مبانی آنالیز عددی

بهنام هاشمی دانشیار دانشگاه صنعتی شیراز

توجه: این متن مرتبا در حال تغییر بوده و هنوز به صورت نهایی درنیامده. از جمله ارجاع به منابع مورد استفاده hoseynhashemi@gmail.com هنوز به درستی داده نشده است. لطفا هرگونه اشتباه احتمالی را به آدرس ایمیل foseynhashemi@gmail.com ارسال فرمایید.

فصل ۱

خطا در آنالیز عددی

1.1 منابع خطا در محاسبات علمي

بسیاری از رشتههای مهندسی و علوم نیاز به محاسبات علمی دارند. نقطه ی شروع، معمولا یک مدل ریاضی است که شامل تعدادی پارامتر بوده و موقعیت مد نظر را توصیف میکند. بعنوان مثال، فرض کنید یک مهندس عمران قصد داشته باشد میزان فشارهای وارد بر یک پل فلزی را تجزیه و تحلیل کند. در عمل، جمعآوری داده ها از طریق اندازه گیری پارامترهایی که در مدل، معلوم درنظر گرفته می شوند صورت می گیرد. مثلا ممکن است مدل، نیاز به طول تیرآهن ها و کابلها، زوایای بین آنها و خواص مواد تشکیل دهنده ی هر قسمت داشته باشد. در همین مرحله ی ابتدایی، مقداری خطای اندازه گیری به طورت یک تقریب به اضافه یا منهای مقداری عدم اطمینان می باشد.

خود مدلی که انتخاب شده نیز می تواند یک منبع خطا باشد. ممکن است برخی فرضیات ساده کننده، اعمال شوند و یا تعدادی از پارامترهای با اهمیت کمتر نادیده گرفته شوند. مثلا ممکن است فرض شود که مواد بکاررفته در هر تیرآهن همگن هستند در حالی که در اصل چنین نبوده. خطای مدلسازی، نتیجهی تفاوت پل واقعی و مدل قابل محاسبهی مهندس است.

وقتی مدل، غیرخطی باشد یعنی روابط بین پارامترهای موثر به صورت سادهی خطی نباشد، ممکن است الگوریتمی برای محاسبهی جواب ارائه شود که جواب را به صورت حدی همچون

بیان میکند که در آن G(n) مثلا جواب بعد از n تکرار است. معمولا چنین حدی را نمیتوان در عمل محاسبه کرد و ممکن است به تقریبی که بعد از تعدادی متناهی مرحله به دست میآید، رضایت دهیم مثلا تصمیم بگیریم که G(150) تقریبی به اندازه ی کافی خوب برای اهداف ماست. چنین عملی که به ریاضیات مساله مربوط می شود، خطای گسسته سازی یا برشی یا خطای تقریب را معرفی میکند. موقعیتی مشابه، وقتی است که در هنگام محاسبه ی مشتق یک تابع در یک نقطه، بجای اینکه طول گام h را به صفر میل دهیم، به تقریبی که با یک h کوچک به دست می آید رضایت دهیم.

در نهایت، نوعا الگوریتم انتخابشده برای حل مساله در یک کامپیوتر پیادهسازی و اجرا میشود. به طور کلی میتوان دو رویکرد متفاوت از انواع محاسبات را درنظر داشت. یکی محاسبات نمادین است و دیگری محاسبات عددی. محاسبات نمادین به نوعی شبیه است به آنچه یک ریاضی کار محض ایده آلگرا با قلم و کاغذ انجام می دهد: کاش بتوان مساله را به صورت تحلیلی حل کرد! زیبایی این رویکرد در دقت بینهایتش است و زشتیش در سرعت پایین آن!۱ متخصصین علوم کامپیوتر و نظریهی گراف تلاشهای فراوانی کردهاند تا نرمافزارهایی تولید کنند که چنین نوع محاسباتی را اجرا مینماید. قدرتمندترین نرم افزارهای محاسبات نمادین عبارتند از مَتِمَتیکا، میپل و جعبه ابزار محاسبات نمادین مَتلَب ٩. هرچند این نرمافزارها گاها توانایی حیرتانگیزی در حل برخی مسائل داشته و در چنین مواردی بسیار مفید و ارزشمند تلقی میشوند اما مشکل اصلی آنها همان است که قبلا گفتیم: پایین بودن سرعت اجرا در حل بیشتر محاسبات علمی مورد نیاز در زندگی روزمره و یا این که اصولا چنین مسائلی در بسیاری مواقع هیچ جواب تحلیلی به فرم بستهای ندارند که بتوان آن را با محاسبات نمادین به دست آورد. لازم نیست راه درازی برویم تا مسالهای بیابیم که محاسبات نمادین از حل آن عاجز باشد: کافی است یک انتگرال معین کمی پیچیده را بخواهیم، یا فقط پنج مقدار ویژهی یک ماتریس با ده هزار سطر و ستون که اندازهی آنها بزرگتر از ۹۹۹۵ مقدار ویژهی دیگر است، یا حل یک معادلهی دیفرانسیل معمولی غیرخطی یا یک معادلهی دیفرانسیل با مشتقات جزیبی. از آنجا که متمتیکا یک نرمافزار محاسبات نمادین است قاعدتا غیرمنطقی به نظر نمی رسد که آن را برای محاسبهی یک انتگرال نامعین بکار ببریم. در اینجا تلاش کردهایم جواب

$$\int \log(3 + \sin(\cos(x))) dx$$

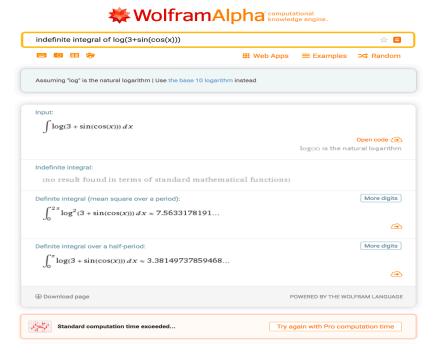
ا کندی سرعت محاسبات نمادین نتیجهی پیچیدگی محاسباتی ترکیبیاتی آن است.

Mathematica ⁷

Maple*

Symbolic Computation Toolbox in MATLAB

را بيابيم.



شکل ۱.۱: تلاشی ناموفق برای محاسبه ی یک انتگرال نامعین با (نسخه ی رایگان) موتور محاسباتی آنلاین متمتیکا در www.wolframalpha.com

در شکل ۱.۱ حداقل سه نکته قابل مشاهده است: یکی شکایت نرمافزار از اینکه اصولا جوابی به فرم استاندارد برای این پرسش وجود ندارد جایی که میگوید:

no result found in terms of \cdots

دیگری این شکایت که زمانی بیش از آنچه انتظار میرفته برای محاسبهی این انتگرال لازم بوده جایی که در پایین شکل میگوید

Standard computation time exceeded...

نکته ی سوم این که خود موتور محاسبات نمادین (بدون آن که از آن خواسته باشیم)، به رویکرد محاسبه محاسبات عددی روی آورده و دو نمونه از انتگرالهای معین را که ((با روشهای عددی محاسبه کرده)) نشان میدهد!

مهندسی و علوم کاربردی به صورتی روزافزون با حل چهار مسالهای که در بالا ذکر کردیم و نظایر آنها درگیر هستند و رویکردی که عموما در عمل استفاده می شود رویکرد دوم است یعنی محاسبات عددی با دقت متناهی ^۵. در این رویکرد از تعدادی مشخص و محدود رقم در ذخیره ی اعداد و اجرای محاسبات نمادین برای محاسبه ی کمیتهای حساس و سپس بکارگیری حاصل در کدهایی که محاسبات عددی را اجرا می کنند نیز استفاده می شود.

محاسبات با آنها بهره می گیریم. نتیجه ی فوریِ این واقعیت، معرفی چهارمین نوع خطا در محاسبات علمی یعنی خطای گرد کردن است. بعنوان مثالی ساده، عددی بنام π به صورتی دقیق در محاسبات با دقت متناهی وجود ندارد! به وضوح اعداد گنگ (که می دانیم بسط اعشاری نامختوم و غیرتکراری دارند) را نمی توان در تعدادی محدود از بیتهای حافظه ی یک کامپیوتر جا داد. داستان خطاهای گرد کردن البته فراتر از این مورد (مشکل نمایش اعداد گنگ) است. هدف ما در این درس آشنایی با مبانی این رویکرد محاسباتی است. محاسبات عددی می توانند بسیار سریع و مفید باشند اما بدون ایراد هم نیستند! در این محاسبات، بجای کار کردن با اعداد حقیقی (یا مختلط) که یک مجموعه ناشمارای نامتناهی را می سازد، با زیرمجموعه ای متناهی و شمارا از آن کار می کنیم (که آنها را اعداد ماشین خواهیم نامید) ۶۰ پس با چهار منبع خطا در محاسبات علمی آشنا شدیم:

- خطای اندازهگیری
- خطای مدلسازی
- خطای گسسته سازی (برشی یا تقریب)
 - خطای گردکردن

دو مورد اول، موضوع این درس نیستند. آنچه در سرتاسر این درس بدان خواهیم پرداخت، خطاهای گسسته سازی و گرد کردن می باشند. در این بین خطای گسسته سازی جنبه ی ریاضی الگوریتمی بیشتری دارد اما خطای گرد کردن نیز که منشأ آن بیشتر کامپیوتری بوده و ناشی از کار با اعداد است را می توان با ابزار ریاضی تجزیه و تحلیل کرد. در اینجا کمی بیشتر در مورد خطای گسسته سازی که تا انتهای درس با آن سر و کار خواهیم داشت بحث می کنیم.

از مهمترین قضایا در سرتاسر ریاضیات، قضیه ی تیلور است که ابتدا یک فرم ساده ی آن را مرور می کنیم. دلیلِ نیاز ما به قضیه ی تیلور در این بخش، استفاده از آن برای توصیف خطای گسسته سازی است اما اهمیت این قضیه در این درس بسیار فراتر است: بعنوان نمونه در فصل بعد در تحلیل خطای گسسته سازیِ درونیابیِ چند جمله ای از قضیه ی تیلور استفاده خواهیم کرد و یا بعدا در ساختن برخی از فرمول های مشتق گیری عددی نیز قضیه ی تیلور را بکار خواهیم برد.

⁹هر سه نرمافزاری که ذکر کردیم را میتوان هم برای اجرای محاسبات نمادین استفاده کرد و هم محاسبات عددی. با این حال متمتیکا و میپل به لحاظ تاریخی با هدف محاسبات نمادین ابداع و توسعه یافتهاند و متلب با هدف محاسبات عددی. متمتیکا و میپل به خاطر قدرتشان در محاسبات نمادین شناخته میشوند و متلب بخاطر تواناییاش در محاسبات عددی بخصوص از نوع محاسبات ماتریسی.

 $x_0 \in [a,b]$ ورض کنید f(x) دارای مشتق تا مرتبه ی $x_0 + 1$ بر بازه ی $x_0 \in [a,b]$ بوده و و قضیه $x_0 \in [a,b]$ بین $x_0 \in x_0$ بین $x_0 \in x_0$ و $x_0 \in x_0$ بین $x_0 \in x_0$

$$f(x) = p_n(x) + R_n(x),$$

که در آن

$$p_n(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \frac{f''(x_0)}{2!}(x - x_0)^2 + \ldots + \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!}(x - x_0)^n,$$

و

$$R_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\zeta)}{(n+1)!} (x - x_0)^{n+1}.$$

وری و $p_n(x)$ چندجملهای تیلور درجه n تابع f در مجاورت نقطه ی $p_n(x)$ و $p_n(x)$ باقیمانده ی متناظر با چندجملهای $p_n(x)$ نامیده می شود. برای دسته ی بزرگی از توابع مهم هم چون توابع تام (که بینهایت با مشتق پذیر هستند) $p_n(x)$ را می توان به دلخواه بزرگ گرفت. یعنی وضعیتی بیش از شرایط ذکر شده در نقطه ی نسخه ی بالا از قضیه ی تیلور برقرار است و یک سری بینهایت جملهای برای بسط تابع $p_n(x)$ در نقطه ی حول $p_n(x)$ موجود است:

$$f(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{f^{(k)}(x_0)}{k!} (x - x_0)^k = \underbrace{\sum_{k=0}^{n} \frac{f^{(k)}(x_0)}{k!} (x - x_0)^k}_{p_n(x)} + \underbrace{\sum_{k=n+1}^{\infty} \frac{f^{(k)}(x_0)}{k!} (x - x_0)^k}_{R_n(x)}$$

از آنجا که در $p_n(x)$ تنها n+1 جملهی ابتدایی این سریِ نامتناهی را نگاه داشته ایم، مناسب است که باقیمانده ی $p_n(x)$ را بعنوان خطای گسسته سازی یا برشی متناظر با $p_n(x)$ نیز در نظر بگیریم: از درس ریاضی ۱ می دانیم که وقتی $x_0=0$ سری مک لورن بعنوان حالت خاصی از سری تیلور حاصل می شود:

$$f(x) = f(0) + f'(0)x + \frac{f''(0)}{2!}x^2 + \dots + \frac{f^{(n)}(0)}{n!}x^n + \dots$$

بعنوان مثال، در ریاضی ۱ دیدیم که سری مکلورنِ تابع نمایی $f(x) = \exp(x)$ عبارت است از

$$\exp(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^k}{k!} = \underbrace{1 + x + \frac{x^2}{2!} \dots + \frac{x^n}{n!}}_{p_n(x)} + \underbrace{\frac{x^{n+1}}{(n+1)!} + \frac{x^{n+2}}{(n+2)!} + \dots}_{R_n(x)}$$
 (1.1)

و یکی از نکات معجزه آسای قضیه ی تیلور این است که بینهایت جمله ی موجود در باقیمانده را می توان به شکلی بسیار ساده در تنها یک جمله چپاند! در مورد تابع نمایی بالا، قضیه ی تیلور، وجود نقطه ای چون χ بین صفر و (نقطه ی انتخاب شده ی χ را تضمین می کرد به طوری که:

$$R_n(x) = \frac{e^{\zeta}}{(n+1)!} x^{n+1}.$$

هثال ۱. به کمک قضیهی تیلور، تقریبی برای \sqrt{e} و کران بالایی برای خطای گسسته سازی ِ تقریب ِ خود به دست آورید.

چون $x_0=0$ پس قرار می دهیم $x=\frac{1}{2}$ همچنین می توان با انتخاب $x_0=0$ از سری می خون $x_0=0$ بستفاده کرد. حال فرض کنید در فرمول می استفاده کرد. حال فرض کنید در فرمول می تقریب مقدار تابع نمایی در نقطه x استفاده کرده $x_0=0$ بس با چهارجمله ای ابتدایی، چندجمله ای تیلور درجه سه را استفاده کرده و داریم:

$$\sqrt{e} = p_3(1/2) + DE$$

که در آن

$$p_3(1/2) = 1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{8} + \frac{1}{48} = \frac{79}{48}$$

تقریبی است که برای \sqrt{e} در نظر گرفته ایم و DE خطای گسسته سازی یعنی اختلاف بین مقدار دقیق \sqrt{e} و تقریب $\frac{79}{48}$ است که طبق قضیه ی تیلور برابر است با

$$DE = \frac{e^{\zeta}}{4!}(1/2)^4 = \frac{e^{\zeta}}{24 \times 16} = \frac{e^{\zeta}}{384},$$

 $e^{\zeta} < e^{1/2} < e^1 < 3$ بین صفر و $\frac{1}{2}$ است. چون تابع نمایی، صعودی است داریم ζ بین صفر و در نتیجه کران بالایی برای خطای گسسته سازی عبارت است از

$$DE < \frac{3}{384} \approx 0.78 \times 10^{-2}.$$

در این مثال، مساله ی یافتن مقدار \sqrt{e} را داشتیم، الگوریتمی که برای حل مساله بکار گرفتیم، استفاده از چندجملهای تیلور درجه سه تابع نمایی بود و خطای گسسته سازی، از جایگزین کردن یک سری بینهایت جملهای با یک چندجملهای درجه سه ناشی شد. در این مثال تا وقتی تقریب $\frac{79}{48}$ را به همین صورت کسری نگه داشته و با تقریبی همچون 1.64583 جایگزین نکنیم، خطای گرد کردنی رخ نداده

است. میتوان نشان داد که چند رقم ابتدایی \sqrt{e} در اصل عبارتند از 1.648721270700128. پس میبینیم که سه رقم ابتدایی 1.64 از تقریب ما درست بوده و میتوان دید که خطای گسسته سازی درواقع تقریبا برابر است با 2.9×10^{-3} که طبیعتا از کران بالایی که بدست آوردیم کمتر است.