

Eyring, Henry 1901. február 20-án Colonia Jaurezben (Mexikó). Egyike volt azoknak, akik a kvantummechanikát és a statisztikus fizikát a kémiában elsőként alkalmazták. Kidolgozta az abszolút reakciósebességek elméletét. Vizsgálta a reakciók kinetikáját és egyensúlyát nagy nyomáson. Lefektette a molekuláris biológia kinetikai alapjait. Elméletet dolgozott ki a folyadékok szerkezetére és az optikai aktivitásra. Polimerekben kötéshosszúságot állapított meg, foglalkozott tömegspektrográfiával, biolumin-eszcenciával, radioaktivitással. 1981-ben halt meg.

Pauling, Linus Carl 1901. február 28-án Portlandban (AEÁ). Már 16 évesen az oregoni egyetem vegyészmérnöki szakán, majd a kaliforniai műszaki egyetemen tanult. A doktori fokozat megszerzése után, 1926-ban európai tanulmányi útja során A. Sommerfeld, N. Bohr, E. Schrödinger mellett dolgozott. 1927-től a kaliforniai egyetemen elméleti kémiát tanított. Bevezette az atomorbitálok hibridizációjának fogalmát, a fémes kötésnek értelmezésére a rezonancia elméletet. Röntgensugarak diffrakciójával vizsgálta a kristályok szerkezetét, atomok és ionok sugarát határozta meg. Bevezette az elektronegativitás fogalmát, amely alapján kidolgozta az irányított vegyérték-elméletet, a kovalens kötések részleges ionos jellegének elméletét. A tudománytörténet a kvantumkémia megalapítójaként tartja számon. *A kémiai kötés elmélete, a molekulák és kristályok szerkezete* című műve a XX. század egyik legjelentősebb kémiai tankönyvévé vált. Molekuláris biológiával is foglalkozott. 1954-ben kémiai, 1962-ben béke-Nobel-díjat kapott. 1994-ben halt meg.

100 éve született

Szőkefalvi-Nagy Zoltán 1916. március 9-én Kolozsváron. Szülővárosában végezte középiskolai tanulmányait. Vegytan-természetrájs tanári diplomát szerzett Szegeden. Kolozsváron tanársegédként, Nagyváradon a hadapród iskolában kémiatanárként dolgozott. A háború után Keszthelyen tanított, majd 1952-től az egri pedagógiai főiskola kémia professzora lett. Jelentős a magyar kémia története feltárásában végzett tevékenysége. *A kémia története Magyarországon* című mű társszerzője Szabadvári Ferencsel (1972). 1980-ban halt meg.

M. E.

Egyenletrendszerek és optimalizálási feladatok megoldása Excelben a Solver segítségével

Az Excel

A Microsoft Excel táblázatkezelő számítógépes program, vagyis amely segítségével egy táblázatban tárolt adatokon műveleteket tudunk végezni. A táblázat *sorokból* és *oszlopokból* áll, egy sor és egy oszlop metszete egy *cellát* határoz meg. A cellában érték vagy kifejezés állhat. Egy cella más celláktól is függhet.

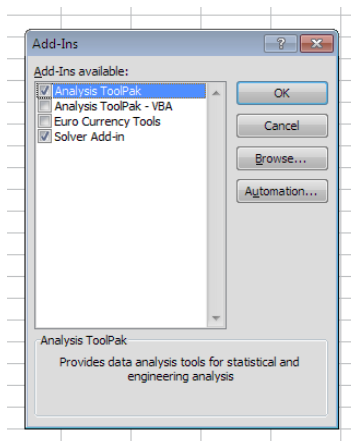
A táblázatban tárolt adatokon komplex műveletek is elvégezhetők. Itt egy olyan eszközt mutatunk be, amelynek segítségével egyenleteket, egyenletrendszereket, optimalizálási feladatokat stb. oldhatunk meg. Ez az eszköz a *Solver*.

A Solver telepítése

Az itt leírtak alapja a Microsoft Excel 2010, más verziókban kisebb vagy nagyobb eltérések lehetnek, azonban lényegében hasonló a gondolatmenet.

Az Excel elindítása után meg kell győződni arról, hogy a Solver bővítmény telepítve van-e. Ehhez a *File* menüből válasszuk ki az *Options* menüpontot, majd a megjelenő dialógusablakban az *Add-Ins* (bővítmények) fület. Itt kell feltelepíteni az *Analysis ToolPak* bővítményt.

A dialógusablak alsó részén, a *Manage* (kezelés) listában, válasszuk ki az Excel *Add-Ins* elemet, majd kattintsuk a *Go* (ugrás) gombra. Ekkor egy új dialógusablak jelenik meg, ebben válasszuk ki az *Analysis ToolPak* és a *Solver Add-in*. Ha a rendszer nem találja a merevlemezen a telepítőt, kéri a CD vagy DVD behelyezését.



Egyenletrendszerek megoldása

*Egyenletrendszer*ről beszélünk akkor, ha van legalább 2 olyan egyenlet, melyeknek külön-külön vett megoldáshalmazuknak metszete megoldásul szolgálhat az egyenletrendszerre nézve.

Az egyenletrendszerek esetében az egyes egyenleteket egymás alá írjuk, majd a bal oldalról egy kapcsos zárójellel látjuk el a rendszert.

Oldjuk meg a következő egyenletrendszert Solver segítségével:

$$\begin{cases} \frac{x}{25} + 2y - 2z = -3 \\ x - 20y + z = 88 \\ 2x - 44y - 3z = 122 \end{cases}$$

Figyelembe véve, hogy $\frac{1}{25} = 0,04$, megnyitunk egy új Excel lapot és bevezetjük az egyenletrendszer együtthatóit, szabad tagjait a következőképpen:

	A	B	C	D	E	F
1	x	y	z	szabad		
2		0.04	2	-2	-3	
3		1	-20	1	88	
4		2	-44	-3	122	
5						
6						
7						

Vezessük fel a három ismeretlent (változót), és adjunk nekik 0-s kezdőértékeket. Ezeket fogja majd a Solver kiszámolni.

	A	B	C	D	E
1	x	y	z	szabad	
2		0.04	2	-2	-3
3		1	-20	1	88
4		2	-44	-3	122
5					
6	x		0		
7	y		0		
8	z		0		
9					

A Solver megkövetel egy *célfüggvényt* is, amelynek itt nincs szerepe csak az optimalizálási feladatoknál, viszont megléte kötelező, így használunk egy egyszerű célfüggvényt, amely nem más, mint a három ismeretlen kezdőértékeinek összege.

	A	B	C	D	E	F
1	x	y	z	szabad		
2		0.04	2	-2	-3	
3		1	-20	1	88	
4		2	-44	-3	122	
5						
6	x	0		célfügg.	0	
7	y	0				
8	z	0				
9						

A következőkben három cella segítségével összekötjük az egyenletrendszer együtthatóit az ismeretlenek (változók) értékeivel, vagyis minden egyenletre beírjuk Excelbe a matematikailag megadott összefüggéseket.

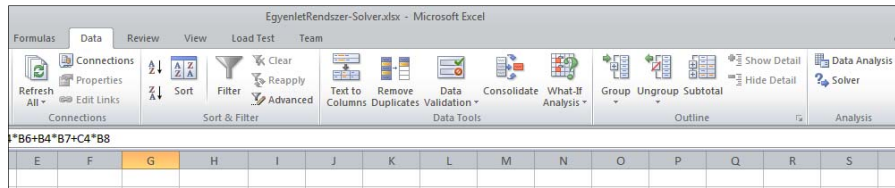
Például az $x - 20y + z = 88$ egyenletre $=A3*B6+B3*B7+C3*B8$ lesz az Excel képlet. Ezt felírjuk mind a három egyenlet alapján.

	A	B	C	D	E	F	G	H
1	x	y	z	szabad				
2		0.04	2	-2	-3			
3		1	-20	1	88			
4		2	-44	-3	122			
5								
6	x	0		célfügg.	0 összefügg.	0		
7	y	0				0		
8	z	0				0		
9								
10								

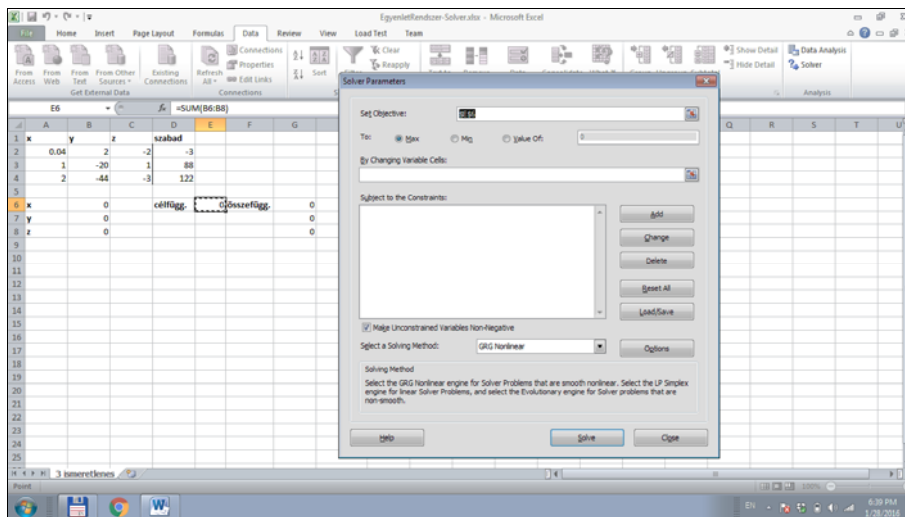
Megjegyzés:

Excelben a $=A3*B6+B3*B7+C3*B8$ képlet felírható a $=SUMPRODUCT(tömb1; [tömb2]; [tömb3]; ...)$ / $=SZORZATOSSZEG(tömb1; [tömb2]; [tömb3]; ...)$ függvény-nyel, amely a paraméterként megadott azonos méretű tömbök megfelelő elemeit szorozza össze, majd kiszámolja a szorzatok összegét. Ebben az esetben viszont az x, y, z ismeretlenek kezdőértékeit is vízszintesen kell írni.

Ha a fentiekkel megvagyunk, elindíthatjuk a telepített Solvert az Excel Data menüpontjának jobb oldalán lévő Analysis palettájáról.



Ha a célfüggvény értékének cellája van kiválasztva, akkor a Solver ezt a cellát már eleve beírja a saját célfüggvény adatmezőjébe (*Set Objective*).

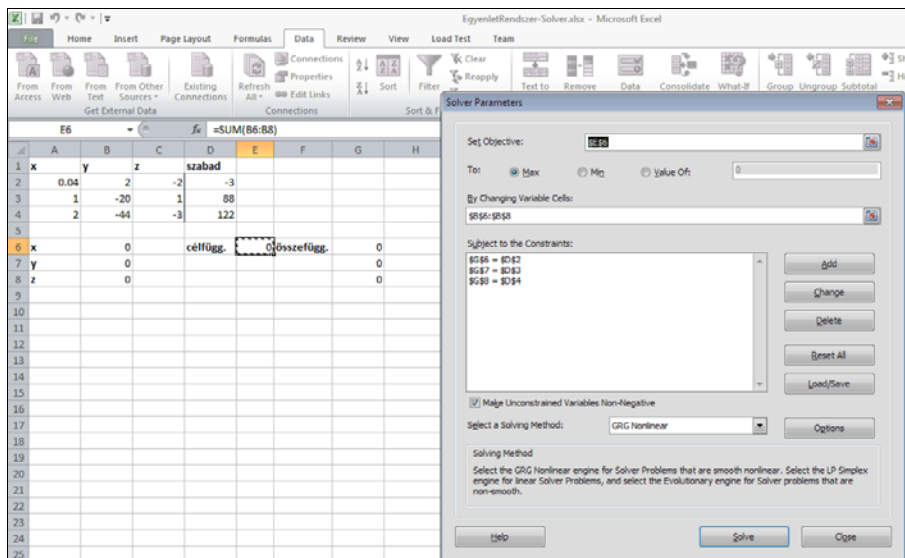


A *Solver To*: Max, Min, Value Of rádiógombokkal beállítható értékeinek itt nincs jelentősége, csak majd az optimalizálási feladatoknál, így maradhat a Max beállítás.

A *Solver By Changing Variable Cells* adatmezőben adjuk meg az ismeretlenek kezdőértékeit tartalmazó cellákat. Ezt megtehetjük egyszerűen úgy, hogy a Solver ezen adatzónájára kattintunk, majd az Excel lapon kiválasztjuk a megfelelő cellákat: $\$B\$6:\$B\8 .

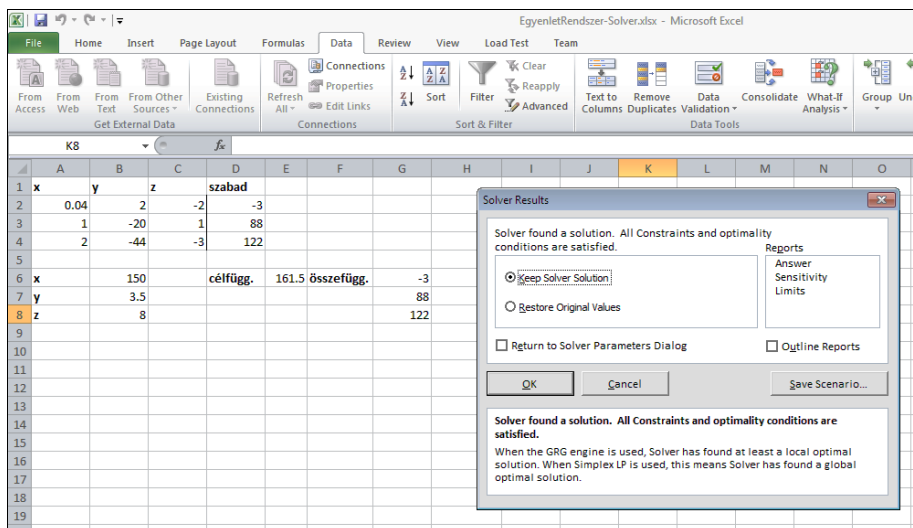
Ezt követi a *Subject to the Constraints* adatmező kitöltése. Ennek segítségével feleltetjük meg az egyenletrendszer összefüggéseit a szabad tagokkal.

Az *Add* gomb segítségével vehetünk fel egy-egy új megfeleltetést.



A *Make Unconstrained Variables Non-Negative* számunkra itt nem érdekes, a *Select a Solving Method* sem annyira, egyenletrendszert mind a három felajánlott módszer meg tud oldani, optimalizálási feladatot már nem annyira.

Nyomjuk meg a *Solve* gombot, és megjelenik az Excel lapon, a megadott cellákban (*By Changing Variable Cells*) az eredmény. A Solver egy dialógusablakban informál, hogy megkapta a megoldást, ugyanitt lehet választani, hogy az Excel lapon maradjon a megoldás, vagy állítsa vissza az eredeti értékeket.



Az egyenletrendszer megoldása tehát: $x = 150$, $y = 3,5$, valamint $z = 8$.

Optimalizálási feladatok megoldása

A Solver lineáris programozást használva optimalizálási feladatokat is meg tud oldani.

A lineáris programozás általános feladata $\mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ lineáris függvény szélsőértékének keresése bizonyos feltételek mellett. A feltételeket lineáris egyenletekkel, vagy egyenlőtlenségekkel adjuk meg, illetve az ismeretlenekre (változókra) nemnegativitási követelmények vonatkoznak.

A lineáris programozás egyik közkezdvelt megoldása a *szimplex módszer*, a Solver is ezt használja.

Vegyünk Kupán Pál *Informatika és statisztika a kertészetben* című könyvéből egy optimalizálási feladatot, majd oldjuk meg ezt Solver segítségével!

A feladat a következő:

Egy gazda 150 ár területen két fajta A és B növényt szeretne termesztetni. Az A növény termesztési költségei 40 euró/ár, míg a B növényé 60 euró/ár. A gazda 7400 euróval rendelkezik. Az A növény megmunkálására 20 óra-munka/ár szükséges, míg a B növény esetében ez 25 óra-munka/ár. A gazda 3300 óra-munkával rendelkezik. Az A növény értékesítéséből a gazda 150, míg a B növényből 200 euró/ár bevételre számít. Milyen arányban ültessen A , illetve B növényt a gazda, hogy a bevétele maximális legyen?

A feladat megoldásához, a szöveg értelmezése alapján állítsuk fel először a matematikai modellt.

Jelöljük x -szel és y -nal az A , illetve a B növény termesztésére szánt területet (mértékegységük az ár). Nyilvánvaló, hogy ekkor a cél függvény, amely szerint optimalizálni kell (meghatározni a maximumát), a következő: $150x + 200y$, hisz a gazda áranként ennyi bevételre számít, s a cél az, hogy a gazda bevétele maximális legyen.

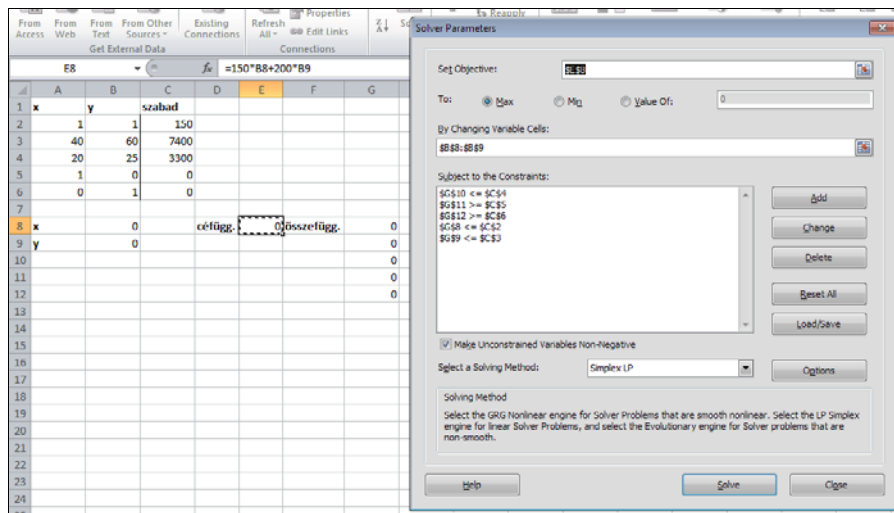
A feladat szövegéből egyenlőtlenség-rendszert írhatunk fel, a feladat matematikai modellje tehát a következő:

$$\begin{aligned} \text{Max Célfüggvény} &= 150x + 200y \\ \begin{cases} x + y = 150 \\ 40x + 60y \leq 7400 \\ 20x + 25y \leq 3300 \\ x \geq 0 \\ y \geq 0 \end{cases} \end{aligned}$$

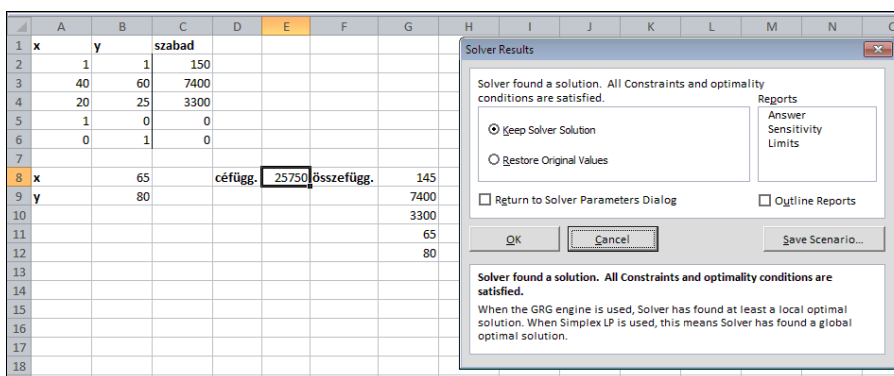
A rendszer első sora, az $x + y = 150$ a feladat szövege alapján egyenletként is felírható, azonban optimalizálási feladatként jobb úgy megfogalmazni, hogy *legtöbb* ennyi terület áll a rendelkezésére, hisz pont a célfüggvény maximalizálása miatt lehet, hogy nem kell beültessen a teljes területét. Írjuk tehát ezt is át egyenlőtlenségre:

$$\begin{cases} x + y \leq 150 \\ 40x + 60y \leq 7400 \\ 20x + 25y \leq 3300 \\ x \geq 0 \\ y \geq 0 \end{cases}$$

Az előbb bemutatott módon vezessük fel Excelbe az adatokat, indítsuk el a Solvert és vezessük fel a korlátozó feltételeket.



A megoldási módot állítsuk be *Simplex LP*-re, majd a megoldáshoz nyomjuk meg a *Solve* gombot!



Láthatjuk, tehát, ahhoz, hogy a gazda bevétele maximális legyen az A növényből 65 árat, a B-ből 80 árat kell beültessen, és ebben az esetben a bevétel 25 750 euró.

Észrevehető az is, hogy a bevétel maximizálása érdekében nem kell felhasználni a teljes területet.

Kovács Lehel István