

حل دستگاه معادلات خطی به کمک بهینه سازی

اسماعیل بابلیان : دانشگاه تربیت معلم

چکیده

در ریاضیات کاربردی، به ویژه تعیین جواب تقریبی برای معادلات انتگرال و معادلات دیفرانسیل معمولی و پارامتری، به مسائلی برخورد می‌کنیم که گرچه از نظر تئوری دارای جواب یکتا هستند ولی در عمل، با گسسته‌سازی آنها، جوابهای عددی زیادی برای مسأله به دست می‌آید. در چنین مواردی باید به طریقی از بین جوابهای تقریبی آن را که به جواب واقعی نزدیکتر است انتخاب کرد. مسائل بد وضع دارای ویژگی فوق هستند. متأسفانه مدل ریاضی برخی از مسائل کاربردی بد وضع است، به این معنا که با تغییری جزئی در داده‌های مسأله تغییر فاحشی در جواب واقعی مسأله ملاحظه می‌شود و این خصوصیت تعیین جواب تقریبی مسأله را دشوار می‌کند. پس از گسسته‌سازی این نوع مسائل تقریباً تمامی آنها منجر به حل یک دستگاه معادلات خطی می‌شوند که ماتریس ضرایب آنها بد وضع است (عدد حالت ماتریس ضرایب بزرگ است). حل این دستگاه معادلات به روشهای عددی معمول جوابهای دور از واقع به دست می‌دهد و حتی اجرای این روشها روی دو کامپیوتر با سخت افزار متفاوت جوابهایی با اختلاف زیاد به دست می‌دهند! در صورتی که کرانهایی از جواب دستگاه درست باشد می‌توان جواب تقریبی مورد نظر را با استفاده از حل یک مسأله بهینه سازی به دست آورد. مثلاً در حل دستگاه n معادله n مجهول زیر

$$AX = B$$

اگر بدانیم که

$$|x_i| \leq \delta_i, \quad i = 1, \dots, n.$$

و δ_i ها اعداد مثبت معلوم باشند، می‌توان مسأله خوش‌وضع زیر را حل کرد [۲] یا [۳]:

$$\text{Minimize} \quad \|AX - B\|$$

$$\text{Subject to:} \quad |x_i| \leq \delta_i, \quad i = 1, \dots, n.$$

مقدمه

تا قرن هفدهم اکثر دانشمندان معتقد بودند که مسائل عملی خوش‌وضع هستند. تا اینکه مسائل کاربردی متعددی معرفی شدند که خوش‌وضع نبودند. اولین بار هادامارد (Hadamard) یک مسأله خوش‌وضع را تعریف کرد. مسأله‌ای خوش‌وضع است که دارای سه شرط زیر باشد:

I. جواب داشته باشد؛

II. جواب یکتا داشته باشد؛

III. جواب مسأله به طور پیوسته به داده‌های آن بستگی داشته باشد.

برای مسائل بسیاری بررسی شرطهای (I) و (II) به سادگی صورت می‌گیرد ولی شرط (III) اساسی است. اگر شرط (III) برقرار نباشد، در عمل وقتی می‌خواهیم روشهای عددی موجود برای حل یک مسأله را به کار ببریم با مشکل مواجه می‌شویم. اگر جواب مسأله‌ای به طور پیوسته به داده‌های آن بستگی نداشته باشد تغییری جزئی در داده‌ها، مثلاً خطای ناشی از ذخیره سازی داده‌ها در حافظه کامپیوتر، سبب تغییری فاحش در جواب تقریبی مسأله می‌شود، و این بدان معناست که جوابهای عددی به دست آمده قابل اطمینان نیستند و بعضاً بسیار دور از جواب واقعی هستند.

نمونه‌هایی از مسائل بد وضع

الف) معادله انتگرال نوع اول زیر را که در اسپکتروسکوپی، فتومتری و ... با آن مواجه می‌شویم، در نظر

$$\int_0^{\pi} k(x,y)f(y)dy = g(x) \quad (1) \quad \text{بگیرید.}$$

که در آن تابع g و هسته k معلوم و تابع f مجهول است.

I. اگر $k(x,y) = \sin x \cos y$ آنگاه

$$\int_0^{\pi} \sin x \cos y f(y)dy = \left(\int_0^{\pi} \cos y f(y)dy \right) \sin x = g(x) \quad (2)$$

اگر معادله (1) جواب داشته باشد، بنا بر (2)، تابع g باید ضربی از تابع $\sin x$ باشد. به عبارت دیگر، اگر

$g(x) = e^x$ ، معادله (1) جواب ندارد.

II. اگر معادله (1) جواب داشته باشد و قرار دهیم

$$f_n^*(y) = f(y) + 4n \sin y, \quad (n \in \mathbb{N}) \quad (3)$$

$$\int_0^{\pi} \sin x \cos y f_n^*(y)dy = \int_0^{\pi} \sin x \cos y f(y)dy + 4n \int_0^{\pi} \sin x \cos y dy$$

$$= g(x) + 2n \sin x \int_0^{\pi} \sin 2y dy$$

$$= g(x) + n \sin x [-\cos 2y]_0^{\pi} = g(x). \quad (4)$$

بنابراین، معادله (1)، اگر جواب داشته باشد، بینهایت جواب دارد. ملاحظه کنید که ممکن است جواب واقعی

$f(y)$ تابعی کراندار باشد ولی مسلماً $f^*(y)$ کراندار نیست.

III. می‌دانیم که اگر $k(x,y)$ تابعی L^2 باشد و $m \in \mathbb{N}$ آنگاه

$$\int_0^{\pi} K(x,y) \sin my dy \xrightarrow{m \rightarrow \infty} 0 \quad (5)$$

لذا، اگر (۱) جواب داشته باشد و قرار دهیم

$$F^*(y) = F(y) + C \sin my \quad (m \in \mathbb{N}) \quad (۶)$$

که در آن C عدد ثابتی مخالف صفر و دلخواه است، آنگاه

$$\int_0^\pi k(x, y) F^*(y) dy = \int_0^\pi k(x, y) f(y) dy + C \int_0^\pi k(x, y) \sin my dy \xrightarrow{m \rightarrow \infty} g(x) \quad (۷)$$

بنابراین، اگر به جای $g(x)$ تابع

$$g(x) + C \int_0^\pi k(x, y) \sin my dy \quad (۸)$$

را قرار دهیم، که به صورت $g(x) + \varepsilon(x)$ است، جواب معادله (۱) از $F(x)$ به $F^*(x)$ تغییر پیدا می‌کند. $\varepsilon(x)$ را با انتخاب m بزرگ می‌توان به دلخواه کوچک کرد ولی $F^*(x) - F(x)$ با انتخاب C بزرگ می‌تواند بسیار قابل توجه باشد. این ویژگی بیانگر عدم پیوستگی جواب (۱) به داده‌های مسئله است.

در عمل بیشتر (III) باعث مشکل می‌شود، زیرا اکثر مسائلی که ما به دنبال جواب تقریبی آنها هستیم دارای جواب یکتا هستند. بعداً روشی برای رفع این مشکل ارائه خواهیم کرد.

(ب) مسأله بعدی تعیین یک یا چند ریشه از معادله چند جمله‌ای زیر است:

$$P(z) = z^n + a_1 z^{n-1} + a_2 z^{n-2} + \dots + a_k z^{n-k} + \dots + a_n = 0 \quad (۹)$$

نشان می‌دهیم که با تغییری جزئی در یکی از ضرایب مقدار بعضی از ریشه‌ها ممکن است تغییر فاحش

داشته باشند. واضح است که هر جواب z از معادله (۹) بستگی به ضرایب a_k دارد. لذا،

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial P}{\partial a_k} \right) &= n z^{n-1} \times \frac{\partial z}{\partial a_k} + \dots + a_k (n-k) z^{n-k-1} \frac{\partial z}{\partial a_k} + z^{n-k} + \dots \\ &= P'(z) \frac{\partial z}{\partial a_k} + z^{n-k} \end{aligned} \quad (۱۰)$$

اگر r ریشه ساده‌ای از معادله (۹) باشد و قرار دهیم $0 = \left(\frac{\partial P}{\partial a_k} \right)_{z=r}$ آنگاه

$$\frac{e(r)}{e(a_k)} \approx \left(\frac{\partial z}{\partial a_k} \right)_{z=r} = - \frac{r^{n-k}}{P'(r)}, \quad (۱۱)$$

که از آن نتیجه می‌شود:

$$\frac{e(r)}{r} \left[\frac{a_k \times r^{n-k-1}}{P'(r)} \right] \frac{e(a_k)}{a_k} \quad (۱۲)$$

یعنی،

$$\delta(r) \approx A_k \delta(a_k), \quad (۱۳)$$

که در آن $\delta(x)$ به معنی خطای نسبی x است و

$$A_k = -\frac{a_k \times r^{n-k-1}}{P'(r)}.$$

سوالی که در اینجا مطرح می‌شود این است که $\delta(a_k)$ کی کوچک، $\delta(r)$ کوچک را نتیجه می‌دهد؟ یعنی با تغییری جزئی در یکی از ضرایب، مثلاً a_k ، تغییری جزئی در ریشه $z = r$ ایجاد می‌شود؟ پاسخ این است که بستگی به مقدار A_k دارد. A_k وقتی بزرگ است که r بزرگ باشد و $P'(r)$ کوچک، یعنی r نزدیک به ریشه‌ای از $P'(z) = 0$ باشد. مثال معروف زیر از ویلکسون (Wilkinson) است:

$$x^{20} + 210x^{19} + \dots + 20! = 0 \quad \text{یا} \quad (x+1)(x+2)\dots(x+20) = 0$$

اگر قرار دهیم $k = 1$ و $e(a_1) = 2^{-23}$ ، یعنی به جای 210 قرار دهیم $210/0.0000001192$ ریشه‌های -1 ، -2 تا -18 کمی تغییر می‌کنند ولی ریشه‌های -14 و -15 به $14 \pm 2/5j$ تغییر می‌کنند! برای ریشه $r = -16$ داریم:

$$A_1 = \frac{210 \times 16^{18}}{15! 4!} \approx 3/2 \times 10^{10} \quad (15)$$

برای تعیین این ریشه، با دقت معمولی، باید 10 رقم محافظ در نظر بگیریم، یعنی اگر دقت مضاعف به کار بریم جواب با دقت 10^{-7} به دست می‌آید.

ج (حل دستگاه معادلات خطی گاهی اوقات مسأله بدوضع است. اگر جواب واقعی معادله

$$Ax = b, \quad (\det(A) \neq 0) \quad (16)$$

x_t و جواب محاسبه شده آن x_c باشد داریم:

$$Ax_c = b + r \quad (17)$$

که r بردارمانده (Residual) است. در این صورت

$$r = A(x_c - x_t) \Rightarrow x_c - x_t = A^{-1}r \quad (18)$$

آیا کوچک بودن درایه‌های r کوچک بودن درایه‌های بردار $x_c - x_t$ را نتیجه می‌دهد؟ پاسخ، از معادله آخر (18)، این است که به درایه‌های A^{-1} بستگی دارد. لذا، اگر درایه‌های A^{-1} بزرگ باشند ممکن است $x_c - x_t$ دارای درایه‌های بزرگ باشد و به عبارت دیگر، x_c خطای فاحش داشته باشد. دستگاههایی با چنین ماتریس ضرایب را دستگاههای بدوضع و ماتریس ضرایب آن را، ماتریس بدوضع نامند. در واقع حل معادلات انتگرال بدوضع نیز منجر به حل دستگاههای بدوضع می‌شود.

ماتریس بدوضع زیرمنسوب به «هیلبرت» است $(H_n = (h_{ij}), h_{ij} = \frac{1}{(i+j-1)})$:

$$H_n = \begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & \dots & \frac{1}{n} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & \frac{1}{4} & \dots & \frac{1}{n+1} \\ \vdots & \frac{1}{3} & \frac{1}{4} & \dots & \frac{1}{n+1} \\ \frac{1}{n} & \frac{1}{n+1} & \frac{1}{n+2} & \dots & \frac{1}{2n-1} \end{pmatrix}$$

در [1] نشان داده شده است که H_n^{-1} درایه‌هایی به بزرگی $10^3 \times 3/3$ دارد. اگر b را چنان اختیار کنیم که $x_t = (1, 1, \dots, 1)^t$ و بعد دستگاه را حل کنیم جواب زیر به دست می‌آید:

$$x_c = (1, 1, 1, 1/0.0000001, 0.99999998, 1/0.0000002, 0.99999999, 1)^t$$

بعداً نشان می‌دهیم که چگونه می‌توان جواب دقیق این دستگاه را به دست آورد. اگر $H_n x = b$ را برای $n > 10$ حل کنید حتی نرم افزار مهمی چون MATLAB نیز جواب دقیق نمی‌دهد. بعداً در مورد این نوع دستگاهها و چگونگی حل آنها بحث خواهیم کرد.

(د) مسأله تعیین مقادیر ویژه یک ماتریس نیز می‌تواند بدوضع باشد. ماتریسهای زیر را در نظر بگیرید:

$$A_n = \begin{pmatrix} \epsilon & \dots & \dots & \dots \\ 1 & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \dots & \dots & \dots & 1 \end{pmatrix} \quad A_n(\epsilon) = \begin{pmatrix} \epsilon & \dots & \dots & \epsilon \\ 1 & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \dots & \dots & \dots & 1 \end{pmatrix} \quad (20)$$

در واقع درایه $(1, n)$ از A_n را به اندازه $\epsilon > 0$ تغییر داده‌ایم تا $A_n(\epsilon)$ به دست آید. واضح است که مقادیر ویژه A_n تماماً صفرند. اما در مورد $A_n(\epsilon)$ داریم:

$$|A_n(\epsilon) - \lambda I_n| = (-\lambda)^n + (-1)^{n+1} \epsilon = 0 \Rightarrow \lambda^n = \epsilon \Rightarrow \lambda = \sqrt[n]{\epsilon \omega}$$

که ω ریشه n ام عدد یک است. مقادیر ویژه A_n صفرند ولی مقادیر ویژه A_n از (10^{-8}) مساوی $\sqrt[8]{10^{-8}} = 0.1$ است. تغییر در یکی از درایه‌های A_n به اندازه 10^{-8} سبب تغییر در مقادیر ویژه از 0 به 0.1 شده است.

استفاده از بهینه‌سازی در حل مسائل بد وضع

همانطور که قبلاً اشاره شد حل عددی اکثر مسائل بد وضع، چه معادلات دیفرانسیل معمولی، چه معادلات انتگرال و چه معادلات دیفرانسیل پاره‌ای، منجر به تعیین جواب یک دستگاه خطی (یا غیر خطی) می‌شود. لذا، حل دستگاههای بدوضع را مورد بررسی قرار می‌دهیم. در یک دستگاه بدوضع x های متفاوتی می‌توان ارائه کرد به طوری که $r = Ax - b$ دارای درایه‌های کوچک باشد. بنابراین، مشکل اصلی در حل عددی چنین دستگاههایی

خطای گرد کردن است و اینکه درایه‌های x می‌توانند بی‌کران تغییر کنند.

مثلا برای حل معادله انتگرال [۲]

$$\int_0^1 e^{xy} f(y) dy = (e^{x+1} - 1) / (x+1) = g(x), \quad 0 \leq x \leq 1, F(y) = y \quad (21)$$

از روش بسط تابع f بر حسب چند جمله‌ایهای «چیبشف» استفاده شده است:

$$f(x) \approx \sum_{i=0}^N a_i T_i(x) \quad (22)$$

با جایگذاری $f(x)$ از (۲۲) در (۲۱) و اعمال روش «گلرکین» به دست می‌آوریم [۲]:

$$Ba = g \quad (23)$$

که در آن $a = (a_0, a_1, \dots, a_N)^t$ و

$$g_i = \int_{-1}^1 \frac{g(x)T_i(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx, \quad i = 0, 1, \dots, N$$

$$b_{ij} = \int_{-1}^1 \frac{T_i(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx \int_{-1}^1 e^{xy} T_j(y) dy, \quad i, j = 0, 1, \dots, N$$

همانطور که در جدول ۱ ملاحظه می‌شود با اعمال روش حذفی گاوس خطا با N افزایش پیدا می‌کند. ملاحظه می‌شود با افزایش N نوسانات a_i ‌ها نیز زیاد می‌شود. همان‌طور که در [۳] توصیه شده و در [۴] به‌طور اتوماتیک عمل شده، به جای حل دستگاه (۲۳) مسأله بهینه‌سازی زیر را حل می‌کنیم:

$$\begin{cases} \text{Min. } \|Ba - g\| \\ \text{S.t. } |a_i| \leq \delta_i, \quad i = 0, 1, \dots, N \end{cases} \quad (24)$$

که در آن δ_i ‌ها کرانهای قابل تعیین هستند. به این ترتیب، ضمن جلوگیری از نوسانات شدید در مقدار x_i ‌ها، مسأله بدوضع (۲۱) به مسأله خوشوضع (۲۴) تبدیل می‌شود. بدیهی است که $\|0\|$ را می‌توان چنان انتخاب کرد که مسأله (۲۴) راحت حل شود [۴].

با اعمال این روش روی مسأله (۲۳) جوابهای جدول ۲ حاصل می‌شود که بسیار رضایت‌بخش هستند.

جدول ۱

N	۲	۳	۵	۶	۷	۸	۱۰	۲۰
$\ e_N\ _\infty$	$8/7(-1)$	$4/7(-1)$	$1/5(-1)$	$1/0(-1)$	$5/4(-1)$	$1/2(+2)$	$3/3(+3)$	$1/1(+5)$

حل دستگاه (۲۳) مربوط به مسأله (۲۱) به روش حذفی گاوس. در این جدول منظور از $\|e_N\|_\infty$ عبارت است

$$\|e_N\|_\infty = \text{Max}_{0 \leq x \leq 1} |f(x) - f_N(x)|$$

جدول ۲

N	۲	۳	۴	۵	۶	۷	۸	۱۰	۲۰
$\ e_N\ _\infty$	۱/۹(-۱)	۸/۰(-۲)	۲/۷(-۲)	۱/۱(-۲)	۱/۶(-۳)	۷/۷(-۵)	۷/۵(-۵)	۶/۰(-۵)	۶/۷(-۵)

حل مسأله بهینه‌سازی (۲۴) متناظر با مسأله (۲۱) که در آن $\delta_i \leq C_i i^{-r}$ و C_f و r با توجه به دستگاه (۲۲) به دست می‌آیند.

با اعمال این روش روی دستگاهی با ماتریس هیلبرت و جواب $x = (1, 1, \dots, 1)^T$ ، مسأله زیر را حل می‌کنیم:

$$\begin{cases} \text{Min. } \|H_n x - b\|_1 \\ \text{S.t. } |x_i| < \varepsilon, \quad i = 1, \dots, n. \end{cases}$$

در جدول ۳، مقادیر $\|x_i - x_c\|_2$ به ترتیب برای قیدهای $|x_i| \leq 2$ ، $|x_i| \leq 1/5$ ، و $0/9 \leq x_i \leq 1/1$ درج شده است.

جدول ۳

N	$ x_i \leq 2$	$ x_i \leq 1/5$	$0/9 \leq x_i \leq 1/1$	MATLAB
۲	۸/۰(-۱۶)	۸/۰(-۱۶)	۶/۰(-۱۶)	۶/۰(-۱۶)
۵	۱/۸(-۱۲)	۱/۰(-۱۱)	۳/۴(-۱۲)	۲/۸(-۱۲)
۱۰	۱/۷(۰)	۸/۴(-۱)	۱/۶(-۱)	۷/۷(-۴)
۱۵	۳/۸(۰)	۲/۰(۰)	۲/۵(-۱)	۱/۵(+۱)
۲۰	۵/۴(۰)	۲/۸(۰)	۳/۳(-۱)	۷/۷(+۱)
۲۵	۶/۶(۰)	۳/۶(۰)	۴/۲(-۱)	
۳۰	۷/۴(۰)	۴/۵(۰)	۴/۵(-۱)	
۳۵	۷/۸(۰)	۵/۲(۰)	۵/۲(-۱)	
۴۰	۸/۰(۰)	۵/۴(-۱)	۵/۵(-۱)	
۴۵	۹/۸(۰)	۸/۰(۰)	۵/۸(-۱)	
۵۰	۱۰/۹(۰)	۶/۴(۰)	۶/۳(-۱)	

مقادیر $\|x_i - x_c\|_2$ به ازای N های مختلف و قیدهای گوناگون، و خطای حاصل از به کارگیری نرم افزار MATLAB، در تمام موارد $\|H_n x - b\|_1$ کوچکتر از $10^{-11} \times 5$ است.

سؤال اساسی که اینجا مطرح است این است که ε را از کجا داریم یا δ_i ها در مسأله قبلی چگونه بدست می‌آیند. برای گرفتن پاسخ خود در مورد مسأله (۲۱) به [۲] مراجعه کنید ولی برای تعیین δ_i در مسائل دیگر باید موردی عمل کرد. معمولاً برای هر مسأله کاربردی باید بتوان حدود جوابها را حدس زد یا با معیارهای معمولی کرانهایی برای مقادیر آنها تعیین کرد. ضمناً با توجه به نتایج مقاله [۵] و استفاده از تخمین درایه‌های A^{-1} همواره می‌توان تخمینی از درایه‌های $A^{-1}b = x$ به دست آورد و از روی آن δ_i ها را تعیین نمود. تحقیق در این زمینه ادامه دارد.

نتایج

جداول ۲ و ۳ نشان می‌دهند که استفاده از بهینه‌سازی در حل دستگاههای بدوضع کمک شایانی به تعیین جواب نسبتاً دقیق مسأله می‌کند. برای $N > 20$ جوابهایی که به کمک نرم افزار MATLAB به دست می‌آیند بسیار دور از جواب واقعی هستند، به همین دلیل نتایج درج نشده‌اند. البته حل مسأله (۲۴) به مراتب مشکل‌تر از حل یک دستگاه به روشهای معمولی است، ولی باید توجه داشت که جواب حاصل از اعمال روشهای معمولی مورد قبول نیست در صورتی که جواب مسأله (۲۴) در اکثر موارد رضایت بخش است. نتایج عددی مندرج در جدول ۳ با استفاده از برنامه کامپیوتری CL1 (Constrained L1 Routine) به دست آمده است.

تشکر و قدردانی

از آقای سعید عباس‌بندی به خاطر اجرای برنامه CL1 و تهیه نتایج جدول ۳ تشکر می‌نمایم. ضمناً از معاونت پژوهشی دانشگاه به خاطر تأمین بودجه این طرح تحقیقاتی قدردانی می‌شود.

مراجع

1. E.V. Krishnamurthy and S.K. Sen, Numerical Algorithms, Computations in Science and Engineering . Translated in Persian by F. Toutounian and A. Bozorgnia. Ferdowsi University Press (1995).
2. E. Babolian, Galerkin Methods for Integral and Integro-differential Equations. Ph. D. Thesis, Liverpool University (1980).
3. E. Babolian & L.M. Delves, An Augmented Galerkin Method for First Kind Fredholm Equations. J. Inst. Maths. Applics. 24 (1979) 157-174.
4. S. Abbasbandy and E. Babolian , Automatic Augmented Galerkin Algorithms for Fredholm Integral Equations of the First Kind, ACTA Math. Sci. (English Ed.) 17 (1997) 1, 69-84.
5. G.H. Golub and Gerard Meurant, Matrices, Moments and Quadratures. Presented as the first A.R. Mitchell lecture in Dundee, Scotland, July (1993).