55807

2289

MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
SZÁMÍTÁSTECHNIKAI KÖZPONTJA

KÖZLEMÉNYEK

1.

1966. szeptember

Szeged

MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA

Számitástechnikai Központja

K Ö Z L E M É N Y E K

1.

Budapest, 1966.

szeptember

Szerkesztő:

Szelezsán János

Technikai szerkesztő:
Hartmann Katalin

Felelős kiadó:

dr. Frey Tamás igazgató

MTA Számitástechnikai Központ

Budapest, I., Uri u. 49.

Numerikus vezérlésü szerszámgépek programozása számológéppel.

Tankó József

Az Egyesült Államokban mintegy 15, Nyugat-Európában mintegy 10, de világszerte több év óta mind szélesebb körben használják a numerikus /számjegyes, digitális/ vezérlésü szerszámgépeket a hagyományos szerszámgépek helyett ill. mellett. Ezeket a számológépekhez hasonlóan programozni kell és a programozás könnyitésére kezdettől fogva alkalmaznak elektronikus számológépeket is. Hazánkban most kezdődik a numerikus vezérlésü szerszámgépek fejlesztése és gyártása és igy felmerült ezek számológép segitségével történő programozásának problémája is. Ez teszi aktuálissá és indokolttá azt a munkát, amelyet az Intézet a Villamos Automatika Intézet megbizásából végzett és végez ezen a területen. Az első tevékenység egy tanulmány - "Tanulmány a numerikus vezérlésü szerszámgépek automatikus programozásáról". Összeállitotta: Tankó József, Fabók Julianna, Szelezsán János. MTA Számitástechnikai Központja, Budapest, 1966. /Kézirat/ - elkészitése volt a probléma lényegéről, a világon e területen eddig elért eredményekről. A jelen ismertető ennek a tanulmánynak egyes részleteiről és az ott bővebben kifejtett problémákról nyujt vázlatos képet.

Bevezetés.

A modern technika napjaink gyors ütemü fejlődésében majdnem egy időre esik az elektronikus számológépek /továbbiakban: ESz/ fejlődésének megindulásával, a numerikus vezérlésü szerszámgépek /továbbiakban: NSz/ fejlődésének megindulása. Eltekintve attól, hogy mindkét ág csirái már korábban és különböző időben megjelentek, az ugrásszerü fejlődés nem véletlenül kezdődött el mintegy 10-15 éve. Az elektronika és kibernetika fejlődése ekkor teremtette meg fejlődésük feltételeit.

Az ESz és NSz egyaránt önszabályozó, programozható elektronikus és többé-kevésbé mechanikai rendszer. Az ESz-nél az elektronikus központi berendezés /az u.n. aritmetikai egység, vezérlő egység és memória együttesen/ a funkcionális fő rész, amelyet a többi, periferiális berendezések kiszolgálnak; A NSz-nél a fő funkcionális rész számológépi felfogásban egy speciális periferiális berendezés, a szorosan vett szerszámgép és az elektronikus vezérlő berendezés ennek "kiszolgálására" hivatott. Hasonlattal élve a NSz-nél az "agy" kevésbé fejlett, mint az ESz-nél, ellenben egyik "szerve" a speciális feladatnak megfelelően magas fejlettségü. Ennek egy fontos következménye a magasabb igényü és racionálisabb gyakorlati használatnál kerül felszinre. A programozás automatizálása az ESz-nél megoldható saját szervezésen belül /"programozó program" konstruálása/, a NSz-nél azonban a programozás automatizálásához munkába kell vonni az univerzális ESz-et is. Az a megoldás, hogy ehelyett fejlesszék ki a NSz "agyát" is ugy, hogy egy univerzális ESz feleslegessé váljék,nem bizonyult ésszerünek és gazdaságosnak. Jóllehet a korszerü, nagy teljesitményü NSz programozásához szükség van ESz-re, ugyanakkor azonban ez az ESz sok NSz-et tud egyszerre kiszolgálni és emellett számtalan egyéb feladatok megoldására használható, igy használata gazdaságossá tehető.

A NSz-eket a mind bonyolultabb és pontosabb megmunkálást igénylő, nagyrészt kis szériákban gyártott alkatrészek készitésének szükséglete hivta életre. A NSz-ek számológéppel történő programozását pedig az, hogy az adatelőkészités és programozás bizonyos határon tul történő megvalósitása számológép nélkül nem gazdaságos, sokszor lehetetlen. A számológéppel történő programozás racionalizálására és tökéletesitésére való törekvés azután létrehozta a különféle automatikus programozó rendszereket és szimbólikus programozó nyelveket.

A következőben a numerikus vezérlésü szerszámgépek számológépekkel történő programozásával kapcsolatos alapkérdéseket érintjük, és áttekintést adunk a programozó rendszerek osztályozási szempontjairól, a rendszerek kialakulásáról és a jelenleg használt rendszerekről.

A NSz-ek programozása.

A NSz-eket mint már a bevezetőben emlitettük, az ESz-ekhez hasonlóan programozni kell. Ez azt jelenti, hogy előirt formában lépésről-lépésre közölni kell a szerszámgép vezérlő berendezésével, hogy mit csináljon a szerszámgép egy adott munkadarab elkészitése céljából. A közlés kódolt információk alakjában valamilyen információhordozó felhasználásával történik /pl. lyukszalag, lyukkártyaköteg, vagy mágnesszalag/. Az információk megfelelő formában és sorrendben a munkadarab programját képezik és ennek elkészitése a munkadarab-programozás.

Tartalmilag a programnak mindenképpen magában kell foglalnia a munkadarab megmunkálandó részeinek egyértelmü geometriai megadását, a megmunkálás sorrendjének és módjának ugyancsak egyértelmü meghatározását, valamint a szerszámgép müködéséhez szükséges funkciók müködtetésének ütemezését.

Nem kivánunk itt foglalkozni egyáltalán a szerszámgépek utasitásrendszereivel /programozó nyelveivel/ a kódrendszerekkel és információhordozókkal. Ezek ugyanis nem lényegbevágóan érintik a számológéppel történő programozás problémáját.

Nem közömbös azonban problémánk szempontjából az a kérdés, hogy a szerszámgép vezérlő rendszere milyen részletes, vagy kevésbé részletes információkat fogad el a szerszám mozgás pályájára vonatkozóan.

Ez érthetővé válik, ha figyelembe vesszük a következőket: A szerszámgépen a szerszám helyváltoztatása az egyes koordinátairányokba elmozditó szervomotorok segitségével történik, az u.n. szánokon. A NSz-eknél a motorok impulzusok hatására meghatározott egységekkel mozgatják el a szerszámot a megfelelő szánok mentén. Ilymódon egy görbe kontur, vagy felület menti mozgatásnál két, vagy több szán menti összehangolt mozgatásra van szükség, amelyhez a motoroknak időben megfelelően ütemezett vezérlő impulzusok tömegét kell kapniuk. Mármost a vezérlőberendezés és programozás szempontjából a következőket lehet megállapitani:

a./ Elképzelhetetlen ezeknek az impulzussorozatoknak a közvetlen emberi programozása.

b./ Az impulzussorozat /nagy mennyisége miatt/ legfeljebb a legnagyobb információsürüségü mágnesszalagon közvetithető és tárolható.

c./ A fentiekből következően az impulzussorozatot automatikusan kell előállitani és célszerü külső információhordozó nélkül továbbitani közvetlenül a motorokhoz. Ez a szerszámgép elektronikus vezérlő berendezésének minimális feladata.

d./ Az egyes koordinátairányba mozgató impulzusok generálásának pillanatai között olyan függvénykapcsolatnak kell fennállnia, hogy az eredő szerszám-mozgás előirt türésen belül megfeleljen a munkadarab előirt konturjának. Lényegében tehát a munkadarab tervezett konturját lépcsős függvénnyel kell közeliteni. Ez történhet egy, vagy több lépésben a kontur jellegétől, valamint a technikai megoldástól függően.

e./ Ha ezt az egész feladatot a NSz vezérlőberendezésén kivül oldják meg és pl. mágnesszalagon közlik, akkor külső interpolátoros megoldásról beszélünk. Ha az interpolációból valamely lépést a vezérlő berendezés old meg, akkor ezt belső interpolálásnak nevezzük.

f./ A sokféle lehetséges fokozat ismertetésétől eltekintve csak azt emlitjük meg, hogy a gyakorlatban - főleg az ESz-ek gazdaságos alkalmazásának elérésére - a legáltalánosabb az a megoldás, amikor a görbéket egy külső interpolátor /az ESz pl./ egyenesszakaszokkal közeliti meg, és a belső interpolátor azután ezt dolgozza fel tovább. Az elektronikus vezérlőberendezés felé igy tömörebb információt kell továbbitani, melyhez nem okvetlen szükséges mágnesszalag, hanem pl. papirszalag vagy lyukkártya is alkalmazható /a mágnesszalag ugyanis az üzemi körülmények - por, légnedvesség, stb. - miatt kedvezőtlen/.

Az általános gyakorlatban a külső interpolátor szerepét a számológép tölti be, melynek tehát a görbéket egyenesszakaszok sorozatával kell közelitenie. A számológépet viszont programozni kell arra, hogy ezt a feladatot elvégezze.

Az egyenesszakaszokkal megközelitett görbe /vagy eleve csak egyenesszakaszok megmunkálását igénylő munkadarab/ esetén a geometriai adatok segitségével egy u.n. szerszámgépi programot kell összeállitani, amely utasitásokat tartalmaz egyéb szerszámgépi funkciókra és paraméterekre vonatkozóan is. Egyszerü esetben, vagy NSz hiányában ezt a programot lehet kézzel is összeállitani. Ezt nevezzük a NSz <u>kézi programozásának</u>. Rendszerint azonban ezt a munkát is az ESz-re bizzák /különösen akkor, ha a görbeközelitést is az ESz végzi/. Ezt nevezzük a NSz-ek <u>számológépi programozásának</u>.

Az NSz-ek számológéppel történő programozását automatikus programozásnak és szimbólikus programozásnak is nevezik. Ez a három kifejezés elvileg takarhatna három különböző eljárást. Ahelyett, hogy az ember esetleg sok ezer szerszámgépi utasitásból álló programot kézzel készitene el egy tervezett munkadarabhoz /kézi programozás/, a program készitéséhez elektronikus számológépet vesz igénybe /számológépes programozás/ de nem csupán a számolás megkönnyitésére segédeszközként, hanem ugy, hogy bizonyos, a munkadarabra és szerszámgépre vonatkozó minimális információ közlése után a számológép a programot automatikusan készitse el /automatikus programozás/. Ehhez természetesen a számológépre egy bonyolult programot kell késziteni, amely ezt a feladatot megoldja. Hogy az ember munkája még könnyebb legyen, a programozás könnyen megtanulható és megbizhatóbb legyen, a számológépi programot /amelyet szerszámgépprogramozó programnak nevezhetnénk/ ugy készitik, hogy a munkadarabra, szerszámgépre és a megmunkálás módjára vonatkozó nélkülözhetetlen információkat szimbólikus formában lehet felirni /szimbólikus programozás/ valamilyen szabályok szerint, az u.n. programozó nyelven.[x/]

A programozó nyelveknél - a szóbanforgó, szerszámgépprogramozásra szolgáló szimbólikus nyelvnél ugyanugy, mint bármely más célra alkalmas szimbólikus számológépi nyelvnél - az a törekvés, hogy az minél közelebb álljon a mindennapi emberi nyelvhez. Egy alapvető különbség azonban van: a programozó nyelvnek szigoruan egyértelmünek kell lennie. A hétköznapi nyelvhasználat ugyanis ezt a követelményt - még általában a tudományokban sem - nem teljesiti.

A szimbólikus programozó nyelvek másik közös sajátsága az a törekvés, hogy problémaorientáltak legyenek, ami azt jelenti, hogy a programozónak lényegében csak azt kell tudnia, hogy mi a programozandó feladat. Ne függjön a nyelv attól, hogy milyen számológépen, vagy milyen szerszámgépre használják. /Ne számológép, vagy esetünkben esetleg szerszámgéporientált legyen./

---

x/ A szerszámgép utasitásrendszerét is nevezik a NSz programozó nyelvének, amely analóg egy ESz gépi nyelvével. Az itt tárgyalt szimbólikus programozó nyelv nem tévesztendő össze ezzel.

Ez a törekvés általában nem valósitható meg teljes mértékben. Ahogyan a szimbólikus számológépprogramozó nyelvek /ALGOL, FORTRAN, COBOL, stb./ számológépprogramozásra valóban kész formái /gépi reprezentánsai/ bizonyos mértékben mindig függnek az adott számológépektől, ugyanugy a szimbólikus szerszámgépprogramozó nyelvek /APT, ADAPT, AUTOPROMT, AUTOSPOT, stb./ kis mértékben mindig függnek attól, milyen szerszámgépek tényleges programozására használják /sőt sok esetben az alkalmazott számológéptől is függhetnek minimálisan/. Általában a problémaorientált nyelv ezért egy alap "szókincset" és "nyelvtani", szintaktikus szabályokat tartalmaz. A szókincset és a szabályokat esetleg bőviteni kell ahhoz, hogy konkrét számológépen és szerszámgépre használható legyen. A nyelv ilyen repezentálásával együtt jár magának a számológépi programnak az elkészitése, amelyet a szimbólikus nyelv fordító programjának, vagy értelmező programnak is neveznek.

A programozó rendszerek osztályozásának alapja.

Mivel a szóbanforgó programozó rendszerek problémaorientáltak, kézenfekvő, hogy azokat a programozható problémák, nevezetesen a megmunkálandó munkadarabok alapján osztályozzák. A szerszámgépeken megmunkálásra kerülő munkadarabok /alkatrészek/ olyan osztályozása azonban, amely alapul szolgálhatna a programozó rendszerek osztályozásához, sajnos nem alakult ki. Éppen forditva, a programozó rendszerek osztályozásának és tervezésének szükséglete hivott életre egy bizonyos osztályzást a munkadarabokra vonatkozóan is. Mindkét osztályozás /a munkadaraboké és programozó rendszereké/ egyaránt a szerszámgépek osztályozására vezetett speciális szemszögből.

A programozó rendszerek osztályozásának alapja igy minden esetben a programozható szerszámgépek valamilyen szempontból való osztályozása. A gyakorlat megmutatta, hogy az osztályzást a szerszámfelület és a munkadarab relativ mozgatásának bonyolultsága szerint célszerü végezni. A relativ mozgás ellenőrzött és ütemezett módon történő végzését nevezzük a szerszám vezérlésének. Az ütemezett mód az időben történő ellenőrzést, szabályozást jelenti.

A programozó rendszerek osztályozásánál általában azt veszik alapul, hogy a szerszámnak milyen fajta vezérlését lehet a rendszerben programozni.

A megmunkálásnál lejátszódó mozgásokat általában két komponensre bontják: főmozgásra és mellékmozgásra. A főmozgás lehet haladó mozgás is, de rendszerint forgómozgás, amelyet végezhet a munkadarab /esztergálás/ vagy a szerszám /furás, marás/. Feladata a forgácsleválasztás. A mellékmozgás a megmunkálás, forgácsleválasztás helyének változtatását célozza és rendszerint haladó mozgás. Az előtolás az effektiv megmunkálás közbeni mellékmozgás. A szerszám és munkadarab relativ mozgását megmunkálás nélkül pozicionálásnak nevezzük. A mellékmozgás vezérlési szempontból a következő fajta lehet:

a./ Egy adott pontba eljuttatja a szerszámot a munkadarabhoz viszonyitva; a pályára, a sebességre és egyéb körülményekre nézve nem kell tekintettel lenni; ilyenek a pozicionálás, vagy a szerszám visszavonulása egy megmunkálás véghelyzetéből, asztalelforditás adott helyzetbe, stb.

b./ Egy tengely mentén egyenletes mozgás megadott szakaszon; az egyenletes sebesség nagyságának és irányának jelentősége van; ez a mozgás mindig megmunkálás közben történik, pl. egyenes körhenger szakasz esztergálása, előirt mélységü lyuk furása /egy menetben/ marás egy szán mozgása közben, egyenletes sebességü adott szögelfordulás megmunkálás közben /ha ilyen lehetséges/.

c./ Több tengely mentén egyidejü összehangolt /általában változó sebességü/ mozgás; a szerszám a munkadarabhoz viszonyitva meghatározott pályán mozog vezérelt sebességkomponensek mellett; ilyenek a tengelyekkel derékszögtől eltérő szöget bezáró egyenes menti /pl. egyenletes/ mozgás, sikbeli, vagy térbeli görbe mentén történő mozgás.

A programozó rendszereket és vezérlési szempontból a szerszámgépeket aszerint lehet csoportositani, hogy hány tengely mentén és milyen b/ vagy c/ tipusu mozgás lehetséges. Az osztályzást az a/ tipusu mozgások nem érintik /mivel azokat automatikusan vezérli a szerszámgép /szervomechanizmusa//.

A szerszámgépek szokásos osztályozása, melyet legtöbbször alapul vesznek programozó rendszerek osztályozásához a következő:

Pontvezérlésü szerszámgép, ami azt jelenti, hogy csak egy, a szerszámtengely menti b/ tipusu mozgás lehetséges; szakaszvezérlésü szerszámgépnél legalább egy, a szerszámtengelyre merőleges tengely mentén lehetséges b/ tipusu vezérlés, a folyamatos pályavezérlésnél pedig legalább két tengely /dimenzió/ viszonylatában lehetséges c/ tipusu vezérlést megvalósitani. A pont-szakaszvezérlésü szerszámgépnél értelemszerüen mind a pont, mind a szakaszvezérlés kritériuma is teljesül.

Ez az osztályozás azonban a számológépi programozás szempontjából nem eléggé részletes és nem a legcélszerübb.

A munkadarabok bonyolultságát, valamint megmunkálási müveletek sokféleségét és összetettségét, valamint a szerszám mozgás vezérlésének bonyolultságát nyilvánvalóan a mozgások b/ és c/ tipusán, ill. a pont-, szakasz-, vagy pályavezérlésen tulmenően lényegesen befolyásolja az, hogy mindezek a mozgások hány tengely mentén valósithatók meg. Geometriailag ez azt jelenti, hogy lényeges az is, a megmunkálás ill. vezérlés hány dimenziós és haladó, valamint forgó mozgások is lehetségesek-e?

A tengelyek száma szerint a szerszámgépeket többféle elv alapján osztályozzák. Általában egy mozgástengely értékelésébe a lehetséges mozgás a/, b/, c/ tipusát is belevonják, mert egyébként az osztályozás nem egyértelmü programozástechnikai szempontból. Egy szerszámgépen a mozgás két vagy három dimenzióban /2D ill. 3D mozgás ill. programozás/ történhet, azonban megint lényeges a mozgás minősége is. A szerszámgépek vezérlésében 2-3-4-5- tengelyü vezérlést különböztetnek meg. A 2 vagy 3 tengely a sikbeli vagy térbeli haladó mozgást teszi lehetővé /szánok/, mig a 4 és 5 tengelyek forgástengelyek, ha az asztal vagy orsó egy, vagy két tengely körül elfordulhat.

A programozó rendszerek osztályozása.

A szerszámgép vezérlések fenti osztályozási szempontjai alapján röviden ismertetjük a legismertebb programozó rendszereket felsorolva, hogy azok az egyes szempontok szerint milyen szerszámgépek vezérlésére alkalmasak.

AUTOPROPS /Automatic Programming of Positioning Systems/: kétdimenziós pont-vezérlésre alkalmas furó, vagy lyukasztógépeken táblázatos, numerikus információk alapján. Az IBM cég dolgozta ki az IBM 1401 ESz-re.

AUTOSPOT /Automatic System for Positioning Tools/: kétdimenziós pont-szakaszvezérlésre alkalmas, egyik legelterjedtebben használt szimbólikus programozó nyelv. Az IBM dolgozta ki az 1620-as ESz-re 1962-ben. Mintegy 60-70 szót és jelet használ a nyelv.

AUTOMAP /Automatic Programming/: kétdimenziós folyamatos pályavezérlésre és z-irányu pozicionálással alkalmas szimbólikus programozó nyelv. Az IBM 1620-ra dolgozták ki.

AUTOPROMT /Automatic Programming of Machine Tools/: háromdimenziós folyamatos pályavezérlésre alkalmas /5 tengelyig/

szimbólikus nyelv, amelyben egész felületi tartományok programozhatók egyetlen /vagy néhány/ "mondattal". Az IBM 7090 ESz-re, valamint más nagyteljesitményü számológépre készitették el. A szimbólikus nyelv 200-nál több szót használ és forditó programja mintegy 32000 számológépi utasitásból áll. Ez tekinthető jelenleg az APT mellett /l.alább/ a leguniverzálisabb és leggazdagabb nyelvnek.

APT /Automatically Programmed Tool/ rendszer: több fokozata van. Az APT I pontvezérlésre, az APT II háromdimenziós görbék szerinti megmunkálás programozására és az APT III háromdimenziós felületi tartományok szerinti programozásra szolgáló rendszer ill. szimbólikus nyelv. A rendszert 1958-ig dolgozták ki a cambridgei müszaki egyetem /Massachusetts Institute of Technology, Cambridge/ Szervomechanizmus Laboratóriumában /ma: Elektronikus Rendszerek Laboratóriuma/ az USA légierővel együttmüködve saját Whirwind I számológépre és később átkódolták az IBM 7090 és UNIVAC 1107 számológépekre is. A komplett APT rendszer 5 tengelyes folyamatos pályavezérlésü szerszámgépekre a legbonyolultabb alkatrészek /pl. repülőgéprészek/ programozására is kiválóan alkalmas /az AUTOPROMT mellett/ és állandó továbbfejlesztés alatt áll. A fejlesztés irányaira még visszatérünk.

ADAPT /Air Material Command Developed APT/ az APT II rendszer egyszerüsitett változata, amely kétdimenziós folyamatos pályavezérlésü gépek programozására alkalmas és közepes számológépeken is alkalmazható. Eredetileg az IBM 7090 ESz-re programozták, de később sok más számológépre is. Mintegy 85-90 szót és 10 egyéb jelet használ a nyelv /a számjegyeken kivül/.

A felsoroltakon kivül még mintegy 40 féle különböző programozó rendszer ismeretes, melyek nagyrészét az Egyesült Államokban, néhányat pedig más országokban dolgoztak ki. Ezek közül pont-szakaszvezérlés programozására megemlitjük még példaként a CAMP /Compiler for Automatic Machine Programming/ programot, melynek II fokozata az IBM 7090 gépekre 2-5 tengelyü pontvezérlésre alkalmas és az AUTOSPOT rugalmasabb változatának tekinthető és a PRONTO /Program for Numerical Tools/ programot, amely háromtengelyü pont-szakaszvezérléshez az IBM 704, GE 225 számológépekre kb. 50 szavas szótárral készült, Folyamatos pályavezérlésre készitették pl. a SYMPAC /Symbolic Programming for Automatic Controls/- Compiler rendszert a közepes UNIVAC UCT számológépekre és később az USS 80/90 gépre kétdimenziós vezérléshez. További ismertebb rendszerek még: WALDO, SPLIT, CLAM, stb.

A szimbólikus programozó rendszerek fejlődése.

Röviden felidézzük a NSz-ek és programozásuk fejlődését, különös tekintettel a szimbólikus programozó rendszerekre.

A szerszámgépek numerikus vezérlésének szükséglete és megvalósitásának lehetősége az 1950-es évek elején merült fel. A problémával az USA repülőgépiparában ill. a légierő megbizásából a Massachusetts Institute of Technology /M.I.T./ Szervomechanizmus Laboratóriumában kezdtek foglalkozni. A kutatási programot és munkát "Automatikusan Programozott Szerszám Rendszerek" /Automatically Programmed Tool (APT) System/ elnevezés alatt végezték. A munkába a repülőgépipar mintegy 20 legjelentősebb gyártó cége is belekapcsolódott és az 1958-ig elkészitett és széleskörüen kipróbált APT rendszer fejlesztésére mintegy 100 évnyi kutatói munkát és több mint 4 millió dollárt forditottak.[x/] Az APT rendszer volt az első numerikus vezérlésü szerszámgép automatikus /számológéppel történő/ programozásra szolgáló program-rendszer és rögtön a legbonyolultabb háromdimenziós

x/ R.A. Thomas: The languages of tape. American Machinist, Special Report No. 545. Jan. 6., 1964.

munkadarabok programozására, hiszen a gyakorlati követelmények ilyen rendszert kivántak. Az APT rendszer egyben cégek és intézmények egy csoportját is jelenti, amelyek közösen résztvesznek a rendszer fejlesztésében, valamint joguk van a rendszer használatához. Ez a társaság 1959-től a civil iparág képviselőivel bővült. Az APT alapelvei szerint, vagy attól tudatosan eltérve egyéb cégek és intézmények, főleg a nagy számológépgyártó cégek speciális igényeknek megfelelően más rendszereket fejlesztettek ki. Igy születtek az előző pontban felsorolt programozó rendszerek.

Az APT rendszer fejlesztése ma is folyik az Illinois Institute of Technology, Research Institute /IITRI/ védnöksége alatt, amely koordinálja a különféle erőfeszitéseket a rendszer speciális gyakorlati feladatkörökre való felhasználására és a rendszer általános fejlesztésére /melyre még visszatérünk/, valamint lehetőséget nyujt programozó szakemberek, segéderők képzésére, kisérletezésre, stb.

A NSz-ek és automatikus programozásuk fejlesztése az amerikai példa nyomán Európában és másutt a világon később indult meg, de körülbelül hasonló fejlődés figyelhető meg. Angliában 1953-től, a Szovjetunióban 1954-től, Csehszlovákiában 1956-tól, Nyugat-Németországban 1957-től foglalkoznak a problémával.x/ Hazánkban napjainkban merült fel a probléma kényszeritő szükségszerüségként. Nyugat-Európában - bár az USA-tól még mindig elmaradva - már széles körben alkalmaznak NSz-eket és programozásukra ESz-eket megfelelő programozó rendszerekkel, de a szocialista országokban széleskörü elterjedésről még nem beszélhetünk és az automatikus programozás igénye még csupán napjainkban merül fel. Az előrehaladás komoly akadálya a nem megfelelő ellátottság számológépekkel és az ebből következő felkészületlenség a programozás és programozó rendszerek területén.

---

x/ W.Simon: Der Entwicklungstand und die Zukunft numerisch gestenerter Werkzeugmaschinen in Deutschland. IBM Nachrichten, Febr. 1965.

Az APT koncepció.

A NSz-ek automatikus programozásának alapvető problémája, amelyet az M.I.T. az APT rendszer kifejlesztésének keretében megoldott a számos elkerülhetetlen részletprobléma mellett lényegében az ember /munkadarabtervező konstruktőr és programozó/, az elektronikus számológép és a numerikus vezérlésü szerszámgép szerves, racionális és hatékony egységbe foglalása "nyelvek" és számológépi programok segitségével.

Az ember szempontjából a probléma lényege az, hogy minél egyszerübben, minél természetesebbnek ható nyelven és minél több és bonyolultabb feladatot tudjon megfogalmazni és a korszerü gépgyártással járó munkák minél nagyobb hányadát tudja a gépekre automatikus végrehajtás céljából átháritani. Első fokozatban az M.I.T.-ben azt tüzték feladatul - és a gyakorlatban a mai napig ezt tudják általában biztositani -, hogy az ember a gyártással járó munkákból a müszaki terület nyelvéhez "hasonló" nyelven, a munkadarabok egyértelmü, pontos geometriai leirását és a legracionálisabb megmunkálási folyamat minimális technológiai utasitásokkal történő megadását vállalja, a többi feladatot a számológép és szerszámgép automatikusan végzi el /az ember-készitette program számológép számára "érthető" formában való "leirása", kódolás és információhordozóra való elhelyezés természetesen még emberi munkát is igényel, de ez elenyésző/. Egy fejlettebb fokozatban, amelyről később még beszélünk, még ennek a munkának egy részét is a számológépre lehet bizni.

A számológép szempontjából többféleképpen vetődik fel probléma. Az egyik az, hogy milyen számológépet alkalmazzunk, ill. milyen áll rendelkezésre? Speciális számológépet /külső interpolátor/ vagy univerzális számológépet? Nagy teljesitményü számológépünk van, vagy kisebb? Miként lehet adott számológépet az ember-számológép-szerszámgép együttesbe a kivánt funkcióval bekapcsolni? Ez a probléma természetesen nem választható el az embertől, ill. a szerszámgéptől. Az ember oldaláról nézve, a számológép memóriakapacitása és müködési sebessége korlátozza a szimbólikus nyelv rugalmasságát, egyszerüségét és az emberre háruló feladatok redukálását. A szerszámgép oldaláról nézve a szerszámgépen megmunkálható munkadarabok geometriai bonyolultsága, valamint a megmunkálási módok iránti igénye befolyásolja azt, hogy milyen számológépeket lehet a programozáshoz racionálisan alkalmazni.

A számológép nagyságán kivül programozhatósága az, amely kihat az ember tevékenységére. Ezt a kihatást azonban már nem a szóbanforgó ember-számológép-szerszámgép rendszerben tekintjük, mert ez a mindennapi gyakorlatban a munkadarab programozó munkáját közvetlenül nem befolyásolja. Ez a szerves hármas létrehozásának és müködése biztositásának munkájához, vagyis egy egyszeri előkészitéshez tartozik és ez volt az M.I.T. kutatóinak feladata, és ez ismétlődik ujra és ujra akkor, ha az ember-számológép-szerszámgép hármas utóbbi két tagjának valamelyike - sőt, az ember által használni kivánt programozó nyelv ugyszintén - megváltozik. Természetesen egy ilyen uj hármas kialakitásában már igen hatásosan felhasználhatók azok a tapasztalatok, melyek az APT és más rendszerek fejlesztésével kapcsolatban nyilvánosságra kerültek.

Az M.I.T.-ben az ember-számológép-szerszámgép hármas első és utolsó tagját különféle "tevékenységi szinteken" elképzelve a középső tagot /számológép/ igyekeztek egy konkrét univerzális számológéptől nagyrészt függetleniteni a következő módon: gondolatilag megalkottak egy APT számológépnek nevezett fiktiv számológépet, az összes alapvető egységgel, amellyel egy tényleges, anyagi számológép rendelkezik: bemenő-vezérlő-aritmetikai-memória-kimenő egységekkel. Mindezeknek az egységeknek megadták a funkcióit, müködésük kapcsolatát és algoritmusait ugy, hogy azok egy megfelelő univerzális számológépen szimulálhatók legyenek. Vagyis egy konkrét számológépem beprogramozva az egységek programjai együtt egy "szimulációs számológépet" realizálnak, amely elvégzi azokat az alapvető feladatokat, amelyet az ember-számológép-szerszámgép középső tagjának adott programozó nyelv és szerszámgépi utasitásrendszer mellett el kell végeznie.

Ennek a szimulációs APT számológépnek a "nyelve" nem egyezik sem az ember használta programozó nyelvvel, sem a konkrét számológép valamely programozó nyelvével, hanem egy célszerüen választott numerikus APT számológépi nyelv. Az APT számológép bemenő egységén csak ilyen nyelven irt utasitások mehetnek be, a vezérlő egysége csak ezeket tudja értelmezni és végrehajtattni az aritmetikai egységével. Az APT számológép kimeneti nyelve szintén nem egyezik meg egy konkrét szerszámgép nyelvével sem. Az APT számológép bemeneti nyelve olyan, amelyre az emberi programozó nyelven felirt munkadarabprogramok /"forrásprogramok"/ könnyen fordithatók minden konkrét számológépen /könnyü forditóprogramot, translatort késziteni/ és kimeneti nyelve pedig olyan, hogy az - ismét bármely számológéppel - könnyen forditható le adott szerszámgép konkrét kódrendszerébe /könnyü u.n. postprocessort késziteni/.

Az ember és a szerszámgép emlitett "tevékenységi szintjei", amelyekhez az APT számológépet illesztik az emberi oldalon: /1/ szimbólikus nyelven való programozása készre megtervezett munkadaraboknak előre kiválasztott technológiával és szerszámgépre, és /2/ a számológéppel való "társalgás" utján való munkadarabtervezés és konstrukció csupán a különleges igények közlésével /erre még visszatérünk/, a szerszámgépi oldalon pedig /1/ pont-szakaszvezérlés, ill. térbeli pontok segitségével való programozhatóság, /2/ folyamatos pályavezérlés térgörbék szerinti programozhatósággal és /3/ folyamatos pályavezérlés térbeli felületek szerinti programozhatósággal.

A szimulációs számológép módszerrel az APT problémája lényegében az APT számológépek "megépitésére", programok elkészitéséro redukálódott. Az M.I.T.-ben az első stádiumban az emberi tevékenységet az emlitett /1/ szinten tételezték fel. A szerszámgépi oldalon szinte egyidejüleg mindhárom szintet figyelembevéve háromféle APT számológép kidolgozásába kezdtek. Először egy APT I számológépet programoztak, amely azonban csak kisérleti célokat szolgált és előkészitette a későbbi "nagyobb teljesitményü" APT II, majd APT III számológépek programozását. Az APT II szimulációs számológép lényegében u.n. kanonikus alakban megadott térbeli görbék interpolálására, vagyis előirt türésen belül egyenesszakaszokkal való megközelitésére képes. A gyakorlati használatban főként sikbeli görbékkel határolt munkadarabok megmunkálására, vagyis kétdimenziós pályavezérlésre alkalmazzák. Az APT III számológép kanonikus alakban megadott felületek határolta felületi tartományok megmunkálásának automatikus programozására képes.

Az emberi tevékenység emlitett /2/ szintjéhez tervezett számológépet ill. az igy nyert IITRI-ban ma is fejlesztés alatt álló APT rendszert APT IV rendszernek nevezték el. Egyébként az APT I-II-III-IV rendszerek mindegyike az előző fokozat kibővitése, vagyis bármely fokozat használata feleslegessé teszi az előző használatát, mert a megelőző fokozatok minden funkcióját képes ellátni.

Az ember-számológép-szerszámgép hármast most már a szerszámgép oldaláról nézve lényegében arra volt szükség, hogy adott NSz-et bekapcsoljanak az APT rendszerbe, mégpedig ugy, hogy egy számológépi program /postprocessor/ segitségével a megfelelő APT számológépfokozat outputjait leforditsák, konvertálják az illető szerszámgép "nyelvére". Erre a kérdésre a forditó program problémájánál még visszatérünk, itt csupán annyit emlitünk, hogy természetesen egy számológép számos szerszámgépet kiszolgálhat egyidejüleg, mivel feladatának elvégzése összehasonlithatatlanul rövidebb időt vesz igénybe, mint a szerszámgép müködési ideje.

Ezzel kapcsolatban hangsulyozzuk, hogy az ember-számológép-szerszámgép hármas általában /1/ több programozó ember és több szerszámgép együttmüködését jelenti egy számológéppel /2/ a hármas minden tagja elláthat emellett a kooperativ munkától különböző feladatokat is /ez főleg a számológépnél jelentős/ és /3/ a hármas tagjai időben és térben teljesen különválva dolgozhatnak; tehát nem szinkron és helyhezkötötten kell együttmüködniök /természetesen először az embernek kell programozni, hogy azt a számológép leforditíhassa és ezután a szerszámgép a programozott munkadarabot elkészithesse./

A programozó nyelvek.

A NSz-ek programozására tervezett szimbólikus programozó nyelvek egyszerüen közönséges tagjai a ma már mind nagyobb családot alkotó probléma-orientált számológépi nyelveknek, melyekre példák a COGO, STRESS, SIMON, CSL, stb., melyek nem szerszámgépvezérlésre szolgálnak, és a már általunk korábban említett APT, ADAPT, AUTOMAP, AUTOPROMT, AUTOSPOT, stb., nyelvek, melyek szerszámgépvezérlésre készültek. Ezek a nyelvek némileg különböznek az ALGOL, FORTRAN, COBOL, stb. nyelvektől, amelyeket program-orientált nyelveknek neveznek, mert a számológépprogramozás egyszerüsitését és szimbolizálását célozzák a programozandó probléma témakörétől függetlenül. Méginkább különböznek a fenti nyelvek az u.n. (számoló)géporientált szimbolikus nyelvektől /autókód, "assemly" nyelvek/, mint pl. az IBM gépeknél a SPS (Symbolic Programming System) AUTOCODER, az Elliott gépeknél pl. a NEAT, stb., amelyek csupán az adott számológépre történő programozáshoz használhatók.

Végül az összehasonlitás láncolatának másik végén állnak esetünkben a szerszámgépi nyelvek, melyek ugyanugy gépi kódok ill. gépi utasitásrendszerek numerikus /ill. alfanumerikus/ formában, mint a számológépi nyelvek ill. utasitásrendszerek.

A szimbolikus nyelvekben egyaránt az a közös törekvés tükröződik, hogy a problémák programját valamely elektronikus rendszer vezérlésével történő megoldása céljából az emberi nyelvhez minél közelebb álló, minél természetesebbnek ható, könnyen megtanulható és használható formában lehessen megfogalmazni és leirni. Az igy leirt programok kódolását és feldolgozását azután speciális elektronikus /és részben mechanikai/ berendezések bevonásával végezzük a lehető legautomatikusabb fokon.

A problémaorientált nyelvek és programrendszerek fejlődése még messzebb vezet, amely már az ember és a számológép közti "eszmécsere" lehetőségét teremti meg az információközlési módok széles skáláján /adott esetekben, a legcélszerübbet megválasztva: irógép, rajzoló és vetitő berendezések, esetleg akusztikai berendezések, stb./. A nagyobb IBM számológépekre ilyen nyelvek pl. a COGO és a STRESS, valamint az APT még fejlesztés alatt álló fejlettebb fokozata /APT IV/.

A szerszámprogramozó szimbólikus nyelvek általában strukturálisan az ALGOL-hoz, vagy a FORTRAN-hoz hasonlithatók. Ismeretes pl. már az APT III nyelv ALGOL 60 riporthoz [x/] hasonló szintaktikus leirása is.[xx/]

A szóbanforgó nyelveken komplett munkadarabok készitéséhez szükséges információk irhatók le. Ezek együttesét <u>munkadarab-programoknak</u> nevezzük. Egy munkadarabprogram kijelentésekből, mondatokból áll, amelyek a nyelv szabályainak megfelelően csoportositott "szavakat", irásjeleket, paramétereket, számokat tartalmaznak előirt szabály szerinti sorrendben. A szavak egy része

---

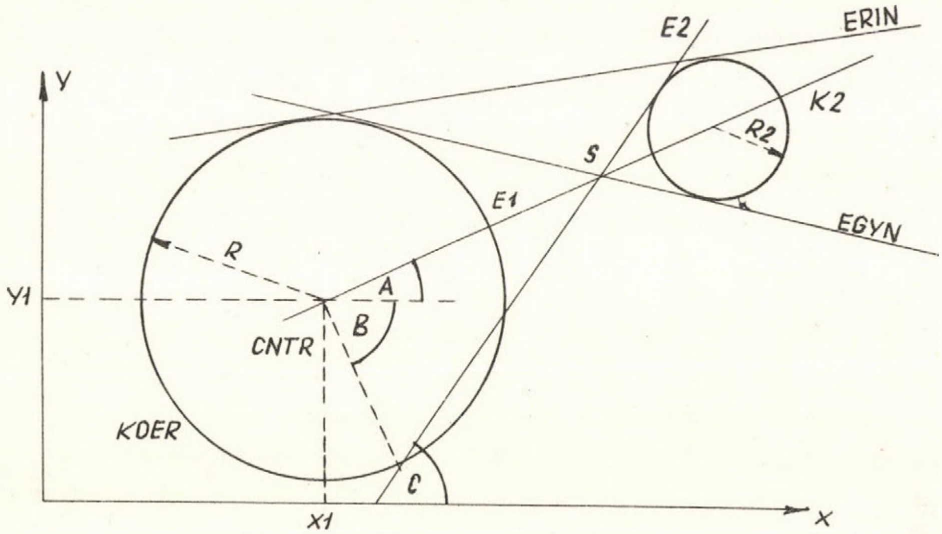
x/ J.W. Bachus és mások: Revized Report on the Algorithmic Languege ALGOL 60 /Edited by P. Naur/ Comm. ACM 6 nov. 1. /1963/

xx/ S.A.Brown és mások: A Description of the APT Languege. Comm. ACM 6 nov. 11. /1963/

u.n. szótári szó, melyeknek a nyelvben meghatározott, rögzitett jelentésük van, más részük azonositó, melyek adott eljárás szerint definiálhatók a nyelv alapjelei-ből. Az alapjelek meghatározott betük /általában az ABC nagybetüi/, az arab számjegyek és néhány egyéb jel.

Különféle információfajták leirására rendszerint más-más mondattipusok használandók, amelyek között általában az alábbi három mindig szerepel:

a/ Geometriai definiciók. Ilyen mondatok keretében irhatók le geometriailag a megmunkálandó alkatrész azon részletei, ahol effektiv megmunkálásnak kell történnie, valamint azok egymáshoz, vagy egy koordinátarendszerhez viszonyitott helyzetei. Az alkatrész mindig egy hozzá kötött derékszögü /esetleg polár/ koordinátarendszerben irható le és a nyelv lehetőségeinek megfelelő geometriai alapelemeket, összefüggéseket lehet felhasználni a leirásban. Például az APT III nyelvben pont, egyenes, kör, ellipszis, hiperbola, általános kupszelet, sik, henger, kup, gömb, általános másodrendü felület adhatók meg előirt formában néhány paraméterrel, vagy egymáshoz viszonyitott helyzetükkel, sőt még táblázatosan megadott sikmetszetü hengert is lehet használni. A geometriai definiciók általában egymásba is ágyazhatók, valamint beépithetők más mondatokba, utasitásokba. Nagyrészüket azonban általában a program elején adjuk meg és a későbbiekben név szerint hivatkozunk rájuk. Tipikus definiáló mondatokat mutatunk be APT III nyelven az alábbi példán:



0/ REMARK / GEOMETRIAI DEFINICIÓK
1/ CNTR = POINT /X1, Y1
2/ KOER = CIRCLE / CENTER, CNTR, RADIUS, R
3/ E1 = LINE / CNTR, (POINT / KOER, ATANGL, A)
4/ E2 = LINE / (POINT / KOER, ATANGL, B), ATANGL, C
5/ EGYN = LINE / (S = POINT / INTOF, E 1, E 2), RIGHT, TANTO, KOER
6/ K2 = CIRCLE / EGYN, YLARGE, E2, YSMALL, RADIUS, R2
7/ ERIN = LINE / LEFT, TANTO, KOER, LEFT, TANTO, K2

A programrészben aláhuztuk az előforduló APT III szótári szavakat. A 0/ cimkéjü megjegyzés /REMARK/ hatástalan. Az 1/ definiálja a CNTR-nek elnevezett pontot, melynek koordinátái /X1, Y1/ változópár értéke /a z-koordinátáról feltételezzük, hogy előzőleg egyszer s mindenkorra adott, vagy pedig 0, amikor is nem kell feltüntetni./ A 2/ definició egy olyan KOER nevü kört definiál, melynek középpontja az előzőleg megadott pont, sugara pedig R értéke. A 3/ alatt E1 egyenest két pontjával definiáljuk, melyek egyike a CNTR pont, a másikat itt definiáljuk még pedig a KOER nevü körön az A (x-tengellyel bezárt) szöghöz /polárszög/

tartozó pontként. A definiciót zárójelbe kell tenni, ha az nem önállóan szerepel, egy mondatként.

A 4/ alatti E2 egyenes a KOER kör B szöghöz tartozó pontján átmenő C irányszögü egyenes. Az EGYN egyenes átmegy azon az S-nek elnevezett ponton, amely E 1 és E 2 egyeneseknek is metszéspontja /INTOF/ és jobbról érinti /RIGHT, TANTO/ a KOER kört. A 6/ alatti K2 nevü kör az EGYN és E2 egyenesek egyik közös érintője R2 sugárral mégpedig az, amelyik EGYN-től a nagyobb Y értékek /YLARGE/ és E2-től a kisebb Y értékek /YSMALL/ felé esik. Végül az ERIN egyenes a két kör közös érintője mégpedig KOER-től a K2 felé nézve mindkét kört balról érinti /LEFT, TANTO/.

b/ Szerszám- és egyéb definiciók. Vannak nyelvek, ahol a szerszámokat szigoruan meghatározott módon a program elején kell definiálni és megszámozni, amely számokkal később az egyes szerszámokra lehet hivatkozni. Más nyelveknél a szerszámokat ott definiálják, ahol a programban használatbavételére sor kerül. Az APT rendszerben is az utóbbi módszert követik. A szerszámdefiniáló mondatban megadjuk a szerszám mindazon lényeges adatait, amelyek az APT számológép számitásainak biztositásához és a postprocessor részére szükségesek. Pl.: CUTTER /d, r azt jelenti, hogy a szerszám egy r sugárral lekerekitett élü d átmérőjü hengeres maró.

A szerszámokon kivül a program elején definiálni kell a geometriai türést, amely a görbék egyenesszakaszokkal való közelitése közben még megengedhető, az előtolás sebességét, a hütés módját stb. Ezek a definiciók mindaddig érvényesek, amig nem változtatjuk meg. Pl.: a SPINDL / 1800, RPM, LOW definicióval /mely utasitás is az orsóforgás elinditására/ meghatározott 1800 fordulat pro perces /RPM/ fordulatszám, mely az alacsony /LOW/fordulatszámtartományba esik, mindaddig érvényes, amig más hasonló előirás, vagy SPINDL / OFF (orsóforgás leállitása) előirás elő nem fordult. A mondatoknak ilyen tipusához sorolhatjuk még a munkadarab és a szerszámgép azonositásához szükséges adatok és a REMARK megjegyzések megadását; valamint a számolás, vagy mozgás módjára, vagy megszakitására szolgáló utasitásokat (STOP, DELAY, END, FINI, CUT, DNTCUT, MULTAX, 2DCALC, 3DCALC, stb.)

c/ Mozgási utasitások. A munkadarabprogram nagy részét képezik általában azok az utasitások, amelyek ténylegesen a szerszám mozgását /irányát, sorrendjét, stb./ irják elő a geometriailag definiált munkadarab mentén, hogy a kivánt megmunkálások megvalósuljanak. Sok nyelvnél az ilyen utasitásokat megszakitják, vagy teljesen egybeépülnek azokkal a geometriai definiciók, vagy egyéb utasitások /pl. aritmetikai számitások, logikai döntések, stb./. A nyelv (ill. program) bonyolultságától függ, hogy egyetlen mozgási utasitással milyen összetett és komplikált mozgássorozatot lehet kiváltani. Pl. az AUTOSPOT-nál egyenesszakasz menti egyenletes mozgásokat, az APT II-nél térgörbeszakaszok menti mozgásokat és pl. az AUTOPROMT-nál felületi tartományok szisztematikus bejárását lehet egyetlen mondattal előirni. Természetesen az előirt utat és határait egyértelmüen kell megadnunk.

Az APT III-ban tipikus mozgási utasitásokat sorolunk fel.

OO) FROM /PT
INDIRV / VEK
GO/TO, LAP

E három utasitás a mozgási utasitások első három utasitásaként fordulhat elő, és pozicionálásra és elinditásra szolgál. Azt jelenti, hogy PT /előzőleg megadott/ pontból elindulva VEK /előzőleg definiált/ vektor irányában menjen (GO), addig mig a szerszám érintkezésbe nem kerül a LAP /előzőleg definiált/ felülettel. Hasonló elinditó utasitássorozatok még:

01) FROM /PT 1
INDIRP /PT 2
GO / OFFSET, FLLT

amely azt jelenti, hogy PT 1 pontból a szerszám menjen egyenes vonalban abba a helyzetbe, amig a FLLT felületet nem érinti a PT 1, PT 2 szakasznak a felülettel való metszéspontjánál.

02) FROM / PT
GO / TO, F 1, ON, F 2, PAST, F 3

ami azt jelenti, hogy PT pontból a legrövidebb uton olyan helyzetbe menjen a szerszám, hogy az F 1, F 2 és F 3 felületek metszéspontjában /ha ilyen nincs, hibajelzés!/ az F 1 felületet érintse az innenső /PT felöli/ oldalon /TO/, az F 2 felület normálisa essen egybe a szerszámtengellyel, az F 3 felületet pedig érintse a tulsó oldalról. Ez a legspeciálisabb helymeghatározások egyike az APT III_ban. Geometriailag 3x3x3=27 térbeli helyzet képzelhető el. Mivel azonban a szerszámtengely a munkadarab felületére /közelitőleg/ merőlegesen kell legyen, ezért ahhoz csak TO előirás lehetséges és igy az összes lehetőség 9-re csökken.

F2	F3
TO	TO
TO	ON
TO	PAST
ON	TO
ON	ON
ON	PAST
PAST	TO
PAST	ON
PAST	PAST

03) FROM /PT 1

GODLTA / X 1, X1, Z1

04) GOTO /PT2

Itt a 03 utasitás után egyszerüen X 1, Y 1 és Z 1 koordinátaértékeknek megfelelő /növekményes/ elmozdulás történik, a 04)-nél pedig a pillanatnyi /álló!/ helyzetből a PT2 pontba történő elmozdulás (és ott megállás) történik.

10) GORGT / GOERBE

Az előző mozgáshoz képest jobbra kanyarodva a GOERBE vonal mentén a következő utasitásbeli görbével való metszéspontig. Az ehhez hasonló utasitások folyamatos mozgatásra szolgálnak.

20) GO LFT /GOERBE, PAST, HATAAR

Az előző mozgáshoz képest balra kanyarodva a GOERBE mentén, amig a HATAAR vonallal való metszés pontnál a szerszám éppen tulmegy (PAST) a HATAAR-on.

Ez egy mozgássorozat befejezésére szolgál.

Az emlitett három mondattipusokon, illetve kijelentéstipusokon kivül sok nyelven még egyéb kijelentések is megengedettek. Pl. aritmetikai kifejezések, illetve értékadó utasitások, ciklusok, összetett utasitások, feltételes és vezérlésátadó utasitások. Az APT III-ban például még a következők használhatók:

d/ Egyéb utasitások. A legfontosabb talán az u.n. makro-utasitás lehetősége, amely több nyelvben is biztositott. Pl. a

MENET = MACRO / P 1, P2,...

- - - - - - - - - -

(utasitások)

- - - - - - - - - -

TERMAC

utasitássorozat egy MENET nevü összetett utasitás, amelynek P 1, P 2, stb. megadott jelzésü paraméterei vannak.

A definició után a makro utasitás

CALL / MENET, P 1 = A, P 2 = B, ...

formában akárhol és akárhányszor hivható és a végrehajtás P 1 = A, P 2 = B, stb. értékekkel történik. Az alábbi utasitássorozat egy ciklusutasitás az APT III-ban:

```
LOOPST
IND) CALL / MENET, P 1 = A, P 2 = B
IF(MAX-B) VEEGE, VEEGE, TOVAABB
TOVAABB) A = A + . 6
         B = B + . 6
JUMPTO / IND
VEEGE) GO TO / HAZA
LOOPND
```

ez az utasitás példázza az APT III-ban a feltételes átirányitó (IF), az értékadó (A=A+.6) és feltétlen vezérátadó (JUMPTO) utasitásokat is. A LOOPST (loop start) és LOOPND (loop end) mondatok csupán a ciklus elejét és végét jelzik,egyébként hatástalanok.

A szótári szavak általában egy, vagy két közönséges szó röviditéséből állnak, amelyek megkönnyitik azok megjegyzését és használatát. Ezért a szerszámgépprogramozó szimbolikus nyelvek szinte természetes kibővitésként hatnak azok számára, akik egyébként a munkadarabtervezés, de különösen programozás területén járatosak /mnemotechnikai szóképzés/. Természetesen a nyelvek a gyártó ország nyelvére épülnek. Igy napjainkban a nyelvek majdnem kizárólag angol-szerü szótárakat tartalmaznak.

Az azonositóknál általában korlátozva van azok hossza /öt, vagy hat betü ill. szám/ és ki vannak zárva a nyelv különleges jelei. Pl. az APT III-ban bármely, legfeljebb hat betüből és számból álló jelsorozat lehet azonositó, kivéve a szótári szavakat /melyek itt szintén eleget tesznek e korlátozásnak/. Az AUTOPROMT nyelvben azonban nincs korlátozva az azonositók hossza.

Az APT III nyelvében pl. lehetőség van a szótári szavak szinonimáinak definiálására is. Itt, ha egy szótári szó a programban igen sokszor szerepelne és nehézkes, vagy egy másik szót kifejezőbbnek tartanánk, akkor mód van bármely azonositót használni helyette. Pl. a

SYN / ÉR, TANTO, METSZ, CROSS, PÁRH, PARLEL

mondat azt jelenti, hogy a programban a továbbiakban a TANTO (tangent to=érintő) helyett ÉR, a CROSS (metsző) helyett METSZ és a PARLEL (parallel=párhuzamos) helyett PÁRH használható.

A programozó program.

Bármely ember-számológép-szerszámgép rendszer müködésének feltétele a számológépre megirt megfelelő program. Tekintve, hogy az ember a munkadarabot valamilyen /szimbolikus/ nyelven irja le és a szerszámgép az utasitásokat valamely más nyelven "érti meg", a számológépet felfoghatjuk, mint tolmácsot, aki fordit az ember használta nyelvről a szerszámgép "használta" nyelvre. A számológép e feladatát egy program révén képes betölteni, amelyet programozó programnak, vagy forditó programnak nevezhetünk.

A programozó programokat általában funkcionálisan különböző részekre osztják, melyek sok esetben időben is egymás után "futnak" a számológépen és felhasználják egymás eredményeit. Ennek oka többféle:

1) A teljes program általában nagy terjedelmü lenne, mely a számológépek korlátozott operativ memóriája következtében nem

férne el a memóriában.

2) Az igények változatai esetében a program részenként cserélhető, vagy fejleszthető, bővithető.

3) Programozástechnikai okok:

a) Részenként általánosabban irható meg és más célra is használható.

b) Nagyobb a szimbolikus programelvek (ALGOL, FORTRAN) használhatósága.

c) Könnyebb a megirás, kipróbálás, ellenőrzés és javitás.

Az APT rendszernél már utaltunk arra, hogy a program fő részét egy "szimulációs APT számológép" képezi, amely tulajdonképen numerikusan kódolt bonyolult számitási és mozgási utasitásokat értelmez, és "bont le" egyszerü mozgási lépéseket leiró utasitásokká, valamint néhány egyéb információt épit be megfelelő helyekre a mozgási utasitások közé. Az APT számológép mellett azonban az APT rendszer tartalmaz még egy translatort és prepocessort (forditó és előfeldolgozó program), amely az APT számológép előtt "müködik" és a következőt végzi:

a) A translator a szimbolikus APT-nyelven megirt program utasitásait átkódolja numerikus utasitásokká és az összetett utasitásokat (makrok, ciklusutasitások, stb.) lebontja alaputasitások sorozatára.

b) A preprocessor megoldja a definiciókban előforduló geometriai feladatokat és az előforduló geometriai elemeket kanonikus formában fejezi ki.

Az APT számológép utasitásaiban már minden geometriai elemnek kanonikus formában kell előfordulnia. A kanonikus formát tulajdonképpen az definiálja, hogy milyen paraméterekkel kell a szimulációs számológép részére előállitani. Például egy kört az APT nyelvben többféleképpen lehet definiálni:

középpontjával és sugarával
középpontjával és érintő egyenesével, vagy körével
két érintő egyenesével, vagy körével és sugarával, stb.

de az APT számológép számára mindig (X, Y, R) alakban kell megadni, ahol az első két szám a középpont koordinátái, a harmadik a sugár.

Azt is emlitettük már, hogy az APT számológép "kimenetét" egyetlen konkrét szerszámgép sem tudja megérteni, tehát a kiadott, leforditott és elemi lépésekre bontott program nem alkalmas semmilyen szerszámgép közvetlen vezérlésére. Ugyanakkor a produkált program olyan, hogy viszonylag egyszerüen forditható bármely konkrét szerszámgép nyelvére (a szerszámgépek meghatározott kategóriájában természetesen). Ezt a forditást és a vezérlő program elkészitését minden konkrét szerszámgépre, vagy azok megadott választékán belül bármelyikre egy külön program, u.n. postprocessor (utófeldolgozó) végzi. Tehát pl. ha a programozott szerszámgépek listája egy géppel bővül, elég a postprocessort (ha egy öszszevont van) kiegésziteni, vagy azok sorozatát (ha minden géphez másik van) kibőviteni. Az egész programrendszer többi eleme változatlan marad.

Általában a postprocessort megelőző programrészt processornak is nevezik, de néha csak az APT számológépet, vagy azzal analóg feladatu programrészt nevezik processornak. A különféle programrészek rendszerint egymás után müködnek, de majdnem kivétel nélkül külön müködik a postprocessor rész. Természetesen ismeretesek speciális egyedi programok is, amelyek egy adott programozó nyelvről egy adott számológépen egy adott szerszámgépre forditanak. Ezek talán az adott relációban sokkal gazdaságosabbak (kisebb a forditóprogram és gyorsabban fordit), ezzel szemben teljesen specifikusak. A törekvés általában eddig az általánosabb programrendszerek készitése volt, sőt azoknak minél inkább univerzális számológép-programozó nyelven való megirása. Pl. az APT rendszer legfőbb részei teljesen FORTRAN nyelven is meg vannak irva.

Bárhogyan és bármely számológépre történjék is a program megirása, a munka nagysága és bonyolultsága komplikáltabb programozó rendszereknél vetekszik egy ALGOL-forditóprogram megirásával. A NSz-ek ESz-el történő programozása általában legalább közepes nagyságu számológépet igényel és egy programozó program elkészitése nagy erőfeszitést egy kollektiva részéről, melynek tevékeny tagja kell legyen elengedhetetlenül egy müszaki szakember, vagy számos szerszámgép-programozó, forditóprogram készitésben járatos matematikusok és a számológép közvetlen kiszolgálói és használói. A forditóprogram készitőinek át kell tekinteni a lehetséges előforduló munkadarabok, megmunkálási módok, szerszámgépfunkciók, szerszámgép-konstrukciók és szerszámgépi kódok széles skáláját, hogy egy némiképp általános, megbizható és a befektetett munkával arányos haszonnal használható forditó-programrendszert alkothassanak meg. Feltétlenül nagy mennyiségü számológépi üzemidőt kell biztositani a munkához és a valószinüleg nélkülözhetetlen a szerszámgépek többé-kevésbé széles skálájából a jellegzetes és szélsőséges példányok reprezentálása és kisérleti programokkal azok müködtetési lehetőségének biztositása.

Egy számológép és egy szerszámgép esetén csupán egy egyedi programot lehet késziteni, amely nem minden körülmények között felel meg a célnak. Hangsulyozhatjuk azt a tényt is, hogy sokan vitatják univerzális szerszámgépprogramozó rendszerek kifejlesztésének eredményességét és gazdaságosságát. Helyettük az egyedi programozó rendszereket, minden szerszámgéphez külön megirt programokat és nyelveket tartanak hasznosnak. Szerintük az APT koncepció és a többi univerzális rendszerek nem váltották be a hozzájuk füzött reményeket és hasznuk nem áll arányban kidolgozási költségeikkel.x/

---

x/ F.A. Peters: A simple handle for a simple tool. The Computer Bulletin June 1965.

A számológépes programozás perspektivái

Az előzőkben több helyen utaltunk már arra, hogy az ESz felhasználása a NSz-ek üzemeltetésében nem zárul le azzal, hogy a NSz-ek programozásának szimbolizálását, illetve a munkadarabok szerszámgépi programja elkészitésének automatizálását lehetővé teszik.

A számológépek felhasználása a teljes alkatrészgyártás, sőt a tervezéssel járó munkák nagy részének teljes automatizálását is lehetővé teszi.

Ma még nagyrészt a számológépeken olyan programokat használnak szélesebb gyakorlatban, amelyek a kész, végleges megtervezett alkatrész, munkadarab komplett, szimbolikus nyelven leirt és információhordozón kódolt programját követelik meg.

A programoknak tartalmazniok kell a felhasznált szerszámgépre, a szerszámokra, előtolásokra, egyéb segédfunkciókra való utalást is, megfelelően ütemezve és meglehetősen szigoru szabályok szerint.

Mi az, amelyet a számológép még ebből a munkából az embertől átvehet? Amely révén az embert az APT-vel kapcsolatban már emlitett b) tevékenységi szinten tételezhetjük fel az ember-számológép-szerszámgép együttesben? Ezt talán a következőkben foglalhatjuk össze:

1) Az embert mentesiteni a programirástól és kódolással járó manuális munkától.

2) Mentesiteni magától a programnak a megszerkesztésétől a meghatározott müszaki és technológiai adatok alapján (pl. müszaki rajz és technológiai követelmények alapján bizonyos lehetőségek felkinálása mellett) a szerszámgép, szerszám és nyersanyagok tekintetében.

3) A különféle megoldási lehetőségek közül az optimális, vagy egyedül helyes megoldások kiválasztása. Pl. a lehetséges szer-

számgépek, szerszámok, hütőanyagok, stb. közül a megfelelők kiválasztása, a megfelelő követelmények megadása után a geometriai türések, esetleg a munkadarab alapanyagának kiválasztása, a megmunkálások fokozatainak és sorrendjének összeállitása, stb.

4) A munkadarab tervezéssel, konstruálással járó számitási és mérlegelési, valamint precizirozási munkák, továbbá átmeneti tervek különféle módokon való szemléltetésének elvégzése.

5) Végül "alkotó" közremüködés a tervezésben azáltal, hogy elképzeléseket elemez, interpretál, vagy "kritizál" és "véleményeket" közöl, vagy "ellenjavaslatokat tesz" az ember által szolgáltatott tervvel, vagy elképzeléssel kapcsolatban.

Az elmondott funkciók egy tényleges rendszerben forditott sorrendben játszódnak le, ha egyáltalán a számológép végzi azokat: először az 5) és 4) funkció, majd a 3) és végül a 2) és 1) funkció. Az 5) és 4) funkciók az ember aktiv közremüködése és befolyása alatt folynak, igy azokról feltétlenül tájékozott. A 3) funkció eredményéről célszerü, ha tájékozódik és a lehetőséget erre biztositani kell. A 2) és 1) funkció az embert, a tervezőt tulajdonképpen már ugyanugy nem érdekli, mint ahogy egy mai rendszernél maga a számológépi forditás lefolyása nem érdekli a munkadarabprogramozót.

Természetesen az ellenőrzési lehetőséget az ember számára a fontosabb lépéseknél biztositani kell a most felvázolt tökéletesebb rendszernél ugyanugy, mint a mai programozó programoknál. Ennek célja főként az esetleges hibák időben történő felderitése és a szükséges közbelépés lehetőségének biztositása, hogy a hibát, ha már fellépett, minél "olcsóbban fizessük meg", vagy küszöbölhessük ki.

A már ma müködő rendszereknél mindennapos a rajzológép vagy fényernyő és megfelelő program, amely a programozott munkadarab kivánt részletének (vagy az egésznek) kivánt méretben és nézőpontból való megjelenitését biztositja vizuálisan. Kivánságra a számológép lehetővé teszi a szerszám utjának végigkövetését a munkadarab mentén a megmunkáláskor, mielőtt akár a munkadarab konkrét szerszámgépre szerkesztett programja elkészült volna, de mindenesetre mielőtt a szerszámgépet üzemeltettük volna a szóbanforgó munkadarab elkészitése érdekében. Ez a módszer általában gazdaságosabb, mint a szerszámgép próbaüzemeltetése a kész programmal (pl.poliuretánhab megmunkálásával), mert a számológép periferiális berendezései gyorsabban és olcsóbban üzemelnek.

A ma meglévő programozó programok is tartalmaznak már u.n. diagnoszta részt, amely a program többi részének müködésével párhuzamosan állandó ellenőrzéseket végez és "jelentéseket", jelzéseket közöl, szükség esetén vész- vagy hibajelzést ad és le is állitja a program további futását.

Természetes, hogy mind a szemléltető program, mind a diagnoszta program hatáskörét és müködését ki kell terjeszteni az egész rendszer fejlesztésével párhuzamosan. A két program szerepe keveredhet és a két program egybe is olvadhat, hiszen fő szerepe tulajdonképpen az ember tájékoztatása: akár az ember közvetlen, vagy közvetett kérdésére válaszolva (értékelések, választások, feltételek közlése), akár pedig rendkivüli helyzetek vagy hibák, tévedések, esetleg üzemzavar vagy matematikai szélsőségek, abszurd helyzetek jelzésével, közlésével. Az utóbbiaknak feltehetően az egész rendszer tökéletesedésével párhuzamosan mind ritkábbaknak kell lenniük, igy e szerep is kisebb jelentőségüvé válik.

Szinte felesleges emliteni, hogy az ilyen "tökéletes" rendszerek programjai csak nagy teljesitményü ESz-ekre készithetők el. Azt azonban hangsulyozni kell, hogy a problémák nagy része nem szoritkozik kizárólag a szerszámgépek programozására és a gyártandó munkadarabok tervezésére és igy az egész fejlesztést nem szabad elszigetelni a számológépek egyéb területeken való mind hatásosabb és racionálisabb felhasználhatóságának kutatásától. Talán nem is szabad a vázolt fejlesztéssel kapcsolatban egy lépést sem tovább menni anélkül, hogy előbb az elért eredményeket fel ne használjuk másutt, valamint meg ne vizsgáljuk, hogy a más területeken elért eredmények miképpen hasznosithatók ezen a területen. Gondoljunk itt az IBM számológépgyár programfejlesztő törekvéseire, amely teljesen hasonló feladatok megoldására tervezte a COGO, a STRESS nyelveket, illetve programrendszereket és ugyancsak érdekelt az IITRI-ben végzett fejlesztésben az APT rendszerrel kapcsolatban.

A numerikus vezérlésü szerszámgépek gazdaságos programozásának igénye az MIT-ben folyt fejlesztésen, az APT rendszer fejlesztésén keresztül kétségtelenül elősegitette általában a problémaorientált számológépprogramozó nyelvek, sőt a szimbólikus, program-orientált számológépprogramozó nyelvek fejlődését is, ma azonban inkább a NSz-ek programozásának fejlettsége függ a számológépprogramozó rendszerek fejlesztése terén elért általános eredményektől. Kétségtelen azonban, hogy az automatizálásban és a számológépeknek e célra történő felhasználásában az alkatrészgyártásnak, a szerszámgépeknek uttörő szerep jutott.

Summary

Numerically controlled machine tool programming with a computer.

Numerically controlled machine tools appeared in recent years in Hungary and their development and organisation of production is now under way. In this connection arose the need for the automation of the programming of numerical machine tools. The examination of the problem was assigned to the Computing Centre of the Hungarian Academy of Sciences.

In the present paper the author gives a short synopsis of the results obtained in different parts of the world in the field of the use of universal digital computers for the automatic programming of numerically controlled machine tools. Arising problems and principles of their solution are discussed. Furthermore, the article surveys the development, the classification and the trends of further developments of symbolic programming systems.

Egy optimális vezérlési feladat

Szelezsán János

Tekintsük az

1) $u_t = a^2 u_{xx}$ parabolikus differenciálegyenletet, az

2) $u(x,0) = 0$ $x \geq 0$

$u(0,t) = h(t)$

feltételek mellett, ahol a $h(t)$ peremfeltétel olyan, hogy kielégiti az:

3) $F(t,h(t),h'(t)) = \varphi(t)$

közönséges elsőrendü differenciálegyenletet, $h(0) = 0$ feltétellel.

Legyen $F = \left\{ \varphi(t) : \varphi(t) \in C; \int_0^{t_0} \varphi(t) = A \right\}$

Feladat: Keressük meg az F halmaznak azt az elemét, amelyre az $u(x,t)$ függvény az (x_0,t_0) pontban minimumot vesz fel, azaz

$$J(\varphi) = \min_{\varphi(t) \in F} u(x_0,t_0)$$

Ha a $\varphi(t)$ függvényt vezérlő függvénynek tekintjük, akkor feladatunk egy speciális optimális vezérlésként fogható fel.

Ismeretes, hogy az (1) differenciálegyenlet megoldása az adott feltételekkel a

$$H(x,t-\tau) = \frac{x}{2a\sqrt{\pi}}\, e^{-\frac{x^2}{4a^2(t-\tau)}}\,(t-\tau)^{-3/2}$$

jelöléssel

$$u(x,t) = \int_0^t H(x,t-\tau)\, h(\tau)\, d\tau$$

alakban állitható elő, ezért

$$u(x_o,t_o) = \int_0^{t_o} H(x_o,t_o-\tau)\, h(\tau)\, d\tau$$

Tétel:

Tegyük fel, hogy a 3) differenciálegyenlet

$h(t) = \varnothing\,(t, \varphi(t))$ megoldása olyan, hogy $\varnothing_{\varphi\varphi} = \mathrm{const} > 0$.
Akkor a feladat megoldását a

$$H(x_o,t_o-t)\, \varnothing_{y'}\,(t,y'(t)) = C$$

differenciálegyenlet megoldásának deriváltja adja, azaz

$$\varphi(t) = y'(t)$$

ahol $y(t)$ a fenti differenciálegyenlet megoldása az $y(0)=0$, $y(t_0) = A$. (A C egy **integrálási állandó, amely a feltételekből meghatározható.**) feltételek mellett.

Bizonyitás:

A 3) differenciálegyenlet megoldása a feltételek szerint

$$h(t) = \emptyset\,(t, \varphi(t))$$

ezért

$$J(\varphi) = \int_0^{t_0} H(x_0, t_0-\tau)\, \emptyset(\tau, \varphi(\tau))\, d\tau$$

Legyen

$$y(t) = \int_0^{t} \varphi(\tau)\, d\tau$$

Igy $y'(t) = \varphi(t)$ és $y(0) = 0$, $y(a) = A$

tehát:

$$J(\varphi) = J(y'(t)) = \int_0^{t_0} H(x_0, t_0-t)\, \emptyset(t, y'(t))\, dt$$

Ismeretes, hogy a $J = \int_a^b F(x,y,y')dx$ funkcionál esetén, annak szükséges feltétele, hogy az $y(x)$ függvény szélsőértéket szolgáltasson, az, hogy az $y(x)$ függvény kielégitse az

$$F_y - \frac{d}{dx} F_{y'} = 0$$

Euler-Lagrange differenciálegyenletet.

Esetünkben az Euler-Lagrange egyenlet

$$\frac{d}{dt} \left\{ H(x_o, t_o - t)\, \emptyset_{y'} (t, y'(t)) \right\} = 0$$

ebből

$$H(x_o, t_o - t)\, \emptyset_{y'} (t, y'(t)) = C$$

A fenti differenciálegyenlet megoldásával (az $y(o) = 0$, $y(t_o) = A$ feltételek figyelembevételével) megkapjuk az optimális vezérlés primitiv függvényét: $y(t) - t$

Ebből $\varphi(t) = y'(t)$

Könnyen belátható a tett feltevés mellett, hogy az elégséges feltétel is teljesül.

Ismeretes ugyanis, hogy a $J = \int_a^b F(x,y,y')\, dx$ funkcionál esetén az elégséges feltétel a következő:

Megvizsgáljuk az un. Jacobi-féle

$$(F_{yy} - \frac{d}{dx} F_{yy'})\, u - \frac{d}{dx} (F_{y'y'}\, u') = 0$$

differenciálegyenlet megoldását az Euler-Lagrange differenciálegyenlet extremálisai ($y(x)$ megoldásai) mentén

$$(u = \frac{y(x,c)}{\partial c}, \quad u(o) = 0).$$

Ha az u megoldás az $x_0 = 0$ ponton kivül más pontban nem metszi az x tengelyt, akkor az adott $y(x)$ extremálison a J funkcional valóban (gyenge) szélsőértéket vesz fel, mégpedig $F_{y'y'} > 0$ esetén minimumot.

Esetünkben a Jacobi egyenlet

$$- \frac{d}{dt} \left[H(x_0, t_0 - t) \, \emptyset_{y'y'}(t, y'(t)) \, u'(t) \right] = 0$$

Ebből a $\emptyset_{\varphi\varphi} = C$ (const) feltétel miatt

$$H(x_0, t_0 - t) \, u'(t) \, C = C_1$$

azaz

$$u'(t) = \frac{C_1}{CH(x_0, t_0 - t)}$$

De $\quad H(x_0, t_0 - t) > 0 \qquad 0 \leq t < t_0$

ezért $u'(t)$ előjeltartó, vagyis a $t = 0$ pont kivételével az $u(t)$ görbe nem metszi a t tengelyt a $(0, t_0)$ intervallumban. Ez azt jelenti, hogy az elégséges feltétel teljesül.

A $\emptyset = \text{const} > 0$ feltétel azt biztositja, hogy a $\varphi(t)$ függvény mellett a $J(\varphi)$ funkcional minimumot vesz fel.

Irodalom:

1 Gelfand-Fomin: Variacionnoe uszcsiszlenie.

2 R.Courant D.Hilbert: Methods of Mathematical Physics Vol.2.

Summary

Concerning a optimal control problem.

Let us consider the parabolic differential equation

$$u_t = a^2 u_{xx}$$

on the conditions

$$u(x,0) = 0 \qquad x \geq 0$$
$$u(0,t) = h(t)$$

where the $h(t)$ function is such that it fulfils the first order ordinary differential equation.

$$F(t,h(t), h'(t)) = \varphi(t)$$

with the condition $h(0) = 0$

Let be: $F = \left\{ \varphi(t): \varphi(t) \in C; \quad \int_0^{t_0} \varphi(t) = A \right\}$

Problem: is to be found that element of F set for which the funkction $u(x,t)$ takes the minimum in point (x_0,t_0), that is.

$$J(\varphi) = \min_{\varphi(t) \in F} u(x_0,t_0)$$

If we consider the function $\varphi(t)$ as control function, then our problem can be considered as a special optimal control.

Transzcendens, illetve algebrai egyenletrendszer megoldásának egy módszere, illetve annak egy alkalmazása molekula modellek erő-állandóinak kiszámitására

Gehér István

Legyen $f_i(x_1,x_2,\dots,x_n)$ n darab n változós függvény és legyenek $c_1,c_2,\dots,c_n$ valós számok. Megoldandó az

$$\left.\begin{aligned} f_1(x_1,x_2,\dots,x_n) &= c_1 \\ f_2(x_1,x_2,\dots,x_n) &= c_2 \\ \dots\dots\dots \\ f_n(x_1,x_2,\dots,x_n) &= c_n \end{aligned}\right\} \quad (A)$$

egyenletrendszer.

A tömörség kedvéért jelöljük az

$$\left.\begin{aligned} y_1 &= f_1(x_1,x_2,\dots,x_n) \\ y_2 &= f_2(x_1,x_2,\dots,x_n) \\ \dots\dots\dots \\ y_n &= f_n(x_1,x_2,\dots,x_n) \end{aligned}\right\}$$

transzformációt $Y = F(X)$-szel. Ez a transzformáció tehát az n dimenziós tér $X = (x_1,x_2,\dots,x_n)^*$ vektorához hozzárendeli ugyanennek a térnek egy $Y = (y_1,y_2,\dots,y_n)^*$ vektorát. Ha a $(c_1,c_2,\dots,c_n)$ vektort C-vel jelöljük, akkor az (A) egyenletrendszer az

$$F(X) = C \; . \; . \; . \qquad (A')$$

egyenletbe megy át.

Hogy az (A), vagy a vele egyenértékü (A') egyenletet meg tudjuk oldani, az F(X) transzformációra és a C vektorra bizonyos megszoritásokat kell tennünk. Megoldáson természetesen elektronikus számológépekre programozható eljárást értünk.

A továbbiakban tegyük fel, hogy az

$$Y = F(X)$$

transzformáció az n dimenziós tér egy D összefüggő és nyilt halmazát ugyanennek a térnek egy R halmazára egy egyértelmüen képezi le. Tegyük fel továbbá, hogy a

$$\frac{\partial f_i}{\partial x_j} \qquad (i=1,2,\ldots,n; \quad j=1,2,\ldots,n)$$

parciális deriváltak a D minden pontjában léteznek és folytonosak. Végül tegyük fel, hogy a

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1}, & \frac{\partial f_1}{\partial x_2}, & \ldots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1}, & \frac{\partial f_2}{\partial x_2}, & \ldots & \frac{\partial f_2}{\partial x_n} \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ \frac{\partial f_n}{\partial x_1}, & \frac{\partial f_n}{\partial x_2}, & \ldots & \frac{\partial f_n}{\partial x_n} \end{bmatrix} = \left[\frac{\partial f_i}{\partial x_j}\right]$$

Jacobi mátrix a D minden pontjában reguláris, azaz determinánsa zérustól különböző.

Megjegyezzük, hogy a $\frac{\partial f_i}{\partial x_j}$ deriváltak folytonossága és a

$\left[\frac{\partial f_i}{\partial x_j}\right]$ mátrix regularitása miatt az R halmaz szintén összefüggő és nyilt.

Az $Y = F(X)$ transzformáció inverzét jelöljük $X = \phi(Y)$-nal.
Az $F(X) = C$ egyenletnek akkor van gyöke, ha C eleme az R halmaznak. Ebben az esetben viszont az egyenlet egyetlen gyöke $\phi(C)$.

Jelöljük a $\left[\frac{\partial f_i}{\partial x_j}\right]$ Jacobi mátrixot $\frac{dF}{dX}$ -szel, vagy $\frac{dY}{dX}$ -szel. A láncszabály miatt

$$\frac{dF}{dX} \cdot \frac{d\phi}{dY} = \frac{dY}{dY} = I$$

ahol I az egységtranszformáció, ezért

$$\frac{d\phi}{dY} = \left[\frac{dF}{dX}\right]^{-1} \qquad (B)$$

Mivel a $\frac{dF}{dX}$ és igy az inverze is csak az $X = (Y)$-tól függ, azért a (B) formula a $\phi(Y)$ függvényre egy általánosabb értelemben vett differenciál egyenlet.

Az (A) illetve a vele egyenértékü (A') egyenletet most már a következőképpen oldjuk meg:

Veszünk egy X^o vektort a D halmazból és meghatározzuk hozzá az $Y^o = F(X^o)$ vektort. Megkeressük a

$$\frac{dX}{dY} = \left[\frac{dF}{dX}\right]^{-1} \qquad (C)$$

differenciál-egyenlet azon $\phi(Y)$ megoldásának $\phi(C)$ helyettesitési értékét, amely eleget tesz a $\phi(Y^o) = X^o$ kezdeti feltételnek.

Mivel

$$\Delta X = \Delta\phi\,(Y) = \frac{dX}{dY}\,\Delta Y + R(\Delta Y)$$

ahol $|R(\Delta Y)| = O(|\Delta Y|)$, azért az (A') egyenlet $X = \phi(C)$ gyökének egy X^k közelitő értékét a következőképpen adjuk meg:

Felveszünk m+1 darab $Y^o = Z^o, Z^1, Z^2, \ldots, Z^{m-1}, Z^m = C$ vektort ugy, hogy a

$$Z^o, Z^1, Z^2, \ldots, Z^{m-1}, Z^m$$

törtvonal az R-ben legyen és hogy az

$$|Z^i - Z^{i-1}| < \frac{1}{k}$$

egyenlőtlenség fennálljon, ha i=1,2m...,m. Meghatározzuk az $V^o, V^1, V^2, \ldots, V^m = X^k$ vektorokat a következő rekurziós formula segitségével:

$$V^o = X^o$$

$$V^{i+1} = V^i + \left[\frac{dF}{dX}\right]^{-1}_{X=U^i} (Z^{i+1} - Z^i)$$

Belátható, hogy $X^k \longrightarrow X = \emptyset(C)$, ha $k \longrightarrow \infty$.

Mivel ez eléggé plauzibilis és itt számitástechnikai módszerről van szó, azért a bizonyitást annak hosszadalmassága miatt nem közöljük.

A gyakorlati feladatok megoldásánál általában a $\frac{\partial f_i}{\partial x_j}$ parciális deriváltat, vagyis a $\frac{dF}{dX}$ mátrixot kénytelenek vagyunk kézzel meghatározni. Mégis abban az igen fontos speciális esetben, amikor tudjuk, hogy az $f_i (x_1,x_2,\ldots,x_n)$ függvények olyan polinomok, hogy bármely változójukban legfeljebb m-ed fokuak, a differenciálást a számológéppel is el lehet végeztetni. Ennek az az oka, hogy egy polinom együtthatóit a differenciák segitségével ki lehet fejezni.

Legyen h egy fix szám és jelöljük Δ-val azt az operátort, amelyikre

$$\Delta g(x) = g(x+h) - g(x)$$

Ha $p(x) = C_m X^m + C_{m-1} X^{m-1} + \ldots + C_1 X + C_o$, akkor a C_i együtthatókra a következő rekurziós formula érvényes:

$$C_m = \frac{1}{m!} \frac{\Delta^m p(x)}{h^m}$$

$$C_i = \frac{1}{i!} \quad \frac{\Delta^i \left[p(x) - (C_m X^m + C_{m-1} X^{m-1} + \dots + C_{i+1} X^{i+1})\right]}{h^i}$$

ahol X tetszés szerinti. A C_i együtthatók ismeretében a

$$p'(x) = m\, C_m X^{m-1} + (m-1)\, C_{m-1} X^{m-2} + \dots + 2\, C_2 X + C_1$$

polinom helyettesitési értékeinek a meghatározása nem okoz gondot. A fent emlitett differenciálási eljárásnak az a nagy előnye is megvan, hogy az $F(X)$ transzformációt explicite nem is kell ismerni, elég ha azt egy rekurziv eljárás segitségével adjuk meg. A következőkben meg fogunk emliteni egy konkrét problémát, ahol éppen ez a helyzet.

Molekula modellek erő-állandóinak kiszámitásával kapcsolatban a következő probléma merült fel:

Adva van egy A $n \times n$-es mátrix, továbbá n szám: $\delta_1, \delta_2, \dots, \delta_n$.

Meghatározandó a

$$Z = \begin{bmatrix} X_1 & & & & & \\ & X_2 & & & & \\ & & \cdot & & & \\ & & & \cdot & & \\ & & & & \cdot & \\ & & & & & X_n \end{bmatrix}$$

diagonális mátrix ugy, hogy AZ sajátértékei $\delta_1, \delta_2, \dots, \delta_n$ legyenek. A továbbiakban ezt a problémát (E)-vel fogjuk jelölni.

Egy M n-ed rendü négyzetes mátrix $|tE - M|$ karakterisztikus polinomja legyen $h_0 + h_1 t + h_2 t^2 + \dots + h_{n-1} t^{n-1} + (-1)^n t^n$

A $(h_0, h_1, \dots, h_{n-1})^* = H$ vektort az M mátrix karakterisztikus vektorának fogjuk nevezni. A H vektort az M sajátértékei egyértelmüen meghatározzák.

Ugyanis:

$$h_{n-i} = (-1)^{n-i} \sum S_{k1} S_{k2} \dots S_{ki}$$

ahol $S_1, S_2, \dots, S_n$ az M sajátértékei.

Az E probléma tehát a következőképpen fogalmazható:

Adva van egy A n-ed rendü négyzetes mátrix, továbbá egy $C = (c_1, c_2, \dots, c_n)^*$ vektor.

Keressük a

$$Z = \begin{bmatrix} X_1 & & & & & \\ & X_2 & & & & \\ & & \cdot & & & \\ & & & \cdot & & \\ & & & & \cdot & \\ & & & & & X_n \end{bmatrix}$$

digonális mátrixot ugy, hogy az AZ mátrix karakterisztikus vektora C legyen.

Jelölje $Y = F(X)$ azt a transzformációt, amely az $X = (x_1, x_2, \dots, x_n)^*$ vektorhoz hozzárendeli az

$$AZ = A \begin{bmatrix} x_1 & & & & \\ & x_2 & & & \\ & & \cdot & & \\ & & & \cdot & \\ & & & & x_n \end{bmatrix}$$

mátrix karakterisztikus vektorát. Az (E) problŧma megoldása egyenértékü az

$$F(X) = C$$

egyenlet megoldásával.

Tudjuk, hogy egy M mátrix $H = (h_0, h_1, \ldots, h_{n-1})^*$ karakterisztikus vektorának h_{n-i} koordinátája egyenlő az összes i-edrendü főminorok összegének $(-1)^{n-i}$-szeresével.

Jelöljük az A mátrix oszlopvektorait $A^1, A^2, \ldots, A^n$-nel.

Az AZ mátrix oszlopvektorai $x_1 A^1$, $x_2 A^2, \ldots, X_n A^n$.

Az AZ mátrix főminorai nyilván az $x_1, x_2, \ldots, x_n$ olyan polinomjai, amelyek minden változóban lineárisak. Ezért az AZ mátrix karaktérisztiku vektorának a koordinátái, azaz az $f_i\ (x_1, x_2, \ldots, x_n)$ függvények minden változójukban lineárisak. A parciális deriváltakat tehát a következő egyszerü formula adja meg:

$$\frac{\partial f_i(x_1, x_2, \ldots, x_n)}{\partial x_j} = \frac{f_i(x_1, x_2, \ldots, x_j + h, \ldots, x_n)}{h} - \frac{f_i(x_1, x_2, \ldots, x_n)}{h}$$

Az F(X) transzformáció értékeinek a kiszámitása a főminorok segitségével gyakorlatilag használhatatlan, ezért F(X) meghatározására gyakorlatilag használható explicit formulánk nincs. Vannak viszont jó rekurziv eljárások, például a LEVERRIER féle eljárás, illetve annak FADDETEV által módositott formája. Mivel F(X) egy egyértelmüséget csak egy hely környezetében tudjuk biztositani, azért az eljárás csak abban az esetben konvergál, ha olyan X^o-ból indulunk ki, amely valamelyik gyökhöz közel van.

Irodalom:

D.E. Mann, T. SHIMANOUCHI, H.MEAL, L.FANO: NORMAL COORDINATE ANALYSIS OF HALOGENATED ETHYLENES.

THE JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS VOLUME 27. NUMBER 1. /1956/

ERICH W SCHMID: MOLEKÖLMODELLRECHNUNGEN MIT ELEKTRONISCHEN RECHENANLAGEN.

ZEITSCHRIFT FÜR ELEKTRONENCHEMIE. BD. 64. NR4. /1960/

Summary

A method for solving the system of transcendent equations

Let $Y = F(X)$ denote a transformation that maps the domain D in the n dimensional space onto a set R in the same n dimensional space. The equation $F(X) = C$ is to be solved.

Let us suppose that the domain D is open and connected, moreover the map $Y = F(X)$ is one to one, continuous, having continuous partial derivatives

$\frac{\partial f_i}{\partial x_j}$ at all the points of the domain D. Besides we will apply for the restriction that the Jacobian determinant $\left| \frac{\partial f_i}{\partial x_j} \right|$ is not equal to zero at any point of the domain D.

The continuity of the partial derivatives $\frac{\partial f_i}{\partial x_j}$ and the not vanishing of the Jacobian determinant involves for the set R to be open and connected.

Let $\emptyset(Y)$ denote the inverse transormation of $Y = F(X)$. The equation $F(X) = C$ has got a root if and only if C belongs to R. In this case the equation mentioned above has got a unique rott $\emptyset(C)$.

Let us denotet the Jacobian matrix $\left[\frac{\partial f_i}{\partial x_j} \right]$ with $\frac{dF}{dX}$. Owing to the chain-rule

$$\frac{d\emptyset}{dY} = \left[\frac{dF}{dX} \right]^{-1}$$

This is a differential equation in a general meaning for the function $\emptyset(Y)$. The solution of that differential equation can be found as follows:

We take a vector X^o of the domain D and then we define the vector $Y^o = F(X^o)$. Let $\emptyset(Y)$ be the solution of the differential equation

$$\frac{dX}{dY} = \left[\frac{dF}{dX}\right]^{-1}$$

that satisfies the initial value condition $\emptyset(Y^o) = X^o$.

$\emptyset(C)$ is the unique root of the equation $F(X) = C$.

Due to the formula

$$\Delta X = \Delta\, \emptyset(X) = \frac{dX}{dY}\, \Delta\, Y + R(\Delta\, Y),$$

where $|R(\Delta Y)| = \text{ordo}\,(|\Delta\, Y|)$, the approximate value of the root $\emptyset(C)$ can be calculated in the following way:

We take m+1 vectors $Y^o = Z^o,\ Z^1,\ Z^2,\ \dots,\ Z^{m-1},\ Z^m$ so that the path $Z^o, Z^1, \dots, Z^{m-1}, Z^m$ with a straight line between two consecutive points should belong to the domain R and the inequality

$$|Z^i - Z^{i-1}| < \frac{1}{k}$$

should be satisfied, if $i=1,2,\dots,m$. We define the vectors $V^o, V^1, \dots, V^m = X^k$ by the following recursive formula:

$$V^o = X^o$$

$$V^{i+1} = V^i + \left[\frac{dF}{dX}\right]^{-1}_{X=Vi}$$

It is not difficult to justify that X^k converges to $X = \emptyset(C)$ if $k \longrightarrow \infty$ This method is particularly simple when the functions $f_i(x_1,x_2,\ldots,x_n)$ are polynoms.

In this case the coefficients of the polynoms can be calculated by means of the differences of higher order.

Egy szakaszonként lineáris optimális vezérlés.

Szelezsán János

Tekintsük az alábbi vezérlési feladatot:

Az $u(t)$ vezérlési hatás alatt álló rendszer müködését a

$$Q(x,t) = \int_0^t K(x,t,\tau)\, u(\tau)\, d\tau \qquad 1)$$

összefüggés irja le, ahol $K(x,t,\tau)$ adott függvény; (magfüggvény, pl. a folyamat Green függvénye) $0 \leq x \leq S$, $0 \leq \tau \leq t \leq T$.)

Legyen $Q_0(t)$ egy adott folytonos függvény, amely a rendszer kivánt, előirt állapotát irja le az x_0 pontban.

Tegyük fel, hogy a folyamatba a $t_i = i\,\Delta t$ $(i = 0,1,\ldots,n)$ pontokban tudunk beavatkozni $(\Delta t = \frac{T}{n})$ és bármely két pont közötti szakaszon vezérlésünk lineáris.

Az $U = \{u(t)\}$ "vezérlő tér" tehát legyen a $t_i = i\Delta t$ pontokban töréspontokkal rendelkező törtvonal sereg. A megengedett vezérléseket korlátozza még az

$$\int_0^T Q(x_0,t)\, \varrho(t)\, dt = A$$

feltétel is, ahol $\varrho(t) > 0$ adott függvény.

A vezérlés célját a

$$J\,(u(t)) = \int_0^T \left[Q_0(t) - Q(x_0,t)\right]^2 dt \qquad 2)$$

funkcionál irja le.

Feladat: határozzuk meg az U vezérlőtérnek azt az $u(t)$ elemét, amelyre a $J(u)$ funkcional szélsőértéket vesz fel.

<u>Tétel:</u>

A 2) funkcionál az U halmazon a

$$p^{*}(\tau, m_1, \ldots, m_n) = \begin{cases} m_j \tau + \Delta t \sum\limits_{\ell=1}^{j} c_\ell m_\ell & \text{ha } (j-1)\Delta t \le \tau \le j\Delta t \\ & \text{ahol } c_\ell = 1 \text{ ha } \ell \le j-1 \\ & \phantom{\text{ahol }} c_\ell = 1-j \text{ ha } \ell = j \\ 0 & \text{különben} \end{cases}$$

helyen minimumot vesz fel, ahol

$$m_1 = \frac{Q_0(i\Delta t) + \frac{\Delta t}{2}\varrho(i\Delta t) - \Delta t \sum\limits_{j=1}^{i} B_{ij} \sum\limits_{\ell=1}^{j-1} m_\ell - \sum\limits_{j=1}^{i-1} (A_{ij} + \Delta t\, B_{ij}) m_{j\,\ell}}{A_{ii} + \Delta t\, B_{ii}}$$

és

$$A_{ij} = \int\limits_{(j-1)\Delta t}^{j\Delta t} K(x_0, i\Delta t, \tau)\tau\, d\tau; \quad B_{ij} = \int\limits_{(j-1)\Delta t}^{j\Delta t} K(x_0, i\Delta t, \tau)\, d\tau$$

<u>Bizonyitás:</u>

Alkalmazzuk a Langrage féle multiplikátor módszert, azaz vegyük a

$$J^{(1)}(u) = \int_0^T \left[Q_0(t) - Q(x_0,t)\right]^2 + \mu\left[\int_0^T Q(x_0,t)\varrho(t)\,dt - A\right] \qquad 3)$$

funkcionált (ahol μ a Langrage féle multiplikátor).

Állitsuk elő a $t_i = i\Delta t$ $(i=1,\dots,n)$ pontokban töréspontokkal biró törtvonalsereget az alábbi módon:

$$P(\tau, m_1,\dots,m_n) = \begin{cases} m_j\tau + \Delta t \sum_{\ell=1}^{j} c_\ell\, m_\ell & \text{ha } (j-1)\Delta t \le \tau \le j\Delta t \\ & \text{ahol } c_\ell = 1 \text{ ha } \ell \le j-1 \\ & \phantom{\text{ahol }} c_\ell = 1-j \text{ ha } \ell = j \\ 0 & \text{különben} \end{cases}$$

Legyen $P^*(\tau, m_1,\dots,m_n)$ optimális megoldás. Legyen $\Delta P = P(\tau, \Delta m_1,\dots,\Delta m_n)$ megengedett variáció, azaz olyan, hogy a hozzátartozó $\Delta Q(x_0,t) = \int_0^t K(x_0,t,\tau)\,\Delta P\,d\tau$ megváltozásra

$$\int_0^T \Delta Q(x_0,t)\varrho(t)\,dt = A$$

legyen.

Vegyük a $P^*(\tau, m_1,\dots,m_n) + \lambda\Delta P$ változást és képezzük a

$$Q^{*}(x_0,t) + \lambda \Delta Q(x_0,t) = \int_0^t K(x_0,t,\tau)(P^{*} + \lambda \Delta P)d\tau$$

növekményt.

Mint ismeretes a 3) funkcionál szélsőértéke létezésének szükséges feltétele az első variáció eltünése, azaz, ha a 3) funkcionál szélsőértéket vesz fel a

$P^{*}(\tau, m_1, \ldots, m_n)$ vezérlésnek megfelelő $Q^{*}(x_0,t)$ helyen,

akkor

$$\frac{\partial}{\partial \lambda} J^{(1)}(Q^{*} + \lambda \Delta Q)\Big|_{\lambda=0} = 0$$

azaz:

$$\frac{\partial}{\partial \lambda}\Bigg[\int_0^T \Big\{Q_0(t) - \big[Q^{*}(x_0,t) + \lambda \Delta Q(x_0,t)\big]\Big\}^2 +$$

$$+ \mu [\varrho(t) \Big\{Q^{*}(x_0,t) + \lambda \Delta Q(x_0,t)]\Big\} dt - \mu A\Bigg]_{\lambda=0} = 0$$

vagyis:

$$\int_0^T \Big\{2\,[Q_0(t) - Q^{*}(x_0,t)] + \mu \varrho(t)\Big\}\Delta Q(x_0,t)\, dt = 0$$

Mivel $\Delta P(\tau, \Delta m_1, \ldots, \Delta m_n)$ tetszőleges volt, ezért $\Delta Q(x_0,t)$

tetszőleges megengedett variáció, és igy

$$2\,[\,Q_0(t) - Q^*(x_0,t)\,] + \mu\varrho(t) = 0$$

vagyis:

$$Q^*(x_0,t) = Q_0(t) + \frac{\mu}{2}\varrho(t) \qquad 4)$$

A μ multiplikátort abból a feltételből határozzuk meg, hogy

$$\int_0^T Q^*(x_0,t)\,\varrho(t)\,dt = A$$

$$\int_0^T \left(Q_0(t) + \frac{\mu}{2}\varrho(t)\right)\varrho(t)\,dt = A$$

ahonnan

$$\mu = 2\,\frac{A - \int_0^T Q_0(t)\,\varrho(t)\,dt}{\int_0^T \varrho^2(t)\,dt}$$

A 4) összefüggés egy Volterra tipusu integrálegyenletet ad $P^*(\tau, m_1,\dots,m_n)$ meghatározására:

$$\int_0^t K(x_0,t,\tau)\,P^*(\tau,m_1,\dots,m_n)\,d\tau = Q_0(t) + \frac{\mu}{2}\varrho(t)$$

Az integrálegyenlet a $t_i = i\Delta t$ töréspontokban

$$\int_0^{t_i} K(x_0, t_i, \tau)\, P^*(\tau, m_1, \ldots, m_n)\, d\tau = Q_0(t_i) + \frac{\mu}{2} \varrho(t_i)$$

illetve:

$$\sum_{j=1}^{i} \int_{(j-1)\Delta t}^{j\Delta t} K(x_0, i\Delta t, \tau)\, P^*(\tau, m_1, \ldots, m_n)\, d\tau =$$

$$= Q_0(i\Delta t) + \frac{\mu}{2} \varrho(i\Delta t)$$

egyenletbe megy át.

Beirva: $P^*(t, m_1, \ldots, m_n)$-ot; azt kapjuk, hogy:

$$\sum_{j=1}^{i} \int_{(j-1)\Delta t}^{j\Delta t} K(x_0, i\Delta t, \tau)\, (m_j \tau + \Delta t \sum_{\ell=1}^{j} c_\ell\, m_\ell)\, d\tau =$$

$$= Q_0(i\Delta t) + \frac{\mu}{2} \varrho(i\Delta t)$$

vagyis:

$$\sum_{j=1}^{i} m_j \int_{(j-1)\Delta t}^{j\Delta t} K(x_o, i\Delta\tau, \tau)\tau\, d\tau \; +$$

$$+ \sum_{j=1}^{i} \left(\Delta t \sum_{\ell=1}^{j} c_\ell m_\ell \int_{(j-1)\Delta t}^{j\Delta t} K(x_o, i\Delta t, \tau)\, d\tau \right) =$$

$$= Q_o(i\Delta t) + \frac{\mu}{2} \varrho (i\Delta t)$$

Vezessük be az

$$A_{ij} = \int_{(j-1)\Delta t}^{j\Delta t} K(x_o, i\Delta t, \tau)\tau\, d$$

$$B_{ij} = \int_{(j-1)\Delta t}^{j\Delta t} K(x_o, i\Delta t, \tau)\, d\tau$$

jelöléseket, akkor a következő egyenletrendszert irhatjuk fel az m_j paraméterekre:

$$\sum_{j=1}^{i} A_{ij} m_j + \Delta t \sum_{j=1}^{i} B_{ij} \sum_{\ell=1}^{j} c_\ell m_\ell = Q_o(i\Delta t) + \frac{\mu}{2} \varrho (i\Delta t)$$

A fenti egyenletrendszer igy is irható

$$\sum_{j=1}^{i} (A_{ij} + \Delta t\, B_{ij})\, m_j + \Delta t \sum_{j=1}^{i} B_{ij} \sum_{\ell=1}^{j-1} m_\ell =$$

$$= Q_0(i\Delta t) + \frac{\mu}{2}\, \varrho\,(i\Delta t)$$

Látható, hogy az egyenletrendszer mátrixa trianguláris, ezért az rekurzive megoldható, és igy

$$m_i = \frac{Q_0(i\Delta t) + \frac{\mu}{2}\varrho(i\Delta t) - \Delta t \sum_{j=1}^{i} B_{ij} \sum_{\ell=1}^{j-1} m_\ell - \sum_{j=1}^{i-1} (A_{ij} + \Delta t\, B_{ij}) m_j}{A_{ii} + \Delta t\, B_{ii}}$$

$$i = 1, 2, \ldots\ldots\ldots n$$

Könnyen belátható, hogy az 1) funkcionál (amennyiben felvesz szélsőértéket) minimumot vesz fel.

Ugyanis:

$$\int_0^T [\, f - (u + \Delta u)\,]^2\, dt = \int_0^T (f-u)^2\, dt + \int_0^T (f-u)\Delta u\, dt \int_0^T (\Delta u)^2\, dt$$

ahol Δu tetszőleges megengedett variáció.

De mivel

$$\int_0^T (f-u)\Delta u \, dt = 0$$

ezért

$$\int_0^T [f - (u + \Delta u)]^2 \, dt - \int_0^T (f-u)^2 \, dt = \int_0^T (\Delta u)^2 \, dt > 0$$

__Vezérlés parabolikus differenciálegyenlet esetén.__

Tegyük fel, hogy valamilyen folyamatot a

$$\frac{\partial q}{\partial t} = a \frac{\partial^2 q}{\partial x^2} \qquad 0 \leq t \leq t_1, \quad 0 \leq x \leq x_1 \qquad 5)$$

parabolikus differenciálegyenletet ir le, a

$$\left. \frac{\partial q}{\partial x} \right|_{x=x_1} = \alpha \left[u(t) - q(x_1, t) \right]$$

$$\left. \frac{\partial q}{\partial x} \right|_{x=0} = 0$$

$$q(x,0) = 0$$

perem, illetve kezdeti feltétel mellett (ahol α és a adott konstansok)

Legyen $u(t)$ vezérlőfüggvény, amelyre $\int_0^T u(t)dt = A$.

Legyen $q_o(t)$ egy adott függvény.

Legyen a célfüggvény

$$J(q) = \int_0^T \left[q_o(t) - q(x_o,t)\right]^2 dt$$

Feladat:

Keressük meg azt a $t_i = i\Delta t$ pontok $(\Delta t = \frac{T}{n},\ i = 0,1,2,\dots n)$ között lineáris vezérlő függvényt, amelyre a $J(q)$ funkcional minimumot vesz fel.

A feladat az ismertetett módszerrel megoldható. Ismeretes ugyanis, hogy az 5) differenciálegyenlet megoldása az adott peremfeltételek mellett

$$q(x,t) = \int_0^t \varphi(x,t,\tau)\, u(\tau)\, d\tau$$

alakban irható fel az $u(t)$ vezérlőfüggvénnyel.

<u>Irodalom:</u>

A.G. Butkovszkij: Teorija optimalnovo upravlenija szisztemami sz raszpredelitelnimi parametrami (Moszkva, Nauka, 1965).

Summary

A optimal control on a broken line set

The paper deals with the optimal control of such systems whose behaviour is described by the relationship

$$Q(x,t) = \int_0^t K(x,t,\tau)\, u(\tau) d\tau$$

where $u(\tau)$ plays the role of the control function. The U set of the control functions is a broken line set with breaking points in $t_i = i\Delta t$ $(i=1,2,\dots,n)$ points. The problem is to find that element of the U set for which the functional

$$J(u(t)) = \int_0^T \left[Q_0(t) - Q(x_0,t) \right]^2 dt$$

takes a minimum under conditions

$$\int_0^T Q(x_0,t) \varrho(t)\, dt = A$$

where $Q_0(t)$, and $\varrho(t)$ are given functions, and A is a given constans.

It was obtained as a result that on the U set the functional takes a minimum on:

$$P^{*}(\tau, m_1, \ldots, m_n) = \begin{cases} m_j \tau + \Delta t \sum\limits_{=1}^{j} c_\ell m_\ell \text{ when } (j-1)\Delta t \leq \tau \leq j \Delta t \\ \qquad \text{where } c_\ell = 1 \text{ when } \ell \leq j-1 \\ \qquad\qquad\quad c_\ell = 1-j \text{ " } \ell = j \\ 0 \qquad \text{otherweise} \end{cases}$$

where

$$m_i = \frac{Q_o(i\Delta t) + \frac{\mu}{2} \varrho(i\Delta t) - \Delta t \sum\limits_{j=1}^{i} B_{ij} \sum\limits_{=1}^{j-1} m_\ell - \sum\limits_{j=1}^{i-1} (A_{ij} + \Delta t B_{ij}) m_j}{A_{ii} + \Delta t\, B_{ii}}$$

and

$$A_{ij} = \int_{(j-1)\Delta t}^{j\Delta t} K(x_o, i\Delta t, \tau)\tau\, d\tau \,; \quad B_{ij} = \int_{(j-1)\Delta t}^{j\Delta t} K(x_o, i\Delta t, \tau)\, d\tau \,.$$

Bizonyos egyszerü tipusu sztochasztikus folyamatok numerikus szimulálása és paramétereinek becslése.

Arató Mátyás - Pásztorné Varga Katalin

Bevezetés.

Jelen dolgozat célja egyszerü tipusu időben és állapotban folytonos sztochasztikus folyamatok szimulálási kérdéseinek vizsgálata (speciálisan Ural-2 tipusu számológépen), s egyben ezen folyamatok bizonyos statisztikai kiértékelésének elvégzése is.

A végzett számitásoknak kettős célja volt, elsősorban előállitani olyan sztochasztikus folyamatokat, melyek konkrét fizikai tanulmányozásához igen költséges kisérleteket kellett volna elvégezni, másodsorban meg kivánjuk vizsgálni, hogy a különböző "véletlen szám" előállitási módszerek mennyiben felelnek meg a statisztikai követelményeknek.

Végül szerettünk volna előzetes becslést kapni bizonyos aszimptotikusan érvényes összefüggések érvényességi határairól is, melyeket analitikus uton jóval nehezebb megkapni. Analitikus vizsgálatok, becslések konvergenciájának gyorsaságára vonatkozóan független megfigyeléssorozatok esetén ismertek, hasonló tipusu vizsgálatokat nem független megfigyeléssorozatok esetére a szerzők nem ismernek.

Jelen vizsgálataink kapcsolódnak a [6,] [7] dolgozatokban felvetett problémakörhöz, annak bizonyos értelemben kiegészitését jelentik.

1. §. Véletlen szám előállitási módszerekről.

Alapvető feladatként rendszerint egy $[0,1]$ -ben vagy -1,1 -ben egyenletes eloszlásu $\xi_1, \xi_2, \ldots$ sorozat előállitása szokott jelentkezni. A megvalósitás különféle módszerei ismeretesek (lásd pl. [2]), gyakorlatilag azonban az egyes gépekre néhány utasitásból álló generálási módszert (melynek lehetőleg nagy a periodusa) szoktak kidolgozni. Az Ural-2 gépre egy ilyen eljárás a következő (lásd [3])

k+1	02	k+10	4	az előző véletlen szám szummátorba küldése
k+2	11	0003	0	eltolás balra 3 bittel
k+3	14	k+11	0	az első 20 bit megváltoztatása
k+4	26	k+10	0	az utolsó 20 bit megváltoztatása
k+5	10	k+10	0	(0,1) intervallumra redukálás
k+6	16	k+10	4	a véletlen szám kiküldése a rekeszbe
k+7	00	0000	0	kimenet
k+10		a_1		az előző véletlen szám
k+11		a_2		

(-1,1) intervallumbeli véletlen számokat a k+5 utasitás elhagyásával nyerünk. A program a k+1 -edik rekesznél kezdődik (k+1 páratlan). Ennek az eljárásnak a "jóságát" - a függetlenség figyelembevételére - éppen az ismertetésre kerülő u.n.

széria-korrelációs együttható segitségével is vizsgálat tárgyává tettük.

Általában az ilymódon előállitott sorozatoktól "teljes" függetlenséget szokás megkövetelni, ennek az ellenőrzése a magasabbrendü széria-korrelációk kiszámolásával valósitható meg. Mint látni fogjuk, ebből a szempontból a fenti módszer független változósorozatot állit elő, s ez az eljárás jóságát mutatja.

Megjegyezzük, hogy hiányzik valamilyen formában annak a természetes ténynek a bizonyitása (matematikai megfogalmazása), hogy az ilyen, lényegében "keveréseken" alapuló eljárások bizonyos értelemben a legjobbak, legalább is a sorozat tagjainak függetlenségét illetően.

Független Gauss-eloszlásu változók sorozatának előállitása.

Nem állt szándékunkban a Gauss-eloszlásu változók előállitására a lehető legjobb módszert kiválasztani, igy megelégedtünk k-darab (esetünkben $k=10$) független $[-1,1]$ -ben egyenletes eloszlásu változó összegének megfelelő normálásával /(0,1) paraméterü Gauss változókat állitottunk elő/, mégpedig olymódon, hogy a fenti - egyenletes eloszlásra szóló - eljárást ciklusban 10 véletlen szám előállitására alkalmaztuk.

2. §. Speciális Gauss folyamatok imitálása.

A $\xi(t)$, $t \in T$ paramétertől függő valószinüségi változók összességét, ahol T lehet egy $[a, b]$ intervallum vagy a $0, \pm 1, \pm 2, \ldots$ értékek összessége, sztochasztikus folyamatnak nevezzük. Gauss vagy normális folyamatnak nevezzük $\xi(t)$ -t, ha tetszőleges véges n és $t_1, t_2, \ldots, t_n$ paraméterértékekre a $\xi(t_1), \xi(t_2), \ldots, \xi(t_n)$ változók többdimenziós Gauss (vagy normális) eloszlásuak. A $\xi(t)$ folyamatot stacionáriusnak nevezzük (tágabb értelemben), ha

$$M\,\xi(t) = m$$

és az

$$M(\xi(t)-m)(\xi(s)-m) = B(t,s)$$

kovariancia függvény csak $t-s$ -től függ, azaz $B(t,s) = B(t-s)$. Szükebb értelemben stacionáriusnak nevezzük a $\xi(t)$ folyamatot, ha $\{\xi(t_1+k), \ldots, \xi(t_n+k)\}$ és $\{\xi(t_1), \ldots, \xi(t_n)\}$ eloszlása megegyezik, tetszőleges $t_1, \ldots, t_n$ és h esetén. Gauss folyamatoknál a két definició egybeesik, mivel Gauss folyamatot az

$$m(t) = M\,\xi(t)$$

középértékfüggvény és a $B(s,t)$ kovarianciafüggvény egyértelmüen meghatározza.

A hiradástechnikában gyakran jóval kényelmesebb egy Gauss folyamatot kovariancia függvénye helyett spektrál eloszlásával (vagy spektrál sürüségfüggvényével) megadni.

Definició szerint:

$$F(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} R(\tau)\, e^{-i\omega}\, d\tau$$

és

$$f(\omega) = \frac{dF(\omega)}{d\omega} \qquad \text{(ha létezik).}$$

(Az $F(\omega) = \text{const.}$ felelne meg az un. "fehér zaj" folyamat spektrál eloszlásának.)

Ha $f(\omega) = \frac{\left|P(i\omega)\right|^2}{\left|Q(i\omega)\right|^2}$ a $\xi(t)$ sztochasztikus folyamat eleget tesz a $Q(D)\,\xi(t) = P(D)E(t)$ sztochasztikus differenciálegyenletnek (P és Q polinómok, Q fokszáma $(n > m)$ nagyobb mint P-é), ahol D a differenciális szimbóluma. Az $E(t)$ folyamat m-szer differenciálható négyzetes középben, és ekkor a fenti egyenletnek tekintjük az egyetlen stacionárius megoldását - mely létezik, ha $Q(i\omega)$ -nak nincs valós gyöke.

A továbbiakban azzal a kérdéssel kivánunk foglalkozni, hogy miképen szimulálhatóak a fenti folyamatok digitális számológépeken? Az első feladat a fenti egyenletnek differencia egyenletté való átirása megadott h lépésköz esetén. (Azaz a $\xi(o), \xi(h), \ldots$ folyamat előállitása differencia egyenlet segitségével.)

A legegyszerübb esetben, amikor $P(i\omega) = \frac{\sigma_\xi^2}{2\pi}$, $Q(i\omega) = \lambda^2 + \omega^2$ ismeretes, hogy a

$$d\xi(t) = -\lambda\xi(t)dt + d\mathcal{E}(t)$$

(ahol $\mathcal{E}(t)$ a Wiener folyamat) sztochasztikus differencia-egyenletnek eleget tevő Gauss folyamat egyben Markov tipusu is. Ennek a folyamatnak az imitálása s egyben az ismeretlen λ paraméter becslése (ill. a különböző becslések vizsgálata) a jelen dolgozat alapvető célkitüzése, de egyben rá szeretnénk mutatni az általunk alkalmazott módszer kiterjesztési lehetőségeire is.

A $\xi(o), \xi(h), \ldots, \xi(k.h), \ldots$ folyamat ugyancsak Markov és stacionárius-Gauss tipusu, igy (lásd Doob [5]) eleget tesz a

$$\xi(n.h) - \alpha\,\xi((n-1)h) = \mathcal{E}(n.h)$$

differenciaegyenletnek, ahol $\alpha = e^{-\lambda.h}$. Az α (ill. λ) paraméter becslésének problémái megvizsgálhatóak, ha generáljuk az egymástól független $\mathcal{E}(n\ h)$ Gauss eloszlásu változókat s a kiindulási $\xi(0)$ változót. Ugyanis

$$\xi(1) = \alpha\xi(o) + \mathcal{E}(1), \quad \xi(2) = \alpha\,\xi(1) + \mathcal{E}(2), \ldots$$

$\lambda = 0{,}1$ és $h = 0{,}1$ esetén $\alpha \sim 0{,}99$, tehát gyakorlatilag bennünket elég sürü beosztásu időintervallum esetén α -nak 1-hez, közeli értékei érdekelnek (természetesen negativ értékekre is stacionárius marad a folyamat). Az ilyen tipusu vizsgálatokra térünk ki a következő pontban.

Hogy ilyen irányu kisérletekre már számológépek nélkül is gondoltak, azt mutatja Quemille [4] könyve.

3. §. Az elégséges statisztikák jelentősége és a becslések milyensége.

1. Ismeretes, hogy bizonyos értelemben a maximum likelihood becslések legjobbak, ehhez azonban szükség van a likelihood függvény felirására. Feltéve, hogy a $\xi(t)$ stacionárius Gauss-Markov folyamat $M\xi(t) = m$ várható értéke is ismeretlen a $\xi(o), \xi(1), \dots, \xi(n)$ változók együttes sürüségfüggvénye (lásd [6], [7])

$$f_{\xi(o),\dots,\xi(n)}(x_o,\dots,x_n) = (2\pi)^{-(n+1)}\sigma_\xi^{-(n+1)}(1-\alpha^2)^{-\frac{n}{2}} \cdot$$

$$\cdot \, e^{-\frac{1}{2\sigma_\xi^2(1-\alpha^2)}\left[(x_o-m)^2(1-\alpha^2) + \sum_1^n (x_i - x_{i-1}-m(1-\alpha))^2\right]}$$

alaku, ahonnan látható, hogy a

$$\tilde{m}_1 = \xi(o) + \xi(n), \quad \tilde{s}_1 = \xi^2(o) + \xi^2(n), \quad \tilde{m}_2 = \sum_o^n \xi(i)$$

$$\tilde{s}_2 = \sum_o^n \xi^2(i), \quad \tilde{s}_{12} = \sum_1^n \xi(i)\,\xi(i-1)$$

mennyiségek elégséges statisztikát alkotnak. Ez számitástechnikailag azt jelenti, hogy az m és α ismeretlen paraméterek szekvenciális becsléséhez a memóriában nincs szükség az egész folyamat, hanem csak ennek az 5 mennyiségnek egy-egy rekeszben történő tárolása (ez pedig amennyiben n értéke 100-as ill. 1000-es nagyságrendü) jelentős előnyt jelent.

A

$$\frac{\partial f}{\partial m} = 0, \quad \frac{\partial f}{\partial \alpha} = 0$$

maximum likelihood egyenletrendszer az $\hat{m}_2$ és $\hat{\alpha}_2$ becslésekre, a következő alaku lesz:

$$\hat{m}_2 = \frac{\hat{\alpha}_2 \tilde{m}_1 + (1-\hat{\alpha}_2)\tilde{m}_2}{2\hat{\alpha}_2 + n(1-\hat{\alpha}_2)}$$

$$\hat{\alpha}_2 = (1-\hat{\alpha}_2^2)\left\{\hat{\alpha}_2 \cdot \tilde{A} + \tilde{B}\right\}$$

ahol

$$\tilde{A} = \tilde{s}_1 - 2\,\hat{m}_2\,\tilde{m}_1 - \tilde{s}_2 + 2\,\hat{m}_2\,\tilde{s}_1 - (n-1)\,(\hat{m}_2)^2$$

$$\tilde{B} = \tilde{s}_{12} - 2\,\hat{m}_2\,\tilde{m}_2 + \hat{m}_2\,\tilde{m}_1 + n\,(\hat{m}_2)^2$$

A 2-es index használatát a maximum likelihood becslésekre az teszi indokolttá, hogy $\hat{m}_0$, $\hat{\alpha}_0$ jelöli az egyszerü számtani közép és széria korreláció alapján kapott becsléseket, azaz

$$\hat{m}_o = \frac{1}{n+1}\tilde{m}_1$$

$$\hat{\alpha}_o = \frac{\tilde{s}_{12} - 2n(\hat{m}_o)^2 + \hat{m}_o \cdot m_1}{\tilde{s}_2 - \xi_n^2 - 2n - (\hat{m}_o)^2 + 2\hat{m}_o \cdot \xi(n)}$$

Másrészt a $\xi(o) = x_o$ feltétel melletti feltételes sűrűségfüggvényből adódó maximum likelihood becsléseket $\hat{m}_1$, $\hat{\alpha}_1$ jelöléssel

$$\hat{m}_1 = \frac{\xi(n) - \xi(1) + (1-\hat{\alpha}_1)\,\tilde{m}_2}{(n+1)\,(1-\hat{\alpha}_1)}$$

(vegyük észre, hogy $\hat{m}_1$, $\hat{\alpha}_1$ és $\hat{m}_o$, $\hat{\alpha}_o$ becsléseiben külön-külön is szükség van a $\xi(o)$, $\xi(n)$ és $\xi^2(o)$, $\xi^2(n)$ értékekre).

2. A kapott becslések értékelése.

Az első megjegyzés a becslésekre vonatkozóan az, hogy $\alpha < 1/2$ értékek esetén $n \geq 100$-tól a három becslésének viselkedése nem mutat lényeges eltérést, m jól becsülhető, amennyiben abszolut értékben kicsi, viszont a nagy értékei esetén $\hat{\alpha}_o$ becslés nem megfelelő.

1-hez közeli α értékekre $\hat{m}_o$ csak igen nagy n mértékek esetén lesz jó becslés, viszont $\hat{\alpha}_o$ teljesen rossz becslés.

Az $\hat{m}_1, \hat{\alpha}_1$ becslések - amint az várható is - viselkedése hasonló az $\hat{m}_2, \hat{\alpha}_2$ becslések viselkedéséhez.

Az $\hat{\alpha}_2$ becslések mindig jók s a jó közelités $m(1-\hat{\alpha}_2^2) \sim \sim c$-nél (ahol $c \sim 10$) kezdődik (ez elméletileg is várható a c konstansra azonban előzetes becslés nem volt ismeretes). Ugyanilyen határtól kezdve lesznek jók az m_2 becslések is. Lényeges tulajdonsága $\hat{\alpha}_2$ -nek, hogy nem lesz 1 tehát inkább - még α nagy értékeire is - alulról ad becslést.

Ismert m esetén α -becslése egyszerübb feladat (a megfelelő képleteket nem irjuk ki) mindössze az eredmények értékelésére szoritkozunk.

Ismert m(+o) esetén az ismeretlen α -paraméterre a

$$\alpha_o^* = \frac{\sum_1^n \xi(i)\xi(i-1)}{\sum_o^{n-1} \xi^2(i)}, \quad \alpha_1^* = \frac{\sum_2^n \xi(i)\xi(i-2)}{\sum_1^{n-1} \xi(i)\xi(i-1)},$$

$$\alpha_2^* = \frac{\sum_3^n \xi(i)\,\xi(i-3)}{\sum_2^{n-1} \xi(i)\,\xi(i-2)}$$

becsléseket használva szemléltetés céljából bemutatunk n=5-től n=20-ig becsléseket, különböző α értékekre (lásd az 1-es mellékletet).

(Az adatok 8-as számrendszerben szerepelnek.)

A bemutatott becslések illusztrálják azt a megállapitást, hogy α_1^* és α_2^* figyelembevétele a becslések jóságán semmit sem javit. Ugyancsak látható, hogy α -tól függően változik a becslés jósága: kis n értékekre 10-es nagyságrendü "megfigyelés szám" esetén α-nak 1-hez (vagy-1-hez) közeli értékei egyáltalán nem becsülhetőek megbizhatóan. Erről tanuskodik a szekvenciálisan végzett becsléssorozat, mely módszer egyrészt meggyőzően bizonyitja a becslések ingadozását, de ezen tulmenően módszert szolgáltat a szükséges megbizható megfigyelésszám keresésre is, ezt a módszert a későbbiekben ki kivánjuk részleteiben is dolgozni. α kis értékeire a becslések megbizhatósága közel áll a független esethez.

Az (m,α) ismeretlen paraméterek becslésére a következő eredményeket kaptuk (lásd 2-es sz. melléklet).

A bemutatott példák egyszerü áttekintése felvilágositást nyujt a becslések milyenségének változásáról. Ebben az irányban kivánunk a későbbiekben a megfigyelések értékelési módszereivel - bonyolultabb rendszerek esetén is - foglalkozni. Az általunk használt eljárás ALGOL-ban megirt programját ismertetjük még az alábbiakban.

Idézett irodalom:

[1] J.N. Franklin: Numerical Simulation of Stationary and Nonstationali Gaussian Random Processes. SIAM Rev. 7 (1965) No 1. 68-80.

[2] D.I. Golenko: Modelirovanije i statisticeskij analiz prevdoslu cainüh cisel na E.V.M. Nauka (1965).

[3] A.Ju.Birkgan, G.P. Voskpesenskij: Programmirovanije dlja C.V.M. URAL-2 Sovjetskoje Radio (1962)

[4] M.H. Quenouille: The analysis of multiple time series, London, 1957.

[5] J.L. Doob: The elementary Gaussian processes, Ann. Math. Stat. 15. (1944) 229-281.

[6] Arató M.: Folytonos állapotu Markov-folyamatok statisztikai vizsgálatáról I. MTA III. Oszt. Közleményei (1964) 13-34.

[7] Arató M.: -"- IV. u.o. (1965) 107-124.

```
procedure (a,m,b,r,v)' value a,m,r' real a,m' integer r'
  real array b' procedure v'
comment v(z,n) eljaaraas n db. a (-1,1)-ben egyenletes eloszlaasu
  veeletlen szaamot generaal a z vektorban.
  az a,m parameetereket becsli haarom moodszerrel.
  stacionaarius aallapot eleereese ceeljaabool eloebb 100, a
  becsleeshez fel nem hasznaalt vaaltozoo eerteeket aallitunk
  eloe, majd a becslees 100-ankeent folyamatosan toerteenik r-ig'
begin real u' real array x[1:10], v, s[1:3], y[1,2]'
  integer i,k,l,t' y[2]:=0'
for i:=-1,0,i while i_r do begin for l:=1 step 1 until 100 do
begin v(x,10)' u:=0' for k:=1 step 1 until 10 do u:=u+x[k]'
y[1]:=y[2]' y[2]:=u□sqrt (0.3)' if i=-1 then go to c'
y[2]:=a□y[1]+m□(1-a)+y[2]' if i=0 then begin i:=i+1'
s[1]:=s[1]+y[2]' v[3]:=y[2]□2' s[2]:=s[2]+v[3]' s[3]:=s[3]+y[1]□y[2]
end
end if i=0 then begin i:=i+1' v[1]:=s[1]:=y[2]' v[2]:=s[2]:=y[2]□2'
s[3]:=0' go to c end'
begin real array m,a[1:3]' real no, am1, am2'
comment az alaabbi haarom becslees eredmeenye az a,m[1:3]-ban lesz'
m[1]:=s[1]i'
a[1]:=(s[3]-2□(i-1)□m[1]□2+m[1]□(v[1]+y[2]))/(s[2]-v[3]-2□(i-1)
-m[1]□2+2□m[1]□y[2])'
a[2]:=a[1]'
for k:=1 step 1 until 10 do begin m[2]:=(y[2]-v[1]+(1-a[2])□s[1])
/((i-1)□(1-a[2]))'
a[2]:=(s[3]-2□m[2]□s[1]+(1-1)m[2]□2+m[2]□(v[1]+y[2]))/
(s[2]-v[3]-2□m[2]□s[1]+2□m[2]□y[2]+(i-1)m[2]□2) end
a[3]:=am1:=0' am2:=1'
for k:=1 step 1 until 15 do begin
m[3]:=(a[3]□(v[1]+y[2])+(1-a[3])□s[1]/(2□a[3]+i(1-a[3]))'
for
```

```
no:=a(3)-(1-a(2)□2)□a(3)□(v(2)+v(3)-2□m(3)□(v(1)+y(2))-s(2)+2□m(3)□
s(1)-(i-2)□m(3)□2)+s(3)-2□m(3)□s(1)+m(3)□(v(1)+y(2))+(1-1)□m(3)□2
while no_2□-20 do begin if no 0 then begin aml:=a(3)'
a: a(3):=(aml+am2)/2 end else if a(3)=0 then begin
a(3):=-1' go to   end' comment nincs gyoek'
else begin am2:=a(3)' goto a end end end'
 : b(i,1):=i' b(i,2):=m(1)' b(i,3):=a(1)' b(i,4):=m(2)'
b(i,5):=a(2)'
b(i,6):=m(3)' b(i,7):=a(3) end'
c: end end'
0
```

1.sz. kiegészités

$\alpha = -0,35$

n	α_2^*	α_1^*	α_0^*
5	0,457(4)	-0,563(-3)	-0,611(-1)
6	0,701(4)	-0,66(-1)	-0,65(-1)
7	0,50(2)	-0,50(-1)	-0,57(-1)
8	0,54(2)	-0,67(-1)	-0,54(-1)
9	0,77(1)	-0,62(-1)	-0,56(-1)
10	0,54(2)	-0,44	-0,70(-1)
11	0,45(1)	-0,62	-0,55
12	0,53	-0,60(-1)	-0,70(-1)
13	0,63(1)	0,65(-2)	-0,70(-1)
14	-0,71(2)	0,65(-2)	-0,64(-1)
15	-0,71(2)	-0,53(-2)	-0,70(-1)
16	0,65(2)	-0,56(-2)	-0,66(-1)
17	0,51(2)	-0,53(-1)	-0,71(-1)
18	0,46(1)	-0,51(-1)	-0,67(-1)
19	0,42(1)	-0,57(-1)	-0,67(-1)
20	0,54(1)	-0,53(-1)	-0,65(-1)
1000	-0,40	-0,63(-1)	-0,67(-1)

$\alpha = -0,3$

5	0,70(-1)	-0,77(-4)	-0,66(-1)
6	0,53(4)	-0,74(-4)	-0,56(-1)
7	0,56(4)	-0,60(-5)	-0,54(-1)
8	0,47(5)	-0,73(-5)	-0,54(-1)
9	0,54(5)	-0,51(-4)	-0,54(-1)
10	0,77(4)	-0,67(-5)	-0,70(-1)
11	0,61(5)	-0,65(+1)	-0,43
12	-0,54(-3)	-0,52(0)	-0,52
13	-0,48(-3)	-0,75(-1)	-0,43

14	0,47(-2)	-0,53(-1)	-0,42
15	-0,57	-0,56(-1)	-0,73(-1)
16	-0,54	-0,63(-1)	-0,64(-1)
17	-0,56	-0,57(-1)	-0,64(-1)
18	-0,43	-0,57(-1)	-0,64(-1)
19	-0,43	-0,56(-1)	-0,63(-1)
20	-0,45	-0,60(-1)	-0,63(-1)
1000	-0,52(-2)	-0,46(-1)	-0,63(-1)

$\alpha = +0{,}777$

5	-0,41	0,64(-1)	0,46
6	-0,77	0,40	0,52
7	-0,63(-1)	0,45	0,54
8	0,63(-4)	0,51	0,55
9	0,60(-1)	0,57	0,61
10	0,52	0,66	0,67
11	0,46	0,58	0,60
12	0,46	0,56	0,60
13	0,44(1)	0,70	0,64
14	0,42(1)	0,68	0,64
15	0,43(1)	0,42(1)	0,74
16	0,41(1)	0,41(1)	0,74
17	0,41(1)	0,41(1)	0,75
18	0,43(1)	0,42(1)	0,40(1)
19	0,45(1)	0,44(1)	0,42(1)
20	0,46(1)	0,45(1)	0,44(1)
1000	0,77717	0,77712	0,77705

$\alpha = -0,77$

5	0,42(3)	-0,57	-0,57(-2)
6	0,60	-0,54(1)	-0,65(-2)
7	-0,47(1)	-0,58(1)	-0,51(-1)
8	-0,43(1)	-0,44(1)	-0,61(-1)
9	-0,44(1)	-0,46(1)	-0,72(-1)
10	-0,64	-0,77	-0,67(-1)
11	-0,47	-0,57	-0,64(-1)
12	-0,53	-0,60	-0,63(-1)
13	-0,41	-0,43(1)	-0,71(-1)
14	-0,48	-0,42(1)	-0,43
15	-0,53	-0,45(1)	-0,52
16	-0,75(-1)	-0,70	-0,45
17	-0,41	-0,71	-0,45
18	-0,71(-1)	-0,68	-0,44
19	-0,57(-1)	-0,63	-0,45
20	-0,41(-1)	-0,64	-0,55
1000	-0,770	-0,771	-0,770

(zárójelben 2 hatványa szerepel)

2. sz. kiegészités

$m = 0 \qquad \alpha = 0,25$

	$\hat{m}_1$	$\hat{m}_2$	$\hat{m}_3$	$\hat{\alpha}_1$	$\hat{\alpha}_2$	$\hat{\alpha}_3$
u = 100	0,033	0,033	0,033	0,186	0,195	0,176
u = 200	-0,0002	-0,0004	-0,0006	0,184	0,184	0,174
u = 300	-0,0172	-0,0189	-0,0187	0,191	0,195	0,187
u = 500	0,0108	0,0100	0,0107	0,276	0,276	0,271
u = 1000	-0,0040	-0,0044	-0,0040	0,271	0,271	0,271
u = 3000	0,0033	0,0031	0,0033	0,245	0,245	0,244

$m = 0 \qquad \alpha = 0,5$

	$\hat{m}_1$	$\hat{m}_2$	$\hat{m}_3$	$\hat{\alpha}_1$	$\hat{\alpha}_2$	$\hat{\alpha}_3$
u = 100	-0,0302	-0,0267	-0,0308	0,572	0,574	0,525
u = 200	-0,0363	-0,0369	-0,0374	0,487	0,493	0,469
u = 300	-0,0160	-0,0145	-0,0161	0,511	0,512	0,496
u = 500	-0,0070	-0,0062	-0,0071	0,498	0,498	0,489
u = 1000	-0,0128	-0,0124	-0,0129	-0,525	0,526	0,521
u = 3000	-0,0199	-0,0196	-0,0198	0,526	0,528	0,528

$m = 0 \qquad = 0,998$

	$\hat{m}_1$	$\hat{m}_2$	$\hat{m}_3$	$\hat{\alpha}_1$	$\hat{\alpha}_2$	$\hat{\alpha}_3$
u = 100	2,123	2,232	2,092	1,01	0,875	0,875
u = 200	2,776	2,966	2,733	1,008	0,936	0,936
u = 300	3,264	3,471	3,189	1,006	0,955	0,955
u = 500	2,936	2,904	2,738	1,006	0,966	0,966
u = 1000	2,362	2,330	2,230	1,016	0,982	0,982
u = 3000	1,214	1,236	1,243	0,992	0,993	0,993
u = 5000	3,495	3,390	3,134	0,990	0,997	0,997
u = 10000	0,139	-0,101	0,109	0,998	0,998	0,998

	$\hat{m}_1$	$\hat{m}_2$	$\hat{m}_3$	$\hat{\alpha}_1$	$\hat{\alpha}_2$	$\hat{\alpha}_3$
n = 100	-2,61	-4,74	-2,38	1,006	1,00	0,926
n = 200	-3,00	-3,50	-3,05	1,005	0,977	0,951
n = 300	-4,60	-3,81	-5,69	0,996	0,999	0,989
n = 500	-6,89		-6,45	1,000	1,000	0,991
n = 1000	-9,28	-9,28	-7,26	1,000	0,998	0,995
n = 3000	-0,16	1,48	-0,16	0,999	0,999	0,998
n = 5000	-2,88	-4,67	-3,45	0,999	0,999	0,998

$m = 10$ $\alpha = 0{,}125$

	m_1	m_2	m_3	$\hat{\alpha}_1$	$\hat{\alpha}_2$	$\hat{\alpha}_3$
n = 100	10,06	10,15	10,05	1,00	0,309	0,256
n = 200	9,99	10,05	9,99	1,00	0,276	0,248
n = 300	10,00	10,04	10,00	1,000	0,205	0,191
n = 500	9,98	9,99	9,98	1,00	0,167	0,161
n = 1000	9,97	9,98	9,97	1,00	0,092	0,090
n = 3000	10,	10,	10,	0,10	0,114	0,114

$m = 10$ $\alpha = 0{,}25$

	$\hat{m}_1$	$\hat{m}_2$	$\hat{m}_3$	$\hat{\alpha}_1$	$\hat{\alpha}_2$	$\hat{\alpha}_3$
100	9,89	9,98	9,89	1,00	0,129	0,703
200	9,96	10,0	9,96	1,00	0,224	0,198
500	9,97	9,99	9,97	1,00	0,233	0,227
1000	9,98	9,99	9,98	1,	0,264	0,261
3000	10,00	10,00	10,00	1,00	0,232	0,231

m = 10; $\alpha = 0,5$

n	$\hat{m}_1$	$\hat{m}_2$	$\hat{m}_3$	$\hat{\alpha}_1$	$\hat{\alpha}_2$	$\hat{\alpha}_3$
100	9,99	10,09	9,98	1,00	0,496	0,415
200	10,01	10,07	10,02	1,00	0,503	0,472
300	10,00	10,04	10,00	1,00	0,497	0,479
500	9,99	10,00	9,99	1,00	0,507	0,497
1000	9,99	10,00	9,99	1,00	0,518	0,513
3000	9,98	9,98	9,98	1,00	0,525	0,524
5000	9,98	9,98	9,98	1,00	0,520	0,519

m = 10; $\alpha = 0,875$

100	10,17		10,19	1,00	1,00	0,806
200	10,04	10,12	10,05	1,0	0,872	0,806
300	10,06	10,10	10,06	1,00	0,858	0,836
500	10,04	10,07	10,05	1,00	0,864	0,849
1000	9,96	9,98	9,96	1,00	0,880	0,841
3000	9,98	9,99	9,98	1,00	0,880	0,878
5000	10,03	10,03	10,02	1,00	0,869	0,868

m = 10; $\alpha = 0,998$

100	7,60	-7,79	7,73	1,00	1,00	0,970
200	8,74	-5,30	8,61	1,00	1,00	0,975
300	8,59	-11,13	8,25	1,00	1,00	0,972
500	8,63	-9,05	8,25	1,00	1,00	0,971
1000	8,52	-4,88	8,86	1,00	1,00	0,989
3000	6,83	8,12	7,17	1,00	0,998	0,996
5000	9,44	9,54	8,98	1,00	0,998	0,997
10000	9,90	10,99	10,14	1,00	0,999	0,998

m =-10; α= 0,998

100	-3,94	-3,96	-3,93	1,00	0,854	0,798
200	-4,41		-4,52	1,00	1,00	0,933
300	-4,51	-4,59	-4,50	1,00	0,948	0,927
500	-5,25	-5,48	-5,27	1,00	0,972	0,959
1000	-8,65	10,80	-8,50	1,00	1,00	0,994
2000	-10,17	-10,33	-10,18	1,00	0,980	0,977
12000	-10,09	-10,10	-10,07	1,00	0,985	0,985
17000	-9,44	-9,89	-9,51	1,00	0,998	0,998

m = 10; α= 0,9994

100	3,27	-15,85	3,67	1,00	1,00	0,9766
200	4,92	-4,86	4,55	1,00	1,00	0,9806
300	5,31	5,84	5,45	1,00	0,9888	0,9813
500	4,26	11,00	3,24	1,00	1,00	0,9871
1000	3,46	3,43	3,20	1,00	0,9912	0,9856
2000	8,05	7,88	5,87	1,00	0,9978	0,99596
5000	9,23	8,64	7,70	1,00	0,99889	0,99795
10000	-0,893	-4,68	-1,79	0,99965	0,99965	0,99918
12000	-2,01	-5,66	-2,76	0,99963	0,99965	0,99922

Summary

Numerical simulation of some stochastic processes of simple type and the estimation of its parameters

The aim of the present paper is the examination of the simulation problems (especially on the computer Ural-2) of some stochastic processes of simple type and at the same time the statistical analysis of these processes.

The computations had double aim: to produce stochastic processes imitativy physical processes the direct examination of which is too expensive; on the othern hand we wished to examine, how the different methods to produce pseudo-random numbers meet the statistical requirements.

At last we wished to get estimates of the validity bounds ot some asymptotic relations too hard to examine analytically. Analytical examinations for the speed of the convergence of estimates in the case of a series of indepent observations are well-known but similar examinations for the case of dependent observations are not known to the authors.

Present examinations are related to the problems, raised in papers [6], [7] and are in some sens their complements.

Optimális vezérlés a telegráf egyenlet esetén peremfeltétellel

Szelezsán János

Tegyük fel, hogy egy folyamatot a

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + 2a \frac{\partial u}{\partial t} + bu - c^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0 \qquad 1/$$

$$0 < x < \pi \quad , t > 0$$

parciális differenciálegyenletet ir le, az alábbi feltételekkel:

$$u\,(0,t) = u\,(\pi,t) = 0$$

$$u\,(x,0) = 0$$

$$\frac{\partial u}{\partial t}\,(x,0) = f(x)$$

ahol a, b, c, pozitiv konstansok.

Tekintsük a

$$J\,(f) = \int_0^{\pi} \left[\, q(x) - u(x,t_o) \right]^2 dx \qquad 2/$$

funkcionált, ahol $q(x)$ egy adott függvény.

Legyen az F halmaz a következő függvényhalmaz

$$F = \left\{ f(x) : \int_0^{\pi} u(x,t_o) \varrho\,(x)\, dx = A \right\} \qquad 3/$$

Feladat: Keressük meg az F halmaznak azt az elemét, amelyre a 2/ funkcionál minimumot vesz fel.

Tétel:

Tegyük fel, hogy $q(x)$ és $\varrho(x)$ korlátos, és folytonos $(0 \leq x \leq \pi)$, és tegyük fel, hogy a feladatnak egyetlen megoldása létezik. Akkor a megoldás:

$$f(x) = q(x) + \frac{\lambda}{2}\varrho(x)$$

ahol

$$\lambda = \frac{A\pi - 2\sum_{n=1}^{\infty} T_n(t_o)\int_0^{\pi}\left(\int_0^{\pi} q(x)\sin nx\,dx\right)\sin nx\,dx}{\sum_{n=1}^{\infty} T_n(t_o)\int_0^{\pi}\left(\int_0^{\pi}\varrho(x)\sin nx\,dx\right)\sin nx\,dx}$$

Bizonyitás:

Ismeretes [I], hogy az 1/ differenciálegyenlet megoldását az adott peremfeltételek mellett

$$u(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} b_n T_n(t)\sin nx \qquad 4/$$

adja, ahol

$$b_n = \frac{2}{\pi}\int_0^{\pi} f(x)\sin nx\,dx$$

és

$$T_n(t) = \begin{cases} e^{-at}\,(a^2 - b - n^2c^2)^{-\frac{1}{2}}\ \mathrm{sh}\,(a^2-b-n^2c^2)^{\frac{1}{2}}\,t & \text{ha } n^2c^2 < a^2-b \\ te^{-at} & \text{ha } n^2c^2 = a^2-b \\ e^{-at}\,(n^2c^2 + b - a^2)^{-\frac{1}{2}}\ \sin\,(n^2c^2 + b - a^2)^{\frac{1}{2}}\,t & \text{ha } n^2c^2 > a^2 - b \end{cases}$$

Mint látjuk az $f(x)$ vezérlő függvény a b_n együtthatókban szerepel; ezért a 2) funkcionál minimumát eredményező $f(x)$ függvény meghatározását az alkalmas b_n együtthatók meghatározására vezetjük vissza.

Vegyük a 4/ végtelen sor részletösszegét a t_o pontban

$$u^{(N)}(x,t_o) = \sum_{n=1}^{N} b_n\,T_n\,(t_o)\sin n\,x$$

Erre a részösszegre vonatkozóan a funkcionál

$$J^{(N)}(f) = \int_0^{\pi}\Big[q(x) - \sum_{n=1}^{N} b_n\,T_n\,(t_o)\sin nx\Big]^2\,dx$$

lesz. A feltétel alakja

$$\int_0^{\pi} \varrho(x)\sum_{n=1}^{N} b_n\,T_n(t_o)\sin nx\;dx = A$$

Tekintsük a $J^{(N)}(f)$ funkcionált a $b_1,\dots,b_N$ együtthatók függvényeként. Alkalmazzuk a Lagrange multiplikátoros módszert, vagyis keressük a

$$J^{(N)}(b_1,\dots,b_N,\lambda) = \int_0^{\pi} \left[q(x) - \sum_{n=1}^{N} b_n T_n(t_o) \sin nx\right]^2 dx +$$

$$+\lambda\left(\int_0^{\pi} \sum_{n=1}^{N} b_n T_n(t_o) \sin nx\, dx - A\right)$$

függvény minimumát a $b_1,\dots,b_N$ együtthatókra vonatkozóan. A szélsőértékre vonatkozó szükséges feltétel szerint a $b_1,\dots,b_N$ együtthatókra teljesülni kell az alábbi egyenlőségeknek:

$$\frac{\partial J^{(N)}(b_1,\dots,b_N,\lambda)}{\partial b_i} = 0; \quad i=1,2,\dots,N$$

$$\frac{\partial J^{(N)}(b_1,\dots,b_N,\lambda)}{\partial \lambda} = 0$$

azaz

$$2\int_0^{\pi}\left[q(x)-\sum_{n=1}^{N} b_n T_n(t_o)\sin nx\right] T_i(t_o)\sin ix\,dx +$$

$$+\lambda\int_0^{\pi} T_i(t_o)\,\varsigma(x)\sin ix\,dx = 0 \qquad i=1,2,\dots,N$$

és

$$\int_0^{\pi}\sum_{n=1}^{N} b_n T_n(t_o)\sin nx - A = 0 \qquad 5/$$

Az integrálásokat tagonként végezve, és figyelembe véve, hogy

$$\int_0^{\pi}\sin nx\ \sin ix = \begin{cases} 0 & \text{ha } n \neq i \\ \frac{\pi}{2} & \text{ha } n = i \end{cases}$$

valamint feltéve, hogy $T_i(t_o) \neq 0$ a következőket kapjuk:

$$2\int_0^{\pi} q(x)\sin ix\,dx - 2\,\frac{\pi}{2}\,b_i + \lambda\int_0^{\pi}\varsigma(x)\sin ix\,dx = 0$$

azaz

$$\frac{2}{\pi}\int_0^{\pi}\left(q(x)+\frac{\lambda}{2}\varsigma(x)\right)\sin ix = b_i^{(N)} \qquad i=1,2,\dots,N$$

A kapott $b_i^{(N)}$ -ket helyettesitsük be 5/-be

$$\int_0^{\pi} \sum_{n=1}^{N} \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi} \left(q(x) + \frac{\lambda}{2} \varrho(x)\right) \sin nx\, dx)\, T_n(t_0) \sin nx\, dx = A$$

Ebből λ -ra azt kapjuk, hogy

$$\lambda^{(N)} = \frac{A\pi - 2 \sum\limits_{n=1}^{N} T_n(t_0) \int\limits_0^{\pi} \left(\int\limits_0^{\pi} q(x) \sin nx\, dx \right) \sin nx\, dx}{\sum\limits_{n=1}^{N} T_n(t_0) \int\limits_0^{\pi} \left(\int\limits_0^{\pi} \varrho(x) \sin nx\, dx \right) \sin nx\, dx}$$

Azt kaptuk tehát, hogy az 1/ differenciálegyenlet megoldásának N-edik szeletére vonatkozóan a minimalizáló peremfeltétel

$$f_N(x) = q(x) + \frac{\lambda^{(N)}}{2} \varrho(x)$$

hiszen ilyen peremfeltétel mellett a

$$b_i^{(n)} = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi} \left[q(x) + \frac{\lambda^{(N)}}{2} \varrho(x) \right] \sin ix \qquad i=1,2,\dots,N$$

együtthatók a differenciálegyenlet megoldásának részletösszegét állitják elő és minimalizálják a $J^{(N)}(f)$ funkcionált.

Megmutatjuk, hogy $\lim\limits_{N \to \infty} f_N(x) = f(x)$ minimalizálja az eredeti funkcionált.

Először is igaz ugyanis, hogy a

$$\lim_{N \to \infty} \lambda^{(N)} = \lambda .$$

határérték létezik.

Ehhez az állitáshoz be kell bizonyitani egyfelől, hogy

$$\sum_{n=1}^{\infty} T_n(t_o) \int_0^{\pi} \left(\int_0^{\pi} (q(x) \sin nx \, dx) \right) \sin nx \, dx$$

létezik.

A feltétel szerint azonban $q(x)$ korlátos, azaz $|q(x)| \leq K_0$

Igy: $\int_0^{\pi} q(x) \sin nx \, dx$ korlátos.

De

$$\int_0^{\pi} \sin nx \, dx = \begin{cases} 0 & \text{ha } n \text{ páros} \\ \frac{2}{n} & \text{ha } n \text{ páratlan} \end{cases}$$

Ezért:

$$\left| \sum_{n \text{ páros}} T_n(t_o) \frac{2}{n} \int_0^{\pi} q(x) \sin nx \, dx \right| \leq |K| \sum_{n \text{ páros}} \frac{|T_n(t_o)|}{n}$$

De $|T_n(t_o)| \approx \sigma(\frac{1}{n})$

Igy $|K| \sum_{n \text{ páros}} \frac{|T_n(t_o)|}{n} = |K| \; \sigma(\frac{1}{n^2})$

Ez azt jelenti, hogy a

$$\sum_{n=1}^{\infty} T_n(t_o) \int_0^{\pi} \left(\int_0^{\pi} q(x) \sin nx \, dx \right) \sin nx \, dx$$

sor konvergens.

Hasonlóan látható be, hogy a tett feltevés mellett

$$\sum_{n=1}^{\infty} T_n(t_o) \int_0^{\pi} \left(\int_0^{\pi} \varrho(x) \sin nx \, dx \right) \sin nx \, dx$$

sor is konvergens.

$$\sum_{n=1}^{\infty} T_n(t_o) \int_0^{\pi} \left(\int_0^{\pi} \varrho(x) \sin nx \, dx \right) \sin nx \, dx$$

sor is konvergens.

Beláttuk tehát, hogy $\lim_{N \to \infty} \lambda^{(N)} = \lambda$ létezik. Világos, hogy létezik a

$$\lim_{N \to \infty} f_N(x) = f(x) \qquad 0 \leq x \leq \pi .$$

határérték is, és mivel

$$b_n = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi} f(x) \sin nx$$

$$n=1,2,\dots.$$

$$b_n^{(N)} = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi} f_N(x) \sin nx$$

ezért

$$\lim_{N \to \infty} b_n^{(N)} = b_n$$

Bebizonyitjuk, hogy

$$\lim_{N \to \infty} J^{(N)} (f_N(x)) = J(f)$$

Igaz ugyanis, hogy

$$\left|J^{(N)}(f_N) - J(f)\right| = \left| \int_0^{\pi} \left\{ \left[q(x) - \sum_{n=1}^{N} b_n^{(N)} T_n(t_o) \sin nx\right]^2 - \right.\right.$$

$$\left.\left. - \left[q(x) - \sum_{n=1}^{\infty} b_n T_n(t_o) \sin nx\right]^2 \right\} dx \right| =$$

$$= \left| \int_0^{\pi} \left\{ 2q(x) - \sum_{n=1}^{N} b_n^{(N)} T_n(t_o) \sin nx - \sum_{n=1}^{\infty} b_n T_n(t_o) \sin nx \right\} \cdot \right.$$

$$\left. \cdot \left\{ \sum_{n=1}^{\infty} b_n T_n(t_o) \sin nx - \sum_{n=1}^{N} b_n^{(N)} T_n(t_o) \sin nx \right\} dx \right| \leq$$

$$\leq \sqrt{\int_0^{\pi} \left[2q(x) - \sum_{n=1}^{N} b_n^{(N)} T_n(t_o) \sin nx - \sum_{n=1}^{\infty} b_n T_n(t_o) \sin nx\right]^2 dx} \; \cdot$$

$$\cdot \sqrt{\int_0^{\pi} \left[\sum_{n=1}^{\infty} b_n T_n(t_o) \sin nx - \sum_{n=1}^{N} b_n^{(N)} T_n(t_o) \sin nx \right]^2 dx} \leq$$

$$\leq K_o \int_0^{\pi} \left[\sum_{n=1}^{N} (b_n - b^{(N)}) T_n(t_o) \sin nx + \sum_{n=N+1}^{\infty} b_n T_n(t_o) \sin nx \right]^2$$

Végezzük el a négyzetreemelést

$$\int_0^{\pi} \left[\sum_{n=1}^{N} (b_n - b_n^{(N)})\, T_n(t_o) \sin nx \right]^2 +$$

$$+ 2 \left\{ \sum_{n=1}^{N} (b_n - b_n^{(N)})\, T_n(t_o) \sin nx \right\} \left\{ \sum_{n=N+1}^{\infty} b_n\, T_n(t_o) \sin nx \right\} +$$

$$+ \left\{ \sum_{n=N+1}^{\infty} b_n\, T_n(t_o) \sin nx \right\}^2 =$$

$$= \sum_{n=1}^{N} (b_n - b_n^{(N)})^2\, T_n^2(t_o) + 2 \int_0^{\pi} \left\{ \sum_{n=1}^{N} (b_n - b_n^{(N)})\, T_n(t_o) \sin nx \right\} \cdot$$

$$\cdot \left\{ \sum_{n=N+1}^{\infty} \left\{ b_n\, T_n(t_o) \sin nx \right\} + \int_0^{\pi} \left\{ \sum_{n=N+1}^{\infty} b_n\, T_n(t_o) \sin nx \right\}^2 dx$$

A $\sum_{n=1}^{N} (b_n - b_n^{(N)})\, T_n(t_o) \sin nx$ összeg korlátos. A

$\sum_{n=1}^{\infty} b_n\, T_n(t_o) \sin nx$ sor konvergens /a differenciálegyenlet megoldását állitja elő az (x,t_o) pontban/ ezért az N megválasztható ugy, hogy

$$\left| \sum_{n=N+1}^{\infty} b_n T_n(t_o) \sin nx \right| < \varepsilon_1$$

legyen. Ez viszont azt jelenti, hogy

$$2 \int_0^{\pi} \left\{ \sum_{n=1}^{N} (b_n - b_n^{(N)}) T_n(t_o) \sin nx \right\} \left\{ \sum_{n=N+1}^{\infty} b_n T_n(t_o) \sin nx \right\} +$$

$$+ \int_0^{\pi} \left\{ \sum_{n=N+1}^{\infty} b_n T_n(t_o) \sin nx \right\}^2 dx \leq 2\pi K_1 \varepsilon_1 + \pi \varepsilon_1^2$$

A $\sum_{n=1}^{N} (b_n - b_n^{(N)})^2 T_n^2(t_o)$ összeget bontsuk két részre

$$\sum_{n=1}^{N} (b_n - b_n^{(N)})^2 T_n^2 (t_o) = \sum_{n=1}^{n_o} (b_n - b_n^{(N)})^2 T_n^2 (t_o)$$

$$+ \sum_{n=n_o}^{N} (b_n - b_n^{(N)})^2 T_n^2 (t_o)$$

Az első összegben

$$\lim_{N \to \infty} b_n^{(N)} = b_n \qquad (n=1,2,\dots,n_o)$$

miatt

$$\sum_{n=1}^{n_o} (b_n - b_n^{(N)})^2 \, T_n^2\,(t_o) < \mathcal{E}_2 \qquad \text{hacsak } N > N_1 \, .$$

Vezessük be a

$$\max_{n_o \leq n \leq N} (b_n - b_n^{(N)})^2 = K_2 \qquad \text{jelölést.}$$

Igy $\sum_{n=n_o}^{N} (b_n - b_n^{(N)})^2 \; T_n^2(t_o) = K_2 \sum_{n=n_o}^{N} T_n^2\,(t_o)$

Ha $a^2c^2 > a^2 - b$ akkor

$$T_n^2\,(t_o) < \frac{1}{n^2c^2 + b - a^2}$$

és igy a $\sum_{n=1}^{\infty} T_n^2\,(t_o)$ sor konvergens, mert egy konvergens sorral majorálható.

Ezért van olyan n_o , hogy

$$\sum_{n=n_o}^{\infty} T_n^2(t_o) \leq \mathcal{E}_3$$

és méginkább

$$\sum_{n=n_o}^{N} T_n^2(t_o) \leq \mathcal{E}_3$$

Igy
$$\sum_{n=n_o}^{N} (b_n - b_n^{(N)})^2 \; T_n^2(t_o) \leq K_2 \, \mathcal{E}_3 .$$

Legyen $N > \max(N_1, n_o)$.

Azt kaptuk tehát, hogy:

$$\left| J^{(N)}(f_N(x)) - J(f(x)) \right| \leq \pi K_o (2\pi K_1 \mathcal{E}_1 + \pi \mathcal{E}_1^2 + \mathcal{E}_2 + K_2 \mathcal{E}_3)$$

azaz

$$\lim_{N \to \infty} J^{(N)}(f_N(x)) = J(f(x))$$

Viszont

$$J^{(N)}\left(q(x) + \frac{\lambda^{(N)}}{2} \varrho(x)\right) \leq J(g(x)) \qquad N=1,2,\ldots$$

ahol $g(x)$ egy tetszőleges megengedett függvény, ezért

$$J\left(q(x) + \frac{\lambda}{2} \varrho(x)\right) \leq J(g(x)).$$

Irodalom:

[1] H.F. Weinberger: A First Course in Partial Differential Equations (Blaisdell Publ. Comp. New York-Torontó, London, 1965).

Summary

Optimal control in case telegraph equation with boundary condition.

Let us suppose that a process is described by the partial differential equation

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + 2a \frac{\partial u}{\partial t} + bu - c^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0$$

$$o < x < \pi, \qquad t > o.$$

with the following conditions:

$$u(o,t) = u(\pi,t)$$

$$u(x,o) = 0$$

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x,o) = f(x)$$

where a,b,c are positive constants.

Let us consider the functional

$$J(f) = \int_o^{\pi} \left[q(x) - u(x,t_o) \right]^2 dx \qquad 1/$$

where $q(x)$ is a given function. Let the set F be the following function set

$$F = \left\{ f(x) : \int_0^{\pi} \rho(x) \; u(x,t_o) \, dx = A \right\}$$

<u>Problem</u>: Let us find that element of F set, for which the functional 1/ renders the minimum.

We have obtained: Let us suppose that $q(x)$ and $\rho(x)$ are bounded and let us suppose that the problem has one solution. Then the solution of the problem is:

$$f(x) = q(x) + \frac{\lambda}{2} \rho(x)$$

where

$$\lambda = \frac{A\pi - 2 \sum_{n=1}^{\infty} T_n(t_o) \int_0^{\pi} \left(\int_0^{\pi} q(x) \sin nx \, dx \right) \sin nx \, dx}{\sum_{n=1}^{\infty} T_n(t_o) \int_0^{\pi} \left(\int_0^{\pi} \rho(x) \sin nx \, dx \right) \sin nx}$$

Egyenletek megoldása szakaszonkénti perturbációval.

Frey Tamás

1. §. Bevezetés.

A Newton-Raphson-féle un. érintőmódszert ill. különböző változatait ujabban egyre gyakrabban alkalmazzák nemcsak egyenletek gyökeinek, hanem általános operátoregyenletek megoldásainak numerikus meghatározására (l. pl. [1]). A finomitott eljárások általában igen gyorsan konvergálnak - ha elég jó közelitésből tudunk elindulni. A gyakorlati feladatoknál azonban éppen ez utóbbi jelenti a legsulyosabb problémát. Jólismertek pl. az algebrai egyenleteknél a Newton-módszer alkalmazása során fellépő jelenségek (l. pl. [2]). Ez az oka annak, hogy az egyenletek zérushelyeinek numerikus meghatározására még olyan, látszólag sokkal munkaigényesebb módszereket is igénybe vettek, mint pl. differenciálegyenletek numerikus integrálása (l. pl. [3]). Az alapgondolat: az $y = f(x)$ kapcsolat minden olyan szakaszon, ahol f monoton, egyértelmüen meghatározza az inverz $x = g(y)$ kapcsolatot is; emellett itt g differenciálható, ha f is ilyen, és ekkor $\frac{dx}{dy} = \frac{1}{f^{1}(x)}$ érvényes. Ha tehát $\hat{x}$ a keresett x_0 zérushely egy olyan közelitése, amelyeket f egy monoton szakasza köt össze, és f itt differenciálható, továbbá $\hat{y} = f(\hat{x})$, akkor x_0 kiszámitható a

$$\frac{dx}{dy} = \frac{1}{f^{1}(x)} \; ; \; x = \hat{x}; \; y = \hat{y}$$

kezdeti-érték probléma $y = 0$-ig történő numerikus integrálásával. Sajnos, algebrai egyenleteknél - különösen ha valamennyi zérushelyre szükség van - még az a követelmény se biztositható, hogy $\hat{x}_i$ és $x_{o,i}$ minden i-re egy-egy közös monoton szakaszra essék.

Ezért a fenti alapgondolatot az alábbi módon próbáltuk továbbfejleszteni: a megoldandó egyenletet, ill. rendszert egy t paraméter függvényévé tesszük, éspedig olymódon, hogy t egy rögzitett értékénél, $t = t_o$-nál legyen ismert a választott alak, $\varphi(x,t)$ valamennyi megoldása, t egy másik rögzitett értékénél viszont, pl. $t=t_1$-nél $\varphi(x,t)$ éppen a megoldandó egyenlettel legyen azonos, azaz legyen

$$\varphi(x, t_1) = f(x),$$

továbbá a

$$\varphi(x,t_o) = 0$$

egyenlet megoldásai legyenek $x_{0,1}, x_{0,2}, \ldots, x_{0,n}$. Ekkor - amennyiben φ mindenütt differenciálható, a

$$\varphi[x(t),t] \equiv 0$$

azonosságot kielégitő $x(t)$ függvények a

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{\partial \varphi}{\partial x} \cdot \frac{dx}{dt} \equiv 0 \qquad (1)$$

differenciálegyenlet megoldásai; ha tehát ezt a $t = t_o$; $x = \hat{x}_i$ kezdeti feltétel mellett numerikusan integráljuk $t = t_1$-ig, akkor $x(t_1)=x_{o,i}$ érvényes lesz. A φ függvény megfelelő megválasztása biztositja, hogy (1) numerikus integrálása során a $\frac{\partial \varphi}{\partial x} = 0$ feltételt kielégitő helyeket elkerülhessük.

Gyakorlatilag, algebrai egyenletek megoldása során ezt a következőkép próbáltuk biztositani: a megoldandó $P_n(z) = 0$ egyenlet zérushelyeinek viszonylag durva közelitéseiből megkonstruáltuk a $Q_n(z) = \prod (z-\hat{z}_i)$ polinomot, ill. az $R_{n-1}(z) = P_n(z) - Q_n(z)$ különbséget. Ezekből konstruáljuk a

$$\varphi(z,t) = Q_n(z) + tR_{n-1}(z) + \Psi(t)\left[Q_n(z) + R_{n-1}(z)\right],$$

függvényt;

$\Psi(t)$ itt tetszőleges, ötször folytonosan differenciálható, a $\Psi(0) = \Psi(1) = 0$ feltételt kielégitő függvény, amelyet az integráció során szakaszonként konstruáltunk $t(\tau)$ polinomjaiból dinamikus programozással olymódon, hogy $\left|\frac{\partial \varphi}{\partial z}\right|$ a lehető legnagyobb legyen, de a $\Psi(1) = 0$ feltétel is biztositódjék. A választott módszer viszonylag magas fokszámu polinomok, sőt általánosabb operátoregyenletek esetén is nagyon jónak bizonyult mindaddig, amig nem kerültek egymáshoz nagyon közel a zérushelyek. Bonyolult szürők méretezése során azonban olyan 28-40-edfoku polinomok zérushelyeinek megállapitását is el kellett végeznünk, amelyeknek 7-7, ill. 10-10 zérushelye egymástól 10^{-3} - -10^{-4} távolságban feküdt. Itt - a numerikus integrálás során a Runge-Kutta módszert használva, változó lépésközzel - már kb. 10^4-10^6 számu részintervállumra kellett a $0 \leq t \leq 1$ intervallumot felosztani, hogy a zérushelyeket 5-6 értékes jegyre pontosan meg tudjuk állapitani. Ez pedig még közepes sebességü számológéppel is nagyon időigényes.

Ezért a fenti módszert célszerünek látszott ugy átalakitani, hogy a Newton-módszer azon válfaja általánositásának lehessen tekinteni, amelynél érintőegyenes helyett másod- ill. magasabbfoku parabolát fektetünk át a pillanatnyi közelitésnek megfelelő ponton. Az alábbiakban ezen módszer leirását, hibabecslését, továbbá általános operátoregyenletekre történő alkalmazását ismertetjük.

2.§. A Runge-Kutta-módszer általánositásáról.

A Runge-Kutta-módszer általánositásával több munka is foglalkozott (l. pl. [4,][5]). Ezek azonban elsősorban az eljárás fokszámának növelését vizsgálták. Az alábbiakban olyan irányu általánositással foglalkozunk, ahol nem érintőegyenesekkel, hanem érintőparabolákkal operálva konstruáljuk meg az integrálgörbe pontjait. [5] alatti munkánkban már szerepelt ilyen jellegü általánositás, de nem szisztematikusan használtuk.

Tekintsük tehát először az

$$\dot{x} = f(t,x) \qquad (2)$$

differenciálegyenletet és tegyük fel, hogy a tekintett tartományban f elég sokszor folytonosan differenciálható. Ekkor $x(t)$

differenciálhányadosai a $D = \frac{\partial}{\partial t} + f \frac{\partial}{\partial x}$ operátorral kifejezhetőek (α pl. [5]). Minthogy azonban a D operátorral kapcsolatosan több uj formulára is szükségünk lesz, a vele kapcsolatos formális szabályokat az alábbiakban összefoglaljuk.

D magasabb hatványait a

$$D^{n+1} = D^n \frac{\partial}{\partial t} + f D^n \frac{\partial}{\partial x} \tag{3}$$

reláció révén értelmezzük. Igy rekurzióval a

$$D^{n+1} = D^n \frac{\partial}{\partial t} + f D^n \frac{\partial}{\partial x} = D^{n-1} \frac{\partial^2}{\partial t^2} + f D^{n-1} \frac{\partial^2}{\partial t \partial x} +$$

$$+ f D^{n-1} \frac{\partial^2}{\partial t \partial x} + f^2 D^{n-1} \frac{\partial^2}{\partial x^2} =$$

$$= D^{n-1} \frac{\partial^2}{\partial t^2} + 2f D^{n-1} \frac{\partial^2}{\partial t \partial x} + f^2 D^{n-1} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

relációra jutunk, ha feltesszük, hogy a szereplö parciális deriváltak folytonosak, és igy a differenciálások sorrendje felcserélhető. Ha tehát $k \leq n$-re még érvényes a

$$D^{n+1} = \binom{k}{o} D^{n+1-k} \frac{\partial^k}{\partial t^k} + \binom{k}{1} f\, D^{n+1-k} \frac{\partial^k}{\partial t^{k-1} \partial x} + \dots +$$

$$+ \binom{k}{r} f^r D^{n+1-k} \frac{\partial^k}{\partial t^{k-r} \partial x^r} + \dots + \binom{k}{k} f^k D^{n+1-k} \frac{\partial^k}{\partial x^k} \qquad (4)$$

reláció, akkor (3)-at ujból alkalmazva

$$D^{n+1} = \binom{k}{o} D^{n+1-k-1} \frac{\partial^{k+1}}{\partial t^{k+1}} + \left\{\binom{k}{o} + \binom{k}{1}\right\} f\, D^{n+1-k-1} \frac{\partial^{k+1}}{\partial t^k \partial x}$$

$$+ \left\{\binom{k}{1} + \binom{k}{2}\right\} f^2 D^{n+1-k-1} \frac{\partial^{k+1}}{\partial t^{k-1} \partial x^2} + \dots +$$

$$+ \left\{\binom{k}{r} + \binom{k}{r+1}\right\} f^{r+1} D^{n+1-k-1} \frac{\partial^{k+1}}{\partial t^{k-r} \partial x^{r+1}} + \dots +$$

$$+ \binom{k}{k} f^{k+1} D^{n+1-k-1} \frac{\partial^{k+1}}{\partial x^{k+1}}$$

adódik, és igy - a binonciális együtthatók ismert tulajdonságai miatt (4) érvényes $k+1 \leqq n+1$-re is. Igy a $D^o \equiv I$ relációt is figyelembe véve, a (3) - (4) formulák alapján ($k+1=n+1$ választással élve) D^{n+1} a D operátor formális $(n+1)$-edik hatványával azonos képletet eredményez. Teljes indukcióval most már azonnal belátható, hogy a D^n operátort összegre ill. szorzatra épp ugy kell alkalmaznunk, mint a $\frac{d^n}{dt^n}$ operátort.

Valóban, $n=1$ esetén, D definiciója alapján

$$D(a+b) = Da + Db \tag{5}$$

és

$$D(a.b) = aDb + bDa \tag{6}$$

érvényes. Tegyük fel, hogy $n=N$-re még érvényesnek bizonyult a

$$D^N(a+b) = D^N a = D^N b \tag{7}$$

ill.

$$D^N(a.b) = \binom{N}{o} a.D^N b + \binom{N}{1} Da.D^{N-1} b + \ldots + \binom{N}{r} Da^r.D^{N-r} b +$$

$$+ \ldots + \binom{N}{N} b.D^N a \tag{8}$$

formula is. Ekkor (3), ill. (7)-(8) felhasználásával

$$D^{N+1}(a+b) = D^N \frac{\partial}{\partial t}(a+b) + f D^N \frac{\partial}{\partial x}(a+b) =$$

$$= D^N \frac{\partial}{\partial t} a + fD^N \frac{\partial}{\partial x} a + D^N \frac{\partial}{\partial t} b + fD^N \frac{\partial}{\partial x} b =$$

$$= D^{N+1} a + D^{N+1} b$$

ill.

$$D^{N+1}(a\cdot b) = D^N \frac{\partial}{\partial t}(a.b) + f\, D^N \frac{\partial}{\partial x}(a.b) =$$

$$= D^N\left(b\frac{\partial a}{\partial t} + a\cdot\frac{\partial b}{\partial t}\right) + f D^N\left(\frac{\partial a}{\partial x} + a\frac{\partial b}{\partial x}\right) =$$

$$= \binom{N}{0} b D^N \frac{\partial a}{\partial t} + \binom{N}{1} D b D^{N-1}\frac{\partial a}{\partial t} + \dots + \binom{N}{N}\frac{\partial a}{\partial t} D^N b +$$

$$+ f\binom{N}{0} b D \frac{\partial a}{\partial x}\ f\binom{N}{1} D b D^{N-1}\frac{\partial a}{\partial x} + \dots + f\binom{N}{N}\frac{\partial a}{\partial x} D^N b +$$

$$+ \binom{N}{0} a D^N \frac{\partial b}{\partial t} + \binom{N}{1} D a D^{N-1}\frac{\partial b}{\partial t} + \dots + \binom{N}{N}\frac{\partial b}{\partial t} D^N a +$$

$$+ f\binom{N}{0} a D^N \frac{\partial b}{\partial x} + f\binom{N}{1} D a D^{N-1}\frac{\partial b}{\partial x} + \dots + f\binom{N}{N}\frac{\partial b}{\partial x} D^N a =$$

$$= \binom{N}{0} b D^{N+1} a + \left\{\binom{N}{N} + \binom{N}{1}\right\} D b D^N a + \left\{\binom{N}{N-1} + \binom{N}{2}\right\} D^2 b D^{N-1} a +$$

$$+ \dots + \left\{\binom{N}{1} + \binom{N}{N}\right\} D^N b\, D a + \binom{N}{0} a D^{N+1} b,$$

és ezek a binomiális együtthatók jólismert tulajdonságai szerint azt mutatják, hogy (7), ill. (8) $n=N+1$-re is érvényesek. Eszerint (7) és (8) minden N-re teljesül.

Ugyancsak teljes indukcióval igazoljuk a

$$D(D^n g) = D^{n+1} g + n\, Df\, D^{n-1}\frac{\partial}{\partial x} g \qquad (9)$$

reláció érvényességét is. Valóban, $n=1$-re

$$D\left(\frac{\partial g}{\partial t} + f\frac{\partial g}{\partial x}\right) = \frac{\partial^2 g}{\partial t^2} + \frac{\partial f}{\partial t}\frac{\partial g}{\partial x} + f\frac{\partial^2 g}{\partial t\,\partial x} +$$

$$+ f\frac{\partial^2 g}{\partial t\,\partial x} + f\frac{\partial f}{\partial x}\frac{\partial g}{\partial x} + f^2\frac{\partial^2 g}{\partial x^2} = D^2 g + \frac{\partial g}{\partial x}\cdot Df$$

azaz ekkor (9) érvényes. Ha n=N-re már igazoltuk, akkor (3) alapján

$$D(D^{N+1}g) = D\left[D^N \frac{\partial g}{\partial t} + f D^N \frac{\partial g}{\partial x}\right] =$$

$$= D^{N+1} \frac{\partial g}{\partial t} + f D^{N+1} \frac{\partial g}{\partial x} + N.Df D^{N-1} \frac{\partial^2 g}{\partial t \partial x} +$$

$$+ f.N.Df D^{N-1} \frac{\partial^2 g}{\partial x^2} + Df.D^N \frac{\partial g}{\partial x} =$$

$$= D^{N+2} g + N.Df D^N \frac{\partial g}{\partial x} + Df D^N \frac{\partial g}{\partial x} = D^{N+2} g + (N+1) Df D \frac{\partial g}{\partial x}$$

tehát (9) érvényes n=N+1-re is. Igy (9) n minden értékére igaz.

Tekintsük most (9) helyett a $D^n(Dg)$ kifejezést. (3) szerint

$$D^n(Dg) = D^{n-1} \frac{\partial}{\partial t}(Dg) + f\, D^{n-1} \frac{\partial}{\partial x}(Dg).$$

Mármost D definiciója szerint

$$\frac{\partial}{\partial t}(Dg) = \frac{\partial^2 g}{\partial t^2} + f \frac{\partial^2 g}{\partial t \partial x} + \frac{\partial f}{\partial t} \frac{\partial g}{\partial x} = D \frac{\partial g}{\partial t} + \frac{\partial g}{\partial x} \cdot \frac{\partial f}{\partial t}$$

ill.

$$\frac{\partial}{\partial x}(Dg) = \frac{\partial^2 g}{\partial t \partial x} + f \frac{\partial^2 g}{\partial x^2} + \frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial g}{\partial x} = D \frac{\partial g}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial x} \cdot \frac{\partial g}{\partial x}$$

Ezeket helyettesitve, és (7)-et ill. (8)-at felhasználva

$$D^n(Dg) = D^{n-1}\left[\frac{\partial^2 g}{\partial t^2} + \frac{\partial}{\partial t}\left(f\frac{\partial g}{\partial x}\right)\right] + fD^{n-1}\left[\frac{\partial^2 g}{\partial t\,\partial x} + \right.$$

$$\left. + \frac{\partial}{\partial x}\left(f\frac{\partial g}{\partial x}\right)\right] = D^{n-1}\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{\partial g}{\partial t}\right) + fD^{n-1}\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial g}{\partial t}\right) +$$

$$+ D^{n-1}\frac{\partial}{\partial t}\left(f\frac{\partial g}{\partial x}\right) + fD^{n-1}\frac{\partial}{\partial x}\left(f\frac{\partial g}{\partial x}\right) = D^n\frac{\partial g}{\partial t} + D^n\left(f\frac{\partial g}{\partial x}\right) =$$

$$= D^n\frac{\partial g}{\partial t} + fD^n\frac{\partial g}{\partial x} + \binom{n}{1}DfD^{n-1}\frac{\partial g}{\partial x} + \binom{n}{2}D^2fD^{n-2}\frac{\partial g}{\partial x} + \cdots + \binom{n}{n}D^nf\cdot\frac{\partial g}{\partial x}$$

$$= D^{n+1}g + \binom{n}{1}DfD^{n-1}\frac{\partial g}{\partial x} + \binom{n}{2}D^2fD^{n-2}\frac{\partial g}{\partial x} + \cdots \binom{n}{n}\frac{\partial g}{\partial x}D^nf \quad (10)$$

is érvényes.

A fentieken kivül szükségünk van a

$$\frac{\partial}{\partial x}(Dg) = D\frac{\partial g}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial x}\cdot\frac{\partial g}{\partial x} \qquad (11)$$

továbbá a

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}(Dg) = D\frac{\partial^2 g}{\partial x^2} + 2\frac{\partial f}{\partial x}\cdot\frac{\partial^2 g}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\frac{\partial g}{\partial x} \qquad (12)$$

ill. általában a

$$\frac{\partial^n}{\partial x^n}(Dg) = D\frac{\partial^n g}{\partial x^n} + \binom{n}{1}\frac{\partial f}{\partial x}\cdot\frac{\partial^n g}{\partial x^n} + \binom{n}{2}\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\cdot\frac{\partial^{n-1} g}{\partial x^{n-1}} +$$

$$+ \cdots \binom{n}{n}\frac{\partial^n f}{\partial x^n}\cdot\frac{\partial g}{\partial x} \qquad (13)$$

relációkra, amelyek teljes indukcióval, a fentiek mintájára könnyen beláthatóak.

Végül fel kell hasznalnunk

$$D^r\left[\frac{\partial^s}{\partial x^s}(Dg)\right]$$

alaku kifejezéseket is, amelyeket nem adunk meg - bonyolultságuk miatt - zart alakban, hanem szükség esetén (13), (10) ill. (8) révén kepezünk.

Mármost fenti relációink közül (9) alapján az $x(t) = f(x,t)$ differenciálegyenlet által meghatározott $x(t)$ függvények magasabb deriváltjai a D operator, ill. a $g \equiv f$ helyettesités révén meghatározhatóak, éspedig

$$\begin{aligned}
x &= f;\\
x &= Df;\\
x &= D(Df) = D^2f + f'_x\, Df;\\
x &= Dx = D^3f+3DfDf'_x+f'_xD^2f+f'_x\, Df;\\
x &= D^4f+6DfD^2f'_x+3f_{xx}(Df)^2+ \qquad\qquad (14)\\
&+ 4D^2fDf'_x+7f'_xDfx'Df+f'_xD^3f+f'^2_x\, D^2f+f'^3_xDf;
\end{aligned}$$

stb.

A valasztott $\Delta t = h$-hoz tartozó k növekményt a Runge-Kutta módszer mintajara helyi növekményekből állitjuk elő, ezeket azonban következetesen legalább másodfoku alakban vesszük fel, éspedig olymódon, hogy k és Δx a h mennél magasabb hatványáig egyezzék meg. Ehhez a kiindulási bázispontban a (t_0, x_0) pontban f értéke mellett $\frac{\partial f}{\partial x}$ ill. $\frac{\partial f}{\partial t}$ értékére is szükségünk van, hogy igy Df is képezhető legyen. Ezek révén először meghatározzuk a k_1 ill. k_1^* növekményt a

$$k_1 = hf_0 + a_{12}h^2 Df_0 + a_{13}h^3 f'_{x,0} Df_0 + a_{14}h^4 f'^2_{x,0} Df_0 + \cdots + a_{1n}h^n f'^{n-2}_{x_1 0} Df_0 \qquad (15)$$

$$k_1^* = hf_0 + a_{22}h^2 Df_0 + a_{23}h^3 f'_{x_1 0} Df_0 + a_{24}h^4 f'^2_{x_1} Df_0 + \cdots \qquad (16)$$

alakban. Itt a 0 alsó index, a (t_0, x_0) helyre vonatkozik, k_1 a k kialakitására szolgáló sulyozott középérték egyik eleme, végül k_1^* arra szolgál, hogy a következő segédpont (t_1, x_1) helyét kijelöljük.

A további középérték-képző elemek meghatározásánál már több utat követhetünk; ugyanis a (t_1, x_1) pontbeli f_1, továbbá f_0, Df_0 és $f_{x,0}$ segitségével felépithetünk h-ban magasabb fokszámu középértékképző elemeket. Lényegesen több számitási munkával azonban $f_{x,1}$ és Df_1 felhasználásával is megtehetjük ezt. Utóbbi módszer egy szempontból mégis előnyösnek fog bizonyulni, ezért ilyen tipusu formulát is levezetünk.

Igy pl. negyedrendü formulát épithetünk fel a

$$k_1 = hf_0 + a_{12}h^2 Df_0 + a_{13}h^3 f'_{x,0} Df_0 + a_{14}h^4 f'^2_{x_1 0} Df_0$$

$$k_1^* = E_1 h f_0 + a_{22}h^2 Df_0 + a_{23}h^3 f'_{x_1} Df_0 + a_{24}h^4 f'^2_{x_1 0} Df_0 \qquad (17)$$

$$t_1 = t_0 + E_1 h; \quad x_1 = x_0 + k_1^*$$

$$k_2 = hf_1 + a_{32}h^2 Df_0 + a_{33}h^2 f'_{x_1 0}(f_1 - f_0) + a_{34}h^3 f'^2_{x_1 0}(f_1 - f_0)$$

$$k = R_1 k_1 + R_2 k_2$$

resp. a

$$\tilde{k}_2 = hf_1 + \tilde{\alpha}_{32} h^2 Df_1 + \tilde{\alpha}_{33} h^3 f'_{x,1} Df_1 + \tilde{\alpha}_{34} h^4 f'_{x,1} Df_1 \tag{18}$$

módon.

Mindkét formulatipus használata esetén az 1 indexü (t.i. a (t_1,x_1) pontbeli) értékeket az (x_0,t_0) pontbeli deriváltak segitségével kell kifejeznünk, hogy k és Δx egyeztetéséről gondoskodni tudjunk. E célból k_1^* -ot a

$$k_1^* = E_1 hf_0 + \Theta(h;f) \tag{19}$$

alakba irjuk. Ekkor - feltéve, hogy f elég sokszor folytonosan differenciálható -

$$f_1 = f(t_0 + E_1 h;\ x_0 + E_1 hf_0 + \Theta(h;f)) = f_0 + E_1 h(f'_{t,0} + f \cdot f'_{x,0})$$

$$+\Theta f'_{x,0} + \frac{1}{2!}\left[f''_{t,t,0} E_1^2 h^2 + 2E_1 h(E_1 hf_0 + \Theta) f_{t,x,0} + (E_1 hf_0 + \Theta)^2 f''_{xx,0}\right] + \dots$$

- ahol a 0 index a (t_0,x_0) helyre vonatkozik, amelyet a továbbiakban elhagyunk, ha ez nem vezethet félreértésre. Felhasználva tehát a D operátort is

$$f_1 = f(t_0 + E_1 h;\ x_0 + E_1 hf + \Theta) =$$

$$= f + E_1 hDf + \Theta f'_x + \frac{1}{2!} E_1^2 h^2 D^2 f + E_1 h \Theta Df'_x +$$

$$+ \frac{1}{2}\Theta^2 f''_{xx} + \frac{1}{3!} E_1^3 h^3 D^3 f + \frac{1}{2!} E_1^2 h^2 \Theta D^2 f'_x + \frac{1}{2!} E_1 h \Theta^2 D f''_{xx} + \tag{20}$$

$$+ \frac{1}{3!}\Theta^3 f'''_{xxx} + \frac{1}{4!} E_1^4 h^4 D^4 f + \frac{1}{3!} E_1 3h^3 \Theta D^3 f_x' + \dots$$

Hasonlóképp - bár erre egyenlőre csak a második tipusu formulák használata során lesz szükség -

$$Df(t_o+E_1h;\ x_o+E_1hf_o+Ⓗ)=Df+E_1hD(Df)+Ⓗ\frac{\partial}{\partial x}(Df)$$

$$+\frac{1}{2!}E_1^2h^2D^2(Df)+E_1hⒽD\left(\frac{\partial}{\partial x}(Df)\right)+\frac{1}{2!}Ⓗ^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}(Df)+$$

$$+\frac{1}{3!}E_1^3h^3D^3(Df)+\frac{1}{2!}E_1^2h^2ⒽD^2\left[\frac{\partial}{\partial x}(Df)\right]+\cdots \qquad (21)$$

ill.

$$f'_x(t_o+E_1h;\ x_o+E_1hf_o+Ⓗ)=f'_x\ E_1hDf'_x+Ⓗ.f''_{xx}+$$

$$+\frac{1}{2!}E_1^2h^2D^2f'_x+E_1hⒽDf''_{xx}+\cdots \qquad (22)$$

Ezek felhasználásával tekintsük először a (17) tipusu formulákat. Felhasználva Ⓗ részletes alakját

$$hf_1=hf+E_1h^2Df+f'_x(a_{22}h^3Df+a_{23}h^4f'_xDf+$$

$$+a_{24}h^5f'^2_xDf+\cdots)+\frac{1}{2}E_1^2h^3D^2f+E_1h^2Df'_x(a_{22}h^2Df+$$

$$+a_{23}h^3f'_xDf+\ldots)+\cdots+\frac{1}{6}E_1^3h^4D^3f+\cdots \qquad (23)$$

adódik. Eszerint - k és $\Delta x\ (t_o,x_o)$ helyre vonatkozó hatványsorának azonos tipusu tagjai együtthatóit összevetve - az ismeretlen együtthatókra az alábbi egyenletek adódnak:

f együtthatói: 1 ill. $R_1 + R_2$

Df együtthatói: $\frac{1}{2}$ ill. $a_{12} R_1 + a_{32} R_2 + R_2 E_1$

$D^2 f$ együtthatói: $\frac{1}{6}$ ill. $R_2 \cdot \frac{E_1^2}{2}$

$D^3 f$ együtthatói: $\frac{1}{24}$ ill. $R_2 \frac{E_1^3}{6}$

E két utóbbi relációból

$$\frac{1}{24} = \frac{1}{6} R_2 E_1^3, \text{ azaz } \frac{1}{4} = R_2 E_1^3$$

ill.

$$\frac{1}{6} = \frac{1}{2} R_2 E_1^2, \text{ azaz } \frac{1}{3} = R_2 E_1^2$$

A másodikat az elsővel osztva

$$\frac{3}{4} = E_1$$

adódik. Igy

$$\frac{1}{4} = R_2 \frac{27}{64}, \text{ azaz } R_2 = \frac{16}{27} .$$

Igy $R_1 = \frac{11}{27}$.

a_{12} és a_{32} csak a második relációban lépnek fel. Szimmetriaokokból az $a_{12} = a_{32} = a$ választással élve

$$\frac{1}{2} = a + \frac{16}{27} \cdot \frac{3}{4} = a + \frac{4}{9} ,$$

amiből $a = \frac{1}{2} - \frac{4}{9} = \frac{9-8}{18} = \frac{1}{18} = a_{12} = a_{32}$.

$f'_x\ D^2f$ együtthatói: $\frac{1}{24}$ ill. $R_2\ a_{33}\ \frac{E_1^2}{2}$.

Igy

$$\frac{1}{24} = \frac{1}{6}\ a_{33}$$

azaz

$$a_{33} = \frac{1}{4}\ .$$

$DfDf'_x$ együtthatói: $\frac{1}{8}$ ill. $R_2\ E_1\ a_{22}$,

azaz $\quad a_{22} = \frac{1}{8} \cdot \frac{1}{R_2} \cdot \frac{1}{E_1} = \frac{1}{8} \cdot \frac{27}{16} \cdot \frac{4}{3} = \frac{9}{32}\ .$

A három "feleslegben lévő" együttható, a_{23}, a_{24} ill. a_{34} megállapitható pl. ugy, hogy ötödrendü tagokat egyeztetünk a segitségükkel. Egyszerübb azonban, ha zérusnak választjuk őket. Igy $a_{23} = a_{24} = a_{34} = 0$.

Végül

$f'_x\ Df$ együttható: $\frac{1}{6}$ ill. $R_1\ a_{13} + R_2 \left\{a_{22} + E_1 \cdot a_{33}\right\}$

amiből $a_1 = \frac{1}{6} \cdot \frac{1}{R_1} - \frac{R_2}{R_1} \left\{a_{22} + E_1 a_{33}\right\} = \frac{1}{2}\ \frac{9}{11} - \frac{16}{11} \left\{\frac{9}{32} + \frac{3}{4} \cdot \frac{1}{4}\right\}$

$= \frac{9-9-6}{22} = -\frac{3}{11}\ .$

$f_x'^2$ Df együtthatói: $\frac{1}{24}$ ill. $R_1 a_{14} + R_2 \left\{ a_{23} + a_{33} \cdot a_{22} + \right.$

$\left. + a_{34} \cdot E_1 \right.$, amiből $a_{14} = \frac{1}{24} \cdot \frac{1}{R_1} - \frac{R_2}{R_1} \left\{ a_{23} + a_{33} a_{22} + a_{34} \right\}$

$= \frac{1}{8} \cdot \frac{9}{11} - \frac{1}{11} \cdot \left\{ 0 + \frac{1}{4} \cdot \frac{9}{2} + 0 \right\} = \frac{9}{88} - \frac{9}{88} = \emptyset.$

Formuláink tehát:

$$k_1 = hf_o + \frac{1}{18} h^2 Df_o - \frac{3}{11} h^3 f'_{x,o} Df_o$$

$$k_1^* = \frac{3}{4} hf_o + \frac{9}{32} h^2 Df_o \qquad (24)$$

$$k_2 = hf_1 + \frac{1}{18} h^2 Df_o + \frac{1}{4} h^2 f'_{x,o}(f_1 - f_o)$$

$$k = \frac{11}{27} k_1 + \frac{16}{27} k_2$$

Áttérve a másik formulatipusra, ott a

$$k_1 = hf_o + a_{12} h^2 Df_o + a_{13} h^3 f'_{x,o} Df_o + a_{14} h^4 f'^2_{x,o} Df_o$$

$$k_1^* = E_1 hf_o + a_{22} h^2 Df_o + a_{23} h^3 f'_{x,o} Df_o + a_{24} h^4 f'^2_{x,o} Df_o \qquad (25)$$

$$k_2 = hf_1 + \tilde{a}_{32} h^2 dF_1 + \tilde{a}_{23} h^3 f'_{x,1} Df_1 + \tilde{a}_{34} h^4 f'^2_{x,1} Df_1$$

$$k = R_1 k_1 + R_2 \tilde{k}_2$$

relációkból indulunk ki. Könnyen belátható, hogy a paraméterek száma igy is csak negyedfoku formula létrehozását teszi lehetővé.

hf_1 kifejtését egyébként (20) alatt megadtuk. Hasonlókép

$$h^2 Df_1 = h^2 Df\left(t_0 + \frac{3}{4}h;\ x_0 + k_1^*\right) = h^2 Df_0\left(t_0 + \frac{3}{4}h;\ x_0 \frac{3}{4}hf_0 + \Theta\right) =$$

$$= h^2 Df_0 + E_1 h^3 D(Df)_0 + \Theta h^2 \frac{\partial}{\partial x}(Df) + \frac{1}{2!}E_1^2 h^4 D^2(Df)_0 + \dots$$

$$= h^2 Df_0 + E_1 h^3 D^2 f_0 + E_1 h^3 f'_{x,0} Df_0 + a_{22} h^4 Df_0 \left[Df'_{x,0} + f'^2_{x,0}\right]$$

$$+ \frac{E_1^2}{2} h^4 \left[D^3 f + 2Df\, Df'_x + f'_x \cdot D^2 f\right] \tag{26}$$

Egyenletünk tehát:

f együtthatói: 1 ill. $R_1 + R_2$

Df együtthatói: $\frac{1}{2}$ ill. $a_{12}R_1 + a_{32}R_2 + R_2E_1$

D^2f együtthatói: $\frac{1}{6}$ ill. $R_2\left\{\frac{E_1^2}{2} + a_{32} \cdot E_1\right\}$

D^3f együtthatói: $\frac{1}{24}$ ill. $R_2\left\{\frac{E_1^3}{3} + a_{32}\frac{E_1^2}{2}\right\}$

Az $E_1 = 1$ választással élve, a két utolsó egyenletből

$$4 = \frac{\frac{1}{2} + a_{32}}{\frac{1}{6} + a_{32}/2};\quad 4 + 12a_{32} = 3 + 6a_{32};\quad a_{32} = -\frac{1}{6}$$

Igy $\frac{1}{6} = R_2\left\{\frac{1}{2} - \frac{1}{6}\right\}$; $R_2 = \frac{\frac{1}{6}}{\frac{1}{3}} = \frac{1}{2}$, és $R_1 = \frac{1}{2}$,

azaz

$$\frac{1}{2} = \frac{1}{2}a_{12} - \frac{1}{12} + \frac{1}{2};\quad a_{12} = \frac{1}{6}$$

$f'_x D^2 f$ együtthatói: $\frac{1}{24}$ ill. $R_2\left\{a_{32}\frac{E_1^2}{2} + a_{33}E_1\right\}$ amiből

$\frac{1}{24} = \frac{1}{2}\left\{-\frac{1}{12} + a_{33}\right\}$, azaz $a_{33} = \frac{1}{12}$.

$Df\,Df'_x$ együtthatói: $\frac{1}{8}$ ill. $R_2\{E_1 a_{22} + a_{32}(a_{22} + E_1^2) +$

$+ a_{33} E_1\}$. Ennek alapján

$\frac{1}{4} = \frac{5}{6} a_{22} - \frac{1}{6} + \frac{1}{12}$; $\frac{5}{6} a_{22} = \frac{1}{4} + \frac{1}{12} = \frac{1}{3}$; $a_{22} = \frac{2}{5}$.

A továbbiakban élhetünk az $a_{23} = a_{24} = a_{34} = 0$ választással.

Végül

$f'_x Df$ együtthatói: $\frac{1}{6}$ ill. $R_1 a_{13} + R_2\{a_{22} + a_{32}E_1 + a_{33}\}$,

amiből

$$\frac{1}{3} = a_{13} + \frac{2}{5} - \frac{1}{6} + \frac{1}{12};$$

$$a_{13} = \frac{20 - 24 + 10 - 5}{60} = \frac{1}{60}$$

ill.

$f'^2_x Df$ együtthatói: $\frac{1}{24}$ ill. $R_1 a_{14} + R\{a_{32}a_{22} + a_{33}E_1\}$

azaz $\frac{1}{12} = a_{14} + \left\{-\frac{2}{5}\cdot\frac{1}{6} + \frac{1}{12}\right\}$,

$$a_{14} = \frac{1}{15}$$

Formulánk tehát ilyen alaku

$$
\begin{aligned}
k_1 &= hf_0 + \frac{1}{6}h^2 Df_0 + \frac{1}{60}h^3 f'_{x,0} Df_0 + \frac{1}{15}h^4 f'^{2}_{x,0} Df_0 \\
k_1^* &= hf_0 + \frac{2}{5}h^2 Df_0 \\
\tilde{k}_2 &= hf_1 - \frac{1}{6}h^2 Df_1 + \frac{1}{12}h^3 f'_{x,1} Df_1 \qquad (27) \\
k &= \frac{1}{2}(k_1 + \tilde{k}_2)
\end{aligned}
$$

Megadunk végül egy első tipusu ötödfoku formulát is:

$$
k_1 = hf_0 + a_{12}h^2 Df_0 + a_{13}h^3 f'_{x,0} Df_0 + a_{14}h^4 f'^{2}_{x,0} Df_0 +
$$

$$
+ a_{15} - h^5 f'^{3}_{x,0} Df_0
$$

$$
k_1^* = E_1 hf_0 + b_{12}h^2 Df_0 + b_{13}h^3 f'_{x,0} Df_0
$$

$$
\begin{aligned}
k_2 &= hf_2 + a_{12}h^2 Df_0 + a_{23}h^2 f'_{x,0}(f_2 - f_0) + a_{24}h^3 f'^{2}_{x,0}(f_2 - f_0) \\
k_2^* &= h(E_{21}f_0 + E_{22}f_2) + b_{22}h^2 Df_0 + b_{23}h^2 f'_{x,0}(f_2 - f_0) \\
k_3 &= hf_3 + a_{12}h^2 Df_0 + a_{33}h^2 f'_{x,0}(f_2 - f_0) + C_{33}h^2 f'_{x,0}(f_3 - f_0)
\end{aligned}
$$

$$
k = R_1 k_1 + R_2 k_2 + R_3 k_3
$$

ahol a 2 index a $(t_0 + E_1 h;\ x_0 + k_1^*)$, a 3 index pedig a $[t_0 + (E_{21} + E_{22})h;\ x_0 + k_2^*]$ helyre vonatkozik.

Itt - a (20) formula mintájára -

$$hf_2 = hf_0 + E_1 h^2 Df_0 + (b_{12} h^3 f'_x Df + b_{13} h^4 f'^2_x Df) +$$

$$+ \frac{E_1^2}{2} h^3 D^2 f + (E_1 b_{12} h^4 Df'_x Df + E_1 b_{13} h^5 f'_x Df'_x Df) +$$

$$+ \frac{1}{2} b_{12}^2 h^5 f''_{xx} (Df)^2 + \cdots + \frac{E_1^3}{6} h^4 D^3 f + \Big(\frac{E_1^2}{2} b_{12} h^5$$

$$Df D^2 f'_x + \cdots\Big) + \frac{E_1^4}{24} h^5 D^4 f + \cdots ,$$

továbbá - bevezetve az $E_{21} + E_{22} = E_2$ jelölést - f_3 argumentuma így írható:

$$t_0 + E_2 h; \quad x_0 + E_2 h f_0 + h^2 (E_1 E_{22} + b_{22}) Df +$$

$$+ h^3 \frac{E_1^2}{2} E_{22} D^2 f + h^3 (b_{12} E_{22} + b_{23} E_1) f'_x Df +$$

$$+ h^4 \frac{E_1^3}{6} E_{22} D^3 f + h^4 (b_{23} \frac{E_1^2}{2} f'_x D^2 f + h^4 E_1 b_{12} E_{22} Df'_x Df +$$

$$+ h^4 (b_{13} E_{22} + b_{23} b_{12}) f'^2_x Df .$$

Ezért

$$hf_3 = hf_0 + E_2 h^2 Df + h^3 (E_1 E_{22} + b_{22}) f'_x Df +$$

$$+ h^4 \frac{E_1^2}{2} E_{22} f'_x D^2 f + h^4 (b_{12} E_{22} + b_{23} E_1) f'^2_x Df +$$

$$+ h^5 \frac{E_1^3}{6} E_{22} f'_x D^3 f + h^5 \frac{E_1^2}{2} b_{23} f'^2_x D^2 f + h^5 E_1 b_{12}$$

$$E_{22} f'_x Df'_x Df$$

$$+ h^5 (b_{13} E_{22} + b_{23} b_{12}) f'^3_x Df + \frac{E_2^2}{2} h^3 D^2 f +$$

$$+ h^4 (E_2 E_1 E_{22} + E_2 b_{22}) Df Df'_x + h^5 \frac{E_1^2}{2} E_2 E_{22} D^2 f Df'_x +$$

$$+ h^5 (b_{12} E_{22} + b_{23} E_1 E_2) f'_x Df'_x Df + \cdots +$$

$$+ h^5 \frac{(E_1 E_{22} + b_{22})^2}{2} f''_{xx} (Df)^2 + h^4 \frac{E_2^3}{6} D^3 f +$$

$$+ h^5 \frac{E_2^2}{2} (E_1 E_{22} + b_{22}) Df D^2 f'_x + \cdots + h^5 \frac{E_2^4}{24} D^4 f + \cdots$$

Egyenleteink első csoportja 9 egyenletből áll és 9 ismeretlent tartalmaz; közülük kettő szeparálható, mert csak ez tartalmazza R_1-et ill. a_{12}-t. A 7 maradék egyenlet D^2f, D^3f, D^4f, $DfDf'_x$, $DfD^2f'_x$, $f''_{xx}\,(Df)^2$ ill. $D^2fDf'_x$ együtthatóinak egyenlőségét fejezi ki. Ezek az egyenletek:

$$\frac{1}{6} = R_2 \frac{E_1^2}{2} + R_3 \frac{E_2^2}{2}$$

$$\frac{1}{24} = R_2 \frac{E_1^3}{6} + R_3 \frac{E_2^3}{6}$$

$$\frac{1}{120} = R_2 \frac{E_1^4}{24} + R_3 \frac{E_2^4}{24}$$

$$\frac{1}{8} = R_2 E_1 b_{12} + R_3 E_2 (E_1 E_{22} + b_{22})$$

$$\frac{1}{20} = R_2 \frac{E_1^2}{2} b_{12} + R_3 \frac{E_2^2}{2} (E_1 E_{22} + b_{22})$$

$$\frac{1}{40} = R_2 \frac{b_{12}^2}{2} + R_3 \frac{(E_1 E_{22} + b_{22})^2}{2}$$

$$\frac{1}{30} = R_3 \frac{E_1^2}{2} E_2 E_{22}$$

Tekintsük először egyrészt az első két, másrészt a negyedik-ötödik egyenletet. Előbbiből

$$R_2 E_1^2 + R_3 E_2^2 = \frac{1}{3}$$

$$R_2 E_1^3 + R_3 E_2^3 = \frac{1}{4}$$

és így

$$R_2 = \frac{E_2^2\left(\frac{1}{3}E_2 - \frac{1}{4}\right)}{E_1^2 E_2^2 (E_2 - E_1)} = \frac{1}{12}\,\frac{4E_2 - 3}{E_1^2 (E_2 - E_1)}$$

$$R_3 = \frac{E_1^2\left(\frac{1}{4} - \frac{1}{3}E_1\right)}{E_1^2 E_2^2 (E_2 - E_1)} = \frac{1}{12}\,\frac{3 - 4E_1}{E_2^2 (E_2 - E_1)}$$

Igy a harmadik egyenlet szerint fent kell állnia E_1 és E_2 között a

$$\frac{1}{12} E_1^2 \frac{4E_2 - 3}{E_2 - E_1} + \frac{1}{12} E_2^2 \frac{3 - 4E_1}{E_2 - E_1} = \frac{1}{5}$$

azaz a

$$4E_1E_2(E_1 - E_2) + 3(E_2^2 - E_1^2) = \frac{12}{5}(E_2 - E_1)$$

azaz a

$$3(E_2 + E_1) - 4E_1E_2 = \frac{12}{5}$$

azaz végülis a

$$15(E_2 + E_1) - 20E_1E_2 = 12$$

egyenletnek.

Az utóbbiakban bevezetve az $E_1E_{22} + b_{22} = \omega$ röviditést, az egyenletek szerint

$$R_2 E_1 b_{12} + R_3 E_2 \omega = \frac{1}{8}$$

$$R_2 E_1^2 b_{12} + R_3 E_2^2 \omega = \frac{1}{10}$$

amiből

$$b_{12} = \frac{R_3 E_2 \left(\frac{1}{8} E_2 - \frac{1}{10}\right)}{R_2 R_3 E_1 E_2 (E_2 - E_1)} = \frac{1}{40} \frac{5E_2 - 4}{R_2 E_1 (E_2 - E_1)}$$

ill.

$$\omega = \frac{R_2 E_1 \left(\frac{1}{10} - \frac{1}{8} E_1\right)}{R_2 R_3 E_1 E_2 (E_2 - E_1)} = \frac{1}{40} \frac{4 - 5E_1}{R_3 E_2 (E_2 - E_1)}$$

vagy R_2 ill. R_3 értékét helyettesitve:

$$b_{12} = \frac{12}{40} \cdot \frac{E_1(4 - 5E_1)}{4E_2 - 3} = \frac{3}{10} \frac{E_1(4 - 5E_1)}{4E_2 - 3}$$

és

$$\omega = \frac{12}{40} \cdot \frac{E_2(5E_2 - 4)}{3 - 4E_1} = \frac{3}{10} \frac{E_2(5E_2 - 4)}{3 - 4E_1}$$

Mármost a hatodik egyenlet szerint fenn kell állnia E_1 és E_2 között az

$$\frac{3}{10} \frac{(4 - 5E_1)^2}{(4E_2 - 3)} \cdot \frac{1}{2} \frac{1}{(E_2 - E_1)} +$$

$$+ \frac{3}{10} \frac{(5E_2 - 4)^2}{(3 - 4E_1)} \cdot \frac{1}{2} \frac{1}{(E_2 - E_1)} = 1$$

azaz a

$$3\{(4-5E_1)^2(3-4E_1)+(5E_2-4)^2(4E_2-3)\}=20(E_2-E_1)(3-4E_1)(4E_2-3)$$

relációnak is. A müveleteket elvégezve

$$3\{(16-40E_1+25E_1^2)(3-4E_1)+(25E_2^2-40E_2+16)(4E_2-3)\}=$$

$$=3\{-100E_1^3+235E_1^2-184E_1+100E_2^3-235E_2^2+$$

$$+184E_2=3\{100E_2^2+100E_1E_2+100E_1^2-235E_1-$$

$$-235E_2+184\}=20(-16E_1E_2+12E_1+12E_2-9)$$

Végül rendezve:

$$300E_2^2+620E_1E_2+300E_1^2-945E_1-945E_2+732=0$$

Hozzáadva ehhez az első egyenlet 31-szeresét

$$5(E_2^2+E_1^2)-8(E_2+E_1)+6=0$$

azaz

$$10(E_2^2+E_1^2)-16(E_2+E_1)+12=0$$

adódik. Levonva ebből az első egyenletet

$$10(E_2+E_1)^2-31(E_2+E_1)+24=0$$

adódik, amiből

$$E_1+E_2=\frac{31\pm 1}{20}$$

adódik. Az $E_1 + E_2 = \frac{32}{20} = \frac{8}{5}$ választással az első egyenletből

$$E_1 \cdot E_2 = \frac{3}{20} \cdot 8 - \frac{12}{20} = \frac{12}{20} = \frac{3}{5},$$

azaz E_1 és E_2 az

$$x^2 - \frac{8}{5}x + \frac{3}{5} = 0$$

egyenlet gyökei. Itt $x = \frac{8 \pm \sqrt{64-60}}{10} = \frac{8 \pm 2}{10},$

azaz $E_1 = \frac{3}{5}$ és $E_2 = 1$.

Visszahelyettesitve

$$R_2 = \frac{1}{12} \cdot \frac{1}{\frac{9}{25} \cdot \frac{2}{5}} = \frac{125}{216} = \left(\frac{5}{6}\right)^3$$

$$R_3 = \frac{1}{12} \frac{3 - \frac{5_{12}}{5}}{\frac{2}{5}} = \frac{1}{12} \cdot \frac{3}{2} = \frac{1}{8} = \left(\frac{1}{2}\right)^3 =$$

$$= \frac{3^3}{6^3} = \frac{27}{216},$$ és végül

$$R_1 = \frac{64}{216} = \frac{4^3}{6^3}$$

Továbbá

$$b_{12} = \frac{3}{10} \cdot \frac{\frac{3}{5}(4-3)}{1} = \frac{9}{50} \text{ és}$$ és

$$\omega = E_1 E_{22} + b_{22} = \frac{3}{10} \cdot \frac{1}{3 - 4\frac{3}{5}} = \frac{3}{10} \cdot \frac{5}{15-12} = \frac{1}{2}.$$

Végül az utolsó egyenletből

$$E_{22} = \frac{1}{15} \cdot \frac{1}{R_3 E_1^2 E_2} = \frac{1}{15} \cdot \frac{216}{27} \cdot \frac{25}{9} = \frac{8 \cdot 25}{9 \cdot 15} =$$

$$= \frac{40}{27}, \quad \text{és így} \quad E_{21} = 1 - E_{22} = \frac{13}{27},$$

végül

$$b_{22} = \omega - E_1 E_{22} = \frac{1}{2} - \frac{3}{5} \cdot \frac{40}{27} = \frac{1}{2} - \frac{8}{9} = -\frac{7}{18}.$$

Végül Df együtthatóinak egyenlősége alapján

$$\frac{1}{2} = (R_1 + R_2 + R_3) a_{12} + R_2 E_1 + R_3 E_2,$$

amiből

$$a_{12} = \frac{1}{2} - R_2 E_1 - R_3 E_2 = \frac{1}{2} - \frac{3}{5} \cdot \frac{125}{216} - \frac{27}{216} =$$

$$= \frac{108 - 75 - 27}{216} = \frac{6}{216} = \frac{1}{36}$$

Ujabb 3 egyenlet adódik $f'_x\, D^2f$, $f'_x\, D^3f$ és $f'_x\, Df'_x\, Df$ együtthatóinak egyeztetése révén:

$$\frac{1}{24} = R_2\left\{a_{23} \cdot \frac{E_1^2}{2}\right\} + R_3\left\{\frac{E_1^2}{2} E_{22} + a_{33} \cdot \frac{E_1^2}{2} + c_{33} \frac{E_2^2}{2}\right\}$$

$$\frac{1}{120} = R_2\left\{a_{33} \cdot \frac{E_1^3}{6}\right\} + R_3\left\{\frac{E_1^3}{6} E_{22} + a_{33} \frac{E_1^3}{6} + c_{33} \frac{E_2^3}{6}\right\}$$

$$\frac{7}{120} = R_2\left\{E_1 b_{13} + a_{23} \cdot E_1 b_{12}\right\} + R_3\left\{E_1 b_{12} E_{22} + b_{12} E_2 E_{22} + \right.$$

$$\left. + b_{23} E_1 E_2 + a_{33} E_1 b_{12} + c_{33} (E_1 E_2 E_{22} + E_2 b_{22})\right\}$$

E rendszerben 4 ismeretlen lép fel; az első kettőben három.

Igy az $a_{33} = 0$ választással ez a két egyenlet:

$$\frac{1}{24} = \frac{125}{216} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{9}{25} \cdot a_{23} + \frac{27}{216} \cdot \frac{1}{2} \frac{9}{25} \cdot \frac{40}{27} + \frac{27}{216} \cdot \frac{1}{2} c_{33}$$

ill.

$$\frac{1}{120} = \frac{1}{216} \cdot \frac{1}{6} \cdot 27 a_{23} + \frac{27}{216} \cdot \frac{1}{6} \frac{1}{125} \cdot 40 + \frac{27}{216} \cdot \frac{1}{6} c_{33}$$

Innét

$$\frac{5}{24\cdot 5}-\frac{1}{24}\cdot\frac{1}{5}\cdot 4=\frac{5}{24}\cdot\frac{1}{2}a_{23}+\frac{1}{16}c_{33}$$

$$\frac{1}{120}-\frac{1}{6}\,\frac{1}{25}=\frac{1}{6}\cdot\frac{1}{8}a_{23}+\frac{1}{6}\cdot\frac{1}{8}c_{33}$$

$$2(5-4)=2=25a_{23}+25c_{33}$$

$$10-8=2=25a_{23}+15c_{33}$$

amiből $c_{33}=0$ és $a_{23}=\frac{2}{25}$

Áttérve a harmadik egyenletre, ott a $b_{23}=0$ választással élünk. Igy

$b_{13}=0$ adódik, $f_x'^2 D^2 f$ együtthatóinak egyeztetése az

$$\frac{1}{120}=R_2 a_{24}\frac{E_1^2}{2}+R\frac{E_1^2}{2}b_{23}\,)$$

amiből

$a_{24}=\frac{2}{25}$ adódik.

Végül $f_x'\,Df$, $f_x'^2\,Df$ ill. $f_x'^3\,Df$ együtthatóinak egyeztetése révén az

$$\frac{1}{6}=R_1 a_{13}+R_2\{b_{12}+a_{23}E_1\}+R_3\{(E_1E_{22}+b_{22})\}$$

ill.

$$\frac{1}{24}=R_1 a_{14}+R_2\{b_{13}+a_{23}b_{12}+a_{24}E_1\}+R_3\{(b_{12}E_{22}+b_{23}E_1)+\ldots\}$$

ill.

$$\frac{1}{120} = R_1 a_{15} + R_2 \{a_{23} b_{13} + a_{24} b_{12}\} + R_3 \{(b_{13} E_{22} + b_{23} b_{12}) + \ldots\}$$

egyenletek adódnak. Ezekből

$$a_{13} = -\frac{3}{32}$$

$$a_{14} = -\frac{3}{32}$$

$$a_{15} = \emptyset .$$

Formulánk tehát

$$k_1 = hf_0 + \frac{1}{36} h^2 Df_0 - \frac{3}{32} h^3 f'_{x,0} Df_0 - \frac{3}{32} h^4 f'_{x,0} Df_0$$

$$k_1^* = \frac{3}{5} hf_0 + \frac{9}{50} h^2 Df_0$$

$$k_2 = hf_2 + \frac{1}{36} h^2 Df_0 + \frac{2}{25} h^2 f'_{x,0}(f_2 - f_0) + \frac{2}{25} h^3 f'_{x,0}(f_2 - f_0) \qquad (28)$$

$$k_2^* = h\left(\frac{40}{27} f_2 - \frac{13}{27} f_0\right) - \frac{7}{18} h^2 Df_0$$

$$k_3 = hf_3 + \frac{1}{36} h^2 Df_0 \qquad k = \frac{64}{216} k_1 + \frac{125}{216} k_2 + \frac{27}{216} k_3$$

alaku.

Mindkét tipushoz hasonló strukturáju magasabb fokszámu eljárásokat is könnyen kidolgozhatunk.

Formuláink erejét normál és erősen "meredek" megoldásgörbével biró egyenletek esetére az 1. ill. a 2. táblázat érzékelteti! Megemlitjük végül, hogy a fenti formulákban t és x komplex mennyiségek is lehetnek.

3. §. Hibabecslés és a formularendszer további javitása.

A megadott formulák elméleti hibabecslése a Runge-Kutta tipusu formuláknál szokásosan használt módon megy; a fellépő konstansok becslésére egy későbbi munkában még visszatérünk, az azonban részletes vizsgálat nélkül is látható, hogy ötször vagy hatszor differenciálható $f(t,x)$ esetén egy-egy lépés hibája h^5-nél vagy h^6-nál arányos. A gyakorlatban ugyanis csak ezt az asszimptotikus tényt szoktuk felhasználni a klasszikus Runge-Kutta formulák használatánál is, mert az exakt formulákban szereplő állandók csak óriási munkával becsülhetők. Ilyen szempontból a 2.§.-ban bevezetett ujtipusu formulák némileg előnyösebbek, mint az eredeti Runge-Kutta formulák, mert a megelőző lépésben számitott segédnövekmények felhasználásával ötödrendü formulát is készithetünk. Ilymódon menet közben egyrészt lépésenként h^6-nal arányos hibával kell csak számolnunk, másrészt minthogy ugyanekkor egy h^5-nél arányos hibáju mennyiség kiszámitása is megtörténik, módunk van a lépésköz szükség ill. lehetőség szerinti menetközbeni megváltoztatására anélkül, hogy a Runge-Kutta módszernél szokásos módon ismételten ugyanazon a részintervallumon kellene számolnunk. Sőt ugyanezen növekmények egyidejü felhasználásával a megelőző alapponttól mért kétszeres lépésközü lépés ötödfoku közelitését is meg tudjuk adni. Ezen uj formulák levezetése céljából azonban szükségünk van az alábbi segédtételre:

1. Segédtétel. Az $f(t,x)$ függvény legyen a (t_0,x_0) hely egy alkalmas környezetében (pl. a $|t-t_0| \leq R$; $|x-x_0| \leq S$ környezetben, ahol még $|f(t,x)| \leq \frac{S}{R}$ is teljesül) ötször folytonosan differenciálható. Legyen $h \leq R$, $|k(h)| \leq S$, és tegyük fel, hogy $|x(t_0+h;\, x_0,t_0) - (x_0+k)| = \mathcal{O}(h^5)$ érvényes. Érvényes ekkor az $|x(t_0;\, x_0+k,\, t_0+h) - x_0| = \mathcal{O}(h^5)$ reláció is.

Bizonyitás: Feltevéseink értelmében $x(t_0+h;\, x_0,t_0) - x_0 = x_1-x_0 = k(h) + C(h).h^5$, és itt $C(h) = C_1$, ha $h \leq R$.

Emellett, feltételeink szerint a differenciálegyenlet a tekintett tartományban egyértelmüen oldható meg, és igy

$$x(t_0;\, x_1,\, t_0 + h) = x_0$$

is érvényes. Minthogy pedig f az x-ben feltételeink szerint Lipschitz-feltételt elégit ki - éspedig t-ben egyenletesen a $|t - t_0| \leq R$; $|x-x_0| \leq S$ tartományban, azért (L-lel jelölve a Lipschitz-feltétel állandóját)

$$|x(t_0;\, x_0+k,\, t_0+h) - x_0| = |x(t_0;\, x_0+k,\, t_0+h) -$$

$$- x(t_0;\, x_1;\, t_0+h)| \leq |k + x_0 - x_1| \cdot \exp Lh \leq C(h)\exp Lh \cdot h^5 = \mathcal{O}(h^5)$$

(l. pl. [6]), ahogy állitottuk.

E segédtétel felhasználásával további formulát adunk meg: hármat arra a célra, hogy a (t_o,x_o) bázispontban meghatározva az ismertetett formulák alapján a k_1, k_1^*, k_2 növekményeket és ezen a réven a negyedfokban pontos k-t, továbbá felhasználva a (t_o-h, x) ill. (t_o-2h, x) ill. $(t_o - \frac{h}{2}, x)$ pontra támaszkodó k_1 és k_2-ben szereplő tagokat, egy ötödfokban pontos k-t is meghatározzunk (itt tehát figyelembe vesszük a lépésköz-felezés ill. lépésköz duplikálás lehetőségét is). Másik három formula révén pedig - ugyanezen adatok révén - a (t_o-h, x), $(t_o,-2h, x)$ ill. $(t_o- \frac{h}{2}, x)$ pontból kiindulva határozzuk meg a t_o+h pontbeli, $x(t_o+h)$ értékhez tartozó $x(t_o+h) - x$ növekményt ötödfokban közelítő k_s értékét is.

Formuláink tehát ilyen alakuak:

$$\hat{k} = R_{-2}hf_{-2} + R_{-1}hf_{-1} + R_0hf_0 + R_1hf_1 + S_{-2}h^2Df_{-2}$$

$$+ S_0h^2Df_0 + T_{-2,1}h^2f'_{x,-2}(f_{-2}-f_0) + T_{-2,2}h^2f'_{x,-2}(f_{-1}-f_0) +$$

$$+ T_{-2,3}h^2f'_{x,-2}(f_1-f_0) + T_{0,1}h^2f'_{x,0}(f_{-2}-f_0) + T_{0,2}h^2f_{x,0}(f_{-1}-f_0)$$

$$+ T_{0,3}h^2f'_{x,0}(f_1-f_0) + V_1h^3f'^{2}_{x,-2}(f_1-f_0) + V_2h^3f'_{x,0}\cdot(f_{-2}-f_0)$$

$$+ V_3h^3f'^{2}_{x,0}(f_1-f_0) + Wh^4f'^{3}_{x,0}(f_1-f_0)$$

ill.

$$
\begin{aligned}
k_s = {} & r_0 h f_0 + r_1 h f_1 + r_2 h f_2 + r_3 h f_3 + s_0 h^2 D f_0 + s_2 h^2 D f_2 \\
& + t_{0,1} h^2 f'_{x,0} (f_1 - f_0) + t_{0,2} h^2 f'_{x,0} (f_2 - f_0) + t_{0,3} h^2 f'_{x,0} (f_3 - f_0) \\
& + t_{2,1} h^2 f'_{x,2} (f_1 - f_0) + t_{2,2} h^2 f'_{x,2} (f_2 - f_0) + t_{2,3} h^2 f'_{x,2} (f_3 - f_0) + \\
& + v_1 h^3 f'_{x,0} (f_1 - f_0) + v_2 h^3 f'^2_{x,0} (f_2 - f_0) + v_3 h^3 f'^2_{x,2} (f_1 - f_0) + w h^4 f^3_{x,0} (f_1 - f_0)
\end{aligned}
\tag{30}
$$

ahol az első formulában a negativ indexek vonatkoznak a megelőző lépésbeni segédnövekményekre, a második formulában viszont ezek - értelemszerüen - a 0 ill. 1 indexet viselik. /Megemlitjük, hogy itt a (24) formulákra kivánunk támaszkodni, ugyanugy lehetne kiépiteni természetesen a (25) formulákkal kapcsolatosan is fonomitást./

Először a (29) alatti formulát tekintjük. E formula - 2 indexü elemei a t_0- h, x helyre vonatkoznak, ahol = 1, 2 vagy $\frac{1}{2}$ - attól függően, hogy lépésköz-tartás, felezés vagy duplikálás történt-e a legutolsó lépésben. x-et viszont - hogy a -2-es indexü tagok kifejtése ötödfokban pontos legyen - az 1. segédtétel értelmében az x_0 helyről a hatványsor negyedfoku szeletéből extrapolálhatjuk, ha x_0 ötödfoku közelitése x-re vonatkozóan $x(t_0)$-nak. Ilymódon

$$
\begin{aligned}
\tilde{x} = {} & x_0 - \vartheta h f_0 + \frac{\vartheta^2 h^2}{2} D f_0 - \frac{\vartheta^3 h^3}{6} D^2 f_0 - \frac{\vartheta^3 h^3}{6} f'_{x,0} D f_0 \\
& + \frac{\vartheta^4 h^4}{24} D^3 f_0 + \frac{\vartheta^4 h^4}{24} f'_{x,0} D^2 f_0 + \frac{\vartheta^4 h^4}{8} D f'_{x,0} D f_0 + \frac{\vartheta^4 h^4}{24} f'_{x,0} D f_0 \pm \cdots
\end{aligned}
$$

tehát (a 0 indexet elhagyva)

$$hf_{-2} = hf(t_0 - \vartheta h\,;\, x_0 - \vartheta h f_0 + \Theta) = hf - \vartheta h^2 Df + \frac{\vartheta^2 h^3}{2} f'_x Df$$

$$- \frac{\vartheta^3 h^4}{6} f'_x D^2 f - \frac{\vartheta^3 h^4}{6} f'^2_x Df + \frac{\vartheta^4 h^5}{24} f'_x D^3 f + \frac{\vartheta^4 h^5}{24} f'^2_x D^2 f +$$

$$+ \frac{\vartheta^4 h^5}{24} f'_x Df'_x Df + \frac{\vartheta^4 h^5}{24} f'^3_x Df + \frac{\vartheta^2 h^3}{2} D^2 f - \frac{\vartheta^3 h^4}{2} Df\, Df'_x +$$

$$+ \frac{\vartheta^4 h^5}{6} D^2 f\, Df'_x + \frac{\vartheta^4 h^5}{8} f''_{xx} (Df)^2 - \frac{\vartheta^3 h^4}{6} D^3 f + \frac{\vartheta^4 h^5}{4} Df\, D^2 f'_x +$$

$$+ \frac{\vartheta^4 h^5}{24} D^4 f \pm \dots$$

és hasonlóképp

$$h^2 Df_{-2} = h^2 Df(t_0 - \vartheta h\,;\, x_0 - \vartheta h f_0 + \Theta) =$$

$$= h^2 Df - \vartheta h^3 D(Df) + \frac{\vartheta^2 h^4}{2} \frac{\partial}{\partial x}(Df)\, Df - \frac{\vartheta^3 h^5}{6} \frac{\partial}{\partial x}(Df)\, D^2 f -$$

$$- \frac{\vartheta^3 h^5}{6} \frac{\partial}{\partial x}(Df)\, f'_x Df + \frac{\vartheta^2 h^4}{2} D^2(Df) - \frac{\vartheta^3 h^5}{2} D\left[\frac{\partial}{\partial x}(Df)\right]\cdot Df -$$

$$- \frac{\vartheta^3 h^5}{6} D^3(Df) \pm \dots =$$

$$= h^2 Df - \vartheta h^3 (D^2 f + f'_x Df) + \frac{\vartheta^2 h^4}{2} Df(Df'_x + f'^2_x) -$$

$$- \frac{\vartheta^3 h^5}{6} D^2 f (Df'_x + f'^2_x) - \frac{\vartheta^3 h^5}{6} f'_x Df (Df'_x + f'^2_x) +$$

$$+ \frac{\vartheta^2 h^4}{2} (D^3 f + 2 Df\, Df'_x + f'_x D^2 f) - \frac{\vartheta^3 h^5}{2} [D^2 f'_x Df +$$

$$+ f''_{xx} (Df)^2 + 2 f'_x Df'_x Df] - \frac{\vartheta^3 h^5}{6} [D^4 f + 3 Df\, D^2 f'_x +$$

$$+ 3 D^2 f\, Df'_x + f'_x D^3 f] \pm \dots =$$

$$= h^2 Df - \vartheta h^3 D^2 f - \vartheta h^3 f'_x Df + \frac{\vartheta^2 h^4}{2} D^3 f + \frac{\vartheta^2 h^4}{2} f'_x D^2 f +$$

$$+ \frac{3\vartheta^2 h^4}{2} Df Df'_x + \frac{\vartheta^2 h^4}{2} f'_x Df - \frac{\vartheta^3 h^5}{6} D^4 f - \frac{\vartheta^3 h^5}{6} f'_x D^3 f$$

$$- \frac{2\vartheta^3 h^5}{3} Df'_x D^2 f - \vartheta^3 h^5 Df D^2 f'_x - \frac{\vartheta^3 h^5}{2} f''_{xx} (Df)^2 -$$

$$- \frac{\vartheta^3 h^5}{6} f'^2_x D^2 f - \frac{7}{6} \vartheta^3 h^5 f'_x Df'_x Df - \frac{\vartheta^3 h^5}{6} f'^3_x Df \pm \dots$$

végül

$$f'_{x,-2} = f'_x - \vartheta h Df'_x + \frac{\vartheta^2 h^2}{2} f''_{xx} Df + \frac{\vartheta^2 h^2}{2} D^2 f'_x \pm \dots$$

Ennek alapján számithatjuk ki a -1 indexnek megfelelő (t,x) helyet. A (24) képlet szerint ti. $E_1 = \frac{3}{4}$, és igy

$$t_{-1} = t_{-2} + \frac{3}{4}\vartheta h = t_0 - \frac{1}{4}\vartheta h,$$

továbbá

$$x_{-1} = \tilde{x} + \frac{3}{4}\vartheta h f_{-2} + \frac{9}{32} h^2 \vartheta^2 Df_{-2}$$

azaz negyedfoku pontossággal

$$x_{-1} = x_0 - \vartheta h f_0 + \frac{1}{2}\vartheta^2 h^2 Df_0 - \frac{1}{6}\vartheta^3 h^3 D^2 f_0 - \frac{1}{6}\vartheta^3 h^3 f'_x Df$$

$$+ \frac{1}{24}\vartheta^4 h^4 D^3 f + \frac{1}{24}\vartheta^4 h^4 f'_x D^2 f + \frac{1}{8}\vartheta^4 h^4 Df'_x Df + \frac{1}{24}\vartheta^4 h^4 f'^2_x Df \pm \dots$$

$$+ \frac{3}{4}\vartheta h f - \frac{3}{4}\vartheta^2 h^2 Df + \frac{3}{8}\vartheta^3 h^3 f'_x Df - \frac{3}{24}\vartheta^4 h^4 f'_x D^2 f - \frac{3}{24}\vartheta^4$$

$$h^4 f'^2_x Df + \frac{3}{8}\vartheta^3 h^3 D^2 f - \frac{3}{8}\vartheta^4 h^4 Df'_x Df - \frac{3}{24}\vartheta^4 h^4 D^3 f \pm \dots$$

$$+\frac{9}{32}\vartheta^2h^2Df-\frac{9}{32}\vartheta^3h^3D^2f-\frac{9}{32}\vartheta^3h^3f'_xDf+\frac{9}{64}\vartheta^4h^4D^3f$$

$$+\frac{9}{64}\vartheta^4h^4f'_xD^2f+\frac{27}{64}\vartheta^4h^4DfDf'_x+\frac{9}{64}\vartheta^4h^4f'^2_xDf\pm\dots$$

$$=x_0-\frac{1}{4}\vartheta hf+\frac{1}{32}\vartheta^2h^2Df-\frac{7}{96}\vartheta^3h^3D^2f-\frac{7}{96}\vartheta^3h^3f'_xDf$$

$$+\frac{11}{192}\vartheta^4h^4D^3f+\frac{11}{192}\vartheta^4h^4f'_xD^2f+\frac{11}{64}\vartheta^4h^4Df'_xDf+\frac{11}{192}h^4\vartheta^4f'^2Df\pm$$

Ennek alapján

$$hf_{-1}=hf_0-\frac{1}{4}\vartheta h^2Df+\frac{1}{32}\vartheta^2h^3f'_xDf-\frac{7}{96}\vartheta^3h^4f'_xD^2f-\frac{7}{96}\vartheta^3$$

$$h^4f'^2_xDf+\frac{11}{192}\vartheta^4h^5f'_xD^3f+\frac{11}{192}\vartheta^4h^5f'^2_xD^2f+\frac{11}{192}\vartheta^4h^5f'^3_xDf\pm\dots$$

$$+\frac{1}{32}\vartheta^2h^3D^2f-\frac{1}{128}\vartheta^3h^4DfDf'+\frac{7}{384}\vartheta^4h^5Df'_xD^2f+$$

$$+\frac{73}{384}\vartheta^4h^5f'_xDf'_xDf\pm\dots+\frac{1}{2048}\vartheta^4h^5f''_{xx}(Df)^2-$$

$$-\frac{1}{384}\vartheta^3h^4D^3f+\frac{1}{1024}\vartheta^4h^5DfD^2f'_x+\dots+\frac{1}{6144}\vartheta^4h^5D^4f+\dots$$

továbbá

$$\cdot\, h^2Df_{-1}=h^2Df-\frac{1}{4}h^3\vartheta D(Df)+\frac{1}{32}\vartheta^2h^4\frac{\partial}{\partial x}(Df).Df-$$

$$-\frac{7}{96}\vartheta^3h^5\frac{\partial}{\partial x}(Df).D^2f-\frac{7}{96}\vartheta^3h^5\frac{\partial}{\partial x}(Df)f'_xDf\pm\dots+$$

$$+\frac{1}{32}\vartheta^2h^4D^2(Df)-\frac{1}{128}\vartheta^3h^5D\left(\frac{\partial}{\partial x}(Df)\right)Df-\frac{1}{384}\vartheta^3h^5D^3(Df)\pm\dots$$

$$=h^2Df-\frac{1}{4}h^3\vartheta D^2f-\frac{1}{4}h^3\vartheta f'_xDf+\frac{3}{232}\vartheta^2h^4Df'_xDf+$$

$$+\frac{1}{32}\vartheta^2h^4f'^2_x Df-\frac{31}{384}\vartheta^3h^5Df'_xD^2f-\frac{7}{96}\vartheta^3h^5f'^2_xD^2f-$$

$$-\frac{17}{192}\vartheta^3h^5f'_xDf'_xDf-\frac{7}{96}\vartheta^3h^5f'^3_xDf+\frac{1}{32}\vartheta^2h^4D^3f+$$

$$+\frac{1}{32}\vartheta^2h^4f'_x\cdot D^2f-\frac{1}{64}\vartheta^3h^5D^2f'_xDf$$

$$-\frac{1}{128}\vartheta^3h^5f''_{xx}(Df)^2-\frac{1}{384}\vartheta^3h^5D^4f$$

$$-\frac{1}{384}\vartheta^3h^5f'_xD^3f-\frac{1}{128}\vartheta^3h^5Df'_xD^2f+\dots$$

és végül

$$f'_{x,-1}=f'_x-\frac{1}{4}\vartheta hDf'_x+\frac{1}{32}\vartheta^2h^2f''_{xx}Df+\frac{1}{32}\vartheta^2h^2D^2f'_x\pm\dots$$

Ami végül az 1. indexü helyet illeti, itt a (24) képlet szerint $t = t_o + \frac{3}{4}h$; $x = x_o + \frac{3}{4}h\,f_o + \frac{9}{32}h^2Df$

és igy

$$hf_1=hf+\frac{3}{4}h^2Df+\frac{9}{32}h^3f'_xDf+\frac{9}{32}h^3D^2f+\frac{27}{128}h^4Df'_xDf$$

$$+\frac{81}{2048}h^5f''_{xx}(Df)^2+\frac{9}{128}h^4D^3f+\frac{81}{1024}h^5D^2f'_xDf+\dots+\frac{27}{2048}h^5D^4f$$

h^2Df_1 és $f'_{x,1}$ értékére nincs szükségünk.

Mármost egyenleteink elsö csoportja hét egyenletből áll, amelyek D^2f, D^3f, D^4f, $Df'_x\,Df$, $D^2f'_x\,Df$, $Df'_x\,D^2f$, és $f''_{xx}(Df)^2$ együtthatóinak azonosságát fejezik ki:

$$\frac{1}{6}=R_{-2}\cdot\frac{\vartheta^2}{2}+R_{-1}\cdot\frac{\vartheta^2}{32}+R_1\cdot\frac{9}{32}+S_{-2}\cdot(\vartheta)$$

$$\frac{1}{24} = R_{-2}\cdot\left(-\frac{\vartheta^3}{6}\right) + R_{-1}\left(-\frac{\vartheta^3}{384}\right) + R_1\cdot\frac{9}{128} + S_{-2}\cdot\left(\frac{\vartheta^2}{2}\right)$$

$$\frac{1}{120} = R_{-2}\cdot\frac{\vartheta^4}{24} + R_{-1}\cdot\frac{\vartheta^4}{6144} + R_1\cdot\frac{27}{2048} + S_{-2}\left(-\frac{\vartheta^3}{6}\right)$$

$$\frac{1}{8} = R_{-2}\cdot\left(-\frac{\vartheta^3}{2}\right) + R_{-1}\cdot\left(-\frac{\vartheta^3}{128}\right) + R_1\frac{27}{128} + S_{-2}\cdot\frac{3}{2}\vartheta^2 +$$

$$+ T_{-2,1}\cdot\vartheta^2\cdot + T_{-2,2}\cdot\frac{1}{4}\vartheta^2 + T_{-2,3}\left(-\frac{3}{4}\vartheta\right)$$

$$\frac{1}{20} = R_{-2}\cdot\frac{\vartheta^4}{4} + R_{-1}\cdot\frac{\vartheta^4}{1024} + R_1\cdot\frac{81}{1024} + S_{-2}\cdot(-\vartheta^3) +$$

$$+ T_{-2,1}\cdot\left(-\frac{\vartheta^3}{2}\right) + T_{-2,2}\left(-\frac{\vartheta^3}{8}\right) + T_{-2,3}\cdot\frac{3}{8}\vartheta^2$$

$$\frac{1}{30} = R_{-2}\cdot\frac{\vartheta^4}{6} + R_{-1}\cdot\frac{7}{384}\vartheta^4 + R_1\cdot\phi + S_{-2}\cdot\left(-\frac{2\vartheta^3}{3}\right) +$$

$$+ T_{-2,1}\cdot\left(-\frac{\vartheta^3}{2}\right) + T_{-2,2}\left(-\frac{\vartheta^3}{32}\right) + T_{-2,3}\cdot\left(-\frac{9}{32}\vartheta\right)$$

$$\frac{1}{40} = R_{-2}\cdot\frac{\vartheta^4}{8} + R_{-1}\cdot\frac{\vartheta^4}{2048} + R_1\cdot\frac{81}{2048} + S_{-2}\cdot\left(-\frac{\vartheta^3}{2}\right) +$$

$$+ T_{-2,1}\cdot\left(-\frac{\vartheta^3}{2}\right) + T_{-2,2}\left(-\frac{\vartheta^3}{8}\right) + T_{-2,3}\cdot\frac{3}{8}\vartheta^2$$

Itt a hetedik egyenletből kivonva az ötödiket, a különbség az első három egyenlettel együtt egy négyismeretlenes lineáris egyenletrendszert képez, amelyből R_{-2}, R_{-1}, R_1 és S_{-2} megállapitható:

$$48\vartheta^2 R_{-2} + 3\vartheta^2 R_{-1} + 27R_1 - 96\vartheta S_{-2} = 16$$

$$-64\vartheta^3 R_{-2} - \vartheta^3 R_{-1} + 27R_1 + 192\vartheta^2 S_{-2} = 16$$

$$1280\vartheta^4 R_{-2} + 5\vartheta^4 R_{-1} + 405R_1 - 5120\vartheta^3 S_{-2} = 256$$

$$-1280\vartheta^4 R_{-2} - 5\vartheta^4 R_{-1} - 405R_1 + 5120\vartheta^3 S_{-2} = -256$$

- és ezekből az utolsó elhagyható, mert nem független a rendszer - amelyhez csatlakozik az eredeti rendszer negyedik, ötödik és hatodik egyenlete.

Ezek azonban szintén nem függetlenek, mert hatodik egyenletben $T_{-2,1}$, $T_{-2,2}$, ill. $T_{-2,3}$ együtthatói éppen $-\frac{\vartheta}{2}$ -szeresei a negyedik egyenlet megfelelő együtthatóinak. Ezért az első három egyenlethez még egy negyediket csatolunk, amely azt követeli meg, hogy az ötödik és hetedik egyenlet ne legyen ellentmondó. Igy az első három, további e függetlenséget megkövetelő egyenletből R_{-2}, R_{-1}, R_1 és S_{-2} megállapitható, (sőt a = 1 esetben R_{-1} szabadon választható, pl. 0-nak), majd a negyedik és ötödik egyenletből a $T_{-2,1}$, $T_{-2,2}$, $T_{-2,3}$, amelyek közül egyet szabadon választhatunk. Igy a $\vartheta = 1$, $\vartheta = 2$ ill. $\vartheta = \frac{1}{2}$ esetben.

$R_{-2} = -\frac{9}{490}$	ill. $= -\frac{3}{1936}$	ill. $= -\frac{24}{125}$
$R_{-1} = 0$	ill. $= 0$	ill. $= 0$
$R_1 = \frac{3968}{6615}$	ill. $= \frac{9728}{16335}$	ill. $= \frac{2048}{3375}$

$$S_{-2} = -\frac{1}{140} \quad \text{ill.} = -\frac{1}{880} \quad \text{ill.} = -\frac{1}{25}$$

$$T_{-2,1} = \phi \quad \text{ill.} = \phi \quad \text{ill.} = \phi$$

$$T_{-2,2} = \frac{62}{735} \quad \text{ill.} = -\frac{125}{3025} \quad \text{ill.} = -\frac{1024}{875}$$

$$T_{-2,3} = -\frac{186}{735} \quad \text{ill.} = -\frac{304}{9075} \quad \text{ill.} = -\frac{512}{2625}$$

A fentiekhez csatlakozóan f ill. Df együtthatóinak azonosságából R_0 ill. S_0 is megállapitható. Valóban:

$$1 = R_0 + R_{-2} + R_{-1} + R_1$$

ill.

$$\frac{1}{2} = R_{-2}\cdot(-\vartheta) + R_{-1}\left(-\frac{1}{4}\vartheta\right) + R_1\cdot\frac{3}{4} + S_0 + S_{-2}\cdot$$

Innét

$$R_0 = \frac{113}{270} \quad \text{ill.} = \frac{106117}{261360} \quad \text{ill.} = \frac{79}{135}$$

$$S_0 = \frac{7}{180} \quad \text{ill.} = \frac{4477}{87120} \quad \text{ill.} = \frac{1}{90}$$

Ujabb három egyenletet kapunk $f_x' D^2 f$; $f_x' Df$ ill. $f_x' D^3 f$ együtthatóinak egyeztetésekor:

$$\frac{1}{24} = R_{-2}\cdot\left(-\frac{\vartheta^3}{6}\right) + R_{-1}\cdot\left(-\frac{7}{96}\vartheta^3\right) + R_1\cdot\phi + S_{-2}\cdot\frac{\vartheta^2}{2} +$$

$$+ T_{-2,1}\cdot\frac{\vartheta^2}{2} + T_{-2,2}\cdot\frac{\vartheta^2}{32} + T_{2,3}\cdot\frac{9}{32} +$$

$$+ T_{0,1}\cdot\frac{\vartheta^2}{2} + T_{0,2}\cdot\frac{\vartheta^2}{32} + T_{0,3}\cdot\frac{9}{32}$$

$$\frac{1}{6} = R_{-2}\cdot\frac{\vartheta^2}{2} + R_{-1}\cdot\frac{\vartheta^2}{32} + R_1\cdot\frac{9}{32} + S_{-2}\cdot(-\vartheta) +$$

$$+ T_{-2,1}\cdot(-\vartheta) + T_{-2,2}\cdot\left(-\frac{1}{4}\vartheta\right) + T_{-2,3}\cdot\frac{3}{4} +$$

$$+ T_{0,1}\cdot(-\vartheta) + T_{0,2}\cdot\left(-\frac{1}{4}\vartheta\right) + T_{0,3}\cdot\frac{3}{4}$$

$$\frac{1}{120} = R_{-2}\cdot\frac{\vartheta^4}{24} + R_{-1}\cdot\frac{11\vartheta^4}{192} + R_1\cdot\phi + S_{-2}\cdot\left(-\frac{\vartheta^3}{6}\right) +$$

$$+ T_{-2,1}\cdot\left(-\frac{\vartheta^3}{6}\right) + T_{-2,2}\cdot\left(-\frac{\vartheta^3}{384}\right) + T_{-2,3}\cdot\frac{9}{128}$$

$$+ T_{0,1}\cdot\left(-\frac{\vartheta^3}{6}\right) + T_{0,2}\cdot\left(-\frac{\vartheta^3}{384}\right) + T_{0,3}\cdot\frac{9}{128}$$

Ezen egyenletek alapján

$$T_{0,1} = -\frac{62}{15435} \qquad \text{ill.} = -\frac{38}{11979} \qquad \text{ill.} = -\frac{808}{39375}$$

$$T_{0,2} = \frac{6944}{15435} \qquad \text{ill.} = \frac{63536}{299475} \qquad \text{ill.} = \frac{108224}{55125}$$

$$T_{0,3} = \frac{5704}{15435} \qquad \text{ill.} = \frac{39829}{299475} \qquad \text{ill.} = \frac{86416}{275625}$$

Ujabb egyenlet adódik f'_x Df'_x Df együtthatói egyeztetése során:

$$\frac{7}{120} = R_{-2}\cdot\frac{7\vartheta^4}{24} + R_{-1}\cdot\frac{73\vartheta^4}{384} + R_1\cdot\phi + S_{-2}\cdot\left(-\frac{7}{6}\vartheta^3\right) +$$

$$+ T_{-2,1}\left(-\frac{\vartheta^3}{2} - \frac{\vartheta^3}{2}\right) + T_{-2,2}\cdot\left(-\frac{1}{128}\vartheta^3 - \frac{1}{32}\vartheta^3\right) + T_{-2,3}$$

$$\cdot\left(\frac{27}{128} - \frac{9}{32}\vartheta\right) + T_{0,1}\left(-\frac{\vartheta^3}{2}\right) + T_{0,2}\cdot\left(-\vartheta^3\frac{1}{128}\right) +$$

$$+ T_{0,3}\cdot\left(\frac{27}{128}\right) + V_1\cdot\left(-\frac{3}{2}\vartheta\right),$$

amiből

$$V_1 = \frac{4091}{123480} \qquad \text{ill.} = \phi \qquad \text{ill.} = \frac{661}{330750}$$

A következő két egyenlet $f_x'^2 Df$ ill. $f_x'^2 D^2 f$ együtthatóinak egyeztetéséből adódik:

$$\frac{1}{24} = R_{-2}\cdot\left(-\frac{\vartheta^3}{6}\right) + R_{-1}\cdot\left(-\frac{7\vartheta^3}{96}\right) + R_1\cdot\phi + S_{-2}\cdot\frac{\vartheta^2}{2} +$$

$$+ T_{-2,1}\cdot\frac{\vartheta^2}{2} + T_{-2,2}\cdot\frac{\vartheta^2}{32} + T_{-2,3}\cdot\frac{9}{32} +$$

$$+ T_{0,1}\cdot\frac{\vartheta^2}{2} + T_{0,2}\cdot\frac{\vartheta^2}{32} + T_{0,3}\cdot\frac{9}{32} +$$

$$+ V_1\cdot\frac{3}{4} + V_2\cdot(-\vartheta) + V_3\cdot\frac{3}{4}$$

ill.

$$\frac{1}{120} = R_{-2}\cdot\frac{\vartheta^4}{24} + R_{-1}\cdot\frac{11\vartheta^4}{192} + R_1\cdot\phi + S_{-2}\cdot\left(-\frac{\vartheta^3}{6}\right) +$$

$$+ T_{-2,1}\left(-\frac{\vartheta^3}{6}\right) + T_{-2,2}\cdot\left(-\frac{7\vartheta^3}{96}\right) + T_{-2,3}\cdot\phi +$$

$$+ T_{0,1}\cdot\left(-\frac{\vartheta^3}{6}\right) + T_{0,2}\cdot\left(-\frac{7\vartheta^3}{96}\right) + T_{0,3}\cdot\phi +$$

$$+ V_1\cdot\frac{9}{32} + V_3\,\frac{9}{32} + V_2\cdot\frac{\vartheta^2}{2}$$

amiből

$$V_2 = \frac{93}{2401} \qquad \text{ill.} = \frac{62567}{1098075} \qquad \text{ill.} = \frac{158143}{3675000}$$

$$V_3 = \frac{16213}{864360} \qquad \text{ill.} = \frac{500536}{3294225} \qquad \text{ill.} = \frac{130226}{4134375}$$

Végül $f_x'^3 Df$ együtthatóinak egyeztetésével:

$$\frac{1}{120} = R_{-2} \cdot \frac{\vartheta^4}{24} + R_{-1} \cdot \frac{11\vartheta^4}{192} + R_1 \cdot \phi + S_{-2} \cdot \left(-\frac{\vartheta^3}{6}\right) +$$

$$+ T_{-2,1} \cdot \left(-\frac{\vartheta^3}{6}\right) + T_{-2,2} \cdot \left(-\frac{7\vartheta^3}{96}\right) + T_{-2,3} \cdot \phi +$$

$$+ T_{0,1} \cdot \left(-\frac{\vartheta^3}{6}\right) + T_{0,2} \cdot \left(-\frac{7\vartheta^3}{96}\right) + T_{0,3} \cdot \phi +$$

$$+ V_1 \cdot \frac{9}{32} + V_3 \cdot \frac{9}{32} + V_2 \cdot \frac{\vartheta^2}{2} + W \cdot \frac{3}{4} \, ,$$

amiből

$$W = \phi \qquad \text{ill.} = -\frac{257488}{3294225} \qquad \text{ill.} = \phi$$

Formuláink tehát lépéstartás ($\vartheta = 1$) esetén:

$$\hat{k} \cong -0{,}01836734 6\, hf_{-2} + 0{,}4185185\, hf_0 + 5998488\, hf_1 +$$

$$+ 0{,}03888888\, h^2 Df_0 - 0{,}007142857\, h^2 Df_{-2} - 0{,}0843537 4\, h^2$$

$$f'_{x,-2}(f_{-1} - f_0) - 0{,}2530612\, h^2 f'_{x,-2}(f_1 - f_0) - 0{,}004016 8448$$

$$h^2 f'_{x,0}(f_{-2} - f_0) + 0{,}44988662\, h^2 f'_{x,0} \cdot (f_{-1} - f_0) + \tag{31}$$

$$+ 0{,}36954972\, h^2 f'_{x,0}(f_1 - f_0) + 0{,}03313087 1\, h^3 f'^2_{x,-2} \, .$$

$$\cdot (f_1 - f_0) + 0{,}038733860\, h^3 f'^{2}_{x,0} (f_{-2} - f_0) +$$

$$+ 0{,}0187572 3\, h^3 f'_{x,0} (f_1 - f_0);$$

lépésfelezés esetén ($\vartheta = 2$):

$$\hat{k} = -0{,}0015495867\, h f_{-2} + 0{,}4060185\, h f_0 + 0{,}59553106\, h f_1 -$$

$$- 0{,}001136363\, h^2 D f_{-2} + 0{,}05138888\, h^2 D f_0 - 0{,}05024793\, h^2 f'_{x,-2} (f_{-1} - f_0) -$$

$$- 0{,}03349862\, h^2 f'_{x,-2} (f'_1 - f_0) + 0{,}00317218\, h^2 f'_{x,0} (f_{-2} - f_0) + \qquad (32)$$

$$+ 0{,}21215794\, h^2 f'_{x,0} (f_{-1} - f_0) + 0{,}13299607\, h^2 f'_{x,0} (f_1 - f_0) + 0{,}056978803$$

$$h^3 f'^{2}_{x,0} (f_{-2} - f_0) + 0{,}15194347\, h^3 f'^{2}_{x,0} (f_1 - f_0) - 0{,}07816345\, h^4 f'^{3}_{x,0} (f_1 - f_0);$$

lépésduplikálás esetén ($\vartheta = 1/2$):

$$\hat{k} = -0{,}192\, h f_{-2} + 0{,}58518518\, h f_0 + 0{,}6068148\, h f_1 - 0{,}04\, h^2 D f_{-2} +$$

$$+ 0{,}01111111\, h^2 D f_0 - 1{,}170285\, h^2 f'_{x,-2} (f_{-1} - f_0) - 0{,}19504761\, h^2 f'_{x,-2}$$

$$(f_1 - f_0) - 0{,}020520634\, h^2 f'_{x,0} (f_{-2} - f_0) + 1{,}963247\, h^2 f'_{x,0} (f_{-1} - f_0) +$$

$$+ 0{,}31352743\, h^2 f'_{x,0} (f_1 - f_0) + 0{,}0019984882\, h^3 f'^{2}_{x,-2} \qquad (33)$$

$$(f_1 - f_0) + 0{,}04303210\, h^3 f'_{x,0} (f_{-2} - f_0) + 0{,}03149835$$

$$h^3 f'^{2}_{x,0} (f_1 - f_0).$$

Áttérünk most a k_s-ben szereplő együtthatók számitására. Egyszerübb, ha itt a megelőző növekmény lépésközét veszszük alapul, és a most végrehajtott lépésközt ehhez viszonyitjuk δh alakban (lépéstartás esetén $\delta = 1$ lépésfelezés esetén $\delta = \frac{1}{2}$, lépésduplikálás esetén $\delta = 2$). Itt tehát a 0 index a bázis, az 1 index igy a

$$t = t_0 + \frac{3}{4} h; \quad x = x_0 + \frac{3}{4} h f + \frac{9}{32} h^2 D f \qquad \text{alaku,}$$

és igy

$$hf_1 = hf + \frac{3}{4}h^2Df + \frac{9}{32}h^3f'_x Df + \frac{9}{32}h^3D^2f + \frac{27}{128}h^4 Df Df''_x$$

$$+ \frac{81}{2048} f''_{xx} (Df)^2 + \frac{9}{128}h^4D^3f + \frac{81}{1024}h^5D^2f'_x Df + \ldots + \frac{27}{2048}h^5D^4f + \ldots$$

A 2 indexre

$$t = t_0 + h; \quad x = x_0 + hf + \frac{h^2}{2}Df + \frac{h^3}{6}D^2f + \frac{h^3}{6}f'_x Df +$$

$$+ \frac{h^4}{24}D^3f + \frac{h^4}{24}f'_x D^2f + \frac{h^4}{8}Df'_x Df + \frac{h^4}{24}f'^2_x Df + \ldots$$

és igy

$$hf_2 = hf + h^2Df + \frac{h^3}{2}f'_x Df + \frac{h^4}{6}f'_x D^2f + \frac{h^4}{6}f'^2_x Df + \frac{h^5}{24}f'_x D^3f +$$

$$+ \frac{h^5}{24}f'^2_x D^2f + \frac{7h^5}{24}f'_x Df'_x Df + \frac{h^5}{24}f'^3_x Df + \frac{h^3}{2}D^2f +$$

$$+ \frac{h^4}{2}Df Df'_x + \frac{h^5}{6}D^2f Df'_x + \frac{h^5}{8}f''_{xx}(Df)^2 + \frac{h^4}{6}D^3f +$$

$$+ \frac{h^5}{4}Df D^2f'_x + \frac{h^5}{24}D^4f + \ldots,$$

továbbá

$$h^2Df_2 = h^2Df + h^3D(Df) + \frac{h^4}{2}\frac{\partial}{\partial x}(Df)\cdot Df + \frac{h^5}{6}\frac{\partial}{\partial x}(Df)D^2f +$$

$$+ \frac{h^5}{6}\frac{\partial}{\partial x}(Df)f'_x Df + \frac{h^4}{2}D^2(Df) + \frac{h^5}{2}D\left(\frac{\partial}{\partial x}(Df)\right)Df +$$

$$+ \frac{h^5}{6}D^3(Df) + \ldots = h^2Df + h^3D^2f + h^3f'_x Df + \frac{3h^4}{2}Df Df'_x +$$

$$+\frac{h^4}{2} f'^2_x Df + \frac{2h^5}{3} Df'_x D^2 f + \frac{h^5}{6} f'^2_x D^2 f + \frac{7h^5}{6} f'_x Df'_x Df +$$
$$+\frac{h^5}{6} f'^3_x Df + \frac{h^4}{2} D^3 f + \frac{h^4}{2} f'_x D^2 f + h^5 D^2 f'_x Df +$$
$$+\frac{h^5}{2} f''_{xx} (Df)^2 + \frac{h^5}{6} D^4 f + \frac{h^5}{6} f'_x D^3 f + \ldots$$

és

$$f'_{x,2} = f'_x + hDf'_x + \frac{h^2}{2} f''_{xx} Df + \frac{h^2}{2} D^2 f'_x + \ldots$$

Ilymódon a 3 indexü pontra

$$t = t_0 + (1 + \frac{3}{4}\delta)h; \quad x = x_2 + \frac{3}{4} h\delta f_2 + \frac{9}{32} h^2 \delta^2 Df_2 =$$
$$= x_0 + (1 + \frac{3}{4}\delta)hf + \frac{h^2}{2} Df + \frac{h^3}{6} D^2 f + \frac{h^3}{6} f'_x Df +$$
$$+ \frac{h^4}{24} D^3 f + \frac{h^4}{24} f'_x D^2 f + \frac{h^4}{8} Df'_x Df + \frac{h^4}{24} f'^2_x Df + \frac{3}{4}\delta h^2 Df +$$
$$+ \frac{3}{8}\delta h^3 f'_x Df + \frac{1}{8}\delta h^4 f'_x D^2 f + \frac{1}{8}\delta h^4 f'^2_x Df + \ldots$$
$$+ \frac{3}{8}\delta h^3 D^2 f + \frac{3}{8}\delta h^4 Df Df'_x + \frac{1}{8}\delta h^4 D^3 f + \frac{9}{32}\delta^2 h^2 Df +$$
$$+ \frac{9}{32}\delta^2 h^3 D^2 f + \frac{9}{32}\delta^2 h^3 f'_x Df + \frac{27}{64}\delta^2 h^4 Df Df'_x +$$
$$+ \frac{9}{64}\delta^2 h^4 f'^2_x Df + \frac{9}{64}\delta^2 h^4 D^3 f + \frac{9}{64}\delta^2 h^4 f'_x D^2 f + \ldots$$

$$= x_0 + \left(1+\frac{3}{4}\delta\right)hf + \left(\frac{1}{2}+\frac{3}{4}\delta+\frac{9}{32}\delta^2\right)h^2Df + \left(\frac{1}{6}+\frac{3}{8}\delta+\frac{9}{32}\delta^2\right)h^3D^2f$$

$$+\left(\frac{1}{6}+\frac{3}{8}\delta+\frac{9}{32}\delta^2\right)h^3f'_xDf + \left(\frac{1}{24}+\frac{1}{8}\delta+\frac{9}{64}\delta^2\right)h^4D^3f +$$

$$+\left(\frac{1}{24}+\frac{1}{8}\delta+\frac{9}{64}\delta^2\right)h^4f'_xD^2f + \left(\frac{1}{8}+\frac{3}{8}\delta+\frac{27}{64}\delta^2\right)h^4Df'_xDf +$$

$$+\left(\frac{1}{24}+\frac{1}{8}\delta+\frac{9}{64}\delta^2\right)h^4f'^2_xDf + \cdots$$

Eszerint

$$hf_3 = hf + \left(1+\frac{3}{4}\delta\right)h^2Df + \left(\frac{1}{2}+\frac{3}{4}\delta+\frac{9}{32}\delta^2\right)h^3f'_xDf +$$

$$+\left(\frac{1}{6}+\frac{3}{8}\delta+\frac{9}{32}\delta^2\right)h^4f'_xD^2f + \left(\frac{1}{6}+\frac{3}{8}\delta+\frac{9}{32}\delta^2\right)h^4f'_xDf +$$

$$+\left(\frac{1}{24}+\frac{1}{8}\delta+\frac{9}{64}\delta^2\right)h^5f'_xD^3f + \left(\frac{1}{24}+\frac{1}{8}\delta+\frac{9}{64}\delta^2\right)h^5f'^2_xD^2f +$$

$$+\left[\left(\frac{1}{8}+\frac{3}{8}\delta+\frac{27}{64}\delta^2\right)+\left(1+\frac{3}{4}\delta\right)\left(\frac{1}{6}+\frac{3}{8}\delta+\frac{9}{32}\delta^2\right)\right]h^5f'_xDf'_xDf +$$

$$+\left(\frac{1}{24}+\frac{1}{8}\delta+\frac{9}{64}\delta^2\right)h^5f'^3_xDf + \frac{\left(1+\frac{3}{4}\delta\right)^2}{2}h^3D^2f + \left(1+\frac{3}{4}\delta\right)\left(\frac{1}{2}+\right.$$

$$\left.+\frac{3}{4}\delta+\frac{9}{32}\delta^2\right)h^4DfDf'_x + \left(1+\frac{3}{4}\delta\right)\left(\frac{1}{6}+\frac{3}{8}\delta+\frac{9}{32}\delta^2\right)h^5Df'_xD^2f +$$

$$+\frac{1}{2}\cdot\left(\frac{1}{2}+\frac{3}{4}\delta+\frac{9}{32}\delta^2\right)^2h^5f''_{xx}(Df)^2 + \frac{\left(1+\frac{3}{4}\delta\right)^3}{6}h^4D^3f +$$

$$+\frac{\left(1+\frac{3}{4}\delta\right)^2}{2}\left(\frac{1}{2}+\frac{3}{4}\delta+\frac{9}{32}\delta^2\right)h^5D^2f'_xDf + \frac{\left(1+\frac{3}{4}\delta\right)^4}{24}h^5D^4f + \ldots$$

Egyenletcsoportjaink ugyanugy alakulnak, mint a másik formularendszernél; egyetlen változás, hogy Δx hatványsorát a $t = t_0 + (1+\delta)h$ helyen kell tekintenünk. Az első hét egyenlet tehát D^2f, D^3f, D^4f, $DfDf'_x$, $D^2fDf'_x$, $DfD^2f'_x$ ill. $f''_{xx}(Df)^2$ együtthatóinak azonosságát fejezi ki:

$$\frac{(1+\delta)^3}{6} = r_1 \cdot \frac{9}{32} + r_2 \cdot \frac{1}{2} + r_3 \cdot \frac{(1+\frac{3}{4}\delta)^2}{2} + s_2 \cdot 1$$

$$\frac{(1+\delta)^4}{24} = r_1 \cdot \frac{9}{128} + r_2 \cdot \frac{1}{6} + r_3 \frac{(1+\frac{3}{4}\delta)^3}{6} + s_2 \cdot \frac{1}{2}$$

$$\frac{(1+\delta)^5}{120} = r_1 \cdot \frac{27}{2048} + r_2 \cdot \frac{1}{24} + r_3 \frac{(1+\frac{3}{4}\delta)^4}{24} + s_2 \cdot \frac{1}{6}$$

$$\frac{(1+\delta)^4}{8} = r_1 \cdot \frac{27}{128} + r_2 \cdot \frac{1}{2} + r_3 \cdot (1+\frac{3}{4}\delta)(\frac{1}{2} + \frac{3}{4}\delta + \frac{9}{32}\delta^2) + s_2 \cdot \frac{3}{2} +$$

$$+ t_{2,1} \cdot \frac{3}{4} + t_{2,2} \cdot 1 + t_{2,3} \cdot (1 + \frac{3}{4}\delta)$$

$$\frac{(1+\delta)^5}{30} = r_1 \cdot \phi + r_2 \cdot \frac{1}{6} + r_3 (1+\frac{3}{4}\delta)(\frac{1}{6} + \frac{3}{8}\delta + \frac{9}{32}\delta^2 + s_2 \frac{2}{3} +$$

$$+ t_{2,1} \cdot \frac{9}{32} + t_{2,2} \cdot \frac{1}{2} + t_{2,3} \frac{(1+\frac{3}{4}\delta)^2}{2}$$

$$\frac{(1+\delta)^5}{20} = r_1\cdot\frac{81}{1024} + r_2\cdot\frac{1}{4} + r_3\cdot\frac{(1+\frac{3}{4}\delta)^2}{2}\left(\frac{1}{2}+\frac{3}{4}\delta+\frac{9}{32}\delta^2\right)+s_2\cdot 1 +$$

$$+ t_{2,1}\cdot\frac{3}{8} + t_{2,2}\cdot\frac{1}{2} + t_{2,3}\cdot\frac{1}{2}\left(1+\frac{3}{4}\delta\right)$$

$$\frac{(1+\delta)^5}{40} = r_1\cdot\frac{81}{2048} + r_2\cdot\frac{1}{8} + r_3\cdot\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+\frac{3}{4}\delta+\frac{9}{32}\delta^2\right)^2 + s_2\cdot\frac{1}{2} +$$

$$+ t_{2,1}\cdot\frac{3}{8} + t_{2,2}\cdot\frac{1}{2} + t_{2,3}\cdot\frac{1}{2}\left(1+\frac{3}{4}\delta\right)$$

Figyelembevéve itt az $\frac{1}{2}+\frac{3}{4}\delta+\frac{9}{32}\delta^2 = \frac{1}{2}\left(1+\frac{3}{4}\delta\right)^2$ relációt, továbbá a két utolsó egyenlet különbségét képezve, az is azonos a harmadikkal. Egy egyenlet tehát itt is elhagyható. Igy külön kezelhető az első három és a negyedik és hatodik azonosságát megkövetelő, továbbá a negyedik és ötödik egyenlet:

$$27\, r_1 + 48\, r_2 + 48\left(1+\frac{3}{4}\delta\right)^2 r_3 + 96\, s_2 = 16\,(1+\delta)^3$$

$$27\, r_1 + 64\, r_2 + 64\left(1+\frac{3}{4}\delta\right)^3 r_3 + 192\, s_2 = 16\,(1+\delta)^4$$

$$405\, r_1 + 1280\, r_2 + 1280\left(1+\frac{3}{4}\delta\right)^4 r_3 + 5120\, s_2 = 256\,(1-\delta)^5$$

$$540\, r_1 + 1280\, r_2 + 1280\left(1+\frac{3}{4}\delta\right)^3 r_3 + 3840\, s_2 -$$

$$- 320(1+\delta)^4 = 405\, r_1 + 1280\, r_2 + 1280\left(1+\frac{3}{4}\delta\right)^4 r_3$$

$$+ 5120\, s_2 - 256\,(1+\delta)^5,$$

amiből a $\delta = 1,\ \frac{1}{2}$ ill. 2-nek megfelelő értékek

$$r_1 = \frac{4096}{135} \quad \text{ill.} = \frac{16}{5} \quad \text{ill.} = \frac{26608}{45}$$

$$r_2 = -\frac{128}{5} \quad \text{ill.} = -\frac{297}{160} \quad \text{ill.} = -\frac{2562}{5}$$

$$r_3 = \emptyset \quad \text{ill.} = \emptyset \quad \text{ill.} = \emptyset$$

$$s_2 = \frac{28}{5} \quad \text{ill.} = \frac{189}{320} \quad \text{ill.} = \frac{472}{5}$$

$$27 r_1 + 64 r_2 + 64\left(-1 + \frac{3}{4}\delta\right)^3 r_3 \; 192 s_2 + 96 t_{2,1} + 128 t_{2,2} +$$

$$+ 128\left(1 + \frac{3}{4}\delta\right) t_{2,3} = 80 r_2 + 480\left(1 + \frac{3}{4}\delta\right)\left(\frac{1}{6} + \frac{3}{8}\delta + \frac{9}{32}\delta^2\right) r_3 +$$

$$+ 320 s_2 + 135 t_{2,1} + 240 t_{2,2} + 240\left(1 + \frac{3}{4}\delta\right)^2 t_{2,3} = 16(1+\delta)^5$$

$$405 r_1 + 1280 r_2 + 1280\left(1 + \frac{3}{4}\delta\right)^4 r_3 + 5120 s_2 + 1920 t_{2,1} +$$

$$+ 2560 t_{2,2} + 2560\left(1 + \frac{3}{4}\delta\right) = 256(1+\delta)^5$$

amiből

$$t_{2,1} = -\frac{307}{180} \quad \text{ill.} = \frac{6373}{1440} \quad \text{ill.} = -\frac{1358}{5}$$

$$t_{2,2} = \frac{307}{240} \quad \text{ill.} = -\frac{6373}{1920} \quad \text{ill.} = \frac{2037}{10}$$

$$t_{2,3} = \emptyset \quad \text{ill.} = \emptyset \quad \text{ill.} = \emptyset$$

Ezek ismeretében f ill. Df együtthatóinak összevetéséből r_0 ill. s_0 is megállapitható:

$$(1+\delta) = r_0 + r_1 \cdot + r_2 + r_3$$

ill.

$$\frac{(1+\delta)^2}{2} = r_1 \cdot \frac{3}{4} + r_2 \cdot 1 + r_3 \cdot \left(1+\frac{3}{4}\delta\right) + s_0 \cdot 1 + s_2 \cdot 1$$

amiből

$r_0 = -\frac{74}{27}$ ill. $= \frac{5}{32}$ ill. $= -\frac{683}{9}$

$s_0 = -\frac{34}{45}$ ill. $= -\frac{3}{320}$ ill. $= -\frac{629}{30}$

Ujabb három egyenlet adódik f'_x Df, f'_x D^2f ill. f'_x D^3f együtthatóinak egyeztetése révén:

$$\frac{(1+\delta)^3}{6} = r_1 \cdot \frac{9}{32} + r_2 \cdot \frac{1}{2} + r_3 \cdot \frac{1}{2}\left(1+\frac{3}{4}\delta\right)^2 + s_2 \cdot 1 +$$

$$+ t_{2,1} \cdot \frac{3}{4} + t_{2,2} \cdot 1 + t_{2,3} \cdot \left(1+\frac{3}{4}\delta\right)$$

$$+ t_{0,1} \cdot \frac{3}{4} + t_{0,2} \cdot 1 + t_{0,3} \cdot \left(1+\frac{3}{4}\delta\right)$$

$$\frac{(1+\delta)^4}{24} = r_1 \cdot \phi + r_2 \cdot \frac{1}{6} + r_3 \cdot \left(\frac{1}{6} + \frac{3}{8}\delta + \frac{9}{32}\delta^2\right) + s_2 \cdot \frac{1}{2} +$$

$$+ t_{2,1} \cdot \frac{9}{32} + t_{2,2} \cdot \frac{1}{2} + t_{2,3} \cdot \frac{1}{2}\left(1+\frac{3}{4}\delta\right)^2$$

$$+ t_{0,1}\cdot\frac{9}{32} + t_{0,2}\cdot\frac{1}{2} + t_{0,3}\cdot\frac{1}{2}\left(1+\frac{3}{4}\delta\right)^2 ;$$

$$\frac{(1+\delta)^5}{120} = r_1\cdot\phi + r_2\cdot\frac{1}{24} + r_3\cdot\left(\frac{1}{24}+\frac{1}{8}\delta+\frac{9}{64}\delta^2\right) + s_2\cdot\frac{1}{6} +$$

$$+ t_{2,1}\cdot\frac{9}{128} + t_{2,2}\cdot\frac{1}{8} + t_{2,3}\cdot\frac{1}{6}\left(1+\frac{3}{4}\delta\right)^3 +$$

$$+ t_{0,1}\cdot\frac{9}{128} + t_{0,2}\cdot\frac{1}{6} + t_{0,3}\cdot\frac{1}{6}\left(1+\frac{3}{4}\delta\right)^3 ,$$

amiből

$t_{0,1} = -\frac{3277}{180}$ ill. $= -\frac{45689}{7200}$ ill. $= -\frac{3946}{21}$

$t_{0,2} = \frac{9319}{720}$ ill. $= \frac{8677}{1920}$ ill. $= \frac{2144}{15}$

$t_{0,3} = \frac{128}{315}$ ill. $= \frac{48}{275}$ ill. $= -\frac{421}{525}$

Ujabb egyenlet adódik $f'_x Df'_x Df$ együtthatói egyeztetése során:

$$\frac{7(1+\delta)^5}{120} = r_1\cdot\phi + r_2\cdot\frac{7}{24} + r_3\left[\left(1+\frac{3}{4}\delta\right)\left(\frac{1}{6}+\frac{3}{8}\delta+\frac{9}{32}\delta^2\right)+\right.$$

$$\left.+\left(\frac{1}{8}+\frac{3}{8}\delta+\frac{27}{64}\delta^2\right)\right] + s_2\cdot\frac{7}{6} + t_{0,1}\cdot\frac{27}{128} + t_{0,2}\cdot\frac{1}{2} +$$

$$+ t_{0,3}\cdot\frac{1}{2}\left(1+\frac{3}{4}\delta\right)^3 + t_{2,1}\cdot\left(\frac{27}{128}+\frac{9}{32}\right) + t_{2,2}\cdot\left(\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\right) + t_{2,3}$$

$$\cdot\left[\frac{1}{2}\left(1+\frac{3}{4}\delta\right)^3 + \frac{1}{2}\left(1+\frac{3}{4}\delta\right)^2\right] + v_3\cdot\frac{3}{2} ,$$

amiből

$v_3 = -\frac{2611}{2880}$ ill. $= \frac{4429}{23040}$ ill. $= -\frac{10103}{360}$

Ujabb két egyenletet szolgáltat $f_x'^2\, Df$ ill. $f_x'^2\, D^2f$ együtt-hatóinak egyeztetése:

$$\frac{(1+\delta)^4}{24} = r_1 \cdot \phi + r_2 \cdot \frac{1}{6} + r_3 \cdot \left(\frac{1}{6} + \frac{3}{8}\delta + \frac{9}{32}\delta^2\right) + s_2 \cdot \frac{1}{2} +$$

$$+ t_{0,1} \cdot \frac{9}{32} + t_{0,2} \cdot \frac{1}{2} + t_{0,3} \cdot \frac{1}{2}\left(1 + \frac{3}{4}\delta\right)^2$$

$$+ t_{2,1} \cdot \frac{9}{32} + t_{2,2} \cdot \frac{1}{2} + t_{2,3} \cdot \frac{1}{2}\left(1 + \frac{3}{4}\delta\right)^2 +$$

$$+ v_3 \cdot \frac{3}{4} + v_1 \cdot \frac{3}{4} + v_2 \cdot 1\,;$$

$$\frac{(1+\delta)^5}{120} = r_1 \cdot \phi + r_2\, \frac{1}{24} + r_3 \cdot \left(\frac{1}{24} + \frac{1}{8}\delta + \frac{9}{64}\delta^2\right) + s_2 \cdot \frac{1}{6} +$$

$$+ t_{0,2} \cdot \phi + t_{0,2} \cdot \frac{1}{6} + t_{0,3} \cdot \left(\frac{1}{6} + \frac{3}{8}\delta + \frac{9}{32}\delta^2\right) +$$

$$+ t_{2,1} \cdot \phi + t_{2,2} \cdot \frac{1}{6} + t_{2,3} \cdot \left(\frac{1}{6} + \frac{3}{8}\delta + \frac{9}{32}\delta^2\right) +$$

$$+ v_3 \cdot \frac{9}{32} + v_1 \cdot \frac{9}{32} + v_2 \cdot \frac{1}{2}\,;$$

amiből

$$v_1 = \frac{513893}{20160} \quad \text{ill.} = \frac{2890997}{1267200} \quad \text{ill.} = \frac{981587}{1800}$$

$$v_2 = -\frac{1936}{105} \quad \text{ill.} = -\frac{8163}{4400} \quad \text{ill.} = -\frac{29096}{75}$$

Végül $f_x'^3\, Df$ együtthatóiból

$$\frac{(1+\delta)^5}{120} = r_1 \cdot \phi + r_2 \cdot \frac{1}{24} + r_3 \cdot \left(\frac{1}{24} + \frac{1}{8}\delta + \frac{9}{64}\right) + s_2 \cdot \frac{1}{6} +$$

$$+ t_{0,1} \cdot \phi + t_{0,2} \cdot \frac{1}{6} + t_{0,3} \cdot \left(\frac{1}{6} + \frac{3}{8}\delta + \frac{9}{32}\delta^2\right) +$$

$$+ t_{2,1} \cdot \phi + t_{2,2} \cdot \frac{1}{6} + t_{2,3} \cdot \left(\frac{1}{6} + \frac{3}{8}\delta + \frac{9}{32}\delta^2\right) +$$

$$+ v_1 \cdot \frac{9}{32} + v_2 \cdot \frac{1}{2} + v_3 \frac{9}{32} + w \cdot \frac{3}{4})$$

amiből

$w = \phi$ ill. $= \phi$ ill. $= \phi$

és igy formuláink:

lépéstartás esetén

$$\begin{aligned}
k_s = {} & 30{,}34074\, h f_1 - 25{,}6\, h f_2 - 2{,}74074074\, h f_0 - \\
& - 0{,}75555555\, h^2 D f_0 + 5{,}6\, h^2 D f_2 - 18{,}205555\, h^2 f'_{x,0} (f_1 - f_0) + \\
& + 12{,}943055\, h^2 f'_{x,0} (f_2 - f_0) + 0{,}4063493\, h^2 f'_{x,0} (f_3 - \\
& - f_0) - 1{,}705555\, h^2 f'_{x,2} (f_1 - f_0) + 1{,}2791666\, h^2 f'_{x,2} (f_2 - f_0) + \\
& + 25{,}490724\, h^3 f'_{x,0} (f_1 - f_0) - 18{,}438095\, h^3 f'^2_{x,0} (f_2 - f_0) - \\
& - 0{,}9065972\, h^3 f'_{x,2} \cdot (f_1 - f_0);
\end{aligned} \tag{34}$$

lépésfelezés esetén

$$
\begin{aligned}
k_s = {} & 0{,}15625\,h f_0 + 3{,}2\,h f_1 - 1{,}85625\,h f_2 - 0{,}009375 \\
& h^2 D f_0 + 0{,}590625\,h^2 D f_2 - 6{,}345694\,h^2 f'_{x,0}(f_1 - f_0) + 4{,}5192708 \\
& h^2 f'_{x,0}(f_2 - f_0) + 0{,}174545\,h^2 f'_{x,0}(f_3 - f_0) + 4{,}425694\,h^2 f'_{x,2} \\
& (f_1 - f_0) - 3{,}3192708\,h^2 f'_{x,2}(f_2 - f_0) + 2{,}2814054\,h^3 \\
& f'_{x,0}(f_1 - f_0) - 1{,}8552272\,h^3 f'_{x,0}(f_2 - f_0) + \\
& + 0{,}1922309\,h^3 f'^{2}_{x,2}(f_1 - f_0);
\end{aligned}
\tag{35}
$$

lépésduplikálás esetén

$$
\begin{aligned}
k_s = {} & -75{,}88888\,h f_0 + 591{,}28888\,h f_1 - 512{,}4\,h f_2 - \\
& - 20{,}96666\,h^2 D f_0 + 94{,}4\,h^2 D f_2 - 187{,}90476\,h^2 f'_{x,0}(f_1 - f_0) + \\
& + 142{,}93333\,h^2 f'_{x,0}(f_2 - f_0) - 0{,}8019047\,h^2 f'_{x,0}(f_3 - f_0) \\
& - 271{,}6\,h^2 f'_{x,2}(f_1 - f_0) + 203{,}7\,h^2 f'_{x,2}(f_2 - f_0) + 545{,}32611 \\
& h^3 f'^{2}_{x,0}(f_1 - f_0) - 387{,}9466\,h^3 f'^{2}_{x,0}(f_2 - f_0) - \\
& - 28{,}063883\,h^3 f'_{x,2}(f_1 - f_0).
\end{aligned}
\tag{36}
$$

A fenti formulák alapján mármost a következőképpen járhatunk el: a kezdőintervallumtól eltekintve - erre még visszatérünk - az egyes részintervallumok végpontja és kezdőpontja (ill. a megelőző részintervallum kezdőpontja) közötti függvényértéknövekmények

$$\Delta x^{(1)} = x(t_i + h) - x(t_i)$$

ill.

$$\Delta x^{(2)} = x(t_i + h) - x(t_i - \vartheta h)$$

számára két-két közelités áll rendelkezésünkre. $\Delta x^{(1)}$ -et ti. az ötödfoku pontosságu k és a negyedfoku pontosságu k közelitésben is ismerjük; $\Delta x^{(2)}$ -t viszont a $(t_0 - \vartheta h; t_0 + h)$ intervallumot egy lépésben áthidaló ötödfokuan pontos k_s és a megelőző lépésben számitott ötödfoku pontosságu $\hat{k}_r$ és a $\hat{k}$ összege is közeliti. Kettős ellenőrzésnek is alávethetjük tehát $\Delta x^{(1)}$ pontosságát és ennek révén h megválasztását. Egyrészt $|\hat{k} - k|$ elég pontosan jellemzi k hibáját és igy általában nyugodtan tekinthetjük elég sokszor differenciálható f esetén $\hat{k}$ hibája "erős" felső korlátjának. Másrészt a klasszikusan alkalmazott hibabecslő módszer mintájára a

$$\Delta x_r = C_1 \cdot (\vartheta h)^6 + \hat{k}_r$$
$$\Delta x^{(1)} = C_2 \cdot h^6 + \hat{k}$$
$$\Delta x^{(2)} = C_3 \cdot (1+\vartheta)^6 h^6 + k_s$$

relációk felhasználásával a szokásos módon, C_1, C_2 és C_3 egy közös C-vel való helyettesitése révén adódik $\Delta x^{(1)}$ hibájának becslésére a

$$\frac{|\hat{k}_r + \hat{k} - k_s|}{6\vartheta^5+15\vartheta^4+20\vartheta^3+15\vartheta^2+6\vartheta}$$

reláció. Ha tehát $\Delta x^{(1)}$ hibáját a

$$H = \max\left\{|\hat{k}-k|;\ (6\vartheta^5+15\vartheta^4+20\vartheta^3+15\vartheta^2+6\vartheta)^{-1}\cdot|\hat{k}_r+\hat{k}-k_1|\right\}$$

relációval becsüljük, a szokásos eljárásnál lényegesen biztosabban becsüljük felülről a hibát, megszüntetve a kétszeres lépésközzel járó tulmunka jelentős részét is. Hogy a számitás ismétlését is lehetőleg elkerüljük, h értékét a soronkövetkező lépésben lefelezzük, ha H a megengedett hiba $\frac{1}{2}$ -szeresе fölé nő, és csak akkor duplázunk, ha H a megengedett hiba $\frac{1}{128}$ -ad része alá csökken. Ilymódon a klasszikus módszernél adódó, jelentős tulmunka nagyrészét megtakaritjuk és általában nagyobb biztonsággal dolgozhatunk, mint a klasszikus esetben. Az exakt hibabecslésre egy későbbi dolgozatban még visszatérünk; ez azonban csak elméleti érdekü kérdés, hiszen jólismert, hogy a gyakorlatban az igy adódó bonyolult becsléseket nem tudjuk használni.

Ami a kezdő intervallumot érinti, ott csak a megadott ötödfoku pontosságu $\hat{k}$ és k eltérésére szoritkozhatunk, ill. szükség esetén a féllépéses számitásismétléssel ellenőrizhetjük k pontosságát.

Megadott formuláink csak mintának számitanak, hiszen hasonló elvek alapján ölelkező formulákra támaszkodó hatod-heted- stb. fokszámu közelitéseket is lehet konstruálni. Ezekre egy későbbi munkában térünk vissza.

A kidolgozott formulák erejét és a hibabecslés értékét a 3. táblázat érzékelteti!

4. §. A szinguláris helyek környezetéről.

Mint a bevezetésben is emlitettük, a zérushelyek keresésének differenciálegyenlettel történő megoldása esetén olyan tipusu szinguláris helyek környezetében okoz a javasolt módszer problémákat, ahol az (1) reláció alapján adódó

$$\frac{dx}{dt} = \frac{\frac{\partial \varphi}{\partial t}}{\frac{\partial \varphi}{\partial x}}$$

egyenlet jobboldalán $\frac{\partial \varphi}{\partial x}$ -nek zérushelye van. Megemlitjük, hogy gyakorlatilag már ezen zérushelyek környezetében is komoly numerikus problémák merülnek fel, mert a megfelelő pontosság eléréséhez a szokásos Runge-Kutta módszer alkalmazása esetén tul "finom" lépésközt kell használni. Mindenesetre a 3. §.-ban kimunkált formulák ilyen pontok környezetében sokkal hatásosabbak mint a Runge-Kutta módszer. Ezt jól érzékelteti a 2-3. táblázat. A szinguláris helyek közvetlen környezetében azonban ez a módszer se válik be.

Az alábbiakban ezért feltesszük, hogy az

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

differenciálegyenletet olyan (t_0,x_0) pont közelében tekintjük, ahol f viszonylag nagyon nagy, sőt esetleg $|f| \to \infty$ ha $(t,x) \to (t_0,x_0)$ és amelynek környezetében f viszonylag gyorsan változik. Célszerü ekkor a

$$\frac{dt}{dx} = \frac{1}{f(t,x)} = g(t,x)$$

egyenletet tekinteni, azaz felcserélni - legalább is formálisan - a két változó szerepét. A két változó szerepcseréjét azért nevezzük formálisnak, mert végeredményben Δt értékét tekintjük adottnak és $\Delta x \sim k$ értékét keressük továbbra is. (Ilymódon - éppen mert a használt Runge-Kutta-tipusu eljárás magasabb fokszámu - lényegében a Newton-Raphson-féle eljárás magasabb fokszámu polinommal történő megvalósitásának megfelelő módszerre jutunk.)

A legegyszerübb lehetőség ármost az a két változó formális szerepcseréjének megváltoztatására, hogy ténylegesen a

$$\frac{dt}{dx} = \frac{1}{f(t,x)} = g(t,x)$$

egyenletből indulunk ki, és eredeti formuláinkat használjuk, figyelembevéve x és t szerepének felcserélődését (ez természetesen azzal jár, hogy D helyett a $\tilde{D} = \frac{\partial}{\partial x} + g\frac{\partial}{\partial t}$ operátort használjuk). Megtartva a k és h jelölést, formálisan a

$$h_i = g_i k + \alpha_{i,1} Dg_{j(i)} k^2 + \dots$$

$$h_i^* = (E_{i1} g_1 + E_{i_2} g_2 + \dots + E_{ii} g_i) k + \beta_{i,1} Dg_{j(i)} k^2 + \dots$$

$$h = \sum R_i h_i$$

formulákból indulunk ki, de nem k, hanem h_1 értékét veszszük fel, ebből számitjuk ki az első egyenlet alapján k értékét, majd ez utóbbi alapján h_1^*, h_2 stb. ill. h értékét. (Igy természetesen se h, se k értéke nem irható előre elő, sőt h komplexnek is adódhat; éppen ezért nem használható a kétlépéses ötödfoku eljárás se, hiszen ott a két lépésbeni k-értékek viszonyának is adottnak kellene lennie. (Megemlitjük egyébként, hogy ez utóbbi probléma áthidalható, mert a $\vartheta = \frac{k_r}{k}$ választással is élhetünk.) Jóllehet a fenti formularendszer is használható elvileg, lényeges hátránynak kell tartani azt a tényt, hogy h nem irható elő, ezért egy más módszerrel élünk. A két változó szerepének formális felcserélését nem a differenciálegyenlet közvetlen transzformációjával érjük el, hanem az eredeti formulák inverziójával. Eközben fellépnek $\frac{1}{f}$ deriváltjai, és ezeket helyettesitjük g deriváltjaival.

Eredetileg ti.

$$k_i \text{ ill. } k_i^* = a_{i,1} h + a_{i,2} h^2 + a_{i,3} h^3 + \dots \qquad (39)$$

alaku formulákat adtunk meg, ahol az $a_{i,1}$-ek állandókból és az f_j-k lineáris kombinációból épülnek fel, az $a_{i,2}$-k hasonlóan állandókból, Df_j-k ill. $f'_{x,j}$ $(f_{j2}-f_{j1})$-ek lineáris kombinációiból, stb.

Mármost e formulákban egyfelől az eredeti $x = f(t,x)$ differenciálegyenlet helyett a $t' = \frac{1}{f} = g(x,t)$ differenciálegyenlet jobboldalára támaszkodunk, ami azt jelenti, hogy a szereplő f_j függvényértékeket $\frac{1}{g_j}$ -vel helyettesitjük, továbbá figyelembevesszük a

$$Df_j = D\left(\frac{1}{g_j}\right) = \frac{\partial}{\partial t}\frac{1}{g_j} + f_j\frac{\partial}{\partial x}\frac{1}{g_j} = -\frac{1}{g_j^3}\left(\frac{\partial}{\partial x}g_j + \right.$$

$$\left. + g_j\frac{\partial}{\partial t}g_j\right) = -\left[\frac{1}{g^3}D\tilde{g}\right]_j \qquad (40)$$

ill. az

$$f'_{x,j} = \frac{\partial}{\partial x}\frac{1}{g_j} = -\frac{1}{g_j^2}g'_{x_j} \qquad (41)$$

relációkat (ez eddig természetesen csak formálit átalakitás), másrészt azonban a $k_i = \Psi_i(h)$ formulákról áttérünk az inverz $h = \Psi_i^{-1}(k_i)$ formulákra, éspedig olymódon, hogy utóbbiak hatványsorát tekintjük, és azt olyan pontosságnál csonkitjuk, mint amilyen pontosságu a használt teljes formula. A (39) alatti formulák inverz függvényének hatványsora jólismert alaku (l. pl. [7]), éspedig a

$$h = \alpha_{i,1}^{\,0} k_i + \alpha_{i,2}^{\,0} k_i^2 + \alpha_{i,3}^{\,0} k_i^3 + \alpha_{i,4}^{\,0} k_i^4 + \alpha_{i,5} k_i^5 + \dots \qquad (42)$$

kifejezésben (ahol $^\circ k_i$ vagy k_i-t vagy k_i^*-ot jelöli)

$$\alpha_{i,1} = \frac{1}{a_{i,1}}\,;\quad \alpha_{i,2} = -\frac{a_{i,2}}{a_{i,1}^3}\,;\quad \alpha_{i,3} = \frac{2a_{i,2}^2 - a_{i,1}a_{i,3}}{a_{i,1}^5}$$

$$\alpha_{i,4} = \frac{5a_{i,1}a_{i,2}a_{i,3} - 5a_{i,2}^3 - a_{i,1}^2 a_{i,4}}{a_{i,1}^7}\,;\quad \alpha_{i,5} = \frac{14a_{i,2}^4 + 6a_{i,1}^2 a_{i,2}a_{i,4}}{a_{i,1}^9}$$

$$\frac{-a_{i,1}^3 a_{i,5} + 3a_{i,1}^2 a_{i,3}^2 - 21a_{i,1}a_{i,2}^2 a_{i,3}}{a_{i,1}^9}\qquad \alpha_{i,6} = \frac{7a_{i,1}^3 a_{i,2}a_{i,5} + 7a_{i,1}^3 a_{i,3}}{a_{i,1}^{11}} \tag{43}$$

$$\frac{a_{i,4} + 84a_{i,1}a_{i,2}^3 a_{i,3} - 42a_{i,2}^5 - 28a_{i,1}^2 a_{i,2}a_{i,3}^2 - 28a_{i,1}^2 a_{i,2}^2 a_{i,4} - a_{i,1}^4 a_{i,6}}{a_{i,1}^{11}}$$

stb. Ha itt elvégezzük még az f-ek g-kkel történő helyettesitését, akkor - amint ez (39)-ből ill. (43)-ból leolvasható - $\alpha_{i,1}$ ill. $\alpha_{i,2}$ nem tartalmaz nevezőjében g_i tipusu szorzófaktort, csak a további tagok. Célszerü ezért a (41) alatti összeget igy alakitani:

$$h = \mu_{i,1}\, g_{j(i)}\, {}^\circ k_i + \mu_{i,2}\, {}^\circ k_i^2 + \mu_{i,3}\frac{{}^\circ k_i^3}{g_{j(i)}} + \mu_{i,4}\frac{{}^\circ k_i^4}{g_{j(i)}^2} + \dots +$$

$$+ \mu_{i,m}\frac{{}^\circ k_i^m}{g_{j(i)}^{m-2}} + \dots \tag{44}$$

E formulákban a $\mu_{i,j}$-k olyan kifejezések, amelyek állandókból, a g_j-kből, Dg_j-kből, $gx,_j$-kből tevődnek össze, és korlátosak maradnak $|f_{j(i)}| \to \infty$ azaz $g_{j(i)} \to 0$ esetén is. Minthogy a harmadik tagtól kezdve a törtek nevezőiben fellépnek a $g_{j(i)}$ hatványai, a (44) alatti formulákat tovább alakitjuk: az $\frac{1}{g_{j(i)}}$-t tartalmazó tagot $\left(h-\mu_{i,2}\,{}^{o}k_i^{\,2}\right)^2 \frac{1}{{}^{o}k_i^{\,2}}$ egy alkalmas állandószorosának levonásával távolitjuk el, a további tagokat viszont, amelyek $\frac{1}{g_{j(i)}}$ -nak $r > 1$-edik hatványait tartalmazzák, a

$$\left(h-\mu_{i,1}\,g_{j(i)}^{o}\,k_i-\mu_{i,2}\,{}^{o}k_i^{\,2}\right)^r \frac{1}{{}^{o}k_i^{\,2r-2}}$$

kifejezés alkalmas (r-től függő) állandóival. Ezen átalakitások elvégzése után végül is a jobboldalon három tag összege marad, amelyek ${}^{o}k_i^{\,2}$ -et, ${}^{o}k_i$ -t ill. állandót tartalmaznak, baloldala pedig a

$$\tau=\frac{h-\mu_{i,1}\,g_{j(i)}\,{}^{o}k_i-\mu_{i,2}\,{}^{o}k_i^{\,2}}{k_i^{\,2}} \tag{45}$$

változó hatványsora. Minthogy $\tau=O({}^{o}k_i)$ érvényes (42) szerint, sőt $g_{j(i)}\to 0$ esetén is érvényes marad, azért ez utóbbit a használt formula fokszámától függően csonkitjuk.

Ami az adódó formulák használhatóságát illeti, azt kell megjegyeznünk, hogy amennyiben a tekintett integrálgörbe csak erősen megközelit egy izolált szinguláris helyet, vagypedig valamelyik bázispont ilyen, de a többi fellépő bázispont előre meghatározhatóan nem az, akkor használhatjuk az egyszerübb (24) - (31) - (33) tipusu formulákat, csak arra kell vigyáznunk, hogy mindazok a ${}^{o}k_i$ kifejezésekben, amelyekben egyáltalán fellép a szinguláris helyre vonatkozó tag, $a_{i,1}$

tartalmazza a megfelelő f-értéket (ez a k_i^*-okat illetően automatikusan teljesül, a k_i-kben pedig szintén, ha a szinguláris hely nem a 0 indexü; hf_0-t viszont szabadon csoportositjuk az egyes k_i-khez). Ha viszont bizonytalan a szingularitás helye (25) tipusu formulából kell kiindulnunk, ahol egy-egy formulában csak azonos indexü helyek fordulnak elő.

Példaként az átalakitás szemléltetésére bemutatjuk a negyedfoku (24) ill. (25)-tel kapcsolatosan a szinguláris helyek környezetében alkalmazandó átalakitást.

Mindkét formulatipusnál k_1 és k_1^* azonos átalakitásban vesz részt, mert csak egy indextől függő (azaz egy meghatározott helyre vonatkozó) tagok szerepelnek benne. Ugyanez igaz a második formulatipus k_2 formulájára is. Ezeket tehát azonos módon kezeljük: kiindulunk a

$$
{}^{o}k_i = a_{i,1} f_{j(i)} \cdot h + a_{i,2} Df_{j(i)} h^2 + a_{i,3} f'_{x,j(i)} Df_{j(i)} h^3 +
$$

$$
+ a_{i,4} f'^{2}_{x,j(i)} Df_{j(i)} h^4
$$

kifejezésből, amelyre az inverziós formulát alkalmazva, a

$$
h = \frac{1}{a_{i,1}} \cdot \frac{1}{f_{j(i)}} {}^{o}k_i - \frac{a_{i,2}}{a_{i,1}} \frac{Df_{j(i)}}{f^3_{j(i)}} {}^{o}k_i^2 +
$$

$$
+ \left(\frac{2a_{i,2}^2 (Df_{j(i)})^2}{a_{i,1}^5 f_{j(i)}^5} - \frac{a_{i,3} f'_{x,j(i)} Df_{j(i)}}{a_{i,1}^4 f^4_{j(i)}} \right) {}^{o}k_i^3 +
$$

$$+\left(\frac{5a_{i,2}\,a_{i,3}\,f'_{x,j(i)}(Df_{j(i)})^2}{a_{i,1}^6\,f_{j(i)}^6}-\frac{5a_{i,2}^3\,(Df_{j(i)})^3}{a_{i,1}^7\,f_{j(i)}^7}-\frac{a_{i,4}\,f'^2_{j(i)}\,Df_{j(i)}}{a_{i,1}^5\,f_{j(i)}^5}\right){}^0k_i^4$$

$$+\left(\frac{14a_{i,2}^4\,(Df_{j(i)})^4}{a_{i,1}^9\,f_{j(i)}^9}+\frac{6a_{i,2}\,a_{i,4}\,f'^2_{x,j(i)}(Df_{j(i)})^2}{a_{i,1}^7\,f_{j(i)}^7}+\frac{3a_{i,3}^2\,f'^2_{x,j(i)}\,(Df_{j(i)})^2}{a_{i,1}^7\,f_{j(i)}^7}-\right.$$

$$\left.-\frac{21\,a_{i,2}^2\,a_{i,3}\,f'_{x,j(i)}(Df_{j(i)})^3}{a_{i,1}^8\,f_{j(i)}^8}\right){}^0k_i^5+\dots$$

reláció adódik. Elvégezve most a (40) - (41) alatti transzformációkat, a

$$h=\alpha_{i,1}\,g_j\,{}^0k_i+\alpha_{i,2}\,{}^0k_i^2+\alpha_{i,3}\,\frac{{}^0k_i^3}{g_j}+\alpha_{i,4}\,\frac{{}^0k_i^4}{g_j^2}+\alpha_{i,5}\,\frac{{}^0k_i^5}{g_j^3}+\dots \tag{46}$$

relációra jutunk, ahol

$$\alpha_{i,1}=\frac{1}{a_{i,1}}\;;\quad \alpha_{i,2}=+\frac{a_{i,2}}{a_{i,1}}\,\tilde{D}g_{j(i)}\;;$$

$$\alpha_i=2\frac{a_{i,2}^2}{a_{i,1}^5}\left(\tilde{D}g_{j(i)}\right)^2-\frac{a_{i,3}}{a_{i,1}^4}\,g'_{x,j(i)}\,\tilde{D}g_{j(i)}\;;$$

$$\alpha_{i,4} = -5\frac{a_{i,2}a_{i,3}}{a_{i,1}^{6}} g'_{x,j(i)}(\tilde{D}g_{j(i)})^2 + 5\frac{a_{i,2}^{3}}{a_{i,1}^{7}}(\tilde{D}g_{j(i)})^3 + \frac{a_{i,4}}{a_{i,1}^{5}} g'^{2}_{x,j(i)}$$

$$\tilde{D}g_{j(i)};\ \alpha_{i,5} = 14\frac{a_{i,2}^{4}}{a_{i,1}^{9}}(\tilde{D}g_{j(i)})^4 + 6\frac{a_{i,2}a_{i,4}}{a_{i,1}^{7}} g'^{2}_{x,j(i)}(\tilde{D}g_{j(i)})^2 + 3\frac{a_{i,2}^{3}}{a_{i,1}^{7}} g'^{2}_{x,j(i)}$$

$$(\tilde{D}g_{j(i)})^2 - 21\frac{a_{i,2}^{2}a_{i,3}}{a_{i,1}^{8}} g'_{x,j(i)}(\tilde{D}g_{j(i)})^3;\ \text{stb.}$$

Mármost (46) alapján

$$h - \frac{1}{2}\frac{\alpha_{i,3}}{\alpha_{i,1}\cdot\alpha_{i,4}}\left(\frac{h-\alpha_{i,2}\,{}^{\circ}k_i^{2}}{{}^{\circ}k_i}\right)^2 = \alpha_{i,1}\,g_j\,{}^{\circ}k_i +$$

$$+\alpha_{i,2}\,{}^{\circ}k_i^{2} + \alpha_{i,3}\frac{{}^{\circ}k_i^{3}}{g_j} + \alpha_{i,4}\frac{{}^{\circ}k_i^{4}}{g_j^{2}} + \alpha_{i,5}\frac{{}^{\circ}k_i^{5}}{g_j^{3}} + \dots$$

$$-\frac{1}{2}\frac{\alpha_{i,1}\alpha_{i,3}}{\alpha_{i,4}} g_j^{2} - \frac{\alpha_{i,3}^{2}}{\alpha_{i,4}}\,{}^{\circ}k_i^{2} - \alpha_{i,3}\frac{{}^{\circ}k_i^{3}}{g_j} -$$

$$-\frac{\alpha_{i,3}^{3} + 2\alpha_{i,1}\alpha_{i,3}\alpha_{i,5}}{2\alpha_{i,1}\cdot\alpha_{i,4}}\frac{{}^{\circ}k_i}{g_j^{2}} - \dots =$$

$$= -\frac{1}{2}\frac{\alpha_{i,1}\alpha_{i,3}}{\alpha_{i,4}} g_j^{2} + \alpha_{i,1}\,g_j\,{}^{\circ}k_i + \left(\alpha_{i,2} - \frac{\alpha_{i,3}^{2}}{\alpha_{i,4}}\right){}^{\circ}k_i^{2} +$$

$$+\frac{\alpha_{i,1}\alpha_{i,4}^{2} - \alpha_{i,3}^{3} - 2\alpha_{i,1}3\alpha_{i,5}}{2\alpha_{i,1}\alpha_{i,4}}\frac{{}^{\circ}k_i^{4}}{g_j^{2}} + \dots$$

Igy

$$h - \frac{1}{2}\frac{\alpha_{i,3}}{\alpha_{i,1}\alpha_{i,4}} \cdot \left(\frac{h - \alpha_{i,2}\,{}^{o}k_i^{2}}{{}^{o}k_i}\right)^{2} -$$

$$- \frac{\alpha_{i,1}\alpha_{i,4}^{2} - \alpha_{i,3}^{3} - 2\alpha_{i,1}\alpha_{i,3}\alpha_{i,5}}{2\alpha_{i,1}\alpha_{i,3}^{2}\alpha_{i,4}} \left(\frac{h - \alpha_{i,1} g_j\,{}^{o}k_i - \alpha_{i,2}\,{}^{o}k_i^{2}}{{}^{o}k_i^{2}}\right)^{2} \cdot {}^{o}k_i^{2} \tag{47}$$

$$+ \cdots = -\frac{1}{2}\frac{\alpha_{i,1}\alpha_{i,3}}{\alpha_{i,4}} g_j^{2} + \alpha_{i,1} g_j\,{}^{o}k_i + \frac{\alpha_{i,2}\alpha_{i,4} - \alpha_{i,3}^{2}}{\alpha_{i,4}}\,{}^{o}k_i^{2}$$

ahol a baloldalon a pontozott rész a $T = \frac{h - \alpha_{i,1} g\,{}^{o}k_i - \alpha_{i,2}\,{}^{o}k_i^{2}}{{}^{o}k_i^{2}}$ változó magasabb hatványait jelöli, amelyek a negyedfoku pontosság miatt elhagyhatók.

Áttérünk most a (24) formula k_2-t megadó tagjának átalakitására. Amennyiben itt a $t_1 = t_0 + \frac{3}{4}h$, $x_1 = x_0 + k_1^{*}$ hely a szinguláris - vagy közel szinguláris - hely (ez a kevésbé valószinü), akkor az inverzió révén előálló formulában,

$$h = \frac{1}{f_1}k_2 - \left[\frac{1}{18}\cdot\frac{1}{f_1}Df_0 + \frac{1}{4}f'_{x,0}\left(1 - \frac{f_0}{f_1}\right)\right]k_2^{2} +$$

$$+ 2\left[\frac{1}{18}\frac{1}{f_1}Df_0 + \frac{1}{4}f'_{x,0}\left(1 - \frac{f_0}{f_1}\right)\right]^{2}k_2^{3} + \cdots$$

-ban közvetlenül elvégezhetjük a $g = \frac{1}{f}$ transzformációt.

Igy

$$h = g_1 k_2 + \left[\frac{1}{18} g_1 \frac{\tilde{D}g_0}{g_0^{3}} + \frac{1}{4}\frac{g'_{x,0}}{g_0^{2}}\left(1 - \frac{g_1}{g_0}\right)\right]k_2^{2} + \cdots$$

adódik, ami közvetlenül használható k_2 megállapitására.

Ha viszont (és ez az általánosabb), a t_0, x_0 hely szinguláris -

vagy ez is, a t_1, x_1 hely is közel szinguláris, akkor k_1-et és k_2-t át kell alakitani, pl. olymódon, hogy k_1-ben hf_0 helyett csak _ pl. – $\frac{5}{11} hf_0$-t veszünk figyelembe (azaz ekkor (46)-ban $a_{1,1} = \frac{5}{11}$), k_2-ben pedig $\frac{3}{8}\, hf_0$-t (fenn kell állnia ti. a $\frac{11}{27} \cdot \frac{5}{11} hf_0 + \frac{16}{27} \cdot \frac{3}{8} hf_0 = \frac{11}{27} hf_0$ relációnak). Igy

$$k_2 = \left(\frac{3}{8} f_0 + f_1\right) h + \left(\frac{1}{18} Df_0 + \frac{1}{4} f'_{x,0}(f_1 - f_0)\right) h^2 ,$$

azaz

$$h = \frac{1}{\frac{3}{8} f_0 + f_1} k_2 - \frac{\frac{1}{18} Df_0 + \frac{1}{4} f'_{x,0}(f_1 - f_0)}{\left(\frac{3}{8} f_0 + f_1\right)^3} k_2^2 +$$

$$+ 2 \frac{\left(\frac{1}{18} Df_0 + \frac{1}{4} f'_{x,0}(f_1 - f_0)\right)^2}{\left(\frac{3}{8} f_0 + f_1\right)^5} k_2^3 - 5 \frac{\left(\frac{1}{18} Df_0 + \frac{1}{4} f'_{x,0}(f_1 - f_0)\right)^3}{\left(\frac{3}{8} f_0 + f_1\right)^7} k_2^4$$

$$+ 14 \frac{\left(\frac{1}{18} Df_0 + \frac{1}{4} f'_{x,0}(f_1 - f_0)\right)^4}{\left(\frac{3}{8} f_0 + f_1\right)^9} k_2^5 \pm \ldots .$$

Elvégezve a megfelelő átalakitást:

$$h = \alpha_{2,1}\, g_0 k_2 + \alpha_{22} k_2^2 + \alpha_{23} \frac{k_2^3}{g_0} + \alpha_{24} \frac{k_2^4}{g_0^2} + \alpha_{25} \frac{k_2^5}{g_0^3} + \cdots$$

ahol

$$\alpha = \frac{1}{g_0\left(\frac{3}{8}\frac{1}{g_0} + \frac{1}{g_1}\right)} = \frac{1}{\frac{3}{8} + \frac{g_0}{g_1}} \,)$$

$$\alpha_{22} = \frac{\frac{1}{18} \tilde{D} g_0 + \frac{1}{4} g'_{x,0} \cdot \left(\frac{g_0}{g_1} - 1\right)}{\left(\frac{3}{8} + \frac{g_0}{g_1}\right)^3} = \frac{S}{T^3}$$

$$\alpha_{23} = 2\frac{S^2}{T^5}\ ;\quad \alpha_{24} = 5\frac{S^3}{T^7}\ ;\quad \alpha_{25} = 14\frac{S^4}{T^9}\ ;\ \dots$$

Itt most már ugyanazokat az átalakitásokat végezhetjük el, mint a fentiekben, és itt is a (47) alatti képlethez jutunk el.

Az előzőekben megadott formulák pontosabb hibabecslésére egy későbbi munkában visszatérünk. Az alábbiakban csak nagyságrendi becslést adunk és ennek alapján a gyakorlati hibabecslés módját ismertetjük. Tegyük fel először, hogy a (39) - (44) alatti formulákat nem szinguláris hely környezetében alkalmazzuk. Ekkor h és k azonos nagyságrendüek, azaz $k = \mathcal{O}(h)$ és $h = \mathcal{O}(k)$ is érvényes. Ilyen feltételek esetén az inverziós formulák alapján adódó teljes végtelen sorokat figyelembevéve k resp. k hibája $\mathcal{O}(h^5)$ resp. $\mathcal{O}(h^6)$ nagyságrendü. Ha tehát az inverziós formulákat ugy csonkitjuk, hogy az ötödfokunál magasabb fokszámu tagokat nem vesszük figyelembe, ezzel k ill. k egyes összetevőiben, és igy magában $\hat{k}$-ban ill. k-ban is $\mathcal{O}(h^5)$ ill. $\mathcal{O}(k^6)$ nagyságu hibát hozunk létre és ez k és h azonos nagyságrendje miatt $\mathcal{O}(h^6)$-nal is mérhető - azaz a csonkitás az eljáráshibával azonos nagyságrendü hibát hoz csak létre. Áttérve mármost arra az alakra, amelyben $\frac{1}{g}$ hatványait kiküszöböltük, itt $(h - \alpha_{i,1} g_{j(i)}\, {}^{\circ}k_i - \alpha_{i,2}\, {}^{\circ}k_i^2) = \mathcal{O}({}^{\circ}k_i^3)$ érvényes, ezt továbbá a $k = \mathcal{O}(h)$ és $h = \mathcal{O}(k)$ relációt is figyelembevéve, $\Gamma = \frac{1}{{}^{\circ}k_i^2} \cdot (h - \alpha_{i,1} g_{j(i)}\, {}^{\circ}k_i - \alpha_{i,2}\, {}^{\circ}k_i^2) = \mathcal{O}(h) = \mathcal{O}({}^{\circ}k_i)$ érvényes. Ezért a k_1 - k és ezeken keresztül a k ill. $\hat{k}$

értékek megállapitásában is biztositandó az $\mathcal{O}(h^6)$ hibakorlát, ezt a sort $\tau^3 \cdot k_i^2$ -en, azaz τ harmadik hatványán tul kell csonkitanunk. Ehhez azonban az invertált sorban még a hatodik hatvány együtthatóját is figyelembe kell vennünk - ahogy ezt az (50) alatti formulából láthatjuk.

Áttérünk most a szinguláris pontok környezetére. Ha a (t_o, x_o) pont szinguláris, azaz $g(t_o, x_o) = 0$, de $\mu_{o,2} \neq 0$ (azaz $\tilde{D}g_o \neq 0$), akkor - amint azt (48)-ból leolvashatjuk - $k = \mathcal{O}(\sqrt{h})$ ill. $h = \mathcal{O}(k^2)$ érvényes. (Ha a tekintett hely közel szinguláris, akkor $k = \mathcal{O}(h)$ és $k = \mathcal{O}(\sqrt{h})$ közötti nagyságrendről van szó.)

Mindenesetre ekkor egyrészt az (50) alatti formulákban h ill. $\hat{h}$ hibája $\mathcal{O}(k^6)$ nagyságrendü, azaz $\mathcal{O}(h^3)$ hibával számolhatunk. Ugyanakkor

$$h - \alpha_{i,1} g_{j(i)}^{o} k_i - \alpha_{i,2}{}^{o} k_i^2 = \mathcal{O}(k^3) = \mathcal{O}(h^{3/2})$$

is érvényes.

Ha tehát a τ harmadik hatványa után csonkitjuk a sort, a k_i-k és igy k ill. $\hat{k}$ csonkitás következtében fellépő hibája $\mathcal{O}(h^3)$ nagyságu, ugyanakkora, mint az eljáráshiba. Ezért k és $\hat{k}$ különbségét most is jellemzőnek tarthatjuk $\hat{k}$ hibájára. Mindössze, annyi az eltérés, hogy h felezése esetén a hiba általában nem $\frac{1}{64}$ -részére csökken, hanem kisebb arányban, esetleg csak $\frac{1}{8}$ -ára. (A fenti nagyságrendi becslések természetesen csak akkor érvényesek, ha

$$h-\frac{1}{2}\frac{\alpha_{i,3}}{\alpha_{i,1}\alpha_{i,4}}\left(\frac{h-\alpha_{i,2}\,{}^{\circ}k_i^2}{{}^{\circ}k_i}\right)^2+\frac{1}{2}\frac{\alpha_{i,1}\alpha_{i,3}}{\alpha_{i,4}}g_{j(i)}^2-\alpha_{i,1}$$

$$g_{j(i)}\,{}^{\circ}k_i-\frac{\alpha_{i,2}\alpha_{i,4}-\alpha_{i,3}^2}{\alpha_{i,4}}\,{}^{\circ}k_i^2$$

hatszor folytonosan differenciálható függvénye marad a τ argumentumnak a $g \longrightarrow 0$, és $\alpha_{i,2} \rightarrow \alpha \neq 0$ feltétel mellett. Ennek igazolására pontosabb hibabecslés kapcsán egy későbbi dolgozatban visszatérünk.)

(52) alatti formuláink szinguláris hely környezetébeni alkalmazhatóságát egyébként az 5. táblázat érzékelteti.

Arra a kérdésre kell még választ adni, hogy a direkt (31) - (36) alatti formulák helyett mikor célszerü áttérni az indirekt (51) - (52) alatti formulákra (utóbbinál egyrészt sokkal bonyolultabb az együtthatók számitása, másrészt a $k_i - k$ meghatározásához egy-egy bonyolult egyenletet kell megoldani). A 4 és 5 táblázatokból kiolvasható, hogy mennél nagyobb f értéke, annál inkább előnyös a (31) - (36) alatti formulák használata a Runge-Kutta-tipusuakkal összehasonlitva. Az indirekt (51) - (52) alatti formulákra viszont (figyelembevéve az ezekkel kapcsolatban jelentkező nagymértékü számitástechnikai nehézségeket) a tapasztalat szerint csak akkor érdekes áttérni, ha h nagyságrendje megközeliti az egy integrációs részintervallumra engedélyezhető hibakorlátot.

5. § Operátoregyenletek megoldása szakaszonkénti perbutációval.

Legyen f olyan Fréchet-értelemben folytonosan differenciálható függvény, amely az E lineáris normált teret az E_1 lineáris normált térbe képezi le, és tekintsük az

$$f(x) = 0$$

egyenletet, ahol $x \in E$ a keresett megoldás, 0 pedig az E_1 tér zéruseleme. Legyen továbbá $g(x)$ egy másik, ugyancsak folytonosan differenciálható, E-t E_1-be leképező függvény, amelynek ismerjük egy $x_0 \in E$ "zérushelyét", azaz amelyre

$$g(x_0) = 0$$

teljesül (és amely lehetőleg "nem nagyon tér el" f-től).

Tekintsük most a válós (vagy komplex) t paramétertől függő

$$h(x,t) = g(x) + t\,[f(x) - g(x)]$$

függvényt, amely E_1 linearitása miatt ugyancsak E-t E_1-be képezi le. h-nak a $t = 0$ paraméterértékhez tartozó "metszetének", $g(x)$-nek ekkor ismerjük egy "zérushelyét", ti. az x_0 E elemet. A keresett megoldás pedig éppen a $t = 1$ paraméterértékhez tartozó "metszet" zérushelye.

Amennyiben mármost a $h(x,o)$ metszet Fréchet-differenciálhányadosa (amely feltevéseink szerint létezik és folytonos x-ben) nem egyenlő Θ-val, az x_0 helyen (Θ itt az $(E \to E_1)$ lineáris normált tér zéruseleme), akkor létezik a $t = 0$ hely környezetében egy folytonos és folytonosan differenciálható $x(t)$ függvény, amely kielégiti a $h(x(t),t) \equiv 0$ azonosságot, továbbá az

$$\dot{x}(t) = [g' + t(f' - g')]^{-1}(f(x) - g(x)) = \Psi(x,t)$$

differenciálegyenletet. A megoldás megkereséséhez tehát ezt a differenciálegyenletet kell integrálnunk az $x(o) = x_o$ kezdeti feltétellel $t = 1$-ig. Tegyük fel a továbbiakban, hogy a $\Psi(x,t)$ függvény, amely tehát az $E \times K$ teret (K a komplex számok testét jelöli) képezi le E-be, elég sokszor folytonosan differenciálható függvénye a tekintett tartományban mindkét argumentumának. A közvetett függvények jólismert differenciálási szabálya alapján ekkor azonnal beláthatóan $x(t)$ is elég sokszor folytonosan differenciálható és deriváltjai az alábbi alakban állithatók elő ([1] pl. ill. [6]):

$$\frac{d}{dt}\dot{x}(t) = \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{\partial \Psi}{\partial x}\dot{x}(t) = \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{\partial \Psi}{\partial x}\cdot \Psi(x,t) \qquad (54)$$

ahol $\frac{\partial \Psi}{\partial t}$ és $\Psi(x,t) \in E$, továbbá $\frac{\partial \Psi}{\partial x} \in (E \to E)$.

Formálisan tehát a D operátort a $\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}\cdot\Psi\right)$ formulával értelmezve, és $D\Psi$-n az (54) alatti, ill. általában $D\varphi$-n a

$$D\varphi = \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{\partial \varphi}{\partial x}\Psi \qquad (55)$$

kifejezést értve (ahol φ is E x K-t képezi le folytonosan differenciálhatóan E-be), mindenesetre

$$\ddot{x}(t) = D\psi \text{ ill. általában } \dot{\varphi}(t) = D\varphi(t) \qquad (56)$$

érvényes.

A D^n operátort most is teljes indukcióval értelmezzük, a

$$D^{n+1} = D^n \frac{\partial}{\partial t} + D^n \frac{\partial}{\partial x} \cdot \psi \qquad (53)$$

formula alapján. Ilymódon a 2.§.-ban már megismert módszerek alapján, teljes indukcióval azonnal belátható, hogy az ott szereplő valamennyi D-re vonatkozó reláció - a tényezők sorrendjének értelemszerü figyelembevételével ill. betartásával - most is érvényes marad. Ezért - betartva a most lényeges tényező-sorrendet - formálisan Δx most is ugyanugy állitható elő Δt polinomjaként, mint a skaláris esetben. Hasonlókép - felhasználva ismét a közvetett függvények differenciálási szabályait

$$\psi(t_s + \Delta t; x_0 + \Delta t\psi + Ⓦ) \text{ ill. } D\psi(t_0 + h; x_0 + h\psi + Ⓗ)$$

stb. is ugyanolyan alaku Δ-t-polinommal irható fel, mint skalárváltozók esetén. Következéskép a klasszikus Runge-Kutta formula is, az általunk megadott módositott formulák is használhatóak ebben az esetben is. Példaként egyrészt a mátrixok sajátértékproblémájának a fenti módon történő megoldását, másrészt egy peremértékfeladat megoldását, végül egy optimális vezérlési feladat közelitő megoldását mutatjuk be a következő - záró - paragrafusokban.

Befejezésül még azt a kérdést érintjük, hogy a szinguláris pontok környezetében hogyan használhatjuk a 3. §-ban ismertetett formulákat. A közvetlen használat már csak azért sem jöhet szóba, mert Ψ -nek általában nem létezik a reciproka. Ezért a problémát ugy kerüljük meg, hogy bevezetünk egy segédváltozót, amely mintegy "felveszi" a szingularitást, éspedig az

$$x = \Psi (x,t)$$

differenciálegyenlettel kapcsolatban például a

$$\frac{d\sigma}{dt} = \|\Psi\| = \vartheta(x,\sigma,t)$$

differenciálegyenlet révén. Az eredeti egyenletet viszont a

$$\frac{dx}{d\sigma} = \frac{1}{\|\Psi\|}\cdot\Psi$$

alakba irjuk. Ekkor ϑ reciproka létezik, és igy a Δ t-hez tartozó $\Delta\sigma$ -t a (51)-ben megadott módon számithatjuk, mig a $\Delta\sigma$-hoz tartozó Δ x-et a (31) formula alapján a szokásos módon, minthogy itt a jobboldal normája biztosan korlátos marad a tekintett pont környezetében.

Az igy alkalmazott különböző tipusu Runge-Kutta formulák pontos hibabecslésére a hibabecsléssel foglalkozó későbbi munkánkban visszatérünk. Mindenesetre elég sokszor folytonosan differenciálható Ψ függvény esetén itt is igaz az, hogy az egy lépésre vonatkozó hiba. reguláris pont környezetében h eggyel magasabb hatványával arányos, mint az alkalmazott formula fokszáma. A különböző tipusok (különböző fokszámok vagy lépésközfelezések) során adódó közelitések távolságát az E-tér metrikájában kell mérnünk, és ilyen feltételek mellett az éppugy jellemzi a közelitő és a pontos növekmény ugyanezen metrikában mért eltérését, mint skalár változók esetén.

6.§. Három példa.

Tekintsük először az alábbi általánositott sajátértékfeladatot:

$$\begin{pmatrix} 2 & 1 & -3 \\ -1 & 4 & 2 \\ -2 & 0 & 1 \end{pmatrix} y - \lambda \begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 \\ 5 & 2 & -1 \\ -3 & 3 & 4 \end{pmatrix} y = \underline{0},$$

amelynek egyik sajátvektora közelitően az

$$y = \begin{pmatrix} 0{,}3 \\ -0{,}9 \\ 1 \end{pmatrix}$$

vektor, a hozzátartozó sajátérték pedig közelitően a $\lambda = 2$ érték. Mindenekelőtt ugy alakitjuk át az eredeti sajátértékproblémát, hogy az egy alkalmas normált téren értelmezett függvény zérushelye megkeresésévé váljék. E célból a sajátértékproblémát kiegészitjük egy normálási feltétellel, amit a $G(\tilde{y}) - 1 = 0$ alakba irunk; ugyanakkor az ismeretlen vektort egy negyedik dimenzióval is kiegészitjük és negyedik rendezőként épp a sajátértéket választjuk; az $\begin{pmatrix} \underline{y} \\ \lambda \end{pmatrix}$ vektort $\underline{u}$ -val jelöljük. A megoldandó egyenlet igy

$$\underline{\underline{T}}(\underline{u}) = \underline{\Theta}$$

alakba irható, ahol a $\underline{\underline{T}}$ operátor jelentése:

$$\underline{\underline{T}}(\underline{u}) = \begin{pmatrix} \underline{\underline{A}}\,\underline{y} - \lambda \underline{\underline{B}}\,\underline{y} \\ G\underline{y} - 1 \end{pmatrix}$$

Az $\begin{pmatrix} \underline{y} \\ \lambda \end{pmatrix}$ vektort pl. az $\left\| \begin{pmatrix} \underline{y} \\ \lambda \end{pmatrix} \right\| = \max(\|\underline{y}\|, |\lambda|)$ módon értelmezhetjük, a vektorok ill. mátrixok normáját pedig pl. legnagyobb abszolut értékü elemükkel, ill. abszolut sorösszegükkel mérhetjük. A G normáló operátor lehet pl. /ez a legegyszerübb/ valamelyik rendezőt /pl. a harmadik rendezőt/ kiválasztó operátor.

Ekkor első feladatunk egy olyan $\underline{\underline{W}}$ operátor kiválasztása, amely $\underline{\underline{T}}$-hez lehetőleg közel áll, és amelynek a megadott $\begin{pmatrix} \tilde{\underline{y}} \\ \lambda \end{pmatrix}$ elem valóban zérushelye.

Ilyent egyszerü számolással, pl.: a

$$\underline{\underline{W}}(\underline{u}) = \begin{pmatrix} \underline{\underline{A}}\,y - \lambda \underline{\underline{B}}_1 \underline{y} \\ G\underline{y} - 1 \end{pmatrix}$$

alakban felirhatunk, ahol $\underline{\underline{B}}_1$ csak az utolsó oszlop vektorában különbözik $\underline{\underline{B}}$-től. Egyszerü számolás mutatja, hogy

$$\underline{\underline{B}}_1 = \begin{pmatrix} -2 & 1 & -0{,}15 \\ 5 & 2 & -0{,}65 \\ -3 & 3 & 3{,}8 \end{pmatrix}$$

megfelel.

Eszerint perturbált egyenletünk

$$\underline{\underline{W}}(\underline{u}) + t \quad \underline{\underline{T}}(\underline{u}) - \underline{\underline{W}}(\underline{u}) \quad = \underline{0}$$

ahol

$$\underline{\underline{\textcircled{H}}}(\underline{u}) = \underline{\underline{T}}(\underline{u}) - \underline{\underline{W}}(\underline{u}) = \begin{pmatrix} \underline{\underline{0}}\,\underline{y} - \lambda \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0{,}15 \\ 0 & 0 & -0{,}35 \\ 0 & 0 & +0{,}2 \end{pmatrix} \underline{y} \\ 0 \end{pmatrix}$$

alaku.

Mármost a $\underline{\underline{W}}(\underline{u})$ ill. $\underline{\underline{\textcircled{H}}}(\underline{u})$ Frechet-deriváltja /l. pl.[ ]/ - az $\left(\frac{y}{\lambda}\right)$ helyen a

$$\begin{pmatrix} \underline{\underline{A}} - \lambda \underline{\underline{B}}_1 & -\underline{\underline{B}}_1 \underline{y} \\ \underline{e}_3^* & 0 \end{pmatrix} \text{ ill. a} \begin{pmatrix} \underline{\underline{0}} - \lambda(\underline{\underline{B}} - \underline{\underline{B}}_1) - y(\underline{\underline{B}} - \underline{\underline{B}}_1) \\ \underline{0}^* \quad\quad 0 \end{pmatrix}$$

mátrix, ahol $\underline{e}_3^*$ a harmadik egységvektor. Részletesen tehát

$$\underline{\dot{u}} = \frac{du}{dt} = -\left[\underline{\underline{W}}' + t\,\underline{\underline{\textcircled{H}}}'\right]^{-1} \underline{\underline{\textcircled{H}}}(\underline{u}) =$$

$$= -\begin{bmatrix} 2+2\lambda & 1-\lambda & -3+0{,}15\lambda - 0{,}15\lambda t & 2y_1 - y_2 + 0{,}15y^3 - 0{,}15ty_3 \\ -1-5\lambda & 4-2\lambda & 2+0{,}65\lambda - 0{,}35t\lambda & -5y_1 - 2y_2 + 0{,}65y_3 + 0{,}35ty_3 \\ -2+3\lambda & -3\lambda & 1+3{,}8\lambda - 0{,}2\lambda t & 3y_1 - 3y_2 - 3{,}8y_3 - 0{,}2ty_3 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

Ezt a differenciálegyenletet kell a t=0-hoz tartozó

$$\underline{u}(o) = \begin{pmatrix} 0,3 \\ -0,9 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix}$$ kezdeti feltétellel $t = 1$-ig integrálni.

Az integrálásnál a Runge-Kutta módszert választva és egy lépéssel áthidalva a 0,1 intervallumot, $\underline{k}_1$-re, $\underline{k}_2$-re, $\underline{k}_3$-ra, $\underline{k}_4$-re, végül $\underline{k}$-ra ill. $\underline{u}(1)$-re az alábbi értékek adódnak:

$$\underline{k}_1 = \begin{pmatrix} 0,059363954\ldots \\ -0,02544172\ldots \\ 0 \\ -0,049469964\ldots \end{pmatrix}; \quad \underline{k}_2 = \begin{pmatrix} 0,059046770\ldots \\ -0,02612260\ldots \\ 0 \\ -0,04890232\ldots \end{pmatrix};$$

$$\underline{k}_3 = \begin{pmatrix} 0,059042886\ldots \\ -0,02612743\ldots \\ 0 \\ -0,04888950\ldots \end{pmatrix}; \quad \underline{k}_4 = \begin{pmatrix} 0,058720235\ldots \\ -0,02681792\ldots \\ 0 \\ -0,04830276\ldots \end{pmatrix};$$

$$\underline{k} = \begin{pmatrix} 0,059043917\ldots \\ -0,02612661\ldots \\ 0 \\ -0,04889272\ldots \end{pmatrix}; \quad \underline{u}(1) = \begin{pmatrix} 0,359043917\ldots \\ -0,92612661\ldots \\ 1 \\ 1,95110728\ldots \end{pmatrix}$$

A sajátérték, ill. a megfelelően normált sajátvektor pontos értéke:

$$\lambda = 1,9513668\ldots \quad \text{ill.} \quad \underline{y} = \begin{pmatrix} 0,3589609\ldots \\ -0,9261842\ldots \\ 1 \end{pmatrix}$$

Második példaként tekintsük az

$$u'' + \frac{u^2}{\frac{x^3}{6} - \frac{x^2}{2} - \frac{x}{3}} = x - 1 ; \quad u(0) = u(1) = 0$$

peremértékfeladatot. Ennek egy "közelitő" megoldása az $u = 0$ függvény, amely pl. az

$$u'' = 0$$

"differenciálegyenletet" elégiti ki. A Banach-tér, amelyet tekintünk, legyen a $[0,1]$ intervallumon kétszer folytonosan differenciálható és a $v(0) = v(1) = 0$ mellékfeltételt kielégitő függvények B tere, és legyen pl.

$$\|u\| = \int_0^0 (u''^2 + u^2)\, dx$$

Igy a perturbált probléma

$$F[u(x;t),t] = u'' + t\left[u'' + \frac{u^2}{\frac{x^3}{6} - \frac{x^2}{2} + \frac{x}{3}} - x + 1 - u''\right] = 0 .$$

A hozzárendelt differenciálegyenlet tehát

$$\dot{u}(x;t) = -F_u'^{-1}(F_t')$$

alaku. Itt

$$F_t' = \frac{u^2}{\frac{x^3}{6}-\frac{x^2}{2}+\frac{x}{3}} - x + 1$$

és

$$F_u' v = \frac{\partial F}{\partial u''} v'' + \frac{\partial F}{\partial u'} v' + \frac{\partial F}{\partial u} v = v'' + 2t \frac{u}{\frac{x^3}{6}-\frac{x^2}{2}+\frac{x}{3}} v$$

Ha tehát

$$-F_u'^{-1}(F_t') = \omega,$$

akkor ez azt jelenti, hogy egyrészt $\omega \in B$, másrészt ω kielégiti a

$$\omega'' + 2t \frac{u}{\frac{x^3}{6}-\frac{x^2}{2}+\frac{x}{3}} \omega = -\frac{u^2}{\frac{x^3}{6}-\frac{x^2}{2}+\frac{x}{3}} + x - 1$$

lineáris differenciálegyenletet.

Minthogy ennek - a peremfeltételeket is kielégitő - megoldása elég sok számitással jár, megelégszünk azzal, hogy egy lépésben hidaljuk át a $0 = t = 1$ intervallumot, sőt itt is az Euler-Canchy formulát /másodrendü Runge-Kutta formula/ használjuk. Igy

$k_1 = 1 \cdot \omega_1;\ t_1 = 0;\ u_1 \equiv 0$, azaz

$$\omega_1' = x-1,$$

tehát $\omega_1 \in B = \frac{x^3}{6} - \frac{x^2}{2} + \frac{x}{3}$.

Ennek alapján $k_2 = 1\ \omega_2;\ t_2 = \frac{1}{2};\ u_2 = \frac{1}{2}\omega_1 = \frac{x^3}{12} - \frac{x^2}{4} + \frac{x}{6}$

azaz

$$\omega_2'' + \frac{1}{2}\omega_2 = -\frac{1}{4}\left(\frac{x^3}{6} - \frac{x^2}{2} + \frac{x}{3}\right) + x - 1 = -\frac{x^3}{24} + \frac{x^2}{8} + \frac{11x}{12} - 1$$

és igy

$$\omega_2 = C_1 \sin\frac{\sqrt{2}}{2}x + C_2 \cos\frac{\sqrt{2}}{2}\ x^3 + \frac{1}{4}x^2 + \frac{17}{6}x - 3,$$

azaz $\omega_2 \in B$ miatt

$$u(x) \simeq \omega_2 = 3\cos\frac{\sqrt{2}}{2}x - \left(\frac{1}{3\sin\frac{\sqrt{2}}{2}} + 3\,\mathrm{ctg}\frac{\sqrt{2}}{2}\right)\sin\frac{\sqrt{2}}{2}x -$$

$$-\frac{1}{12}x^3 + \frac{1}{4}x^2 + \frac{17}{6}x - 3$$

ω_2 pontosságára $\|\omega_2 - \omega_1\|$ alapján következtethetünk.

Harmadikként tekintsük az optimális vezérlési problémákat. Az ilyen tipusu feladatok általános sémája: Legyenek E_1, E_2, E_3, E_4 lineáris szupermetrikus terek, $F(u_1,u_2)$ legyen értelmezve az $E_1 \times E_2$ téren és azt képezze le E_3-ba, $G(u_1,u_2)$ pedig a valós számok V terébe, végül $H(u_3, u_4)$ legyen egy bilineáris funkcionál az $E_3 \times E_4$ téren. Ekkor - amint azt könnyen be lehet látni - a

$$G(u_1, u_2) = \text{extr.}, \quad F(u_1, u_2) = 0$$

feltételes szélsőértékproblémának az $u_{1,o}$, $u_{2,o}$ helyen lokális szélsőértéke van, ha e pontban és annak környezetében F és G differenciálhatók és található olyan

$$u \in E_4 \neq 0, \text{ hogy}$$

$$\operatorname{grad}\left[G + H(F, u_4)\right] = 0$$

teljesül (u_4 itt a Lagrange-féle multiplikátor általánositása). Ha tehát valamilyen G_1, F_1 függvénypár mellett meg tudjuk oldani az extrémumfeladatot, és G_1 nem nagyon "tér el" G-től, F_1 pedig F-től és ismeretes az ezen megoldáshoz tartozó $u^*_{4,o}$ érték is, akkor

a $\underline{v}(t) = \begin{pmatrix} u_1(t) \\ u_2(t) \\ u_4(t) \end{pmatrix}$ függvényt ugy kell megállapitani,

hogy $\underline{v}(o)$ az ismert extremum-megoldás legyen, és $\underline{v}(t)$ kielégitse a

$$\operatorname{grad}\Big[G_1(u_1(t), u_2(t)) + t\{G(u_1(t)\ u_2(t)) - G_1(u_1(t), u_3(t))\} +$$
$$+ H\big(F_1(u_1(t), u_2(t)) + t\{F(u_1(t), u_2(t)) - F_1(u_1(t), u_2(t))\}\, u_4(t)\big)\Big] \equiv 0$$

azaz a

$$\frac{d}{dt}\,\mathrm{grad}\left[G_1+t(G-G_1)+H(F_1+t(F-F_1),u_4)\right]=0$$

differenciálegyenletet.

Ez utóbbi megoldása a már bemutatott módon megy.

Befejezésül megemlitjük azt is, hogy az itt bemutatott ötletek, amelyeket a Runge-Kutta módszer javitására használtunk fel, az f'_x ill. Df értékek szerepeltetése nélkül is alkalmazhatóak. Igy pl. hárompontos, ötödrendü Runge-Kutta formulát lehet ugy konstruálni, hogy a megelőző lépés növekményeit még a következő lépésben is felhasználjuk. Hasonlóképp h-ban másodfoku növekményeket lehet ugy konstruálni, hogy a hf_i alaku tagok mellett $h^2(f_j-f_i)$ alaku tagokat is szerepeltetünk, stb. Ezekre szintén visszatérünk egy további cikkben![x/]

Irodalom:

[1] Collatz, L.: Funktionalanalysis und numerische Mathematik, Springer, 1964.

[2] Rényi A.: A Newton féle gyökközelitő eljárásról. Mat. Lapok, 1. 1949/50.

[3] Kizner, W.: A Numerical Method for Finding Solutions of non-linear Equations. J. Soc. Indust. Appl. Math. V. 12. N°2.

---

x/ Az 1.2.3.4.5 táblázatokat a következő közlemények függelékeként közöljük, minthogy e szám nyomdába adásakor még nem voltak teljesek.

[4] Huta, A.: Une amélioration de la méthode de Runge-Kutta-Nyström... Acta Fac. Rev. Nat. Univ. Comen, 1956.

[5] Frey, T.: On the Runge-Kutta-Nyström Method I. Periodica Polytechnika, 1958.

[6] Ljusternik, L.A.-Sobolew, W.I.: Elemente der Funktional-analysis, Berlin, 1955.

[7] Knopp, K.: Theorie und Anwendung der unendlichen Reihen, Springer, 1922.

Zusammenfassung

Eine allgemeine Methode für Lösung von Gleichungen in allgemeinen Räumen wird hier angegeben, welche mit Hilfe eines Hilfsparameters die Grundgedanke des Newton-Raphsonschen Verfahrens verallgemeinert und dementsprechend die Runge-Kutta Methode erweitert.

Optimális perem-vezérlőfüggvény Fourier-sora hiperbolikus differenciaegyenlet esetén

Szelezsán János

Vegyünk olyan folyamatokat, amelyeknek viselkedését a

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = L(u)$$

$$L(u) = \sum_{i,j=1}^{n} \frac{\partial}{\partial x_i}\left(a_{ij}(X)\frac{\partial u}{\partial x_j}\right) - a(X)u \qquad 1./$$

differenciálegyenlet írja le, ahol

$$X = (x_1,\ldots,x_n)$$

és az $a_{ij}(X)$, valamint $a(X)$ együtthatók valamilyen Ω tartományban kielégítik az

$$a(X) \geq 0 \quad , \quad a_{ij} = a_{ji}$$

$$\sum_{i,j=1}^{n} a_{ij}\,\xi_i\,\xi_j \geq \alpha \sum_{i=1}^{n} \xi_i^2 \qquad \alpha > 0$$

feltételeket. /Az utóbbi egyenlőtlenség azt jelenti, hogy a differenciálegyenlet hiperbolikus/.

Tartozzék a feladathoz az alábbi vegyes peremfeltétel:

a $Q_T = \Omega \times (0<t<T)$ hengeren a megoldás elégitse ki az

$$u\Big|_{t=0} = \varphi(X)\,; \qquad \frac{\partial u}{\partial t}\Big|_{t=0} = 0 \qquad 2./$$

kezdeti feltételt és az

$$u\big|_S = 0 \;, \quad t \in [0,T] \qquad 3./$$

feltételt, ahol S az Ω tartomány határa.

Legyen $q(X)$ egy adott függvény.

Tekintsük a

$$J(\varphi(X)) = \int_{\Omega} [q(X) - u(X,t_0)]^2 \, d\Omega =$$

funkcionált, ahol $d\Omega = dx_1,\ldots,dx_n$.

Feladat:

Meghatározandó az a $\varphi(X) \in L_2$ perem feltétel, melyre a $J(\varphi(X))$ funkcionál minimumot vesz fel.

Tétel:

Legyenek λ_k, $v_k(X)$ $(k=1,2,\ldots,n,\ldots)$ az

$$L(v) + \lambda v = 0$$

egyenlet sajátértékei ill. saját vektorai.

Tegyük fel, hogy $\sum_{k=1}^{\infty} \frac{\gamma_k^2}{\cos^2\sqrt{\lambda_k}\, t_0} < \infty$ ahol $\gamma_k = \int_{\Omega} q(X) v_k(X) \, d\Omega$

Akkor a feladat megoldása:

$$\varphi(X) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\gamma_k}{\cos^2\sqrt{\lambda_k}\, t_0} v_k(X)$$

Bizonyitás:

Ismeretes, [1] hogy az 1/ differenciálegyenlet megoldása a 2/, 3/ feltételek mellett:

$$u(X,t)=\sum_{k=1}^{\infty} A_k \cos(\sqrt{\lambda_k}\, t_0)\, v_k(X)$$

alakban állitható elő, ahol

$$A_k=\int_{\Omega} \varphi(X)\, v_k(X)\, d\Omega$$

és a $v_k(X)$ függvények az $L(u)$ operátor ortonormált sajátfüggvényei, azaz az

$$L(v)+\lambda v=0$$

egyenlet megoldásai a $v|_S=0$ feltétel mellett, a $\lambda_k>0$ számok pedig a megfelelő sajátértékek.

Jelöljük H_1-el a H Hilbert térnek a $v_1(X),\dots,v_n(X)$ elemek által generált $H_1=L(v_1,v_2,\dots,v_n,\dots)$ alterét. A H_1 altér elemei tehát

$$h(X)=\sum_{i=1}^{\infty} \alpha_i\, v_i(X)$$

alakuak, ahol az $\alpha_1,\alpha_2,\dots,\alpha_n,\dots$ tetszőleges végtelen számsorozat.

E jelöléssel azt mondhatjuk, hogy $u(x,t_0)\in H_1$. Legyen H_1^* a H_1 altér ortogonális komplementere.

Tétel: (l. II. 83. old.)

Legyen H_1 a H Hilbert tér altere H_1^* pedig H_1 ortogonális komplementere. A H Hilbert tér tetszőleges $x \in H$ elemét egyértelmüen elő lehet állitani:

$$x = x' + x''$$

alakban $(x' \in H_1,\ x'' \in H_1^*)$. Az x' elem az x elemnek a H_1 altértől való távolságát realizálja, azaz

$$\| x - x' \| = \varrho (x_1 H_1)$$

/Az x', x'' elemeket az x elem H ill. H_1^* altérre vonatkozó vetületeinek nevezzük./

A tétel értelmében, $q(X)$ felbontható két vetületének összegére azaz:

$$q(X) = q_1(X) + q_2(X)$$

ahol $q_1(X) \in H_1$, azaz $q_1(X) = \sum_{n=1}^{\infty} \gamma_n v_n(X)$

ahol $\gamma_n = [q(X), v_n(X)]$ (Itt $[x,y]$ a skalár szorzatot jelöli.)

A $q_2(X)$ vetületre viszont: $q_2(X) \in H_1^*$

A két vetület közül $q_1(X)$ realizálja H_1 altér távolságát $q(X)$-től, azaz

$$\| q(X) - q_1(X) \| = \varrho (q(X), H)$$

és ez a távolság éppen $\| q_2 \|$ -val egyenlő.

Viszont $\varrho(q(X), H_1) = \min \int\limits_{\Omega} [u(X,t_0) - q(X)]^2 d\Omega$

Ebből azonban következik, hogy mivel $q_1(X) \in H_1$, és $u(X,t_0) \in H_1$ ezért

$$q_1(X) = u(X,t_0)$$

azaz

$$\sum_{n=1}^{\infty} \gamma_n v_n(X) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n \cos\sqrt{\lambda_n}\, t_0\, v_n(X)$$

vagyis

$$A_n = \frac{\gamma_n}{\cos\sqrt{\lambda_n}\, t_0} = \frac{[q(X), v_n(X)]}{\cos\sqrt{\lambda_n}\, t_0}$$

Annak viszont, hogy a

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{\gamma_n}{\cos\sqrt{\lambda_n}\, t_0} v_n(X)$$

sor konvergens legyen, szükséges és elégséges feltétele, hogy

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{\gamma_n^2}{\cos^2\sqrt{\lambda_n}\, t_0} < \infty$$

legyen.

A feladat megoldásának

$$\varphi(X) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\gamma_n}{\cos\sqrt{\lambda_n}\, t_0} v_n(X)$$

alakja lehetőséget ad $\varphi(X)$ közelitő meghatározására. Ha valamilyen módon ugyanis kiszámitottuk a λ_n sajátértékeket és a $v_n(X)$ sajátfüggvényeket, akkor a $\varphi(X)$ megoldás közelitéseként vehető a végtelen sor egy

$$\sum_{n=1}^{N} \frac{\gamma_n}{\cos\sqrt{\lambda_n}\, t_0} v_n(X)$$

szelete.

Egy példa:

Tekintsük a szabadon rezgő hur egyenletét:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = a^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

az

$$u\big|_{x=0} = 0 \quad ; \quad u\big|_{x=\ell} = 0$$

perem ill. kezdőfeltétellel.

Legyen a cél

$$\int_0^{\ell} [\varphi(x) - u(x,t_0)]^2 dx$$

minimalizálása.

A differenciálegyenlet megoldása a fenti feltételekkel:

$$u(x,t) = \sum_{k=1}^{\infty} a_k \cos \frac{k\pi a t}{l} \cdot \sin \frac{k\pi x}{l}$$

ezért az előbbi tétel alapján

$$\varphi(x) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\gamma_k}{\cos \frac{k\pi a t_0}{l}} \cdot \sin \frac{k\pi x}{l}$$

ahol

$$\gamma_k = \int_0^l \varphi(x) \sin \frac{k\pi x}{l} dx$$

Ha

$$\sum_{k=1}^{\infty} \frac{\gamma_k^2}{\cos^2 \frac{k\pi a t_0}{l}} < \infty$$

akkor az igy kapott $\varphi(x)$ megoldása a feladatnak.

Irodalom:

[1] M.M. Szmirnov: Differencialnie uravnenija v czasztnik proizvodnik vtorovo porjadka /Moszkva, 1964/

[2] L.V.Kantorovics, G.P. Akilov: Funkcionalnij analiz v normirovannih prosztransztvah /Moszkva, 1959/.

Summary

Optimal boundary control funkction with Fourier series in case of hyperbolic differential equations.

Let us take such processes whose behaviour is described by the differential equation.

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = L(u)$$

where

$$L(u) = \sum_{i,j=1}^{n} \frac{\partial}{\partial x_i}\left(a_{ij}(X)\frac{\partial u}{\partial x_j}\right) - a(X)\,u$$

$$X = (x_1, \ldots, x_n)$$

and the $a_{ij}(X)$ as well as $a(X)$ coefficients are fulfilling the following conditions.

$$a(X) \geq 0; \quad a_{ij} = a_{ji}$$

$$\sum_{i,j=1}^{n} a_{ij}\,\xi_i\,\xi_j \geq \alpha \sum_{i=1}^{n} \xi_i^2 \qquad \alpha > 0$$

Let us take the following boundary couditions

$$u\Big|_{t=0} = \varphi(X) \quad ; \quad \frac{\partial u}{\partial t}\Big|_{t=0} = 0$$

$$u\Big|_S = 0 \qquad ; \quad t \in [0,T]$$

where S is the boundary of the domain Ω.

Let $q(X)$ be a given function.
Let us consider the functional

$$J(\varphi(X)) = \int_{\Omega} [q(x) - u(X, t_0)]^2 d\Omega$$

where $d\Omega = dx_1, dx_2 \cdots dx_n$

Problem

The $\varphi(X) \in L_2$ boundary condition is to be determined, for wich the functional takes up the minimum.

We have obtained the following:

Let λ_k, $v_k(X)$ be the eigeuvalues and eigenvectors of the equation.

$$L(v) + \lambda v = 0 \qquad (k = 1, 2, \cdots, n, \cdots)$$

Let us suppose that $\sum_{k=1}^{\infty} \frac{\gamma_k^2}{\cos^2\sqrt{\lambda_k} t_0} < \infty$ where

$$\gamma_k = \int_{\Omega} q(x)\, v_k(x)\, d\Omega$$

Then the solution of the problem is:

$$\varphi(X) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\gamma_k}{\cos^2\sqrt{\lambda_k} t_0} v_k(X)$$

Rövid közlemények elkészült programokról

Intézeti Közleményünkben e számtól kezdve rövid leirásokat közlünk a Központ munkatársai által kidolgozott gépi programokról. E rövid leirások célja egyfelől tájékoztatást adni abból a célból, hogy a Közlemények olvasói az elkészült programokat igénybevehessék, felhasználhassák, másfelől azt akarjuk ezzel elérni, hogy a Központ munkatársainak ezuton legyen lehetőségük, hacsak igen erősen leröviditett formában is "publikálni" sokszor nagyon sok munkát és szaktudást igénylő tevékenységüket.

Dancs István - Simon István:

Szimplex módszer, lineáris programozási feladatokra

A program az $\underline{A}\underline{x} \leqq \underline{b}$, $\underline{c}\underline{x} \longrightarrow opt$ $\Big\}$ $\underline{b} \geqq 0$, $\underline{x} \geqq 0$

modell megoldását állitja elő, ahol A egy m x n-es mátrix, $\underline{b}$ pedig $\underline{m}$ dimenziós kapacitásvektor, $\underline{c}$ pedig a célfüggvény együtthatóinak n dimenziós vektora, $\underline{x}$ pedig a megoldás vektora.

A program a jólismert kétfázisu szimplex módszer alapján müködik, melynek leirása pl.: G.Hadley, Linear programming /University of Chicago Addison-Werley Publishing, Company, Inc. 1966/ c. könyvben megtalálható.

A programot a felmerült igényeknek megfelelően többféle változatban készitettük el.

a/ Csak ferrit memóriát használó változat

Ez a program dolgozik a leggyorsabban, de csak kisméretü mátrixokra alkalmas. A programmal számolható maximális méretekre fenn kell állni a következő egyenlőtlenségnek $3\,(m+n) + mn \leqq 4096$.

b/ Csak a dobmemóriát használó változat

E programmal megoldható feladat maximális méretei nem léphetik tul a következő két egyenlőtlenséget

$$mn + 3\,(m+n) \leqq 7600$$

$$2m + n \leqq 300$$

c/ <u>A ferrit és dobmemóriát egyszerre használó változat</u>

Ez az előzőekhez képest lassabb, de ez a lassuság alig mérhető. Segitségével elvégezhető feladat maximális méreteit a következő két egyenlőtlenség korlátozza:

$$2m + n \leq 310$$

$$3(m+n) + mn \leq 11500$$

d/ <u>Optimális táblát kiiró változat</u>

Ez a program a c/-ben emlitetthez képest csak annyiban különbözik, hogy az optimális megoldáson kivül még az optimális táblát is kiirja.

Az a/-d/-ig felsorolt programok az adatok beolvasásakor adatkontrollálást is végeznek.

e/ <u>Adatbeolvasáskor ellenőrzést nem végző változat</u>

Ez a program képes a Gier számológépen elérhető maximális adat tömeggel dolgozni anélkül, hogy mágnesszalagot használna adatok tárolására. Az e feladattal megoldható maximális méreteket a következő két egyenlőtlenség korlátozza:

$$2m + n \leq 310$$

$$3(m + n) + mn \leq 12500$$

Ehhez a programhoz megjegyezzük, hogy beolvasásnál a beolvasás helyességét nem ellenőrzi. Ezért csak akkor használjuk, ha más lehetőség nincs ilyen nagyméretü feladat megoldására.

Simon István:

Célfüggvényt variáló szimplex módszer

Az első pontban emlitett feladat annyival bővül, hogy nem egy, hanem tetszőleges számu konkrétan adott célfüggvény mellett számolja ki az optimumokat. A program együtt használja a dob és ferritmemóriát. Feltételezi, hogy a célfüggvényeknél mindig azonos tipusu szélsőértéket keresünk, vagy mind maximum, vagy mind minimum. A célfüggvény -1-el való szorzásával a szélsőértékek azonos tipusuakká hozhatók.

A programmal megoldható feladat méretei:

$$2m + n \leqq 310$$

$$mn + 4m + 3n \leqq 11500$$

Simon István:

Célfüggvény szerint parametrizáló szimplex módszer

A program az

$$A\underline{x} \leqq \underline{b}$$

ahol $\underline{x} \geqq 0$

$\underline{b} \geqq 0$

A pedig m x n-es mátrix feltételek mellett optimalizálja a

$$z(\underline{x}) = (\underline{c} + \lambda\, \underline{c}')\, \underline{x} \quad \text{célfüggvényt}$$

ahol $a \leqq \lambda \leqq a_1$

a és a_1 adott határok a λ paraméterre.

A megoldható feladat méreteit a következő két egyenlőtlenség korlátozza:

$$2m + n \leqq 310$$

$$mn + 5(m+n) \leqq 11000$$

Srajber Benedek:

<u>Módositott szimplex módszer</u>

Ez a program a jól ismert kétfázisu "revised" módszert dolgozza fel, az

$$\underline{\underline{A}}\,\underline{x} \leqq b$$

$$\underline{b} \geqq 0$$

$$\underline{x} \geqq 0$$

$$\underline{cx} \longrightarrow \text{opt.}$$

feladatra:

a/ <u>A feladat mátrixát hézagosan tároló változat.</u>

A feladat maximális méreteit a következő két egyenlőtlenség korlátozza:

$$m^2 + 2(m+n) + mn \leqq 7350$$

$$n + 5m \leqq 600$$

b/ <u>A feladat mátrixát tömören tároló változat</u>

Ezt a változatot akkor érdemes használni, ha a feltételi mátrixban igen sok a 0 elem. (pontosabban akkor, ha

$$2n^2 - n > 2e$$

ahol $\underline{e}$ a mátrixban szereplő 0-tól különböző elemek száma.)
Ebben az esetben a feladat méreteit a következő két egyenlőtlenség korlátozza:

$$n + 5m \leqq 600$$

$$m^2 + 2(m+n+e) \leqq 7350$$

Simon István:

Célfüggvényt és kapacitásvektort variáló lineáris programozási program

A program az

$$\underline{\underline{A}}\,\underline{x} \leqq \underline{b}_i$$

$$z_i(\underline{x}) \longrightarrow \text{opt.}$$ feladatot oldja meg, ahol
$\underline{\underline{A}}$ mx n méretü mátrix és $i=1,2,\ldots,k$ (azaz tetszőleges számu kapacitás és célfüggvény vektor variánsok mellett oldja meg az optimalizálási feladatot).

A programmal elvégezhető feladatok méreteit a következő két egyenlőtlenség korlátozza

$$2m + n \leqq 320$$

$$mn + 4m + 3n + km \leqq 10950$$

Simon István:

Kapacitásvektor szerint parametrizáló lineáris programozási program

A program a következő alakban adott feladatot oldja meg:

$$\underline{A}\,\underline{x} \leqq \underline{b} + \lambda\,\underline{b}'$$

$$\underline{c}\,\underline{x} \longrightarrow \text{opt.}$$

ahol A m x n-es mátrix, és λ egy előre adott tetszőleges intervallumban mozogható paraméter. A programmal elvégezhető feladatok méreteit a következő két egyenlőtlenség korlátozza:

$$2m + n \leqq 320$$

$$mn + 4m + 3n \leqq 12000$$

Bakó András:

Egyedi korlátos szimplex algoritmus

A program a következő alakban adott feladatot oldja meg:

$$A\,\underline{x} \leqq \underline{b}$$

$$0 \leqq \underline{x} \leqq \underline{k}$$

$$\underline{c}\,\underline{x} \longrightarrow \text{opt.}$$

ahol A egy m x n-es mátrix, $\underline{k}$ pedig egy n dimenziós korlátozó oszlopvektor. Ezt a programot akkor érdemes használni, ha a lineáris programozási feladatokban a változókra sok egyedi korlát van kiróva. Az algoritmus leirás megtalálható

W.W.Garvin: Introduction to linear programming /Mc Graw-Hill-Book Company, Inc. N.Y. 1960).

A programmal elvégezhető feladat méreteit a következő három egyenlőtlenség korlátozza:

$$mn + 5(m+n) \leq 10500$$

$$4m + n \leq 650$$

$$3m + 2n \leq 650$$

Simon István:

Adatellenőrző programok

A lineáris programok nagy adattömeggel dolgoznak, szükségessé vált az adatok géprevitele előtt egy megnyugtató adatellenőrzési rendszert kidolgozni. E célból minden eddig felsorolt lineáris programhoz tipusának megfelelő adatellenőrző programot készitettünk. Ezek a programok a kézi lyukasztásban előfordulható hibákat küszöbölik ki.

Komáromi Éva:

Maximális sajátérték és a hozzátartozó sajátvektor kiszámitása

A program az Országos Tervhivatal számára, speciális feladatra készült, Gier-algolban. A program központi része egy nemnegativ mátrix maximális sajátértékének és a hozzátartozó sajátvektorának kiszámitására szolgál, iterativ módszerrel számol, a kivánt pontosság előre megadható. A mátrix mérete 9 x 9, de a program nagyon kis változtatásával tetszőleges, de maximum 60 x 60-as mátrix megoldására alkalmas.

Frey Tamás:

Szürők méretezése

A feladat több részprogramból áll. Alapfeladata a magas fokszámu algebrai egyenletek zérushelyeinek 20-25 értékes jegyre pontos megállapitása, és ezek alapján az un. Hurwitz-polinomok ugyanilyen pontosságu előállitása. (Felhasznált módszereket l. "Egyenletek megoldása szakaszonkénti perturbációval", ill. "Hosszuszavas aritmetikai müveletek ELLIOT 803 gépre", "Hosszuszavas program komplex gyöktényezők ELLIOT 803 gépen történő összeszorzására"). Fontos mellékfeladat egy algebrai egyenletben szereplő paraméter minimalizálása azon mellékfeltétel mellett, hogy az egyenlet zérushelyei egy adott egyenlőtlenségi feltételt kielégitsenek.

Varga Gyula:

Hosszuszavas aritmetikai müveletek ELLIOT 803-as gépre.

Az itt ismertetésre kerülő müveletekben résztvevő számok maximális terjedelme 35 értékes számjegy, ebből 10 egész és 25 tizedes jegy.

Számok ábrázolása:

A hosszuszavas számok ábrázolásához 8 egymás utáni rekeszre van szükségünk: az első hét mindegyikében egy-egy legfeljebb 5 jegyü fiktiv egész szám foglal helyet, melyeket a gépben nagyságrendi relációk kapcsolnak össze egész és tizedes tört részekkel rendelkező egyetlen számmá, az utolsó rekeszben elhelyezett +1 vagy -1 pedig a szám előjelét reprezentálja. (Ha a szám 0, az előjel rekesz tartalma +1.) Ha pl. egy számot az A7-A0 rekeszekben tárolunk, a szám egész része az A7 és A6, tizedestört része az A5-A1, az előjelet reprezentáló +1 vagy -1 pedig az A0 rekeszekben foglal helyet, vagyis a hosszuszavas szám értéke:

$$(A0).\left[(A7)10^{5}+(A6)+(A5).10^{-5}+(A4).10^{-10}+(A3).10^{-15}+ + (A2).10^{-20}+(A1).10^{-25}\right],$$

(ahol (AI) jelenti az AI rekeszben tárolt egész számot.)

Az igy részekre osztott szám szalagra lyukasztása az autókod szabályainak megfelelően történik.

Müveletek:

1./ Összeadás: A benne résztvevő számok elhelyezése az A7-A0 és B7-B0 rekeszcsoportokban történik, az eredmény a C7-C0-ban jelenik meg. Behivás az 1)-es ref. számról történik, de előtte Y = 1 irandó.

2./ Kivonás: Kisebbitendő: A7-A0; kivonandó: B7-B0, különbség: C7-C0. Behivás: 1)-es ref. számról, előtte Y = -1 irandó.

3./ Szorzás: Tényezők: A7-A0 és B7-B0, szorzat: C7-C0. Behivás: 10)-es ref. számról.

4./ Reciprokérték képzése: Benne résztvevő szám: U7-U0. Eredmény: C7-C0. Behivás: 19)-es ref. számról.

5./ Négyzetgyökvonás: Benne résztvevő szám: V7-V0. Eredmény: V15-V8. Behivás: 33)-as ref. számról. Ha e két utóbbi müvelet nem hajtható végre, ezt a gép megfelelő szöveg kiadásával jelzi és leáll.

Deklarációk:

Az itt felsorolt müveletekhez az alábbiak deklarálására van szükség:

SETV X(1)

SETS A(11)B(11)V(8) (1)JK(4)U(7)V(15)Y(11)Z(7)

SETF SQRT INT FRAC

SETR 43

Megjegyzések:

A hosszuszavas müveletek végzésére alkalmas szubrutincsoportot programunk elején helyezzük el, s első bemenő adatként közöljük azt a ref. számot, amelyen a program munkáját ténylegesen megkezdi, majd a 27)-es ref. számról inditsuk el a gépet, amely először az Y1-Y11 rekeszekben a 10^{0}-10^{10} mennyiségeket tárolja, majd az általunk megadott ref. számra ugrik.

Varga Gyula:

Hosszuszavas program komplex gyöktényezők Elliott 803-as gépen történő összeszorzására

Az itt ismertetésre kerülő program azt a célt szolgálja, hogy segitségével $z^2-(\alpha_i+j\beta_i)^2$ alaku komplex gyöktényezőket szorozzuk össze, majd képezzük a kapott R polinom és egy előre megadott hasonló tipusu Q polinom különbségeként előálló S polinomot.

A $z^2 - z_i^2$ alaku gyöktényezők összeszorzása fokozatosan egymás után történik a

$$(z^2-z_m^2)\sum_{k=0}^{m-1} a_k^{(m-1)} \cdot z^{2k} = \sum_{k=0}^{m} a_k^{(m)} \cdot z^{2k}$$

egyenlőségből adódó

$$a_k^{(m)} = a_{k-1}^{(m-1)} - a_k^{(m-1)} \cdot z_m^2$$

$$a_0^{(m)} = -a_0^{(m-1)} \cdot z_m^2 \qquad a_0^{(0)} = 1$$

$$\left(\begin{array}{l} 0 < m \leq n \\ 0 < k < m \end{array}\right) \qquad a_1^{(0)} = 0$$

rekurziv formulák alapján, ahol $a_k^{(m)}$ az m db gyöktényező összeszorzása révén keletkező polinomban a 2K-adik hatvány együtthatóját jelenti, n pedig az összeszorzandó gyöktényezők száma.

A számolás a hosszuszavas aritmetikai müveletek segitségével történik 25 tizedes pontosságra.

A program bemenő adatainak lyukasztása az alábbi sorrendben történik:

1./ Az a ref. szám, amelyen a program munkája elkezdődik /19/.

2./ Az összeszorzandó tényezők száma /M2/.

3./ A $z_i = \alpha_i + j\beta_i$ komplex számok, képzetes-valós sorrendben /a hosszuszavas számok lyukasztási szabályai szerint/.

4./ A Q polinom együtthatói csökkenő fokszám szerint, valós-képzetes sorrendben /a hosszuszavas számok lyukasztási szabályai szerint/.

Az eredmények nyomtatási sorrendje a következő:

R polinom maximális fokszámu tagja együtthatójának valós és képzetes része, azután az S polinom maximális fokszámu tagja együtthatójának valós és képzetes része, s.i.t. csökkenő fokszám szerint váltakozva.

A program lefuttatásához az alábbiak deklarálására van szükség:

```
SETS A(11)B(11)C(8)D  (M2+1).16-1  E(31)F(15)H
     (1)JK(4)LM(2)NOY(11)Z(4)
SETR 27
```

Megjegyzés:

A program felhasználása eddig a

$$Q(z^2) = \prod_{k=1}^{m} (z^2 + \varrho_k^2) - j\varepsilon \prod_{k=1}^{m} (z^2 + \gamma_k^2)$$

komplex együtthatós polinom 25 tizedes pontosságra való faktorizálása során történt: a $z_i = \alpha_i + j\beta_i$ komplex számok segitségével előállitottuk a $R(z^2) = \prod_{k=1}^{n} [z^2 - (\alpha_k + j\beta_k)^2]$ polinomot, s a $Q(z^2)$ polinommal való összehasonlitás során nyertünk tájékoztatást a z_i közelitő gyökök pontosságáról.

Ábel Lászlóné:

Termelési függvények számitása

1. Az első modell a

$$V = AK^{\alpha} L^{\beta} - mL$$

alaku termelési függvények számitása az 1957-64 évek adatai alapján.

A program négy változatra készült:

a/ $V = AK_1^{\alpha} L_1^{\beta} - mL_1$

b/ $V = AK_1^{\alpha} L_2^{\beta} - mL_2$

c/ $V = AK_2^{\alpha} L_1^{\beta} - mL_1$

d/ $V = AK_2^{\alpha} L_2^{\beta} - mL_2$

V - nettó termelés

K_1 - termelő állóalapok

K_2 - hasznositott állóalap

L_1 - foglalkoztatottak száma

L_2 - munkáslétszám

A számitást m különböző értékei mellett kell elvégezni, mégpedig az $m = 0,5,10,\ldots,100$ értékeknél.

Minden egyes számitásnál kiirandók:

A, α, β paraméterek, $\hat{\sigma}^2, \sqrt{c_{ii}\hat{\sigma}^2}$ $(i=1,2,3)$

$\hat{V}_i$ a számitott V értékek

és $R^2 = 1 - \dfrac{\sum_i (V_i - \hat{V}_i)^2}{\sum_i (V_i - \bar{V})^2}$ ahol $\bar{V} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} V_i$,

$$\hat{V} = e^{\hat{y}} - mL$$

$$\hat{y} = X\hat{\beta}$$

$$\hat{\beta} = (X'X)^{-1}X'y$$

$$X = \begin{pmatrix} 1 & x_{11} & x_{21} \\ 1 & x_{12} & x_{22} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_{1n} & x_{2n} \end{pmatrix}$$

$$x_1 = \ln K$$

$$x_2 = \ln L$$

$$C = (X'X)^{-1}$$

Amelyik m értéknél R^2 maximális, ott az $(m-4, m+4)$ intervallumban m minden egész értékre elvégzendő a számitás.

2. A második program a

$$V = A K^{\alpha} L^{\beta}$$

alaku termelési függvények számitásával kapcsolatos az 1949-64 évek /1956 kihagyva/ adatai alapján.

Négy változat készült , mint az előbbi modellben.

Kiirandók: $A, \alpha, \beta, \hat{V}_i$ és $R^2, \hat{\sigma}^2, \sqrt{c_{ii}\hat{\sigma}^2}$ $(i=1,2,3)$

3. A harmadik program a

$$V = Ae^{\lambda t} K^{\alpha} L^{1-\alpha}$$

alaku termelési függvények számitását végzi az 1949–64 évek adatai alapján.

Négy változat készült, mint az 1. feladatban.

Kiirandók:

$A, \alpha, \lambda, \hat{V}_i$ és $R^2, \hat{\sigma}^2, \sqrt{c_{ii}\hat{\sigma}^2}$ $(i=1,2,3)$

Számitástechnikailag mindhárom esetet az alábbi lineáris modellre vezettük vissza:

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2$$

(az Y, X_1, X_2 változók esetenként részben eltérők).

A program Gier-algolban készült.

Fehér Györgyné:

Szimmetrikus mátrixok sajátértékeinek és sajátvektorainak meghatározása Jacobi-módszerrel.

A program autokódban készült az Ural-2 gépre két változatban. Az első változat maximum 40 x 40-es szimmetrikus mátrix sajátértékproblémáját képes megoldani, kb. 1 óra 20 perc alatt; a másik változat lényegesen lassabban, maximum 170-ed rendü mátrixban müködik. A pontossági igény előre megadható.

Irodalom:

a/ D.K.Fagyajev, V.N.Fagyajeva: Vücsiszlitelnüje metodü linejnoj algebrü.

b/ Bodewig: Matrix calculus.

Foltényi Vilmos:

Az Ural-2 EFT autókód

Az autókód az ELLIOTT 803B elektronikus számológép A 103-as autokódja alapján készült.

A két autokód lényegesebb eltérései a következők:

Az Ural-2 EFT autokód (EFT = ELLIOTT-FOLTÉNYI-TARNAY) képes - kulcsállástól függően - mint tele, mint telex-kódban lyukasztott szalagok forditására. Az eredmények lyukasztása is a két kódrendszer közül bármelyikben történhet.

Az Ural-2 EFT autokódnál az index értékének a kiszámitásánál az indexben szereplő változó abszolut értékével vesz részt.

Az Ural-2 EFT autokódnál nincsenek meg a VARIFAY és a MODIFAY utasitások megfelelői.

Az ELLIOTT autokódban használt összes filmmel kapcsolatos utasitásoknak az URAL-2 EFT autokódban nincs meg a megfelelőjük. Ezek helyett olyan feltétel nélküli mágnesszalagra, ill. dobra történő iró vagy ezekről olvasó utasitásokat lehet használni, amelyekben megadva a zónaszámot vagy dobcimet (akár egy indexes változó pillanatnyi értékével is), valamint az átirásra kerülő tömb hosszát. Pl. PRUM(I) FROM A(K:L) jelentése: az A(K),A(K+1),...,A(L) változók pillanatnyi értékeit a gép vigye át az I. változó aktuális értékével kezdődő dobcimtől kezdve.

A gépikód programblokkok utasitásai az URAL-2 gépi utasitásaihoz idomultak.

A forditóprogram átadása óta felszinre kerültek bizonyos továbbfejlesztési lehetőségek. A nyelv legszükebb keresztmetszetét jelentő indexeknél, valamint azon, hogy az értékadó utasitásoknál a jobboldalon legfeljebb csak két változó szerepelhet, változtatni akarunk. Ezeken tulmenően az uj forditóprogram nagyobb hatásfokkal nagyobb programok leforditására lesz alkalmas. Az uj forditóprogram elkészitése folyamatban van.

Az URAL-2 EFT autokód részletes leirása megtalálható Foltényi Vilmos-Tarnay Gyula: "Az Ural-2 gép EFT autókódja" c. kiadványban /MTA Számitástechnikai Központ, sajtó alatt./

Gergely József:

Egy statisztikai táblázat számolása.

Folyamatos termelést biztositó legkisebb raktárkészlet meghatározásával kapcsolatban merült fel a következő egyenlet numerikus megoldása:

$$x \cdot \sum_{j=0}^{[n(1-x)]} \binom{n}{j} \left(1-x-\frac{j}{n}\right)^{n-j} \left(x+\frac{j}{n}\right)^{j-1} - \varepsilon = 0 \qquad (1)$$

ahol a [ ] jel az egész rész jelölésére szolgál.

A raktározási probléma matematikai leirása, valamint az (1) egyenlet felállitása és nagy n-ek mellett az egyenlet gyökeinek asszimptotikus közelitése ($x = \frac{M}{CT}$ jelöléssel) megtalálható az [1] és [2] cikkekben.

A 3 -as cikk foglalkozik az (1) egyenlet megoldásával és közli a gyökök táblázatát n=1,2,...,100; ε = 0,1, 0,05, 0,025, 0,01, 0,005 paraméter értékek mellett. Raktározási problémáknál azonban szükség van (1) megoldásra $\varepsilon > 0.1$ esetben is. Ezeket a számolásokat végeztük el az Ural-2-es számológépen.

Jelöljük X_n-el adott n mellett az (1) egyenlet megoldását. A gyökök között fennáll az

$$x_n > x_{n+1} > x_n - (x_{n-1} - x_n)$$

egyenlőtlenség. Ezt figyelembevéve az X_{n+1} közelitő gyököt az őt közrefogó X_n és $X_n - (X_{n-1} - X_n)$ értékből kiindulva

(X_1 és X_2 könnyen kiszámitható) iterációs eljárással kaptuk meg. Minthogy az n növekedésével az $X_{n-1}-X_n$, azaz az iteráció kiindulásául választható, a gyököt tartalmazó intervallum hossza csökken egyszerü lineáris interpelációval három majd két iterációs lépésben hat tizedes pontossággal eljutottunk a gyökökhöz, ezért feleslegesnek látszott magasabb foku közelitést használni.

Az (1) baloldalán az összeadandó tagokat a számolásuknál fellépő nagy nagyságrendi eltérések miatt logaritmus segitségével számoltuk. Az $\ln\binom{n}{j} = \ln n! - \ln j! - \ln (n-j)!$ -ban szereplő faktoriálisok logaritmusait n=25-ig táblázatosan adtuk meg n>25-re pedig a pontositott Stirling formulából nyert

$$\ln n! \sim \left(n+\frac{1}{2}\right)\ln n - n + \frac{1}{12n} + \ln\sqrt{2\pi}$$

képlettel számoltunk, ami n>25 esetben nyolc tizedesre pontos ln n! értéket ad.

A [1] cikkben az (1) egyenlet gyökeinek asszimtotikus közelitésére használt

$$\bar{X}_n \sim \frac{\sqrt{\ln \frac{1}{\varepsilon}}}{\sqrt{2n}} \qquad (2)$$

értékeit $\varepsilon = 0.1$ és n=1,2,...,200 esetekben kiszámoltuk. Összehasonlitás céljából néhány n mellett közöljük az (1) egyenlet gyökeinek a fentiek alapján kiszámolt gyökeit, valamint a (2)-ből nyert asszimtotikus közelitéseit:

n	x_n	$\bar{x}_n$
5	.446980	.4799
10	.322601	.3393
15	.265885	.2770
20	.231555	.2399
25	.207901	.2146
30	.190321	.1959
40	.165471	.1697
50	.148398	.1517
60	.135734	.1385
80	.117873	.1200
100	.105627	.1073

Az (1) egyenlet megoldását ε=0.1, 0.12, 0114, 0.16, 0.18, 0.2 értékek mellett n=1,2,...,100-ra végeztük el hat tizedes pontosságig. A kapott gyökök ε = 0.1 mellett megegyeznek a [3] cikkekben közölt eredményekkel.

Az alábbiakban a kapott gyökök táblázatából közlünk részleteket:

$n \backslash \varepsilon$	0.1	0.1	0.14	0.16	0.18
1	.900000	.880000	.860000	.840000	.820000
2	.683772	.653589	.625834	.600000	.575735
3	.564810	.543363	.523856	.505771	.488885
4	.492652	.472407	.455183	.439787	.425639
5	.446980	.428217	.411359	.395968	.382381
6	.410373	.393588	.387629	.365003	.352393
7	.381475	.365849	.352059	.339591	.328117
8	.358313	.343447	.330417	.318717	.308015
9	.339102	.324978	.312532	.301383	.291229
10	.322601	.309252	.297428	.286759	.277035
12	.295769	.283542	.272769	.263063	.254171
14	.274806	.263424	.253401	.244391	.236160
16	.257783	.247123	.237723	.229265	.221540
18	.243600	.233533	.224665	.216683	.209386
20	.231555	.221986	.213560	.205983	.199059
25	.207901	.199322	.191767	.184972	.178766
30	.190321	.182475	.175567	.169356	.163684
35	.176587	.169313	.162911	.157155	.151899
40	.165471	.158661	.152667	.147279	.142359
45	.156234	.149809	.144154	.139071	.134429
50	.148398	.142299	.136931	.132107	.127701
55	.141640	.135822	.130703	.126101	.121899
60	.135734	.130162	.125258	.120851	.116827
65	.130515	.125159	.120446	.116211	.112344
70	.125857	.120153	.116153	.112070	.108343
75	.121668	.116680	.112290	.108345	.104744
80	.117873	.113042	.108791	.104971	.101483
85	.114415	.109727	.105602	.101895	.098511
90	.111245	.106688	.102679	.099076	.095787
95	.108326	.103890	.099988	.096481	.093279
100	.105627	.101303	.097498	.094080	.090959

Irodalom:

(1) Ziermann M: A Szmirnov-tétel alkalmazása egy raktározási problémára. MTA MKI Közleményei /1963/ VIII. évf. B. sorozat, 4., 509-518.

(2) Prékopa A.: Reliability equation for an invertory problem and its asimptotic solutions. Procedings of the Colloquium on the Applications of Mathematics to Economics, Budapest, 1963. June 18-22. Akadémiai Kiadó, Budapest, 1964.

(3) Miller A.: Table of Percentage Points of Kolmogorov Statistics. Journal of the American Statistical Association 51 /1956/ 111-121.

Koszó Gábor:

Egy minimum keresési feladat

A MTA Elméleti Fizika Kutató Csoportjának megbízásából számolásokat végeztünk egy több paramétert tartalmazó energia kifejezés minimumának meghatározására.

A feladat matematikailag a következőképpen fogalmazható meg: adott különböző paraméterérték mellett keresendő az a

$$C = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} \\ c_{21} & c_{22} & c_{23} \\ c_{31} & c_{32} & c_{33} \end{pmatrix}$$

mátrix, amely eleget tesz a

$$\sum_{i,j=1}^{3} C_{ij}^{2} = 1 \qquad C_{ij} = C_{ji}$$

normálási és szimmetricitási feltételeknek és minimalizálja az

$$E(\eta, c_{ij}) = E_1(\eta, c_{ij}) + E_2(\eta, c_{ij}) + \eta$$

energiakifejezést, ahol $E_1(\eta, c_{ij})$ a C_{ij} mátrixelemek másodfoku $E_2(\eta, c_{ij})$ pedig negyedfoku kifejezései, éspedig:

$$E_1 = \sum_{i=1}^{3} K(ii)(i^2 - i + 1/3) + \eta \sum_{i=1}^{3} \sum_{j=1}^{3} \sum_{k=1}^{3} \sum_{l=1}^{3} c_{ij} C_{kl} [ijkl]$$

$$E_2 = -\eta \sum_{i=1}^{3} \sum_{j=1}^{3} \sum_{k=1}^{3} \sum_{l=1}^{3} K(ij) K(kl) [ijkl] + 2\eta K(13)^2 + h\eta K(12) K(13) + 2\eta K(12)^2 + 2\eta K(23)^2 + 2\eta K(13) K(23)$$

ahol $K(ij) = \sum_{k=1}^{3} C_{ik} C_{jk}$ és a $[ijkl]$ együtthatók táblázatosan adottak.

Az η első értékénél a

$$C^{\circ} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{11}^{\circ} & C_{12}^{\circ} & C_{13}^{\circ} \\ C_{21}^{\circ} & C_{22}^{\circ} & C_{23}^{\circ} \\ C_{31}^{\circ} & C_{32}^{\circ} & C_{33}^{\circ} \end{pmatrix}$$

mátrixból kiindulva a mátrixelemek C_{22}, $C_{23} = C_{32}$, C_{33}, $C_{12} = C_{21}$ $C_{13} = C_{31}$ sorrendben történő változtatásában iterációs uton kerestük az egyes C_{ij} elemek megváltoztatásához tartozó 0-hoz legközelebb eső minimumot. Ezt a C_{ij} elem változtatása esetén a következőképpen végeztük a mátrix többi elemét, változatlanul hagyva kerestük az $E(\eta, c_{ij}) = E(c_{ij}^{(k)})$ mint egyváltozós függvény minimumát. A $c_{ij}^{(k-1)}$-ből kiindulva $\Delta c_{ij}^{(k-1)}$ lépésekkel haladva jobbra vagy balra, mig az $E(c_{ij}^{(k)})$ fogyásból növekedésbe megy át és a legkisebb és azt közrefogó $E[c_{ij}^{(k)}]$ értékből meghatározott parabola minimumpontját fogadjuk el az uj $c_{ij}^{(k)}$ közelitésnek. Ezt mindaddig ismételtük rögzitett, η mellett, mig a $C^{(k)}$ mátrix a $C^{(k-1)}$-hoz viszonyitva adott pontosságnál kevesebbet változik. Minden egyes iterációs lépés után elvégezzük a $\sum_{ij}^{3} c_{ij}^{2} = 1$ normálást, és minden iteráció befejezése után kiszámoltuk az $E(\eta, c_{ij})$ energia értéket is.

A második és minden további η értéknél az előző η mellett kapott eredmény mátrixból kiindulva végeztük el a fenti iterációt.

Az általunk megadott feladat speciális esete egy általánosabb problémának, ahol az energiakifejezésre minimumokat szolgáltató $m \times m$-es C mátrixot kell meghatározni. Ebben az esetben az energiakifejezésben szereplő összegezések m-ig mennek, és a $[ijkl]$ együtthatókat bonyolult összefüggésekből kell számolni.

TARTALOMJEGYZÉK

Ny.2139/1966