# I. Bevezetés

A matematika, tárgyát és módszereit tekintve, sajátos tudomány, mely részben a többi tudomány által vizsgált, részben pedig a matematika „belső” fejlődéséből adódóan létrejött (felfedezett ill. feltalált) rendszereket, struktúrákat, azok absztrakt, közösen meglévő tulajdonságait vizsgálja. A numerikus analízis a matematikai - elsősorban, analitikus - problémák közelítő megoldásával foglalkozik. Az egyik legrégebbi matematikai írás az YBC 7289-es számú Babilóniai agyagtábla, amely 60-as számrendszerben jegyezte le a \sqrt{2}numerikus közelítését, ami egy egység négyzet átlójának hossza. A numerikus analízis folytatja ezt a hosszú tradíciót, de nem keres pontos megoldásokat, mert a sokszor lehetetlen ilyeneket adni. A numerikus analízis közelítő megoldásokra törekszik, de úgy, hogy bizonyos elfogadható hibahatáron belül maradjanak.

A szakdolgozatom témáját keresve találkoztam Dr. Furtenbacher Tiborral és Prof. Dr. Császár Attilával az Eötvös Loránd Tudományegyetem Kémia Intézetének munkatársaival, akik a kvantumkémia egy érdekes ágával, az aktív kísérleti rezgési-forgási energiaszintek vizsgálatával foglalkoznak. Az általuk kitalált MARVEL eljárás nagyméretű, ritka mátrixokkal leírható egyenletrendszerek megoldásának közelítését is magában foglalja.

Ennek az eljárásnak a felületes megismerése adta az irányt a szakdolgozatom témájához. A kiválasztás során viszont motivált az is, hogy egy olyan problémát válasszak, mely átlátható, jól megfogható, és később akár a tanári pályán is tovább fejleszthető.

A probléma két részből állt.

Az első, hogy hogyan ábrázoljuk ezeket a ritka mátrixokat, vektorokat, az alapvető műveleteket hogyan optimalizáljuk ezekre a struktúrákra. Sok megoldást találtam erre, végül egy, a témában íródott szakdolgozat alapján elindulva egy sajátos adatstruktúrát választottam.

A másik a módszerek implementálása ezekre az adattípusokra. Itt a jól megfogalmazott struktúrák miatt már könnyebb volt a dolgom, a nehézséget az adatok összehasonlíthatóságának, az eredmények megjeleníthetőségének megtervezése volt.

# II. Felhasználói dokumentáció

A program Windows operációs rendszerre készült JAVA nyelven, így futásához fel kell telepíteni a Java futtató környezetet (JRE). A használatához elengedhetetlen a számítógéphez rendelt billentyűzet és egér. MEMÓRIA!!!!!!!!

Ha a számítógépünk eleget tesz a követelményeknek, a program telepítés nélkül futtatható az Iteracios\_Modszerek.exe fájlt elindítva (duplán kattintva rá, esetleg parancssorból futtatva).

A lineáris egyenletrendszer olyan többváltozós egyenletrendszer, ahol minden ismeretlen változó elsőfokon (azaz első hatványon) szerepel. Egy *m* egyenletből álló és *n* ismeretlent tartalmazó lineáris egyenletrendszer:

a_{11}x_{1}+a_{12}x_{2}+\dots+a_{1n}x_{n}=b_{1}

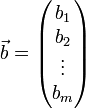
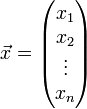
a_{21}x_{1}+a_{22}x_{2}+\dots+a_{2n}x_{n}=b_{2}

\vdots

a_{m1}x_{1}+a_{m2}x_{2}+\dots+a_{mn}x_{n}=b_{m}

Itt az *x*-ek az ismeretlenek, az *a*-k az ismeretlenek együtthatói, és a *b*-k az egyenletek konstansai. A lineáris egyenletrendszert felírhatjuk mátrix és vektorok kombinációjaként, melynek mátrixa egy olyan *m*×*n*-es mátrix, amely a lineáris egyenletrendszer együtthatóit tartalmazza. Az előbbi egyenletrendszer mátrixa:

A=
\begin{bmatrix}
a_{11}&a_{12}&\dots&a_{1n}\\
a_{21}&a_{22}&\dots&a_{2n}\\
\vdots&\vdots&\ddots&\vdots\\
a_{m1}&a_{m2}&\dots&a_{mn}
\end{bmatrix}


Ha bevezetjük a és az jelöléseket, akkor a lineáris egyenletrendszer a következő rövid alakban írható fel:

A\vec{x}=\vec{b}.

Az *A* mátrix és az \vec{x}vektor szorzata formálisan éppen a kívánt egyenleteket adja.

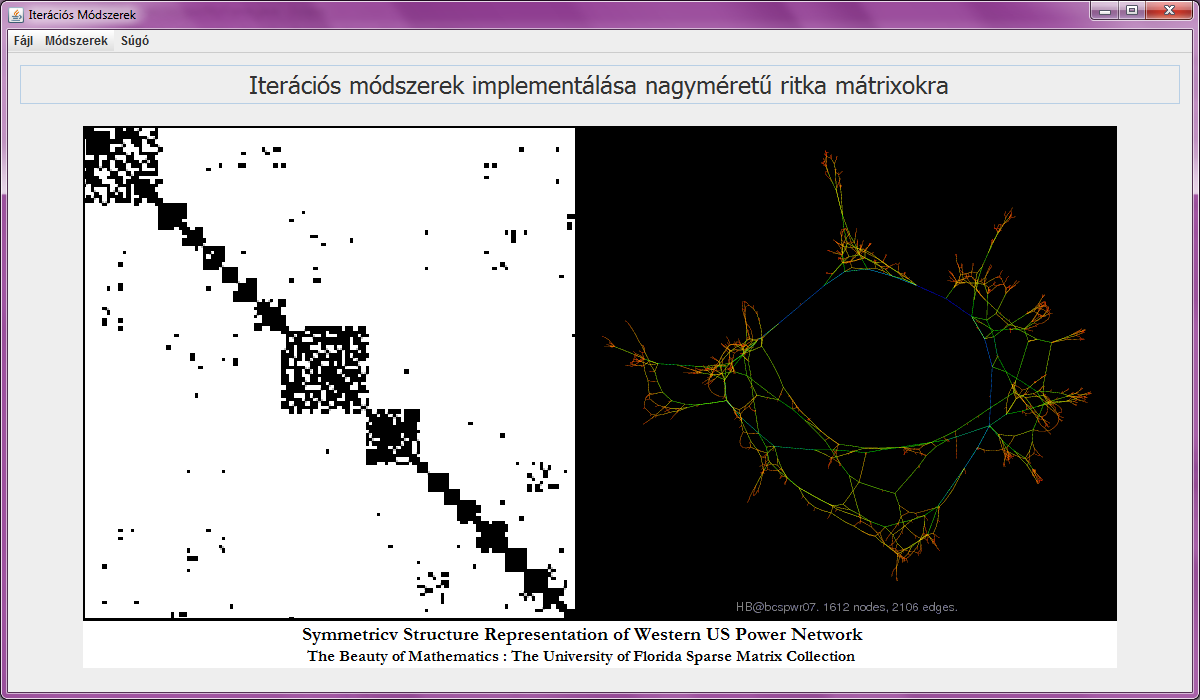
A lineáris és nem lineáris egyenletrendszerek numerikus megoldására vagy azok közelítésére sok algoritmust és módszert dolgoztak ki, és ezeket sokrétűen felhasználják a tudomány szinte minden területén.

A program a felhasználó által magadott mátrix és vektor alapján reprezentálható lineáris egyenletrendszer megoldását keresi iterációs módszerekkel, melyekhez több **x**0 vektorból is kiindulhatunk. Az eredményeket összehasonlíthatjuk a különböző módszereknél, ezekből különböző grafikonokat kérhetünk le.

A program a futása során egy mátrixot, egy b és több x0 kezdővektort képes tárolni, ezekre tudja alkalmazni az iterációs módszereket. Az adatokat megadhatjuk a felületen keresztül, fájlból beolvasva, illetve kérhetünk egy előre definiált tesztadatot, viszont fontos, hogy méretük megegyezzen, azaz ha a mátrix -es, akkor a vektorok is legyenek. Ezeket az adatokat akár kiírhatjuk fájlba is.

Az alkalmazást leginkább olyan felhasználókra terveztem, akik az iterációs módszereket tanulják, és szeretnének egyszerűen, gyorsan eredményeket elérni, esetleg összehasonlítani őket a nagyméretű környezetben, vagy akár egyéb tudományág problémáihoz felhasználni az eredményeket. Érdekes lehet esetleg a tanároknak is, akik ezzel a programmal reprezentálhatják a módszereket.

## A program általános leírása

Az alkalmazás egy főablakból áll, az ablak felső sorában egy menü helyezkedik el. Az elemeire kattintva legördülő menüben jelennek meg a menüpontok. Ez alatt jelenik meg a program megjelenítő felülete, melyen a megnyitáskor egy üdvözlő képernyő köszönt bennünket. Itt jelennek meg később a különböző panelek, melyeket a beolvasáshoz és kiíráshoz használ az alkalmazás.

1. ábra: Üdvözlő képernyő

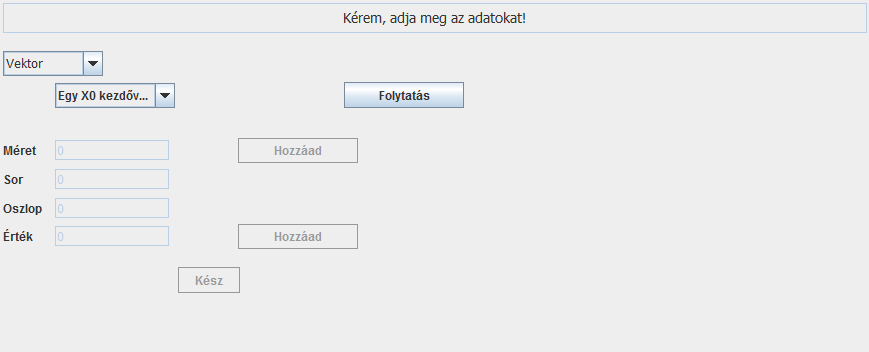
### Fájl menü

A fájl menüben találhatóak az alapvető funkciók, melyek nem kötődnek közvetlenül a módszerekhez. Az első menüpont az “Új folyamat”, ami törli az alkalmazásból az addig betöltött adatokat, és visszatér az üdvözlő képernyőre.

#### Beolvasás

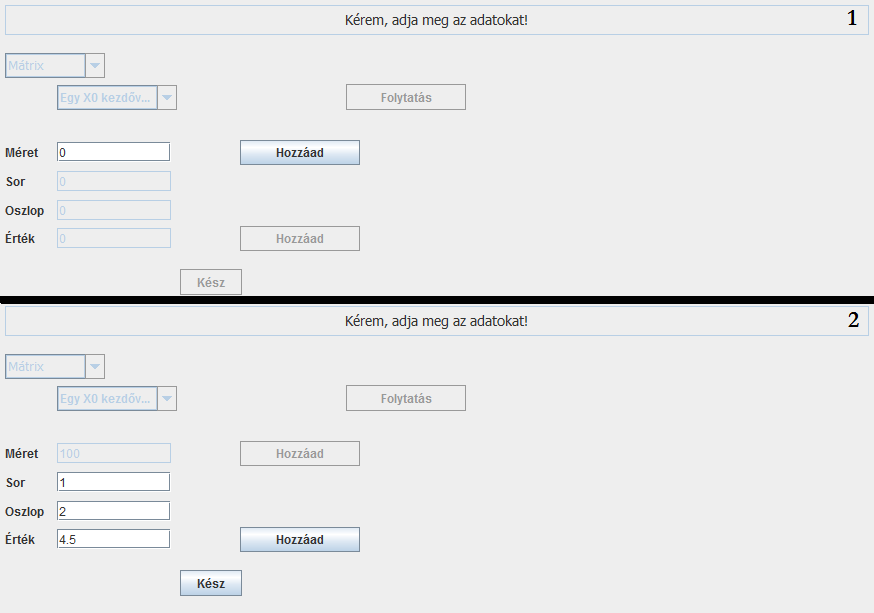
A fájl menü “Beolvasás” pontja alatt három alpontot is találunk, melyek megnyitják a különböző adatbekérő paneleket.

Értékek megadásával

A mátrixot és a vektorokat megadhatjuk a felületen keresztül. Először a legördülő menüből kiválasztjuk, hogy milyen adatot kívánunk megadni. Megadhatjuk a mátrixot vagy a vektorok közül a b jobboldali vektort, vagy az x0 kezdővektorok egyikét. A „Folytatás” gombra kattintva elérhetővé válik a méret megadására szolgáló mező.

2. ábra: Adat megadása a felületen - kezdőállapot

Mátrix megadása

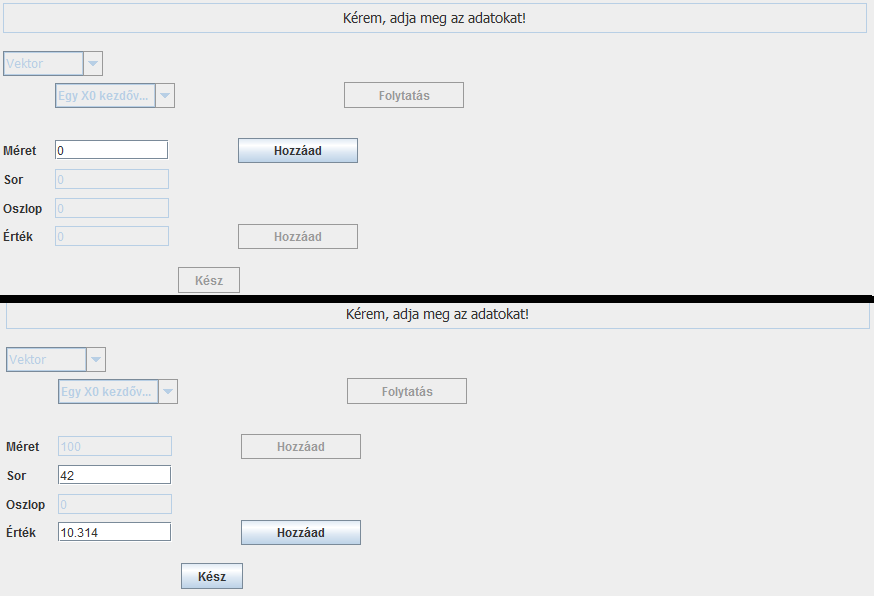
Egy négyzetes mátrixot szeretnénk megadni, a méret mezőbe az értéket írjuk. Ez után a „Hozzáad” gombra kattintva folytathatjuk tovább az értékek megadásával. (3. ábra felső része)

3. ábra: Mátrix megadása felületen keresztül

A sor és az oszlop mezőbe szintén természetes számok adhatóak csak meg, melyek 1 és n között vannak. Az érték mezőbe bármilyen valós számot megadhatunk (csak a 0-tól különböző értékűeket menti a program), az egész és a tizedes számokat ponttal elválasztva. A „Hozzáad” gombra nyomva menthetjük az adott sorhoz és oszlophoz tartozó értéket. (3. ábra alsó része)

Ha már megadtuk az összes nem 0 elemet, a „Kész” gombra nyomva tárolhatjuk el a mátrixot. Ha nem adunk meg egy értéket sem, akkor olyan mátrix kerül tárolásra, melynek minden értéke 0.

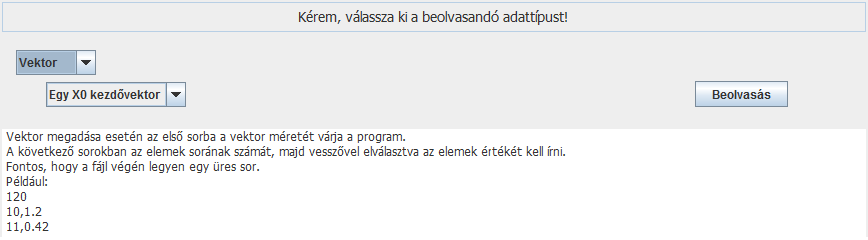
Vektor megadása

Egy vektort szeretnénk megadni, a méret mezőbe az értéket írjuk. Ez után a „Hozzáad” gombra kattintva folytathatjuk tovább az értékek megadásával. (4. ábra felső része)

4. ábra: Vektor megadása felületen keresztül

A sor mezőbe szintén természetes számok adhatóak csak meg, melyek 1 és n között vannak. Az érték mezőbe bármilyen valós számot megadhatunk (csak a 0-tól különböző értékűeket menti a program), az egész és a tizedes számokat ponttal elválasztva. A „Hozzáad” gombra nyomva menthetjük az adott sorhoz tartozó értéket. (4. ábra alsó része)

Ha már megadtuk az összes nem 0 elemet, a „Kész” gombra nyomva tárolhatjuk el a vektort. Ha nem adunk meg egy értéket sem, akkor olyan vektor kerül tárolásra, melynek minden értéke 0.

**Fájlból beolvasással

5. ábra: Adatbekérés fájlból 1

A mátrixot és a vektorokat megadhatjuk úgy, hogy az értékeit fájlból olvassuk be. Először a legördülő menüből kiválasztjuk, hogy milyen adatot kívánunk megadni. Megadhatjuk a mátrixot vagy a vektorok közül a b jobboldali vektort vagy az x0 kezdővektorok egyikét. A „Beolvasás” gombra kattintva megjelenik a fájlkereső ablak, mellyel kiválaszthatjuk az állományaink között a beolvasandó fájlt.

A program által értelmezhető fájl szöveges formátumú (.txt kiterjesztésű), és a felépítése a következő:

* Vektor megadása esetén az első sorba a vektor méretét várja a program. A következő sorokban az elemek sorának számát, majd vesszővel elválasztva az elemek értékét kell írni. Fontos, hogy a fájl végén legyen egy üres sor. Például:

120

10,1.2

11,0.42

…stb

* Mátrix megadása esetén az első sorba a mátrix méretét várja a program. A következő sorokban az elemek sorának, oszlopának számát, majd az elemek értékét kell írni vesszővel elválasztva. Fontos, hogy a fájl végén legyen egy üres sor. Például:

120

10,10,1.2

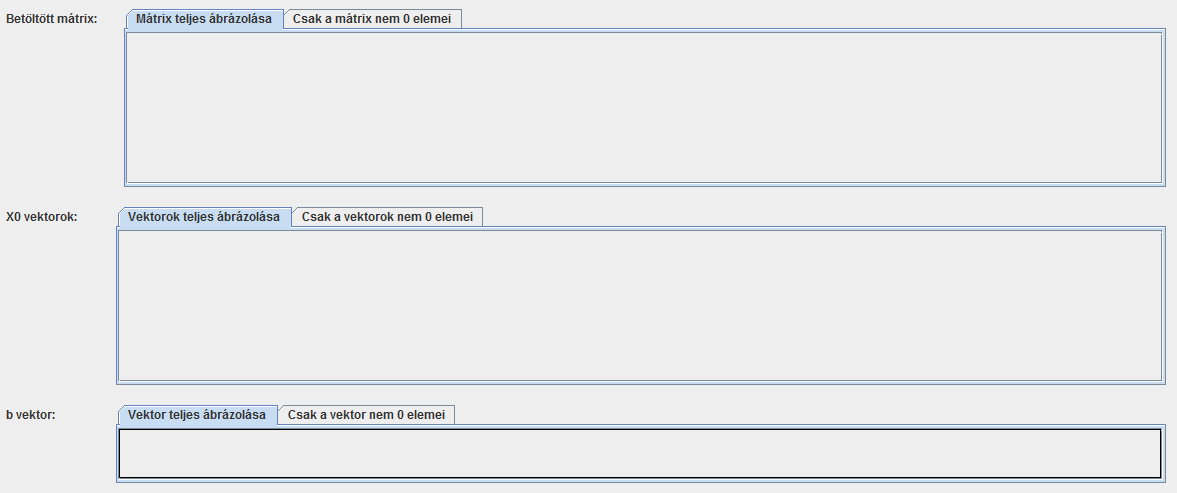
11,11,0.42

…stb

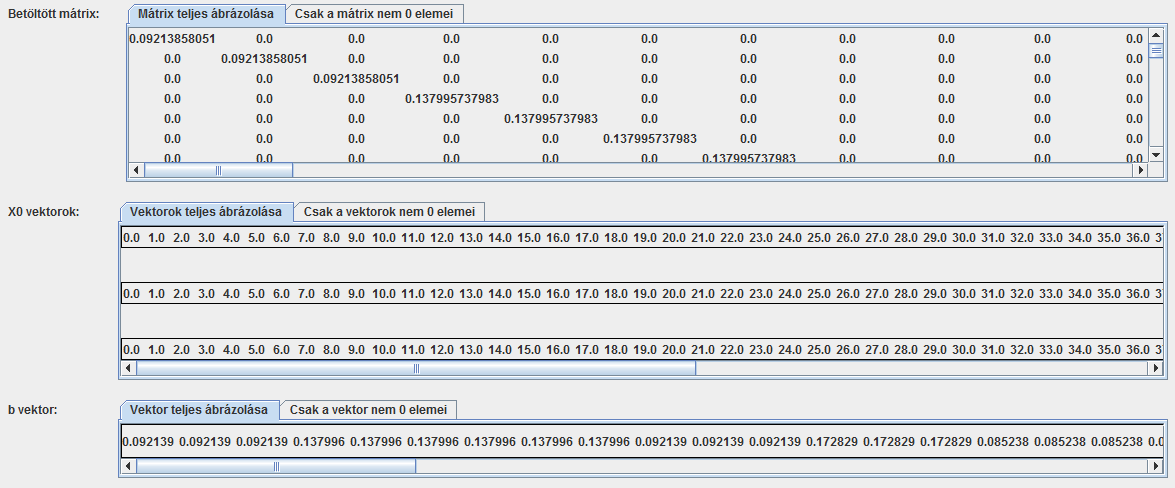
Tesztadat betöltése

Ha nem konkrét problémát szeretnénk megoldani, csak esetleg a program működését megfigyelni, akkor az alkalmazásba betölthető egy előkészített adat együttes. Ekkor nem jelenik meg új képernyő, az program csak egy felugró ablakkal jelzi, hogy a folyamat lezajlott.

#### Aktuális adatok megjelenítése

A betöltött adatokat megtekinthetjük egy kezdetleges megjelenítő panelen. Ha nincs betöltve adat, a panel így néz ki:

6. ábra: adatok nélküli megjelenítőpanel

Ha viszont elérhetőek a vektorok és a mátrix, akkor hasonlóan:

7. ábra: megjelenítőpanel adatokkal

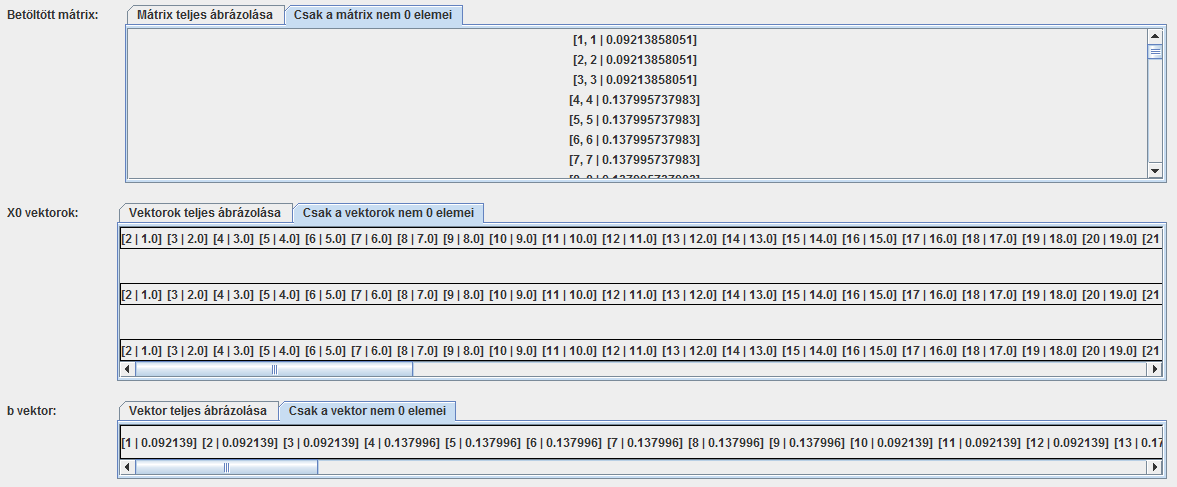
Az felső részen a mátrix, a középsőn a kezdővektorok (soronként, sötét vonallal elválasztva), az alsón a jobboldali vektor értékei jelennek meg egy-egy skrollozható panelen. Minden panel felső részén választhatunk, hogy az összes értéket szeretnénk látni, vagy csak a nem nulla elemeket. A mátrix nem nulla elemei [sorindex, oszlopindex| érték] alakban jelennek meg egymás alatt, pl:

„[1,1|1.2]

[1,5|0.5]

[5,1|0.5] …”

Ezek az értékek sorfolytonosan íródnak ki.

A vektoroknál viszont [index|érték] alakban jelennek meg a nem nulla elemek egymás mellett.

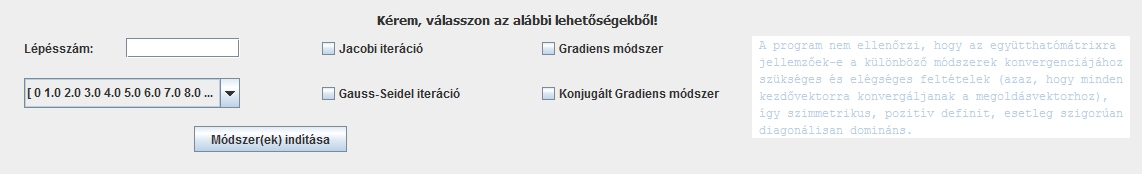
8. ábra: megjelenítőpanel csak a nem nulla elemekkel

A kirajzolás memóriaigénye miatt a program nem engedi a kirajzolást 100x100-as mátrixméret felett.

#### Mentés fájlba

A program képes a memóriában tárolt adatok mentésére szöveges fájlba. A fájl felépítése ugyanolyan lesz, mint amilyet a program bemenetként vár. A megjelenő képernyőn kiválaszthatjuk, hogy mely adatot szeretnénk menteni. Ha az egyik kezdővektort, akkor elérhetővé a kezdővektorokat tartalmazó menü. A „Mentés” gombra kattintva megjelenik a fájlmentő képernyő, amelyben kiválaszthatjuk, hova, milyen néven szeretnénk menteni a fájlt.

### Módszerek

A “**Módszerek kipróbálása**” menüpont rejti a program lényegi részét.

9. ábra: Szűrőpanel

Ha betöltöttünk mátrixot, a kezdő- és jobboldali vektort, és ezek nagysága megegyezik, akkor lehet elkezdeni a folyamatot. A megjelenő képernyőn (szűrőpanel) láthatóak a módszerekre vonatkozó információkat bekérő mezők.

Az első kérdés, hogy hány lépést futtasson a program az adott módszer segítségével. Az alatta lévő lenyíló menüben lehet kiválasztani a betöltött kezdővektorok közül a nekünk kellőt. A képernyő jobb oldalán a módszereket úgy választhatjuk ki, ha nevükre, vagy az előttük lévő jelölőnégyzetre kattintunk. Az összes a megjelölt módszert fogja futtatni a program, és az azokra vonatkozó eredményeket jeleníti meg.

A “Módszer(ek) indítása” gombra kattintva lép működésbe a program, rövid időn belül megjelennek az előző szűrőpanel alatt a módszerek eredményei (eredménypanelek) egy olyan felületen, ami több oldalból áll. Minden megjelölt metódus egy külön oldalon jelenik meg. Az oldalt azonosító „fülön” a módszer neve szerepel, arra kattintva megjelenik az iteráció eredménye.

#### A használt módszerek leírása

Általános leírás a klasszikus iterációkról

A program a használt módszerekből adódóan felteszi, hogy az együtthatómátrix négyzetes, a determinánsa nullától különböző. Ekkor az egyértelmű megoldást jelölje **x**\*. Az iterációs módszerek általában olyan konvergens sorozatokat konstruálnak, melyek határértéke az egyenlet megoldása. Az

iterációt az A \* **x** = **b** egyenletrendszerrel konzisztensnek hívjuk, ha

(Az **x**\* vektor az egyenletrendszer megoldása.)

Tegyük fel, hogy az A együtthatómátrixot előállítottuk A = S – T alakban, ahol S reguláris mátrix. Ekkor a

egyenlőséget S inverzével balról szorozva, majd **x**-et kifejezve

Ezen egyenlőség miatt az

iteráció konzisztens az egyenletrendszerrel.

Az S mátrixot prekondicionálási mátrixnak hívjuk. Ez a mátrix határozza meg, hogy mennyire nehéz vagy könnyű az iteráció végrehajtása. Megválasztását két, egymással ellentétes követelmény határozza meg. Egyrészt könnyen invertálhatónak kell lennie, hiszen az iterációhoz szükség van a mátrix inverzére, másrészt a

egyenlőség miatt jó lenne, ha S "közel lenne A-hoz", hiszen akkor a B mátrix spektrálsugara jóval kisebb lehetne, mint 1, ami gyors konvergenciát eredményezne.

Az implementált módszerek közül a két klasszikus iteráció (Jacobi és Gauss-Seidel) alapjai az előzőekben taglaltak. Mindkét esetben a mátrixot A = D - L - U is írjuk fel, ahol D a diagonális elemek, L a diagonális alatti elemek -1-szereseinek, míg U a diagonális feletti elemek -1-szereseinek mátrixa. Feltesszük, hogy D főátlójának (azaz A főátlójának) egyik eleme sem nulla. Ez mindig elérhető az egyenletek megfelelő átrendezésével.

Jacobi-iteráció

Az S = D és T = U + L választással konstruált

iterációt ( tetszőleges kezdővektor) Jacobi-iterációnak nevezzük. Az iterációt vektorkomponensenként kiírva az

iterációt nyerjük.

Gauss-Seidel-iteráció

Az S = D + L és T = U választású

iterációt (**x**0 tetszőleges kezd®vektor) Gauss-Seidel-iterációnak nevezzük. Hogy lássuk az iteráció Jacobi-iterációval való kapcsolatát, alakítsuk át az iterációs képletet. Szorozzunk először balról a (D-L) mátrixszal, majd adjunk hozzá mindkét oldalhoz -et, és végül szorozzunk D inverzével. A fenti ekvivalens átalakítások után az

iterációt nyerjük. Látható, hogy a Jacobi-iterációhoz kép est csak annyi a különbség, hogy a tag helyett a Gauss-Seidel-iterációban szerepel. Látszólag ez az iteráció nem explicit, hiszen a jobb oldalon is szerep el az vektor, de mivel szigorú (a főátlóban nullák szerepelnek) alsó háromszögmátrix, így mégis egyszerűen meghatározható. Az vektor első elemének meghatározásához nincs szükség az vektorra. A második elem meghatározásához pedig csak a korábban meghatározott első elemre van szükség, stb. Még jobban látszik a kapcsolat a két iteráció között, ha a Gauss-Seidel-iteráció utóbbi alakját komponensenként is kiírjuk:

(i = 1,..., n). Ha összevetjük ezt a Jacobi-iteráció képletével, akkor látható, hogy a Jacobi-iteráció az vektor komponenseinek meghatározásához csak az vektort használja, míg a Gauss-Seidel-módszer az vektor i-edik elemének meghatározásához felhasználja a vektor korábban kiszámolt j = 1,…,i-1 indexű elemeit ( megfelelő elemei helyett)

Általános leírás a variációs módszerekről

A lineáris egyenletrendszerek megoldásának egy másik iterációs megoldási lehetősége szimmetrikus, pozitív definit mátrixokra. Az alap ötlet az, hogy megadunk egy többváltozós függvényt, melynek abszolút minimumhelye az egyenletrendszer megoldása. Ezt a minimumhelyet keressük meg egy megfelelő iterációs eljárással.

Legyen tehát szimmetrikus, pozitív definit mátrix, és tekintsük a

n-változós függvényt. Az összeszorzott mátrixok mérete szerint a jobb oldali kifejezés valóban egy valós számot (egy (1x1) -es mátrixot) rendel minden vektorhoz. Ennek a függvénynek egyetlen abszolút minimumhelye van az halmazon és ez pontosan az A \* **x** = **b** egyenletrendszer megoldása.

Gradiens-módszer

A Gradiens-módszernél egy x pontból, ahol a maradékvektorm az er vektor irányába az pontba lépünk tovább. Innét pedig az itteni

maradékvektor irányában keressük a következő iránymenti minimumot. Az

egyenlőség miatt látható, hogy az iteráció során az egymás utáni keresési irányok merőlegesek egymásra.

A módszer algoritmusa:

Konjugált Gradiens-módszer

Természetesen vetődik fel az a kérdés, hogy a keresési irányok másfajta megválasztásával nem lehetne-e gyorsítani valahogy a konvergenciát. Induljunk ki abból az állításból, hogy az pontbeli keresési irány (a Gradiensvektor (-1)-szerese) merőleges az pontbeli maradékvektorra.

Ebből a képletből látható, hogy az pontból az megoldásba vezető vektor teljesíti a feltételt. Az egyszerűbb megfogalmazás kedvéért vezessük be az alábbi fogalmat.

*Definíció:*

Legyen adva egy szimmetrikus pozitív definit mátrix. Azt mondjuk, hogy az **x** és **y** vektorok *A-konjugáltak (vagy A ortogonálisak),* ha *.*

Vegyük észre, hogy ha A az egységmátrix, akkor az A-ortogonalitás pontosan a hagyományos skaláris szorzatbeli ortogonalitást jelenti.

A defníció segítségével tehát mondhatjuk, hogy a keresési irányt úgy kell egválasztanunk, hogy az legyen A-ortogonális a keresési irányra. Rögtön látjuk, hogy ez lehetséges az megoldás ismerete nélkül is. Keressük

alakban a második keresési irányt. Az A-ortogonalitási feltételt felhasználva ekkor

Továbbá,

Így

Tehát a módszer algoritmusa a következő:

##### Az eredménypaneleken megjelenő adatok

Az első grafikonon látható a tapasztalati kontrakciós együttható, míg a másodikon a reziduumvektor normájának változása. Az ezeken ábrázolt eredmények nem láthatóak mindig pontosan. Ha egy oszlop fölé visszük az egeret, a program megjeleníti a konkrét értéket.

10. ábra: szűrő- és eredménypanel

A diagramon ábrázolt eredményeket kétféle módon is exportálhatjuk. A kirajzolt képet lementhetjük JPEG fájlba (“Kép mentése” gomb), mely 1200X1200 pixel méretű, de az értékek így sem látszanak pontosan. A másik lehetőség, hogy a megjelenített grafikon pontos értékeit egy txt fájlba írjuk (“Adatok mentése” gomb). Az exportált adat formátuma:

“DÁTUM”-n exportált “MÓDSZER NEVE” számolt “EGYÜTTHATÓ/REZIDUUMVEKTOR” változása:

Iterációs lépés száma: “MELYBEN AZ ÉRTÉKET SZÁMOLTUK”; “EGYÜTTHATÓ/REZIDUUMVEKTOR” értéke : “ÉRTÉK”

Iterációs lépés száma: “MELYBEN AZ ÉRTÉKET SZÁMOLTUK”; “EGYÜTTHATÓ/REZIDUUMVEKTOR” értéke : “ÉRTÉK”

Például:

“2014-05-15-n exportált Jacobi iterációval számolt Tapasztalati kontrakciós együttható változása:

Iterációs lépés száma: 3; Együttható értéke: 0.2581495930773764

Iterációs lépés száma: 4; Együttható értéke: 0.26954823316059784 … “

A diagramok mellet található a már ismert vektorpanel, melyen az iteráció eredményét látjuk. Ezt exportálhatjuk egy fájlba az “Az eredményvektor exportálása” gambbal, mely a “Fájl”-> “Mentés fájlba” menüpontban megismert formátumhoz hasonlóan fog kiíródni.

Az ereményvektor alatt látható, hogy a módszer hány lépést használt az előre megadott maximumból. Ez akkor lehet kevesebb, ha a program előbb leállítja az iterációt, mert vagy megtalálta az eredményvektort, vagy biztosan konvergál a megoldáshoz a módszer (q>5).

A panelen lehetőség van még az iteráció folytatására, azaz a szűrőpanelen megadott lépésszámban újra futtatni az adott iterációt az  eredményvektorral, mint kezdővektorral. Ekkor a grafikonokon az új adatok láthatóak, az új xn is látszik, a használt lépések pedig hozzáadódnak az eddigiekhez.

Lehetőség van még az eredményvektor eltárolására az aktuális kezdővektorok között. Ez akkor lehet hasznos, ha egy módszer eredményvektorából szeretnénk indítani egy másik iterációt. Ahogy a program is figyelmeztet rá, ha használni szeretnénk ezt a vektort, újra kell töltenünk a panelt (“Módszerek” menü -> “Módszerek kipróbálása” gombbal).

### Súgó

A „Súgó” menüben egy általános leírást találunk a programról és a benne lévő funkciókról.

# Fejlesztői dokumentáció

### A probléma részletes leírása

**A megvalósított adattípus leírása**