استخدام طرق التحليل العددي في تعجيل التقارب

طالب كاظم السعدي
المركز القومي للحاسبات الالكترونية

المقدمة

ان من المشاكل الرئيسية في الحسابات العددية العملية هي تحديد الـ (eigenvalues) للمصفوفة A وايجاد اكبرها أو اصغرها. اذا كانت N×N هي ابعاد المصفوفة A فان لها N من الـ (eigenvalues). و N من الـ (eigenvectors) وهذا يحتاج الى عمل يدوي كبير جداً ولزيادة في الدقة نستخدم الحاسبة الالكترونية (كتبت البرامج بلغة ALGOL W)(*) لايجاد كل الحلول المطلوبة للمصفوفة A بمعنى آخر ايجاد كل أو معظم الجذور والمتجهات وهذا لا يعتمد كثيراً على شكل المصفوفة A.

(*) تمت تمشية البرامج على حاسبة جامعة كلاسكو في بريطانيا حيث درست التحليل العددي مع استخدام لغة (ALGOL W).

بقدر ما يعتمد على ما هي الحلول المطلوبة.

2 ـ تعريف

لتوضيح الفكرة الاساسية لطرق التحليل العددي في تعجيل التقارب المستخدمة في هذه الدراسة.

نفرض ان

$$A\vec{Y}^{(i)} = \lambda_i \vec{Y}^{(i)} \text{ — — — — — — — — — — — — — — } (1)$$

حيث ان

A : هي المصفوفة المتناظرة (Symmetric) المراد ايجاد جذورها

$\vec{Y}^{(i)}$: هو المتجه (eigenvector) والذي يكون (Characteristic)

λ_i : هي الـ (eigenvalues) والتي تكون (Characteristic)

i : 1, 2, — — — — —, n

وبما ان $\vec{Y}^{(i)}$ هو عبارة عن مجموعة من الاسس المتعامدة (orthogonal basis set) اذن نستطيع ان نستخدم أي متجه اختياري ولنسميه $\vec{P}$ كتوافقية مستقيمة (Linear combination) للمتجه $\vec{Y}^{(i)}$ في الشكل التالي:

$$P = C_1 \vec{Y}^{(1)} + C_2 \vec{Y}^{(2)} + \text{ — — — — — — } + C_n \vec{Y}^{(n)} \text{ — — — — } (2)$$

وبضرب المعادلة (2) في المصفوفة المتناظرة A نحصل على

$$A\vec{P} = \lambda_1 C_1 \vec{Y}^{(1)} + \lambda_2 C_2 \vec{Y}^{(2)} + \text{ — — — — — — } + \lambda_n C_n \vec{Y}^{(n)} \text{ — — } (3)$$

ولنفرض ان الجذر λ_1 لاكبر معامل هو جذر حقيقي وان

$$|\lambda_r| \neq |\lambda_1|$$

حيث $r=1, 2, ------, n$

وبما اننا نهتم بالجذر الحقيقي λ_1 اذن نعيد صياغة المعادلة (3) بالشكل التالي للحصول على λ_1

$$A\vec{P} = \lambda_1 [C_1\vec{Y}^{(1)} + (\frac{\lambda_2}{\lambda_1}) C_2\vec{Y}^{(2)} + ------ + (\frac{\lambda_n}{\lambda_1}) C_n\vec{Y}^{(n)}]$$

$$------ (4)$$

وبضرب المعادلة (3) بالمصفوفة A الى m من المرات واعادة صياغتها كما في المعادلة (4) نحصل على الشكل التالي :

$$A^{(m)}\vec{P} = \lambda_1^{(m)} [C_1\vec{Y}^{(1)} + (\frac{\lambda_2}{\lambda_1})^2 C_2\vec{Y}^{(2)} + -- -- + (\frac{\lambda m}{\lambda_1})^m C_n Y^{(m)}$$

$$-------- (5)$$

وبضرب المعادلة (5) في المصفوفة A نحصل على الشكل التالي

$$A^{m+1}\vec{P} = \lambda_1^{m+1} [C_1\vec{Y}^{(1)} + (\frac{\lambda_2}{\lambda_1})^{m+1} C_2\vec{Y}^{(2)} + -- -- +$$

$$(\frac{\lambda_n}{\lambda_1})^{m+1} C_n\vec{Y}^{(n)}]$$

$$------ (6)$$

ولنفرض ان

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| > --- > |\lambda_n|$$

اذن

$$\lim_{m \to \infty} \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1} \right)^m = 0$$

واذا كانت C_1 لا تساوي صفراً وان قيمة عناصر المتجه $\vec{P}$ كبيرة نسبياً نستطيع استخراج قيمة λ_1 من المعادلتين (5) و (6) على الشكل التالى

$$\lim_{n \to \infty} \left(\frac{A^{m+1} \vec{P}}{A^m \vec{P}} \right) = \left(\frac{\lambda_1^{m+1} C_1 \vec{Y}^{(1)}}{\lambda_1^m C_1 \vec{Y}^{(1)}} \right)$$

$$= \lambda_1 \quad \text{———————————} (7)$$

وتطبيقاً للمعادلة (7) نحتاج الى معادلة متعددة الحدود (polynomial) وذلك في حالة ضرب المتجه المختار $\vec{P}$ في المصفوفة المتناظرة نحصل على متجه جديد وبضرب هذا المتجه في المصفوفة المتناظرة A بعد استخراج اكبر قيمة من قيم عناصره والتي تمثل λ_1 وتقسيم كافة قيم عناصره على هذه القيمة (λ_1) ونتيجة للضرب نحصل على متجه جديد آخر ونجري عليه نفس الخطوات السابقة وبتكرار هذه العملية نحصل على عدد متسلسل غير محدد من المتجهات $\vec{Y}^{(i)}$ ويوضع ذلك بالشكل التالي :

$$Y_{i+1} = A\, Y_i = A^{i+1}\, Y_0$$

وفي حالة تقارب قيم عناصر المتجه Y_i مع قيم عناصر المتجه Y_{i+1} أي تكون النسبة $Y_{i=\epsilon} / Y_{i+1}$ في هذه الحالة نحصل على قيمة الجذر المطلوب (λ_1) حيث ان هذا التقارب لا يعتمد على اختيار Y_0.

3 ـ طرق التحليل العددي لتعجيل التقارب

لزيادة سرعة التقارب نستخدم احدى الطرق التالية :

أولا : طريقة Aitken acceleration

ان الشكل العام لمعادلة هذه الطريقة هو

$$X^{*} = X_{r+2} - \frac{(X_{r+2} - X_{r+1})^2}{X_{r+2} - 2X_{r+1} + X_r} \quad (8)$$

حيث ان $r = 1, 2, ---, n$

ولكي نستخدم المعادلة (8) يجب ان نستخرج قيم X_1, X_2, X_3 من المعادلة التالية

$$X_{r+1} = g(X_r) \quad (9)$$

وقد استخدمت المعادلة (8) كدالة $(g(X_r))$ ولتطبيق ذلك يجب استخراج ثلاث (eigenvectors) والتي تكون (Normalized) للحصول على قيمة X_1 يجب ان نأخذ قيم العناصر الاولى من المتجهات الثلاث ونعوضها في المعادلة (8) وللحصول على قيمة X_2 نأخذ قيم العناصر الثانية من المتجهات الثلاث ونعوضها في المعادلة (8) واخيراً نحصل على قيمة X_3 بتعويض قيم العناصر الثالثة من المتجهات الثلاث في المعادلة (8).

وباستخدام تكنيك التعجيل في المعادلة (8) وذلك بجعل قيمة $r=1$ وبتعويض قيم X_1, X_2, X_3 نحصل على قيمة X^{*} ولأجل الاستمرار في تطبيق المعادلة (8) للحصول على قيم X^{*} الاخرى نعوض قيمة X_1 بقيمة X^{*} وكذلك

نحصل على قيم X_2 , X_3 باستخدام المعادلة (9) وذلك باستخدام قيم العناصر الثانية والثالثة من المتجهات الثلاث ونعوض القيم الجديدة X_1 , X_2 , X_3 في المعادلة (8) للحصول على قيمة جديدة X^* وهكذا نستمر بنفس الطريقة اعلاه للحصول على نقاط اخرى من X^* حتى نصل الى نقطة التقارب المطلوبة أي نحصل على $\in = X^*_k / X^*_{k-1}$.

ولتوضيح الفكرة اذكر ادناه الـ (Subroutine) الخاص بهذه الطريقة .

```
PRØCEDURE AIT(LØNG REAL ARRAY Z,X(*,*);LØNG REAL ARRAY R(*);
              LØNG REAL RESULT C;INTEGER VALUE N);
BEGIN
   INTEGER L;
   L:=1;
   FØR I:=1 UNTIL N DØ
     BEGIN
       IF I=B THEN
          X(I,1):=1;
          E:=Z(I,3)-2*Z(I,2)+Z(I,1);
        IF E¬=0 THEN
          BEGIN
            X(I,1):=Z(I,2)-(((Z(I,2)-Z(I,1))**)/E);
          END;
       END;
     G:=(R(L+1)-R(L))**2;
     F:=R(L+2)-2*R(L+1)+R(L);
     IF F=0 THEN
       BEGIN
         FINISHED:=TRUE
       END
     ELSE
       BEGIN
         C:=R(L)-(G/F);
       END;
END AIT;
```

مثال

نفرض لدينا المصفوفة التالية

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \\ 1 & 2 & 4 \end{pmatrix}$$

ومتجه البدء

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

وتنفيذ طريقة **Aitken acceleration**

على الحاسبة الالكترونية نحصل على النتائج التالية

EIGENVALUE	EIGENVECTØR
5.151316	
	0.1941964
	0.4805194
	1.0000000
5.156712	
	0.1939280
	0.4811913
	1.0000000
5.156326	
	0.1939365
	0.4811943
	1.0000000
5.156325	
	0.1939366
	0.4811942
	1.0000000
5.156325	
	0.1939366
	0.4811942
	1.0000000

ثانياً : طريقة **Rayleigh quotient**

في حالة اختلاف قيم الـ(**eigenvalues**) عن بعضها وان أسس الـ (**eigen** vectors) متعامدة ولنفرض ان $\vec{X}$ هو المتجه الذي حصلنا عليه بعد K من التكرار اذن

$$\vec{X} = C_1 V_1 \times C_2 \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^k V_2 + ------- + C_n \left(\frac{\lambda_n}{\lambda_1}\right)^k V_n$$

ونفرض ان

$$\Sigma_n = C_n \left(\frac{\lambda_n}{\lambda_1}\right)^k$$

اذن

$$\vec{X} = C_1 V_1 + \Sigma_2 V_2 - - - - - - - - - - \Sigma_n V_n$$

ونفترض ان المتجة V_i هو (normalized)

اذن

$$AX = C_1 \lambda_1 V_1 + \Sigma_2 \lambda_2 V_2 + --------- + \Sigma_n \lambda_n V_n$$

وكذلك

$$X^T AX = \lambda_1 |C_1|^2 + \lambda_2 |\Sigma_2|^2 + ----- + \lambda_n |\Sigma_n|^2$$

وكذلك

$$X^T X = |C_1|^2 + |\Sigma_2|^2 + ----- + |\Sigma_n|^2$$

وعندما التكرار K يزداد فان كل Σ_i تقترب من الصفر وبهذا نحصل على طريقة (Rayleigh quotient) والتي هي

$$\frac{X^T AX}{X^T X}$$

ولتوضيح الفكرة اذكر الـ (Subroutine) الخاص بهذه الطريقة.

```
PRØCEDURE RAY(LØNG REAL ARRAY W1, W(*,*);LØNG REAL RESULT
              S1, S2, S3, S4;INTEGER VALUE N);

BEGIN
  S1:=S2:=S3:=S4:=0;
  FØR J:=1 UNTIL N DØ
  BEGIN
    W1(1,J):=W(J,1);
    W1(2,J):=W(J,2);
  END;

FØR I:=1 UNTIL N DØ
BEGIN
  S1:=S1+W1(1,I)*W(I,2);
  S2:=S2+W1(1,I)*W(I,1);
END;

NØRM(W(*,2),W(*,2),N,P);
FØR L:=1 UNTIL N DØ
BEGIN
  S3:=S3+W1(2,L)*W(L,2);
END;

NØRM(W(*,2),W(*,2),N,P);
FØR K:=1 UNTIL N DØ
BEGIN
  S4:=S4+W1(1,K)*W(K,2);
END;
END;
```

مثال

نفرض لدينا المصفوفة التالية

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \\ 1 & 2 & 4 \end{pmatrix}$$

ومتجه البدء

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

وبتنفيذ طريقة (Rayleigh quotient) على الحاسبة الالكترونية نحصل على

```
        4.000000        5.250000
        5.142857        5.157407
ROOT 2 = -0.4420635
ROOT 1 =   5.692063
```

ثالثاً : **Shift of origin**

عند استخدام طرق التحليل العددي في بعض المصفوفات لا نحصل على التقارب المطلوب (eigenvalues المصفوفة A) في هذه الحالة نحتاج الى ازاحة (shift) كافة الـ (eigenvalues) للمصفوفة A وبنفس القيمة المختارة ولتكن S وذلك بطرح هذه القيمة من عناصر قطر (diagonal) المصفوفة A ولتمثيلها رياضياً ستكون على الشكل التالي :

$$\begin{aligned} AX &= \lambda X \\ &= (\lambda - S) X + SX \end{aligned}$$

$$(A - SI) X = (\lambda - S) X \quad \text{— — ——} \quad (11)$$

ويمكن كتابة المعادلة 11 بالشكل التالي

$$BX = \eta X \text{ — — — — — — — — — — — — — } (12)$$

حيث ان

$$(A - SI) = B$$

$$(\lambda - S) = \eta$$

وباستخدام هذه الطريقة فان الـ (eigenvalues) ستتغير بينما الـ (eigenvectors) لا تتغير اطلاقاً وان نسبة التقارب تعتمد على $(\lambda_{n+1} / \lambda_n)$ واذا طبقنا هذه الطريقة على المصفوفة الجديدة (A—SI) فان الـ (eigenvalues) للمصفوفة الجديدة هي $S - \lambda_i$ وفي هذه الحالة فان نسبة التقارب تعتمد على

$$\frac{\lambda_2 - S}{\lambda_1 - S}$$

ولتوضيح الفكرة ساذكر الـ (Subroutine) الخاص بهذه الطريقة.

```
PRØCEDURE SHIF(LØNG REAL ARRAY A,W(*,*);LØNG REAL ARRAY X(*);
                INTEGER VALUE N,S,K);
BEGIN
  INTEGER T;
  LØGICAL FINISHED;
  FINISHED := FALSE;
  T:=1;
  WRITE("THE ITEREATIØN BY SHIFT ØF ØRIGIN IS");
  FØR I:=1 UNTIL N DØ
  WHILE T¬=25 AND ¬ FINISHED DØ
  BEGIN
     MULT(A,W(*,1),W(*,2),N);
     NØRM(W(*,2),W(*,1),N,K);
     X(T):=W(K,2);
```

```
WRITE (X(T));
IF T¬=1 THEN
BEGIN
   IF ABS(X(T)-X(T-1))<0.5'-11 THEN
   BEGIN
      FINISHED:=TRUE;
      X(T):=X(T)+S;
      WRITE("THE RØØT IS",X(T));
   END
END;
T:=T+1;
END;
END SHIF;
```

رابعاً: طريقة التقريب في حالة $\lambda_2 = -\lambda_1$

تستخدم هذه الطريقة في حالات خاصة والتي يكون فيها الجذرين الحقيقين متساويين في القيمة ومختلفين في الاشارة واذا استخدمنا الطرق السابقة لايجاد eigenvalues المصفوفة A فاننا لا نحصل على التقارب (Convergent) ولتوضيح الفكرة رياضياً نفرض ان المتجه $\vec{Y}^{(p)}$ هو توافقيه مستقيمة (Linear Combination) لاثنين من (eigenvectors) المقابلة للجذرين الحقيقين اذن ستكون العلاقة الرياضية كما يلي

$$Y^{p+2} = \lambda_2 Y^{p} \qquad (13)$$

وان نسبة التقارب هي ((Y_i^{p+2} / Y_i^{p})) والتي ستستقر عند قيمة ثابتة هي λ^2 وللتخلص من هذه الحالة نستخدم طريقة الازاحة عن المركز (Shift of origin) وبذلك نحصل على التقارب المطلوب.

وللتوضيح نعطي المثال التالي

مثال: نفرض لدينا المصفوفة التالية

$$\begin{pmatrix} 5 & 5 & -7 \\ 5 & -7 & 5 \\ -7 & 5 & 5 \end{pmatrix}$$

ولايجاد eigenvalues المصفوفة اعلاه نختار قيمة البدء التالي

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ -2 \end{pmatrix}$$

```
THE ITERATION WITH OUT SHIFT OF ORIGIN IS
       24.00000
      -12.00000
       6.000000
       24.00000
       6.000000
ROOT 2 = - ROOT 1
THE ITERATION BY SIFT OF ORIGIN IS
       28.00000
       12.57143
       18.18132
       15.04000
       16.51064
       15.75257
       16.12565
       15.93766
       16.03129
       15.98439
       16.00781
       15.99610
       16.00195
       15.99903
       16.00048
       15.99976
       16.00012
       15.99994
       16.00003
       15.99999
       16.00000
       16.00000
```

ومن النتائج اعلاه حصلنا على قيمة الجذر الحقيقي والتي يساوي

12=4 -16

حيث ان 4 - هو الثابت المستخدم في الازاحة

المصادر

1 — An Introduction to numerical Linear Algebra by L. FOX

2 — Numerical Methods that work by Forman S. Acton

3 — Introduction to Matrix computations by G.W. Stewart

4 — Theory and Applications of numerical Analysis by philips and Taylor

5 — Computational Methods for Matrix Eigenproblems by Gourilay watson

6 — Introduction to Numerical analysis by Carl-Erik Froberg