Reinsch-féle kiegyensulyozó eljárás /[54], 315. o./, melyben D_1 diagonális elemei a lebegőpontos számrendszer alapjának egészkitevős hatványai. Utóbbi előnye, hogy mind A_2 képzése, mind a /3.1.4/ visszatranszformálás kerekitési hiba nélkül végezhető el.

(iii) [négyzetelés] Legyen $K := \min\{k \geq 0 \mid \|tA\|_2 \leq 2^k\}$ és $h := 2^{-K} t$. Akkor $\|hA\|_2 \leq 1$ és

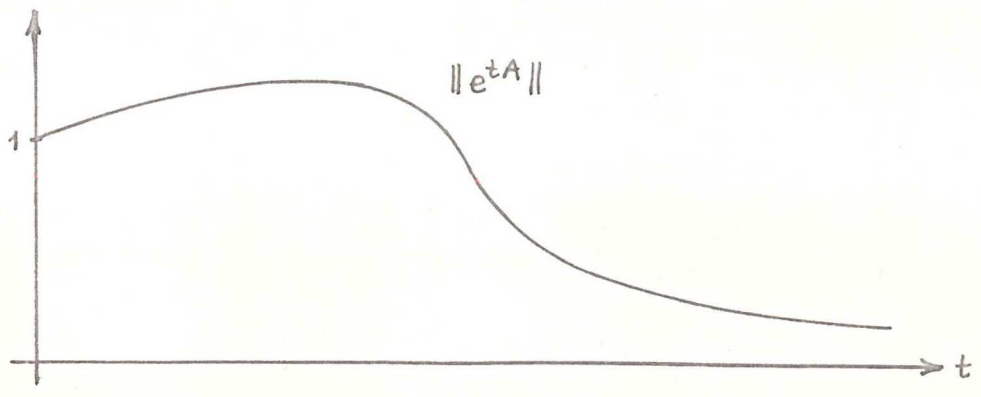
$$e^{tA_2} = \left[e^{hA_2}\right]^{2^K} = \underbrace{[\ldots[[e^{hA_2}]^2]^2\ldots]^2}_{K\text{-szor}}. \qquad /3.1.5/$$

Megjegyezzük, hogy Ward az (i)-(iii) normaredukáló eljárásokat a Padé-approximáció módszerével kombinálva alkalmazta,

amely a Taylor-sor-módszerhez hasonlóan szintén csak $\|tA\| \leq 1$ esetben hatékony és pontos.

Az (i) és (ii) eljárásokkal egy mátrix normája csak bizonyos határok közt redukálható, mig (iii) alkalmazásával tetszés szerinti redukció elérhető. Ezért a továbbiakban a négyzetelés módszerével foglalkozunk csak részletesebben, és az egyszerőség kedvéért A_2 helyett A-t irunk.

A négyzetelés módszerénél a kerekitési hibák szempontjából a következő probléma merül fel. Mivel itt K számu mátrixszorzást végzünk az $\exp(hA)$ mátrixból kiindulva, $\exp(tA) = [\exp(hA)]^{2^K}$ végeredményként kapott közelitésének kerekitési hibakorlátja $\|\exp(hA)\|^{2^K}$ -nal lesz /durván/ arányos $\|\exp(tA)\|$ helyett /vö. [38]/, ami igen nagy relativ hibát tesz lehetővé, ha az utóbbi két mennyiség aránya egynél sokkal nagyobb. Ez a probléma különösen hangsulyozottan jelentkezik stabil A mátrix esetén, mivel ilyenkor elég nagy t-re $\|\exp(tA)\| < 1$, viszont $\mu(A) > 0$ esetén könnyen előfordulhat /vö. 2.1.1. következmény/, hogy $\|\exp(hA)\| > 1$ és ha K elég nagy, akkor $\|\exp(hA)\|^{2^K} >> 1$. Ezt a stabil mátrixoknál gyakran előforduló esetet Moler és Van Loan [38] "pup-jelenségnek" nevezték el, mivel ilyenkor $\|\exp(tA)\|$ grafikonja egy puppal kezdődik, mint azt a következő ábra mutatja.



Abban az esetben, amikor $\mu(A) \leq 0$, a 2.1.1. következmény szerint $\|\exp(tA)\|$ monoton nemnövő t-ben és a pup-jelenség nem fordulhat elő. Ez a helyzet pl. stabil normális mátrixoknál, mivel $\mu_2(A) = \alpha(A) < 0$. Összefoglalva megállapithatjuk, hogy a négyzetelés módszere stabil tipusu mátrixokra $\mu(A) > 0$ esetén a kerekitési hibák felnövekedése miatt numerikusan instabil.

Az öröklött hiba terjedése a négyzetelés módszerében

Tegyük fel, hogy a Taylor-sor-módszerrel /vagy más uton/ meghatároztuk $B = \exp(hA)$-nak egy $B+E$ közelitését, ahol az E hibamátrix kicsiny, és erre alkalmazzuk a négyzetelés módszerét a /3.1.5/ kélet szerint. Ekkor /ha a négyzetre emeléseknél elkövetett kerekitési hibáktól eltekintünk/ $\exp(tA) = B^{2^K}$ helyett eredményül a $(B+E)^{2^K}$ mátrix adódik. Az alábbiakban megvizsgáljuk, hogy egy B mátrix E perturbáicója milyen mértékü eltérést okozhat a k-adik hatványban /négyzetelésnél $k = 2^K$/. Az alábbi tételben megadott három perturbációs korlát közül a középső érvényességét /tőlünk eltérő módon/ Kanyár és Tóth [31] is igazolta.

3.1.1. Tétel. Legyen $B, E \in \mathbb{C}^{n \times n}$ és k természetes szám. Akkor

$$\|(B+E)^k - B^k\| \leq \left\{ \begin{array}{ll} \|E\| \dfrac{\|B+E\|^k - \|B\|^k}{\|B+E\| - \|B\|} & , \text{ha } \|B+E\| \neq \|B\| \\ k\|E\|\|B\|^{k-1} & , \text{ha } \|B+E\| = \|B\| \end{array} \right\} \leq$$

$$\leq \left(\|B\| + \|E\|\right)^k - \|B\|^k \leq k\|E\|\left(\|B\| + \|E\|\right)^{k-1} \qquad /3.1.6/$$

Bizonyitás. Először a tételben megadott legélesebb korlát érvényességét igazoljuk teljes indukcióval. $k = 0$-ra az állitás nyilvánvaló. Ezután az indukciós feltevést kihasználva,

$$\|(B+E)^{k+1}-B^{k+1}\| = \|EB^k + (B+E)[(B+E)^k - B^k]\| \le$$

$$\le \|E\|\,\|B^k\| + \|B+E\|\,\|(B+E)^k - B^k\| \le$$

$$\le \|E\|\,\|B\|^k + \|B+E\| \cdot \begin{cases} \|E\| \dfrac{\|B+E\|^k - \|B\|^k}{\|B+E\| - \|B\|}, & \|B+E\| \neq \|B\| \\ k\,\|E\|\,\|B\|^{k-1}, & \|B+E\| = \|B\| \end{cases} =$$

$$= \begin{cases} \|E\| \dfrac{\|B+E\|^{k+1} - \|B\|^{k+1}}{\|B+E\| - \|B\|}, & \|B+E\| \neq \|B\| \\ (k+1)\|E\|\,\|B\|^k, & \|B+E\| = \|B\| \end{cases}$$

amivel az első egyenlőtlenséget igazoltuk. A további egyenlőtlenségek $\|B+E\| \le \|B\| + \|E\|$ alkalmazásával az $(x^k - a^k)/(x-a)$ $(x, a \ge 0)$ és $k x^{k-1}$ $(x \ge 0)$ függvények x szerinti monotonitásából a középértéktétel segitségével következnek. □

A tételben becsült $\|(B+E)^k - B^k\|$ mennyiség $k \to \infty$ -re 0-hoz tart, ha $\rho(B) < 1$ és E elég kicsiny ahhoz, hogy $\rho(B+E) < 1$ is fennáll. A $B = \exp(kA)$ mátrixra a $\rho(B) < 1$ feltétel ekvivalens azzal, hogy $\alpha(A) < 0$, azaz A stabil. Ezzel szemben a tételben megadott felső korlátok csak akkor tartanak 0-hoz, ha $\|B\| < 1$ és $\|B+E\| < 1$ az első korlát esetén ill. $\|B\| + \|E\| < 1$ a többinél.

A tételben szereplő kolrátok levezetésében alkalmaztuk a $\|B^k\| \le \|B\|^k$ egyenlőtlenséget, ami bizonyos mátrixoknál nem ad elég éles becslést. A mátrixhatványok perturbációra való érzékenysége - mint azt alább látni fogjuk - optimális akkor, ha ez az egyenlőtlenség éles. Hogy ezt az állitást pontosithassuk, először definiáljuk egy B mátrix hatványozásra vonatkozó /relativ/ kondiciós számát, Rice [44] elméletével összhangban.

3.1.1. Definició. Egy $B \in \mathbb{C}^{n\times n}$ mátrix k-adik hatvány képzésére vonatkozó kondiciós száma alatt az

$$N(B,k) := \frac{\|B\|}{\|B^k\|} \lim_{\delta\to 0+} \sup_{\|E\|\le\delta} \frac{\|(B+E)^k - B^k\|}{\delta} \qquad /3.1.7/$$

határértéket értjük, amennyiben $B^k \neq 0$.

A kondiciós számnak itt is hasonló geometriai jelentés tulajdonitható, mint az exponenciális kondiciós szám esetében /2.2.pont/, és kiszámitása itt is visszavezethető a k-adik hatványt kéző operátor Frèchet-deriváltjának normájára.

3.1.2. Tétel.

$$N(B,k) = \frac{\|B\|}{\|B^k\|} \sup_{\|E\|=1} \left\| \sum_{i=1}^{k} B^{i-1} E B^{k-i} \right\| . \qquad /3.1.8/$$

Bizonyitás. Rice [46] cikkének 4. tétele értelmében

$$N(B,k) = \frac{\|B\|}{\|B^k\|} \|D(B^k)\| ,$$

ahol $D(B^k)$ az $F(A) = A^k$, $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ relációval definiált operátor Fréchet-deriváltja a B helyen. Könnyen látható, hogy

$$(B+E)^k - B^k = \sum_{i=1}^{k} B^{i-1} E B^{k-i} + O(\|E\|^2)$$

amiből következik, hogy a /3.1.8/-ban szereplő szuprémum valóban $D(B^k)$ normájának felel meg. □

3.1.1. Következmény.

$$k \le N(B,k) \le k \frac{\|B\|^k}{\|B^k\|} , \qquad /3.1.9/$$

és ha B normális mátrix, akkor $N_2(B,k) = k$.

Bizonyitás.

$$N(B,k) \ge \frac{\|B\|}{\|B^k\|} \left\| \sum_{i=1}^{k} B^{i-1} \frac{B}{\|B\|} B^{k-i} \right\| = k ,$$

valamint

$$N(B,k) \le \frac{\|B\|}{\|B^k\|} \sup_{\|E\|=1} \sum_{i=1}^{k} \|B\|^{i-1} \|E\| \|B\|^{k-i} = k \frac{\|B\|^k}{\|B^k\|} .$$

Másrészt, ha B normális mátrix, akkor $B = Q\Lambda Q^H$, ahol Q unitér és Λ di-

agonális, továbbá $\|B^k\|_2 = \|Q\Lambda^k Q^H\|_2 = \|\Lambda^k\|_2 = \|\Lambda\|_2^k = \|B\|_2^k$ és igy /3.1.9/-ből következik $N_2(B,k) = k$. □

Látjuk tehát, hogy a normális mátrixok kondicionáltsága nemcsak a mátrix-exponenciális kiszámitására nézve optimális, hanem a hatványozásra nézve is. Mivel $\exp(tA)$ négyzeteléssel való számitásakor a $B = \exp(hA)$ mátrixot emeljük $k = 2^K$-adik hatványra /ahol $h = t/k$ /, igy az a kedvező, ha $\exp(hA)$ normális mátrix, ami azonban a mátrix-exponenciális (D) tulajdonsága /1.2.9. tétel/ következtében ekvivalens azzal, hogy maga A is normális.

Az $N(B,k)$ kondiciós szám első rendben jellemzi a relativ hiba terjedését B k-adik hatványra emelésekor, mint azt az alábbi tétel mutatja.

3.1.3. Tétel. Legyen $B+E$ relativ hibája $\varepsilon := \|E\|/\|B\|$. Akkor

$$\frac{\|(B+E)^k - B^k\|}{\|B^k\|} \le N(B,k)\cdot\varepsilon + \frac{\|B\|^k}{\|B^k\|}\left[(1+\varepsilon)^k - k\varepsilon - 1\right]. \qquad /3.1.10/$$

Bizonyitás.
$$\frac{\|(B+E)^k - B^k\|}{\|B^k\|} = \frac{\|\sum_{i=1}^{k} B^{i-1} E B^{k-i} + \text{többi tag}\|}{\|B^k\|}$$
$$\le \frac{\|\sum_{i=1}^{k} B^{i-1} E B^{k-i}\|}{\|B^k\|} + \frac{\sum_{i=2}^{k} \binom{k}{i} \|E\|^i \|B\|^{k-i}}{\|B^k\|}$$
$$\le \frac{\|E\|}{\|B\|} N(B,k) + \sum_{i=2}^{k} \binom{k}{i} \left(\frac{\|E\|}{\|B\|}\right)^i \cdot \frac{\|B\|^k}{\|B^k\|} \cdot \square$$

A tételben megadott felső korlát $\varepsilon \le 1$ esetén $N(B,k)\varepsilon + O(\varepsilon^2)$, mivel ekkor $(1+\varepsilon)^k - k\varepsilon - 1 \le \varepsilon^2 2^k$.

A fentiekben láttuk, hogy a hatványozásra vonatkozó kondiciós szám ugyanugy optimális a normális mátrixok osztályára, mint a 2.2. pontban vizsgált exponenciális kondiciós szám. A továbbiakban megmutatjuk, hogy a négyzetelés módsze-

rének alkalmazása esetén még szorosabb kapcsolat is van a kétféle kondiciós szám között.

Először tegyük fel, hogy A normális mátrix és $\|tA\|_2 = k$ egész. Ekkor a 2.2.1. következmény szerint $\nu_2(A,t) = t\|A\|_2 = k$. Amennyiben $k = 2^K$, ugy a négyzetelés módszere a $B = \exp(tA/k)$ mátrix k-adik hatványra emelését jelenti. Viszont ilyenkor B is normális, tehát $N_2(B,k) = N_2(\exp(tA/k), k) = k = \nu_2(A,t)$, azaz az A mátrix exponenciális kondiciós száma <u>megegyezik</u> a hatványozandó $\exp(tA/k)$ mátrix hatványozásra vonatkozó kondiciós számával.

Ha A nem normális, de k elég nagy, akkor bizonyos közelitőleges kapcsolat szintén létesithető $N(\exp(tA/k), k)$ és $\nu(A,t)$ között. Ugyanis

$$N(e^{tA/k}, k) = \frac{\|e^{tA/k}\|}{\|e^{tA}\|} \sup_{\|E\|=1} \left\| \sum_{i=1}^{k} e^{\frac{i-1}{k}tA} E\, e^{\frac{k-i}{k}tA} \right\| \approx (\geq)$$

$$\approx \frac{k/t}{\|e^{tA}\|} \sup_{\|E\|=1} \left\| \frac{t}{k} \sum_{i=1}^{k} e^{i\frac{t}{k}A} E\, e^{(t-i\frac{t}{k})A} \right\| \approx$$

$$\approx \frac{k/t}{\|e^{tA}\|} \sup_{\|E\|=1} \left\| \int_0^t e^{sA} E\, e^{(t-s)A} ds \right\| = \frac{k}{\|tA\|} \nu(A,t), \qquad /3.1.11/$$

és igy $\|tA\| \approx k$ esetén $N(\exp(tA/k), k) \approx \nu(A,t)$. Bár e levezetés során eléggé durva közelitéseket alkalmaztunk, a kapcsolat szorossága a két kondiciós szám között mégis figyelemre méltó. Leszürhetjük belőle azt a következtetést, hogy a négyzetelés módszere csak akkor növeli meg erősebben az öröklött relativ hibákat, ha $\exp(tA)$ kiszámitásának problémája eleve gyengén meghatározott.

Hogy a /3.1.11/ közelités nem lehet tulságosan rossz, alátámasztja a következő becslés is, melyet /3.1.9-ből/

/2.1.1-2/ alapján kapunk $N(\exp(tA/k), k)$ -ra:

$$k \le N(e^{tA/k}, k) \le k \frac{[e^{t\mu(A)/k}]^k}{e^{t\alpha(A)}} = k\, e^{t q(A)} \quad , t \ge 0. \quad /3.1.12/$$

Ugyanezt a becslést kapnánk akkor is, ha /3.1.11/-ben helyére annak a 2.2.3. tételbeli (i) korlátját irnánk.

A Taylor-soros és négyzetelési módszer müvelet- és memóriaigénye

A Taylor-sor-módszer müveletigénye $\exp(tA)$ számolása esetén /N tagot figyelembe véve/ $(N-2)n^3 + O(n^2)$, $\exp(tA)\underline{b}$ számolása esetén $(N-1)n^2 + O(n)$, ahol egy müvelet alatt egy szorzás /vagy osztás/ + egy összeadás /vagy kivonás/ értendő. A memóriaigény A tárolására n^2, az eredmény tárolására pedig $\exp(tA)$ esetén n^2, $\exp(tA)\underline{b}$ esetén pedig n memóriarekesz.

A négyzetelés müveletigénye $K \cdot n^3$, ahol $K \approx \log_2 \|tA\|$, memóriaigénye ugyanaz, mint a megelőző Taylor-sor-módszeré. Ha csak az $\exp(tA)\underline{b}$ vektor-problémát akarjuk megoldani, akkor a négyzeteléssel kombinált Taylor-sor módszernél nincs mód a müveletigény $O(n^2)$-re való csökkentésére. Ez a nagyságrendi csökkentés elérhető, ha négyzetelés helyett k-szori szorzást alkalmazunk, ahol $k := \min\{i \ge 0 \mid \|tA\| \le i\}$. Ekkor

$$e^{tA}\underline{b} = [e^{tA/k}]^k \underline{b} = \underbrace{e^{tA/k} \cdot [e^{tA/k} \cdot \ldots \cdot [e^{tA/k}}_{k\text{-szor}} \cdot \underline{b}\,]\ldots.]\,,$$

és a müveletigény kn^2, ahol $k \approx \|tA\|$. A vektor-problémára az utóbbi eljárást akkor érdemes alkalmazni a négyzetelés helyett, ha $n^2 \|tA\| < n^3 \log_2 \|tA\|$.

Külön emlitést érdemel az az eset, amikor $\exp(tA)$ vagy $\exp(tA)\underline{b}$ értékeit egy $t = h, 2h, \ldots, mh$ ekvidisztáns pontsoro-

zaton kell kiszámolni. Ilyenkor célszerü kiszámolni először az $\exp(hA)$ mátrixot a négyzeteléssel kombinált Taylor-sor-módszerrel, majd az egymást követő pontokban felvett értékeket $\exp(hA)$-val való szorzás utján; nem pedig minden pontra függetlenül számolni $\exp(tA)$ -t.

3.2. Spektrálfelbontás módszere

Amennyiben ismernénk az A mátrix Jordan-féle kanonikus felbontását, ugy $\exp(tA)$ számolása t különböző értékeire az 1.2.10. tételben megadott explicit képlet alapján elméletileg igen egyszerü lenne. A fő probléma a gyakorlatban az, hogy lebegőpontos aritmetika alkalmazásával a Jordan-féle kanonikus alak nem határozható meg megbizhatóan. Ennek fő oka, hogy a hasonlósági transzformációk elvégzésekor elkövetett kerekitési hibák miatt a többszörös sajátértékek általában különbözőekbe mennek át, amelyekhez tartozó sajátvektorok közel párhuzamosak. Igy defektiv mátrix esetén is általában egy $\mathcal{J}_A = \Lambda$ diagonális mátrixhoz és egy olyan V sajátvektor-mátrixhoz jutunk, amely közel szinguláris. Ennélfogva a defektiv mátrixok gyakorlatilag nem különithetők el a gyengén meghatározott sajátértékproblémáju diagonalizálható mátrixoktól, amelyekre a

$$\mathcal{G}(A) := \inf_{A=V\Lambda V^{-1}} \varkappa(V) \qquad /3.2.1/$$

Jordan-féle kondiciós szám /[55], 83. o./ nagy. Ezt a problémát részletesen tárgyalja a pl. Golub és Wilkinson [18].

A defektiv mátrixok Jordan-féle kanonikus alakjának numerikus meghatározásával kapcsolatban emlitett nehézségek miatt eleve csak arra az esetre szoritkozunk, amikor $\mathcal{J}_A = \Lambda$ diagonális, tehát

$$A = V \Lambda V^{-1} \text{ , ahol } \quad \Lambda = \begin{bmatrix} \lambda_1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \lambda_n \end{bmatrix}, \qquad /3.2.2/$$

és igy

$$e^{tA} = V e^{t\Lambda} V^{-1} \text{ , ahol } \quad e^{t\Lambda} = \begin{bmatrix} e^{t\lambda_1} & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & e^{t\lambda_n} \end{bmatrix}. \qquad /3.2.3/$$

Amennyiben A sajátértékproblémája gyengén meghatározott /pl. A közel defektiv/, $\mathcal{J}(A)$ és $\varkappa(V)$ nagy, és ilyenkor mind a sajátértékek, mind a sajátvektorok csak nagy hibával számolhatók még stabil módszer /pl. a QR-algoritmus [54]/ alkalmazása esetén is. Ugyanis az alkalmazott módszer numerikus stabilitása csak azt biztositja, hogy a számolt sajátértékek és sajátvektorok pontosak lesznek egy olyan $A+E$ mátrixra, amely közel van A-hoz [54], de gyengén meghatározott sajátprobléma esetén a két mátrix sajátértékei és sajátvektorai közt igen nagy eltérés lehet kis E mellett is. Ez utóbbi önmagában nem lenne probléma, mivel végső célunk $\exp(tA)$ közelitése.

Tegyük fel tehát, hogy a számolt sajátértékekből és sajátvektorokból képzett $\tilde{\Lambda}$ /diagonális/ és $\tilde{V}$ mátrix egy $A+E$ mátrix

$$A + E = \tilde{V} \tilde{\Lambda} \tilde{V}^{-1} \qquad /3.2.4/$$

spektrálfelbontását adják, ahol $\|E\| / \|A\|$ kicsiny. Ekkor a relativ hiba nagysága a 2.2.5. tétel szerint

$$\phi(t) = \frac{\| e^{t(A+E)} - e^{tA} \|}{\| e^{tA} \|} = \nu(A,t) \frac{\|E\|}{\|A\|} + \mathcal{O}\left(\left[\frac{\|E\|}{\|A\|} \right]^2 \right), \qquad /3.2.5/$$

tehát elsősorban az A mátrix exponenciális kondiciós számától függ. Mivel $\|E\|/\|A\|$ kicsiny, a $\phi(t)$ relativ hiba csak a mátrix-exponenciális kiszámitására nézve gyengén meghatározott mátrixok esetén lehet nagy. Ez azt jelenti, hogy a spektrálfelbontási módszer numerikusan stabil módszer lenne, ha a /3.2.3/ képletet pontosan tudnánk számolni.

Azonban, ha $\varkappa(\tilde{V})$ nagy, azaz a számolt sajátvektorok mátrixa gyengén meghatározott mátrix, akkor $\tilde{V}^{-1}$ képzésekor a kerekitésekből eredő hiba igen nagy lesz. Például a részleges főelemkiválasztásos Gauss-elimináció alkalmazása esetén az inverz kerekitési hibaanalizisből ismert [52], hogy $\tilde{V}$ inverze helyett egy perturbált $\tilde{\tilde{V}} = \tilde{V} + F$ mátrix inverzét kapjuk meg, ahol

$$\|F\| \leq c\,\|\tilde{V}\|, \qquad c = O(u) \qquad /3.2.6/$$

és ahol u a lebegőpontos aritmetika relativ pontossága /pl. β alapu számábrázolás és d-jegyü mantissza esetén $u = \frac{1}{2}\beta^{1-d}$/. Igy $\exp(t[A+E]) = \tilde{V}\exp(t\tilde{\Lambda})\tilde{V}^{-1}$ helyett a $\tilde{V}\exp(t\tilde{\Lambda})\tilde{\tilde{V}}^{-1}$ kifejezést számoljuk, és az ebből adódó hiba becslése /3.2.6/ felhasználásával

$$\|\tilde{V}\exp(t\tilde{\Lambda})[\tilde{V}^{-1} - \tilde{\tilde{V}}^{-1}]\| \leq \|\tilde{V}\exp(t\tilde{\Lambda})\tilde{V}^{-1}\|\,\|I - \tilde{V}\tilde{\tilde{V}}^{-1}\|$$

$$= \|\exp(t[A+E])\|\,\|F\,\tilde{\tilde{V}}^{-1}\|$$

$$\leq \|e^{t(A+E)}\|\,c\,\|\tilde{V}\|\,\|\tilde{\tilde{V}}^{-1}\| \approx \|e^{tA}\|\,c\,\varkappa(\tilde{V}), \qquad /3.2.7/$$

vagyis, ha $\varkappa(\tilde{V}) >> 1$, akkor $\tilde{V}$ közelitő inverzének alkalmazása durván $c\,\varkappa(\tilde{V}) >> u$ relativ hibát okoz, és ez független A exponenciális kondiciós számától. Ez az eredmény megegyezik

Moler és Van Loan [38] bizonyitás nélkül közölt megjegyzésével a módszer pontosságával kapcsolatban.

$\varkappa(\tilde{V}) >> 1$ esetben a kerekitési hibák halmozódásának egy további tényezője a $\tilde{V}\, exp(t\tilde{\Lambda})\tilde{V}^{-1}$ szorzat kiszámitása. Még ha $\tilde{V}^{-1}$ pontosan ismert lenne is, a mátrixszorzás során elkövetett kerekitési hiba korlátja $c_2 \|\tilde{V}\| \|exp(t\tilde{\Lambda})\| \|\tilde{V}^{-1}\| = \|exp(t\tilde{\Lambda})\| \cdot \varkappa(\tilde{V}) c_2$, ahol $c_2 = O(u)$. Látjuk, hogy az emlitett mátrixszorzásnál fellépő hiba korlátja ismét a $\varkappa(\tilde{V})$ kondiciós számmal arányos.

Az előzőekben elemzett okok miatt a spektrálfelbontás módszere csak jól kondicionált sajátértékfeladat mellett javasolható. A sajátértékfeladat megoldásának egyik legjobb módszere hatékonyság és numerikus stabilitás szempontjából a QR-algoritmus, melynek megbizható programjai hozzáférhetők a szakirodalomban [54].

Müvelet- és memóriaigény

A spektrálfelbontási módszer egy számitógépre orientált algoritmusának sémáját Moler és Van Loan adták meg, a QR-algoritmusra alapozva [38]. Ez a séma magában foglalja a $\varkappa(\tilde{V})$ kondiciós szám nagyságának, azaz a módszer adekvát voltának ellenőrzését is. Az eljárás müveletigénye a következő.
Előkészitő szakasz. A mátrix spektrális felbontásának meghatározása QR-algoritmus segitségével /beleértve V^{-1} meghatározását $exp(tA)$ számitása ill. $\underline{c} = V^{-1}\underline{b}$ meghatározását $exp(tA)\underline{b}$ számitása esetén/ átlagosan $\bar{K} n^3 + O(n^2)$ müveletet igényel, ahol a $\bar{K}$ konstans egy jó becslése a [38] cikk szerint $\bar{K} \approx 15$.

Második szakasz. t tetszőleges értékére $\exp(tA)$ kiszámitása a /3.2.3/ képlet szerint $n^3+O(n^2)$, $\exp(tA)\underline{b}$ kiszámitása $\exp(tA)\underline{b} = V\exp(t\Lambda)\underline{c}$ szerint pedig $n^2+O(n)$ müveletet igényel, az n számu skaláris exponenciális kiértékelésén kivül.

Ha t több értékére is el kell végezni a számitásokat, akkor láthatjuk, hogy a vektor-probléma müveletigénye egy nagyságrenddel kisebb, mint a mátrix-problémáé, szemben az előző pontban tárgyalt négyzetelési módszerrel. További előnye a spektrálfelbontásnak a négyzetelésen /vagy hatványozáson/ alapuló módszerrel szemben, hogy a müveletigény itt gyakolatilag független $\|tA\|$ nagyságától, mig az előző pont módszerében általában t-vel együtt nőtt a szükséges méveletek száma.

A spektrálfelbontási módszer $\exp(tA)$-ra való alkalmazása esetén szükség van A, V, V^{-1} tárolására, igy a memóriaigény $3n^2+O(n)$. $\exp(tA)\underline{b}$ számolása esetén V^{-1} kiszámitása és tárolása elkerülhető, ezért itt csak $2n^2+O(n)$ memória-rekeszre van szükség.

3.3. Minimálpolinom-módszer

Az e pontban kifejtendő módszert elsődlegesen $\exp(tA)\underline{b}$ kiszámitására fejlesztettük ki [12], tekintettel az olyan esetekre, amikor A sajátértékproblémája gyengén meghatározott /$\mathcal{Y}(A)$ nagy/ és a spektrálfelbontás módszere nem alkalmazható, másrészt mivel a négyzeteléssel kombinált Taylor-soros módszer $\exp(tA)\underline{b}$ számitására tulságosan müveletigényes. Az un. poli-

nomiális módszereket - melyekhez az alábbiakban megadott módszer is sorolható - Moler és Van Loan összefoglaló cikke [38] elveti, mint amelyek nem hatékonyak, mivel $O(n^4)$ a müveletigényük és $O(n^3)$ a memóriaigényük /$exp(tA)$ számitása esetén/, szemben más módszerekkel, ahol a nagyságrend eggyel kisebb /pl. az előző két pontban tárgyalt módszereknél/. Azonban az $exp(tA)\underline{b}$ vektor-problémára az előkészitő szakaszban e müveletigény általában $O(n^3)$-re csökken, a különböző t értékekhez tartozó későbbi számitásokban pedig már csak $O(n^2)$ müveletre van szükség, hasonlóan pl. a spektrálfelbontás módszeréhez; ezenkivül a memóriaigény is $O(n^2)$ -re redukálódik.

Eljárásunk lényege $exp(tA)\underline{b}$ kiszámitásának visszavezetése egy Frobenius-alaku /kompanion-/ mátrix exponenciálisának kiszámitására, amely utóbbi feladat megoldására Kammler dolgozott ki egy hatékony eljárást [28].

Az eljárás levezetése

Legyen $p(\lambda) = \lambda^m + c_m\lambda^{m-1} + \ldots + c_2\lambda + c_1$ az $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ mátrix $\underline{b} \in \mathbb{R}^n$ vektorhoz tartozó minimálpolinomja, azaz a legkisebb fokszámu egy főegyüttható polinom, melybe az A mátrixot behelyettesitve fennáll a

$$p(A)\,\underline{b} = \underline{0} \qquad /3.3.1/$$

egyenlőség. Mivel $\underline{x} = exp(tA)\underline{b}$ idő szerinti deriváltjai $\dot{\underline{x}} = A\underline{x}$, $\ddot{\underline{x}} = A^2\underline{x}$ és általában $(d/dt)^i\underline{x} = A^i\underline{x}$, $i = 0,1,2,\ldots$, igy

$$p(d/dt)\,\underline{x} = p(A)\,\underline{x} = e^{tA}\,p(A)\,\underline{b} = \underline{0} \qquad /3.3.2/$$

/ahol a $p(d/dt) = (d/dt)^m + c_m(d/dt)^{m-1} + \ldots + c_2(d/dt) + c_1$ differenciáloperátor az $\underline{x} = \underline{x}(t)$ vektorra komponensenként alkalmazandó/. /3.3.2/-ből látható, hogy $\underline{x}$ bármely x_j eleme kielé-

giti a

$$p(d/dt)\, x_j = 0 \qquad (1 \le j \le n) \qquad /3.3.3/$$

m-edrendü homogén egyenletet.

A bevezetés 1.2. pontja alapján //1.2.22/ formula/ a /3.3.3/ egyenlet megoldása

$$x_j = \underline{e}_1^T e^{tC} \underline{x}_j(0) \;, \qquad (1 \le j \le n) \qquad /3.3.4/$$

ahol

$$\underline{x}_j(0) = \left[x_j(0), \dot{x}_j(0), \ldots, x_j^{(m-1)}(0)\right]^T \qquad /3.3.5/$$

és C a $p(.)$ polinom kompanion-/kisérő/ mátrixa:

$$C = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & 1 \\ -c_1 & \cdots & \cdots & -c_{m-1} & -c_m \end{bmatrix} \qquad /3.3.6/$$

A /3.3.5/-ben specifikált kezdetiértékeket az

$$x_j^{(i)}(0) = \underline{e}_j^T \underline{x}^{(i)}(0) = \underline{e}_j^T A^i \underline{b} \;, \quad i = 0, 1, \ldots, m-1 \qquad /3.3.7/$$

reláció adja meg $(1 \le j \le n)$. Ezzel $\exp(tA)\underline{b}$ kiszámitásának feladatát visszavezettük az A mátrix $\underline{b}$ vektorhoz tartozó minimálpolinomjának meghatározására és $\exp(tC)$ kiszámitására, ahol C a $p(.)$ minimálpolinom kisérő mátrixa.

Világos, hogy a fenti levezetés érvényes akkor is, ha $p(.)$ az A mátrix $\underline{b}$ vektorhoz tartozó tetszőleges annulláló polinomja /amelyre /3.3.1/ fennáll/. Ezt a levezetést Kolodner [33] alkalmazta annak igazolására, hogy $p(A)=0$ esetén $\exp(tA)$ minden eleme megoldása a $p(d/dt)x=0$ egyenletnek; bonyolultabb bizonyitást Putzer [43] és Bierman [7] adott a karakterisztikus polinom esetére. Azonban ezek a cikkek nem kapcsolják össze a homogén magasabbrendü differenciálegyenlet megoldását a kisérő mátrix exponenciálisával, ill. nem

foglalkoznak a $p(.)$ polinom és $\exp(tC)$ numerikus meghatározásának kérdésével sem. Az alábbiakban e két fontos részfeladatra gyakorlati szempontból is kielégitő megoldási eljárásokat ismertetünk.

A vektor-minimálpolinom meghatározása

A $p(.)$ polinom választására egy lehetőség az A mátrix karakterisztikus polinomja, melynek meghatározására a müszaki cikkekben általában Le Verrier módszerét /melyet a mérnökök "Bocher formulája" néven ismernek/ javasolják [37]. Azonban Le Verrier módszerének nemcsak az a hátránya, hogy $O(n^4)$ müveletet igényel /lásd [39]/, hanem az is, hogy a kerekitések gyakran katasztrofális jegyveszteséget okoznak, mint azt Wilkinson kimutatta /[53], 434. o./. Ezért mi inkább Krülov módszerének alkalmazását javasoljuk.

A klasszikus Krülov-módszer /lásd pl. [53], 364. o./ alkalmazásával éppen egy mátrixnak egy vektorhoz tartozó minimálpolinomja adódik eredményül. A $\underline{b}$ vektorhoz tartozó minimálpolinom m fokszámát a Krülov-vektorok

$$\underline{b}_0 = \underline{b}\,, \quad \underline{b}_1 = A\underline{b}\,, \quad \underline{b}_2 = A^2\underline{b}\,, \quad \ldots\,, \quad \underline{b}_n = A^n\underline{b} \qquad /3.3.8/$$

sorozatában az első olyan vektor indexe adja meg, amely lineárisan függ az előzőektől; együtthatói pedig előjeltől eltekintve megegyeznek ezen lineáris függés együtthatóival, s igy kielégitik a

$$[\underline{b}_0, \underline{b}_1, \ldots, \underline{b}_{m-1}] \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_m \end{bmatrix} = -\underline{b}_m \qquad /3.3.9/$$

lineáris egyenletrendszert. Ez az egyenletrendszer hatéko-

nyan oldható meg a részleges főelemkiválasztásos Gauss-elimináció módszerével. Mivel a /3.3.9/ egyenletrendszerben szereplő oszlopok m száma előre nem ismert, Wilkinson kidolgozta e feladat megoldására az un. oszloponkénti Gauss-elimináció módszerét /lásd [53], 370. o./ melyben a k-adik lépés kezdetekor a $k, k+1, \ldots, n$ indexü Krülov-vektorok még nem vettek részt a számitásokban. Az eljárás akkor ér véget, ha már nem találunk nemzérus főelemet.

A számitások folyamán elkövetett kerekitési hibák természetesen "elronthatják" a pontos számitás mellett zérus részeredményeket, és igy tévedhetünk a minimálpolinom fokszámát illetően. Wilkonson elemezte ezt a problémát és megmutatta, hogy eljárása általában olyan polinomot eredményez, melyre az

$$\underline{r} := \underline{b}_m + \sum_{i=1}^{m} c_i \underline{b}_{i-1} = p(A)\underline{b} \qquad /3.3.10/$$

reziduál-vektor igen kicsiny /itt p-vel már a számolt minimálpolinomot jelöltük/.

Megjegyezzük még, hogy bár a mátrix sajátértékeinek /a minimálpolinom gyökeinek/ kiszámitására gyengén meghatározott polinom esetén a Krülov-módszer nem alkalmas még kis reziduál mellett sem /lásd Wilkinson [53], 377. o./, a mi céljainknak megfelel, ha az $\underline{r}$ reziduál kicsiny, mint azt az alábbi vizsgálat megmutatja.

Közelitőleg annulláló polinom alkalmazásának hibája

Legyen a továbbiakban az A mátrix $\underline{b}$ vektorhoz tartozó számolt minimálpolinomja $p(\lambda) = \lambda^m + c_m\lambda^{m-1} + \ldots + c_2\lambda + c_1$ és C ennek kisérő mátrixa. Mivel a számolt polinom a kerekitési

hibák miatt általában csak közelitőleg annulláló, igy az $\underline{r} = p(A)\,\underline{b}$ reziduál-vektor általában kicsiny, de nem nulla. A következő tételben egy becslést adunk arra, hogy ennek következtében a minimálpolinom-módszerrel adódó $\tilde{\underline{x}}(t)$ megoldás /minden további számolást pontosnak feltételezve/ mennyire tér el az eredeti $\underline{x}(t) = \exp(tA)\,\underline{b}$ megoldástól.

3.3.1. Tétel. Legyenek érvényesek a 2.1.3. lemma jelölései, és legyen $\underline{r} = p(A)\,\underline{b}$, $\underline{x}(t) = \exp(tA)\,\underline{b}$ és $\tilde{x}_j = \underline{e}_1^T \exp(tC)\,\underline{x}_j(0)$, $j = 1, \dots, n$, ahol C a $p(.)$ m-edfoku polinom kisérő mátrixa és $\underline{x}_j(0)$ /3.3.5/ szerint definiált. Akkor

$$\|\underline{x}(t) - \tilde{\underline{x}}(t)\|_2 \le \|\underline{r}\|_2 \frac{t^m}{m!} f_n(t\|u\|_2)\, e^{t \max\{\alpha(A), \alpha(C)\}}, \quad t \ge 0.$$

A tétel bizonyitásához szükségünk lesz az alábbi két segédtételre.

3.3.1. Lemma. A 3.3.1. tétel jelölései mellett

$$\underline{x}(t) - \tilde{\underline{x}}(t) = \int_0^t \left(\underline{e}_1^T e^{(t-s)C} \underline{e}_m\right) e^{sA}\, \underline{r}\, ds .$$

Bizonyitás. Legyen $\underline{d}(t) := \underline{x}(t) - \tilde{\underline{x}}(t)$ és alkalmazzuk ennek j-edik komponensére a $p(d/dt)$ differenciáloperátort:

$$p(d/dt)\, d_j(t) = p(d/dt)\, \underline{e}_j^T e^{tA} \underline{b} - p(d/dt)\, \underline{e}_1^T e^{tA} \underline{x}_j(0)$$
$$= \underline{e}_j^T e^{tA} p(A)\,\underline{b} - \underline{e}_1^T e^{tC} p(C)\, \underline{x}_j(0) = \underline{e}_j^T e^{tA}\, \underline{r}$$

Tehát $d_j(.)$ megoldása egy m-edrendü inhomogén differenciálegyenletnek, mégpedig zérus kezdeti feltétellel, mivel

$$d_j^{(i)}(0) = \underline{e}_j^T\, \underline{x}^{(i)}(0) - \underline{e}_1\, C^i\, \underline{x}_j(0)$$
$$= x_j^{(i)}(0) - \underline{e}_{i+1}^T\, \underline{x}_j(0) = 0, \quad i = 0, 1, \dots, m-1;$$

ahol felhasználtuk $\underline{x}_j(0)$ definicióját ill. a C kompanion-mátrix azon tulajdonságát, hogy $\underline{e}_i^T C = \underline{e}_{i+1}^T$, $i = 1, \dots, m-1$. Tehát $d_j(t)$ az /1.2.22/ formula alapján a

$$d_j(t) = \int_0^t \underline{e}_1^T e^{(t-s)C} \underline{e}_m \underline{e}_j^T e^{sA} \underline{r}\, ds$$

alakban adható meg, melyből közvetlenül adódik a lemma szerinti előállitás. □

3.3.2. Lemma. Legyenek a $C \in \mathbb{C}^{m\times m}$ kompanion-mátrix /nem feltétlenül különböző/ sajátértékei $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_m$. Akkor

$$\underline{e}_1^T \exp(tC)\, \underline{e}_m = [\lambda_1; \lambda_2; \ldots; \lambda_m] \exp(\cdot t),$$

ahol a jobboldal $\exp(\lambda t)$-nek, mint λ függvényének a $\lambda_1, \ldots, \lambda_m$ pontokhoz tartozó $(m-1)$-edrendü osztott differenciája.

Bizonyitás. Irjuk fel a mátrix-exponenciálisra vonatkozó Newton-féle osztott differenciás interpolációs formulát C-re:

$$e^{tC} = \sum_{i=1}^{m} [\lambda_1; \ldots; \lambda_{i-1}] e^{\cdot t} \prod_{j=1}^{i-1} (C - \lambda_j I) . \qquad /3.3.11/$$

Mivel $\underline{e}_1^T C = \underline{e}_2^T$, $\underline{e}_1^T C^2 = \underline{e}_2^T C = \underline{e}_3^T$, $\ldots$, $\underline{e}_1^T C^{m-1} = \underline{e}_m^T$, igy

$$\underline{e}_1^T C^{i-1} \underline{e}_m = \underline{e}_i^T \underline{e}_m = \delta_{im}, \quad i = 1, \ldots, m$$

Ezt felhasználva,

$$\underline{e}_1^T e^{tC} \underline{e}_m = [\lambda_1; \ldots; \lambda_m] e^{\cdot t}$$

/mivel az osztott differenciás alakban C $(m-1)$-nél kisebb hatványai kiesnek/, és ezzel igazoltuk a lemmát.

A tétel bizonyitása. A 3.3.2. lemma és az osztott differenciák integrálelőállitása /[4], 188. o./ alapján $t \geq s$-re

$$\underline{e}_1^T e^{(t-s)C} \underline{e}_m = [\lambda_1; \ldots; \lambda_m] e^{\cdot (t-s)} = \int_{\Omega} \ldots \int (t-s)^{m-1} \exp\Big([t-s] \sum_{i=1}^{m} \omega_i \lambda_i\Big) d\omega_1 \ldots d\omega_m ,$$

ahol

$$\Omega = \Big\{ [\omega_1, \ldots, \omega_m]^T \in \mathbb{R}_+^m \;\Big|\; \sum_{i=1}^{m} \omega_i = 1 \Big\} .$$

Ebből

$$|\underline{e}_1^T e^{(t-s)C} \underline{e}_m| \le (t-s)^{m-1} \int_{\Omega} \dots \int |\exp([t-s]\sum_{i=1}^{m} \omega_i \lambda_i)| \, d\omega_1 \dots d\omega_m$$

$$= (t-s)^{m-1} \int_{\Omega} \dots \int \exp([t-s]\sum_{i=1}^{m} \omega_i \mathrm{Re}\lambda_i) \, d\omega_1 \dots d\omega_m$$

$$\le (t-s)^{m-1} e^{(t-s)\alpha(C)} \int_{\Omega} \dots \int d\omega_1 \dots d\omega_m = \frac{(t-s)^{m-1}}{(m-1)!} e^{(t-s)\alpha(C)} .$$

Az igy nyert becslést, valamint a 2.1.3. lemmát alkalmazva a $\underline{d}(t) = \underline{x}(t) - \tilde{\underline{x}}(t)$ különbség 3.3.1. lemma szerinti integrál-előállitására,

$$\|\underline{d}(t)\|_2 \le \int_0^t \frac{(t-s)^{m-1}}{(m-1)!} e^{(t-s)\alpha(C)} f_m(\|U\|_2 s) e^{s\alpha(A)} \|\underline{r}\|_2 \, ds$$

$$\le \|\underline{r}\|_2 f_m(t\|U\|_2) e^{t \max\{\alpha(A), \alpha(C)\}} \int_0^t \frac{(t-s)^{m-1}}{(m-1)!} ds ;$$

és az utóbbi éppen a tételben megadott korlát. □

A 3.3.1. tételben megadott hibakorlát egyenesen arányos az $\underline{r}$ reziduál-vektor normájával. Az arányossági tényező egy polinom és egy exponenciális szorzata, ahol az exponenciális tényező kitevőjében szereplő együttható $\alpha(C) \approx \alpha(A)$ esetben közel egyenlő magának az $\underline{x}(t)$ megoldásnak a korlátjában fellépő $\alpha(A)$ együtthatóval. Ilyen esetben, ha $\|\underline{r}\|_2$ kicsiny, akkor várhatóan $\tilde{\underline{x}}(t)$ relativ hibája sem lesz tul nagy.

Stabil A mátrix esetén $\underline{x}(t) \to \underline{0}$ /$t \to \infty$/; viszont $\underline{d}(t) \to \underline{0}$ a fenti korlát alapján csak ugy garantálható, ha $\alpha(A) < 0$ mellett $\alpha(C) < 0$ is teljesül, azaz, ha a $p(.)$ számolt minimálpolinom gyökei is mind negativ valós részüek. Az utóbbi feltétel viszont teljesül, ha a számolt minimálpolinom elég jó közelitése a tényleges minimálpolinomnak.

Kompanion-mátrix exponenciálisának meghatározása: Kammler módszere

$\exp(tA)\underline{b}$ minimálpolinom-módszerrel való számításához a $p(.)$ minimálpolinom meghatározása után szükség van egy megfelelő módszerre $\exp(tC)$ kiszámitására t különböző értékeire, ahol C a $p(.)$ polinom kisérő mátrixa. Elvileg a sajátértékek ismeretében $\exp(tC)$ explicite is megadható, akár a /3.3.11/ osztott differenciás képlettel, akár C Jordan-féle felbontása segitségével, ahol a fővektorok V mátrixa a sajátértékekhez tartozó /esetleg konfluens/ Vandermonde-féle mátrix, melynek inverzére is vannak explicit képletek [32, 40]. Azonban, ha az A mátrix sajátértékproblémája gyengén meghatározott, a sajátértékek nem számithatók ki megfelelő pontossággal. De ha még pontos sajátértékekből indulnánk is ki, közeli sajátértékek esetén mind az osztott differenciás, mind a Vandermonde-mátrixon alapuló [38] explicit képletek igen érzékenyek a számolás során elkövetett kerekitési hibákra, ezért ezek alkalmazása nem javasolható.

A probléma megoldására jelenleg ismert leghatékonyabb eljárás Kammler módszere [28]. Ez a módszer tulajdonképpen egy négyzeteléssel kombinált Taylor-soros módszer, speciálisan kompanion-mátrixra kifejlesztve. Az eljárás fő szakaszai a következők.

A. Előzetes transzformációk a polinom-együtthatók (ℓ_1-) normájának redukálására a C mátrix kompanion-strukturájának megtartása mellett.

B. Taylor-sor-módszer.

C. Négyzetelés.

D. utólagos transzformációk.

Kammler cikkében elvégezte az eljárás részletes kerekítési hibaelemzését, valamint az egyes lépések érzékenységi analizisét.

Mielőtt Kammler módszerének egyes lépéseit ismertetnénk, kitérünk a kompanion-mátrix egy olyan tulajdonságára, amely kulcsfontosságu az eljárás hatékonysága szempontjából.

3.3.3. Lemma. Legyen $F \in \mathbb{C}^{m\times m}$ felcserélhető a $C \in \mathbb{C}^{m\times m}$ kompanion-mátrixszal. Ekkor C-nek, és F utolsó oszlopának ismeretében F összes többi eleme egyértelmüen meghatározható az alábbi, un. Thomson-féle relációk segitségével:

$$\left.\begin{aligned} f_{i,1} &= -c_1 f_{i-1,m} \quad , \quad i = 2,\dots,m \\ f_{i,j} &= f_{i-1,j-1} - c_j f_{i-1,m} \quad , \quad i = j+1,\dots,m;\ j = 2,\dots,m \\ f_{i-1,j-1} &= f_{ij} + c_j f_{i-1,m} \quad , \quad i = 1,\dots,j;\ j = m-1,\dots,2,1 \end{aligned}\right\} \qquad /3.3.12/$$

Bizonyitás. A C kompanion-mátrix szerkezete /lásd /3.3.6// alapján érvényesek az alábbi összefüggések:

$$C\underline{e}_1 = -c_1\underline{e}_m \ , \quad C\underline{e}_i = \underline{e}_{i-1} - c_i\underline{e}_m \ , \quad \underline{e}_{i-1}^T C = \underline{e}_i^T \ , \quad i = 2,\dots,m.$$

Ezeket, valamint F és C felcserélhetőségét felhasználva, $i>1$ esetén

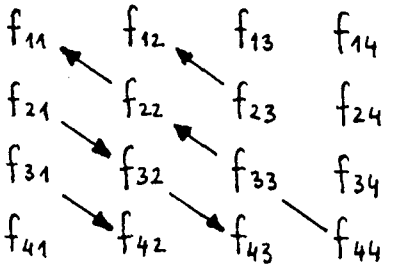
$$f_{ij} = \underline{e}_i^T F \underline{e}_j = \underline{e}_{i-1}^T C F \underline{e}_j = \underline{e}_{i-1}^T F C \underline{e}_j$$

$$= \begin{cases} -c_1 \underline{e}_{i-1}^T F \underline{e}_m = -c_1 f_{i-1,m} \ , & j = 1; \\ \underline{e}_{i-1}^T F \underline{e}_{j-1} - c_j \underline{e}_{i-1}^T F \underline{e}_m = f_{i-1,j-1} - c_j f_{i-1,m} \ , & j > 1 . \end{cases} \quad \square$$

Megjegyzés. Mivel egy kompanion-mátrix mindig nemderogatórius /karakterisztikus és minimálpolinomja egybeesik/, igy a lemma $FC=CF$ felcserélhetőségi feltétele ekvivalens azzal, hogy F kifejezhető C polinomjaként /lásd [45], 6.2.2. tétel/.

A /3.3.12/ relációkat $F=\exp(tC)$ esetére Thomson [49] és Kammler [28], $F=f(C)$, $f(.)$ analitikus függvény esetére pedig Kaufman [32] igazolták, de a fentinél bonyolultabb uton.

Az alábbi ábrán az $m=4$ esetben nyilak segitségével szemléltetjük a /3.3.12/ rekurziós relációk alkalmazásának sorrendjét; egyik elemből a másikba mutató nyil azt jelenti, hogy az egyik elemet előbb kell kiszámitani, mint a másikat. Amelyik elembe nem mutat nyil, annak kiszámitásához egyedül az utolsó oszlop /ismert/ elemeire van szükség.



Ezekután rátérhetünk a Kammler-módszer egyes lépéseinek ismertetésére.

A D. Elő- és utótranszformációk. Kammler háromféle előzetes transzformációt adott meg, de ezek közül az elsőt, a spektrum-eltolást nem vette figyelembe hibaanalizisében. Egy λ_0 nagyságu eltolásra igazolta, hogy ha

$$C^* = e^{-\lambda_0 H} C\, e^{\lambda_0 H} - \lambda_0 I ,$$

ahol

$$H=\left((i-1)\,\delta_{i-1,j}\right)_{m\times m}=\begin{bmatrix} 0 & & & \\ 1 & 0 & & \\ & 2 & 0 & \\ & & \ddots & \ddots \\ & & & (m-1)\ 0 \end{bmatrix} \qquad \text{és} \qquad e^{\lambda H}=\left(\binom{i-1}{j-1}\lambda^{i-j}\right)_{m\times m}$$

/itt a binomiális együtthatók kiterjesztett értelmezése szerint $\binom{i-1}{j-1}=0$, ha $i<j$/, akkor C^* a

$$p^*(\lambda)=\lambda^m+c_m^*\lambda^{m-1}+\ldots+c_2^*\lambda+c_1^*=\prod_{i=1}^{m}[\lambda-(\lambda_i-\lambda_0)]$$

polinom kisérő mátrixa, ahol a $c_j^*=p^{(j-1)}(\lambda_0)/(j-1)!$ együtthatók az általánositott Horner-séma szerint számolhatók. Ha már meghatároztuk C^* exponenciálisát, akkor ebből C exponenciálisa a következőképpen transzformálható vissza:

$$e^{tC}=e^{t\lambda_0}\,e^{\lambda_0 H}\,e^{tC^*}\,e^{-\lambda_0 H}\,.$$

Megjegyezzük, hogy $e^{tA}\underline{b}$ minimálpolinom-módszerrel való számitásához e lehetőségre nincs szükségünk, mivel a spektrum-eltolást még a minimálpolinom meghatározása előtt elvégezhetjük, ha szükséges, és a továbbiakban az $A-\lambda_0 I$ mátrixszal számolhatunk /ezt a transzformációt a 3.1. pontban emlitettük a $\lambda_0=tr(A)/n$ esetben/.

Fontosabb szerepe van viszont a második fajta transzformációnak, melynek célja a polinomegyütthatók nagyságának redukálása. Könnyen belátható a következő összefüggés: ha

$$\tilde{C}=\alpha^{-1}D^{-1}CD\,,$$

ahol $D=(\alpha^{i-1}\delta_{ij})_{m\times m}$ diagonális mátrix, és $\alpha\neq 0$, akkor $\tilde{C}$ a

$$\tilde{p}(\lambda)=\lambda^m+\tilde{c}_m\lambda^{m-1}+\ldots+\tilde{c}_2\lambda+\tilde{c}_1=\prod_{i=1}^{m}(\lambda-\lambda_i/\alpha)$$

polinom kisérő mátrixa, ahol $\tilde{c}_j=c_j/\alpha^{m+1-j}$. Az α paraméter választása a következő: $\alpha=\beta^l$, ahol β a számitásokhoz használt számitógép lebegőpontos aritmetikájának alapszáma /pl. a Rjad-10 gépen $\beta=16$; β másik gyakori értéke 2/, és

$$l:=\min\left\{k\geq 0 \mid k \text{ egész és } \sum_{j=1}^{m}\left(|c_j|/[\beta^k]^{m+1-j}\right)\leq 1\right\}.$$

E választással a polinom együtthatóinak redukálása ill. a mátrix exponenciálisának az

$$\exp(tC) = D \exp(\alpha t \tilde{C}) D^{-1}$$

képlet szerinti visszatranszformálása során nem követünk el kerekitési hibát.

A D diagonális mátrixszal való hasonlósági transzformáció célja a számitásokban részt vevő polinom-együtthatók normalizálása és ezáltal a kerekitési hibák terjedésének csökkentése volt. Azonban az $\alpha t \tilde{C}$ mátrixra $\alpha t > 1$ esetben nem alkalmas a Taylor-sor módszer, ezért ilyenkor a négyzetelésre is szükség van. Jelölje M azt a legkisebb nemnegativ egész számot, melyre $|\alpha t| \leq 2^M$. Akkor Kammler eljárása szerint Taylor-sor-módszerrel meghatározzuk az $\exp(2^{-M} \alpha t \tilde{C})$ mátrixot, majd ebből M-szeri négyzetre emeléssel kapjuk az $\exp(\alpha t \tilde{C})$ mátrixot.

B. Taylor-sor-módszer. Legyen az egyszerőség kedvéért $\tilde{t} := 2^{-M} \alpha t$ és $F := \exp(\tilde{t}\tilde{C})$. Mivel F kommutál a $\tilde{C}$ kompanion-mátrixszal, a Thomson-féle /3.3.12/ relációk birtokában elég F utolsó oszlopát meghatározni a Taylor-sor módszerrel, amely

$$F \underline{e}_m = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\tilde{t}^k}{k!} \tilde{C}^k \underline{e}_m .$$

A kompanion-mátrix-struktura alapján különösen egyszerü az egymást követő $\tilde{C} \underline{e}_m, \tilde{C}^2 \underline{e}_m, \ldots$ vektorok képzése, mivel könynyen belátható, hogy

$$\tilde{C}^k \underline{e}_m = [q_{k+1}, \ldots, q_{k+m}]^T, \quad k = 0, 1, \ldots,$$

ahol

$$q_1 = \ldots = q_{m-1} = 0, \quad q_m = 1$$

és

$$g_{k+1} = -\sum_{i=0}^{m-1} \tilde{c}_{m-i}\, g_{k-i} \quad , \quad k=m+1, m+2, \ldots \quad /3.1.13/$$

Ez alapján $\exp(\tilde{t}\tilde{C})$ utolsó oszlopának i-edik eleme:

$$\underline{e}_i^T F \underline{e}_m = \sum_{k=m-i}^{\infty} (\tilde{t}^k/k!)\, g_{k+i} \quad , \quad i=1, \ldots, m.$$

Kammler szerint a közelitésnél utolsónak figyelembe vett tag legyen a K-adik, ahol

$$K := \min \left\{ k \geq m \;\middle|\; |\tilde{t}|^k/k! \leq u\, |\tilde{t}|^{m-1}/(m-1)! \right\}$$

és u a lebegőpontos kerekitési egység. Ha feltesszük, hogy $N! \geq 1/u$, akkor $|\tilde{t}| \leq 1$ alapján belátható, hogy $K \leq m+N$, azaz $k > 2m+N$ indexü g_k együtthatók sehol sem szerepelnek a számitásokban. /N minimális értéke általában nem nagy; pl. a Rjad-10 gépen $u = \frac{1}{2}\, 16^{-5}$ mellett N=10./

Mivel az előzetes transzformációk következtében $\sum_{i=1}^{m} |\tilde{c}_i| \leq 1$, igy a g_k sorozat tagjaira a /3.3.13/ rekurziv képletből

$$|g_k| \leq 1 \quad , \quad k = 1, 2, \ldots$$

következik. Ebből K definicióját figyelembe véve a Taylor-sor csonkitásából származó képlethibára az

$$\left| \underline{e}_i^T F \underline{e}_m - \sum_{k=m-i}^{K} (\tilde{t}^k/k!)\, g_{k+i} \right| = \left| \sum_{k=K+1}^{\infty} (\tilde{t}^k/k!)\, g_{k+i} \right| \leq$$

$$\leq \frac{|\tilde{t}|^K}{K!} \left(\frac{1}{2!} + \frac{1}{3!} + \ldots \right) \leq u\, \frac{|\tilde{t}|^{m-1}}{(m-1)!} (e-2) \leq u\, \frac{|\tilde{t}|^{m-i}}{(m-i)!} \quad , \quad i=1, \ldots, m$$

becslés adódik, azaz a képlethiba nem haladja meg a sor első nemzérus tagjának lebegőpontos gépi reprezentációból eredő kerekitési hibáját.

Miután $F = \exp(\tilde{t}\tilde{C})$ utolsó oszlopát meghatároztuk, ebből a teljes mátrix a Thomson-féle /3.3.12/ relációk alapján konst-

ruálható meg. /Valójában, ha a kerekitési hibáktól eltekintenénk, akkor a Thomson-féle relációk $\exp(t\tilde{C})$ helyett annak K-adfoku Taylor-polinomját adnák./ Mivel nem a teljes mátrixra alkalmaztuk a Taylor-sor módszert, és a Thomson-relációk müveletigénye csak $m^2+O(m)$, igy $\exp(t\tilde{C})$ előállitásának müveletigénye a kompanion-struktura következtében $O(m^3)$ helyett csupán $O(m^2)$. Ebből $m^2+O(m)$ a g_k sorozat képzése $/k=m+1,\ldots,2m+N/$, és hasonlóképpen $m^2+O(m)$ a Taylor-sor részletösszegének kiszámitása.

C. Négyzetelés. Az $\exp(\alpha t\tilde{C})$ mátrixot $\exp(2^{-M}\alpha t\tilde{C})$ Taylor-sor-módszerrel számolt közelitéséből kiindulva M-szeri négyzetreemeléssel, az

$$\exp(2^{-k}\alpha t\tilde{C}) = \left[\exp(2^{-k-1}\alpha t\tilde{C})\right]^2, \quad k=M-1,\ldots,1,0$$

rekurzió alapján határozhatjuk meg. Egy m-edrendü mátrix négyzetre emelése általában m^3 müveletet igényel. Viszont jelen esetben, a Thomson-féle relációk felhasználásával ez a müveletigény $2m^2+O(m)$-re csökkenthető, ha először meghatározzuk a négyzetmátrix utolsó oszlopát ugy, hogy a négyzetre emelendő mátrixot szorozzuk saját utolsó oszlopával:

$$\left[e^{2^{-k}\alpha t\tilde{C}}\,\underline{e}_m\right] = e^{2^{-k-1}\alpha t\tilde{C}}\cdot\left[e^{2^{-k-1}\alpha t\tilde{C}}\,\underline{e}_m\right]$$

majd ebből a /3.3.12/ relációk szerint rekonstruáljuk az $\exp(2^{-k}\alpha t\tilde{C})$ mátrix összes elemét.

A minimálpolinom-módszer müvelet- és memóriaigénye

A müvelet- és memóriaigény megadásánál az alábbiakban feltételezzük, hogy a minimálpolinom fokszáma maximális, azaz $m=n$. Ekkor az előkészitő szakaszban a Krülov-vektorok

képzése $n^3 - n^2$, a vektor-minimálpolinom meghatározása $n^3/3 + O(n^2)$ és a Kammler-módszerhez szükséges $\{q_k\}$ sorozat képzése $n^2 + O(n)$ müveletet igényel. A módszer e kezdeti szakaszának müveletigénye $/\frac{4}{3}n^3 + O(n^2)/$ tehát jóval kisebb, mint az előző pontban tárgyalt spektrálfelbontásé $/\approx 15n^3/$. Ezután t bármely értékére Kammler módszere $\exp(tC)$ meghatározására $(2M+2)n^2 + O(n)$ müveletet igényel, ahol M értéke függ t nagyságától. További n^2 aritmetikai művelet szükséges $\underline{x}(t) = \exp(tA)\underline{b}$ képzéséhez a /3.3.4/ képlet szerint. Ebben a második szakaszban tehát a spektrálfelbontási módszer gyorsabb.

A Taylor-soros módszerhez hasonlóan, $t = h, 2h, \ldots$ ekvidisztáns pontsorozat esetén itt is csökkenthető a müveletigény. Ugyanis, ha $\exp(hC)$ meghatározása után annak utolsó oszlopát megőrizzük, akkor $\exp(khC)$ utolsó oszlopa megkapható $\exp([k-1]hC)$ -ből az $[\exp(khC)\underline{e}_m] = \exp([k-1]hC)[\exp(hC)\underline{e}_m]$ mátrix-vektor szorzással, majd ebből a /3.3.12/ Thomson-féle relációk alapján $\exp(khC)$ minden eleme meghatározható. Ezáltal egy-egy ujabb pont esetén a szükséges aritmetikai müveletszám már csak $3n^2 + O(n)$.

Az eljárás memóriaigénye $3n^2 + O(n)$ memóriarekesz; ebből az A mátrix tárolásán kivül n^2 rekeszt igényel a Krülov-vektorokból képzett mátrix tárolása, további n^2-et az utóbbi mátrix LU-felbontása /Gauss-elimináció/, amely később $\exp(tC)$ számitásánál is felhasználható. Igy a minimálpolinom-módszer memóriaigénye körülbelül másfélszer akkora, mint a spektrálfelbontásé.

4. ELJÁRÁSOK A MÁTRIX-EXPONENCIÁLIS PARAMÉTEREK SZERINTI PARCIÁLIS DERIVÁLTJAINAK KISZÁMITÁSÁRA

A mátrix-exponenciális paraméterek szerinti parciális deriváltjai az /1.1.7/ érzékenységi egyenletek megoldásai, melyek speciális szerkezete lehetővé teszi az előző fejezet módszereinek kiterjesztését a parciális deriváltak számolására. E kiterjesztéseknek általában ugyanazok a gyenge pontjai, mint maguknak az eredeti módszereknek.

Mivel a Taylor-sor és négyzetelés, valamint a spektrálfelbotnás módszereinek kiterjesztését e problémára már elvégezték, ezért ezeknek csupán rövid leirására szoritkozunk. Viszont részletesebben adjuk meg a spektrálfelbotnás alkalmazását $\exp(tA(.))$ második parciális deriváltjainak meghatározására, valamint a minimálpolinom-módszer kiterjesztését $\exp(tA(.))\underline{b}$ parciális deriváltjainak kiszámitására, melyeket mi dolgoztunk ki.

4.1. Taylor-sor és négyzetelés módszere

A Taylor-sor módszerének alkalmazását a mátrix-exponenciális paraméter szerinti deriváltjainak kiszámitására Kanyár és mtsai [30, 31], valamint Feldman [16] javasolták. Az eljárás a következő.

Tegyük fel, hogy $A(.):\mathbb{R}^{\nu} \to \mathbb{R}^{n\times n}$ folytonosan differenciálható a $\underline{\theta}_0 \in \mathbb{R}^{\nu}$ pont egy környezetében, és legyen r tetszőle-

ges /rögzitett/ paraméter-index $/1 \le r \le \nu/$. Az egyszerüség kedvéért vezessük be a következő jelöléseket:

$$A := A(\underline{\theta}_0), \quad X(t) := e^{tA(\theta_0)}, \quad B := \frac{\partial A}{\partial \theta_r}(\underline{\theta}_0), \quad Z(t) := \left.\frac{\partial e^{tA(\underline{\theta})}}{\partial \theta_r}\right|_{\underline{\theta}=\underline{\theta}_0}.$$

Ekkor érvényes az

$$\begin{bmatrix} \dot{X} \\ \dot{Z} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A & 0 \\ B & A \end{bmatrix} \begin{bmatrix} X \\ Y \end{bmatrix}, \qquad \begin{bmatrix} X(0) \\ Y(0) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I \\ 0 \end{bmatrix}$$

kibővitett differenciálegyenlet-rendszer, melynek megoldása

$$\begin{bmatrix} X(t) \\ Z(t) \end{bmatrix} = \exp\left(t \begin{bmatrix} A & 0 \\ B & A \end{bmatrix}\right) \begin{bmatrix} I \\ 0 \end{bmatrix}$$

Ebből a keresett $Z(t)$ parciális derivált mátrix

$$Z(t) = [0 \,|\, I] \exp\left(t \begin{bmatrix} A & 0 \\ B & A \end{bmatrix}\right) \begin{bmatrix} I \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{t^k}{k!} [0 \,|\, I] \begin{bmatrix} A & 0 \\ B & A \end{bmatrix}^k \begin{bmatrix} I \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Legyen

$$\begin{bmatrix} A_k \\ B_k \end{bmatrix} := \begin{bmatrix} A & 0 \\ B & A \end{bmatrix}^k \begin{bmatrix} I \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Akkor

$$Z(t) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{t^k}{k!} B_k \qquad /4.1.1/$$

ahol A_k és B_k a következő rekurziv képletekkel számolhatók:

$$\left.\begin{aligned} A_0 &= I, & A_k &= A\,A_{k-1} \\ B_0 &= 0, & B_k &= B\,A_{k-1} + A\,B_{k-1} \end{aligned}\right\} k = 1, 2, \ldots . \qquad /4.1.2/$$

Ismét érvényes, hogy $\left\| t \begin{bmatrix} A & 0 \\ B & A \end{bmatrix} \right\| > 1$ esetben a sor konvergenciája lassu, és jegyveszteséggel számolhatunk. Ezért

itt is ajánlatos a mátrix-exponenciális multiplikativitásán alapuló hatványozást vagy négyzetelést alkalmazni. A [16, 30, 31] cikkekben csak a hatványozást /azaz szukcessziv mátrix-szorzást/ javasolták, amely azonban csak akkor hatékony, ha a számitásokat t ekvidisztáns értékeire kell elvégezni; különben a négyzetelés hatékonyabb.

Könnyen belátható, hogy a négyzetelés ill. hatványozás alapjául szolgáló multiplikativ tulajdonság a $Z(t)$ parciális deriváltra a következő formulát adja:

$$Z(u+v) = Z(u)X(v) + X(u)Z(v) \qquad /4.1.3/$$

A négyzetelés módszere esetén e képletben $u=v=2^k h$ $/k=1,\dots,K/$; hatványozásnál pedig $u=(k-1)h$, $v=h$ $/k=1,\dots,M/$, ahol

$$\| h \begin{bmatrix} A & 0 \\ B & A \end{bmatrix} \| \leq 1 .$$

A /4.1.3/ képletből látható, hogy $Z(t)$ meghatározása csak $X(t)=e^{xA}$ kiszámitásával egyidejüleg történhet.

A /4.1.1/ sor véges részletösszeggel való közelitésére, valamint az ebből származó öröklött hiba hatványozás //4.1.3/ alkalmazása/ során való terjedésére Kanyár és Tóth adott meg hibakorlátokat 31 ; ezekkel itt nem foglalkozunk.

Müvelet- és memóriaigény

A Taylor-sor-módszer N számu tag figyelembe vétele esetén $(N+2\nu N-1)(n^3+O(n^2))$ aritmetikai müveletet igényel $\exp(tA)$ és a ν számu parciális derivált kiszámitásra. Ezután a /4.1.3/ reláció egyszeri alkalmazása az összes parciális deriváltra $2\nu n^3$ müveletet jelent; a négyzetelés módszere esetén e relációt K-szor kell alkalmazni, ahol

$$K = \min \left\{ k \geq 0 \mid 2^{-k} t \left\| \begin{bmatrix} A & 0 \\ B & A \end{bmatrix} \right\| \leq 1 \, , \; B = \frac{\partial A}{\partial \theta_r}(\underline{\theta}_0), \; 1 \leq r \leq \nu \right\} ;$$

hatványozás /szorzás/ esetén pedig legalább 2^{K-1} -szer és legfeljebb 2^K -szor.

A memóriaigény /feltéve, hogy az összes parciális deriváltat egyidejüleg számitjuk/ a $B = (\partial/\partial\theta_r) A(\underline{\theta}_0)$ mátrixok tárolását is figyelembe véve $2(\nu+1)n^2$ memóriarekesz.

4.2. Spektrálfelbontás módszere

A spektrálfelbontás alkalmazását $\exp(tA(.))$ parciális deriváltjaira Atherton és de Gance [1], valamint Jennrich és Bright [25] javasolták. Mi kiterjesztettük a módszert a második parciális deriváltak számitására is [11].

Induljunk ki az előző pontban használt jelölésekből és legyen az $A = A(\underline{\theta}_0)$ diagonalizálható mátrix spektrálfelbontása

$$A = V \Lambda V^{-1} \, , \qquad \Lambda = (\lambda_i \delta_{ij})_{n \times n} \, ,$$

ahol Λ a sajátértékek diagonális mátrixa. Ekkor az 1. fejezet /1.2.23/ képlete alapján

$$Z(t) = \int_0^t e^{(t-s)A} \, B e^{sA} \, ds$$

Alkalmazva erre spektrális felbontást,

$$Z(t) = V \int_0^t e^{(t-s)\Lambda} \, V^{-1} B V e^{s\Lambda} \, ds \, V^{-1} , \qquad /4.2.1/$$

azaz

$$Z(t) = \left. \frac{\partial e^{tA(\underline{\theta})}}{\partial \theta_r} \right|_{\underline{\theta} = \underline{\theta}_0} = V \, G(t) \, V^{-1} , \qquad /4.2.2/$$

ahol $G(t)=(g_{ij}(t))_{n\times n}$ elemei:

$$g_{ij}(t)=h_{ij}\int_0^t e^{\lambda_i(t-s)}e^{\lambda_j s}ds=h_{ij}\cdot[\lambda_i;\lambda_j]e^{\cdot t} \qquad /4.2.3/$$

és

$$H=(h_{ij})_{n\times n}=V^{-1}BV. \qquad /4.2.4/$$

Továbbá, a $\underline{z}(t):=\dfrac{\partial e^{tA(\underline{\theta})}\underline{b}}{\partial\theta_r}$ parciális derivált a

$$\underline{z}(t)=V\,G(t)\,\underline{c}\ ,\quad V\underline{c}=\underline{b} \qquad /4.2.5/$$

relációk alapján határozható meg.

A spektrálfelbontás alkalmazása itt is igen hatékony eljárás müveletigény szempontjából, mivel az előkészitő szakasz /Λ, V, V^{-1} ill. H és $\underline{c}$ meghatározása/ után $Z(t)$ ill. $\underline{z}(t)$ kiszámitása /rendre/ csak két mátrix-mátrix- ill. mátrix-vektor-szorzást igényel. Azonban numerikus pontosság szempontjából kétszeresen is problémát okoz, ha a $\varkappa(V)$ kondiciós szám nagy, mivel a V^{-1} tényező kétszer is szerepel $Z(t)$ /4.2.1/ előállitásában. Ezért $\varkappa(V)\gg 1$ esetben a módszer alkalmazása nem javasolható.

Müvelet- és memóriaigény

Előkészitő szakasz müveletigénye: / ν=paraméterszám/

(i) Spektrálfelbontás /beleértve V^{-1}-et is/ meghatározása a QR-algoritmus felhasználásával: $\approx \bar{\bar{K}}\,n^3$ $/\bar{\bar{K}}\approx 16/$

(ii) a H mátrixok képzése minden paraméterre: $2\nu n^3+O(n^2)$

Második szakasz müveletigénye t egy-egy uj értékére:

(iii) $Z(t)$ kézése minden paraméterre a /4.2.2-3/ képletek alapján: $2\nu n^3+O(n^2)$

(iii)' $\underline{z}(t)$ képzése minden paraméterre a /4.2.5/ képlet alapján: $(3\nu+1/2)n^2+O(n)$.

Az itt megadott müveletigény csak az aritmetikai müveletekre vonatkozik; szükség van ezen kivül az $\exp(t\lambda_i)$ exponenciálisok kiszámitására is /$i=1,\dots,n$/.

A módszerhez szükséges a sajátvektorok V mátrixának és inverzének, valamint az egyes paraméterekhez tartozó H mátrixoknak a tárolása, ami /valós sajátértékek esetén/ $(\nu+2)n^2$ memóriarekeszt igényel. Azonban, ha A-nak komplex sajátértékei is lehetnek, akkor kétszer ekkora memóriaterületet kell lefoglalni.

Második parciális deriváltak számitása

Bizonyos esetekben - pl. a másodrendben konvergens Newton-módszerrel történő paraméterbecslés esetén - szükség van $\exp(tA(.))$ vagy $\exp(tA(.))\underline{b}$ paraméterek szerinti második parciális deriváltjainak kiszámitására [11]. Az alábbiakban megmutatjuk, hogyan valósitható ez meg a spektrálfelbontás segitségével.

Tegyük fel, hogy $A(.):\mathbb{R}^\nu\to\mathbb{R}^{n\times n}$ kétszer folytonosan differenciálható a $\underline{\theta}_0\in\mathbb{R}^\nu$ pont egy környezetében, és legyen

$$A:=A(\underline{\theta}_0),\quad B_i=\frac{\partial A}{\partial\theta_i}(\underline{\theta}_0),\ i=1,\dots,\nu,\quad D=D^{(p,q)}:=\frac{\partial^2 A}{\partial\theta_p\partial\theta_q}(\underline{\theta}_0),$$

$$Z_i(t)=\left.\frac{\partial e^{tA(\underline{\theta})}}{\partial\theta_i}\right|_{\underline{\theta}=\underline{\theta}_0},\ i=1,\dots,\nu,\quad Y(t)=Y^{(p,q)}(t):=\left.\frac{\partial^2 e^{tA(\underline{\theta})}}{\partial\theta_p\partial\theta_q}\right|_{\underline{\theta}=\underline{\theta}_0},$$

ahol p,q rögzitett indexek /$1\le p,q\le\nu$/. Ekkor pl. a p indexhez tartozó első parciális deriváltra vonatkozó érzékenységi egyenlet θ_q szerinti parciális deriválásával és a θ_q és t szerinti differenciálás sorrendjének felcserélésével belát-

ható a következő inhomogén mátrix-differenciálegyenlet érvényessége:

$$\left.\begin{aligned} \dot{Y}(t) &= A\,Y(t) + B_p\,Z_q(t) + B_q\,Z_p(t) + D e^{tA} \\ Y(0) &= 0 \end{aligned}\right\}$$

Ebből a konstansvariációs formula alapján

$$Y(t) = \int_0^t e^{(t-s)A}\left[B_p Z_q(s) + B_q Z_p(s) + D e^{sA}\right] ds \qquad /4.2.6/$$

adódik. /4.2.6/-ba behelyettesitve a mátrix exponenciálisnak és első parciális deriváltjainak /vö. /4.2.1// spektrális előállitásait, a

$$G_i(s) = V^{-1} Z_i(s) V \;, \quad i = 1, \ldots, n$$

jelölés alkalmazásával azt kapjuk, hogy

$$Y(t) = V \int_0^t e^{(t-s)\Lambda}\left[V^{-1}B_p V\, G_q(s) + V^{-1}B_q V G_p(s) + V^{-1} D V e^{s\Lambda} ds\, V^{-1}\right. \qquad /4.2.7/$$

Legyen $K = (k_{ij})_{n\times n} := V^{-1} D V$, $H^{(r)} = (h^{(r)}_{ij})_{n\times n} := V^{-1} B_r V$, $r = p, q$,

$$L(t) = (\ell_{ij})_{n\times n} := \int_0^t e^{(t-s)\Lambda} K e^{s\Lambda} ds,$$

$$F^{(r,w)}(t) = (f^{(r,w)}_{ij})_{n\times n} := \int_0^t e^{(t-s)\Lambda} H^{(r)} G_w(s)\, ds, \quad r, w = p, q.$$

Ekkor /4.2.7/-ből

$$Y(t) = V\left[F^{(p,q)}(t) + F^{(q,p)}(t) + L(t)\right] V^{-1} \qquad /4.2.8/$$

ahol $L(t)$ elemei /4.2.3/-hoz hasonlóan az

$$\ell_{ij}(t) = k_{ij} \cdot [\lambda_i; \lambda_j]\, e^{\cdot t} \qquad /4.2.9/$$

képlettel; $F^{(r,w)}(t)$ elemei $/r, w = p, q\ /$ pedig

$$\begin{aligned} f^{(r,w)}_{ij} &= \int_0^t \sum_{k=1}^n e^{\lambda_i (t-s)}\, h^{(r)}_{ik}\, g^{(w)}_{kj}(s)\, ds \\ &= \sum_{k=1}^n h^{(r)}_{ik}\, h^{(w)}_{kj} \int_0^t e^{\lambda_i (t-s)} \cdot [\lambda_k; \lambda_j] e^{\cdot s}\, ds \\ &= \sum_{k=1}^n h^{(r)}_{ik}\, h^{(w)}_{kj} \cdot [\lambda_i; \lambda_k; \lambda_j]\, e^{\cdot t} \end{aligned} \qquad /4.2.10/$$

szerint számithatók ki.

Mivel igen sok gyakorlati alkalmazásnál - mint pl. a következő fejezetben tárgyalt biológiai kompartment-rendszerek esetében /vö. [11]/ - az $A(\underline{\theta})$ mátrix elemei maguk a θ_i paraméterek, vagy azok lineáris függvényei, igy a második parciális derivált $D = D^{(p,q)}$ mátrixok /az $L(t)$ mátrixokkal együtt/ eltünnek és csupán a $H^{(r)}$ mátrixokra van szükség, mely utóbbiak amugy is kellenek az első parciális deriváltak számitásához. Ilyen esetben a számitásigény egyetlen második parciális derivált esetén relative nem sokkal több /kb. másfélszer akkora/, mint egy első parciális derivált mátrixnál. /Vegyük azonban figyelembe, hogy összesen $\nu(\nu+1)/2$ számu különböző második parciális derivált van./

4.3. Minimálpolinom-módszer

E pontban megadjuk az általunk kifejlesztett minimálpolinom-módszer kiterjesztését $\exp(tA(.))\underline{b}$ parciális deriváltjainak kiszámitásra /cf. [12]/. A módszer alkalmazása akkor javasolt, amikor a spektrálfelbontási módszer gyengén meghatározott sajátérték-probléma miatt nem ad pontos eredményt.

Legyen r rögzitett index /$1 \le r \le \nu$/ és alkalmazzuk az

$$A := A(\underline{\theta}_0), \quad B := \frac{\partial A}{\partial \theta_r}(\underline{\theta}_0), \quad \underline{x}(t) = e^{tA(\underline{\theta}_0)}\underline{b}, \quad \underline{z}(t) = \left.\frac{\partial e^{tA(\underline{\theta})}}{\partial \theta_r}\right|_{\underline{\theta}=\underline{\theta}_0}$$

jelöléseket. Ekkor célunk a $\underline{z}(t)$ parciális derivált meghatározása. Fennáll az alábbi /az érzékenységi egyenlettel/ kibővitett differenciálegyenlet-rendszer:

$$\frac{d}{dt}\begin{bmatrix}\underline{x}\\ \underline{z}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}A & 0\\ B & A\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\underline{x}\\ \underline{z}\end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix}\underline{x}(0)\\ \underline{z}(0)\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\underline{b}\\ \underline{0}\end{bmatrix}. \qquad /4.3.1/$$

Legyen $p(\lambda)=\lambda^m+c_m\lambda^{m-1}+\ldots+c_2\lambda+c_1$ az A mátrix minimálplinomja /vagy tetszőleges annulláló polinomja/, melyre

$$p(A)=0$$

és legyen $$q(\lambda):=[p(\lambda)]^2=\lambda^{2m}+d_{2m}\lambda^{2m-1}+\ldots+d_2\lambda+d_1 .$$

Ekkor a $q(.)$ polinom annullálja a /4.3.1/ rendszer mátrixát, ugyanis

$$q\left(\begin{bmatrix}A & 0\\ B & A\end{bmatrix}\right)=\begin{bmatrix}p(A) & 0\\ X & p(A)\end{bmatrix}^2=\begin{bmatrix}0 & 0\\ X & 0\end{bmatrix}^2=0 .$$

Igy a 3.3. pont eredményei alapján

$$z_j(t)=\underline{e}_1^T e^{tD}\,\underline{z}_j(0), \quad j=1,\ldots,n, \qquad /4.3.2/$$

ahol D a $q(.)$ polinom kompanion-mátrixa, és a

$$\underline{z}_j(0)=\left[z_j(0), \dot{z}_j(0), \ldots, z_j^{(2m-1)}(0)\right]^T$$

vektorok elemei megkaphatók a

$$z_j^{(i)}(0)=\left[\underline{0}^T, \underline{e}_j^T\right]\begin{bmatrix}A & 0\\ B & A\end{bmatrix}^i\begin{bmatrix}\underline{b}\\ \underline{0}\end{bmatrix}, \quad i=0,1,\ldots,2m-1$$

relációkból. A gyakorlati számitás céljára az utóbbiaknál alkalmasabbak a

$$\underline{z}^{(0)}(0)=\underline{0}, \quad \underline{z}^{(i)}(0)=B A^{i-1}\underline{b}+A\,\underline{z}^{(i-1)}(0), \quad i=1,\ldots,2m-1$$

rekurziós képletek.

A D 2m-edrendü kompanion-mátrix exponenciálisa ismét hatékonyan számitható ki Kammler módszerével /lásd 3.3. pont/. A mátrix-minimálpolinom meghatározására két lehetőségünk is van. Az egyik, hogy egy $/\mathbb{R}^n$ feletti folytonos eloszlásból/ véletlenszerüen választott vektorhoz tartozó minimálpolinomot határozunk meg Krülov módszerével. Ekkor "egy valószinüséggel" a mátrix-minimálpolinomot kapjuk. Ez az eljárás rejt magában egy bizonytalansági tényezőt, melyet viszont lénye-

gesen csökkenthetünk, ha az eljárást egy második véletlen vektorral megismételjük. Azonban, ha ellenőrizni is akarjuk, hogy mennyire jó a számolt $\tilde{p}(.)$ minimálpolinom, azaz kiszámitjuk az $R=\tilde{p}(A)$ reziduál-mátrixot, akkor ez már $O(n^4)$ müveletet igényel.

A második lehetőséget mátrix-Krülov-módszernek is nevezhetjük. Ez abban áll, hogy az $I, A, A^2, \ldots, A^n$ mátrixok elemeit n^2-elemü oszlopvektorokba rendezzük, majd részleges főelemkiválasztásos Gauss-eliminációval meghatározzuk az első olyan m oszlop közötti lineáris függést, ahol az első $m-1$ oszlop még lineárisan független. A mellékletben megadott programban lényegében az utóbbi eljárást valósitottuk meg; ennek müveletigénye $\frac{3}{2}n^4 + O(n^3)$.

További lehetőség lenne még a mátrix karakterisztikus polinomjának közvetlen meghatározása. A LeVerrier-módszer a 3.3. pontban már emlitett hiányosságai / $O(n^4)$ müveletigény, jegyveszteség/ miatt a karakterisztikus polinom meghatározására nem javasolható. Egyelőre nincs tudomásunk más, hatékony és numerikus szempontból /a kerekitési hibákat is figyelembe véve/ stabil eljárásról egy általános mátrix karakterisztikus polinomjának meghatározására.

Megemlitjük még, hogy a közelitő annulláló polinom alkalmazásából eredő hibára itt is hasonló hibabecslés érvényes, mint amit a 3.3.1. tételben megadtunk.

Müvelet- és memóriaigény

Előkészitő szakasz müveletigénye:

(i) Krülov-módszer, maximális fokszámu minimálpolinomot feltételezve, vektor-Krülov-módszer esetén: $\frac{4}{3}n^3 + O(n^2)$;

mátrix-Krülov-módszer esetén: $\frac{3}{2}n^4 + O(n^3)$;

(ii) a $\underline{z}^{(i)}(0)$ $/i=0,1,\ldots,2m-1/$ vektorok képzése az összes / ν számu/ paraméterre: $\leq (4\nu+2)n^3$

Második szakasz müveletigénye t bármely ujabb értékére:

(iii) $\exp(tD)$ számitása Kammler módszerével: $(2M+2)n^2+O(n)$, ahol M a szükséges négyzetelések száma;

(iv) parciális deriváltak képzése a /4.3.2/ képlet alapján, az összes θ_r $/r=1,\ldots,\nu/$ paraméter esetén: $2\nu n^2$

Összehasonlitva a spektrálfelbontási módszerrel, megállapithatjuk, hogy ha $2M+2$ nagyobb /kisebb/, mint $\nu+\frac{1}{2}$, akkor a minimálpolinom-módszer második fázisa több /kevesebb/ müveletet igényel az előbbinél, feltéve, hogy A sajátértékei valósak /komplex sajátértékek jelenléte esetén a komplex aritmetika használata miatt durván a müveletigény megkétszereződésével számolhatunk a spektrálfelbontási módszernél/.

Az eljárás memóriaigényének nagyságrendben legnagyobb tételei a következők. Kammler módszeréhez $\exp(tD)$ számitásánál szükség van egy $(2n)^2=4n^2$ méretü tömbre. A $\underline{z}^{(i)}(0)$ vektorok tárolásához $2\nu n^2$ számu memóriarekesz szükséges. A mátrix-Krülov-módszer alkalmazásához az eljárás előkészitő fázisában n^3+n^2 rekeszre van szükség, melyek azonban átfedésben lehetnek az utána kiszámitandó $\underline{z}^{(i)}(0)$ vektorokhoz használt $2\nu n^2$ számu rekesszel; igy a kettő együttes memóriaigénye csupán $n^2\max\{n+1,2\nu\}$. Megjegyezzük, hogy komplex sajátértékek esetén nagyságrendben ugyanennyi a spektrálfelbontási módszer memóriaigénye is.

5. ALKALMAZÁS A BIOLÓGIAI REKESZ-/KOMPARTMENT-/ RENDSZEREK MODELLEZÉSÉBEN

E fejezetben megvizsgáljuk az előző két fejezet módszereinek alkalmazhatóságát ill. alkalmazási módját az orvosi biológiában gyakran használt un. kompartment-modellekre. Ehhez először bemutatjuk, hogy milyen feltevések mellett lépnek fel ilyen rendszereknél a lineáris állandóegyütthatós differenciálegyenletek, valamint ismertetjük a kompartment-rendszerek inverz /paraméterbecslési/ problémájával kapcsolatos kérdéseket és eljárásokat.

Az 5.3 pontban elemezzük a kompartment-**rendszerek** mátrixainak /un. kompartment-mátrixok/ és azok exponenciálisainak speciális tulajdonságait, majd erre alapozva tárgyaljuk a 3. és 4. fejezetbeli módszerek lineáris kompartment-rendszerre való alkalmazásának szempontjait. E pont leglényegesebb konkluziója, hogy alkalmas spektrum-eltolással kombinálva a Taylor-sor és négyzetelés módszere várhatóan numerikusan igen stabil eljárás kompartment-mátrix exponenciálisának meghatározására /bár az $\exp(tA)\underline{b}$ vektor-problémára a nagy müveletigény miatt továbbra sem hatékony/.

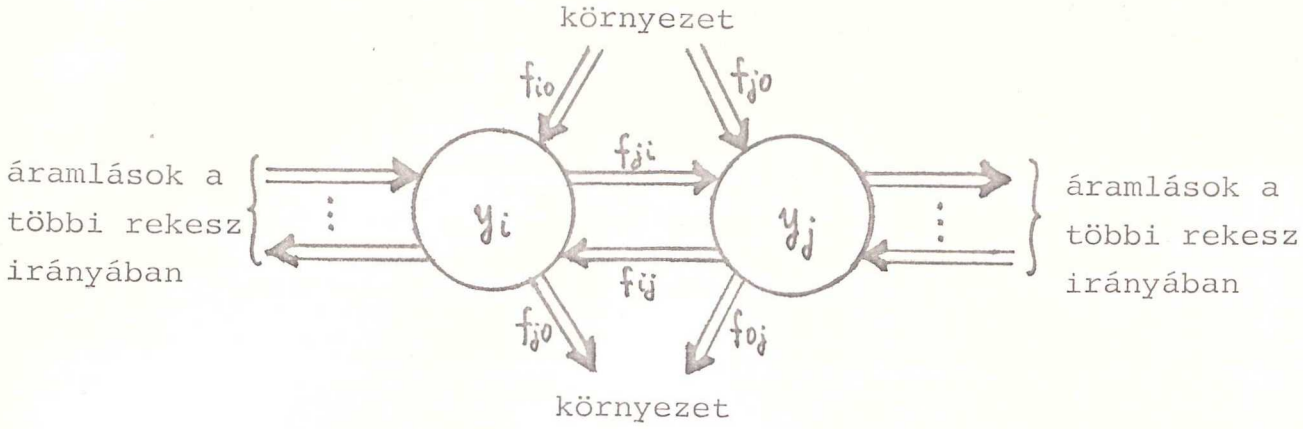
Végül az 5.4. pontban egy numerikus példán mutatjuk be a minimálpolinom-módszer kompartment-rendszerre történő alkalmazását.

5.1. A biológiai kompartment-analizis alapjai

E pontban először megadjuk egy általános /nemlineáris/ rekeszrendszer leirását és modell-egyenleteit, utalva az utóbbiakra vonatkozó elméleti eredményekre. Ezután bemutatjuk, hogy egy egyensulyi helyzetben levő idő-invariáns /autonóm/ nemlineáris rendszerbe beadott radioaktiv nyomjelző áramlása igen jó közelitéssel lineáris állandóegyütthatós differenciálegyenlet-rendszerrel irható le, melynek együtthatói az egyensulyi helyzet relativ sebességi együtthatói. Végül egy konkrét biológiai példát mutatunk be egy egyszerü kompartment-rendszerre, és ennek segitségével illusztráljuk a kompartment-analizis inverz, paraméterbecslési feladatát és az ezzel kapcsolatos kérdéseket.

Kompartment-rendszerek modell-egyenletei

Egy kompartment-rendszer vagy rekeszrendszer alatt /véges/ n számu, bizonyos anyagot tartalmazó kompartmentet /vagy rekeszt/, és ezek egymásközti, valamint a rendszer környezete felé irányuló anyagáramlásait értjük. Jelölje a t időpontban az i-edik rekeszhez tartozó anyagmennyiséget $y_i(t)$, az anyagnak az i-edik rekeszből a j-edik felé való kiáramlási sebességét $f_{ji}(t, \underline{y}(t))$, ahol $\underline{y}(.) = [y_1(.), \ldots, y_n(.)]^T : [0,\infty) \longrightarrow \mathbb{R}^n$, $i,j = 0,1,\ldots,n$, $i \neq j$, és az $i,j = 0$ esetek a környezet - mint "0-dik rekesz" - irányában történő be- és kiáramlásnak felelnek meg. A következő oldalon látható ábra a rendszer i-edik és j-edik rekeszt tartalmazó részének sémáját mutatja.



5.1.1. Ábra. Egy kompartment-rendszer i-edik és j-edik rekeszének sémája

Látható, hogy egy kompartment-rendszer tulajdonképpen egy irányitott gráffal reprezentálható, ahol a csucsoknak az $y_1(.), \ldots, y_n(.)$ függvények ill. a környezet /"0-adik csucs"/ feleltethetők meg, az éleknek pedig az $f_{ij}(.)$ áramlási sebesség-függvények /ahol az $i \to j$ élnek $f_{ji}(.)$ felel meg, $i,j = 0,1,\ldots,n$/. Ha $f_{ij}(.) \equiv 0$, akkor a $j \to i$ él elhagyható a gráfból.

Egy biológiai rendszerben az egyes kompartmentekhez tartozó vizsgált anyag lehet fizikailag /pl. membránnal/ szeparált a többi rekesz anyagától, de lehet akár kémiailag is, ha más vegyület formájában van jelen esetleg ugyanazon a helyen. Tehát, ha egy rekeszben levő anyagmennyiségről beszélünk, az nem jelent feltétlenül térbeli elkülönitettséget, bár az utóbbit könnyebb szemléletesen elképzelni.

A rekeszrendszerek modell-egyenletei lényegében az alábbi feltevésekre épülnek:

(i) A t időpontban az i-edik rekeszben levő anyag mennyisége $y_i(t) \geq 0$, $i = 1, \ldots, n$, $t \geq 0$.

(ii) A t időpontban az anyag i-edik rekeszből a j-edik felé való kilépési sebessége $f_{ji}(t, \underline{y}(t))$, ahol $f_{ji}(.): \mathbb{R}_+^{1+n} \to \mathbb{R}_+$ megfelelően sima függvény, $i, j = 0, 1, \ldots, n$.

(iii) A t időpillanatban az i-edik rekeszből a j-edik felé kilépő anyag ugyanabban a pillanatban belép a j-edik rekeszbe.

(iv) Ha a t időpontban az i-edik rekesz üres / $y_i(t) = 0$ /, akkor bármely $f_{ji}(t, \underline{y}(t))$ kilépési sebesség nulla / $i = 1, \ldots, n$; $j = 0, 1, \ldots, n$ /.

Mivel a t időpontban az i-edik rekeszben levő anyagmennyiség változásának sebessége egyenlő a be- és kiáramlási sebességek különbségével, igy a fenti feltevések alapján érvényes a következő differenciálegyenlet-rendszer [24]:

$$\dot{y}_i(t) = \sum_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^{n} \left[f_{ij}(t, \underline{y}(t)) - f_{ji}(t, \underline{y}(t)) \right], \quad t \geq 0, \; i = 1, \ldots, n. \qquad /5.1.1/$$

Mivel az $f_{ij}(t, .)$ függvények csak nemnegativ elemü vektorokra értelmezettek, igy /5.1.1/ megoldása alatt egy olyan $\underline{y}(.): \mathbb{R}_+ \to \mathbb{R}_+^n$ függvényt értünk, amely /komponensenként/ differenciálható $[0, \infty)$-en és kielégiti /5.1.1/-et. Ilyen megoldás egzisztenciáját és unicitását az $f_{ij}(t, .)$ függvények Lipschitz-folytonossága esetén bebizonyitották /vö. [46], 275. o./.

Mielőtt továbbmennénk, megjegyezzük, hogy több biológiai rendszerben /lásd pl. [39]/ a (iii) feltevés nem teljesül

/még közelitőleg sem/, vagyis az anyagnak az egyik rekeszből való kilépése és a másikba való belépése között eltelt idő gyakran nem elhanyagolható. Ilyen un. idő-késleltetéses kompartment-rendszerek modell-egyenleteit Győri és Eller [21, 20, 19] vezették le és vizsgálták /lineáris esetben/; egy konkrét biológiai rendszer modellezésére pedig [29]-ben alkalmazták.

Nyomjelzők alkalmazása idő-invariáns egyensulyi rendszerekben

Most rátérünk annak bemutatására, hogyan irható le egy /nemlineáris/ időinvariáns, egyensulyi helyzetben levő rekeszrendszerbe beadott kis mennyiségü radioaktiv nyomjelző anyag /'tracer'/ kinetikája /jó közelitéssel/ lineáris állandóegyütthatós kompartment-egyenletek segitségével. A gyakorlatban vizsgált rendszerekről általában feltételezhető, hogy idő-invariánsak, vagyis az f_{ij} áramlási sebességek explicite nem függnek az időtől: $f_{ij}(t, \underline{y}(t)) \equiv f_{ij}(\underline{y}(t))$. Ilyen biológiai rendszerek normális körülmények között általában dinamikus egyensulyi állapotban /'steady state'/ vannak, azaz

$$\underline{y}(t) \equiv \underline{v} = \text{konstans} \; / \in \mathbb{R}_+^n /$$

Különféle, nem tul szigoru feltételek mellett Sandberg [46] bebizonyitotta az idő-invariáns rekeszrendszerek egyensulyi helyzetének létezését, unicitását és stabilitását. A $\underline{v}$ egyensulyi vektor megoldása a következő nemlineáris egyenletrendszernek:

$$0 = \sum_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^{n} \left[f_{ij}(\underline{v}) - f_{ji}(\underline{v}) \right], \quad i = 1, \ldots, n \qquad /5.1.2/$$

/5.1.2/-ből a (iv) feltétel és $\underline{v}$ nemnegativitása alapján

$$v_i = 0 \Rightarrow f_{ji}(\underline{v}) = 0 \Rightarrow \sum_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^{n} f_{ij}(\underline{v}) = 0 \Rightarrow f_{ij}(\underline{v}) = 0, \quad j \neq i, \quad j = 0, 1, \ldots, n;$$

tehát, ha valamely kompartment egyensulyi helyzetben üres, akkor az összes feléje irányuló be- és kiáramlási sebesség nulla. Mivel az egyensulyi helyzet nagyon kis perturbációja esetén az ilyen rekeszek irányában történő áramlások /az egyensulyi helyzet stabilitása következtében/ elhanyagolhatóan kicsik, ezért e rekeszek gyakorlatilag elhagyhatók a rendszerből. Ennélfogva a továbbiakban feltehetjük, hogy a vizsgált idő-invariáns rendszer $\underline{v}$ egyensulyi helyzetére teljesül a

$$\underline{v} > \underline{0}$$

feltétel.

Egy radioaktiv nyomjelzővel végzett kisérlet abban áll, hogy az időskála $t=0$ pontjában az egyensulyi rendszer i-edik rekeszébe beadunk b_i mennyiségü radioaktivan jelzett anyagot /pl. injekció formájában; leggyakrabban csak egyetlen rekesznél van /pozitiv/ input/, majd alkalmas mérőeszközzel figyeljük a nyomjelző mennyiségének időbeli változását az egyes rekeszekben.

A beadott nyomjelzőre vonatkozóan a következő feltevéseket tesszük:

(I) a nyomjelző pillanatszerüen egyenletesen elkeveredik a rekeszben levő jelzetlen anyaggal, és igy a kiáramlásnál mindig olyan arányban áramlik ki egy rekeszből, mint amilyen arányban az illető rekeszben jelen van;

(II) a beadott jelzett anyag mennyisége olyan kicsiny a bent levő jelzetlen anyagéhoz képest, hogy a rendszer "észre sem veszi", vagyis az egyensuly gyakorlatilag nem változik meg $\left(\sum_{i=1}^{n} b_i << \min_{1\le i\le n} v_i\right)$.

Jelölje a t időpontban az i-edik rekeszben levő jelzett anyag mennyiségét $x_i(t)$. Mivel az i-edik rekeszből a j-edik felé a jelzetlen anyag kiáramlási sebessége (II) miatt gyakorlatilag az egyensulyi $f_{ji}(\underline{v})$ sebesség, és (I) alapján a nyomjelző gyakorlatilag $x_i(t)/v_i$ arányban áramlik együtt a jelzetlen anyaggal, igy a nyomjelző kilépési sebessége a időpillanatban az i-edik rekeszből a j-edik felé

$$\frac{x_i(t)}{v_i}\cdot f_{ji}(\underline{v}) = a_{ji}\,x_i(t)\ ,\quad i=1,\dots,n,\ j=0,1,\dots,n$$

ahol

$$a_{ji} := \frac{f_{ji}(\underline{v})}{v_i}\ . \qquad /5.1.3/$$

Tehát a nyomjelző áramlását jó közelitéssel a következő sebességi egyenletek irják le:

$$\left.\begin{aligned} \dot{x}_i(t) &= -\sum_{\substack{j=0\\ j\neq i}}^{n} a_{ji}\,x_i(t) + \sum_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{n} a_{ij}\,x_j(t)\ ,\ t\ge 0,\\ x_i(0) &= b_i\ ,\qquad i=1,\dots,n. \end{aligned}\right\} \qquad /5.1.4/$$

Az /5.1.3/ relációval definiált a_{ji} állandókat relativ sebességi állandóknak vagy /frakcionális/ <u>transzportegyütthatók</u>nak nevezzük.

Bevezetve a transzportegyütthatókból képzett $A=(a_{ij})_{n\times n}$ mátrixot, ahol

$$a_{ii} := -\sum_{\substack{j=0\\ j\neq i}}^{n} a_{ji}\ ,\quad i=1,\dots,n,$$

az /5.1.4/ rendszer vektor-mátrix-alakba irható:

$$\left.\begin{aligned} \dot{\underline{x}}(t) &= A\,\underline{x}(t) \quad , \; t \geq 0 \\ \underline{x}(0) &= \underline{b} \end{aligned}\right\} \qquad /5.1.5/$$

/5.1.5/ lineáris állandóegyütthatós differenciálegyenlet-rendszer, melynek numerikus megoldására felhasználhatók a 3. fejezetben tárgyalt eljárások.

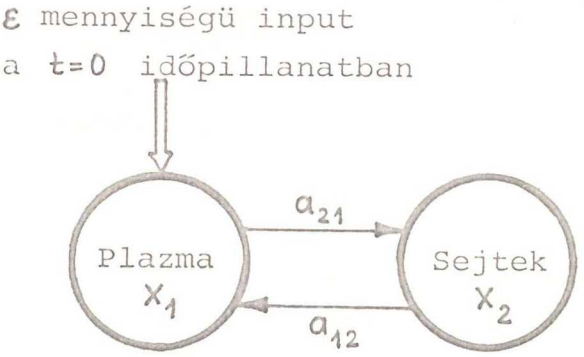
A nyomjelzők alkalmazásának idő-invariáns, dinamikus egyensulyban levő rekeszrendszerek vizsgálatában két szempontból is óriási jelentősége van: (1) különösebb /pl. mütéti/ beavatkozás nélkül megfigyelhetővé válnak más uton nehezen vagy egyáltalán nem megfigyelhető folyamatok; (2) a megfigyelt nyomjelző-áramlás az egyensulyi transzport együtthatók segitségével megadott lineáris állandóegyütthatós differenciálegyenlet-renszerrel irható le, annak ellenére, hogy az alapvető transzportfolyamat általában ismeretlen nemlineáris természetü. A megfigyelési adatok alapján lehetőség van az egyensulyi transzportegyütthatók becslésére, amelyek az orvos számára diagnosztikus értéküek lehetnek.

Megjegyezzük, hogy általában nem maguk az $x_i(t)$ mennyiségek mérhetők, hanem a $z_i(t) = r_i\, x_i(t)/v_i$ un. <u>specifikus aktivitás</u>ok, melyek lényegében a jelzett anyagnak a jelzetlen anyag egyensulyi mennyiségéhez viszonyitott koncentrációi, szorozva az r_i fizikai konverziós faktorokkal, amelyek a koncentrációról a radioaktivitásra való átszámitás miatt szerepelnek /lásd [24], 4. o./.

Példa: a kálium megoszlása a sejtek és a plazma között

A fentiek illusztrálására megadunk egy, Jacquez könyvéből /[24], 121. o./ vett példát, amely a kálium egyensulyi megoszlásának vizsgálata ^{42}K izotóp segitségével. A kálium egy aktiv transzportfolyamat utján épül be az emberi vörösvérsejtekbe, amely ezzel együtt nátriumot von el a sejtekből. A transzportfolyamat nemlineáris, és energiaráforditást igényel a sejtektől egy magas sejtközi káliumszint fenntartásához.

Tegyük fel, hogy a $t=0$ időpillanatban egy kis ε mennyiségü jelzett káliumot adunk a plazmába. A jelzett kálium eloszlása az ábrán látható rekeszrendszerrel modellezhető:



5.1.2. Ábra. ^{42}K izotóp eloszlásának rekeszmodellje

A nyomjelző áramlását leiró differenciálegyenletek:

$$\dot{x}_1(t) = -a_{21}x_1(t) + a_{12}x_2(t), \qquad x_1(0)=\varepsilon$$

$$\dot{x}_2(t) = a_{21}x_1(t) - a_{12}x_2(t), \qquad x_2(0)=0$$

melyek megoldása

$$x_1(t) = \varepsilon \frac{a_{12} + a_{21} e^{-t(a_{12}+a_{21})}}{a_{12} + a_{21}} ,$$

$$x_2(t) = \varepsilon \frac{a_{21} - a_{21} e^{-t(a_{12}+a_{21})}}{a_{12} + a_{21}} .$$

Mint már emlitettük, megfigyelni általában csak a $z_i(t) = r_i x_i(t)/v_i$ specifikus aktivitásokat tudjuk, amelyek itt

$$z_1(t) = r_1 \varepsilon \left[\frac{a_{12}}{v_1(a_{12}+a_{21})} + \frac{a_{21}}{v_1(a_{12}+a_{21})} e^{-t(a_{12}+a_{21})} \right]$$

$$z_2(t) = r_2 \varepsilon \frac{a_{21}}{v_2(a_{12}+a_{21})} \left[1 - e^{-t(a_{12}+a_{21})} \right]$$

A $z_1(\cdot)$ függvény ismeretében egyértelmüen meghatározható $(a_{12}+a_{21})$, (a_{12}/v_1) és (a_{21}/v_1) /feltéve, hogy ε, r_1 és r_2 ismertek/, amelyekből az a_{12} és a_{21} transzportegyütthatók kiszámolhatók. Ha csak a $z_2(.)$ függvényt ismerjük, akkor abból csupán $(a_{12}+a_{21})$ és (a_{21}/v_2) határozható meg. Ha viszont mindkét specifikus aktivitási függvényt ismerjük, akkor az emlitetteken tul még a (v_1/v_2) egyensulyi térfogatarány is megkapható, amely az orvos számára szintén fontos információt jelenthet /pl. egy normálértéktől való lényeges eltérés valamilyen rendellenesség jele lehet/.

Rekeszrendszerek paraméterbecslési feladata

A kompartment-analizis legfontosabb gyakorlati feladata az un. inverz probléma /[24], 102. o./, amely alatt a rendszer ismeretlen paramétereinek meghatározását /becslését/ értjük mérési adatok alapján. A paraméterbecslési módszerek alkalmazásához feltesszük, hogy a keresett paraméterek iden-

tifikálhatóak a megfigyelendő görbékből, azaz, ha e görbéket pontosan ismernénk, ugy azok egyértelmüen meghatároznák a keresett paramétereket. Az identifikálhatósághoz az szükséges, hogy a tekintett mérési függvény ténylegesen függjön az összes keresett paramétertől, ill. hogy paraméter-transzformációval ne legyen csökkenthető a függvény paramétereinek száma. Igy fenti példánkban az $z_2(.)$ függvényből a v_1 paraméter nem identifikálható, mivel attól $z_2(.)$ nem függ; másrészt az a_{12}, a_{21}, v_2 paraméterhármas sem identifikálható belőle, mert a $\theta_1 = \varepsilon r_2 a_2 / [v_2(a_{12}+a_{21})]$, $\theta_2 = a_{12} + a_{21}$ paraméter-transzformációval a függvény a $z_2(t) = \theta_1 [1 - e^{-t\theta_2}]$ kétparaméteres alakra hozható.

Egy kompartment-rendszer transzportegyütthatói identifikálhatóságának kérdése általában a rendszer strukturája /gráfja/ és a mérési ill. input konfiguráció alapján már a megfigyelés előtt eldönthető. E problémának már eléggé kiterjedt irodalma van; a kérdés egy logikai megközelitése és referenciák találhatók [22]-ben.

A gyakorlatban a paraméterek az identifikálhatósági feltétel teljesülése esetén sem azonosithatók pontosan, mivel egyrészt a matematikai modell sem felel meg száz százalékosan a tényleges biológiai folyamatnak, másrészt a mérés során elkövetett megfigyelési hibák is zajossá teszik az output függvényt. Ezen okok miatt csupán a paraméterek közelitő értékeinek meghatározására, azaz paraméterbecslésre van lehetőségünk.

Az alkalmazások során egy vagy több időfüggvényt figyelnek meg diszkrét időpontokban, ahol a k -adik megfigyelési

függvény, $y_k(t)$, általában a rekeszekben levő $x_i(t)$ nyomjelző-mennyiségek lineáris kombinációja:

$$y_k(t) = \sum_{i=1}^{n} c_{ik}\, x_i(t) = \underline{c}_k^T \underline{x}(t) = \underline{c}_k^T e^{tA} \underline{b} \quad , \quad k = 1, \ldots, K$$

Mivel közvetlenül csak a $x_i(t)$ specifikus aktivitások figyelhetők meg, ezért $\underline{c}_k$ i-edik eleme tartalmazza az r_i / v_i tényezőt. Egy megfigyelés leggyakrabban egyetlen rekesz specifikus aktivitásának mérését jelenti, és ilyenkor egy kivételével $\underline{c}_k$ összes eleme nulla.

Tegyük most fel, hogy mind a $\underline{c}_k$ vektorok, mind az A mátrix tartalmaz ismeretlen paramétereket, és foglaljuk az összes paramétert egy $\underline{\theta} = (\theta_i)_\nu \in \mathbb{R}^\nu$ paramétervektorba. A $\underline{c}_k$ vektorok paraméterei pl. a v_i rekesztérfogatotk, az A mátrix paraméterei általában a nemzérus transzportegyütthatók. Legyen a $\underline{\theta}$ paramétervektor keresett /"elméleti"/ értéke $\underline{\theta}^*$ és tegyük fel, hogy a k-adik output függvénynek a t_{jk} időpontban történő mérésekor ε_{jk} hibát követünk el, vagyis a ténylegesen mért érték

$$\tilde{y}_{jk} = y_k(t_{jk}, \underline{\theta}^*) + \varepsilon_{jk} \quad , \quad j = 1, \ldots, m_k \; ; \; k = 1, \ldots, K,$$

ahol

$$y_k(t, \underline{\theta}) = \underline{c}_k(\underline{\theta})\, e^{tA(\underline{\theta})}\, \underline{b} \qquad /5.1.6/$$

Az ismeretlen $\underline{\theta}^*$ paraméter-érték csak pontos mérések, azaz $\varepsilon_{jk} = 0 \; / \forall j, k /$ esetén lenne meghatározható, egyébként csak egy $\hat{\underline{\theta}}$ becslés adható rá, amely közel lesz $\underline{\theta}^*$ -hoz, ha az ε_{jk} mérési hibák elég kicsik. A paraméterbecslés módszereivel a következő pontban foglalkozunk, előtte csupán két technikai szempontra térünk ki.

A leghatékonyabb paraméterbecslő módszerek /'gradiens tipusu' módszerek/ alkalmazásához a megfigyelési függvényeken kivül szükség van ezek paraméterek szerinti parciális deriváltjainak kiszámitására is. Esetünkben az /5.1.6/ output függvény parciális deriváltjai:

$$\frac{\partial y_k(t,\underline{\theta})}{\partial \theta_r} = \frac{\partial \underline{c}_k^T(\underline{\theta})}{\partial \theta_r} e^{tA(\underline{\theta})} \underline{b} + \underline{c}_k^T(\underline{\theta}) \frac{\partial e^{tA(\theta)}}{\partial \theta_r} \underline{b}, \quad r=1,\dots,\nu.$$

Tehát a paraméterbecslési feladat megoldásához szükség van $\exp(tA(\underline{\theta}))\underline{b}$ és parciális deriváltjai számitására, ami megoldható a 3. és 4. fejezetben tárgyalt módszerekkel.

A paraméterbecslési módszerek tárgyalásához az egyszerüség kedvéért célszerü a mérési adatokat lineáris sorozatba rendezni. Legyen az összes mérési adat száma m, és ha az i-edik $\tilde{y}_i = \tilde{y}_{j,k}$, akkor legyen a hozzá tartozó mérési hiba $\varepsilon_i = \varepsilon_{j,k}$ és a megfelelő output függvény pedig $f_i(\underline{\theta}) = y_k(t_{j,k}, \underline{\theta})$. Ezzel a paraméterbecslési feladat az egyszerübb $\tilde{y}_i = f_i(\underline{\theta}) + \varepsilon_i$, $i=1,\dots,m$ alak segitségével adható meg.

5.2. Nemlineáris paraméterbecslési módszerek

Tegyük fel, hogy bizonyos /biológiai, kémiai, stb./ input-output rendszerek egy osztálya egy $\underline{\theta} \in \Theta \subset \mathbb{R}^\nu$ paramétervektorral jellemezhető, és bármely input /pl. mérési konfiguráció, stb./ esetén ismerjük egy ilyen rendszer válaszának függési módját az inputtól és a $\underline{\theta}$ paramétervektor értékétől. Legyen a megfigyelni kivánt konkrét rendszerre a $\underline{\theta}$ paraméter értéke $\underline{\theta} = \underline{\theta}^*$ és tartozzék m számu kiválasztott input közül az i-edikhez az $f_i(\underline{\theta}^*)$ output, ahol $f_i(.): \Theta \longrightarrow \mathbb{R}$ ismert paraméter-függvény /melyről feltesszük, hogy elegendően si-

ma/. Végül tegyük fel, hogy az i-edik inputhoz tartozó válasz megfigyelésekor ε_i mérési hibát követünk el, és igy az $f_i(\underline{\theta}^*)$ outputok helyett az

$$\tilde{y}_i = f_i(\underline{\theta}^*) + \varepsilon_i \quad , i = 1, \ldots, m \qquad /5.2.1/$$

hibával terhelt értékeket figyeljük meg.

A paraméterbecslési feladat abban áll, hogy $\underline{\theta}^*$ ismeretlen értékére minél jobb $\hat{\underline{\theta}}$ becslést adjunk a mért $\tilde{y}_i$ adatok és az $f_i(.)$ függvények /a továbbiakban modell-függvények/ ismeretében. Ha az ε_i hibákról semmit sem tudunk, akkor semmiféle $\hat{\underline{\theta}}$ becslésről nem mondhatunk semmi érdemlegeset. Egy $\hat{\underline{\theta}}$ becslés jóságát az ε_i hibák viszonylatában legszerencsésebben statisztikailag jellemezhetjük; ehhez az ε_i hibákat valószinüségi változóknak tekintjük és bizonyos feltevéseket teszünk ezek eloszlására.

Gyakori feltevés, hogy az ε_i hibák függetlenek, azonos eloszlásuak és nulla várható értékük. Mivel mérési hibákról van szó, szokásos feltenni, hogy ez az eloszlás a normális eloszlás. Azonban radioaktiv méréseknél, ahol a mért érték a beütésszám, jogosabb lehet annak feltételezése, hogy $\tilde{y}_i$ $\lambda = f_i(\underline{\theta}^*)$ paraméterü Poisson-eloszlást követ. A továbbiakban csak e két eloszlásra leszünk különös tekintettel.

E pontban két paraméterbecslési eljárást ismertetünk: a /sulyozott/ legkisebb négyzetek módszerét és a maximum-likelihood-módszert Poisson-eloszlás esetén. Mindkét módszerrel kapcsolatban kitérünk a $\hat{\underline{\theta}}$ paraméterbecslések numerikus meghatározására szolgáló eljárásokra is; de az utóbbiak közül csak olyanokra szoritkozunk, melyeknél csak az első parciális deriváltak kiszámitása szükséges.

Legkisebb négyzetek módszere

A nemlineáris függvények paramétereinek becslésére leggyakrabban alkalmazott eljárás a /sulyozott/ legkisebb négyzetek módszere, amely a $\hat{\underline{\theta}}$ paraméterbecslést az

$$S(\underline{\theta}) := \sum_{i=1}^{m} w_i [\tilde{y}_i - f_i(\underline{\theta})]^2 \qquad /5.2.2/$$

sulyozott négyzetösszeg minimalizálása utján határozza meg. Itt a $w_i \geq 0$ sulyok általában az $\tilde{y}_i$ megfigyelések pontosságát, megbizhatóságát reprezentálják. Például ha az ε_i hibák $D^2(\varepsilon_i) = \sigma_i^2$ varianciája /esetleg egy konstans szorzótól eltekintve/ ismert, akkor a $w_i = \sigma_i^{-2}$ sulyok alkalmazása célszerü /'általánositott legkisebb négyzetek módszere'/.

Statisztikai szempontból a legkisebb négyzetek módszeréről, mint paraméterbecslési módszerről, a következők mondhatók el. Amennyiben az ε_i hibák független, nulla várható értékü normális eloszlásu valószinüségi változók, az általánositott legkisebb négyzetek módszere egybeesik a maximum-likelihood-módszerrel /vö. [2], 63. o./; és ha még az azonos hibavariancia feltétele is áll, akkor mindkettő a "közönséges" legkisebb négyzetek módszerére /ahol $w_i = 1 \; \forall i$/ redukálódik. Ilyen esetekben tehát érvényesek a maximum-likelihood-becslések kedvező tulajdonságai, azaz a becslés bizonyos viszonylag enyhe feltételek mellett konzisztens, aszimptotikusan hatásos és aszimptotikusan normális eloszlásu, továbbá, ha létezik elégséges becslés, ugy az /az egyetlen/ maximum-likelihood-becslés [2, 8].

Abban az esetben, ha a hibák normalitásának feltétele nem teljesül, szintén érvényesek bizonyos aszimptotikus tu-

lajdonságok, melyeket pl. a [8] cikk foglal össze. Bebizonyitották, hogy ha az ε_i hibák korrelálatlanok, nulla várható értékűek és azonos szórásuak, akkor az $f_i(.)$ függvényekre vonatkozó regularitási feltételek mellett a /közönséges/ legkisebb négyzetek módszerével nyert $\hat{\underline{\theta}}$ paraméterbecslés erősen konzisztens és aszimptotikusan normális.

Sajnos a fentiekben felsorolt aszimptotikus tulajdonságok csak az m mintelemszám eléggé nagy értékeire vonatkozóan mondanak valamit. A gyakorlati problémák nagy részében a mérések száma általában elég kicsi, legtöbbször 10 és 40 közt mozog. Ilyen kis minták esetére a legkisebb négyzetes becslések tulajdonságai csak lineáris $f_i(\underline{\theta})$ modell-függvényekre ismertek /lásd a lineáris regresszió jólismert Gauss-Markov-féle elméletét; pl. [2], 58. o./.

Most rátérünk a legkisebb négyzetek módszerének numerikus megvalósitásával kapcsolatos eljárásokra. Bár többváltozós függvények minimalizálására többféle módszer is ismeretes, /5.2.2/ minimalizálására azok az eljárások a leghatékonyabbak, amelyek figyelembe veszik az $S(.)$ függvény négyzetösszeg-strukturáját [2]. E módszerek alapja a négyzetre emelendő $y_i - f_i(\underline{\theta})$ függvények linearizálása az aktuális, mondjuk k-adik közelités / $\underline{\theta}^k$ / körül. Ezáltal a minimalizálandó $S(.)$ függvényt helyettesitjük Gauss-Newton-féle közelitésével:

$$S_k(\underline{\theta}^k + \underline{\delta}) = \sum_{i=1}^{m} w_i \left[y_i - f_i(\underline{\theta}^k) - \sum_{j=1}^{\nu} \frac{\partial f_i}{\partial \theta_j}(\underline{\theta}^k)\, \delta_j \right]^2 \qquad /5.2.3/$$

amely már /a $\underline{\delta}$ növekményben/ lineáris függvények négyzetösszege. Vezessük most be az alábbi jelöléseket:

$$\underline{g}^k := (g_i^k)_\nu \quad , \quad g_i^k := -\sum_{l=1}^{m} w_l \frac{\partial f_l}{\partial \theta_i}(\underline{\theta}^k) \left[\tilde{y}_l - f_l(\underline{\theta}^k) \right] , \quad i = 1, \ldots, \nu ;$$

$$M_k := (m_{ij}^k)_{\nu\times\nu}, \quad m_{ij}^k := \sum_{\ell=1}^{m} w_\ell \frac{\partial f_\ell}{\partial \theta_i}(\underline{\theta}^k) \frac{\partial f_\ell}{\partial \theta_j}(\underline{\theta}^k), \; i,j = 1,\dots,\nu.$$

Ekkor az /5.2.3/ kvadratikus függvény minimumhelye

$$\underline{\delta}^k = M_k^{-1} \underline{g}$$

alakban áll elő, feltéve, hogy M_k nemszinguláris.

A klasszikus Gauss-Newton-féle iterációs módszernél kiindulva egy kezdeti $\underline{\theta}^0$ közelitésből, minden ujabb közelitést a

$$\underline{\theta}^{k+1} = \underline{\theta}^k + \underline{\delta}^k$$

reláció alapján számitunk. Azonban az eljárás ilyen formájában nem mindig konvergens, még jó kezdőérték esetén sem /vö. [34], 72. o./. A divergencia oka lehet az $f_i(.)$ függvények nagymértékü nemlinearitása a $\hat{\underline{\theta}}$ minimumhely környezetében, vagy rossz illeszkedésük a mérési adatokhoz / $S(\hat{\underline{\theta}})$ nagy/. Ilyen esetben szokásos eljárás a $\underline{\delta}^k$ korrekciós vektornak egy olyan $\omega_k \in (0,1)$ relaxációs tényezővel való szorzása, hogy a

$$\underline{\theta}^{k+1} = \underline{\theta}^k + \omega_k \underline{\delta}^k$$

helyen már kisebb legyen $S(.)$ értéke, mint $\underline{\theta}^k$-ban. Mivel $S(.)$ negativ gradiense $\underline{\theta}^k$-ban $2\underline{g}^k$, és $\underline{\delta}^k$ ezzel bezárt szöge $\underline{g}^k \neq 0$ esetben hegyesszög / $\underline{\delta}^{kT}\underline{g}^k = \underline{g}^{kT} M_k^{-1} \underline{g}^k > 0$, mert M_k pozitiv definit/, igy $S(.)$ a $\underline{\theta}^k$ helyen lokálisan csökken a $\underline{\delta}^k$ irányban, s ezért ilyen ω_k tényező létezik. ω_k célszerü választására különféle stratégiák ismertek /lásd pl. [2], 110. o./.

A relaxációs Gauss-Newton-tipusu módszerekkel kapcsolatos fő probléma az M_k /pozitiv szemidefinit/ mátrixok szingularitása ill. közel-szingularitása. Ilyenkor a számolt $\underline{\delta}^k$

korrekciós vektor igen nagy hibát tartalmazhat, mivel gyengén meghatározott lineáris egyenletrendszer megoldásából származik. E nehézség áthidalható Levenberg-Marquardt-tipusu módszerek alkalmazásával, melyek általános alakja

$$\underline{\theta}^{k+1} = \underline{\theta}^{k} + \omega_k \left[M_k + \lambda_k I\right]^{-1} \underline{g}^{k} , \qquad k = 0, 1, \ldots$$

ahol λ_k alkalmas nemnegativ szám és $\omega_k \in (0, 1]$ relaxációs tényező. Ha $\lambda_k > 0$ akkor $M_k + \lambda_k I$ mindig pozitiv definit /tehát nemszinguláris/, és elég nagy λ_k-ra nem gyengén meghatározott. λ_k megválasztására szintén többféle stratégia létezik /lásd pl. [13]/.

Az emlitett módszerekre az ω_k ill. a λ_k tényezők alkalmas választása esetén un. szemilokális konvergenciatételek mondhatók ki /lásd [42], 14.4 pont/. E tételek szerint, ha a $\underline{\theta}^0$ kezdőértékhez tartozó $\left\{ \underline{\theta} \in \mathbb{R}^{\nu} \mid S(\underline{\theta}) \leq S(\underline{\theta}^0) \right\} \subset \Theta$ szinthalmaz kompakt és egyetlen $\hat{\underline{\theta}}$ /lokális/ minimumhelyet tartalmaz, akkor az $f_i(.)$ függvények /kétszeri/ folytonos differenciálhatósága esetén az iteráció /első rendben/ konvergál a $\hat{\underline{\theta}}$ minimumhelyhez.

Maximum-likelihood-módszer Poisson-eloszlás esetén

Tegyük fel, hogy az $\tilde{y}_1, \ldots, \tilde{y}_m$ megfigyelések független Poisson-eloszlásu valószinüségi változók, rendre $f_1(\underline{\theta}^*), \ldots, f_m(\underline{\theta}^*)$ várható értékkel, azaz

$$P(\tilde{y}_i = k) = e^{-f_i(\underline{\theta}^*)} \frac{[f_i(\underline{\theta}^*)]^k}{k!} , \qquad \begin{array}{l} i = 1, \ldots, m, \\ k = 0, 1, 2, \ldots . \end{array}$$

A $\hat{\underline{\theta}}$ maximum-likelihood-becslést az alábbi likelihood-függvény maximalizálásával nyerjük:

$$L(\underline{\theta}\,|\,\underline{\tilde{y}}) = \prod_{i=1}^{m} \left[\exp(-f_i(\underline{\theta})) [f_i(\underline{\theta})]^{\tilde{y}_i} / (\tilde{y}_i!) \right]$$

$$= \frac{1}{\prod_{i=1}^{m} \tilde{y}_i!} \exp\left(-\sum_{i=1}^{m} [f_i(\underline{\theta}) - \tilde{y}_i \ln f_i(\underline{\theta})] \right) \qquad /5.2.4/$$

A maximum-likelihood-becslések statisztikai tulajdonságait a legkisebb négyzetek módszerével kapcsolatban már említettük, és most már csak $\hat{\underline{\theta}}$ numerikus meghatározásának kérdésével foglalkozunk.

Világos, hogy /5.2.4/ maximalizálása ekvivalens a következő $\phi(.)$ függvény minimalizálásával:

$$\phi(\underline{\theta}) = \sum_{i=1}^{m} [f_i(\underline{\theta}) - \tilde{y}_i \ln f_i(\underline{\theta})] \,.$$

$\phi(.)$ negativ gradiense a $\underline{\theta}^k$ helyen $\underline{g}^k = (g_i^k)_v$, ahol

$$g_i^k = \sum_{\ell=1}^{m} \left[1 - \frac{\tilde{y}_\ell}{f_\ell(\underline{\theta}^k)} \right] \frac{\partial f_\ell}{\partial \theta_i}(\underline{\theta}^k) = -\sum_{\ell=1}^{m} [f_\ell(\underline{\theta}^k)]^{-1} [\tilde{y}_\ell - f_\ell(\underline{\theta}^k)] \frac{\partial f_\ell}{\partial \theta_i}(\underline{\theta}^k)$$

Látható, hogy $\phi(.)$ negativ gradiense a $\underline{\theta}^k$ helyen formailag megegyezik az /5.2.2/-vel definiált $S(.)$ négyzetösszeg negativ gradiensével abban az esetben, ha a w_i sulyokat a

$$w_i = [f_i(\underline{\theta}^k)]^{-1} \quad , i = 1, \ldots, m \qquad /5.2.5/$$

relációval definiáljuk /és rögzitettnek tekintjük deriválásnál/. E felismerés, amely Jennrich és Moore eredménye [26], lehetővé teszi a legkisebb négyzetes nemlineáris paraméterbecslő programok felhasználását a maximum-likelihood-becslés meghatározására; csupán annyit kell tennünk, hogy minden egyes ujabb $\underline{\theta}^k$ közelités meghatározása után /5.2.5/ szerint ujradefiniáljuk a w_i sulyokat. Ezen szukcesszive módositott sulyozás alkalmazásával a Gauss-Newton-tipusu módszerek mindig lejtőmódszerbe mennek át.

A paraméterbecslés pontossága és az illeszkedés jósága

Az iterációs eljárással nyert $\hat{\underline{\theta}}$ paraméterbecslés meghatározása után felmerül a kérdés, hogy mennyire jól illeszkednek a becsült $f_i(\hat{\underline{\theta}})$ output értékek az $\tilde{y}_i$ mérési adatokhoz ill., hogy mennyire megbizhatóak, pontosak a számolt paraméterek. Sajnos e kérdésekre nem adhatunk kielégitő választ, mivel a nemlineáris regressziós modellek statisztikai elmélete e téren jelenleg még nem kidolgozott. Bizonyos kvantitativ mórőszámok megadhatók, de ezek csak kellő óvatossággal veendők figyelembe.

A paraméterbecslés pontosságára vonatkozóan követett eljárás: az $f_i(.)$ függvények linearizálása a számolt $\hat{\underline{\theta}}$ paraméterbecslés körül, majd a kapott linearizált modell alapján a lineáris regressziónál szokásos statisztikai vizsgálatok elvégzése /pl. $\hat{\underline{\theta}}$ becsült kovariancia- ill. korrelációmátrixának megadása, ennek főkomponens-analizise, konfidenciatartományok és hipotézisvizsgálat az egyes paraméterekre ill. a teljes paramétervektorra/. A linearizált modellel való közelités megbizhatóságát két, egymással összefüggő tényező is ronthatja: ha $\hat{\underline{\theta}}$ nincs elég közel a valódi $\underline{\theta}^*$ értékhez ill., ha az $f_i(.)$ függvények erősen nemlineárisak $\underline{\theta}^*$ környezetében. Ezért a linearizálás utján nyert eredmények gyakran csak durva közelitésnek tekinthetők.

A modell-függvények illeszkedésének jóságát két szempontból is jellemezhetjük. Az egyik szempont, hogy mennyire vannak közel az illesztett $f_i(\hat{\underline{\theta}})$ függvényértékek az $\tilde{y}_i$ mérési adatokhoz, azaz, hogy mennyire kicsik az $r_i := \tilde{y}_i - f_i(\hat{\underline{\theta}})$ reziduálok. E közelség kvantitative jellemezhető például az

ε_i hibák becsült szórásával /abszolut mérőszám/, vagy különféle korrelációs tipusu mutatókkal /relativ mérőszámok/; egyéb mérőszámok találhatók [13]-ban.

Amennyiben az /5.2.1/ regressziós modellben az ε_i hibák független $N(0,\sigma^2)$ valószinüségi változók, és a $\hat{\underline{\theta}} \approx \underline{\theta}^*$ közelités elég jó, akkor az r_i reziduáloknak véletlenszerüen kell ingadozniuk a nulla körül. Ha ez az ingadozás szisztematikus, pl. valamilyen görbe alakját követi, akkor az $f_i(.)$ modellfüggvények hibás specifikációjára gyanakodhatunk. A reziduálokban levő szisztematikus tendencia, trend jelenléte jól jellemezhető a reziduálokból számolt sorozatkorrelációs együttható segitségével [13]. A reziduálok előjelei sorozatának véletlenszerüsége a run-szám-próba segitségével ellenőrizhető /[8], 201. o./. Annak tesztelésére, hogy valóban az adott $f_i(.)$ függvényekkel érvényes-e az /5.2.1/ regressziós modell, jelenleg még nem ismert elméleti szempontból adekvát eljárás.

5.3. Mátrix-exponenciális módszerek kompartment-rendszerre történő alkalmazásának speciális szempontjai

Bizonyos mátrix-exponenciális módszerek lineáris kompartment-rendszerre való alkalmazásánál jól kihasználhatók az ilyen rendszerek együtthatómátrixai, az un. kompartment-mátrixok speciális tulajdonságai. Igy például megmutatjuk, hogy a Taylor-sor és a négyzetelés módszerénél a kerekitési hibák terjedését elősegitő bizonyos tényezők nincsenek jelen ill. könnyen kiküszöbölhetők. Ehhez először megvizsgáljuk,

hogy milyen tulajdonságokkal rendelkezik egy kompartment-mátrix és exponenciálisa.

Kompartment-mátrixok tulajdonságai

Emlékeztetünk arra, hogy egy kompartment-mátrix egy olyan $A=(a_{ij})_{n\times n}\in\mathbb{R}^{n\times n}$ mátrix, melynek elmei a következő összefüggéseknek tesznek eleget:

$$\left.\begin{aligned} a_{jj} &= -\sum_{\substack{i=0\\ i\neq j}}^{n} a_{ij} \\ a_{ij} &\geq 0, \quad i=0,1,\dots,n,\ i\neq j \end{aligned}\right\} \quad j=1,\dots,n \qquad /5.3.1/$$

/ahol az a_{0j} számok maguk nem mátrixelemek, csupán a_{jj} definíciójában szerepelnek/.

Tehát az A kompartment-mátrix egy un. lényegében nemnegativ mátrix /[5], 146. o./, mivel főátlón kivüli elemei nemnegativok. Egy ilyen mátrix spektrum-eltolással nemnegativ mátrixba vihető át:

$$\lambda=\max_{1\leq j\leq n}(-a_{jj}) \Rightarrow A+\lambda I\geq 0 \qquad /5.3.2/$$

Ebből közvetlenül következik, hogy $\exp(tA)$ nemnegativ $t\geq 0$ -ra:

$$e^{tA}=e^{-\lambda t}\sum_{k=0}^{\infty}\frac{t^k}{k!}(A+\lambda I)^k\geq 0. \qquad /5.3.3/$$

Továbbá, ha A irreducibilis, akkor /és csak akkor/ $t>0$-ra $\exp(tA)>0$ /elemenként/ is érvényes /[5], /3.11/ tétel/.

A Gersgorin-tétel /[41], 289. o./ segitségével könnyen belátható, hogy egy kompartment-mátrix bármely sajátértéke vagy negativ valós részü, vagy nulla. Ugyanis az A^T mátrixhoz tartozó Gersgorin-körök vagy teljesen a képzetes tengelytől

balra helyezkednek el, vagy /ha $\exists j : a_{0j} = 0$ / balról érintik a képzetes tengelyt az origóban, mivel középpontjuk $a_{jj} = -\sum_{\substack{i=0 \\ i \neq j}}^{n} a_{ij}$, sugaruk pedig $\sum_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^{n} a_{ij}$. Ebből következik, hogy egy nemszinguláris kompartment-mátrix mindig stabil tipusu / $\alpha(A) < 0$ /.

A szingularitás kompartment-mátrixoknál bizonyos értelemben "természetes" módon léphet fel. Ha például az A kompartment-mátrix zárt, azaz az összes környezetbe való kiáramlási transzportegyüttható zérus / $a_{0j} = 0$, $j = 1, \dots, n$ /, akkor szinguláris, mivel sorvektorainak összege a zérus sorvektor. Sőt az is nyilvánvaló, hogy zárt kompartment-mátrix nulla sajátértékéhez tartozó baloldali sajátvektora az $\underline{1} = [1, \dots, 1]^T$ összegző vektor:

$$a_{0j} = 0, \; j = 1, \dots, n \quad \Longrightarrow \quad \underline{1}^T A = 0 \cdot \underline{1}^T \qquad /5.3.4/$$

A következő lemma kompartment-mátrixok spektrális abszcisszáján fontos tulajdonságait adja meg.

5.3.1. Lemma. Egy A kompartment-mátrixnak $\alpha(A)$ mindig egyetlen /bár nem feltétlenül egyszeres/ maximális valós részü sajátértéke, és érvényes rá a következő becslés:

$$\min_{1 \le j \le n} (-a_{0j}) \le \alpha(A) \le \max_{1 \le j \le n} (-a_{0j}) \qquad /5.3.5/$$

Ha A-ról még azt is feltesszük, hogy irreducibilis, akkor $\alpha(A)$ egyszeres sajátérték, és léteznek hozzá csupa pozitiv elemet tartalmazó bal- és jobboldali sajátvektorok, továbbá /5.3.5/ két egyenlőtlensége közül bármelyikben csak akkor érvényes egyenlőség, ha $a_{01} = \dots = a_{0n}$.

Bizonyitás: Először tegyük fel, hogy A irreducibilis. Ekkor az /5.3.2/-vel definiált $A + \lambda I$ nemnegativ elemü mátrix is ir-

reducibilis, és igy Frobenius tétele /[45], 524. o./ alapján $\rho(A+\lambda I)$ egyszeres sajátértéke, pozitiv elemü bal- és jobboldali sajátvektorokkal. Nyilvánvaló, hogy $\alpha(A)=\alpha(A+\lambda I)-\lambda=\rho(A+\lambda I)-\lambda$, igy $\alpha(A)$ egyetlen és egyszeres maximális valós részü sajátértéke A-nak. Ezenkivül a [45] könyv 9.1.5. tételéből következik, hogy

$$\min_{1\le j\le n}\left(\sum_{i=1}^{n} a_{ij}+\lambda\right)\le \rho(A+\lambda I)\le \max_{1\le j\le n}\left(\sum_{i=1}^{n} a_{ij}+\lambda\right),$$

ahol bármelyik egyenlőtlenségben egyenlőség csak akkor lehet érvényes, ha az alsó és felső korlát egybeesik. Az előzőekből látható, hogy λ levonásával az utóbbi egyenlőtlenség épp /5.3.5/-be megy át. Mivel A és $A+\lambda I$ sajátvektorai megegyeznek, igy a lemma állitását irreducibilis mátrixra beláttuk.

Ha A nem irreducibilis, $\rho(A+\lambda I)$ továbbra is sajátértéke $(A+\lambda I)$-nek /[45], 9.2.1. tétel/, és nyilván nem lehet ettől eltérő, $\rho(A+\lambda I)$ valós részü sajátértéke. Ebből ismét $\alpha(A)=\rho(A+\lambda I)-\lambda$ alapján kapjuk, hogy $\alpha(A)$ A-nak egyetlen maximális valós részü sajátértéke. /5.3.5/ igazolásához képezzük A-ból azt az $A^{(\varepsilon)}=(a_{ij}^{(\varepsilon)})_{n\times n}$ kompartment mátrixot, melyben az $a_{ij}^{(\varepsilon)}$ transzportegyütthatót az $a_{ij}^{(\varepsilon)}:=a_{ij}+\varepsilon$ egyenlőséggel definiáljuk /$i\neq j$/, ahol $\varepsilon>0$. Ekkor $A^{(\varepsilon)}$ irreducibilis /mivel főátlón kivüli elemei pozitivok/, tehát $\alpha(A^{(\varepsilon)})$ -ra érvényes az /5.3.5/ alaku becslés. Ebből $\varepsilon\to 0$ határátmenettel adódik /5.3.5/, tekintettel a sajátértékeknek a mátrixelemektől, ill. a spektrális abszcisszának a sajátértékektől való folytonos függésére. □

Könnyen látható, hogy az /5.3.5/-ben szereplő felső korlát éppen az A kompartment-mátrix ℓ_1-normához tartozó loga-

ritmikus normája:

$$\mu_1(A) = \max_{1\le j\le n}(-a_{oj}) = -\min_{1\le j\le n} a_{oj} \qquad /5.3.6/$$

Tehát a $\mu_1(A)$ logaritmikus norma mindig nempozitiv, és csak akkor negativ, ha $a_{oj} > 0$, $j = 1, \dots, n$, amikor is a kompartment-mátrix diagonálisan domináns.

A logaritmikus norma nempozitivitása a 2.1.1. következmény szerint maga után vonja, hogy kompartment-mátrix esetén

$$0 \le t \le s \implies \|e^{sA}\|_1 \le \|e^{tA}\|_1 \le 1. \qquad /5.3.7/$$

/5.3.5/ alapján egyszerü becslés adható egy kompartment-mátrix logaritmikus inefficienciájára / ℓ_1-norma mellett/:

$$q_{\ell_1}(A) := \mu_1(A) - \alpha(A) \le \max_{1\le j\le n} a_{oj} - \min_{1\le j\le n} a_{oj} \qquad /5.3.8/$$

Az 5.3.1. lemma értelmében egy irreducibilis kompartment-mátrix $q_{\ell_1}(A)$ logaritmikus inefficienciája akkor és csak akkor nulla, ha minden a_{oj} kifolyási transzportegyüttható egyenlő. Továbbá egy szinguláris kompartment- mátrixra $\alpha(A) \le \mu_1(A) \le 0$ miatt /$t \ge 0$-ra/

$$\alpha(A) = 0 \implies \mu_1(A) = q_{\ell_1}(A) = 0 \text{ és } \|e^{tA}\|_1 = 1. \qquad /5.3.9/$$

Ha A reducibilis, akkor $\alpha(A)$ lehet többszörös sajátérték is. $\alpha(A) = 0$ esetben $\exp(tA)$ korlátosságából /lásd /5.3.7// következik /lásd [41], 402. o./, hogy egy többszörös nulla sajátérték nem lehet defektiv. $\alpha(A) < 0$ esetben viszont előfordulhat, hogy $\alpha(A)$ defektiv sajátérték, mint azt a következő példa mutatja:

$$A = \begin{bmatrix} -2 & 1 \\ 0 & -2 \end{bmatrix}.$$

A nulla sajátérték multiplicitása Foster és Jacquez alábbi eredménye alapján egyértelmüen meghatározható a kompartment-mátrix strukturája /gráfja/ alapján.

5.3.2. Lemma [17]. Legyen az A kompartment-mátrixnak a nulla ν-szörös /$\nu \geq 0$/ sajátértéke. Ekkor A egy alkalmas P permutációmátrixszal elvégzett hasonlósági transzformációval a következő reducibilitási normálalakra hozható:

$$\tilde{A} := P^{-1} A P = \begin{bmatrix} A_{11} & & 0 & & \\ \vdots & \ddots & & 0 & \\ A_{\alpha 1} & \cdots & A_{\alpha\alpha} & & \\ & & A_{\alpha+1,\alpha} & A_{\alpha+1,\alpha+1} & \\ \vdots & & \vdots & & \ddots \\ A_{k1} & \cdots & A_{k\alpha} & 0 & A_{kk} \end{bmatrix} \qquad /5.3.10/$$

ahol $0 \leq \alpha < k \leq n$; $1 \leq j \leq \alpha$ esetén van olyan $i > j$, hogy $A_{ij} \neq 0$, és a főátló mentén elhelyezkedő $A_{11}, \ldots, A_{kk}$ négyzetes blokkok irreducibilis kompartment-mátrixok, melyek közül A_{jj} pontosan akkor zárt kompartment-mátrix, hogyha $k-\nu+1 \leq j \leq k$. Továbbá szükségképpen teljesül $k-\nu \geq \alpha$.

/A particionálás ugy értendő, hogy $\alpha = 0$ esetben csak a jobb alsó blokk-diagonális rész szerepel./

Bizonyitás. Lásd [17]-ben. Kiegészitésül csak azt jegyezzük meg, hogy [17]-ben az $A_{\alpha+1,\alpha+1}, \ldots, A_{k-\nu,k-\nu}$ /oszlopok szerint/ izolált blokkokat /melyek alatt és felett csupa 0 blokk szerepel/ nem különitették el. /Lásd a [45] könyv 9.2. pontját, amely sorok szerint izolált blokkokkal definiálja egy reducibilis mátrix normálalakját/. □

Megjegyzés. Ha A irreducibilis, akkor $\alpha = 0$, $k = 1$, és a reducibilitási normálak egyetlen blokkja lehet maga az A mátrix /ha $P = I$/.

A reducibilitási normálalak segitségével /5.3.7/-nél élesebb eredmény bizonyitható egy kompartment-mátrix exponenciálisának ℓ_1-normájára.

5.3.3. Lemma. Legyen A kompartment-mátrix. Akkor

(I) $\alpha(A)=0$ esetén $t \geq 0 \Rightarrow \|\exp(tA)\|_1 = 1$;

(II) $\alpha(A)<0$ esetén $s>t>0 \Rightarrow \|\exp(sA)\|_1 < \|\exp(tA)\|_1 < 1$.

Bizonyitás. (I): lásd /5.3.9/-et. (II): Mivel az ℓ_1-norma permutációra nézve invariáns, igy $\|\exp(tA)\|_1 = \|\exp(t\tilde{A})\|_1$, ahol $\tilde{A}$ az /5.3.7/ reducibilitási normálalak mátrixa, és $\alpha(A)<0$ miatt $\nu=0$. Tudjuk, hogy $\|\exp(t\tilde{A})\|_1 = \max_{1\leq \ell \leq n} z_\ell(t)$ ahol $z_\ell(t) := \underline{1}^T \exp(t\tilde{A}) \underline{e}_\ell \ (\geq 0)$. Legyen $\underline{a}_0 := (a_{0i})_n$, $\tilde{\underline{a}}_0 := P\underline{a}_0 = (\tilde{a}_{0i})_n$ és particionáljuk az $\tilde{\underline{a}}_0$ vektort ugyanugy, mint $\tilde{A}$-ot /5.3.10/-ben: $\tilde{\underline{a}}_0^T = [\tilde{\underline{a}}_{0_1}^T, \dots, \tilde{\underline{a}}_{0_k}^T]$. Tegyük fel, hogy $\tilde{A}$ ℓ-edik oszlopa az A_{jj} főátlómenti blokkot metszi, mégpedig annak i-edik oszlopában. Mivel $\exp(t\tilde{A}) \geq 0$, és $\exp(t\tilde{A})$ j-edik főátlómenti blokkja $\exp(tA_{jj})$, igy

$$\dot{z}_\ell(t) = \underline{1}^T \tilde{A} e^{t\tilde{A}} \underline{e}_\ell = -\tilde{\underline{a}}_0^T e^{t\tilde{A}} \underline{e}_\ell \leq -\tilde{\underline{a}}_{0_j}^T e^{tA_{jj}} \underline{e}_i . \qquad /5.3.11/$$

Mivel A_{jj} irreducibilis kompartment-mátrix, igy $t>0$-ra $\exp(tA_{jj})>0$ /elemenként/; továbbá mivel A_{jj} nem zárt, igy az $\underline{a}_{0_j}$ ben szereplő kiáramlási transzportegyütthatók valamelyike határozottan pozitiv. E két utóbbi tényből /5.3.11/ alapján következik, hogy $t>0$-ra $\dot{z}_\ell(t)<0$, tehát $z_\ell(\cdot)$ szigoruan monoton csökkenő $[0,\infty)$-en $/1\leq \ell \leq n/$. E monotonitás a $\max_{1\leq \ell \leq n} z_\ell(\cdot)$ függvényre is igaz, ami maga után vonja (II) érvényességét. □

Végül megemlitjük, hogy bizonyos strukturális feltételek mellett garantálható, hogy egy kompartment-mátrix sajátértékei valósak legyenek. Hearon bebizonyitotta [23], hogy ha egy A kompartment-mátrix előjel-szimmetrikus, azaz

$a_{ij}>0 \Leftrightarrow a_{ji}>0$, $i,j=1,\dots,n$, és <u>körmentes,</u> azaz nincs olyan, $\ell \geq 3$ különböző indexből álló $i_1,\dots,i_\ell$ sorozat, hogy az $a_{i_1 i_2},\dots,$ $a_{i_{\ell-1} i_\ell}, a_{i_\ell i_1}$ mátrix-elemek mindegyike pozitiv, akkor A diagonális – hasonló egy szimmetrikus mátrixhoz, és ennélfogva nemdefektiv és sajátértékei valósak. Mivel A sajátértékeinek összessége megegyezik reducibilitási normálalakjában szereplő $A_{11},\dots,A_{kk}$ blokkjai sajátértékeinek összességével, igy az 5.3.2. lemma alapján belátható, hogy ha az előjel-szimmetria feltételét elhagyjuk, akkor is valósak lesznek a sajátértékek. /Ugyanis körmentes esetben az A_{jj} diagonális-menti blokkok irreducibilitása maga után vonja azok előjel-szimmetriáját./ Az utóbbi eredményt Smith és Mohler [47] bizonyitotta be más uton. Azonban az előjel-szimmetria feltételének elhagyása esetén már nem garantálható A nemdefektivitása. Viszont akár előjel-szimmetrikus a mátrix, akár nem, mindkét esetben lehet közel-defektiv, ami a sajátértékprobléma megoldásánál majdnem ugyanolyan kellemetlen, mint ha defektiv volna.

<u>$\exp(tA)$ és $\exp(tA)\,b$ kiszámitása kompartment-mátrix esetén</u>

Mielőtt az egyes módszerekre rátérnénk, megemlitjük azt az érdekes tényt, hogy szinguláris kompartment-mátrix ℓ_1-normához tartozó exponenciális kondiciós száma mindig optimális. Ugyanis a 2.2.1. következmény, a 2.2.3. tétel és /5.3.9/ alapján

$$\alpha(A)=0 \Rightarrow \nu_1(A,t) = t\,\|A\|_1\,, \quad t\geq 0. \qquad /5.3.12/$$

Sajnos $\alpha(A)<0$ esetben ez általában nem áll fenn, sőt $\nu(A,t)$

nagyságrendje nagy t-re $O(t)$-nél nagyobb is lehet /amikor az $\alpha(A)$ sajátérték defektiv/.

a) Taylor-sor-módszer. Mint azt a 3.1. pontban emlitettük, a Taylor-sor-módszerben komoly jegyveszteség léphet fel ellenkező előjelü számok összeadásánál. E probléma kompartment-mátrixoknál kiküszöbölhető, ha elvégezzük az /5.3.2/ képlet szerinti $A \to A+\lambda I$ spektrumeltolást, amellyel egy nemnegativ elemü $A+\lambda I$ mátrixhoz jutunk. $exp(tA)$ közelitése ezután az

$$e^{tA} \approx e^{-t\lambda} \sum_{k=0}^{N} \frac{t^k}{k!} (A+\lambda I)^k \qquad /5.3.13/$$

képlet szerint történhet, ahol N értéke a pontossági kritériumtól függ.

Az /5.3.13/ jobboldalán szereplő összeg tagjainak ill. részletösszegeinek számitása során mindvégig nemnegativ számokon végzünk szorzásokat és összeadásokat, és ez a jegyveszteséget igen nagy mértékben csökkenti. Ugyanis a számolás közben elkövetett kerekitési hibák relative kicsik az aktuális részeredményekhez viszonyitva, és még kisebbek a végeredményhez viszonyitva, mivel a nemnegativ tagok hozzáadásával a mátrix-részletösszeg-sorozat elemenként nemcsökkenő.

Látjuk tehát, hogy kompartment-mátrixoknál az /5.3.13/ képlet szerint alkalmazott Taylor-sor-módszer pontossági szempontból kedvező tulajdonságokkal bir. Továbbra is hátrány azonban, hogy $\|tA\| > 1$ esetén a Taylor-sor konvergenciájának lassusága miatt tul sok müveletet igényel. Ezért ilyenkor a módszert a négyzeteléssel célszerü kombinálni.

b) Négyzetelés módszere. E módszernél e^{hA} egy /pl. Taylor-soros módszerrel számolt/ közelitéséből indulunk ki, ahol $h=2^{-m}t$ és teljesül pl. $\|hA\|_1 \leq 1$; majd szukcessziv négyzeteléssel kapjuk az $\exp(t_i A)$ mátrixok közelitéseit, ahol $t_i = 2^{i-m}t = 2^i h$. Mivel egy kompartment-mátrix exponenciálisa mindig nemnegativ, igy itt minden módositás nélkül biztositott a számitásokban részt vevő $\exp(t_i A)$ mátrixok nemnegativitása. Igy a Taylor-sor-módszerel kapcsolatban már emlitett okok miatt a kerekitési hibák hatása relative igen kicsiny lesz, ami biztositja a módszer numerikus stabilitását.

Hogy utóbbi állitásunkat méginkább alátámasszuk, megemlitjük, hogy mivel kompartment-mátrix esetén $\|\exp(tA)\|_1$ t-ben vagy állandó /ha A szinguláris/, vagy monoton csökkenő /ha A stabil; lásd az 5.3.3. lemmát/, igy a 3.1. pontban emlitett pup-jelenség itt nem léphet fel. Ezenkivül, szinguláris kompartment-mátrix esetén $\exp(hA)$ 2^m-edik hatványának $\exp(hA)$ öröklött relativ hibáira való érzékenysége ℓ_1-normában minimális, hasonlóan a normális mátrixok és ℓ_2-norma esetéhez. Ugyanis, ha A szinguláris kompartment-mátrix, akkor $\exp(hA)$ hatványozásra vonatkozó /ℓ_1-normához tartozó/ kondiciós számára /3.1.12/ és /5.3.8-9/ alapján azt kapjuk, hogy

$$\alpha(A)=0 \Rightarrow \quad N_1(e^{hA}, 2^m) = 2^m . \qquad /5.3.14/$$

Összefoglalva megállapithatjuk, hogy a négyzeteléssel kombinált spektrum-eltolásos Taylor-sor-módszer mind hatékonyság /müveletigény/, mind pontosság szempontjából igen alkalmas kompartment-mátrixok exponenciálisának meghatározására. Amennyiben csak $\exp(tA)\underline{b}$ kiszámitására van szükség, az $O(n^3)$ müveletigény /bármely t-re/ miatt a módszer nem haté-

kony, kivéve a $t=h, 2h, \ldots$ ekvidisztáns pontsorozat esetét, amikor a müveletigény $\exp(hA)$ meghatározása után már $O(n^2)$-re redukálódik.

c) Spektrálfelbontás módszere. E módszer kompartment-mátrixra történő alkalmazásával kapcsolatban megemlithető, hogy a nulla sajátérték sohasem lehet defektiv, bár a többi sajátértékek azok lehetnek. Ezenkivül semmi sem biztositja, hogy egy kompartment-mátrix ne legyen közel-defektiv, illetve, hogy Jordan-kondiciós száma ne legyen nagy.

Ha $\exp(tA)\underline{b}$ kiszámitása a célunk, akkor csak a módszer előkészitő szakasza igényel $O(n^3)$ számu müveletet. E szakaszmüveletigénye esetenként lényegesen redukálható a mátrix reducibilitási normálalakjának figyelembe vételével. Ugyanis $\exp(tA)=P\exp(t\tilde{A})P^{-1}$, ahol $\tilde{A}$ /5.3.10/ szerint adott; és $\tilde{A}$ spektrálfelbontásának QR-algoritmussal való meghatározásánál elég csupán a főátlómenti A_{jj} blokkokra elvégezni a QR-iterációt, mert ha meghatároztuk ezek $A_{jj}=Q_j L_{jj} Q_j^H$ Schur-felbontását, ahol Q unitér és L_{jj} alsó trianguláris, akkor $\tilde{A}$ alsó Schur-alakja:

$$\tilde{A} = \begin{bmatrix} Q_1 & & & 0 \\ & \ddots & & \\ & & Q_\nu & \\ & & & Q_{\nu+1} \\ & & & & \ddots \\ 0 & & & & & Q_k \end{bmatrix} \begin{bmatrix} L_{11} & & & 0 & 0 \\ L_{21} & \ddots & & & \\ \vdots & & L_{\nu\nu} & & \\ \vdots & & \vdots & L_{\nu+1,\nu+1} & \\ L_{k1} & \ldots & L_{k\nu} & 0 & L_{kk} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Q_1 & & & 0 \\ & \ddots & & \\ & & Q_\nu & \\ & & & Q_{\nu+1} \\ & & & & \ddots \\ 0 & & & & & Q_k \end{bmatrix}^H$$

ahol a főátló alatti L_{ij} blokkok már egyszerü mátrixszorzással megkaphatók:

$$L_{ij} = Q_i^H A_{ij} Q_j \quad , \quad i > j .$$

Az L_{jj} mátrixok főátlóelemei adják $\tilde{A}$ sajátértékeit, a saját-

vektorok pedig a szokásos módon, inverz iterációval vagy egyszerüen háromszögmátrixu egyenletrendszerek megoldásával kaphatók meg. /Megjegyezzük, hogy az elterjedt számitógépi programok /lásd pl. [54]-ben/ általában felső Hessenberg- és felső háromszögmátrixokkal dolgoznak; ilyenek alkalmazásához $\tilde{A}$ transzponáltja vehető, vagy definiálhatunk egy felső reducibilitási normálalakot./

Amennyiben az A kompartment-mátrixnak a nulla ν-szörös /$\nu>0$/ sajátértéke, az $\tilde{A}$ mátrix $A_{k-\nu+1,k-\nu+1}, \dots, A_{kk}$ blokkjaira - melyek egyszeres nulla sajátértékkel rendelkező zárt kompartment-mátrixok - meggyorsitható a spektrálfelbontás, ugyanis a következő lemma alapján a nulla sajátérték egyetlen elemi Householder-transzformációval leválasztható.

5.3.4. Lemma. Legyen $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ zárt kompartment-mátrix. Legyen

$$Q := I - \frac{1}{n+\sqrt{n}}\, u\, u^T, \qquad u := \sqrt{n}\, e_1 + 1$$

Akkor Q ortogonális és Q^TAQ első sora zérus.

Bizonyitás. Az, hogy Q /szimmetrikus/ ortogonális mátrix, következik abból, hogy Q elemi Householder-transzformációs mátrix /lásd pl. [39], 86. o./, mivel $I - 2ww^T$ alakba irható, ahol $w := (2n+2\sqrt{n})^{-1/2}\, u$, és $w^Tw = 1$. Továbbá,

$$e_1^T Q^T = e_1^T - \frac{1}{n+\sqrt{n}}(\sqrt{n}+1)(\sqrt{n}\, e_1^T + 1^T) = -\frac{1}{\sqrt{n}}\, 1^T,$$

és mivel 1 az A mátrix nulla sajátértékéhez tartozó baloldali sajátvektora /lásd /5.3.4//, igy

$$e_1^T Q^T A Q = -\frac{1}{\sqrt{n}}\, 1^T A Q = 0^T,$$

amivel az állitást igazoltuk. □

A lemmában megadott elemi Householder-transzformációt elvégezve $\tilde{A}$ A_{jj} $(j>k-\nu)$ blokkjaira, a kapott almátrixoknak

már csak a jobb alsó részét képező eggyel kisebb rendü blokkját kell alsó háromszög alakura transzformálni a QR-algoritmus segitségével.

Megemlitjük még, hogy az $\tilde{A}=V\Lambda V^{-1}$ spektrálfelbontás meghatározása után az $\exp(t\tilde{A})=V\exp(t\Lambda)V^{-1}$ mátrixszorzat kiszámitásakor is csökkenthető a müveletigény a reducibilitási struktura figyelembe vételével.

d) Minimálpolinom-módszer. Ennél a módszernél a Taylor-sormódszerhez hasonlóan csökkenthető a kerekitési hiba az /5.3.2./ spektrum-eltolás segitségével, ha A helyett az $A+\lambda I$ mátrix $\underline{b}$ vektorhoz tartozó Krülov-sorozatát képezzük és ezzel számolunk tovább. Itt a $\underline{b}$ vektor fizikai jelentése /kezdeti anyagmennyiség az egyes kompartmentekben/ miatt nemnegativ, és ezt a nemnegativ $A+\lambda I$ mátrixszal szorozgatjuk. Ha meghatároztuk $\exp(t[A+\lambda I])\underline{b}-t$, akkor ebből $\underline{x}(t)=\exp(tA)\underline{b}$ az

$$\underline{x}(t)=e^{-t\lambda}\,e^{t(A+\lambda I)}\,\underline{b}$$

képlet szerint kapható meg.

$\exp(tA)$ és $\exp(tA)\underline{b}$ paraméterek szerinti deriváltjainak számitása

A paraméterek szerinti parciális deriváltak vonatkozásában sajnos nem használható ki az, hogy A kompartment-mátrix, mivel az érzékenységi egyenlettel kiegészitett /4.3.1/ rendszer mátrixa már nem kompartment-mátrix. Azonban általában lehetőség van a müveletek számának lényeges csökkentésére, ha figyelembe vesszük a $\partial A/\partial\theta_r$ parciális derivált mátrixok ritka voltát. Ugyanis lineáris kompartment-rendszer esetén a θ_r paraméterek általában maguk a /nemzérus/ transzport-

együtthatók, és $\theta_r = a_{ij}$, $i \neq j$, $0 \leq i \leq n$, $1 \leq j \leq n$ esetén

$$\frac{\partial A}{\partial \theta_r} = \begin{cases} -\underline{e}_j \underline{e}_j^T, & \text{ha } i = 0, \\ (\underline{e}_i - \underline{e}_j)\underline{e}_j^T, & \text{ha } i > 0, \end{cases}$$

tehát $\partial A / \partial \theta_r$ általában csak egy vagy két nemnulla elemet tartalmaz. Ennélfogya a $\partial A / \partial \theta_r$ mátrixnak egy vektorral való szorzásánál a müveletszám $O(n^2)$-ről $O(1)$-re csökkenthető. Tehát a $\partial A / \partial \theta$ parciális deriváltakkal kapcsolatos számitások müveletigénye két nagyságrenddel csökken, ha figyelembe vesszük a parciális derivált mátrixok ritkaságát.

5.4. Példa a minimálpolinom-módszer alkalmazására

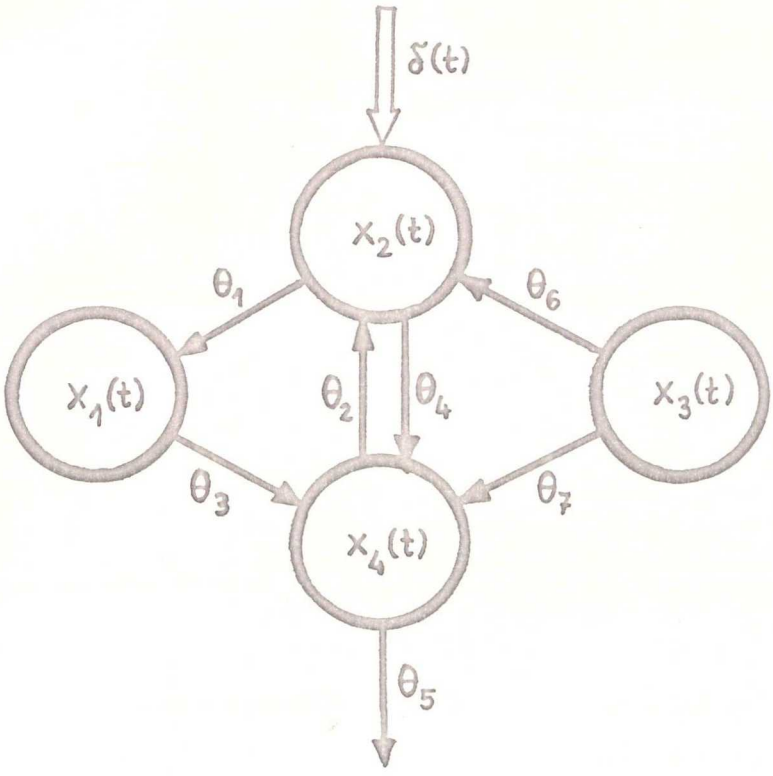
Befejezésül illusztráció gyanánt bemutatjuk az általunk kifejlesztett minimálpolinom-módszer alkalmazását egy egyszerü numerikus példán.

Tekintsük az 5.4.1. ábrán látható, négy rekeszből álló kompartment-rendszert. Tegyük fel, hogy a rekeszek kezdetben üresek, és a t=0 időpontban impulzusszerüen egységnyi mennyiségü anyagot adunk be a második rekeszbe. Ekkor a rekeszekben levő anyagmennyiségek változását a következő differenciál-egyenlet-rendszerrel irhatjuk le:

$$\begin{bmatrix} \dot{x}_1(t) \\ \dot{x}_2(t) \\ \dot{x}_3(t) \\ \dot{x}_4(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\theta_3 & \theta_1 & 0 & 0 \\ 0 & -\theta_1-\theta_4 & \theta_6 & \theta_2 \\ 0 & 0 & -\theta_6-\theta_7 & 0 \\ \theta_3 & \theta_4 & \theta_7 & -\theta_2-\theta_5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1(t) \\ x_2(t) \\ x_3(t) \\ x_4(t) \end{bmatrix} \qquad /5.4.1/$$

ahol a kezdeti feltétel

$$\underline{x}(0) = \underline{b} = [0, 1, 0, 0]^T . \qquad /5.4.2/$$

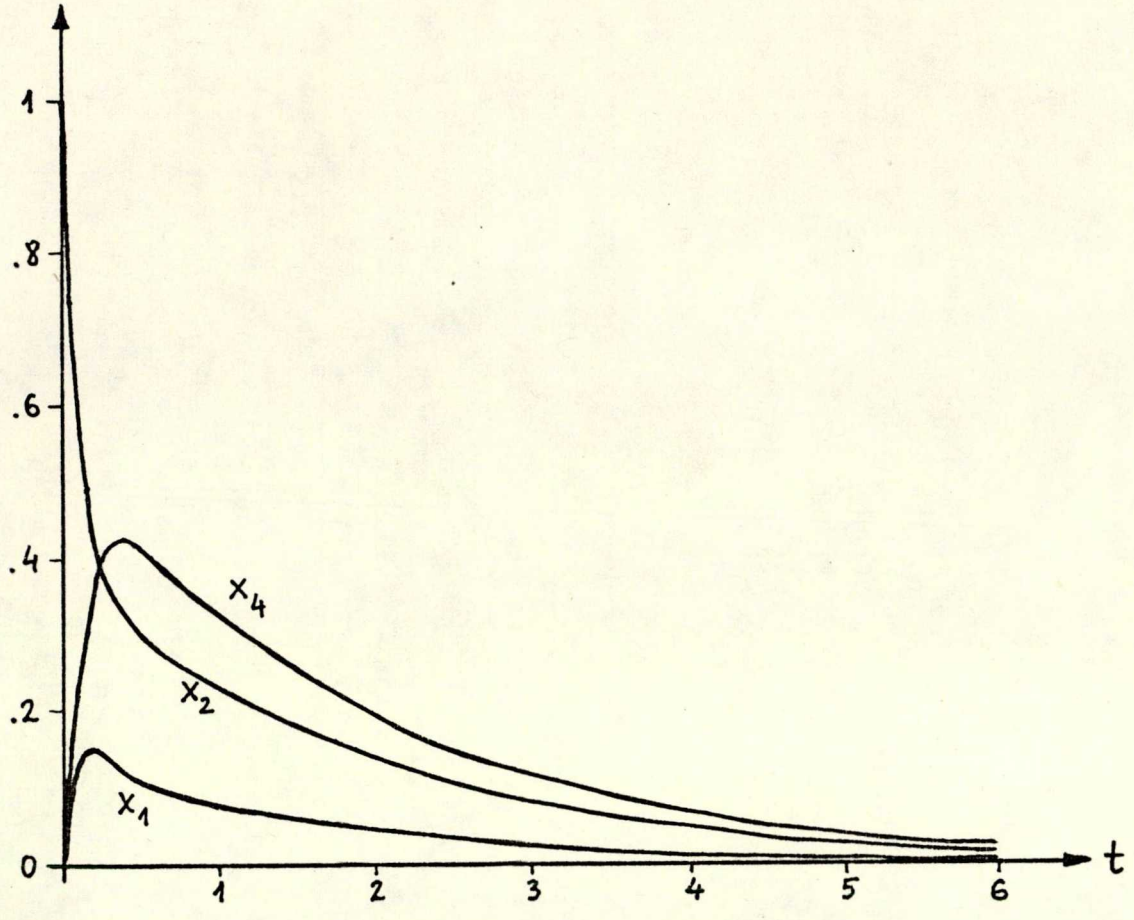


5.4.1. Ábra. Egy négyrekeszes kompartment-rendszer a $t=0$ időpillanatban a 2. rekeszbe beadott egységnyi inputtal

A fenti kezdetiérték-problémát a paramétervektor $\underline{\theta}_o = [3, 4, 9, 3, 1, 5, 2]^T$ értéke mellett oldottuk meg a $t = 0.1, 0.2, \ldots, 6$ ekvidisztáns pontsorozaton a minimálpolinom-módszernek a mellékletben található programja segitségével. A $\underline{b}$ kezdeti vektorhoz tartozó minimálpolinom harmadfoku:

$$p_3(\lambda) = \lambda^3 + 20\lambda^2 + 117\lambda + 54 \quad .$$

A megoldások grafikonja az 5.4.2. ábrán látható, $x_3(.)$ kivételével, amely azonosan nulla /ami természetes a rendszer struktuája alapján, hiszen a 3. rekeszbe sohasem kerül



5.4.2.Ábra. Az /5.4.1-2/ kezdetiérték-probléma megoldásainak grafikonja /$x_3 \equiv 0$/

anyag/. A program által számolt értékek a mellékletben csatolt számitógépi listán találhatók.

Ezután a minimálpolinom-módszerrel megoldottuk az /5.4.1/ rendszerhez tartozó érzékenységi egyenleteket is, ugyanazon paraméter-érték mellett és ugyanazon a pontsorozaton. A rendszer mátrixának minimálpolinomát a mátrix-Krülov-módszerrel /lásd a 4.3. pontban/ határoztuk meg, és ez egybeesett a karakterisztikus polinommal:

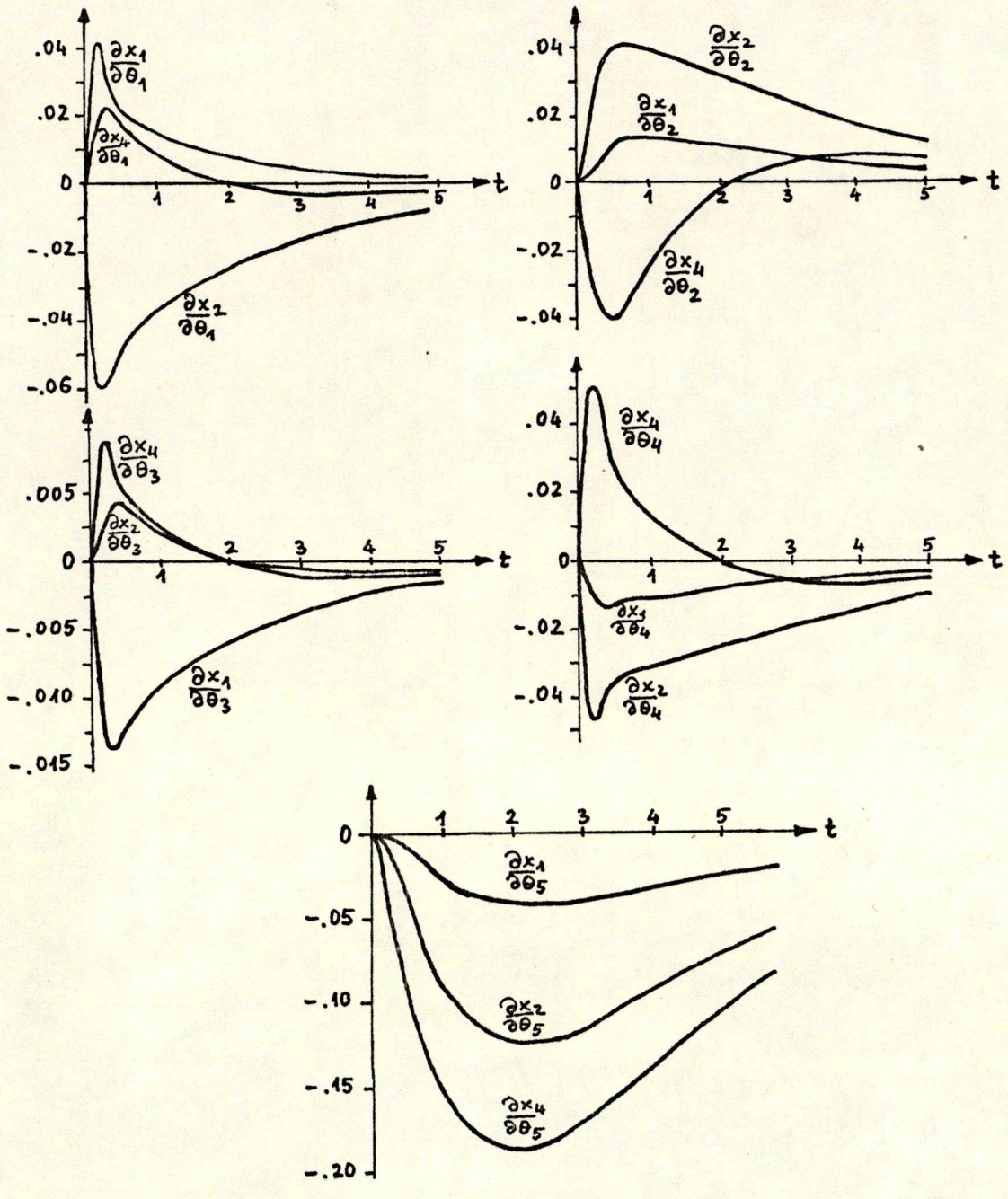
$$p_4(\lambda) = \lambda^4 + 27\lambda^3 + 257\lambda^2 + 873\lambda + 378 .$$

Az érzékenységi függvények számolt értékeit a mellékletben található output lista tartalmazza, grafikonjaik pedig az 5.4.3. ábrán láthatók, kivéve $x_3(.)$ parciális deriváltjait, valamint a θ_6 és θ_7 paraméterekre vonatkozó parciális deriváltakat, amelyek ismét azonosan nullák.

Megemlitjük még, hogy az /5.4.1/ rendszer mátrixa nemszinguláris reducibilis kompartment-mátrix, melynek reducibilitási normálalakja:

$$\tilde{A} = P^{-1}AP = \left[\begin{array}{c|ccc} -\theta_6-\theta_7 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & -\theta_3 & \theta_1 & 0 \\ \theta_6 & 0 & -\theta_1-\theta_4 & \theta_2 \\ \theta_7 & \theta_3 & \theta_4 & -\theta_2-\theta_5 \end{array}\right] ,$$

ahol $P = [e_2, e_3, e_1, e_4]$ permutációmátrix, és az 5.3.2. lemma jelölései mellett $\nu = 0$, $k = 2$ és $\alpha = 1$.



5.4.3.Ábra. Az /5.4.1-2/ rendszerhez tartozó érzékenységi egyenletek megoldásainak grafikonjai /$\partial x_i/\partial \theta_j \equiv 0$, ha i=3 vagy j=6,7/

IRODALOMJEGYZÉK

1 Atherton, R.W., DeGance, A.E./1975/, On the evaluation of the derivative of the matrix exponential function. IEEE Trans. Automatic Control AC-20: 707-708.

2 Bard, Y. /1974/, Nonlinear Parameter Estimation. Academic Press, New York-San Francisco-London.

3 Bellman,R. /1960/, Introduction to Matrix Analysis. McGraw-Hill, New York.

4 Berezin,I.S., Zhidkov,N.P. /1965/, Computing Methods, Vol. I. Pergamon Press, Oxford.

5 Berman, A., Plemmons, R.J. /1979/, Nonnegative Matrices in the Mathematical Sciences. Academic Press, New York-San Francisco-London.

6 Bickart, T.A. /1968/, Matrix exponential: Approximation by truncated power series. Proc. IEEE 56: 872-873.

7 Bierman,G.J. /1971/, Finite series solution for the transition matrix and covariance of a time-invariant system. IEEE Trans. Automatic Control AC-16: 173-175.

8 Bunke, H., Henschke, K., Strüby,R., Wisotzki,C. /1977/, Parameter estimation in nonlinear regression models. Math. Operationsforsch. Statist., Ser. Statistics 8: 23-40.

9 Былов,Б.Ф., Виноград,Р.Э., Гробман,Д.М., Немыцкий,В.В. /1966/, Теория показателей Ляпунова и её приложения к вопросам устойчивости. Наука, Москва.

10 Coppel,W.A. /1965/, Stability and Asymptotic Behavior of Differential Equations. D.C. Heath & Co., Boston.

11 Eller J. /1981/, A second order method for the parameter estimation of linear compartmental models. Lásd [15]-ben, 215-222 o.

12 Eller J. /1981/, Minimal polynomial method for the numerical solution of the sensitivity equations in time-invariant linear systems. "Systems Science VII" Internat. Conference, Wroclaw, Sept. 1981 /előadás; cikk közlés alatt a Systems Science /Wroclaw/ folyóiratban/.

13 Eller J., Győri I., Magyar G. /1981/, Nemlineáris paraméterbecslés dinamikus biológiai rendszerek modellezése során - I: paraméterbecslő eljárások és a modellilleszkedés statisztikai elemzése. "Számitástechnikai és kibernetikai módszerek alkalmazása az orvostudományban és a biológiában" 10. /NJSZT Kollokvium, Szeged, 1980. dec./ 297-315 o.

14 Everling, W. /1967/, On the evaluation of e^{At} by power series. Proc. IEEE 55: 413.

15 Fedina L., Kanyár B., Kocsis B., Kollai M. /szerk./ /1981/, Mathematical and Computational Methods in Physiology. /Satellite Symposium of the 28th International Congress on Physiological Sciences, Budapest, 1980/

"Advances in Physiological Sciences". Vol. 34. Pergamon Press, Oxford - Akadémiai Kiadó, Budapest.

16 Feldman, H. A. /1977/, A short parameter-fitting routine for compartmental models. Comput. Progr. Biomed. 7: 135-144.

17 Foster, D.M., Jacquez, J.A. /1975/, Multiple zeros for eigenvalues and the multiplicity of traps of a linear compartmental system. Math. Biosci. 26: 89-97.

18 Golub,G.H., Wilkinson, J.H. /1976/, Ill-conditioned eigensystems and the computation of the Jordan canonical form. SIAM Review 18: 578-619.

19 Győri I. /1981/, Delay differential and integro-differential equations in biological compartmental models. "Systems Science VII" Internat. Conference, Wroclaw, Sept. 1981 /előadás; cikk közlés alatt a Systems Science /Wroclaw/ folyóiratban/.

20 Győri I., Eller J. /1981/, Analytic properties and identifiability problems of compartmental models with time-lags. Lásd [15]-ben, 61-74 o.

21 Győri I., Eller J. /1981/, Compartmental systems with pipes. Math. Biosci. 53: 223-247.

22 Győri I., Lehoczky A., Eller J. /1981/, Rekeszrendszerek strukturális identifikálhatósági problémájának egy algebrai megközelitése. "Számitástechnikai és kibernetikai módszerek alkalmazása az orvostudományban és a biológiában" 10. /NJSZT Kollokvium, Szeged, 1980. dec./, 287-295 o.

23 Hearon, J.Z. /1963/, Theorems on linear systems. Ann. N. Y. Acad. Sci. 108: 36-68.

24 Jacquez, J.A. /1972/, Compartmental Analysis in Biology and Medicine. Elsevier, Amsterdam-London-New York.

25 Jennrich, R.I., Bright, P.B./1976/, Fitting systems of linear differential equations using computer generated exact derivatives. Technometrics 18: 385-392.

26 Jennrich, R.I., Moore, R.H. /1975/, Maximum likelihood estimation by means of nonlinear least squares. Amer. Statist. Assn. Proc. Stat. Comp. Sect., 57-65.

27 Kågström, Bo /1977/, Bounds and perturbation bounds for the matrix exponential. BIT 17: 39-57.

28 Kammler, D.W. /1978/, Numerical evaluation of $\exp(tA)$ when A is a companion matrix. SIAM J. Numer. Anal. 15: 1077-1102.

29 Kanyár B., Eller J., Győri I. /1981/, Parameter estimation of the radiocardiogram using compartmental models with pipes. Lásd [15]-ben, 229-238 o.

30 Kanyár B., Erődi J. /1978/, A program to estimate parameters of linear systems. Comput. Progr. Biomed. 8: 135-140.

31 Kanyár B., Tóth J. /1976/, Lineáris differenciálegyenletrendszer illesztése gradiens módszerrel. Alk. Mat. Lapok 2: 259-268.

32 Kaufman, I. /1969/, Evaluation of an analytical function of a companion matrix with distinct eigenvalues. Proc. IEEE 57: 1180-1181.

33 Kolodner,I.I. /1975/, On $\exp(tA)$ with A satisfying a polynomial. J. Math. Anal. Appl. 52: 514-524.

34 Kowalik,J., Osborne, M.R. /1968/, Methods for Unconstrained Optimization. Elsevier, New York-London--Amsterdam.

35 Liou,M.L. /1966/, A novel method of evaluating transient response. Proc. IEEE 54: 20-23.

36 Magyar G., Galántai A., Kanyár B., Eller J. /1981/, Nemlineáris paraméterbecslés dinamikus biológiai rendszerek modellezése során - II: a modell-differenciálegyenletek numerikus integrálása; a program szerkezete. "Számitástechnikai és kibernetikai módszerek alkalmazása az orvostudományban és a biológiában" 10. /NJSZT Kollokvium, Szeged, 1980. dec./, 317-323 o.

37 Martascusa, E.J. /1969/, A method for calculating e^{AT} based on the Cayley-Hamilton theorem. Proc. IEEE 57: 1328-1329.

38 Moler,C., Van Loan,C. /1978/, Nineteen dubious ways to compute the exponential of a matrix. SIAM Review 20: 801-836.

39 Móricz F. /1975/, Numerikus analizis II. JATE egyetemi jegyzet. Tankönyvkiadó, Budapest.

40 Muralidharan,R. /1975/, Closed-form expressions for matrix functions /including e^{At}/. IEEE Trans. Automatic Control AC-20: 705-707.

41 Noble,B., Daniel, J.W. /1977/, Applied Linear Algebra, 2nd Ed. Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, N.J.

42 Ortega, J.M., Rheinboldt, W.C. /1970/, Iterative Solution of Nonlinear Equations in Several Variables. Academic Press, New York-London.

43 Putzer, E.J. /1966/, Avoiding the Jordan canonical form in the discussion of linear systems with constant coefficients. Amer. Math. Monthly 73: 2-7.

44 Rice, J.R. /1966/, A theory of condition. SIAM J. Numer. Anal. 3: 287-310.

45 Rózsa P. /1974/, Lineáris algebra és alkalmazásai. Müszaki Könyvkiadó, Budapest.

46 Sandberg,I.W. /1978/, On the mathematical foundations of compartmental analysis in biology, medicine, and ecology. IEEE Trans. Circuits Systems CAS-25: 273-279.

47 Smith,W.D., Mohler, R.R. /1976/, Necessary and sufficient conditions in the tracer determination of compartmental system order. J. Theor. Biol. 57: 1-21.

48 Ström, T. /1975/, On logarithmic norms. SIAM J. Numer. Anal. 12: 741-753.

49 Thomson,W.E. /1966/, Evaluation of transient response. Proc. IEEE 54: 1584.

50 Van Loan,C. /1977/, The sensitivity of the matrix exponential. SIAM J. Numer. Anal. 14: 971-981.

51 Ward, R.C. /1977/, Numerical computation of the matrix exponential with accuracy estimate. Ibid., 600-610.

52 Wilkinson, J.H. /1963/, Rounding Errors in Algebraic Processes. Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, N. J.

53 Wilkinson, J.H. /1965/, The Algebraic Eigenvalue Problem, Clarendon Press, Oxford.

54 Wilkinson, J.H., Reinsch, C./1971/, Linear Algebra. "Handbook for Automatic Computation", Vol. II. Springer-Verlag, New York-Heidelberg-Berlin.

55 Young, D. M./1979/, Nagy lineáris rendszerek iterációs megoldása. Müszaki Könyvkiadó, Budapest.

Köszönetnyilvánitás

Köszönetet mondok munkahelyi vezetőmnek, dr. Győri István cimzetes egyetemi docensnek, és témavezetőmnek, dr. Móricz Ferenc egyetemi tanárnak a disszertáció elkészitéséhez nyujtott sokoldalu támogatásukért és hasznos szakmai tanácsaikért, továbbá dr. Galántai Aurél kandidátusnak a Kammler-módszer referenciájáért.

M e l l é k l e t :

A MINIMÁLPOLINOM-MÓDSZER FORTRAN NYELVÜ PROGRAMJA

Az alábbiakban megadjuk a minimálpolinom-módszer megvalósitására kifejlesztett programunk szubrutinjainak használatához szükséges információkat, csatolva a szubrutinok Fortran forrásnyelvi listáit. E szubrutinokban használt utasitások megfelelnek a hivatkozási Fortran nyelvnek. A melléklet végén megadjuk a program próbafuttatásához felhasznált tesztfeladatokat, valamint az input-output tevékenységet és a szubrutinok meghajtását végző főprogramot, továbbá a futtatás eredményeit.

M.1. A Krülov-módszer szubrutinjai

A /mátrix-/ Krülov-módszert a KRYLOV nevü szubrutin valósitja meg, amely a minimálpolinom fokszámának meghatározására ill. a módszerben fellépő lineáris egyenletrendszer megoldására felhasználja a DECOMP és ITSOLV szubrutinokat. Az utóbbi rutin ezenkivül még egy háromszögmátrixu egyenletrendszereket megoldó TRSOLV nevü szubrutint is hiv.

A KRYLOV nevü szubrutin tevékenysége

A szubrutin adott $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $B \in \mathbb{R}^{n \times k}$ mátrixok és λ valós

szám esetén a 4.3. pontban emlitett mátrix-Krülov-módszerrel meghatározza az $(A-\lambda I)$ mátrixnak a B mátrixhoz tartozó minimálpolinomját, azaz azt a legkisebb/m/ fokszámu olyan $p(\lambda) = \lambda^m + p_m\lambda^{m-1} + \ldots + p_2\lambda + p_1$ polinomot, amelyre $p(A-\lambda I)B = 0$ fennáll.

Ehhez a szubrutin először képzi a $B, (A-\lambda I)B, (A-\lambda I)^2 B, \ldots, (A-\lambda I)^n B$ Krülov-mátrixsorozatot, amely a sorozat tagjainak oszlopait egymás alá helyezve egy $nk \times (n+1)$ méretü mátrixszá rendezhető át. /Mivel a Fortranban a kétdimenziós tömbök /mátrixok/ ábrázolása oszlopfolytonos, tényleges átrendezésre nincs szükség/. E mátrixra a DECOMP szubrutin segitségével végezzük el a Wilkinson-féle oszloponkénti Gauss-eliminációt /lásd a 4.3. pontot/, melynek eredményeként megkapjuk a Krülov-sorozat első m /lineárisan független/ tagja által alkotott $nk \times m$ méretü mátrix PLU-felbontását, ahol $P \in \mathbb{R}^{nk \times nk}$ permutációmátrix, $L \in \mathbb{R}^{nk \times m}$ főátló feletti elemei nullák, főátlóelemei egyesek, és $U \in \mathbb{R}^{m \times m}$ felső trianguláris mátrix, és ahol $(A-\lambda I)^m B$ már lineárisan függ a sorozat előző tagjaitól. Ezután a lineáris függés, azaz a minimálpolinom együtthatóit a megfelelő egyenletrendszer mátrixának PLU-felbontására támaszkodva, az iterativ javitás módszerével, Forsythe és Moler könyvében leirt módon határozzuk meg az ITSOLV szubrutin segitségével /lásd: G.E. Forsythe-C.B.Moler: Lineáris algebrai problémák megoldása számitógéppel. Müszaki Könyvkiadó, Bp. 1976/.

A KRYLOV nevü szubrutin paraméterei

A SUBROUTINE utasitás a következő:

```
SUBROUTINE  KRYLOV (N,A,NA,AB,K,SHIFT,P,M,RN,WORK,IW)
```

A megfelelő aktuális paramétereket az alábbiak szerint kell

megadni:

N - /input/ az A mátrix rendje /n/ /egész tipusu/;

A - /input/ az A mátrixot tartalmazó, legalább $NA * N$-elemü kétdimenziós valós tömb, melynek a hivó szegmensbeli deklarációjában az első indexhatár $=NA \geq N$ és "bal felső" $N * N$-es részében tartalmazza az A mátrixot;

NA - /input, egész tipusu/ lásd A;

AB - legalább $N * K * 2N$-elemü háromdimenziós valós tömb a Krülov-sorozat mátrixa és annak LU-felbontása tárolására. Inputként $AB(i,j,1)$-nek a B mátrix b_{ij} elemét kell tartalmaznia /$i = 1, \ldots, n$; $j = 1, \ldots, k$/ ; visszatéréskor pedig $AB(i,j,l)$ tartalmazza a Krülov-sorozat l-edik tagjának (i,j) indexü elemét /$l = 1, \ldots, n$/;

K -/input/ a B mátrix oszlopainak száma /k/ /egész tip./;

SHIFT -/input/ elvégzendő spektrum-eltolás /λ/ értéke /valós/;

P -/output/ legalább N-elemü valós tömb, melynek első M eleme tartalmazza kimenetkor a számolt minimálpolinom együtthatóit / $P(i) = p_i$, $i = 1, \ldots, m$/;

M -/output/ a számolt minimálpolinom fokszáma /m/ /egész/;

RN -/output/ számitott reziduál-norma /lásd 3.3. pont/: a számolt $p(A-\lambda I)B$ mátrix elemei abszolut értékének maximuma /valós tipusu/;

WORK - legalább $N * K * 4$-elemü valós munkatömb;

IW - legalább $N * K$-elemü egész munkatömb.

A DECOMP nevü szubrutin tevékenysége

A szubrutin egy $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ téglalapmátrix első $k_0 - 1$ oszlopából álló A_0 részmátrix $A_0 = PLU$ faktorizációját határozza meg, ahol $k_0 := \max\{k \in \{1, \ldots, n, n+1\} \mid k-1 \leq m,$ A első $k-1$ oszlopa lineá-

risan független és a k-adik oszlop /ha van ilyen/ lineárisan függ az előzőektől$\}$; $P \in \mathbb{R}^{m \times m}$ permutációmátrix; $L \in \mathbb{R}^{m \times (k_0-1)}$ főátlóelemei egyesek, főátló feletti elemei nullák, továbbá $U \in \mathbb{R}^{(k_0-1) \times (k_0-1)}$ felső trianguláris. Az alkalmazott módszer Wilkonson oszloponkénti Gauss-eliminációja. A részleges főelemkiválasztási eljárás által megkivánt sorcseréket a hatékonyabb müködés érdekében a szubrutin nem végzi el, hanem a szükséges permutációkat egy IP egész tömbben megjegyzi, és az L, U mátrixok /informativ/ elemei egy UL tömbben /sorok szerint/ permutált alakban adódnak.

A DECOMP nevü szubrutin paraméterei

A SUBROUTINE utasitás a következő:

```
SUBROUTINE  DECOMP (M,N,A,MA,UL,MUL,IP,KØ,SC,DP)
```

A megfelelő aktuális paraméterek a következőképp adandók meg

M - /input/ az A mátrix sorainak száma /m/ /egész tip./;

N - /input/ az A mátrix oszlopainak száma /n/ /egész tip./;

A - /input/ legalább MA*N-elemü kétdimenziós valós tömb, melynek hivó szegmensbeli deklarációjában az első indexhatár =MA $\geq$ M, és amely "bal felső" M*N-es részében tartalmazza az A mátrixot;

MA - /input, egész tipusu/ lásd A;

UL - /output/ legalább MUL*N-elemü kétdimenziós valós tömb, melynek hivó szegmensbeli deklarációjában az első indexhatár =MUL $\geq$ M. Kimenetkor UL első k_0-1 oszlopa tartalmazza A megfelelő részének permutált LU-felbontását. Neveze-

tesen, UL IP(i) -edik sora $i \geq k_0$ esetén az L mátrix i-edik sorát tartalmazza, $i < k_0$ esetén pedig rendre az $l_{i1}, \ldots, l_{i,i-1}, u_{ii}, u_{i,i+1}, \ldots, u_{i,k_0-1}$ elemeket;

MUL - /input, egész tip./ lásd UL;

IP - /output/ a P permutációmátrixnak megfelelő permutáció megjegyzését biztositó /legalább/ M-elemü egész tömb /lásd még UL leirását/;

KØ - /output/ kimenetkor értéke k_0, hogha $k_0 \leq n$, és nulla, ha $k_0 = n+1$;

SC - legalább M-elemü valós munkatömb;

DP - legalább M-elemü dupla pontosságu munkatömb.

Az ITSOLV nevü szubrutin tevékenysége

Legyen adott az $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ mátrix PLU-felbontása és egy $\underline{b} \in \mathbb{R}^m$ vektor, ahol $m \geq n = \text{rank}(A)$. Legyen $\tilde{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ a $P^{-1}A = LU$ mátrix első n sorából képzett nemszinguláris mátrix, és $\tilde{\underline{b}} \in \mathbb{R}^n$ a $P^{-1}\underline{b}$ vektor első n eleméből álló vektor. Ekkor a szubrutin az $\tilde{A}\underline{x} = \tilde{\underline{b}}$ lineáris egyenletrendszert oldja meg az iterativ javitás módszerével, mely az alábbi képletekkel adható meg:

$$\underline{x}^{(0)} = \underline{0}; \quad \underline{r}^{(s)} = \tilde{\underline{b}} - \tilde{A}\underline{x}^{(s)}, \quad \tilde{A}\,\underline{d}^{(s)} \doteq \underline{r}^{(s)}, \quad \underline{x}^{(s+1)} = \underline{x}^{(s)} + \underline{d}^{(s)}, \quad s = 0,1,2,\ldots$$

$$\underline{x} = \lim_{s \to \infty} \underline{x}^{(s)}$$

ahol $\doteq$ az illető egyenletrendszer közelitő megoldására utal, melyhez a szubrutin felhasználja az A mátrix /DECOMP segitségével meghatározható/ PLU-felbontását. Hogy az iteráció valóban javitsa az egyes közelitéseket, szükséges az $\underline{r}^{(s)}$ reziduálok dupla pontosságu kiszámitása. Az eljárás gépi konvergenciájához általában 3-4 javitás elegendő.

Amennyiben $\tilde{A}$ annyira gyengén meghatározott, hogy az eljárás divergál, pontosabban, hogy nem konvergál bizonyos ITMAX

számu /pl. 20/ lépésben, ugy a szubrutin ezt jelzi /lásd ITNO paraméter/, és azt az $\underline{x} = \underline{x}^{(s)}$ közelitést adja vissza megoldás gyanánt, amelyre az $\underline{r} = \underline{b} - A\underline{x} \in \mathbb{R}^m$ reziduálvektor ℓ_∞-normája a legkisebb volt /$1 \leq s \leq$ ITMAX/.

Az ITSOLV nevü szubrutin paraméterei

A SUBROUTINE utasitás a következő:

```
SUBROUTINE ITSOLV(M,N,A,MA,UL,MUL,IP,B,X,ITNO,COND,RNORM,R,DX)
```

Az aktuális paraméterek az alábbiak szerint adandók meg:

M - /input/ az A mátrix sorainak száma /egész tip./;

N - /input/ az A mátrix oszlopainak száma, $\leq M$ /egész tip./;

A - /input/ legalább MA*N-elemü kétdimenziós valós tömb, melynek hivó szegmensbeli deklarációjában az első index-határ $= MA \geq M$, és "bal felső" M×N-es részében tartalmazza az A mátrixot. Feltételezzük, hogy az A mátrix rangja $= N$ és PLU-felbontását /e rutin hivása előtt/ a DECOMP nevü szubrutin segitségével már meghatároztuk;

MA - /input, egész tip./ lásd A;

UL - /input/ legalább MUL*N-elemü kétdimenziós valós tömb, melynek hivó szegmensbeli deklarációjában az első index-határ $= MUL \geq M$, és M×N-es "bal felső" része tartalmazza az A mátrix sorok szerint permutált LU-felbontását, ahogy azt DECOMP produkálja;

MUL - /input, egész tip./ lásd UL;

IP - /input/ az A mátrix PLU-felbontásához tartozó permutációt tartalmazó M-elemü egész tömb;

B - /input/ az egyenletrendszer jobboldalának $\underline{b}$ vektorát tartalmazó /legalább/ M-elemü valós tömb;

X - /output/ egyenletrendszer számolt megoldásvektora, N-elemü valós tömb;

ITNO - /output/ ha $1 \leq$ ITNO $(\leq$ITMAX$)$, akkor az iteráció ITNO számu lépésben konvergált; ITNO<0 esetben pedig divergált és X kimenetkor a legkisebb reziduálhoz tartozó, (-ITNO) sorszámu közelitést tartalmazza /egész tip./;

COND - /output/ az együtthatómátrix kondiciós számának egy becslése /valós tip./;

RNORM - /output/ a számolt $\underline{r} = \underline{b} - A\underline{x}$ reziduálvektor ℓ_∞ -normája /valós tip./;

R - /output/ a számolt $\underline{r}$ reziduálvektort tartalmazó legalább M-elemü valós tömb;

DX - legalább N-elemü valós munkatömb.

A szubrutinnak egy adott számitógépen való használatához egy DATA utasitásban három olyan konstanst kell megadni, amelyek függenek a gép lebegőpontos számábrázolásától. Ezeket a következőképpen kell megadni:

BETA - a számitógép lebegőpontos számábrázolásának alapszáma /valós tip./ /R-10-en BETA=16./;

EPS - a lebegőpontos aritmetika relativ pontossága: az a legkisebb pozitiv lebegőpontos szám, melyet 1-gyel lebegőpontosan összeadva 1-et kapunk eredményül. Értéke $\frac{1}{2}\beta^{1-d}$ kerekitéses, és β^{1-d} csonkitásos aritmetika esetén, ahol β=BETA és d a mantissza jegyeinek száma /valós tip./ /R-10-en EPS$=\frac{1}{2}16^{1-6}=2^{-21}$/;

ITMAX - maximális iterációs lépésszám. Javasolt értéke Forsythe és Moler könyve alapján $\approx 2\,\lg(1/\text{EPS})$. /egész tip./

A TRSOLV nevü szubrutin tevékenysége

Ez a szubrutin egy $LU\underline{x}=\underline{b}$ alaku lineáris egyenletrendszert old meg, ahol L alsó és U felső háromszögmátrixok, L főátlóelemei 1-esek, U főátlóelemei pedig nemnullák. L és U sorait és $\underline{b}$ elemeit permutált alakban lehet /és kell/ megadni a szubrutin számára.

A TRSOLV nevü szubrutin paraméterei

A SUBROUTINE utasitás a következő:

```
SUBROUTINE TRSOLV (N,UL,NUL,IP,B,X)
```

Az aktuális paramétereket az alábbiak szerint kell megadni:

N - /input/ a megoldandó egyenletrendszer rendje /egész/;

UL - /input/ legalább NUL*N-elemü kétdimenziós valós tömb, melynek hivó szegmensbeli deklarációjában az első indexhatár $= NUL \geq \max\{IP(i) \mid 1 \leq i \leq N\}$, és amelynek $IP(i)$-edik sora az L és U mátrixok $l_{i1}, \ldots, l_{i,i-1}, u_{ii}, \ldots, u_{iN}$ elemeit tartalmazza /ilyen sorrendben/;

NUL - /input, egész tip./ lásd UL;

IP - /input/ legalább N-elemü egész tipusu vektor; UL azon N sorát és B azon N elemét jelöli ki, melyek a számitásokban részt vesznek /lásd UL, B/;

B - /input/ az egyenletrendszer $\underline{b}$ jobboldalát tartalmazó, legalább $\max\{IP(i) \mid 1 \leq i \leq N\}$- elemü valós tömb, ahol B $IP(i)$-edik eleme tartalmazza b_i-t;

X - /output/ megoldásvektor; N-elemü valós tömb.

M.2. A Kammler-módszer szubrutinja

A KAMLER nevü szubrutin adott $p(\lambda)=\lambda^m+b_m\lambda^{m-1}+\ldots+b_2\lambda+b_1$ polinomhoz és t idő-értékhez kiszámitja a $p(.)$ polinom C kompanion-mátrixának $\exp(tC)$ exponenciálisát a 3.3. pontban leirt Kammler-féle módszerrel.

A szubrutin IT nevü paraméterén keresztül jelezni kell azt, hogy adott $p(.)$ polinom esetén az első t-értékkel hivjuk-e, ugyanis a szubrutin csak ilyenkor végzi el az előkészitü számitásokat.

A szubrutin paraméterei

A SUBROUTINE utasitás a következő:

SUBROUTINE KAMLER(M,B,T,IT,EBT,MEBT,ALFA,BB,E,GT1,GT2)

Az aktuális paramétereket az alábbiak szerint kell megadni:

M - /input/ a $p(.)$ polinom fokszáma /m/ /egész tip./;

B - /input/ a $p(.)$ polinom együtthatóit tartalmazó M-elemü valós tömb

T - /input/ a t idő-érték /valós tipusu/;

IT - /input/ ha $IT<1$, akkor a szubrutin csak az előkészitő, t-től független számitásokat végzi el, ha $IT>1$, akkor ezeket feltételezi és csak a t-vel kapcsolatos második szakasz számitásait hajtja végre, $IT=1$ esetben pedig mindkettőt. /IT általában a KAMLER szubrutin hivásának sorszáma egy adott polinom mellett./ /egész tip./;

EBT - /output/ legalább MEBT$\geq$M-elemü kétdimenziós valós tömb, melynek hivó szegmensbeli deklarációjában az első indexhatár =MEBT$\geq$M. Visszatéréskor EBT "bal felső" MxM-es

része tartalmazza a számolt $\exp(tC)$ mátrix-exponenciálist.

MEBT - /input, egész tip./ lásd EBT;

ALFA - a szubrutin adott polinom melletti első /IT≠1/ hivása során számolt skálaparaméter, amely az esetleges további hivásokhoz változtatás nélkül megőrzendő /valós tip./;

BB - a szubrutin adott polinom melletti első hivásakor számolt skálázott polinomegyütthatókat tartalmazó M-elemü valós tömb, amely az esetleges további /uj T-vel való/ hivásokhoz megőrzendő;

E - /legalább/ M-elemü valós munkatömb;

GT1 - a szubrutin adott polinom melletti első hivásakor számolt hatványsor-együtthatókat tartalmazó M+NGT-elemü valós tömb; uj T-vel való hivásokhoz megőrzendő /NGT értékét a szubrutin DATA utasitása adja meg/;

GT2 - /legalább/ M+NGT elemü valós munkatömb, ahol NGT értéke a szubrutin DATA utasitásában specifikált.

A szubrutinnak egy adott számitógépen való használata előtt a szubrutin DATA utasitásában két, a gép lebegőpontos számábrázolásától függő konstanst kell megadni az alábbiaknak megfelelően.

BETA - a számitógép lebegőpontos számábrázolásának alapszáma /valós tip./ /R-1O-en BETA=16./;

NGT - NGT:= $\min\{\nu\in\{1,2,\dots\} \mid \nu! > \gamma\,\beta^{d-1}\}$ ahol β=BETA és d a mantissza jegyeinek száma a gép lebegőpontos számábrázolásában, továbbá $\gamma=1$ csonkitásos és $\gamma=2$ kerekitéses aritmetika esetén /egész tip./ /R-1O-en NGT=1Ø/.

M.3. ETAB: szubrutin $\exp(tA)\underline{b}$ számolására

A szubrutin az $\underline{x}(t) = \exp(tA)\underline{b}$ vektort számolja adott t idő-érték, $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ mátrix és $\underline{b} \in \mathbb{R}^{n}$ vektor esetén, a 3.3. pontban leirt minimálpolinom-módszerrel. A szubrutin feltételezi az $A-\lambda I$ mátrix $\underline{b}$ vektorhoz tartozó minimálpolinomjának ismeretét /ahol λ adott valós szám/, amely az M.1. pontban leirt KRYLOV szubrutin segitségével határozható meg.

ETAB hivja az M.2. pontban ismeretetett KAMLER nevü szubrutint, igy azonos $A, \underline{b}$ de különböző t melletti hivásnál az IT paramétert az ott leirtak szerint kell megadni.

A szubrutin paraméterei

A SUBROUTINE utasitás a következő:

```
SUBROUTINE  ETAB (T,AB,N,M,P,SHIFT,IT,XT,ALFA,SAVE,WORK)
```

Az aktuális paraméterek az alábbiak szerint adandók meg:

T — /input/ a t idő-érték /valós tip./;

AB — /input/ N*M méretünek deklarált kétdimenziós valós tömb, melynek $AB(i,j)$ eleme a Krülov-sorozat j-edik, $A^{j-1}\underline{b}$ vektorának i-edik elemét tartalmazza /ahogy a KRYLOV szubrutin produkálja/;

N — /input/ az A mátrix rendje /n/ /egész tip./;

M — /input/ az $A-\lambda I$ mátrix $\underline{b}$ vektorhoz tartozó minimálpolinomjának fokszáma /egész tip./;

P — /input/ az $A-\lambda I$ mátrix $\underline{b}$-hez tartozó minimálpolinomjának együtthatóit tartalmazó M-elemü valós tömb;

SHIFT — /input/ a λ spektrum-eltolás értéke /valós tip./;

IT - /input/ adott $A, \underline{b}$ esetén 1-re állitandó be az első t-vel való hivásnál és > 1 -re a további t-knél /egész tip./;

XT - /output/ a számolt $\underline{x}(t) = \exp(tA)\underline{b}$ vektort tartalmazó, N-elemü valós tömb;

ALFA - a KAMLER szubrutin által számolt skálaparaméter; értéke megőrzendő azonos A-val és b-vel, de különböző t-vel való hivásokhoz /valós tip./;

SAVE - legalább $2M + NGT$-elemü valós tömb a KAMLER szubrutin részeredményeinek tárolására; tartalma megőrzendő azonos $A, \underline{b}$ de különböző t melletti hivásokhoz /NGT értékére nézve lásd az M.2. pontot/;

WORK - legalább $M * (M+2) + NGT$ - elemü valós munkatömb; NGT-re vonatkozóan lásd az M.2. pontot.

M.4. GRETAB: szubrutin $\exp(tA)b$ paraméterek szerinti parciális deriváltjainak számitására

A szubrutin az $z_k(t) = z_k(t, \theta_0)$ vektorokat számolja, ahol $z_k(t, \theta) := (\partial/\partial\theta_k) \exp(tA(\theta))\, b$, $k = 1, \ldots, \nu$ és ν a θ paramétervektor elemeinek száma. Kérés esetén $x(t) := \exp(tA(\theta))\, b$ is kiszámitásra kerül, de ennek meghatározása az ETAB rutinnal pontosabb. Az alkalmazott módszer a 4.3. pontban tárgyalt minimálpolinom-módszer. A szubrutin feltételezi az $A-\lambda I$ mátrix /λ adott szám/ minimálpolinomjának ismeretét, amely az M.1. pontban leirt KRYLOV szubrutinnal határozható meg.

Ha a $z_k(t)$ vektorok kiszámitása egynél több t-re is szükséges, akkor az IT paraméteren keresztül közölhetjük a szubrutinnal, hogy ne ismételje meg az előkészitő /t-től független/ szakasz számitásait.

A szubrutinnak inputként meg kell adni a $\partial A/\partial\theta_k(\theta_0)$ parciális derivált mátrixokat, melyeket ő az első t-vel való híváskor felülir bizonyos, ujabb t-vel való hivásnál is szükséges részeredményekkel.

A szubrutin paraméterei

A SUBROUTINE utasitás a következő:

```
      SUBROUTINE GRETAB (T,A,B,N,NA,IT,IX,XT,ZT,NZT,NPAR,P,M,
     *                   ,P2,GRA,MGRA,NGRA,SHIFT,ALFA,WORK,SAVE)
```

Az aktuális paraméterek az alábbiaknak megfelelően adandók meg:

T - /input/ a t idő-érték /valós tip./

A - /input/ legalább $NA*N$-elemü kétdimenziós valós tömb, melynek hivó szegmensbeli deklarációjában az első index-

határ $=NA \geq N$, és amely $N*N$-es "bal felső" részében tartalmazza az $A = A(\underline{\theta}_0)$ mátrixot;

B - /input/ a $\underline{b}$ vektort tartalmazó N-elemü valós tömb;

N - /input/ az A mátrix rendje /egész tip./;

NA - /input, egész tip./ lásd A;

IT - /input/ ha a $\underline{z}_k(t)$ vektorokat az első t-értékre számoltatjuk, akkor IT 1-re állitandó be, későbbi t-kre pedig >1-re /egész tip./;

IX - /input/ ha IX=$\emptyset$, akkor a szubrutin nem nyul az XT tömbhöz; különben XT tartalmazza /kimenetkor/ az $\underline{x}(t)$ $\exp(tA)\underline{b}$ vektort /egész tip./;

XT - /output/ IX=0 esetben XT aktuális értéke bármi lehet, mert a szubrutin nem használja output céljára; IX$\neq$0 esetben N-elemü valós tömb, mely visszatéréskor a számolt $\underline{x}(t)$ vektort tartalmazza;

ZT - /output/ kétdimenziós, legalább NZT*NPAR-elemü valós tömb, melynek hivó szegmensbeli deklarációjában az első indexhatár $=NZT \geq N$. Visszatéréskor a $ZT(j,k)$ tömbelem tartalmazza a számolt $\underline{z}_k(t)$ vektor j-edik elemét;

NZT - /input, egész tip./ lásd ZT;

NPAR - /input/ $A(.)$ paraméterei /változói/ száma /ν/ /egész/;

P - /input/ az $A(\underline{\theta}_0)-\lambda I$ mátrix minimálpolinomjának együtthatóit tartalmazó M-elemü valós tömb;

M - /input/ $A(\underline{\theta}_0)$ minimálpolinomjának fokszáma /egész/;

P2 - a minimálpolinom négyzetének együtthatóit tartalmazó 2M-elemü valós tömb, melynek a szubrutin az első t-vel való hiváskor /IT=1/ ad értéket, és ezt uj t-vel való hivásnál /IT>1/ felhasználja;

GRA - legalább $MGRA * NGRA * \max\{N, 2M\}$-elemü, háromdimenziós valós tömb, melynek hivó szegmensbeli deklarációjában az első és második indexhatár rendre $=MGRA \geq N$ és $=NGRA \geq NPAR$. IT=1 esetén bemenetkor a $GRA(i,k,j)$ tömbelemnek kell tartalmaznia a $\partial A/\partial\theta_k(\theta_0)$ mátrix (i,j) indexü elemét. A GRA tömb IT=1 esetben kimenetkor felüliródik a /4.3.3/ képlet szerint számolt $\underline{z}^{(i)}(0) = \underline{z}_k^{(i)}(0)$ vektorokkal $/ k=1, \ldots, \nu /$, amelyek az IT>1 mellett való hivásokhoz megőrzendők;

MGRA - /input, egész tip./ lásd GRA;

NGRA - /input, egész tip./ lásd GRA;

SHIFT - /input/ értéke a λ spektrum-eltolás /valós tip./;

ALFA - IT=1 esetén a hivott KAMLER szubrutin által számolt skálaparaméter, mely az IT>1 esetekre megőrzendő /valós/;

WORK - legalább $N*(4N+4)+NGT$ -elemü valós munkatömb; NGT értékére nézve lásd az M.2. pontot;

SAVE - legalább $N*(2M+4)+NGT$ -elemü valós tömb az IT=1 híváskor számolt részeredmények tárolsára, amelyekre IT>1 esetben is szükség van: NGT értékére vonatkozólag lásd az M.2. pontot.

M.5. A tesztadatokon való futtatás leirása és eredményei

A minimálpolinom-módszer tesztadatokon való kipróbálásához egy PRETAB nevü főprogramot irtunk, amely beolvassa az adatokat, hivja az M.1-4. pontokban ismeretetett szubrutinokat és sornyomtatón megjeleniti az eredményeket. Mátrixok és vektorok kiirására egy, a SZOTE R-10 számitógépén belövéseknél részeredmények nyomtatására alkalmazott MXWRT nevü szubrutint használtunk fel, amely a kinyomtatott tömb előtt egy csupa M, utána pedig egy csupa W karakterből álló sort ir ki. Az input-output utasitásoknál nem ragaszkodtunk a hivatkozási Fortran nyelvhez, és kihasználtuk az R-10-en müködő Fortran-reprezentáns által biztositott speciális lehetőségeket is.

A PRETAB főprogram segitségével lehetőség van egymás után több feladat megoldására /a program ujrainditása nélkül/. Itt egy feladat alatt vagy (1) $\exp(tA)\underline{b}$ kiszámitását értjük egy $t = t_0, t_0+h, \ldots, t_0+n_t h$ ekvidisztáns pontsorozaton, ahol $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ tetszőleges mátrix és $\underline{b}$ vagy n_b számu kivülről megadott vektort, vagy az $\underline{e}_1, \ldots, \underline{e}_n$ egységvektorokat futja be /ha $n_b = 0$ /; vagy pedig (2) $\exp(tA)\underline{b}$ és paraméterek szerinti deriváltjai egyidejü kiszámitását ugyanolyan pontsorozaton, de ekkor A csak kompartment-mátrix lehet és $n_b = 1$. A program jelenlegi verziójában az A mátrix rendje és paramétereinek száma egyaránt legfeljebb 9 lehet, de ez a korlát a DIMENSION,EQUIVALENCE és MAX=9 utasitások cseréjével módositható. A program adatait lyukkártyán kell megadni.

(1) $\exp(tA)\underline{b}$ kiszámitásának feladata esetén a megfelelő input sorozat a következő:

1. Cimke-kártya: tetszőleges 80-karakteres szöveg a feladat megjelölésére.

2. Adatkártya, formája: NT=<n_t>␣T∅=<t_0>␣H=<h>␣␣␣␣␣<n_b> ahol n_t I3, t_0 F4.1, h F8.4, n_b I2 formátummal olvasódik.

3. Mátrix-rend és sor-formátum kártya, formája: N=<n><'format'> ahol az A mátrix n rendjét I2, a mátrix soraira és az esetleges $\underline{b}$ vektor/ok/ra vonatkozó 'format' input formátumot pedig 19 A4 formátummal olvassa a program.

4. Az A mátrix sorai /n számu/, mind uj kártyán kezdődően, az előzőleg beolvasott 'format' formátumnak megfelelően.

[5.] A $\underline{b}$ vektorok /n_b számu/, mind uj kártyán kezdve, a 'format' formátumnak megfelelően. $n_b=0$ esetén e tétel kimarad és a program rendre az $\underline{e}_1,\dots,\underline{e}_n$ egységvektorokat generálja $\underline{b}$ gyanánt.

6. Adatvégjel-kártya, formája: %EOD

(2) Ha A kompartment-mátrix, és $\exp(tA)\underline{b}$-n kivül annak paraméterek szerinti parciális deriváltjait is számoltatni akarjuk, akkor a megadandó input sorozat 1-5. tételei megegyeznek a fentivel, de ilyenkor a program a parciális deriváltakat csak egyetlen $\underline{b}$ vektorra számolja /ha $n_b\neq 1$, akkor az utolsóra/. Az input sorozat további része itt a következő:

6. Paraméterszám-kártya, formája <npar>, ahol npar az A mátrix azon paramétereinek száma, amelyek szerinti parciális deriváltak számitandók; olvasás formátuma: I3.

7. Sorindex-kártya /kártyák/: az npar számu paraméter, mint transzportegyüttható, első indexe /0 is lehet, lásd az 5.1. pontot/; 2∅I3 formátummal olvasódik.

8. Oszlopindex-kártya /kártyák/: ugyanugy adandók meg, mint az előbbiek, csak a megfelelő transzportegyütthatók második indexére vonatkoznak.

Az utolsó feladat input sorozata után egy /ujabb/ adat-végjel-kártya a program futásának szabályos befejeződését eredményezi.

A program sornyomtatón megjelenő outputja a következőket tartalmazza: input adatok, vektor-minimálpolinom együtthatói, $e^{tA}\underline{b}$ megoldásvektor értékei a megadott pontsorozaton, mátrix-minimálpolinom együtthatói, továbbá $e^{tA}\underline{b}$ paraméterek szerinti parciális deriváltjai /a legutóbbit csak 2 tipusu input esetén/.

A próbafutás során a következő feladatokat oldottuk meg, az itt megadott sorrendben.

1. Az 5.4. pontban leirt rekeszmodell egyenletének megoldása és annak a $\theta_1, \ldots, \theta_5$ paraméterek szerinti parciális deriváltjának kiszámitása. Itt

$$A=\begin{bmatrix} -9 & 3 & 0 & 0 \\ 0 & -6 & 5 & 4 \\ 0 & 0 & -7 & 0 \\ 9 & 3 & 2 & -5 \end{bmatrix}, \quad \underline{b}=\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \text{és} \quad \begin{matrix} \theta_1=a_{12} & \theta_2=a_{24} \\ \theta_3=a_{41} & \theta_4=a_{42} \\ \theta_5=a_{04} & \end{matrix}$$

2. Ward [51] 1. sz. teszt-példája: e^A meghatározása, ahol

$$A=\begin{bmatrix} 4 & 2 & 0 \\ 1 & 4 & 1 \\ 1 & 1 & 4 \end{bmatrix}$$

nemderogatórius defektiv mátrix. e^A i-edik oszlopát $e^{tA}\underline{e}_i$ kiszámitása utján kapjuk meg /$i=1,2,3$/, ahol $t=1$.

3. Ward [51] 3. sz. teszt-példája: e^A meghatározása, ahol

$$A = \begin{bmatrix} -131 & 19 & 18 \\ -390 & 56 & 54 \\ -387 & 57 & 52 \end{bmatrix}$$

Itt e^A oszlopait az előzővel azonos módon nyerjük.

E három feladat megoldására a program inputja a következő volt:

```
AZ 5.4. PONTBAN MEGADOTT REKESZMODELL EGYENLETEINEK MEGOLDASA
NT= 6Ø TØ= Ø.Ø H= Ø.1       1
N= 4    (4F4.Ø)
  -9    3
      -6    5    4
           -7
   9    3    2   -5
        1
  5
  1   2   4   4   Ø
  2   4   1   2   4
WARD 1.SZ. TESZT-PELDAJA  (NEMDEROGATORIUS DEFEKTIV MATRIX)
NT=  1 TØ= 1.Ø H=Ø.Ø
N= 3 (3F3.Ø)
  4   2   Ø
  1   4   1
  1   1   4
%EOD
WARD 3.SZ. TESZT-PELDAJA
NT=  1 TØ= 1.Ø H= Ø.Ø
N= 3 (3F5.Ø)
 -131    19    18
 -39Ø    56    54
 -387    57    52
%EOD
%EOD
```

A PRETAB főprogram és az MXWRT mátrixkiíró rutin forrásnyelvi listája, valamint a szerkesztési és futtatási listák a következő lapokon találhatók.

```
C       DETERMINATION OF THE MINIMAL POLYNOMIAL OF AN N-BY-N MATRIX A
C       WITH RESPECT TO AN N-BY-K MATRIX B BY KRYLOV'S METHOD.
C
C       THAT MINIMAL POLYNOMIAL IS THE SMALLEST ORDER POLYNOMIAL P(.)
C       SATISFYING  P(A)*B = 0.
C
C       IF B IS THE IDENTITY MATRIX THEN THE MATRIX MINIMAL POLYNOMIAL OF A
C       WILL RESULT
C
C
        SUBROUTINE  KRYLOV (N,A,NA,AB,K,SHIFT,P,M,RN,WORK,IW)
C                   ======
C
C
        DIMENSION A(NA,N),AB(N,K,1),P(N),WORK(N,K,4),IW(N,K)
C
C
C   P A R A M E T E R S :
C   ---------------------
C
C   A(NA,N)         INPUT:  TWO-DIMENSIONAL REAL ARRAY (N.LE.NA) CONTAINING
C                           THE MATRIX A
C   AB(N,K,.)       INPUT:  THREE-DIMENSIONAL REAL ARRAY WITH THE THIRD (ACTUAL
C                           DIMENSIONING PARAMETER NOT LESS THAN 2*N.  AB(I,J,1
C                           MUST BE SET TO THE (I,J) ENTRY OF THE MATRIX B
C                   OUTPUT: AN(.,.,L) CONTAINS THE L-TH MEMBER OF THE KRYLOV
C                           SEQUENCE, A**(L-1)*B, FOR L=1,...,N. THE OTHER HALF
C                           OF ARRAY AB CONTAINS INTERMEDIATE RESULTS.
C   SHIFT           INPUT:  VALUE OF EIGENVALUE-SHIFT TO BE USED (REAL)
C   M               OUTPUT: DEGREE OF THE MINIMAL POLYNOMIAL
C                           IF B=0 THEN M=0 IS RETURNED (ANY POLNOMIAL IS
C                           ANNIHILATING WITH RESPECT TO B
C   P(N)            OUTPUT: THE FIRST M ELEMENTS ARE THE MINIMAL POLYNOMIAL
C                           COEFFICIENTS. THE MINIMAL POLYNOMIAL IS GIVEN BY
C                           X**M + P(M)*X**(M-1) +...+ P(2)*X + P(1)
C   RN              OUTPUT: RESIDUAL NORM, E.G., MAXIMAL MAGNITUDE IN P(A)*B
C
C   WORK(N,K,4)             REAL WORKING ARRAY WITH AT LEAST N*K*4 ELEMENTS
C   IW(N,K)                 INTEGER WORKING ARRAY WITH AT LEAST N*K ELEMENTS
C
C
        DOUBLE PRECISION SUM,AIJ
C
C
        IF(N.LE.0.OR.K.LE.0) GO TO 40
        NP1=N+1
C
C   FORM KRYLOV'S SEQUENCE
        DO 10 L=1,N
        DO 10 I=1,N
        DO 10 J=1,K
        SUM=0.D0
        DO 11 IJ=1,N
        AIJ=A(I,IJ)
        IF(IJ.EQ.I) AIJ=AIJ-DBLE(SHIFT)
   11   SUM=SUM+AIJ*DBLE(AB(IJ,J,L))
   10   AB(I,J,L+1)=SUM
C
C   STORE N+1-ST MEMBER OF THE SEQUENCE
        DO 20 I=1,N
        DO 20 J=1,K
   20   WORK(I,J,1)=-AB(I,J,NP1)
        M=N
C
C   GAUSSIAN ELIMINATION BY COLUMNS FOR THE DETERMINATION
```


SZOV Nyomda 78,2462

```
C  OF MINIMAL POLYNOMIAL DEGREE, M
C
      NK=N*K
      CALL DECOMP(NK,N,AB,NK,AB(1,1,NP1),NK,IW,MP1
     ,,                 WORK(1,1,4),WORK(1,1,2))
      IF(MP1.EQ.0) GO TO 50
C
C  MINIMAL POLYNOMIAL DEGREE < N
      M=MP1-1
      DO 30 I=1,N
      DO 30 J=1,K
   30 WORK(I,J,1)=-AB(I,J,MP1)
      IF(M.NE.0) GO TO 50
C
C  B=0: ANY POLYNOMIAL OF A IS ANNIHILATING WITH RESPECT TO B
   40 M=0
      RN=0.0
      ITNO=0
      COND=1.0
      GO TO 99
C
C  FIND COEFFICIENTS
C
   50 CALL ITSOLV(NK,M,AB,NK,AB(1,1,NP1),NK,IW,WORK,P,ITNO,COND
     ,,                 RN,WORK(1,1,2),WORK(1,1,3))
C
   99 RETURN
      END
```

SZOV Nyomda 78,2462

```
    P*L*U DECOMPOSITION OF AN M-BY-N RECTANGULAR MATRIX


    IF THE RANK OF THE MATRIX IS LESS THAN N AND K0 IS THE NUMBER
    OF THE FIRST COLUMN THAT LINEARLY DEPENDS ON THE PRECEDING ONES
    THEN ONLY THE FIRST (K0-1) COLUMNS ARE INCLUDED IN THE DECOMPOSITION


    SUBROUTINE  DECOMP (M,N,A,MA,UL,MUL,IP,K0,SC,DP)
                ======

    DIMENSION A(MA,N),UL(MUL,N),IP(M),SC(M)
    DOUBLE PRECISION DR                       ,DP(M)


  P A R A M E T E R S :
  ---------------------

  M,N           INPUT:  NUMBER OF ROWS AND COLUMNS, RESP.,
                        OF THE MATRIX TO BE DECOMPOSED

  A(MA,N)       INPUT:  TWO-DIMENSIONAL REAL ARRAY (M.LE.MA)
                        CONTAINING THE MATRIX TO BE DECOMPOSED
  UL(MUL,N)     OUTPUT: TWO-DIMENSIONAL REAL ARRAY (M.LE.MUL) CONTAINING
                        THE L*U DECOMPOSITION OF THE
                        APPROPRIATELY PERMUTED INPUT     U(1,1)  U(1,2)  U(1,3
                        MATRIX, PLACED - APART FROM      L(2,1)  U(2,2)  U(2,3
                        PERMUTATIONS - ACCORDING TO      L(3,1)  L(3,2)  U(3,3
                        THE FOLLOWING PATTERN:           L(4,1)  L(4,2)  L(4,3
                        (MS, N=3)                        L(5,1)  L(5,2)  L(5,3
  IP(M)         OUTPUT: INTEGER ARRAY DESCRIBING THE PERMUTATION MATRIX P
                        OF THE P*L*U DECOMPOSITION
  K0            OUTPUT: EITHER ZERO OR THE NUMBER OF THE FIRST COLUMN
                        FOUND TO BE LINEARLY DEPENDENT ON THE PRECEDING ONES
  SC(M),DP(M)           REAL AND DOUBLE PRECISION WORKING ARRAYS, RESP.



    K0=0
    IF(N.LE.0.OR.M.LE.0) GO TO 100

INITIALIZE IP,UL,SC AND DP
    DO 10 I=1,M
    IP(I)=I
    DP(I)=DBLE(A(I,1))
    BIG=0.0
    DO 20 J=1,N
    IF(BIG.LT.ABS(A(I,J))) BIG=ABS(A(I,J))
20  UL(I,J)=A(I,J)
    IF(BIG.NE.0.0) BIG=1./BIG
10  SC(I)=BIG

GAUSSIAN ELIMINATION WITH PARTIAL PIVOTING
    KP1=1
30  K=KP1
    KP1=K+1

FIND PIVOT ELEMENT
    BIG=0.0
    DO 40 I=K,M
    IPI=IP(I)
    SIZE=ABS(SNGL(DP(IPI)))*SC(IPI)
    IF(SIZE.LE.BIG) GO TO 40
    BIG=SIZE
    IPIV=I
40  CONTINUE
```

```
      SIZE=BIG+1.0
      IF(SIZE.LE.1.0) GO TO 90

EXCHANGE
      KP=IP(IPIV)
      IP(IPIV)=IP(K)
      IP(K)=KP
      UL(KP,K)=SNGL(DP(KP))
      IF(K.LT.M) GO TO 51
      IF(M.LT.N) K0=KP1
      GO TO 100

FORM THE K-TH COLUMN OF L
51    DO 50 I=KP1,M
      IPI=IP(I)
50    UL(IPI,K)=SNGL(DP(IPI)/DP(KP))
      IF(K.GE.N) GO TO 100

PROCESS THE KP1-TH COLUMN
      DO 60 I=1,M
60    DP(I)=DBLE(UL(I,KP1))
      DO 70 J=1,K
      JP1=J+1
      IPJ=IP(J)
      DO 80 I=JP1,M
      IPI=IP(I)
80    DP(IPI)=DP(IPI)-DBLE(UL(IPI,J))*DP(IPJ)
70    UL(IPJ,KP1)=SNGL(DP(IPJ))
      GO TO 30

ZERO PIVOT FOUND
90    K0=K

TERMINATE
00    RETURN
      END
```

```
C       SOLUTION OF A DECOMPOSED LINEAR ALGEBRAIC SYSTEM BY ITERATIVE REFINE
C
C
      SUBROUTINE  ITSOLV (M,N,A,MA,UL,MUL,IP,B,X,ITNO,COND,RNORM,R,DX)
C                 ======
C
C
      DIMENSION A(MA,N),UL(MUL,N),IP(M),B(M),X(N),R(M),DX(N)
C
C
C     P A R A M E T E R S :
C     ---------------------
C
C     M             INPUT:  NUMBER OF EQUATIONS IN THE SYSTEM, ALL OF WHICH AR
C                           INCLUDED IN RESIDUAL NORM COMPUTATION(SEE 'RNORM')
C                           BUT ONLY N OF WHICH TAKE PART IN OTHER COMPUTATION
C                           (N.LE.M, SEE PARAMETER 'N')
C     N             INPUT:  NUMBER OF UNKNOWNS IN THE SYSTEM OF EQUATIONS
C     A(MA,N)       INPUT:  REAL TWO-DIMENSIONAL ARRAY (N.LE.M.LE.MA)
C                           CONTAINING THE M BY N COEFFICIENT MATRIX OF THE SY
C     UL(MUL,N)     INPUT:  REAL TWO-DIMENSIONAL ARRAY (M.LE.MUL) CONTAINING
C                           THE PERMUTED TRIANGULAR MATRICES U,L OF THE
C                           P*L*U DECOMPOSITION OF THE COEFFICIENT MATRIX,
C                           AS PRODUCED BY DECOMP
C     IP(M)         INPUT:  INTEGER ARRAY DESCRIBING THE PERMUTATION MATRIX P
C                           OF THE P*L*U DECOMPOSITION OF THE COEFFICIENT MATR
C                           ONLY THE FIRST N ELEMENTS OF IP ARE USED HERE
C     B(M)          INPUT:  RIGHT-HAND SIDE OF THE SYSTEM
C     X(N)         OUTPUT:  SOLUTION VECTOR OF THE SYSTEM
C     ITNO         OUTPUT:  0<=ITNO=:THE NUMBER OF ITERATION STEPS TAKEN
C                           IN CASE OF CONVERGENCE WITHIN ITMAX STEPS, WHERE
C                           ITMAX IS GIVEN IN THE DATA STATEMENT; OTHERWISE
C                           ITNO<=0 AND -ITNO IS THE NUMBER OF THAT APRROXIMATI
C                           WITH THE SMALLEST RESIDUAL NORM /IN SUCH A CASE,
C                           THE NUMBER OF ITERATION STEPS TAKEN IS ITMAX-ITNO,
C                           BECAUSE THE FIRST -ITNO STEPS ARE REPEATED
C     COND         OUTPUT:  ESTIMATE OF THE CONDITION NUMBER OF THE COEF. MATR
C     RNORM        OUTPUT:  MAGNITUDE OF THAT EQUATION RESIDUAL WITH MAXIMUM
C                           ABSOLUTE VALUE
C     R(M),DX(N)            REAL WORKING ARRAYS
C
C     BETA           DATA:  RADIX BASE IN FLOATING POINT REPRESENTATION
C     EPS            DATA:  ROUNDOFF UNIT OF THE FLOATING POINT REPRESENTATION
C                           ON THE COMPUTER/APPROXIMATELY/
C                           EPS=(1/2)*BETA**(1-ND) WHERE ND:=NO.OF MANTISSA DI
C     ITMAX          DATA:  MAXIMUM NUMBER OF ITERATIONS. A VALUE NOT LESS THA
C                           2*ALOG10(1/EPS) IS USED
C
C     ***  BETA,EPS AND ITMAX ARE MACHINE DEPENDENT  ***
C
C
C
      DATA BETA,EPS,ITMAX/16.,Z3B800000,20/
C     EPS=(1/2)*16**(1-6)
C
      DOUBLE PRECISION SUM
C
      ITEND=ITMAX
   10 ITNO=0
      CALL TRSOLV(N,UL,NUL,IP,B,X)
C
C  SET INITIAL VALUES
      XNORM=0.0
      DO 20 I=1,N
   20 XNORM=AMAX1(ABS(X(I)),XNORM)
```

```
      COND=1.0
      DXNORM=XNORM
      DXEPS=EPS*XNORM
C
C  COMPUTE RESIDUALS WITH DOUBLE PRECISION ACCUMULATION
   30 RNORM=0.0
      DO 50 I=1,M
      SUM=DBLE(B(I))
      DO 40 J=1,N
   40 SUM=SUM-DBLE(A(I,J))*DBLE(X(J))
      RI=SNGL(SUM)
      RNORM=AMAX1(ABS(RI),RNORM)
   50 R(I)=RI
      IF(ITNO.EQ.0) GO TO 55
      IF(RNMIN.LE.RNORM) GO TO 60
   55 ITMIN=ITNO
      RNMIN=RNORM
C
C  TEST FOR CONVERGENCE
   60 IF(DXNORM.LE.DXEPS) GO TO 100
      IF(ITNO.EQ.1) COND=BETA*DXNORM/DXEPS
      IF(ITNO.LT.ITEND) GO TO 70
      IF(ITNO.EQ.ITMIN) GO TO 99
      ITEND=ITMIN
      GO TO 10
C
   70 ITNO=ITNO+1
      CALL TRSOLV(N,UL,MUL,IP,R,DX)
C
C  FORM REFINED SOLUTION VECTOR
      DXNORM=0.0
      DO 80 I=1,N
      XI=X(I)
      X(I)=XI+DX(I)
   80 DXNORM=AMAX1(ABS(X(I)-XI),DXNORM)
      GO TO 30
C
C  FINISH
   99 ITNO=-ITMIN
      IF(ITNO.EQ.0) COND=1.E30
  100 RETURN
C
      END
```

SZOV Nyomda 78,2462

```
C       TRIANGULAR SYSTEMS SOLVER
C
C
C
        SUBROUTINE  TRSOLV (N,UL,NUL,IP,B,X)
C                   ======
C
C
        DIMENSION UL(NUL,N),IP(N),B(N),X(N)
C
C
C
C     P A R A M E T E R S :
C     --------------------
C
C     N             INPUT:  ORDER OF THE SYSTEM TO BE SOLVED
C     UL(NUL,N)     INPUT:  TWO-DIMENSIONAL REAL ARRAY CONTAINING A PERMUTED
C                           L*U DECOMPOSITION OF A NONSINGULAR MATRIX, AS
C                           PRODUCED BY DECOMP. (N.LE.NUL).
C     IP(N)         INPUT:  INTEGER ARRAY CONTAINING THE PERMUTATION OF THE
C                           L*U DECOMPOSITION
C     B(N)          INPUT:  RIGTH-HAND SIDE OF THE SYSTEM
C     X(N)         OUTPUT:  SOLUTION VECTOR OF THE SYSTEM
C
C
C     M E T H O D :   THE SUBROUTINE SOLVES THE SYSTEM  P*L*U*X=B, WHERE
C     -------------   P,L AND U DENOTE PERMUTATION, UNIT LOWER TRIANGULAR
C                     AND UPPER TRIANGULAR MATRICES GIVEN IN IP AND UL, RESP.
C                     BY MEANS OF FORWARD SUBSTITUTION FOLLOWED BY BACK
C                     SUBSTITUTION
C
C
C
C   FORWARD SUBSTITUTION
        I=0
   10   I=I+1
        IF(I.GT.N) GO TO 20
        IPI=IP(I)
        SUM=B(IPI)
        J=0
   30   J=J+1
        IF(J.GE.I) GO TO 40
        SUM=SUM-UL(IPI,J)*X(J)
        GO TO 30
   40   X(I)=SUM
        GO TO 10
C
C   BACK SUBSTITUTION
C
   20   I=I-1
        IF(I.LE.0) RETURN
        IPI=IP(I)
        SUM=X(I)
        J=I
   50   J=J+1
        IF(J.GT.N) GO TO 60
        SUM=SUM-UL(IPI,J)*X(J)
        GO TO 50
   60   X(I)=SUM/UL(IPI,I)
        GO TO 20
C
        END
```

SZOV Nyomda 78,2462

```
   COMPUTATION OF EXP(T*A) WHERE A IS A COMPANION MATRIX BY KAMMLER'S METH

   SUBROUTINE  KAMLER (M,B,T,IT,EBT,MEBT,ALFA,BB,E,GT1,GT2)
               ======

   DIMENSION B(M),EBT(MEBT,M),BB(M),E(M),GT1(1),GT2(1)

 P A R A M E T E R S :
 ---------------------

 M             INPUT:  ORDER OF THE COMPANION MATRIX A
 B(M)          INPUT:  COEFFICIENTS OF THE
                       CHARACTERISTIC POLYNOMIAL      0     1     0     0
                       OF A WHICH OCCUR WITH          0     0     1     0
                       OPPOSITE SIGN IN A AS IN       0     0     0     1
                       THE FOLLOWING PATTERN/M=4/:  -B(1) -B(2) -B(3) -B(4)
 T             INPUT:  TIME-VALUE FOR WHICH EXP(T*A) IS TO BE COMPUTED
 IT            INPUT:  INTEGER PARAMETER CONTROLING PROGRAM FLOW
                       IF IT<1 ONLY COMPUTATIONS INDEPENDENT OF T ARE DONE;
                       IF IT>1 THE ABOVE ARE ASSUMED AND ONLY THE SUBSEQUEN
                               COMPUTATIONS ARE DONE.
                       AT FIRST CALL (WITH A NEW COMPANION MATRIX)
                       IT SHOULD NORMALLY BE SET TO 1
 ALFA          OUTPUT, IF IT<=1, INPUT, IF IT>1 :  SCALE PARAMETER
 DAS'LDAS+L)   OUTPUT: TWO-DIMENSIONAL REAL ARRAY (MEBT,GE,M) CONTAINING
                       THE MATRIX EXP(T*A) IN THE RELEVANT PART

 BB(M)                 AUXILIARY REAL VECTOR TO SAVE SCALED COEFFICIENTS
 E(M)                  REAL WORKING ARRAY
 GT1(,)                AUXILIARY REAL ARRAY TO SAVE TAYLOR SERIES
                       COEFFICIENTS. GT1 MUST HAVE AT LEAST M+NGT
                       ELEMENTS, WHERE NGT IS MACHINE DEPENDENT AND IS
                       GIVEN IN A DATA STATEMENT OF THE PRESENT ROUTINE
 GT2(,)                REAL WORKING ARRAY WITH AT LEAST M+NGT ELEMENTS

   DATA BETA,NGT/16.,10/

 BETA          DATA:   MACHINE-BASE(RADIX) OF FLOATING POINT ARITHMETIC
 NGT           DATA:   THE SMALLEST INTEGER SATISFYING
                                    FACTORIAL(NGT) > 2*BETA**NDIGIT
                       WHERE NDIGIT IS THE NUMBER OF MANTISSA DIGITS IN THE
                       FLOATING POINT REPRESENTATION OF THE MACHINE

   DOUBLE PRECISION SUM
   REAL LN2
   DATA LN2/0.693 147 180 559 945/

   IF(M-1) 900,110,1
 1 MP1=M+1
   MPNGT=M+NGT
   IF(IT.GT.1) GO TO 50

DETERMINE ALFA,BB
   ALFA=1.0
   GO TO 11
10 ALFA=ALFA*BETA
11 BBNORM=0.0
   SC=1.0
   DO 20 J=1,M
   JB=MP1-J
   SC=SC*ALFA
```

```
      BB(JB)=B(JB)/SC
      BBNORM=BBNORM+ABS(BB(JB))
      IF(BBNORM.GT.1.0) GO TO 10
20    CONTINUE

GENERATE TAYLOR SERIES COEFFICIENTS  G(M),...,G(2*M+NGT-1)
AND STORE THEM AS  G(M+K-1)=:GT1(K), K=1,...,M+NGT
      GT1(1)=1.0
      K=1
30    K=K+1
      IF(K.GT.MPNGT) GO TO 49
      SUM=0.D0
      KB=K
      DO 40 J=1,M
      JB=MP1-J
      KB=KB-1
      IF(KB.LE.0) GO TO 41
40    SUM=SUM-DBLE(BB(JB))*DBLE(GT1(KB))
41    GT1(K)=SUM
      GO TO 30

49    IF(IT) 900,900,50

COMPUTATIONS INVOLVING T

DETERMINE N
50    AT=ALFA*T
      SC=ABS(AT)
      N=0.
      IF(SC.LE.1.0) GO TO 60
      N=IFIX(ALOG(SC)/LN2)+1
      AT=AT/FLOAT(2**N)

FORM POWER SERIES TERMS IN GT2(.)
      GT2(K+1)=AT**K/K! ,  K=0,1,...,M+NGT-1

60    GT2(1)=1.0
      DO 61 KP1=2,MPNGT
      K=KP1-1
61    GT2(KP1)=AT*GT2(K)/FLOAT(K)

COMPUTE LAST COLUMN OF EXP(AT*A) AND STORE IT IN E
      DO 70 I=1,M
      SUM=0.D0
      K1=NGT+I
      K2=MPNGT
71    SUM=SUM+DBLE(GT1(K1))*DBLE(GT2(K2))
      K1=K1-1
      K2=K2-1
      IF(K1) 70,70,71
70    E(I)=SUM

      K=0
80    K=K+1
      IF(K.LE.N.OR.ALFA.EQ.1.0) GO TO 90

RESCALE E
      JB=M
      SC=1.0
81    JB=JB-1
      IF(JB.LE.0) GO TO 90
      SC=SC*ALFA
      E(JB)=E(JB)/SC
      GO TO 81

APPLY THOMPSON'S RELATIONS
```

```
90    DO 91 I=1,M
      GT2(I)=BB(I)
      IF(K.GT.N) GT2(I)=B(I)
91    EBT(I,M)=E(I)

      JB=M
92    JB=JB-1
      IF(JB.LE.0) GO TO 94
      DO 93 I=1,JB
93    EBT(I,JB)=EBT(I+1,JB+1)+GT2(JB+1)*E(I)
      GO TO 92

94    I=1
95    IM1=I
      I=I+1
      IF(I.GT.M) GO TO 99
      J=1
      EBT(I,1)=-GT2(1)*E(IM1)
96    JM1=J
      J=J+1
      IF(J.GE.I) GO TO 95
      EBT(I,J)=EBT(IM1,JM1)-GT2(J)*E(IM1)
      GO TO 96

IF N=0 NO SQUARING IS REQUIRED
99    IF(K.GT.N) GO TO 900

SQUARING

      DO 100 I=1,M
      SUM=0.D0
      DO 101 J=1,M
01    SUM=SUM+DBLE(EBT(I,J))*DBLE(EBT(J,M))
00    E(I)=SUM
      GO TO 80

SOLVE THE MATRIX EXPONENTIAL PROBLEM FOR M=1
10    IF(IT.GE.1) EBT(1,1)=EXP(-B(1)*T)

TERMINATE
00    RETURN
      END
```

```
C       SUBROUTINE  ETAB
C                   ====
C
C
C   COMPUTES XT=EXP(T*A)*B, WHERE A IS SQUARE MATRIX AND B IS A COLUMN VECTO
C
C
C
      SUBROUTINE  ETAB (T,AB,N,M,P,SHIFT,IT,XT,ALFA,SAVE,WORK)
C
C
      DIMENSION AB(N,M),P(M),XT(N),SAVE(M,1),WORK(M,1)
C
C
C    P A R A M E T E R S :
C    ---------------------
C
C     T             INPUT:  TIME-VALUE
C
C     N             INPUT:  ORDER OF MATRIX A
C
C     M             INPUT:  ORDER OF THE MINIMAL (OR ANNIHILATING) POLYNOMIAL
C                           OF THE MATRIX A WITH RESPECT TO THE VECTOR B
C
C     AB(N,M)       INPUT:  MATRIX FORMED BY THE KRYLOV SEQUENCE OF COLUMN
C                           VECTORS  B, A*B, A**2*B, ... , A**(M-1)*B
C
C     P(M)          INPUT:  VECTOR OF MINIMAL (OR ANNIHILITING) POLYNOMIAL
C                           COEFFICIENTS, WHERE THE CORRESPONDING POLYNOMIAL
C                           IS X**M+P(M)*X**(M-1)+...+P(2)*X+P(1)
C
C     SHIFT         INPUT:  EIGENVALUE-SHIFT THAT HAS BEEN PERFORMED BEFORE
C                           THE COMPUTATION OF THE MINIMAL POLYNOMIAL.
C                           (SHOULD BE SET TO ZERO IF NOT USED)
C
C     IT            INPUT:  INTEGER; SHOULD BE SET TO 1 AT FIRST CALL AND
C                           GREATER THAN 1 AT SUBSEQUENT CALLS WITH THE SAME
C                           MATRIX A
C
C     XT(N)        OUTPUT:  REAL ARRAY CONTAINING EPX(T*A)*B ON EXIT
C
C     ALFA         OUTPUT: IF IT<=1, INPUT, IF IT>1 :  SCALING PARAMETER
C
C     SAVE(M,.)             REAL SAVE ARRAY WITH AT LEAST 2*M+NGT ELEMENTS
C                           WHERE THE VALUE OF NGT IS GIVEN IN A DATA
C                           STATEMENT OF SUBROUTINE 'KAMLER'
C                    *****  IN THE PRESENT VERSION NGT=12  *****
C     WORK(M,.)             REAL WORKING ARRAY WITH AT LEAST M*(M+2)+NGT
C                           ELEMENTS. FOR THE ACTUAL VALUE OF NGT, SEE THE
C                           SUBROUTINE 'KAMLER'
C
C
C
      DOUBLE PRECISION SUM
C
C
      IF(N.LE.0) GO TO 99
C
C   COMPUTE THE EXPONENTIAL OF THE COMPANION MATRIX
C   OF THE POLYNOMIAL P BY KAMMLER'S METHOD
C
      CALL KAMLER
     * (M,P,T,IT,WORK,M,ALFA,SAVE,WORK(1,M+1),SAVE(1,2),WORK(1,M+2))
C
C       M B T IT EBT MEBT ALFA BB    E          GT1          GT2      <---K
C
```


SZOV Nyomda 78,2462

```
C  FORM  EXP(T*A)*B
C
      ETS=EXP(T*SHIFT)
      DO 20 I=1,N
      SUM=0.D0
      J=0
   10 J=J+1
      IF(J.GT.M) GO TO 20
      SUM=SUM+DBLE(WORK(1,J))*DBLE(AB(I,J))
      GO TO 10
   20 XT(I)=SUM*ETS
C
   99 RETURN
      END
```

SZOV Nyomda 78,2462

```
C      SUBROUTINE  GRETAB
C                  ======
C
C  COMPUTES THE GRADIENT ZT OF XT=EXP(T*A)*B  WITH RESPECT TO A PARAMETER V
C  UPON WHICH THE N BY N MATRIX A DEPENDS. XT IS ALSO COMPUTED ON REQUEST.
C
C
C
      SUBROUTINE  GRETAB (T,A,B,N,NA,IT,IX,XT,ZT,NZT,NPAR,P,M,P2
     ,                   ,GRA,MGRA,NGRA,SHIFT,ALFA,WORK,SAVE)
C
C
      DIMENSION A(NA,N),B(N),XT(N),ZT(NZT,NPAR),P(M),P2(1)
     ,         ,GRA(MGRA,NGRA,1),WORK(N,1),SAVE(N,1)
C
C
C  P A R A M E T E R S :
C  ---------------------
C
C    T             INPUT:  TIME-VALUE
C    N             INPUT:  ORDER OF MATRIX A
C    A(NA,N)       INPUT:  TWO-DIMENSIONAL REAL ARRAY (N.LE.NA) CONTAINING
C                          THE MATRIX A
C    B(N)          INPUT:  ONE-DIMENSIONAL REAL ARRAY CONTAINING THE VECTOR B
C    IT            INPUT:  CONTROL PARAMETER (INTEGER)-(SEE BELOW)
C    IX            INPUT:  FOR IX=0 XT SHOULD NOT BE COMPUTED
C    XT           OUTPUT:  XT=EXP(T*A)*B, PROVIDED IT>=1 AND IX.NE.0
C    NPAR          INPUT:  NUMBER OF PARAMETERS OF THE MATRIX A
C  ZT(NZT,NPAR)  OUTPUT:  TWO-DIMENSIONAL REAL ARRAY (N.LE.NZT). ON EXIT THE
C                         K-TH COLUMN OF ZT CONTAINS THE PARTIAL DERIVATIVE
C                         VECTOR OF XT WITH RESPECT TO THE K-TH PARAMETER,
C                         K=1,...,NPAR
C    SHIFT         INPUT:  VALUE OF EIGENVALUE-SHIFT TO BE USED IN COMPUTATIO
C
C    M             INPUT:  DEGREE OF THE MINIMAL (OR ANNIHILATING) POLYNOMIAL
C                          OF THE MATRIX A
C    P(M)          INPUT:  MINIMAL POLYNOMIAL COEFFICIENTS
C    P2(,)        OUTPUT, IF IT<=1, INPUT, IF IT>1, REAL ARRAY WITH AT LEAST
C                          2*M ELEMENTS TO STORE THE COEFFICIENTS OF THE
C                         SQUARED MINIMAL POLYNOMIAL
C    GRA(MGRA,NGRA,,)      INPUT:  THREE-DIMENSIONAL REAL ARRAY WITH  N.LE.MG
C                       NPAR.LE.NGRA  AND WITH THE THIRD ACTUAL DIMEMENSIONG
C                       PARAMETER NOT LESS THAN MAX(N,2*M). ON ENTRY GRA(I,K
C                       SHOULD CONTAIN THE PARTIAL DERIVATIVE OF A(I,J) WITH
C                       RESPECT TO THE K-TH PARAMETER. THE INPUT MATRIX IS
C                       OVERWRITTEN BY AUXILIARY QUANTITIES NEEDED SUBSEQUEN
C    ALFA         OUTPUT: IF IT<=1, INPUT, IF IT>1 :  SCALING PARAMETER
C
C    WORK(N,,)             WORKING AREA WITH AT LEAST N*(4*N+4)+NGT ELEMENTS,
C                          WHERE THE ACTUAL VALUE OF NGT IS GIVEN IN SUBROUTI
C                          'KAMLER'
C                   *****  IN THE PRESENT PROGRAM, NGT=12  *****
C    SAVE(N,,)             AUXILIARY REAL ARRAY WITH AT LEAST N*(2*M+4)+NGT
C                          ELEMENTS TO SAVE RESULTS OF THE FIRST CALL (IT<=1)
C                          NEEDED ON LATER CALLS WITH DIFFERENT T (IT>1)
C
C
      DOUBLE PRECISION SUM,AIL
C
C
      IF(N.LE.0) GO TO 99
      M2=M+M
      IF(IT.GT.1) GO TO 50
C
      M2=M+M
C
```

```
C  FORM KRYLOV'S SEQUENCE IN SAVE
C
      IF(M.LE.0) GO TO 51
      DO 20 J=1,M2
      DO 20 I=1,N
      IF(J.NE.1) GO TO 10
      SAVE(I,1)=B(I)
      GO TO 20
C
   10 SUM=0.D0
      DO 19 L=1,N
      AIL=A(I,L)
      IF(L.EQ.I) AIL=AIL-DBLE(SHIFT)
   19 SUM=SUM+AIL*DBLE(SAVE(L,J-1))
      SAVE(I,J)=SUM
   20 CONTINUE
C
C  FORM COEFFICIENTS OF SQUARED MINIMAL POLYNOMIAL IN P2
C
      DO 30 K=1,M2
      SUM=0.D0
      I=0
      IG=K
      IF(IG.LE.M) GO TO 31
      I=K-M
      SUM=2.D0*DBLE(P(I))
      IG=M
   31 J=K-I
      I=I+1
      IF(I.GT.IG) GO TO 30
      SUM=SUM+DBLE(P(I))*DBLE(P(J))
      GO TO 31
   30 P2(K)=SUM
C
C  SET INITIAL CONDITIONS FOR HIGHER ORDER DERIVATIVES
C
      DO 40 K=1,NPAR
C
C  COPY GRA(.,K,.) INTO WORK(.,.); ZERO GRA(.,K,1)
      DO 41 I=1,N
      DO 42 J=1,N
   42 WORK(I,J)=GRA(I,K,J)
   41 GRA(I,K,1)=0.0
C
      DO 40 J=2,M2
      JM1=J-1
      DO 44 I=1,N
      SUM=0.D0
      DO 45 L=1,N
      AIL=A(I,L)
      IF(L.EQ.I) AIL=AIL-DBLE(SHIFT)
      SUM=SUM+AIL*DBLE(GRA(L,K,JM1))
   45 SUM=SUM+DBLE(WORK(I,L))*DBLE(SAVE(L,JM1))
   44 GRA(I,K,J)=SUM
   40 CONTINUE
C  PARTIAL DERIVATIVE MATRICES IN GRA ARE OVERWRITTEN NOW
C
C
C  FORM THE EXPONENTIAL OF THE COMPANION MATRIX OF THE SQUARED MINIMAL
C  POLYNOMIAL IN WORK USING KAMMLER'S METHOD
C
C
C    KAMLER ---> ( M  B  T IT EBT MEBT ALFA    BB              E
C
   50 CALL KAMLER(M2,P2,T,IT,WORK,2*N,ALFA,SAVE(1,M2+1),WORK(1,4*N+1)
     ,            ,SAVE(1,M2+3),WORK(1,4*N+3))
```

```
C
C     ,                GT1          GT2        )
C
C
C
C  COMPUTE ZT AND OPTIONALLY XT
C
      IF(IT.LE.0) GO TO 99
   51 ETS=EXP(T*SHIFT)
      DO 60 I=1,N
      IF(IX.EQ.0) GO TO 61
C
      SUM=0.D0
      J=0
   62 J=J+1
      IF(J.GT.M2) GO TO 63
      SUM=SUM+DBLE(WORK(1,2*J-1))*DBLE(SAVE(I,J))
      GO TO 62
   63 XT(I)=SUM*ETS
C
   61 DO 64 K=1,NPAR
      SUM=0.D0
      J=0
   65 J=J+1
      IF(J.GT.M2) GO TO 64
      SUM=SUM+DBLE(WORK(1,2*J-1))*DBLE(GRA(I,K,J))
      GO TO 65
   64 ZT(I,K)=SUM*ETS
   60 CONTINUE
   99 RETURN
C
      END
```

SZOV Nyomda 78,2462

```
C       MATRIX WRITING ROUTINE
C
        SUBROUTINE  MXWRT (NAME,MATRIX,MDIM,M,N)
C                   =====
        DOUBLE PRECISION NAME
        DIMENSION MATRIX(1),ROW(10),IROW(20),F9020(8)
        EQUIVALENCE(ROW(1),IROW(1))
        DATA KDEZ/2H  /,F1,F2,F3,F4/4H1,3X,4H2,2X,4H3,1X,4H4   /
       DATA F9020/32H    ('0 ',10(A6,'/',I2,2X, 2X )) /
C
        PRINT 900
900     FORMAT(/66('MM'))
        IF(MDIM.LE.0) GO TO 1
C       REAL CASE
        K=2
        INCR=2*MDIM
        NR=10
        GO TO 2
C       INTEGER CASE
1       K=1
        INCR=-MDIM
        NR=20
C       LOOP FOR COLUMNS
2       J2=0
3       J1=J2+1
        IF(J1.GT.N) GO TO 9
        J2=J2+NR
C
        IF(J2.GT.N) J2=N
       IF(K.EQ.2) GO TO 200
       PRINT 9010,NAME
9010   FORMAT('0',A6,':')
       IF(J2.GT.1) PRINT 90100,(J,J=J1,J2)
901000FORMAT('+',9X,20(I5,','))
       IF(J2.GT.1) PRINT 9011
9011    FORMAT('--------')
       GO TO 100
200    F9020(6)=F1
       IF(J2.LE.9) GO TO 201
       F9020(6)=F3
       IF(J2.LE.99) F9020(6)=F2
       IF(J2.GE.1000) F9020(6)=F4
201    WRITE(108,F9020)(NAME,J,J=J1,J2)
       PRINT 9021,(KDEZ,J=J1,J2)
9021    FORMAT(10(A2,'------',5X))
C
C       LOOP FOR ROWS
100     DO 10 I=1,M
C
C       LOOP FOR ELEMENTS
        JR=0
        DO 4 J=J1,J2
        L2=(J-1)*INCR+K*I
        L1=L2+1-K
        DO 5 L=L1,L2
        JR=JR+1
5       IROW(JR)=MATRIX(L)
4       CONTINUE
C
        JD=J2-J1+1
        IF(K.EQ.2) GO TO 6
C       INTEGER CASE
        PRINT 901,(IROW(J),J=1,JD)
901     FORMAT(10X,20I6)
        IF(M.GT.1) PRINT 9001,I
```

```
9001    FORMAT('+',I4,',')
        GO TO 10
C       REAL CASE
6       PRINT 902,(ROW(J),J=1,JD)
902     FORMAT(1X,10G13.6)
10      CONTINUE
        IF(N.GT.NR) PRINT 903
903     FORMAT(66('--'))
        GO TO 3
C
9       PRINT 909
909     FORMAT(/66('WW')/)
        RETURN
        END
```

SZOV Nyomda 78,2462

```
   MAIN  PRETAB
         ======


   DIMENSION FORMA (19)

  0 DIMENSION A(9,9),B(9),AB(9,9,2),P(9),P2(9,2),XT(9),ZT(9,9)
  1,GRA(9,9,18),AA(9,9,18),WORK1(9,4),IW1(9),SAVE2(9,4),WORK2(9,9,2)
  2,WORK3(9,9,4),IW3(9,9),WORK4(9,9,5),SAVE4(9,9,3),AIA(1)
  3,II(9),JJ(9)


  0 EQUIVALENCE (XT(1),IW1(1)),(ZT(1,1),IW3(1,1))
  1,(GRA(1,1,1),AA(1,1,1),AIA(1)),(SAVE2(1,1),SAVE4(1,1,1))
  2,(WORK1(1,1),WORK2(1,1,1),WORK3(1,1,1),WORK4(1,1,1))


EQUIVALENCE TABLE

KRYLOV1:    IW1(N)                                                    WORK1(N,4)
ETAB   :    XT(N)                                    SAVE2(N,4)       WORK2(N,N,2
KRYLOV2:              IW3(N,N)      AA(N,N,2*N)                       WORK3(N,N,4
GRETAB :    XT(N)     ZT(N,NPAR)    GRA(N,NPAR,2*N)  SAVE4(N,N,3)     WORK4(N,N,5


   DATA SHIFT/0,0/

    MAX=9
    NGT=12

THE VALUES OF MAX AND (2*MAX) OCCUR IN THE DIMENSION STATEMENT ABOVE
AND BOTH STATEMENTS (DIM,AND MAX= ) MAY BE CHANGED CORRESPONDINGLY

HOWEVER, NGT.LE.2*MAX AND NGT.LE.MAX*(MAX-4) MUST HOLD, WHERE THE VALUE
OF NGT SHOULD NOT LESS THAN THAT IN SUBROUTINE KAMLER (DATA STATEMENT)

FURTHERMORE, MAX.GE.2 MUST ALSO BE FULFILLED

WITH NGT=12,  MAX.GE.6 SHOULD BE SATISFIED


    IF(NGT.GT.2*MAX.OR.NGT.GT.(MAX-4)*MAX) STOP


LABEL CARD INPUT

0  READ(105,905,END=9999) FORM1,FORMA
5  FORMAT(20A4)
   WRITE(108,908) FORM1,FORMA
8  FORMAT('1',20A4/)

CONTROL PARAMETER INPUT

   READ 907,NT,T0,H,NB
7   FORMAT('NT=',I3,' T0=',F4.1,' H=',F8.4,5X,I2)
   PRINT 910,NT,T0,H,NB
1  FORMAT('0NT=',I3,' T0=',F4.1,' H=',F8.4,' NB=',I2)

MATRIX ORDER AND ROW FORMAT INPUT

   READ 906,N,FORMA
6  FORMAT('N=',I2,19A4)
   PRINT 909,N,FORMA
9  FORMAT('0N=',I2,19A4)
```

```
** N.LE.MAX MUST HOLD ***
     IF(N.GT.MAX) STOP

ATRIX INPUT

    DO 100 I=1,N
    READ(105,FORMA) (A(I,J),J=1,N)
    WRITE(108,FORMA) (A(I,J),J=1,N)
    PRINT 900
    FORMAT('0-',65('--'))
     CALL MXWRT(6H A     ,A,MAX,N,N)
    MB=NB
    IF(NB.LE.0) MB=N

    DO 1 IB=1,MB
    IF(NB.LE.0) GO TO 102

READ VECTOR B

    READ(105,FORMA) (B(I),I=1,N)
    GO TO 101

CHOOSE NATURAL UNIT VECTORS FOR B

    DO 1010 I=1,N
0   B(I)=0.0
    B(IB)=1.0

     NT1=NT+1
    IF(NT.LE.1) NT1=NT
     IF (IB.GT.1) PRINT 901
     FORMAT('1')
     CALL MXWRT(6H B     ,B,1,1,N)
    DO 1 JT=1,NT1
     IT=JT-1
    IF(NT.LE.1) IT=NT
     T=T0+FLOAT(IT)*H
    IF(NT.LE.1) T=T0
    IF(JT.GT.1) GO TO 600


**********************************************************************

DETERMINATION OF THE MINIMAL POLYNOMIAL OF A WITH RESPECT TO THE VECTOR B
                        USING KRYLOV'S METHOD


     DO 500 I=1,N
00   AB(I,1,1)=B(I)
     CALL KRYLOV(N,A,MAX,AB,1,SHIFT,P,M,RN,WORK1,IW1)


**********************************************************************


     CALL MXWRT(6H P     ,P,1,1,M)


**********************************************************************

           COMPUTATION OF  XT=EXP(T*A)*B


00   CALL ETAB(T,AB,N,M,P,SHIFT,JT,XT,ALFA,SAVE2,WORK2)
```

```
*************************************************************************

   IF(JT.GT.1) GO TO 200
    L1=1
    IF (NT.LE.1) L1=0
    PRINT 920,L1,(J,J=1,N)
    FORMAT(I1,' IT',5X,'TIME  ',9(5X,'X',I1,6X))
   PRINT 921
   FORMAT(66('--'))

   PRINT 922,IT,T,(XT(J),J=1,N)
   FORMAT(I4,F11.4,9G13.6)
   CONTINUE

*************************************************************************

 DETERMINATION OF THE MINIMAL POLYNOMIAL OF A BY THE MATRIX KRYLOV METHOD


PUT THE N-BY-N IDENTITY MATRIX INTO THE FIST N*N LOCATIONS OF THE
ARRAY 'AA'

    NN=N*N
    DO 700 I=1,NN
00  AIA(I)=0.0
    NP1=N+1
    DO 710 J=1,NN,NP1
10  AIA(J)=1.0

L KRYLOV'S METHOD

    CALL KRYLOV(N,A,MAX,AA,N,SHIFT,P,M,RN,WORK3,IW3)


*************************************************************************


    CALL MXWRT(6H P(A) ,P,1,1,M)
   PRINT 921

INPUT COMPARTMENT MATRIX PARAMETER STRUCTURE

   READ(105,904,END=1000) NPAR
   FORMAT(20I3)
   PRINT 903,NPAR
   FORMAT('1 NPAR=',I2/)
** NPAR.LE.MAX MUST HOLD ***
    IF(NPAR.GT.MAX) STOP
   READ(105,904) (II(I),I=1,NPAR)
   PRINT 904,(II(I),I=1,NPAR)
   READ(105,904) (JJ(J),J=1,NPAR)
   PRINT 904,(JJ(J),J=1,NPAR)

SET PARTIAL DERIVATIVE MATRICES
   DO 300 K=1,NPAR
   DO 301 I=1,N
   DO 301 J=1,N
   GRA(I,K,J)=0.0
   IK=II(K)
   JK=JJ(K)
   GRA(JK,K,JK)=-1.0
   IF(IK.NE.0) GRA(IK,K,JK)=1.0
   CONTINUE
```

```
LOOP FOR TIME VALUES
   DO 3 JT=1,NT1
   IT=JT-1
   IF(NT.LE.1) IT=NT
   T=T0+FLOAT(IT)*H
   IF(NT.LE.1) T=T0

*******************************************************************************

   COMPUTATION OF THE GRADIENT, ZT, OF  XT=EXP(T*A)*B


    CALL GRETAB(T,A,B,N,MAX,JT,1,XT,ZT,MAX,NPAR,P,M,P2
  ,             ,GRA,MAX,MAX,SHIFT,ALFA,WORK4,SAVE4)


*******************************************************************************


   IF(JT.GT.1) GO TO 30
   PRINT 930,(J,J=1,N)
   FORMAT('1 IT',5X,'TIME  ',9(5X,'Y',I1,6X))
   PRINT 921

   PRINT 922,IT,T,(XT(J),J=1,N)
   PRINT 931
   DO 33 K=1,NPAR
   PRINT 933,K,(ZT(J,K),J=1,N)
   FORMAT('    D',I1,':',4X,9G13.6)
   PRINT 931
   FORMAT(1X)
   CONTINUE

   GO TO 1000

9  STOP
   END
```

```
%JOB 'LINKD'
 / 0 / 0 /12 /39

%C/BIB/COPY,UL,GO,(PRETAB)
BIB   0008
  6CB6 6D12 8344

%C/LINKD/SL,UL,SG,CL,FR,(PRETAB)
LINKD 006D
  6CB6 6D86 88C4

*** SEGMENT RELOCATION TABLE ***
       F:CDS      0000
        RETAB     0124
    1  PRETAB     298C
       LF:INI     32A6
    2  F:INI1     32C0
    3  F:STP      32C4
    4  F:STPN     32F8
       LF:RBE     3302
    5  F:REW      3312
    6  F:BKSP     3344
    7  F:ENDF     3354
       LF:REC     33B6
    8  F:REC      33BA
       LF:RDF     33E4
    9  F:RDF      33E8
       LF:IO      33EE
   10  F:IO       3406
       LF:FIO     3490
   11  F:FIO      3494
       LF:WRF     34A0
   12  F:WRF      34A4
        XWRT      34AA
   13  MXWRT      35A4
       LDSCIR     38BE
   14  F:CVIR     38C4
        RYLOV     38F6
   15  KRYLOV     39A2
        TAB       3CC4
   16  ETAB       3D34
       LDSOPR     3E96
   17  F:OPPR     3E9A
        RETAB     3EA2
   18  GRETAB     3FA4
       LF:ES      44FA
   19  F:DENR     4508
   20  F:FENR     4612
       LF:ERF     4658
   21  F:ERFO     467A
       LF:ESF     469A
   22  F:ESF      4794
   23  F:DECI     5482
   24  F:SABL     54BE
   25  F:INBL     54CC
   26  F:INCN     54E6
   27  F:TAB      54FA
       LF:ESC     551E
   28  F:GETC     5522
   29  F:PUTC     553E
       LDSLDP     555C
   30  F:LDDP     5562
       LDSSDP     5576
   31  F:STDP     557C
       LDSCRD     5590
   32  F:CVRD     5594
       LDSFSJ     559C
```

```
   33 F:DFSJ     55A2
      XLDS       55C2
   34 F:DFMJ     55F0
      DFALDS     576E
   35 F:DFAD     5774
      LDSCDR     5786
   36 F:CVDR     578A
       ECOMP     578E
   37 DECOMP     5838
       TSOLV     58C6
   38 ITSOLV     5C98
       AMLER     5F12
   39 KAMLER     6008
      LDSEXP     6540
   40 EXP        659C
      LDOVFD     66E4
   41 F:OVFD     66EA
      DFCOM      673C
   42 DFSFNC     6740
      LDFASJ     674C
   43 FADFSJ     6758
      LDSNO      6840
   44 DNORM      684A
      LDSABS     68E8
   45 ABS        68EC
      LDSCMR     68FA
   46 F:CMPR     68FE
      LDSNGL     6920
   47 SNGL       6924
      DVLDS      6928
   48 F:DFDV     693C
       RSOLV     6A6C
   49 TRSOLV     6AC0
      LDS1R      6C02
   50 AMAX1      6C0C
      LDSLOG     6C2E
   51 ALOG       6C76
      LDSCRI     6D3A
   52 F:CVRI     6D3E
      VELDS      6D8E
   53 F:EXII     6DAC
      LF:ERR     6E54
   54 F:ERR      6E9E
   55 DEBUG      6F36
      LUS        6F50
   56 USERR      6F54

*** LIST OF COMMON UTILISER  ***

***  UNSATISFIED REFERENCES  ***

*** LIST OF COMMON SP CALLED ***
       M:EXIT
       M:IO
       M:WAIT
       M:BNHX
       M:BNDC
       M:MOVE
       M:ABRT
       M:INDI
       M:FLD3
```

```
%JOB  %L%R     /EJ/
 / 0 / 0 /22 / 3

%L
PRETAB0000
  6CB6 6D96 DCFC

%R
```

SZDV Nyomda 78.2462 2

AZ 5.4. PONTBAN MEGADOTT REKESZMODELL EGYENLETEINEK MEGOLDASA

```
NT= 60 TÖ= 0.0 H=  0.1000 NB= 1

N= 4    (4F4.0)
-9.  3.  0.  0.
 0. -6.  5.  4.
 0.  0. -7.  0.
 9.  3.  2. -5.
```

= A

```
--------------------------------------------------------------------------------

MMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMM

  A      /1        A      /2        A      /3        A      /4
 ------           ------           ------           ------
 -9.00000          3.00000         0.000000         0.000000
 0.000000         -6.00000          5.00000          4.00000
 0.000000         0.000000         -7.00000         0.000000
  9.00000          3.00000          2.00000         -5.00000

WWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWW

MMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMM

  B      /1        B      /2        B      /3        B      /4
 ------           ------           ------           ------
[0.000000    ,     1.00000    ,    0.000000    ,    0.000000]  = b^T

WWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWW

MMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMM

  P      /1        P      /2        P      /3
 ------           ------           ------
  54.0000          117.000          20.0000      <- vektor-minimálpolinom együtthatói

WWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWW
```

SZÜV Nyomda 78.2462

t $x_1(t)$ $x_2(t)$ $x_3(t)$ $x_4(t)$

IT	TIME	X1	X2	X3	X4	X
0	0.0000	0.000000	1.00000	0.000000	0.000000	
1	0.1000	0.146078	0.592752	0.000000	0.247789	
2	0.2000	0.155020	0.423671	0.000000	0.375850	
3	0.3000	0.138042	0.354570	0.000000	0.421558	
4	0.4000	0.122329	0.322834	0.000000	0.426401	
5	0.5000	0.111314	0.303684	0.000000	0.414429	
6	0.6000	0.103568	0.288470	0.000000	0.396798	
7	0.7000	.975794E-01	0.274563	0.000000	0.377970	
8	0.8000	.924687E-01	0.261298	0.000000	0.359476	
9	0.9000	.878281E-01	0.248578	0.000000	0.341769	
10	1.0000	.834910E-01	0.236422	0.000000	0.324942	
11	1.1000	.793855E-01	0.224826	0.000000	0.308952	
12	1.2000	.754851E-01	0.213784	0.000000	0.293757	
13	1.3000	.717769E-01	0.203279	0.000000	0.279317	
14	1.4000	.682507E-01	0.193291	0.000000	0.265590	
15	1.5000	.648963E-01	0.183791	0.000000	0.252536	
16	1.6000	.617095E-01	0.174765	0.000000	0.240134	
17	1.7000	.586765E-01	0.166174	0.000000	0.228331	
18	1.8000	.557942E-01	0.158012	0.000000	0.217115	
19	1.9000	.530515E-01	0.150245	0.000000	0.206442	
20	2.0000	.504456E-01	0.142864	0.000000	0.196302	
21	2.1000	.479645E-01	0.135838	0.000000	0.186647	
22	2.2000	.456067E-01	0.129160	0.000000	0.177472	
23	2.3000	.433679E-01	0.122820	0.000000	0.168760	
24	2.4000	.412338E-01	0.116776	0.000000	0.160455	
25	2.5000	.392086E-01	0.111041	0.000000	0.152575	
26	2.6000	.372827E-01	0.105587	0.000000	0.145080	
27	2.7000	.354507E-01	0.100398	0.000000	0.137951	
28	2.8000	.337102E-01	.954689E-01	0.000000	0.131178	
29	2.9000	.320529E-01	.907754E-01	0.000000	0.124729	
30	3.0000	.304765E-01	.863111E-01	0.000000	0.118595	
31	3.1000	.289805E-01	.820743E-01	0.000000	0.112773	
32	3.2000	.275567E-01	.780419E-01	0.000000	0.107233	
33	3.3000	.262019E-01	.742051E-01	0.000000	0.101961	
34	3.4000	.249153E-01	.705613E-01	0.000000	.969541E-01	
35	3.5000	.236906E-01	.670931E-01	0.000000	.921887E-01	
36	3.6000	.225268E-01	.637972E-01	0.000000	.876599E-01	
37	3.7000	.214211E-01	.606656E-01	0.000000	.833570E-01	
38	3.8000	.203672E-01	.576810E-01	0.000000	.792559E-01	
39	3.9000	.193666E-01	.548473E-01	0.000000	.753624E-01	
40	4.0000	.184124E-01	.521449E-01	0.000000	.716491E-01	
41	4.1000	.175102E-01	.495898E-01	0.000000	.681384E-01	
42	4.2000	.166480E-01	.471480E-01	0.000000	.647832E-01	
43	4.3000	.158297E-01	.448305E-01	0.000000	.615989E-01	
44	4.4000	.150514E-01	.426264E-01	0.000000	.585705E-01	
45	4.5000	.143116E-01	.405311E-01	0.000000	.556914E-01	
46	4.6000	.136100E-01	.385444E-01	0.000000	.529615E-01	
47	4.7000	.129407E-01	.366488E-01	0.000000	.503570E-01	
48	4.8000	.123035E-01	.348441E-01	0.000000	.478773E-01	
49	4.9000	.117005E-01	.331365E-01	0.000000	.455309E-01	
50	5.0000	.111246E-01	.315055E-01	0.000000	.432898E-01	
51	5.1000	.105776E-01	.299564E-01	0.000000	.411612E-01	
52	5.2000	.100586E-01	.284865E-01	0.000000	.391416E-01	
53	5.3000	.956474E-02	.270879E-01	0.000000	.372198E-01	
54	5.4000	.909435E-02	.257557E-01	0.000000	.353893E-01	
55	5.5000	.864720E-02	.244893E-01	0.000000	.336494E-01	
56	5.6000	.822325E-02	.232887E-01	0.000000	.319996E-01	
57	5.7000	.781866E-02	.221429E-01	0.000000	.304252E-01	
58	5.8000	.743457E-02	.210551E-01	0.000000	.289306E-01	
59	5.9000	.706912E-02	.200201E-01	0.000000	.275085E-01	
60	6.0000	.672181E-02	.190365E-01	0.000000	.261570E-01	

MMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMM

P(A) /1 P(A) /2 P(A) /3 P(A) /4

378,000 873,000 257,000 27,0000 ← mátrix – minimálpolinom együtthatói

NPAR= 5

```
1   2   4   4   0
2   4   1   2   4
```

← $\theta_1 = a_{12}$ $\theta_2 = a_{24}$ $\theta_3 = a_{41}$ $\theta_4 = a_{42}$ $\theta_5 = a_{04}$

IT	TIME	Y1	Y2	Y3	Y4	Y
0	0.0000	0.000000	1.00000	0.000000	0.000000	
D1:		0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	
D2:		0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	
D3:		0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	
D4:		0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	
D5:		0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	
1	t= 0.1000	[0.146078 ,	0.592750 ,	0.000000 ,	0.247788]^T = $\underline{x}(t) = e^{tA}\underline{b}$	
D1:		[.412646E-01,	-.544501E-01,	0.000000 ,	.126549E-01]^T = $\partial\underline{x}(t)/\partial\theta_1$	
D2:		[.869991E-03,	.968852E-02,	0.000000 ,	-.101809E-01]^T = $\partial\underline{x}(t)/\partial\theta_2$	
D3:		[-.678273E-02,	.835219E-03,	0.000000 ,	.570102E-02]^T = $\partial\underline{x}(t)/\partial\theta_3$	
D4:		[-.659277E-02,	-.460135E-01,	0.000000 ,	.494358E-01]^T = $\partial\underline{x}(t)/\partial\theta_4$	
D5:		[-.955590E-04,	-.141481E-02,	0.000000 ,	-.114570E-01]^T = $\partial\underline{x}(t)/\partial\theta_5$	
2	0.2000	0.155019	0.423668	0.000000	0.375847	
D1:		.367649E-01	-.609391E-01	0.000000	.218283E-01	
D2:		.395669E-02	.241780E-01	0.000000	-.259312E-01	
D3:		-.126365E-01	.282119E-02	0.000000	.879827E-02	
D4:		-.120871E-01	-.463869E-01	0.000000	.501442E-01	
D5:		-.964987E-03	-.784889E-02	0.000000	-.339891E-01	
3	0.3000	0.138042	0.354569	0.000000	0.421554	
D1:		.284846E-01	-.553056E-01	0.000000	.222232E-01	
D2:		.760792E-02	.340909E-01	0.000000	-.363245E-01	
D3:		-.140172E-01	.411880E-02	0.000000	.802252E-02	
D4:		-.134105E-01	-.404901E-01	0.000000	.410012E-01	
D5:		-.309642E-02	-.184010E-01	0.000000	-.570922E-01	
4	0.4000	0.122330	0.322826	0.000000	0.426396	
D1:		.234133E-01	-.493526E-01	0.000000	.192571E-01	
D2:		.104658E-01	.390528E-01	0.000000	-.402682E-01	
D3:		-.133205E-01	.439379E-02	0.000000	.633318E-02	
D4:		-.129696E-01	-.365145E-01	0.000000	.329102E-01	
D5:		-.628552E-02	-.307158E-01	0.000000	-.774475E-01	
5	0.5000	0.111311	0.303675	0.000000	0.414422	
D1:		.207740E-01	-.452767E-01	0.000000	.160589E-01	
D2:		.122281E-01	.409338E-01	0.000000	-.398785E-01	
D3:		-.122034E-01	.407824E-02	0.000000	.497075E-02	
D4:		-.122513E-01	-.345708E-01	0.000000	.272580E-01	
D5:		-.100445E-01	-.430896E-01	0.000000	-.947958E-01	
6	0.6000	0.103567	0.288464	0.000000	0.396795	
D1:		.192422E-01	-.426543E-01	0.000000	.134964E-01	
D2:		.131272E-01	.413151E-01	0.000000	-.372889E-01	
D3:		-.112448E-01	.357414E-02	0.000000	.406761E-02	
D4:		-.117061E-01	-.336567E-01	0.000000	.232819E-01	
D5:		-.139393E-01	-.546743E-01	0.000000	-0.109658	
7	0.7000	.975827E-01	0.274539	0.000000	0.377955	
D1:		.180976E-01	-.408005E-01	0.000000	.115399E-01	
D2:		.134882E-01	.410743E-01	0.000000	-.338489E-01	
D3:		-.105171E-01	.307853E-02	0.000000	.346107E-02	
D4:		-.113515E-01	-.331072E-01	0.000000	.202094E-01	
D5:		-.176918E-01	-.651625E-01	0.000000	-0.122527	
8	0.8000	.924703E-01	0.261292	0.000000	0.359459	

D1:		,170620E-01	-,392765E-01	0,000000	,997738E-02
D2:		,135583E-01	,406120E-01	0,000000	-,302517E-01
D3:		-,995249E-02	,265420E-02	0,000000	,299804E-02
D4:		-,111073E-01	-,326250E-01	0,000000	,175950E-01
D5:		-,211627E-01	-,745115E-01	0,000000	-0,133751
9	0,9000	,878279E-01	0,248585	0,000000	0,341749
D1:		,160701E-01	-,378922E-01	0,000000	,865423E-02
D2:		,134842E-01	,400635E-01	0,000000	-,267796E-01
D3:		-,948134E-02	,229483E-02	0,000000	,260599E-02
D4:		-,109110E-01	-,321227E-01	0,000000	,152557E-01
D5:		-,242982E-01	-,827742E-01	0,000000	-0,143531
10	1,0000	,835034E-01	0,236413	0,000000	0,324900
D1:		,151228E-01	-,365734E-01	0,000000	,747654E-02
D2:		,133409E-01	,394731E-01	0,000000	-,235331E-01
D3:		-,905844E-02	,198642E-02	0,000000	,224846E-02
D4:		-,107253E-01	-,315890E-01	0,000000	,131201E-01
D5:		-,270916E-01	-,900320E-01	0,000000	-0,152013
11	1,1000	,793419E-01	0,224847	0,000000	0,308948
D1:		,141848E-01	-,352844E-01	0,000000	,643151E-02
D2:		,131617E-01	,388582E-01	0,000000	-,205378E-01
D3:		-,867601E-02	,171267E-02	0,000000	,193125E-02
D4:		-,105498E-01	-,309968E-01	0,000000	,111385E-01
D5:		-,295581E-01	-,963705E-01	0,000000	-0,159321
12	1,2000	,754382E-01	0,213808	0,000000	0,293745
D1:		,133187E-01	-,340340E-01	0,000000	,545463E-02
D2:		,129632E-01	,382118E-01	0,000000	-,177804E-01
D3:		-,830413E-02	,146974E-02	0,000000	,162501E-02
D4:		-,103577E-01	-,303976E-01	0,000000	,932473E-02
D5:		-,317166E-01	-0,101862	0,000000	-0,165539
13	1,3000	,717708E-01	0,203281	0,000000	0,279276
D1:		,125217E-01	-,328276E-01	0,000000	,454576E-02
D2:		,127523E-01	,375340E-01	0,000000	-,152435E-01
D3:		-,794258E-02	,124895E-02	0,000000	,133616E-02
D4:		-,101530E-01	-,297971E-01	0,000000	,767213E-02
D5:		-,335914E-01	-0,106580	0,000000	-0,170759
14	1,4000	,682429E-01	0,193292	0,000000	0,265589
D1:		,117502E-01	-,316582E-01	0,000000	,373413E-02
D2:		,125308E-01	,368356E-01	0,000000	-,129151E-01
D3:		-,760618E-02	,104344E-02	0,000000	,108448E-02
D4:		-,995402E-02	-,291688E-01	0,000000	,615266E-02
D5:		-,352084E-01	-0,110597	0,000000	-0,175081
15	1,5000	,648363E-01	0,183814	0,000000	0,252558
D1:		,110024E-01	-,305087E-01	0,000000	,299861E-02
D2:		,122984E-01	,361181E-01	0,000000	-,107833E-01
D3:		-,728740E-02	,856573E-03	0,000000	,856878E-03
D4:		-,975316E-02	-,285096E-01	0,000000	,474761E-02
D5:		-,365822E-01	-0,113951	0,000000	-0,178556
16	1,6000	,617043E-01	0,174772	0,000000	0,240104
D1:		,103472E-01	-,294052E-01	0,000000	,228571E-02
D2:		,120613E-01	,353807E-01	0,000000	-,882960E-02
D3:		-,696426E-02	,691921E-03	0,000000	,623915E-03
D4:		-,952901E-02	-,278814E-01	0,000000	,348484E-02
D5:		-,377367E-01	-0,116713	0,000000	-0,181272

17	1,7000	,586570E-01	0,166203	0,000000	0,228317
D1:		,969963E-02	-,283325E-01	0,000000	,166294E-02
D2:		,118171E-01	,346300E-01	0,000000	-,704170E-02
D3:		-,666688E-02	,536254E-03	0,000000	,429279E-03
D4:		-,931645E-02	-,272239E-01	0,000000	,232328E-02
D5:		-,386906E-01	-0,118931	0,000000	-0,183294
18	1,8000	,558047E-01	0,158018	0,000000	0,217061
D1:		,911165E-02	-,272968E-01	0,000000	,107791E-02
D2:		,115674E-01	,338641E-01	0,000000	-,540742E-02
D3:		-,637381E-02	,397335E-03	0,000000	,240953E-03
D4:		-,909257E-02	-,265782E-01	0,000000	,127665E-02
D5:		-,394563E-01	-0,120640	0,000000	-0,184664
19	1,9000	,530184E-01	0,150269	0,000000	0,206435
D1:		,852366E-02	-,262920E-01	0,000000	,578846E-03
D2:		,113132E-01	,330930E-01	0,000000	-,391666E-02
D3:		-,610757E-02	,264964E-03	0,000000	,907004E-04
D4:		-,888416E-02	-,259061E-01	0,000000	,314822E-03
D5:		-,400565E-01	-0,121902	0,000000	-0,185470
20	2,0000	,504280E-01	0,142865	0,000000	0,196273
D1:		,799859E-02	-,253243E-01	0,000000	,103590E-03
D2:		,110561E-01	,323112E-01	0,000000	-,255777E-02
D3:		-,584179E-02	,147919E-03	0,000000	-,591443E-04
D4:		-,866283E-02	-,252552E-01	0,000000	-,543379E-03
D5:		-,404991E-01	-0,122739	0,000000	-0,185735
21	2,1000	,479241E-01	0,135840	0,000000	0,186642
D1:		,748640E-02	-,243854E-01	0,000000	-,310146E-03
D2:		,107966E-01	,315271E-01	0,000000	-,132329E-02
D3:		-,559424E-02	,388092E-04	0,000000	-,184180E-03
D4:		-,844949E-02	-,245921E-01	0,000000	-,132492E-02
D5:		-,408017E-01	-0,123200	0,000000	-0,185527
22	2,2000	,455891E-01	0,129160	0,000000	0,177462
D1:		,702456E-02	-,234809E-01	0,000000	-,701637E-03
D2:		,105372E-01	,307440E-01	0,000000	-,204654E-03
D3:		-,534972E-02	-,563720E-04	0,000000	-,308540E-03
D4:		-,822817E-02	-,239487E-01	0,000000	-,202219E-02
D5:		-,409790E-01	-0,123327	0,000000	-0,184903
23	2,3000	,433186E-01	0,122822	0,000000	0,168747
D1:		,656850E-02	-,225979E-01	0,000000	-,103916E-02
D2:		,102757E-01	,299625E-01	0,000000	,805071E-03
D3:		-,512205E-02	-,143683E-03	0,000000	-,411818E-03
D4:		-,801471E-02	-,232907E-01	0,000000	-,265857E-02
D5:		-,410378E-01	-0,123135	0,000000	-0,183881
24	2,4000	,412119E-01	0,116784	0,000000	0,160451
D1:		,616196E-02	-,217538E-01	0,000000	-,135697E-02
D2:		,100162E-01	,291841E-01	0,000000	,171791E-02
D3:		-,489760E-02	-,220581E-03	0,000000	-,513050E-03
D4:		-,779593E-02	-,226585E-01	0,000000	-,321710E-02
D5:		-,409958E-01	-0,122677	0,000000	-0,182530
25	2,5000	,391637E-01	0,111067	0,000000	0,152589
D1:		,575946E-02	-,209318E-01	0,000000	-,162718E-02
D2:		,975693E-02	,284130E-01	0,000000	,253723E-02

D3:	-.458923E-02	-.291065E-03	0.000000	-.595290E-03	
D4:	-.758617E-02	-.220166E-01	0.000000	-.372507E-02	
D5:	-.408599E-01	-0.121969	0.000000	-0.180874	
26	2.6000	.372822E-01	0.105573	0.000000	0.145049
D1:	.541353E-02	-.201464E-01	0.000000	-.188859E-02	
D2:	.949849E-02	.276367E-01	0.000000	.327555E-02	
D3:	-.447869E-02	-.352575E-03	0.000000	-.679865E-03	
D4:	-.736646E-02	-.214055E-01	0.000000	-.415630E-02	
D5:	-.406305E-01	-0.121013	0.000000	-0.178903	
27	2.7000	.354193E-01	0.100388	0.000000	0.137963
D1:	.505231E-02	-.193849E-01	0.000000	-.208867E-02	
D2:	.924150E-02	.268746E-01	0.000000	.393501E-02	
D3:	-.429203E-02	-.412200E-03	0.000000	-.735184E-03	
D4:	-.716631E-02	-.207774E-01	0.000000	-.455078E-02	
D5:	-.403315E-01	-0.119873	0.000000	-0.176715	
28	2.8000	.336811E-01	.954646E-01	0.000000	0.131189
D1:	.472837E-02	-.186470E-01	0.000000	-.228378E-02	
D2:	.898799E-02	.261232E-01	0.000000	.451921E-02	
D3:	-.410537E-02	-.460663E-03	0.000000	-.796394E-03	
D4:	-.695933E-02	-.201696E-01	0.000000	-.489536E-02	
D5:	-.399648E-01	-0.118557	0.000000	-0.174319	
29	2.9000	.320297E-01	.907884E-01	0.000000	0.124733
D1:	.442610E-02	-.179327E-01	0.000000	-.245883E-02	
D2:	.873756E-02	.253805E-01	0.000000	.503568E-02	
D3:	-.392479E-02	-.502821E-03	0.000000	-.852300E-03	
D4:	-.675330E-02	-.195719E-01	0.000000	-.519583E-02	
D5:	-.395358E-01	-0.117079	0.000000	-0.171729	
30	3.0000	.304417E-01	.863199E-01	0.000000	0.118608
D1:	.413363E-02	-.172447E-01	0.000000	-.259880E-02	
D2:	.848787E-02	.246437E-01	0.000000	.549187E-02	
D3:	-.375657E-02	-.541948E-03	0.000000	-.892938E-03	
D4:	-.655554E-02	-.189772E-01	0.000000	-.545383E-02	
D5:	-.390482E-01	-0.115446	0.000000	-0.168951	
31	3.1000	.289597E-01	.820640E-01	0.000000	0.112778
D1:	.387130E-02	-.165869E-01	0.000000	-.272650E-02	
D2:	.824272E-02	.239174E-01	0.000000	.589326E-02	
D3:	-.359215E-02	-.575864E-03	0.000000	-.931353E-03	
D4:	-.635779E-02	-.184045E-01	0.000000	-.566741E-02	
D5:	-.385154E-01	-0.113698	0.000000	-0.166040	
32	3.2000	.275224E-01	.780415E-01	0.000000	0.107245
D1:	.361241E-02	-.159453E-01	0.000000	-.283026E-02	
D2:	.800113E-02	.232068E-01	0.000000	.623904E-02	
D3:	-.343767E-02	-.604694E-03	0.000000	-.961610E-03	
D4:	-.616642E-02	-.178321E-01	0.000000	-.585599E-02	
D5:	-.379417E-01	-0.111846	0.000000	-0.163014	
33	3.3000	.262099E-01	.741898E-01	0.000000	0.101945
D1:	.339493E-02	-.153332E-01	0.000000	-.293627E-02	
D2:	.776451E-02	.225042E-01	0.000000	.653821E-02	
D3:	-.328089E-02	-.627417E-03	0.000000	-.997571E-03	
D4:	-.596912E-02	-.172907E-01	0.000000	-.599983E-02	
D5:	-.373296E-01	-0.109898	0.000000	-0.159877	
34	3.4000	.249289E-01	.705439E-01	0.000000	.969265E-01

D1:		.317509E-02	-.147383E-01	0.000000	-.301407E-02
D2:		.753060E-02	.218169E-01	0.000000	.679193E-02
D3:		-.313637E-02	-.647047E-03	0.000000	-.102175E-02
D4:		-.578160E-02	-.167477E-01	0.000000	-.612292E-02
D5:		-.366865E-01	-0.107871	0.000000	-0.156656
35	3.5000	.236595E-01	.671046E-01	0.000000	.921983E-01
D1:		.294462E-02	-.141605E-01	0.000000	-.305795E-02
D2:		.730076E-02	.211470E-01	0.000000	.700444E-02
D3:		-.300694E-02	-.666089E-03	0.000000	-.102941E-02
D4:		-.560795E-02	-.161992E-01	0.000000	-.623094E-02
D5:		-.360204E-01	-0.105789	0.000000	-0.153383
36	3.6000	.225022E-01	.637882E-01	0.000000	.876660E-01
D1:		.275193E-02	-.136117E-01	0.000000	-.310321E-02
D2:		.707503E-02	.204826E-01	0.000000	.718178E-02
D3:		-.287570E-02	-.681092E-03	0.000000	-.104079E-02
D4:		-.542990E-02	-.156805E-01	0.000000	-.629837E-02
D5:		-.353248E-01	-0.103633	0.000000	-0.150024
37	3.7000	.214140E-01	.606548E-01	0.000000	.833372E-01
D1:		.257720E-02	-.130789E-01	0.000000	-.314852E-02
D2:		.685514E-02	.198360E-01	0.000000	.732254E-02
D3:		-.274579E-02	-.690066E-03	0.000000	-.105671E-02
D4:		-.525085E-02	-.151779E-01	0.000000	-.634692E-02
D5:		-.346131E-01	-0.101442	0.000000	-0.146638
38	3.8000	.203509E-01	.576911E-01	0.000000	.792456E-01
D1:		.239927E-02	-.125622E-01	0.000000	-.317204E-02
D2:		.663923E-02	.192070E-01	0.000000	.743136E-02
D3:		-.262661E-02	-.697123E-03	0.000000	-.106318E-02
D4:		-.508148E-02	-.146769E-01	0.000000	-.638292E-02
D5:		-.338886E-01	-.992219E-01	0.000000	-0.143234
39	3.9000	.193166E-01	.548639E-01	0.000000	.753862E-01
D1:		.222140E-02	-.120678E-01	0.000000	-.317016E-02
D2:		.642742E-02	.185899E-01	0.000000	.751399E-02
D3:		-.251852E-02	-.705722E-03	0.000000	-.105579E-02
D4:		-.492319E-02	-.141812E-01	0.000000	-.640031E-02
D5:		-.331515E-01	-.969738E-01	0.000000	-0.139807
40	4.0000	.184021E-01	.521210E-01	0.000000	.716576E-01
D1:		.208797E-02	-.116010E-01	0.000000	-.318103E-02
D2:		.621989E-02	.179759E-01	0.000000	.757290E-02
D3:		-.240402E-02	-.710410E-03	0.000000	-.105771E-02
D4:		-.475650E-02	-.137216E-01	0.000000	-.637972E-02
D5:		-.323950E-01	-.946798E-01	0.000000	-0.136326
41	4.1000	.175097E-01	.495858E-01	0.000000	.681272E-01
D1:		.195032E-02	-.111383E-01	0.000000	-.319079E-02
D2:		.601988E-02	.173944E-01	0.000000	.760246E-02
D3:		-.229495E-02	-.707774E-03	0.000000	-.106456E-02
D4:		-.459401E-02	-.132655E-01	0.000000	-.636628E-02
D5:		-.316474E-01	-.924195E-01	0.000000	-0.132919
42	4.2000	.166308E-01	.471395E-01	0.000000	.647794E-01
D1:		.180955E-02	-.106953E-01	0.000000	-.317127E-02
D2:		.582101E-02	.168151E-01	0.000000	.761256E-02
D3:		-.219710E-02	-.708846E-03	0.000000	-.105400E-02
D4:		-.444290E-02	-.128095E-01	0.000000	-.633316E-02

D5: -.308818E-01 -.901128E-01 0.000000 -0.129456

43 4.3000 .158053E-01 .448327E-01 0.000000 .616019E-01

D1: .168082E-02 -.102690E-01 0.000000 -.315261E-02
D2: .562898E-02 .162568E-01 0.000000 .760350E-02
D3: -.210180E-02 -.706482E-03 0.000000 -.104644E-02
D4: -.429409E-02 -.123708E-01 0.000000 -.629131E-02
D5: -.301233E-01 -.878341E-01 0.000000 -0.126049

44 4.4000 .150441E-01 .426324E-01 0.000000 .585688E-01

D1: .157178E-02 -.986309E-02 0.000000 -.313610E-02
D2: .544314E-02 .157114E-01 0.000000 .757874E-02
D3: -.200684E-02 -.702724E-03 0.000000 -.104101E-02
D4: -.414565E-02 -.119538E-01 0.000000 -.623265E-02
D5: -.293661E-01 -.855671E-01 0.000000 -0.122670

45 4.5000 .143090E-01 .405324E-01 0.000000 .556848E-01

D1: .146395E-02 -.946903E-02 0.000000 -.310943E-02
D2: .526008E-02 .151796E-01 0.000000 .753589E-02
D3: -.191785E-02 -.696820E-03 0.000000 -.103210E-02
D4: -.400254E-02 -.115420E-01 0.000000 -.616626E-02
D5: -.286061E-01 -.832963E-01 0.000000 -0.119300

46 4.6000 .135835E-01 .385360E-01 0.000000 .529586E-01

D1: .135196E-02 -.908962E-02 0.000000 -.306501E-02
D2: .508108E-02 .146590E-01 0.000000 .747970E-02
D3: -.183740E-02 -.692956E-03 0.000000 -.101279E-02
D4: -.386883E-02 -.111330E-01 0.000000 -.609272E-02
D5: -.278467E-01 -.810326E-01 0.000000 -0.115950

47 4.7000 .129210E-01 .366314E-01 0.000000 .503661E-01

D1: .128760E-02 -.872916E-02 0.000000 -.302551E-02
D2: .490793E-02 .141555E-01 0.000000 .741247E-02
D3: -.175747E-02 -.686383E-03 0.000000 -.997966E-03
D4: -.373578E-02 -.107462E-01 0.000000 -.600794E-02
D5: -.270981E-01 -.788054E-01 0.000000 -0.112662

48 4.8000 .122765E-01 .348544E-01 0.000000 .478830E-01

D1: .116387E-02 -.837191E-02 0.000000 -.298865E-02
D2: .474008E-02 .136710E-01 0.000000 .732931E-02
D3: -.167933E-02 -.675722E-03 0.000000 -.987535E-03
D4: -.360402E-02 -.103643E-01 0.000000 -.592692E-02
D5: -.263568E-01 -.766050E-01 0.000000 -0.109427

49 4.9000 .116688E-01 .331478E-01 0.000000 .455392E-01

D1: .107772E-02 -.803534E-02 0.000000 -.294274E-02
D2: .457697E-02 .131978E-01 0.000000 .723984E-02
D3: -.160644E-02 -.666917E-03 0.000000 -.971184E-03
D4: -.347881E-02 -.999717E-02 0.000000 -.583429E-02
D5: -.256243E-01 -.744342E-01 0.000000 -0.106240

50 5.0000 .111167E-01 .315067E-01 0.000000 .432903E-01

D1: .101017E-02 -.771612E-02 0.000000 -.290149E-02
D2: .441881E-02 .127333E-01 0.000000 .714277E-02
D3: -.153254E-02 -.657572E-03 0.000000 -.957564E-03
D4: -.335297E-02 -.965044E-02 0.000000 -.572787E-02
D5: -.248967E-01 -.722829E-01 0.000000 -0.103087

51 5.1000 .105817E-01 .299516E-01 0.000000 .411454E-01

D1: .941813E-03 -.740238E-02 0.000000 -.285791E-02

D2:		.426366E-02	.122847E-01	0.000000	.703368E-02
D3:		-.146225E-02	-.644861E-03	0.000000	-.945311E-03
D4:		-.323028E-02	-.930766E-02	0.000000	-.562270E-02
D5:		-.241754E-01	-.701527E-01	0.000000	-.999756E-01
52	5.2000	.100340E-01	.284812E-01	0.000000	.391480E-01
D1:		.860303E-03	-.710319E-02	0.000000	-.279147E-02
D2:		.411306E-02	.118486E-01	0.000000	.692152E-02
D3:		-.140336E-02	-.637065E-03	0.000000	-.917935E-03
D4:		-.312144E-02	-.896417E-02	0.000000	-.551786E-02
D5:		-.234678E-01	-.680649E-01	0.000000	-.969297E-01
53	5.3000	.954882E-02	.270947E-01	0.000000	.372153E-01
D1:		.800106E-03	-.681346E-02	0.000000	-.274562E-02
D2:		.396888E-02	.114303E-01	0.000000	.680169E-02
D3:		-.133890E-02	-.623841E-03	0.000000	-.904931E-03
D4:		-.300668E-02	-.864387E-02	0.000000	-.540980E-02
D5:		-.227759E-01	-.660276E-01	0.000000	-.939649E-01
54	5.4000	.911095E-02	.257455E-01	0.000000	.353804E-01
D1:		.753985E-03	-.654399E-02	0.000000	-.269786E-02
D2:		.382866E-02	.110198E-01	0.000000	.668052E-02
D3:		-.127636E-02	-.612000E-03	0.000000	-.889933E-03
D4:		-.289500E-02	-.834256E-02	0.000000	-.528853E-02
D5:		-.220939E-01	-.640221E-01	0.000000	-.910474E-01
55	5.5000	.863804E-02	.244920E-01	0.000000	.336440E-01
D1:		.687084E-03	-.627217E-02	0.000000	-.263468E-02
D2:		.369108E-02	.106233E-01	0.000000	.654951E-02
D3:		-.122249E-02	-.600277E-03	0.000000	-.867133E-03
D4:		-.279254E-02	-.802862E-02	0.000000	-.517925E-02
D5:		-.214184E-01	-.620372E-01	0.000000	-.881698E-01
56	5.6000	.823982E-02	.232683E-01	0.000000	.319788E-01
D1:		.646410E-03	-.602082E-02	0.000000	-.258400E-02
D2:		.355833E-02	.102368E-01	0.000000	.641833E-02
D3:		-.116513E-02	-.587005E-03	0.000000	-.851746E-03
D4:		-.268720E-02	-.774349E-02	0.000000	-.505546E-02
D5:		-.207571E-01	-.600968E-01	0.000000	-.853579E-01
57	5.7000	.780582E-02	.221398E-01	0.000000	.304312E-01
D1:		.582987E-03	-.577199E-02	0.000000	-.251505E-02
D2:		.342960E-02	.986824E-02	0.000000	.628340E-02
D3:		-.111864E-02	-.575547E-03	0.000000	-.825866E-03
D4:		-.259450E-02	-.744870E-02	0.000000	-.494574E-02
D5:		-.201142E-01	-.582107E-01	0.000000	-.826317E-01
58	5.8000	.742675E-02	.210450E-01	0.000000	.289476E-01
D1:		.539110E-03	-.554077E-02	0.000000	-.245394E-02
D2:		.330569E-02	.950749E-02	0.000000	.614938E-02
D3:		-.107011E-02	-.564356E-03	0.000000	-.803703E-03
D4:		-.250083E-02	-.717673E-02	0.000000	-.482465E-02
D5:		-.194844E-01	-.563659E-01	0.000000	-.799649E-01
59	5.9000	.708599E-02	.200079E-01	0.000000	.274953E-01
D1:		.508237E-03	-.531159E-02	0.000000	-.240894E-02
D2:		.318536E-02	.915913E-02	0.000000	.600788E-02
D3:		-.101699E-02	-.547917E-03	0.000000	-.793534E-03
D4:		-.240168E-02	-.691755E-02	0.000000	-.470388E-02
D5:		-.188625E-01	-.545470E-01	0.000000	-.773430E-01

60	0,0000	,670393E-02	,190434E-01	0,000000	,261542E-01

D1:	,453530E-03	-,508726E-02	0,000000	-,234016E-02
D2:	,306807E-02	,882307E-02	0,000000	,586569E-02
D3:	-,975965E-03	-,535752E-03	0,000000	-,768268E-03
D4:	-,231686E-02	-,664737E-02	0,000000	-,459353E-02
D5:	-,182554E-01	-,527719E-01	0,000000	-,747880E-01

SZDV Nyomda 78.2462 2

WARD 1.SZ. TESZT-PELDAJA (NEMDEROGATORIUS DEFEKTIV MATRIX)

NT= 1 TŌ= 1.0 H= 0.0000 NB= 0

N= 3 (3F3.0)

$$\begin{pmatrix} 4. & 2. & 0. \\ 1. & 4. & 1. \\ 1. & 1. & 4. \end{pmatrix} = A$$

A /1	A /2	A /3
4.00000	2.00000	0.000000
1.00000	4.00000	1.00000
1.00000	1.00000	4.00000

B /1	B /2	B /3
[1.00000 ,	0.000000 ,	0.000000] = $\underline{b}^T = \underline{e}_1^T$

P /1	P /2	
18.0000	-9.00000	← vektor-minimálpolinom együtthatói

IT	TIME	X1	X2	X3	X
1	1.0000	[147.863 ,	127.778 ,	127.778]^T = $e^A \underline{e}_1$	

MMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMM

B /1	B /2	B /3	
[0.000000 ,	1.00000 ,	0.000000]	$^T = \underline{b} = \underline{e}_2$

WWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWW

MMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMMM

P /1	P /2	P /3	
-54.0000	45.0000	-12.0000	← vektor-minimálpolinom együtthatói

WWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWWW

IT	TIME	X1	X2	X3	X
1	1.0000	[183.761 ,	183.760 ,	163.677] $^T = e^A \underline{e}_2$	

```
  B     /1        B     /2        B     /3
 ------          ------          ------
[0.000000 ,      0.000000 ,      1.00000]^T = b = e_3
```

```
  P     /1        P     /2        P     /3
 ------          ------          ------
-54.0000         45.0000         -12.0000   <- vektor-minimálpolinom együtthatói
```

```
 IT       TIME          X1              X2              X3              X
-------------------------------------------------------------------------------
  1      1.0000 [71.7957 ,       91.8807 ,       111.964]^T = e^A e_3
```

```
  P(A) /1        P(A) /2        P(A) /3
 ------          ------          ------
-54.0000         45.0000         -12.0000   <- mátrix-minimálpolinom együtthatói
```

SZDV Nyomda 78.2462

WARD 3.SZ. TESZT-PELDAJA

NT= 1 TŌ= 1.0 H= 0.0000 NB= 0

N= 3 (3F5.0)

$$\begin{pmatrix} 131. & 19. & 18. \\ 390. & 56. & 54. \\ 387. & 57. & 52. \end{pmatrix} = A$$

A /1	A /2	A /3
-131.000	19.0000	18.0000
-390.000	56.0000	54.0000
-387.000	57.0000	52.0000

B /1	B /2	B /3
[1.00000 ,	0.000000 ,	0.000000] $= \underline{b}^T = \underline{e}_1^T$

P /1	P /2	P /3	
40.0000	62.0000	23.0000	→ vektor-minimálpolinom együtthatói

IT	TIME	X1	X2	X3	X
1	1.0000	[-1.50959 ,	-5.63237 ,	-4.93477]$^T = e^A \underline{e}_1$	

B /1	B /2	B /3
0.000000	1.00000	0.000000

$[0.000000, 1.00000, 0.000000]^T = \underline{b} = \underline{e}_2$

P /1	P /2
20.0000	21.0000

← vektor-minimálpolinom együtthatói

IT	TIME	X1	X2	X3	X
1	1.0000	[0.367865,	1.47146,	1.10359]^T	$= e^A \underline{e}_2$