جامعة الشهيد الشيخ العربي التبسي ـــ تبسة
كلية العلوم الدقيقة وعلوم الطبيعة والحياة
قسم علوم المادة

مطبوعة دروس في مادة

الفيزياء العددية 2

مخصص لطلبة ماستر فيزياء المادة المكثفة

الأستاذ: د. محمد أمين طق

2025-2024

الفيزياء العددية هي مجال في الفيزياء يستخدم الأساليب الرقمية لحل المشاكل المعقدة. تجمع هذه النهج بين مبادئ الفيزياء النظرية مع أدوات الحساب الحاسوبي لنمذجة ومحاكاة ظواهر فيزيائية متنوعة. يمكن العثور على تطبيقات هذا التخصص في العديد من المجالات، مثل علم الفلك، وميكانيكا السوائل، وفيزياء المواد، وغيرها.

تشمل الأساليب الرقمية المستخدمة في الفيزياء العددية غالباً خوارزميات التقريب والحل الرقمي لحل المعادلات التفاضلية، والمعادلات التكاملية، ومشاكل رياضية أخرى معقدة. تسمح هذه التقنيات بمحاكاة سلوك الأنظمة الفيزيائية في ظروف مختلفة وتوقع تطورها مع مرور الوقت.

الميزة الرئيسية للفيزياء العددية تكمن في قدرتها على التعامل مع الأنظمة المعقدة التي من الصعب، أو حتى من المستحيل، الحصول على حلول تحليلية دقيقة لها. من خلال استخدام المحاكاة الحاسوبية، يمكن للباحثين استكشاف مجموعة واسعة من الظروف والمعلمات، مما يساعد في فهم سلوك الأنظمة الفيزيائية في الظروف الواقعية أو النظرية.

نقدم في هذه المطبوعة دروس وكذلك تمارين في الفيزياء العددية وكذلك تطبيق الخوارزميات الشهيرة وبرمجتها بواسطة لغة الفورترون.

هذه المطبوعة مخصصة لطلبة ماستر في فيزياء المادة المكثفة، كذلك يمكن للطلبة بصفة عامة، خاصة في مادة التحليل العددي.

الفـــــهرس

تذكير بلغة البرمجة

لغات البرمجة هي أدوات أساسية يستخدمها المطورون لإنشاء البرامج والتطبيقات وأنظمة الحاسوب. تتميز كل لغة برمجة بقواعدها النحوية والدلالية الخاصة بها، فضلاً عن نقاط قوتها وضعفها، مما يجعلها مناسبة لبعض المهام أكثر من غيرها.

1. جافا (Java):

– لغة برمجة متعددة الاستخدامات وشائعة الاستخدام في تطوير البرامج.

– تشتهر بقابليتها للتشغيل على منصات متعددة، وأمانها، وسهولة استخدامها، وغالباً ما تُستخدم لإنشاء تطبيقات الويب، والأجهزة المحمولة، والأنظمة المضمنة.

2. بايثون (Python):

– لغة برمجة مفسرة مستوى عالٍ، محبوبة لقراءتها السهلة وبساطتها.

– يُستخدم Python في مجموعة واسعة من المجالات بما في ذلك تطوير الويب، وتحليل البيانات، والذكاء الاصطناعي، والمزيد.

3. سي (C):

– لغة برمجة منخفضة المستوى تُستخدم لتطوير أنظمة التشغيل ومشغلات الأجهزة وغيرها من البرمجيات التي تتطلب أداءً عاليًا.

– تُعرف بفعاليتها وتحكمها الدقيق في أجهزة الكمبيوتر.

4. سي++ (C++):

– توسيع للغة C، يضيف ميزات مثل الكائنات والتوريث.

– يُستخدم في تطوير البرمجيات المعقدة مثل أنظمة إدارة قواعد البيانات وألعاب الفيديو.

5. جافا سكريبت (JavaScript):

– لغة برمجة سيناريوية تُستخدم بشكل رئيسي لجعل صفحات الويب تفاعلية.

– يُنفذ في متصفحات الويب، ويُستخدم على نطاق واسع لإضافة المزيد من التفاعلية إلى المواقع الإلكترونية.

6. فورتران (Fortran):

– Fortran هي إختصار لـ "Formula Translation"، وهي واحدة من أقدم لغات البرمجة متعددة المستويات التي لا تزال تستخدم حتى الآن.

– تم تصميمها في الأصل للحسابات العلمية والهندسية، ولا تزال تستخدم في مجالات مثل نمذجة المناخ والمحاكاة الرقمية وتطبيقات أخرى علمية وتقنية.

نهتم في هذه المطبوعة ببرمجة الخوارزميات باستخدام لغة البرمجة فورتران، بالطبع يمكن تطبيق كل الخوارزميات الموجودة في هذه المطبوعة باستخدام أي لغة برمجة.

برمجة الأخطاء

لتقييم دقة النتيجة، يجب على المُحسِن الرقمي أن يعرف بدقة الأخطاء التي تم ارتكابها. لنُعطِ ثلاثة أمثلة.

الأخطاء التقريبية يفرضها الحاسوب. حيث أن تمثيل عدد في ذاكرة الحاسوب محدود، فإن كل عدد حقيقي لا يُعرَف إلا بدقة معينة من خلال n أرقام معنوية. على سبيل المثال، لعدد أي من 0 إلى 1، قد تكتب الآلة:

$$x = 0.a_1a_2a_3 \dots a_n$$

عند التعامل مع هذه الأرقام، ستضطر الآلة إلى اختيار بين القص أو التقريب إلى العشرة القريبة. عند إجراء عملية جمع للأرقام x = 0.1234 و y= 0.5678 باستخدام ثلاثة أرقام معنوية فقط، ستحصل على إما 0.690 عندما يتم تقريب y إلى 0.567 أو 0.691 عندما يتم تقريب y إلى 0.568. يُدرك كيف يمكن أن تؤدي هذه الأخطاء، عندما تكون على نطاق أوسع، إلى مشاكل في الدقة.

الأخطاء التقطيعية مرتبطة بدقة الخوارزمية المستخدمة. يمكن التحكم فيها عن طريق الخوارزمية نفسها. إذا تم تقريب وظيفة باستخدام تطوير تايلور، سيتم الحصول على الخطأ التقطيعي عن طريق تقدير باقي التطوير. يتم السيطرة عليه من خلال تقدير هذا الباقي. عند الجوار من نقطة a ، إذا كانت الوظيفة f تتقبل تطوير تايلور بالصورة التالية:

$$f(x) = f(a) + \dots + \frac{(x-a)^{n-1}}{(n-1)!} f^{(n-1)}(x) + \int_a^x (x-t)^{n-1} \frac{f^{(n)}(t)}{(n-1)!} dt$$

وإذا كانت الانحدار الثاني لـ f مقدرة بثابت M ، سيكون الباقي مقدرا ب

$$\left| \int_a^x \frac{(x-t)^{n-1}}{(n-1)!} f^{(n)}(t) dt \right| \leq M \frac{|x-a|^n}{n!}$$

تحدث أخطاء الطريقة عندما يتم مزج تعبير بشكل غير متوازن ويختلط القيم التي فارقها كبير. إنها مشكلة في المعايرة الرقمية التي تتأثر بالأخطاء التقريبية.

في معظم الحالات، يجب تعديل الخوارزمية. لنأخذ مثلاً معادلة من الدرجة الثانية

$$10^{-8}x^2 - 0.8x + 10^{-8} = 0$$

تحتوي هذه المعادلة على جذرين $r_1 = 0.8 \times 10^8$ و . $r_2 = 1.25 \times 10^{-8}$ إذا كنا مهتمين فقط بالجذر الأصغر، فإن بعض الحواسيب وخاصة الحاسبات الجيبية تعطي قيمًا خاطئة. يأتي ذلك من حقيقة أن

عند حساب الاختلاف $\Delta = 0.64 - 4 \times 10^{-16}$ لا يتم دائماً الحساب الصحيح لأنه يتم تجاهل المصطلح 4×10^{-16} بالنسبة لـ 0.64. للحصول على قيمة دقيقة يجب تعديل الخوارزمية عن طريق اقتراح حساب الجذر r_2 بالعلاقة التي تعطي ضرب الجذور . $r_2 = 1/r_1$ لاحظ أنه إذا قمنا بضرب المعادلة بـ 10^{8} ، فإن المشكلة تبقى صحيحة.

في العمليات المتكررة أو التكرارية، تتراكم الأخطاء، مما يؤدي إلى تضخيم الخطأ الشامل وتقليل دقة الحساب.

يؤدي انتشار الأخطاء في مختلف أجزاء الحساب إلى إضافة الضبابية في الأماكن التي لم يكن من المتوقع بالضرورة حدوثها. في الحسابات التكرارية، ينتشر الخطأ من خطوة إلى أخرى.

على سبيل المثال، في الحساب العددي لعبارات السلسلة المحددة بالعلاقة التكرارية:

$$x_{n+1} = \frac{1}{n} + a x_n$$

يتطور الخطأ الذي يُعطى بواسطة

$$\Delta x_{n+1} \approx a \Delta x_n$$

بشكل أسي. في الخطوة n ، يتم ضرب الخطأ ب a^n من خطوة إلى أخرى ينتشر الخطأ ويمكن أن يؤدي إلى انفجار الخوارزمية.

1.2 التقارب والاستقرار

الأساليب العددية المستخدمة لحل مشكلة تقريبية تؤدي دائمًا إلى نتيجة مصابة بالخطأ. يجب أن يكون هذا الخطأ صغيرًا بما يكفي حتى تتقارب الحل العددي نحو الحل الفعلي. في هذه الحالة، يُعتبر الخوارزمية (أو الطريقة) متقاربة. إذا كان التفكير الرياضي يسمح بإظهار أن الطريقة تتبدل، فلن يتم استخدامها أبدًا على الحاسب. على الجانب الآخر، إذا كانت الطريقة متقاربة، فمن الممكن أن تتبدل عمليًا.

سرعة التقارب هي عامل مهم في جودة الخوارزميات. إذا كانت سرعة التقارب عالية، فإن الخوارزمية تتقارب بسرعة ويكون وقت الحساب أقل. هذه الاهتمامات بسرعة التقارب أدت إلى تنويع وسائل التقارب والبحث عن عمليات مثلى.

الاستقرار يضمن أن الأخطاء لا تتضخم خلال تنفيذ الخوارزمية وأن الطريقة تبقى مستقرة. بالإضافة إلى هذه الاستقرار العددية، هناك أيضًا استقرار الحلول التي تدخل في المسائل المعادلاتية والتي يتم توضيحها جيدًا من خلال التقنيات التعديلية. عندما يكون لدى مشكلة P حلا، من المثير للاهتمام النظر في المشكلة المعدلة، التي تُعرف بـ P_ε، حيث ε هو معلم صغير والتساؤل عما إذا كانت حلول النظام المعدل مجاورة لحل النظام غير المعدل. لا يوجد نظرية عامة تجيب على هذا السؤال.

لنقدم بعض التعاريف. لنفترض أن $u: I \to R$ هو دالة بقيم حقيقية محددة على فترة$I = [a, b]$ وتقسيمًا $a = x_0 < x_1 < x_2 \dots < x_n = b$. نلاحظ $h_i = x_i - x_{i-1}$ و h هو أكبر قيمة للخطوات في التقسيم $h = \sup_i\{h_i\}$ نفترض أن الدالة u مزودة بتجسيد عددي (طريقة، عملية أو مخطط تقسيم) يتم التعبير عنه على شكل

$$u_{i+1} = \phi(h_1, \dots h_i, u_1, \dots u_i)$$

نسمي خطأ التناغم المتعلق بالدالة $u(x)$ كمية $e_i = u(x_i) - u_i$ ونسمي الخطأ الكلي التعبير:

$$e = \sup_{0 \le i \le n} |u(x_i) - u_i|$$

نقول إن الطريقة تتقارب إذا كان الخطأ الكلي يتجه نحو 0 عندما يتجه التقسيم h نحو 0.

تسمى الطريقة متناسقة إذا كان مجموع $\sum_{i=0}^{n} |e_i|$ من أخطاء التناغم المتعلقة بالدالة u يتجه نحو 0 عندما يتجه h نحو 0.

تسمى الطريقة من الرتبة p إذا كان الحد

$$\lim_{n \to \infty} \frac{|e_{n+1}|}{|e_n|^p}$$

موجودًا عندما يتجه n نحو اللانهاية. نقول أن خطأ التناغم هو بمقدار h^p، ونلاحظ

$$e_i = O(h^p) \quad \forall i = 0, \dots, n$$

تعتبر الطريقة مستقرة إذا كانت لجميع الأزواج المجاورة u_{i+1} و $v_{i+1} = u(x_{i+1})$ التي تتبع

$$u_{i+1} = \phi(h_1, \dots h_i, u_1, \dots u_i)$$
$$v_{i+1} = \phi(h_1, \dots h_i, v_1, \dots v_i) + \varepsilon_i$$

ثابت S يُسمى ثابت الاستقرار يحقق المعادلة

$$\sup_{0\le i\le n}|v_i-u_i|\le S\sum_{i=0}^{n}|e_i|$$

نثبت أن أي عملية مستقرة ومتناسقة تتقارب.

فعلا، الطريقة مستقرة، لذلك بالنسبة للأزواج u_{i+1} و $v_{i+1}=u(x_{i+1})$ لدينا

$$\sup_{0\le i\le n}|v_i-u_i|\le S\sum_{i=0}^{n}|e_i|$$

بما أن الطريقة متناسقة، فإن العضو الأيمن يتجه نحو 0 عندما يتجه h نحو 0.

1.3 تسريع التقارب

الطريقة التي ابتكرها ريتشاردسون للاستيفاء توضح تسريع تقارب الطرق العددية. اقترحها لويس فراي ريتشاردسون (1881−1953) في عام 1927، وتتضمن الاستيفاء عند الحد حيث يتم حساب نفس الكمية عدة مرات باستخدام شبكة مختلفة. فلنفترض أن $r>1$ عدد حقيقي ثابت و u_h تقريب لـ u. إذا كانت u من الرتبة الأولى وتم الحساب مرتين، نحصل على

$$u_h=u+\alpha h+O(h^2)$$

$$u_{h/r}=u+\alpha\frac{h}{r}+O(h^2)$$

وبالتالي، من خلال الجمع بين النتيجة u_h والنتيجة المستمدة من شبكة أدق، نحصل على

$$ru_{h/r}-u_h=(r-1)u+O(h^2)$$

عمومًا، إذا كانت u مقربة بالرتبة n

$$u(h)=a+bh^n+ch^{n+1}+\cdots+eh^{n+l}+O(h^{n+l})$$

عند اختيار خطوتين h_1 و h_2، إذا كانت خطوة h_2 أصغر من خطوة h_1، فإن $u(h_2)$ تكون تقريبًا أفضل من $u(h_1)$. يمكننا الحصول على تقريب أفضل بإزالة المصطلح h^n، من خلال

$$u(h_1, h_2) = \frac{h_1^n u(h_2) - h_2^n u(h_1)}{h_1^n - h_2^n}$$

وخصوصًا، عندما تكون $h_1 = h$ و $h_2 = h/r$ حيث $r > 1$، نحصل على

$$u_h = u + \alpha h^n + O(h^{n+1})$$

$$u_{h/r} = u + \alpha \frac{h^n}{r^n} + O(h^{n+1})$$

من هنا نحصل على العلاقة العادية

$$\frac{r^n u_{h/r} - u_h}{r^n - 1} = u + O(h^{n+1}) \ \forall n \geq 1$$

1.4 التعقيد Complexity

تنقسم المشكلات التي يتم التعامل معها على الحاسوب إلى فئتين رئيسيتين حسب ما إذا كان يتوقع الحصول على قيمة عددية (مشاكل الحساب) أو ما إذا كان مطلوبًا الحصول على إجابة نعم أو لا (مشكلة قرار).

تمت دراسة خصائص الخوارزميات في الثلاثينيات من القرن الماضي من قبل الرياضي ألان تورنج (1912–1954) الذي ابتكر الآلة التي تحمل اسمه. قام تورنج، من خلال إثبات أن المشاكل التي لا يمكن حلها بواسطة آلته الرمزية ليس لها خوارزمية، بتحديد حدود القابلية للحساب. منذ ذلك الحين، تم تصنيف المشاكل في فئتين رئيسيتين: المشاكل التي لا توجد فيها خوارزمية والمشاكل التي توجد فيها خوارزمية. بين هذه الأخيرة، يتم قياس كفاءة الخوارزميات وفقًا لنمو مدة التنفيذ مع حجم المشكلة. بالنسبة لمشكلة ذات حجم n، تُعتبر الخوارزميات فعالة إذا كان نموها يكون متعدد المقدرات وغير فعالة أو صعبة الاستغلال إذا كان نموها يكون تصاعديًا. يُقال إن خوارزمية غير قابلة للحل أو غير قابلة للاستدلال إذا لم يكن بإمكانها الحصول على حل باستخدام خوارزمية.

توجد عدة فئات.

تُمثل الفئة P (متعدد المقدرات) الفئة التي يمكن اتخاذ قرارات فيها في وقت متعدد المقدرات: هذه هي المشاكل التي يمكن حلها على آلة تورنج في وقت متعدد المقدرات. يتم الحصول على حل للمشكلة في وقت أقل من

قوة معينة لحجم المشكلة n: إذا زاد حجم المشكلة n، فإن عدد الخطوات في الخوارزمية يظل أقل دائمًا من قوة معينة من n.

تُمثل الفئة NP (غير متعدد المقدرات) الفئة التي يمكن اتخاذ قرارات فيها في وقت غير متعدد المقدرات. هذه هي المشاكل التي يمكن التحقق من حلها في وقت متعدد المقدرات إذا تم تقديم حلاً، ولكن لبعض المشاكل في هذه الفئة لا يوجد أي خوارزمية متعددة المقدرات. نعرف أن الفئة P مشمولة في الفئة NP ونفترض أن $P \neq NP$. تعتبر تلوين الخريطة مشكلة من الفئة NP. في عام 1975، "أثبت" كينيث أبيل وفولفغانغ هاكن باستخدام الكمبيوتر

أنه يكفي أربعة ألوان لتلوين خريطة مع تجنب أن تكون لدى دولتين مجاورتين نفس اللون.

تُمثل الفئة NP–كاملة المشاكل التي تتصل بالفئة NP: إذا كان يمكن حل مشكلة في هذه الفئة بواسطة خوارزمية في وقت متعدد المقدرات، فسيكون جميع مشاكل الفئة NP قابلة للحل بواسطة خوارزمية فعالة. إذا تم العثور على مثل هذه الخوارزمية، فسوف يتم تطابق الفئتين P و NP. مشكلة عامل التجارة، التي تتمثل في العثور على أقصر مسار يربط سلسلة من المدن، هي مشكلة NP–كاملة. مشكلة حقيبة الظهر: بالنظر إلى مجموعة فرعية S من مجموعة الأعداد الطبيعية و m عددًا موجبًا، هل يمكن العثور على جزء A من S بحيث يكون مجموع عناصره يساوي العدد m، هي مشكلة NP–كاملة.

يتم قياس تعقيد الخوارزميات عن طريق احتساب الأوامر بدرجات الحجم فقط. إذا كان $T(n)$ يمثل عدد الإرشادات البسيطة التي تنفذها آلة معينة، فسنقول إن وقت التنفيذ هو $O\big(T(n)\big)$ أو أن تعقيد الخوارزمية متناسب مع $f(n)$ إذا كانت $T(n) = O\big(T(n)\big)$ بالتعبير عن طريق لانداو. أي أنه إذا كانت هناك ثابتان c و n_0 بحيث

$$T(n) \leq cf(n) \ \forall n \geq n_0$$

فإننا نقول أن الخوارزمية $O(n)$.

في الطريقة ذات الوصول المباشر، يتم تحديد البيانات في $O(1)$ عمليات. الوصول في شجرة البحث هو $O(\log(n))$. جمع متعدد المقدرات هو $O(n)$. التصنيف التكراري أو التحويلة السريعة لفورييه هو $O(n\log(n))$. ضرب المصفوفات هو $O(n^2)$. لنعطي مثالًا بسيطًا على حساب التعقيد.

مثال. لنأخذ الخوارزمية العاملية المتكررة لحساب $n!$

Do

(1) If (n ≤ 1) Then

(2) fac = 1

(3) Else If fac(n) = n * fac(n−1)

End Do

الأسطر (1) و (2) لها تعقيد $O(1)$، والسطر (3) هو $O(1) + T(n-1)$. لذا، إذا كانت c تعبر عن عدد العمليات في $O(1)$ وإذا كان $n > 1$، فإن $T(n) = c + T(n-1)$. في النهاية، $T(n) = c(n-1) + T(1)$، ومن ثم $T(n) = O(n)$. لذا فإن الخوارزمية العاملية المتكررة لحساب عاملي n هي $O(n)$.

1.5 التحسين Optimization

في الممارسة العملية، ليس اختيار خوارزمية دائمًا مسألة بسيطة. سنسعى إلى اختيار الخوارزمية التي توفر أفضل دقة في النتائج وتقلل من حجم الذاكرة وزمن الحساب. يهدف التحسين إلى تقليل عدد العمليات وبالأخص عدد عمليات الضرب. لنعطي مثالين حيث نحاول فيهما تقليل عدد عمليات الضرب، حتى لو استدعى ذلك استبدالها بالجمع، الذي يكلف أقل من حيث الوقت.

مثال 1. ضرب عددين مركبين $z_1 = a + ib$ و $z_2 = c + id$ يتطلب تقييم أربع كميات ab, bd, ad و bc. بتوظيف العلاقات التالية:

$$ac - bd = (a+b)c - (c+d)b$$
$$ad + bc = (a-b)d - (c+d)b$$

يمكننا تقليل الحساب إلى تقييم ثلاث كميات فقط: $(a+b)c, (a-b)d$ و $(c+d)b$. يأتي الفوز من حقيقة أن الضرب يكون أبطأ بكثير من الجمع.

مثال 2. في الضرب المصفوفي، يمكننا تقليل عدد عمليات الضرب عن طريق زيادة عدد عمليات الجمع. يتطلب ضرب مصفوفتين ذات صفين وأعمدة اثنين سبع عمليات ضرب وليس ثماني:

$$\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}\begin{pmatrix} e & f \\ g & h \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix}$$

نحسب بتسلسل

$$p_1 = ae$$
$$p_2 = bg$$
$$p_3 = (a-c)(h-f)$$
$$p_4 = (c+d)(f-e)$$
$$p_5 = (a+b-c-d)h$$
$$p_6 = (e-f+g-h)d$$
$$p_7 = (c-a+d)(e-f+h)$$

هذه القيم السبع كافية لتحديد ضرب المصفوفتين

$$\alpha = p_1 + p_2$$
$$\beta = p_1 + p_4 + p_5 + p_7$$
$$\gamma = p_1 + p_3 + p_6 + p_7$$
$$\delta = p_1 + p_3 + p_4 + p_7$$

عندما يرغب عدة مستخدمين أو عدة قطع من الحسابات في استخدام نفس النتيجة، يمكن تنظيم الحساب بشكل موازي بحيث يستخدم كل حساب مجموعة من البيانات التي تم حسابها مسبقًا: هذا ما يسمى التكيف المسبق. على سبيل المثال، لتقييم القيمة في x لمتعدد الحدود الرابع، سنقوم بحساب الكميات α, β, γ و δ مسبقًا والتي تُعرف بواسطة:

$$ax^4 + bx^3 + cx^2 + dx + e = [(x+\alpha)x + \beta][(x+\alpha)x + (x+\gamma)] + \delta$$

ومعطياتها تكون على النحو التالي

$$\alpha = (b-a)/2a$$

$$\beta = \frac{d\alpha c}{a^2} + \alpha^2(\alpha + 1)$$

$$\gamma = \frac{c}{d} - \alpha(\alpha + 1) - \beta$$

$$\delta = e - a\beta\gamma$$

من خلال تقييم هذه الكميات وتوفيرها للحسابات الأخرى، لم يعد حساب المتعدد الحدود يتطلب سوى ثلاث عمليات ضرب.

يمكن تعميم هذه العملية. أظهر Strassen أن ضرب مصفوفتين $2n \times 2n$ يتم تحويله إلى ضرب سبع مصفوفات $n \times n$.

قاعدة Horner تسمح بتقييم متعدد الحدود في نقطة معينة بعدد أمثل من العمليات. في مقال نشر في عام 1819، أشار William Horner إلى طريقة لتقييم قيمة متعدد الحدود في نقطة x_0. الطريقة المعتادة التي تتمثل في حساب x^2 ثم x^3، ...، ثم x^n تتطلب $(2n-1)$ عملية ضرب و n عملية جمع. لحساب المتعدد الحدود

$$P(x_0) = a_n x_0^n + a_{n-1} x_0^{n-1} + \cdots + a_1 x_0 + a_0$$

يقترح Horner تعريف $P(x)$ على النحو التالي:

$$P(x) = a_0 + x\big(a_1 + x(a_2 + \cdots + x(a_{n-1} + x a_n) \dots)\big)$$

وتقييم الكميات بتسلسل

$$b_n = a_n$$

$$b_{n-1} = a_{n-1} + x_0 b_n$$

$$\dots$$

$$b_i = a_i + x_0 b_{i+1}$$

$$\dots$$

$$b_1 = a_1 + x_0 b_2$$

$$b_0 = a_0 + x_0 b_1$$

عند انتهاء الحساب، b_0 يعطي قيمة متعدد الحدود P في نقطة x_0. في كل خطوة، نقوم بعملية ضرب واحدة وعملية جمع واحدة، مما يعني أن طريقة Horner لتقييم قيمة متعدد الحدود من الدرجة n في نقطة معينة تتطلب n عمليات ضرب و n عمليات جمع، مما يحقق توفيرًا بالمقارنة مع الطريقة المعتادة وبالتالي توفيرًا

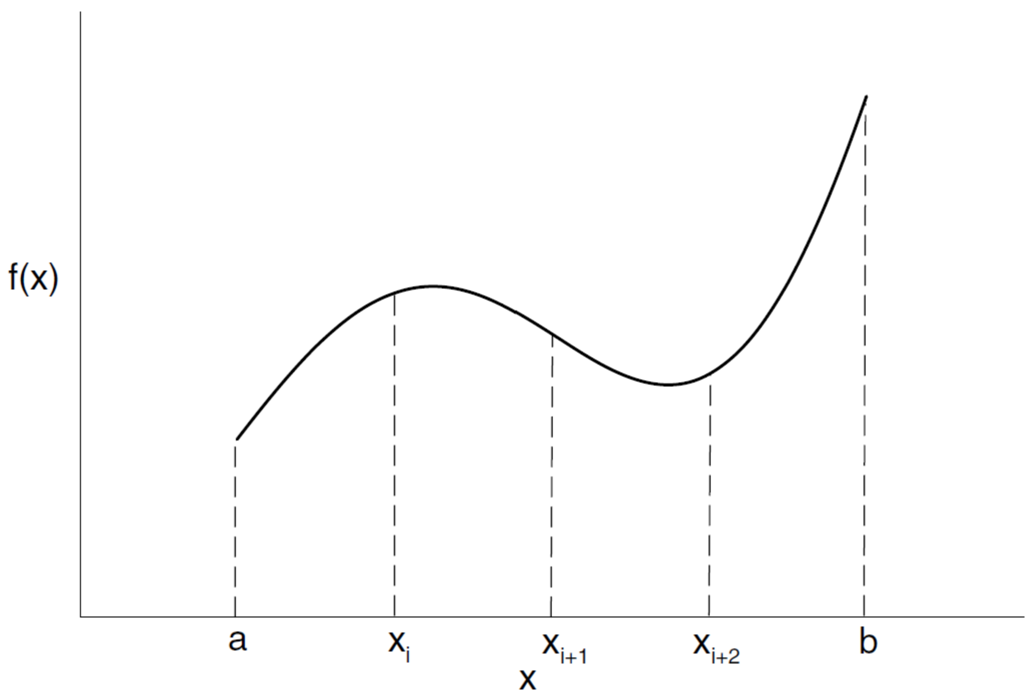
في الوقت إذا كانت درجة المتعدد الحدود مرتفعة. يثبت أن طريقة Horner هي أمثل وهي الطريقة الوحيدة الأمثل. توسيع قاعدة Horner إلى أنظمة متعددة الحدود أو متعددة الحدود هو أيضًا أمثل.

التكامل العددي

تتطلب التكامل لوظيفة بعض الدهاء للقيام به تحليليًا، ولكنها نسبياً مباشرة على الكمبيوتر. طريقة تقدير التكامل العددي بواسطة اليد هي أخذ قطعة من الورق الرسم البياني وعدد عدد الصناديق أو المتوازيات الموجودة تحت منحنى الدالة المتكاملة.

لهذا السبب، يُطلق على التكامل العددي أيضًا تكامل الربع، حتى عندما يصبح أكثر تعقيدًا من عملية عد الصناديق البسيطة. التعريف الريماني للتكامل هو حد المجموع على الصناديق بينما يقترب عرض الصندوق h من الصفر:

$$\int_a^b f(x)dx = \lim_{h\to 0}\left(h\sum_{i=1}^{(b-a)/h} f(x_i)\right)$$



شكل 1.2: التكامل $\int_a^b f(x)dx$ هو المساحة تحت منحنى $f(x)$ من a إلى b. هنا نقسم المنطقة إلى أربع مناطق من نفس العرض.

التكامل العددي لدالة $f(x)$ يتم تقديره كما يُعادل مجموع محدود على صناديق من ارتفاع $f(x)$ وعرض w_i:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{N} w_i f(x_i)$$

وهو مشابه للتعريف الريماني (5.2)، باستثناء أنه لا يوجد حد لحجم الصندوق اللامتناهي. المعادلة (5.3) هي الشكل القياسي لجميع خوارزميات التكامل؛ يتم تقييم الدالة $f(x)$ في N نقطة في الفترة $[a،b]$، ويتم جمع قيم الدالة $f_i = f(x_i)$ مع كل عنصر في المجموع موزون ب w_i. على الرغم من أن المجموع في (5.3) بشكل عام سيعطي التكامل الدقيق فقط عندما يقترب $N \to \infty$، إلا أنه قد يكون دقيقًا للمتعددات فقط N. تختلف الخوارزميات المختلفة للتكامل في طرق مختلفة لاختيار النقاط والأوزان. عمومًا، يزيد الدقة كلما زاد N، مع تحديد الخطأ العددي في نهاية المطاف الزيادة. لأن "أفضل" تقريب يعتمد على السلوك الخاص لـ $f(x)$، فإنه لا يوجد تقريب جيد عالميًا. في الواقع، يقوم بعض مخططات التكامل الآلي الموجودة في مكتبات البرامج الفرعية بالتبديل من طريقة إلى أخرى حتى يجدوا واحدة تعمل بشكل جيد.

بشكل عام، يجب عدم محاولة التكامل العددي لدالة متكاملة تحتوي على نقطة منعطف دون إزالة النقطة المنعطفية يدويًا أولاً. قد تكون قادرًا على القيام بذلك ببساطة جدًا عن طريق تقسيم الفترة إلى عدة فترات فرعية، بحيث تكون النقطة المنعطفية في نقطة نهاية حيث لا تسقط نقطة Gauss أبدًا، أو عن طريق تغيير المتغير:

$$\int_{-1}^{1} f(|x|)dx = \int_{-1}^{0} f(-x)dx + \int_{0}^{1} f(x)dx$$

$$\int_{0}^{1} x^{1/3}dx = \int_{0}^{1} 3y^3 dy \quad (y = x^{1/3})$$

$$\int_{0}^{1} \frac{f(x)}{\sqrt{1-x^2}}dx = 2\int_{0}^{1} \frac{f(1-y^2)}{\sqrt{2-y^2}}dy \quad (y^2 = 1-x)$$

بالمثل، إذا كان لديك دالة متكاملة تتغير ببطء شديد في منطقة ما، فيمكنك تسريع التكامل عن طريق التبديل إلى متغير يضغط تلك المنطقة ويضع قليلًا من النقاط هناك. على العكس، إذا كانت لديك دالة متكاملة تتغير بسرعة شديدة في منطقة ما، فقد ترغب في تغيير المتغيرات التي توسع تلك المنطقة لضمان عدم فوات الأرباح.

طريقة شبه المنحرف

قواعد التكامل باستخدام الإسطوانة وقاعدة سيمبسون تستخدم قيم $f(x)$ في قيم x متساوية الانتشار. تستخدم N نقطة x_i $(i = 1, N)$ بتساوي في مسافة h بعيدة عن بعضها البعض في جميع أنحاء منطقة التكامل $[a،b]$ وتشمل النقاط النهائية. هذا يعني أن هناك $N - 1$ فترة طولها h:

$$h = \frac{b-a}{N-1} \quad x_i = a + (i-1)h \quad i = 1, \dots, N$$

لاحظ أننا نبدأ عدادنا عند $i = 1$، وأن قاعدة سيمبسون تتطلب عددًا فرديًا من النقاط N.

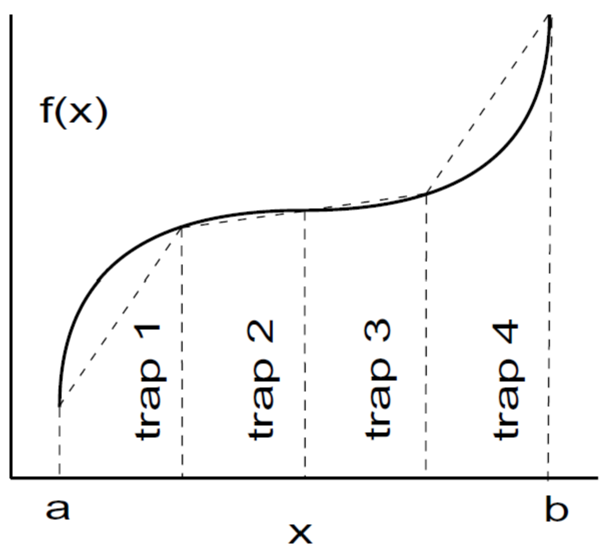


Fig. 5.2 المقاطع المستقيمة المستخدمة لقاعدة الإسطوانة.

تأخذ قاعدة الإسطوانة فترة التكامل i وتنشئ إسطوانة عرضها h فيها (الشكل 5.2). هذا يقرب $f(x)$ بخط مستقيم في ذلك الفترة i، ويستخدم الارتفاع المتوسط $(f_i + f_{i+1})/2$ كقيمة لـ f. مساحة إسطوانة واحدة هي بهذه الطريقة

$$\int_{x_i}^{x_i+h} f(x)dx \approx h\frac{(f_i + f_{i+1})}{2}$$

لتطبيق قاعدة الإسطوانة على المنطقة الكاملة [a، b]، نضيف المساهمات من كل فترة فرعية:

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{h}{2}f_1 + hf_2 + hf_3 + \cdots + hf_{N-1} + \frac{h}{2}f_N$$

ستلاحظ أنه نظرًا لأن كل نقطة داخلية تُحسب مرتين، فإن لها وزن h، في حين تحسب النقاط النهائية مرة واحدة فقط وبالتالي تحتوي على أوزان قدرها فقط $h/2$.

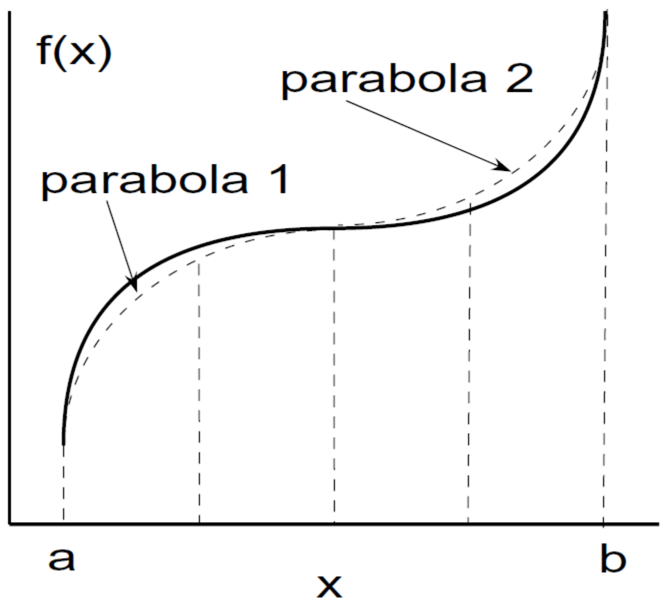
في القائمة 5.1 نقدم تنفيذًا بسيطًا لقاعدة الإسطوانة.

القائمة 5.1: يقوم البرنامج Trap بتكامل الدالة $f(t) = t^2$ عبر قاعدة الإسطوانة. لاحظ كيف تعتمد حجم الخطوة h على الفترة وكيف يتم تعيين أوزان النقاط النهائية.

```
PROGRAM Trap
  IMPLICIT NONE
  REAL :: A, B, h, sum, t, w
  INTEGER :: N, i
  ! Déclaration des constantes
  REAL, PARAMETER :: A = 0.0, B = 3.0
  INTEGER, PARAMETER :: N = 100
  ! Calcul de l'incrément h
  h = (B - A) / REAL(N - 1)
  ! Initialisation de la somme
  sum = 0.0
  ! Règle du trapèze
  DO i = 1, N
    t = A + REAL(i - 1) * h
    IF (i == 1 .OR. i == N) THEN
      w = h / 2.0
    ELSE
      w = h
    END IF
    sum = sum + w * t * t
  END DO
  ! Affichage du résultat
```

```
  PRINT *, sum
END PROGRAM Trap
```

طريقة سمبسون



الشكل 5.3 قطعان مكافئان مستخدمان في قاعدة سمبسون.

عند كل فترة، تقرب قاعدة سيمبسون الدالة $f(x)$ بواسطة قوس قزحي (الشكل 5.3):

$$f(x) \approx ax^2 + bx + c$$

مع الفترات ما زالت متساوية الانتشار. مساحة كل قسم بالتالي هي التكامل من هذا القوس القزحي

$$\int_{x_i-h}^{x_i+h} f(x)dx = \frac{2}{3}h\left(3c + 3bx_i + a(h^2 + 3x_i)\right)$$

ولكن نلاحظ أن

$$f_{i-1} = f(x_i - h) = a(x_i - h)^2 + b(x_i - h) + c;$$

$$f_i = f(x_i) = ax_i^2 + bx_i + c;$$
$$f_{i+1} = f(x_i + h) = a(x_i + h)^2 + b(x_i + h) + c$$

بالتالي

$$a = \frac{f_{i-1} - 2f_i + f_{i+1}}{2h^2}$$
$$b = \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h} - 2x_i a$$
$$c = f_i - x_i b - x_i^2 a$$

بهذه الطريقة يمكننا التعبير عن التكامل كمجموع مرجح على قيم الدالة في ثلاث نقاط:

$$\int_{x_i-h}^{x_i+h} f(x)dx \approx \frac{h}{3}(f_{i-1} + 4f_i + f_{i+1})$$

تتطلب قاعدة سيمبسون التكامل البسيط لتكون على أزواج من الفترات، مما يتطلب بدوره أن يكون إجمالي عدد الفترات زوجيًا أو أن يكون عدد النقاط N فرديًا. من أجل تطبيق قاعدة سيمبسون على الفترة بأكملها، نضيف المساهمات من كل زوج من الفترات الفرعية، معددة كل نقطة نهائية ما عدا الأولى والأخيرة مرتين:

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{h}{3}f_1 + \frac{4h}{3}f_2 + \frac{2h}{3}f_3 + \frac{4h}{3}f_4 + \cdots + \frac{4h}{3}f_{N-1} + \frac{h}{3}f_N$$

تذكر أن عدد النقاط N يجب أن يكون فرديًا لقاعدة سيمبسون.

```
program Simpson_Integration
   implicit none
   integer :: n
   real :: a, b, h, x, integral
   real, dimension(:), allocatable :: f
   ! Définir les bornes de l'intégrale
   a = 0.0
   b = 1.0
   ! Nombre de sous-intervalles
   n = 100
   ! Calcul de la largeur de chaque sous-intervalle
   h = (b - a) / real(n)
```

```
    ! Allouer de la mémoire pour stocker les valeurs de la fonction
    allocate(f(0:n))
    ! Remplir le tableau des valeurs de la fonction
    do i = 0, n
       x = a + real(i) * h
       f(i) = my_function(x)
    end do
    ! Calcul de l'intégrale par la méthode de Simpson
    integral = f(0) + f(n)
    do i = 1, n-1, 2
       integral = integral + 4.0 * f(i)
    end do
    do i = 2, n-2, 2
       integral = integral + 2.0 * f(i)
    end do
    integral = integral * h / 3.0
    ! Affichage du résultat
    print *, "L'intégrale de la fonction entre ", a, " et ", b, " est : ", integral
    ! Libérer la mémoire allouée
    deallocate(f)
contains
    ! Définir la fonction à intégrer
    real function my_function(x)
       real, intent(in) :: x
       ! Remplacer ceci par votre fonction
       my_function = x**2
    end function my_function
end program Simpson_Integration
```

طريقة رومبرغ

تستخدم طريقة رومبرغ التقريب الريتشاردسوني من 2^n تطبيقًا لطريقة المنطقة. لنكن $(A_{n,0})$ تقييمات الانتساب من خلال طريقة المنطقة:

$$A_{0,0} = \frac{b-a}{2}\big(f(a)+f(b)\big)$$

$$A_{n,0} = \frac{1}{2}A_{n-1,0} + \frac{b-a}{2^n}\sum_{k=0}^{2^{n-1}-1} f\left(a+(2k+1)\frac{b-a}{2^n}\right) \quad ; n \geq 1$$

على نحو متزايد، نحدد القيم المستترة بالتالي

$$A_{n,l} = \frac{4^l A_{n,l-1} + A_{n-1,l-1}}{4^l - 1}$$

عندما يتجه n نحو اللانهاية، نحصل على

$$A_{n,l} = \int_a^b f(x)dx + O\big(4^{-n(l+1)}\big)$$

```
program Romberg_Integration
    implicit none
    integer, parameter :: max_iter = 10
    real :: a, b, integral
    real, dimension(max_iter, max_iter) :: romberg_table
    ! Définir les bornes de l'intégrale
    a = 0.0
    b = 1.0
    ! Initialiser la table de Romberg
    romberg_table = 0.0
    ! Appel à la fonction de calcul de l'intégrale par la méthode de Romberg
    call romberg(a, b, integral, romberg_table)
    ! Affichage du résultat
    print *, "L'intégrale de la fonction entre ", a, " et ", b, " est : ", integral
contains
    subroutine romberg(a, b, integral, table)
        real, intent(in) :: a, b
```

```
    real, intent(out) :: integral
    real, dimension(:,:) :: table
    real :: h, x, sum
    integer :: i, j, k
    ! Calculer la première ligne de la table (Méthode des Trapèzes)
    h = b - a
    table(1,1) = h / 2.0 * (my_function(a) + my_function(b))
    ! Calculer les lignes suivantes de la table (Méthode de Richardson)
    do i = 2, max_iter
      h = h / 2.0
      sum = 0.0
      do k = 1, 2**(i-2)
        x = a + (2*k - 1) * h
        sum = sum + my_function(x)
      end do
      table(i,1) = 0.5 * table(i-1,1) + h * sum
      do j = 2, i
        table(i,j) = table(i,j-1) + (table(i,j-1) - table(i-1,j-1)) / (4.0**(j-1) - 1.0)
      end do
    end do
    ! L'intégrale est dans la dernière entrée de la dernière ligne de la table
    integral = table(max_iter,max_iter)
  end subroutine romberg
  ! Définir la fonction à intégrer
  real function my_function(x)
    real, intent(in) :: x
    ! Remplacer ceci par votre fonction
    my_function = x**2
  end function my_function
end program Romberg_Integration
```

4.8 طرق التربيع الغاوسي

تستخدم أساليب كارل فريدريش غاوس (1777–1855) تقسيمًا فرعيًا خاصًا للنقاط x_j، وهي فروع لعائلة متعددة الأوجه متعامدة، والتي لا تكون مسافات منتظمة، على عكس الأساليب المركبة. يتم تقريب وظيفة التكامل من خلال استيفاء Lagrange على النقاط x_j. طرق Gauss هي الأساليب الأكثر تفصيلاً والأكثر دقة، حيث يكون التكامل دقيقًا لجميع حدود الدرجة الأدنى أو تساوي $2n+1$ (بدلاً من n أو $n+1$ في الطرق المركبة). لذلك (Ψ_n) عائلة من متعددات متعامدة لوظيفة $\omega(x)$على الفاصل الزمني $[u,v]$

Cherchons لشرح التكامل $\int_a^b f(x)\omega(x)dx$ كتابة الوظيفة f باستخدام صيغة Lagrange :

$$f(x)=\sum_{i=0}^{n} L_i(x)f(x_i)+\prod_{i=0}^{n}(x-x_i)\frac{f^{(n+1)}(c)}{(n+1)!}$$

حيث $c\in[u,v]$ و

$$L_i(x)=\prod_{\substack{j=0\\ j\neq i}}^{n}\frac{x-x_j}{x_i-x_j}$$

إذا كانت (Ψ_n) هي أساس متعددات الحدود المتعامدة لدالة الوزن $\omega(x)$، فلدينا

$$\int_u^v \Psi_n(x)\Psi_n(x)\omega(x)dx=0\ \ si\, n\neq m$$

دعونا نطور المنتج على هذا الأساس

$$\prod_{i=0}^{n}(x-x_i)=\sum_{i=0}^{n+1} a_i\Psi_i(x)$$

وإذا كانت f متعددة الحدود من الدرجة $(2n\ +\ 1)$، فلنلاحظ ذلك

$$Q_n(x)=\frac{f^{(n+1)}(x)}{(n+1)!}=\sum_{i=0}^{n} b_i\Psi_i(x)$$

والباقي يعبر عنه

$$R_n(x) = \prod_{i=0}^{n}(x - x_i)\frac{f^{(n+1)}(x)}{(n+1)!}$$

أي

$$R_n(x) = \sum_{i=0}^{n}\sum_{j=0}^{n} a_i b_i \Psi_i(x)\Psi_j(x) + a_{n+1}\sum_{i=0}^{n} b_i \Psi_i(x)\Psi_{n+1}(x)$$

وبالتالي عن طريق التكامل

$$\int_u^v f(x)\omega(x)dx = \sum_{i=0}^{n} f(x_i)\int_u^v L_i(x)\omega(x)dx + \int_u^v R_n(x)\omega(x)dx + \varepsilon$$

إما بحكم تعامد كثيرات الحدود

$$\int_u^v R_n(x)\omega(x)dx = \sum_{i=0}^{n}\sum_{j=0}^{n} a_i b_i \int_u^v \Psi_i(x)\Psi_j(x)\omega(x)dx + a_{n+1}\sum_{i=0}^{n} b_i \int_u^v \Psi_i(x)\Psi_{n+1}(x)\omega(x)dx$$

إذن:

$$\int_u^v R_n(x)\omega(x)dx = \sum_{i=0}^{n} a_i b_i \int_u^v \Psi_i^2(x)\omega(x)dx$$

باختيار النقاط (x_j) للتقسيم الفرعي كجذور $(n+1)$ لكثيرة الحدود من الدرجة $n+1$، فإننا نفرض $a_i =$ 0، لـ $i = 0.1, \dots, n$ و $0 \neq a_{n+1}$ وهذا يعني

$$\prod_{i=0}^{n}(x - x_i) = a_{n+1}\Psi_{n+1}(x)$$

ومنه

$$\int_u^v R_n(x)\omega(x)dx = 0$$

وبالتالي، فإن الطريقة الغوسية المطبقة على الدالة f تؤدي إلى تقريب النموذج

$$\int_u^v f(x)\omega(x)dx = \sum_{i=0}^{n} f(x_i)w_i + \varepsilon$$

حيث:

$$w_i = \int_u^v L_i(x)\omega(x)dx$$

الخطأ من الشكل $\varepsilon = \varepsilon_n f^{(2n+2)}(c)$ حيث يعتمد ε_n على اختيار كثيرات الحدود المتعامدة (Ψ_n).

4.9 التكامل غاوس ليجندر

تكامل Gauss–Legendre هو طريقة لتقريب تكامل دالة خلال فترة زمنية معينة. عندما تكون عائلة كثيرات الحدود المتعامدة المستخدمة هي عائلة كثيرات الحدود الأسطورية، المتعلقة بدالة الترجيح $w(x) = 1$ على الفاصل الزمني [−1, 1]، يتم تقريب التكامل بواسطة الصيغة:

$$\int_{-1}^{1} f(x)\ dx \approx \sum_{i=0}^{n} w_i \cdot f(x_i) +$$

حيث w_i هي الأوزان المقابلة و x_i هي حدود Gauss–Legendre.

حساب الأوزان

يتم تحديد الأوزان w_i بالصيغة التالية:

$$w_i = \sum_{j=0}^{n} \left(\frac{x_i - x_j}{x_i - x_j}\right) \cdot f(x_j)$$

حساب الإحداثيات

إحداثيات x_i هي جذور كثيرة حدود Legendre P_{n+1}.

خطأ تقريبي

يتم إعطاء خطأ التقريب بواسطة:

$$\varepsilon = \frac{2^{2n+3} \cdot (n+1)!^4}{(2n+3) \cdot (2n+2)!^3} \cdot \left(\frac{2n+2}{2n+3}\right) \cdot (b-a)$$

حيث n هي درجة كثيرة الحدود Legendre المستخدمة للتقريب و a, b هي حدود فترة التكامل.

تعتبر طريقة التكامل هذه دقيقة بشكل خاص للوظائف المستمرة خلال فترة زمنية معينة.

مثال 1: $n = 1$

بالنسبة إلى $n = 1$ ، فإن علاقة التكرار التي تحدد متعددات حدود Legendre تعطي $P_2(x) =$ $(3x^2 - 1)/2$. يعترف كثير الحدود هذا بجذرين $x_0 = -\frac{1}{\sqrt{3}}$ و $x_1 = \frac{1}{\sqrt{3}}$، مما يحدد التقسيم الفرعي للأساس فاصلة.

ويتم استنتاج القيم w_i من هذا. يتم حساب القيمة الأولى بواسطة:

$$w_0 = \int_{-1}^{1} \frac{x - x_1}{x_0 - x_1}\, dx = \int_{-1}^{1} \frac{x + \frac{1}{\sqrt{3}}}{2\sqrt{3}}\, dx = 1$$

وبنفس الطريقة نبين أن $w_1 = 1$. التكامل يقلل إلى:

$$\int_{-1}^{1} f(x)\, dx \approx f\left(-\frac{1}{\sqrt{3}}\right) + f\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right)$$

يؤدي تغيير المتغيرات $\xi = (\epsilon + \delta)/2 + (\epsilon - \delta)x/\sqrt{3}$ إلى تقريب التكامل:

$$\int_{\delta}^{\epsilon} f(x)\, dx \approx \frac{\epsilon - \delta}{2}\left[f\left(\frac{\epsilon + \delta}{2} - \frac{\epsilon - \delta}{2\sqrt{3}}\right) + f\left(\frac{\epsilon + \delta}{2} + \frac{\epsilon - \delta}{2\sqrt{3}}\right)\right]$$

مثال 2: $n = 2$

بالنسبة إلى $n = 2$ ، فإن كثيرة الحدود $P_3(x)$ لها ثلاثة جذور، $x_0 = -\sqrt{\frac{3}{5}}$، $x_1 = 0$ و $x_2 = \sqrt{\frac{3}{5}}$. حساب القيم w_i يؤدي إلى تقريب التكامل:

$$\int_{-1}^{1} f(x)\ dx \approx \frac{5}{9} f\left(-\sqrt{3/5}\right) + \frac{8}{9} f(0) + \frac{5}{9} f\left(\sqrt{3/5}\right)$$

4.10 تكامل غاوس–لاجير

كثيرات حدود Laguerre متعامدة على الفاصل الزمني $[0, \infty]$ بالنسبة إلى دالة الترجيح $\omega(x) = e^{-x}$ أنها تجعل من الممكن حساب تقريبي للتكامل:

$$\int_{0}^{\infty} f(x) e^{-x}\ dx \approx \sum_{\lambda=1}^{n} \omega_\lambda f(x_\lambda)$$

يتم إعطاء الخطأ بواسطة:

$$\varepsilon = \frac{(n+1)!^2}{(2n+2)!} \cdot \frac{1}{n+2} \cdot \omega(n)$$

مثال لـ $n = 1$

بالنسبة إلى $n = 1$ ، فإن كثيرة الحدود $L_2(x) = x^2 - 4x + 2$ لها جذرين $x_0 = 2 - \sqrt{2}$ و $x_1 = 2 + \sqrt{2}$. قيم ω_λ هي $\omega_0 = \frac{2+\sqrt{2}}{4}$ و $\omega_1 = \frac{2-\sqrt{2}}{4}$. ومن هنا التقريب:

$$\int_{0}^{\infty} f(x) e^{-x}\ dx \approx \frac{2+\sqrt{2}}{4} f\left(2-\sqrt{2}\right) + \frac{2-\sqrt{2}}{4} f\left(2+\sqrt{2}\right)$$

4.11 تكامل غاوس–تشيبيشيف

تشكل كثيرات حدود تشيبيشيف أساسًا متعامدًا على الفترة $[-1, 1]$ فيما يتعلق بوظيفة الترجيح $\omega(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$. جذور كثيرة حدود تشيبيشيف T_{n+1} من الدرجة $n + 1$ تُعطى بواسطة:

$$x_\lambda = \cos\left(\frac{\pi(2\lambda+1)}{2(n+1)}\right)$$

القيم w_λ لها، في هذه الحالة، تعبير تحليلي عام $w_\lambda = \frac{\pi}{n+1}$.

تسمح لنا كثيرات حدود تشيبيشيف بحساب تقريبي للتكامل:

$$\int_{-1}^{1} f(x)\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}\,dx \approx \sum_{\lambda=1}^{n} w_\lambda f(s_\lambda)$$

يتم إعطاء الخطأ بواسطة:

$$\varepsilon = \frac{2}{2^{2n+2}(2n+2)!}\cdot\frac{1}{n+1}\cdot\omega(\theta)$$

مثال لـ $n = 1$

بالنسبة إلى $n = 1$ ، فإن كثيرة الحدود من الدرجة الثانية $T_2(x) = 2x^2 - 1$ لها جذرين $x_0 = \frac{1}{\sqrt{2}}$ و $x_1 = -\frac{1}{\sqrt{2}}$. تؤدي القيم $w_0 = w_1 = \frac{\pi}{2}$ إلى التقريب:

$$\int_{-1}^{1} f(x)\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}\,dx \approx \frac{\pi}{2}\left(f\left(-\frac{1}{\sqrt{2}}\right)+f\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)\right)$$

تعتبر طريقة التكامل هذه مفيدة للتكاملات في الفترة $[-1، 1]$، خاصة في المسائل التي تظهر فيها المتفردات في نهايات هذه الفترة. إنه يوفر دقة جيدة لعدد صغير نسبيًا من نقاط التقييم.

4.12 تكامل جاوس هيرميت

تشكل كثيرات الحدود هيرميت أساسًا متعامدًا على الفاصل الزمني $]-\infty, +\infty[$ فيما يتعلق بدالة الترجيح $\omega(x) = e^{-x^2}$. أنها تجعل من الممكن حساب تقريبي للتكامل:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x) e^{-x^2} \; dx \approx \sum_{\lambda=1}^{n} \omega_\lambda f(x_\lambda)$$

يتم إعطاء الخطأ بواسطة:

$$\epsilon = \frac{(n+1)! \cdot \sigma \cdot \sqrt{\pi}}{2^{2n+1}(2n+2)!} \cdot \frac{1}{n+1} \cdot \omega(\theta)$$

مثال لـ $n = 1$

بالنسبة إلى $n = 1$ ، فإن كثيرة الحدود هيرميت $H_2(x) = 4x^2 - 2$ لها جذرين $x_0 = -\frac{1}{\sqrt{2}}$ و $x_1 = -\frac{1}{\sqrt{2}}$. تؤدي القيم $\omega_0 = \omega_1 = \frac{\sigma \cdot \sqrt{\pi}}{2}$ إلى التقريب التالي:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x) e^{-x^2} \; dx \approx \frac{\sigma \cdot \sqrt{\pi}}{2} \left(f\left(-\frac{1}{\sqrt{2}}\right) + f\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right) \right)$$

تعتبر طريقة التكامل هذه مفيدة بشكل خاص للتكاملات على الفاصل الزمني $]-\infty, +\infty[$، خاصة في المسائل التي تتناقص فيها الدالة المراد تكاملها بشكل كبير في نهايات الفاصل الزمني. إنه يوفر دقة جيدة لعدد صغير نسبيًا من نقاط التقييم.

التفاضل العددي

ربما قمت بأداء جيد في دورتك الأولى للتفاضل والتكامل وتشعر بالكفاءة في أخذ المشتقات. ومع ذلك، من المحتمل أنك لم تأخذ مشتقات لجدول من الأرقام باستخدام التعريف الأساسي:

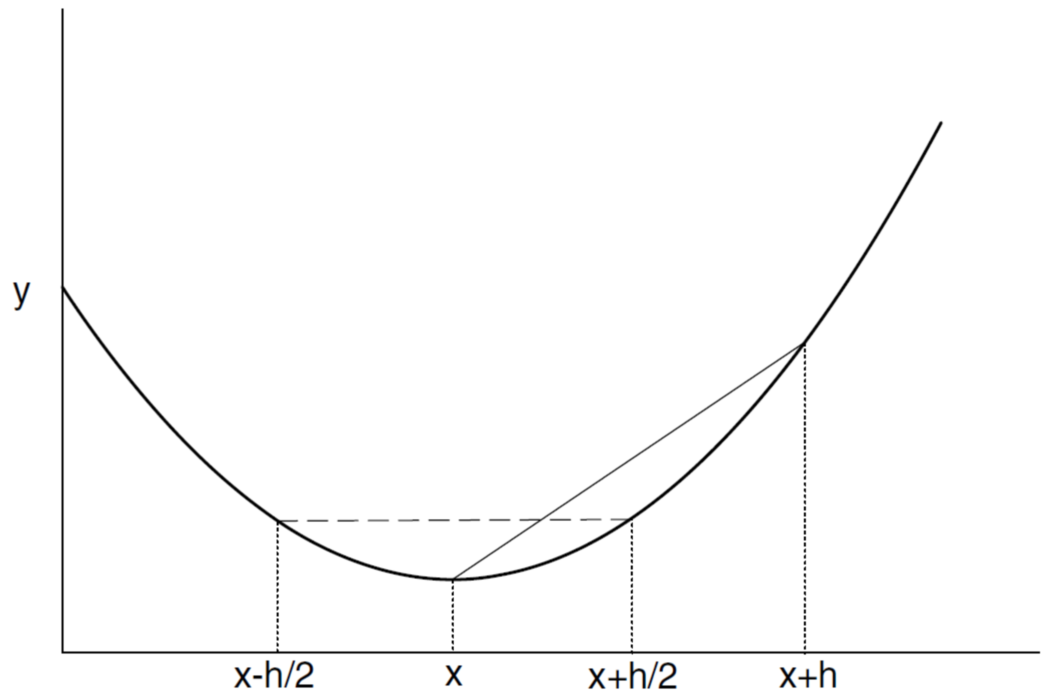
$$\frac{df(x)}{dx} \equiv \lim_{h\to 0} \frac{f(x+h)-f(x)}{h}$$

في الواقع، حتى الكمبيوتر يواجه أخطاء مع هذا النوع من الحدود لأنه مليء بالإلغاء الطردي؛ طول كلمة الكمبيوتر المحدود يجعل البسط يتذبذب بين الصفر ودقة الجهاز m عندما يقترب المقام من الصفر.

الفرق المتقدم (Forward Difference)

أكثر الطرق مباشرة للتفاضل العددي لدالة تبدأ بتوسيعها في سلسلة تايلور. تقدم هذه السلسلة الدالة خطوة واحدة صغيرة إلى الأمام:

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) + \frac{h^3}{6}f^{(3)}(x) + \cdots$$



شكل 1.3 تقريب الفرق المتقدم (خط متصل) وتقريب الفرق المركزي (خط متقطع) للمشتقة الأولى العددية في النقطة x. يُلاحظ أن الفرق المركزي يعتبر أدق.

تُستخدم الحجم (h) كحجم للخطوة (راجع الشكل 1.3). نحصل على خوارزمية التقريب للمشتقة بالفرق المتقدم عن طريق حل المعادلة للحصول على $f'(x)$:

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h} = f'(x) + \frac{h}{2}f''(x) + \cdots$$

يمكنك التفكير في هذا التقريب على أنه استخدام نقطتين لتمثيل الدالة بخط مستقيم في الفترة من x إلى $x + h$.

يتناسب الخطأ في التقريب السابق بشكل متناسب مع h ما لم يرجم الله لك بنعمته ويجعل f'' تختفي.

يمكننا جعل خطأ التقريب أصغر وأصغر عن طريق جعل h أصغر وأصغر. ومع ذلك، لفترة زمنية قصيرة جدًا، ستضيع الدقة بسبب الإلغاء الطردي في الجهة اليسرى للمعادلة (3.3)، وسيصبح خطأ التقريب المنخفض غير ذو أهمية. كحالة مثالية، لنفرض $f(x) = a + bx^2$. المشتقة الدقيقة هي $f'(x) = 2bx$، بينما المشتقة المحسوبة هي:

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h} = 2bx + bh$$

هذا بوضوح يصبح تقريبًا جيدًا فقط لقيم صغيرة من h $(h \ll 2x)$.

تقديم الخوارزمية للتفاضل بالفرق المركزي:

تقدم تقريب محسّن للمشتقة يبدأ باستخدام التعريف الأساسي (6.1). بدلاً من القيام بخطوة واحدة للأمام بحجم h ، نقوم بتشكيل فرق مركزي عن طريق القيام بخطوة إلى الأمام بحجم $h/2$ وإلى الخلف بحجم $h/2$ (راجع الشكل 6.1):

$$f'(x)_{cd} = \frac{f(x+h/2) - f(x-h/2)}{h} = D_{cd} f(x,h)$$

حيث نستخدم الرمز D_{cd} للفرق المركزي. عند استبدال سلسلة تايلور لـ $f(x \pm h/2)$ في المعادلة (6.5)، نحصل على:

$$f'(x)_{cd} \approx f'(x) + \frac{1}{24} h^2 f^{(3)}(x) + \cdots$$

الفارق المهم من (6.3) هو أنه عندما يُطرح $f(x - h/2)$ من $f(x + h/2)$، تُلغى جميع المصطلحات التي تحتوي على قوة فردية لـ h في سلسلة تايلور. لذلك، تصبح خوارزمية الفرق المركزي دقيقة بدرجة أعلى

في h، أي h^2. إذا كانت الدالة متسامحة، أي إذا كان $f^{(2)}h/2 \ll f^{(3)}h^2/24$ ، فمن الممكن أن تكون الخطأ مع طريقة الفرق المركزي أقل من طريقة الفرق المتقدم (6.3).

إذا عدنا الآن إلى مثال الدالة التربيعية (6.4)، نجد أن الفرق المركزي يُعطي الإجابة الدقيقة بغض النظر عن h :

$$f'(x)_{cd} \approx \frac{f(x+h/2)-f(x-h/2)}{h} = 2bx$$

طريقة الفرق المتطرفة:

نظرًا لأن قاعدة التفاضل المعتمدة على الاحتفاظ بعدد معين من المصطلحات في سلسلة تايلور توفر أيضًا تعبيرًا عن الخطأ (المصطلحات غير المدرجة)، يمكننا محاولة تقليل الخطأ بكوننا ذكيين. بينما يجعل الفرق المركزي (6.5) المصطلح الخاص بالخطأ يتناسب مع h يختفي، يمكننا أيضًا جعل المصطلح المتناسب مع h^2 يختفي أيضًا عن طريق التكامل الجبري من h الكبير نسبيًا، وبالتالي خطأ تقريبي لـ $h \to 0$:

$$f'(x)_{ed} = \lim_{h\to 0} D_{cd}\, f(x,h)$$

نقدم المعلومات الإضافية المطلوبة عن طريق تشكيل الفرق المركزي بحجم $h/2$:

$$D_{ed}f(x,h/2) = \frac{f(x+h/4)-f(x-h/4)}{h/2}$$

$$\approx f'(x) + \frac{h^2 f^{(3)}(x)}{96} + \cdots$$

الآن نقوم بالتخلص من المصطلح التربيعي للخطأ وكذلك المصطلح الخطي في المعادلة (6.6) عن طريق تشكيل التالي:

$$f'(x)_{ed} = \frac{4D_{cd}f(x, h/2) - D_{cd}f(x, h)}{3}$$
$$\approx f'(x) - \frac{h^4 f^{(5)}(x)}{4 \times 16 \times 120} + \cdots$$

إذا كانت $h = 0.4$ و $f^{(5)} \leq 1$ ، فإن هناك مكان واحد فقط للخطأ المتراكم وأن خطأ القص العددي يقارب الدقة الآلية m ؛ هذا هو الأفضل ما يمكنك أن تأمله.

طريقة جيدة لحساب (6.11) هو تجميع المصطلحات كما يلي:

$$f'(x)_{ed} = \frac{1}{3h}\left(8\left[f\left(x + \frac{h}{4}\right) - f\left(x - \frac{h}{4}\right)\right] - \left[f\left(x + \frac{h}{2}\right) - f\left(x - \frac{h}{2}\right)\right]\right)$$

الفائدة من (6.13) هي أنه قد يقلل من فقدان الدقة الذي يحدث عندما يتم إضافة أرقام كبيرة وصغيرة معًا، ثم يتم طرحها من أرقام كبيرة أخرى؛ من الأفضل أن نطرح الأرقام الكبيرة أولاً من بعضها البعض ثم نضيف الفارق إلى الأرقام الصغيرة.

عند العمل مع هذه الطرق وطرق أعلى الرتبة المشابهة، من المهم أن نتذكر أنه في حين قد تعمل على النحو المصمم له للدوال المتسلسلة بشكل جيد، قد تفشل بشكل سيء للغاية في الدوال التي تحتوي على ضوضاء، كما قد يكون الناتج عن الحوسبة أو القياسات. إذا كانت الضوضاء كبيرة، قد يكون من الأفضل أن نقوم أولاً بتناسب البيانات ببعض الدوال التحليلية باستخدام تقنيات الفصل 8 ومن ثم نقوم بتفاضل التناسب.

بغض النظر عن الخوارزمية، النقطة المهمة التي يجب تذكرها هي أن تقييم المشتقة لـ $f(x)$ في x يتطلب منك معرفة قيم f المحيطة بـ x . سنستخدم هذه الفكرة نفسها عندما نقوم بحل المعادلات التفاضلية العادية والجزئية.

المصفوفات

1. حلول جملة المعادلات الخطية

تعتبر المعادلات الخطية في الرياضيات والفيزياء مهمة ولها عدة تطبيقات أساسية. لذلك فمن المهم التطرق لها ومعرفة أهم الخوارزميات المستخدمة في ذلك وانجار تطبيقات بواسطة لغة الفورتران. كذلك سوف نتطرق لأهم العمليات المستخدمة في المصفوفات ومنها محدد مصفوفة والمصفوفة العكسية.

1.1. حلول المعدلات الخطية من الشكل مثلثية سفلى

المصفوفة المثلثية السفلى هي كل مصفوفة عناصرها العلوية (ما فوق القطر) معدومة أي من الشكل

$$L=\begin{pmatrix} l_{1,1} & 0 & \dots & 0 \\ l_{2,1} & l_{2,2} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ l_{n,1} & l_{n,2} & \cdots & l_{n,n} \end{pmatrix} \qquad 1.1)$$

في هذا الجزء نبحث عن حلول المعادلات من الشكل $L.X=B$، حيث L تمثل المصفوفة المثلثية السفلى و X يمثل شعاع المجاهيل و B شعاع المساوات أي من الشكل:

$$\begin{pmatrix} l_{1,1} & 0 & \dots & 0 \\ l_{2,1} & l_{2,2} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ l_{n,1} & l_{n,2} & \cdots & l_{n,n} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} \qquad 1.2)$$

أو على شكل جملة معادلات

$$\begin{cases} l_{1,1}x_1=b_1 & (1) \\ l_{2,1}x_1+l_{2,2}x_2=b_2 & (2) \\ l_{3,1}x_1+l_{3,2}x_2+l_{3,3}x_3=b_3 & (3) \\ \vdots & \\ l_{p,1}x_1+l_{p,2}x_2+\cdots+l_{p,p}x_p=b_p & (p) \\ \vdots & \\ l_{n,1}x_1+l_{n,2}x_2+\cdots+l_{n,n}x_n=b_n & (n) \end{cases} \qquad 1.3)$$

حل جملة المعادلات (1.3) سهل حيث لدينا من المعادلة الأولى (1) أن:

$$x_1=b_1/l_{1,1} \qquad 1.4)$$

ومن المعادلة (2) لدينا أن:

$$x_2=\frac{1}{l_{2,2}}\left(b_2-l_{2,1}x_1\right) \qquad 1.5)$$

في المعادلة (1.5) لا نعوض قيمة x_1 لأنها قيمة معلومة من المساوات (1.4)

وهكذا من المعادلة (3) نجد كذلك أن:

$$x_3 = \frac{1}{l_{3,3}}\left(b_3 - l_{3,1}x_1 - l_{3,2}x_2\right) \qquad 1.6)$$

حيث في المعادلة (1.6) قيمتي x_1 و x_2 معلومتين من مما سبق في الحلين (1.4) و (1.5) على الترتيب.

وهكذا نستنتج أن حل المعادلة (p) على سبيل المثال هو من الشكل:

$$x_p = \frac{1}{l_{p,p}}\left(b_p - \sum_{i=1}^{p-1} l_{p,i}x_i\right) ; 2 \le p \le n \qquad 1.7)$$

ومنه فإن خوارزمية الحلول تكون من الشكل:

Do i=1,n

$x_i = b_i$

Do j=1,p−1

$x_i = x_i - L_{ij}x_i$

End Do

$x_i = x_i / L_{ii}$

End Do

2.1. حلول المعدلات الخطية من الشكل مثلثية علوية

المصفوفة المثلثية العلوية هي كل مصفوفة عناصرها السفلية (ما تحت القطر) معدومة أي من الشكل:

$$U = \begin{pmatrix} u_{1,1} & u_{1,2} & \dots & u_{1,n} \\ 0 & u_{2,2} & \cdots & u_{2,n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & u_{n,n} \end{pmatrix} \qquad 1.8)$$

نتطرق في هذا الجزء حول كيفية إيجاد حلول المعادلات من الشكل $UX = B$، حيث U تمثل مصفوفة مثلثية عليا و X يمثل شعاع المجاهيل و B شعاع المساوات أي من الشكل:

$$\begin{pmatrix} u_{1,1} & u_{1,2} & \dots & u_{1,n} \\ 0 & u_{2,2} & \cdots & u_{2,n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & u_{n,n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} \qquad 1.9)$$

أو على شكل جملة معادلات:

$$\begin{cases} u_{1,1}x_1 + u_{1,2}x_2 + \cdots + u_{1,n}x_n = b_1 & (1) \\ u_{2,2}x_2 + u_{2,3}x_3 + \cdots + u_{2,n}x_n = b_2 & (2) \\ \vdots \\ u_{p,p}x_p + u_{p,p+1}x_{p+1} + \cdots + u_{p,n}x_n = b_p & (p) \\ \vdots \\ u_{n-1,n-1}x_{n-1} + u_{n-1,n}x_n = b_{n-1} & (n-1) \\ u_{n,n}x_n = b_n & (n) \end{cases} \qquad .10)$$

حل جملة المعادلات (1.10) سهل حيث لدينا من المعادلة (n) أن الحل x_n هو

$$x_n = b_n/u_{n,n} \qquad .11)$$

ومن المعادلة (n−1) نجد كذلك الحل x_{n-1} من الشكل:

$$x_{n-1} = \frac{1}{u_{n-1,n-1}}\left(b_{n-1} - u_{n-1,n}x_n\right) \qquad .12)$$

كما نلاحظ في المعادلة (1.12) فإننا لا نقوم بتعويض قيمة x_n لأنها قيمة معلومة من (1.11)

وهكذا من المعادلة (p) نستنتج أن:

$$x_p = \frac{1}{u_{p,p}}\left(b_p - \sum_{i=p+1}^{n} u_{p,i}\, x_i\right) ;\ 1 \le p \le n-1 \qquad .13)$$

ومنه فخوارزمية الحلول تكون من الشكل:

Do i=n, $1,-1$

$x_i = b_i$

Do j=k+1,n

$x_i = x_i - u_{ij} x_j$

End Do

$x_i = x_i / u_{ii}$

End Do

التطبيق رقم 1 يمثل برنامج خاص بحلول المصفوفة المثلثية السفلى والعليا وبعض العمليات الابتدائية على المصفوفات.

3.1. حلول جملة المعادلات الخطية باستخدام طريقة حذف غوس

جملة المعادلات الخطية هي عبارة عن معادلات خطية ذات عدة مجاهيل x_i وتكتب على الشكل

$$\begin{cases} a_{1,1}x_1 + a_{1,2}x_2 + a_{1,3}x_3 + \cdots + a_{1,j}x_j + \cdots + a_{1,n}x_n = b_1 & (1) \\ a_{2,1}x_1 + a_{2,2}x_2 + a_{2,3}x_3 + \cdots + a_{2,j}x_j + \cdots + a_{2,n}x_n = b_2 & (2) \\ a_{3,1}x_1 + a_{3,2}x_2 + a_{3,3}x_3 + \cdots + a_{3,j}x_j + \cdots + a_{3,n}x_n = b_3 & (3) \\ \vdots & \\ a_{i,1}x_1 + a_{i,2}x_2 + a_{i,3}x_3 + \cdots + a_{i,j}x_j + \cdots + a_{i,n}x_n = b_i & (i) \\ \vdots & \\ a_{n,1}x_1 + a_{n,2}x_2 + a_{n,3}x_3 + \cdots + a_{n,j}x_j + \cdots + a_{n,n}x_n = b_n & (n) \end{cases} \quad .14)$$

يمكن كتابة جملة المعادلات الخطية (1.14) بالعبارة المصفوفية التالية

$$A.X = B \quad .15)$$

حيث A هي مصفوفة مربعة $n \times n$ تحوي العناصر $\left(a_{i,j}\right)_{\substack{1\le i\le n \\ 1\le j\le n}}$ و X يمثل شعاع المجاهيل

$x_i(1 \le i \le n)$ و B يمثل شعاع العناصر $b_i(1 \le i \le n)$.

الطريقة العادية لحل مثل هذه المعادلات هو تحويل جملة المعادلات (1.14) الى مثلثية عليا او سفلى. لذلك نقوم في كل مرة بتحويل عمود المصفوفة السفلي ل A الى الصفر.

في المرحلة الأولى $k=1$ نقوم بتحويل قيم العمود السفلي الأول الى الصفر وذلك بضرب المعادلة (1) من الجملة (1.14) في القيمة $\frac{-a_{i,1}}{a_{1,1}}$ ونجمع مع المعادلة (i). حيث $2 \le i \le n$ وبذلك فان جملة المعادلات (1.14) تتحول الى

$$\begin{cases} a_{1,1}x_1 + a_{1,2}x_2 + a_{1,3}x_3 + \cdots + a_{1,j}x_j + \cdots + a_{1,n}x_n = b_1 & (1) \\ 0x_1 + a_{2,2}^{(1)}x_2 + a_{2,3}^{(1)}x_3 + \cdots + a_{2,j}^{(1)}x_j + \cdots + a_{2,n}^{(1)}x_n = b_2^{(1)} & (2) \\ 0x_1 + a_{3,2}^{(1)}x_2 + a_{3,3}^{(1)}x_3 + \cdots + a_{3,j}^{(1)}x_j + \cdots + a_{3,n}^{(1)}x_n = b_3^{(1)} & (3) \\ \vdots & \\ 0x_1 + a_{i,2}^{(1)}x_2 + a_{i,3}^{(1)}x_3 + \cdots + a_{i,j}^{(1)}x_j + \cdots + a_{i,n}^{(1)}x_n = b_i^{(1)} & (i) \\ \vdots & \\ 0x_1 + a_{n,2}^{(1)}x_2 + a_{n,3}^{(1)}x_3 + \cdots + a_{n,j}^{(1)}x_j + \cdots + a_{n,n}^{(1)}x_n = b_n^{(1)} & (n) \end{cases} \quad .16)$$

حيث

$$\begin{cases} a_{i,j}^{(1)} = a_{i,j} - \frac{a_{i,1}}{a_{1,1}} a_{1,j} \\ b_i^{(1)} = b_i - \frac{a_{i,1}}{a_{1,1}} b_1 \end{cases} ; \begin{pmatrix} 2 \le i \le n \\ 2 \le j \le n \end{pmatrix} \quad .17)$$

نعيد نفس العملية مع العمود السفلي الثاني $k=2$. وذلك بضرب المعادلة رقم (2) من جملة المعادلات الخطية (1.16) في القيمة $\frac{-a_{i,2}^{(1)}}{a_{2,2}^{(1)}}$ ونجمع مع المعادلة (i). حـيث $3 \le i \le n$ وبذلك فان جملة المعادلات (1.16) تتحول الى جلمة المعادلات الخطية:

$$\begin{cases} a_{1,1}x_1 + a_{1,2}x_2 + a_{1,3}x_3 + \cdots + a_{1,j}x_j + \cdots + a_{1,n}x_n = b_1 & (1) \\ 0x_1 + a_{2,2}^{(1)}x_2 + a_{2,3}^{(1)}x_3 + \cdots + a_{2,j}^{(1)}x_j + \cdots + a_{2,n}^{(1)}x_n = b_2^{(1)} & (2) \\ 0x_1 + 0x_2 + a_{3,3}^{(2)}x_3 + \cdots + a_{3,j}^{(2)}x_j + \cdots + a_{3,n}^{(2)}x_n = b_3^{(2)} & (3) \\ \vdots & \\ 0x_1 + 0x_2 + a_{i,3}^{(2)}x_3 + \cdots + a_{i,j}^{(2)}x_j + \cdots + a_{i,n}^{(2)}x_n = b_i^{(2)} & (i) \\ \vdots & \\ 0x_1 + 0x_2 + a_{n,3}^{(2)}x_3 + \cdots + a_{n,j}^{(2)}x_j + \cdots + a_{n,n}^{(2)}x_n = b_n^{(2)} & (n) \end{cases} \quad .18)$$

حيث

$$\begin{cases} a_{i,j}^{(2)} = a_{i,j}^{(1)} - \dfrac{a_{i,2}^{(1)}}{a_{2,2}^{(1)}} a_{1,j}^{(1)} \\ b_i^{(2)} = b_i^{(1)} - \dfrac{a_{i,2}^{(1)}}{a_{2,2}^{(1)}} b_2^{(1)} \end{cases} \cdots \begin{pmatrix} 3 \leq i \leq n \\ 3 \leq j \leq n \end{pmatrix} \quad .19)$$

وهكذا نعيد نفس العملية مع العمود السفلي الثالث و الرابع حتى العمود $k = n - 1$، اذن تصبح الصيغة النهائية للمعادلات من الشكل

$$\begin{cases} a_{1,1}x_1 + a_{1,2}x_2 + a_{1,3}x_3 + \cdots + a_{1,n}x_n = b_1 & (1) \\ 0x_1 + a_{2,2}^{(1)}x_2 + a_{2,3}^{(1)}x_3 + \cdots + a_{2,n}^{(1)}x_n = b_2^{(1)} & (2) \\ 0x_1 + 0x_2 + a_{3,3}^{(2)}x_3 + \cdots + a_{3,n}^{(2)}x_n = b_3^{(2)} & (3) \\ \vdots & \\ \vdots & \\ 0x_1 + 0x_2 + 0x_3 + \cdots + a_{n,n}^{(n-1)}x_n = b_n^{(n-1)} & (n) \end{cases} \quad .20)$$

حيث

$$\begin{cases} a_{i,j}^{(k)} = a_{i,j}^{(k-1)} - \dfrac{a_{i,k}^{(k-1)}}{a_{k,k}^{(k-1)}} a_{k,j}^{(k-1)} \\ b_i^{(k)} = b_i^{(k-1)} - \dfrac{a_{i,2}^{(k-1)}}{a_{k,k}^{(k-1)}} b_k^{(k-1)} \end{cases} ; \begin{pmatrix} 1 \le k \le n-1 \\ k+1 \le i \le n \\ k+1 \le j \le n \end{pmatrix} \qquad .21)$$

حيث هنا اعتبرنا ان $a_{i,j}^{(0)} = a_{i,j}$ و $b_i^{(0)} = b_i$

اذن خوارزمية حلول جملة المعادلات (1.14) يمكن استنتاجها بسهولة باستخدام العلاقة (1.21)

Do k=1,n−1

Do i=k+1,n

$a_{i,k} = a_{i,k}/a_{k,k}$

$b_i = b_i - a_{i,k} b_k$

Do j=k+1,n

$a_{i,j} = a_{i,j} - a_{i,k} a_{k,j}$

End Do

End Do

End Do

عناصر المصفوفة الناتجة تمثل قيم المصفوفة العليا والدنيا حيث هنا نجد أن

$$U = (a_{i,j})_{\substack{1 \le i \le n \\ i \le j \le n}} \qquad .22)$$

$$L = (a_{i,j})_{\substack{2 \le i < n \\ 1 \le j < i}} \; ; \quad L_{i,i} = 1 \qquad .23)$$

ومنه نجد خوارزمية عناصر L و U كما يلي

Do i=1,n

$l_{i,i} = 1$

$u_{i,i} = a_{i,i}$

Do j=i+1,n

$l_{j,i} = a_{j,i}$

$u_{i,j} = a_{i,j}$

End Do

End Do

ومن هنا يمكننا استنتاج أن

$$A = L.U \qquad .24)$$

جملة المعادلات (1.20) تمثل معادلات مثلثية علوية ويمكن استخدام الخوارزمية (1.13) لحلها.

لكن هناك مشكلة ومتمثلة في القسمة على العناصر القطرية $a_{k,k}$ فاذا كانت معدومة فانه هناك حالة عدم التعيين، لذلك لتفادي هذه المشكلة فإننا نقوم بتبديل المعادلة التي يكون فيها $a_{k,k}$ معدوم مع أي معادلة أخرى يكون فيها قيمة $a_{i,k}$ غير معدوم، لذلك فاننا نقوم بشبه عملية بحث على قيمة $a_{i,k}$ غير معدوم.

او بطريقة أخرى نقوم في كل مرة بالبحث عن القيمة العظمى بالقيمة المطلقة من بين العناصر $a_{i,k}(k \leq i \leq n)$ ثم نقوم بمبادلة السطر الذي يحوي القيمة العظمى مع السطر (k).

خوارزمية إيجاد القيمة العظمى max والسطر الذي يحوي القيمة العظمى p تكتب من الشكل

$max = |a_{k,k}|$

$p = k$

Do i=k+1,n

If $(|a_{i,k}| > max)$

$max = |a_{i,k}|$

$p = i$

End If

End Do

بينما خوارزمية عملية المبادلة بين عناصر السطر الذي يحوي القيمة العظمى (p) و السطر (k) تكتب على الشكل

Do i=k,n

$temp = a_{k,i}$

$a_{k,i} = a_{p,i}$

$a_{p,i} = temp$

End Do

$temp = b_k$

$b_k = b_p$

$b_p = temp$

عملية المبادلة هذي يمكن اختزالها في مصفوفة تسمى مصفوفة التبادل P حيث نختار هذه المصفوفة في البداية هي المصفوفة الواحدية وأي عملية مبادلة هي عبارة عن مبادلة بين أسطر المصفوفة الواحدية.

ونتحصل في النهاية على العلاقة

$$P.A = L.U \qquad .25)$$

خوارزمية حذف غوس

باستخدام ما سبق فإن الخوارزمية النهائية لحل جملة المعادلات الخطية هي من الشكل

Do k=1,n−1

$max = |a_{k,k}|$

$p = k$

Do i=k+1,n

If $|a_{i,k}| > max$

$max = |a_{i,k}|$

$p = i$

End If

End Do

Do i=k,n

$temp = a_{k,i}$

$a_{k,i} = a_{p,i}$

$a_{p,i} = temp$

End Do

$temp = b_k$

$b_k = b_p$

$b_p = temp$

Do i=k+1,n

$a_{i,k} = a_{i,k}/a_{k,k}$

$b_i = b_i - a_{i,k}b_k$

Do j=k+1,n

$a_{i,j} = a_{i,j} - a_{i,k}a_{k,j}$

End Do

End Do

End Do

Do k=n, $1,-1$

$x_k = b_k$

Do i=k+1,n

$x_k = x_k - a_{k,i}x_i$

End Do

$x_k = x_k / a_{k,k}$

End Do

مثال

إيجاد حلول المعادلة الخطية التالية

$$\begin{cases} 2x_1 - x_2 + x_3 = 2 \\ -x_1 + x_2 + 2x_3 = 2 \\ -4x_1 + 2x_2 - x_3 = -3 \end{cases} \qquad .26)$$

يمكن كتابة الجملة (1.26) على الشكل المصفوفي التالي

$$\begin{pmatrix} 2 & -1 & 1 \\ -1 & 1 & 2 \\ -4 & 2 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 2 \\ -3 \end{pmatrix} \qquad .27)$$

ونفرض دائما في البداية ان مصفوفة المبادلة P و المصفوفة المثلثية السفلى Lهي المصفوفة الواحدية

$$P=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{pmatrix};L=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{pmatrix}$$ .28)

نلاحظ في العمود الأول ان -4 هي القيمة العظمى بالقيمة المطلقة، لذلك نقوم بعملية المبادلة بين السطر الأول والسطر الثالث، اذن يمكن كتابة المعادلة (1.27) على الشكل

$$\begin{pmatrix}-4&2&-1\\-1&1&2\\2&-1&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x_1\\x_2\\x_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-3\\2\\2\end{pmatrix}$$ .29)

كذلك نقوم بعملية المبادلة بين السطر الأول والثالث في مصفوفة المبادلة P

$$P=\begin{pmatrix}0&0&1\\0&1&0\\1&0&0\end{pmatrix}$$ .30)

نقوم بضرب السطر الأول في $\frac{-1}{4}$ والجمع مع السطر الثاني.

كذلك نقوم بضرب السطر الأول في $\frac{1}{2}$ والجمع مع السطر الثالث.

اذن المعادلة (1.29) تصبح

$$\begin{pmatrix}-4&2&-1\\0&1/2&9/4\\0&0&1/2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x_1\\x_2\\x_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-3\\11/4\\1/2\end{pmatrix}$$ .31)

بينما هنا فان قيم المصفوفة المثلثية $l_{2,1}$ و $l_{3,1}$ هي قيم المعاملات $\frac{-1}{4}$ و $\frac{1}{2}$ مع عكس إشارتهم أي

$$L=\begin{pmatrix}1&0&0\\1/4&1&0\\-1/2&0&1\end{pmatrix}$$ .32)

وكما نلاحظ من المعادلة (1.31) فهي تمثل معادلة مصفوفة عليا عناصرها

$$U=\begin{pmatrix}-4&2&-1\\0&1/2&9/4\\0&0&1/2\end{pmatrix}$$ .33)

يمكن البرهان بسهولة ان $L.U = P.A$

ومن المعادلة السابقة (1.31) وباستخدام طريقة الحل بواسطة المعادلات المثلثية العليا نجد ان الحلول هي:

$$x_1 = 1; x_2 = 1; x_3 = 1$$

محدد مصفوفة

من العلاقة (1.25) لدينا

$$P.A = L.U \Rightarrow det(P.A) = det(L.U)$$
$$det(P).det(A) = det(L).det(U)$$

حيث هنا لدينا ان

$$det(L) = 1; det(P) = (-1)^{\sigma}; det(U) = \prod_{i=1}^{n} u_{i,i}$$

حيث σ تمثل عدد التبديلات المنجزة.

ومنه محدد المصفوفة يكون من الشكل

$$det(A) = (-1)^{\sigma} \prod_{i=1}^{n} u_{i,i} \qquad .34)$$

أي ان محدد المصفوفة A هو جداء العناصر القطرية لمصفوفة المثلثية العلوية ضرب $1-$ اذا كان عدد التبديلات المنجزة فردي.

التطبيق رقم 2 يمثل برنامج بلغة الفورتران لحلول المعادلات الخطية ومحدد مصفوفة بطريقة حذف غوص.

المصفوفة العكسية

نستخدم الخاصية المعروفة وهي ان جداء مصفوفة ومعكوسها يعطي المصفوفة الواحدية I أي أن:

$$A.A^{-1} = I \qquad .35)$$

بضرب طرفي العلاقة السابقة (1.35) في مصفوفة التبادل نجد

$$P.A.A^{-1} = P \tag{.36}$$

ومن العلاقة (1.25) نجد

$$L.U.A^{-1} = P \tag{.37}$$

نفرض ان معاملات المصفوفة العكسية هم $A^{-1} = \left(d_{i,j}\right)_{\substack{1\le i\le n\\1\le j\le n}}$ و عناصر مصفوفة التبادل هم $P = \left(p_{i,j}\right)_{\substack{1\le i\le n\\1\le j\le n}}$ حيث كما نعلم ان عناصر هذه الأخيرة تساوي صفر او واحد. اذن المسألة محصورة في إيجاد عناصر المصفوفة العكسية، لذلك فان كل عمود من المصفوفة العكسية يمثل جملة معادلات خطية وبالتالي فإننا نبحث عن حلول كل هذه المعادلات الخطية، أي أننا نقوم بحل الجمل الخطية التالية:

$$L.U\begin{pmatrix} d_{1,j} \\ d_{2,j} \\ \vdots \\ d_{n,j} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p_{1,j} \\ p_{2,j} \\ \vdots \\ p_{n,j} \end{pmatrix}(1 \le j \le n) \tag{.38}$$

طريقة غوس−جوردن

طريقة غوس−جوردن هي طريقة أخرى تشبه طريقة غوس مع اختلاف صغير، حيث تعتمد هذه الطريقة على تحويل مصفوفة المعاملات $A = \left(a_{i,j}\right)_{\substack{1\le i\le n\\1\le j\le n}}$ الى مصفوفة واحدية عكس طريقة غوس التي تحول مصفوفة المعاملات الى مثلثية علوية.

لتكن جملة المعادلة الخطية $A.X = B$ حيث

$$\begin{pmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} & a_{1,3} & \cdots & a_{1,n} \\ a_{2,1} & a_{2,2} & a_{2,3} & \cdots & a_{2,n} \\ a_{3,1} & a_{3,2} & a_{3,3} & \cdots & a_{3,n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n,1} & a_{n,2} & a_{n,3} & \cdots & a_{n,n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} \qquad .39)$$

نقوم بقسمة السطر الأول على $a_{1,1}$ وضرب هذا السطر في العنصر $-a_{i,1}$ وجمعه مع السطر i حيث $2 \le i \le n$ وبذلك نتمكن من تصفير العمود الأول باستثناء القيمة الاولى، وبذلك فجملة المعادلات الخطية (1.39) تتحول الى:

$$\begin{pmatrix} 1 & a_{1,2}^{(1)} & a_{1,3}^{(1)} & \cdots & a_{1,n}^{(1)} \\ 0 & a_{2,2}^{(1)} & a_{2,3}^{(1)} & \cdots & a_{2,n}^{(1)} \\ 0 & a_{3,2}^{(1)} & a_{3,3}^{(1)} & \cdots & a_{3,n}^{(1)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & a_{n,2}^{(1)} & a_{n,3}^{(1)} & \cdots & a_{n,n}^{(1)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1^{(1)} \\ b_2^{(1)} \\ b_3^{(1)} \\ \vdots \\ b_n^{(1)} \end{pmatrix} \qquad .40)$$

حيث

$$\begin{gathered} a_{1,j}^{(1)} = \frac{a_{1,j}}{a_{1,1}} \\ a_{i,j}^{(1)} = a_{i,j} - \frac{a_{i,1}}{a_{1,1}} a_{1,j} = a_{i,j} - a_{i,1} a_{1,j}^{(1)} \\ b_1^{(1)} = \frac{b_1}{a_{1,1}} \\ b_i^{(1)} = b_i - \frac{a_{i,1}}{a_{1,1}} b_1 = b_i - a_{i,1} b_1^{(1)} \end{gathered} \qquad .41)$$

نقوم الان بقسمة السطر الثاني على $a_{2,2}^{(1)}$ وضرب هذا السطر في العنصر $-a_{i,2}^{(1)}$ وجمعه مع السطر i حيث $1 \le i \le n; i \ne 2$ وبذلك نتمكن من تصفير العمود الثاني باستثناء القيمة الثانية، وبذلك فجملة المعادلات الخطية (1.40) تتحول الى:

$$
\begin{pmatrix}
1 & 0 & a_{1,3}^{(2)} & \cdots & a_{1,n}^{(2)} \\
0 & 1 & a_{2,3}^{(2)} & \cdots & a_{2,n}^{(2)} \\
0 & 0 & a_{3,3}^{(2)} & \cdots & a_{3,n}^{(2)} \\
\vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
0 & 0 & a_{n,3}^{(2)} & \cdots & a_{n,n}^{(2)}
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}
=
\begin{pmatrix} b_1^{(2)} \\ b_2^{(2)} \\ b_3^{(2)} \\ \vdots \\ b_n^{(2)} \end{pmatrix}
\qquad .42)
$$

حيث

$$
a_{2,j}^{(2)} = \frac{a_{2,j}^{(1)}}{a_{2,2}^{(1)}}
$$

$$
b_2^{(2)} = \frac{b_2^{(1)}}{a_{2,2}^{(1)}} \qquad .43)
$$

$$
a_{i,j}^{(2)} = a_{i,j}^{(1)} - a_{i,2}^{(1)} a_{2,j}^{(2)}
$$

$$
b_i^{(2)} = b_i^{(1)} - a_{i,2}^{(1)} b_2^{(2)}
$$

وهكذا نفس العملية مع السطر الثالث و الرابع .... وبهذا فان جملة المعادلات الخطية (1.39) تصبح بعد العمود k كما يلي

$$
\begin{pmatrix}
1 & 0 & \cdots & 0 & a_{1,k+1}^{(k)} & \cdots & a_{1,n}^{(k)} \\
0 & 1 & \cdots & 0 & a_{2,k+1}^{(k)} & \cdots & a_{2,n}^{(k)} \\
 & & \ddots & \vdots & & \vdots & \vdots \\
\vdots & \vdots & \cdots & 1 & a_{k,k+1}^{(k)} & \cdots & a_{k,n}^{(k)} \\
0 & 0 & & & & & \\
0 & 0 & \cdots & 0 & a_{k+1,k+1}^{(k)} & \cdots & a_{k+1,n}^{(k)} \\
\vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
0 & 0 & & 0 & a_{n,k+1}^{(k)} & \cdots & a_{n,n}^{(k)}
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_k \\ x_{k+1} \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}
=
\begin{pmatrix} b_1^{(k)} \\ b_2^{(k)} \\ \vdots \\ b_k^{(k)} \\ b_{k+1}^{(k)} \\ \vdots \\ b_n^{(k)} \end{pmatrix}
\qquad .44)
$$

حيث

$$\begin{cases} a_{k,k}^{(k)} = 1 \\ a_{k,j}^{(k)} = \dfrac{a_{k,j}^{(k-1)}}{a_{k,k}^{(k-1)}} \;;\; (k+1 \le j \le n) \\ b_k^{(k)} = \dfrac{b_k^{(k-1)}}{a_{k,k}^{(k-1)}} \end{cases} \qquad .45)$$

$$\begin{cases} a_{i,k}^{(k)} = 0 \\ a_{i,j}^{(k)} = a_{i,j}^{(k-1)} - a_{i,k}^{(k-1)} a_{k,j}^{(k)} \;;\; \begin{pmatrix} k+1 \le j \le n \\ 1 \le i \le n; i \ne k \end{pmatrix} \\ b_i^{(k)} = b_i^{(k-1)} - a_{i,k}^{(k-1)} b_k^{(k)} \end{cases} \qquad .46)$$

حيث $1 \le k \le n$ و كذلك ناخذ هنا $a_{i,j}^{(0)} = a_{i,j}$ و $b_i^{(0)} = b_i$

وبذلك فان المعادلة تصبح من أجل $k = n$ تصبح $I.X = B^{(n)}$، حيث I المصفوفة الواحدية ذات البعد n، و $B^{(n)}$ شعاع المساواات بعد اجراء n عملية، وبذلك يمكننا استنتاج حلول المعادلة (*) وهي $x_i = b_i^{(n)}$

نفس المشكلة المطروحة في طريقة حذف غوس نجدها في طريقة غوس−جوردن والمتمثلة في القسمة على العناصر القطرية $a_{k,k}$ فاذا كانت معدومة فانه هناك حالة عدم التعيين، ولذلك لتفادي هذه المشكلة فإننا نقوم بنفس العملية وهي تبديل السطر الذي يكون فيه $a_{k,k}$ معدوم مع أي سطر اخر يكون فيه قيمة $a_{i,k}$ غير معدوم، لذلك نقوم في كل مرة بالبحث عن القيمة العظمى بالقيمة المطلقة من بين العناصر $a_{i,k}(k \le i \le n)$ ثم نقوم بمبادلة السطر الذي يحوي القيمة العظمى مع السطر (k).

المصفوفة العكسية

تستخدم طريقة غوس−جوردن كذلك لحساب المصفوفة العكسية حيث أنه باعتبار ان الشعاع b عبارة عن عناصر المصفوفة العكسية $\left(b_{i,j}\right)_{\substack{1\le i\le n\\ 1\le j\le n}}$فان العمليات التي تجرى على المصفوفة A ستطبق على المصفوفة B.

لذلك فان عناصر المصفوفة العكسية عند k الغاء هو.

$$\begin{cases} a_{i,j}^{(k)} = a_{i,j}^{(k-1)} - a_{i,k}^{(k-1)} a_{k,j}^{(k)}; 1 \le i \le n; i \ne k; k+1 \le j \le n \\ b_{i,j}^{(k)} = b_{i,j}^{(k-1)} - a_{i,k}^{(k-1)} b_{k,j}^{(k)}; 1 \le i \le n; i \ne k; 1 \le j \le m \end{cases} \quad .47)$$

$$\begin{cases} a_{k,j}^{(k)} = \dfrac{a_{k,j}^{(k-1)}}{a_{k,k}^{(k-1)}}; k+1 \le j \le n \\ b_{k,j}^{(k)} = \dfrac{b_{k,j}^{(k-1)}}{a_{k,k}^{(k-1)}}; 1 \le j \le m \end{cases} \quad .48)$$

محدد المصفوفة

يمكن كذلك حساب محدد المصفوفة كما يلي

$$det(A) = (-1)^{\sigma} \prod_{k=1}^{n} a_{k,k}^{(k-1)} \quad .49)$$

حيث σ تمثل عدد التبديلات المنجزة بين الأسطر.

المصفوفة الموسعة: وهي المصفوفة التي تمكننا من حساب حلول المعدلات الخطية وإيجاد المصفوفة العكسية وكذاك محدد المصفوفة بشكل مختصر، حيث يمكن اختزال الخوارزمية السابقة في مصفوفة موسعة كما يلي:

نأخذ مصفوفة موسعة بعدها $n \times (2n+1)$ حيث الجزء $(a_{i,j})_{\substack{1\le i\le n\\ 1\le j\le n}}$ يمثل عناصر المصفوفة A بينما الجزء $(a_{i,n+1})_{1\le i\le n} = (b_i)_{1\le i\le n}$ يمثل عناصر شعاع المساوات وأخيراً الجزء $(a_{i,j})_{\substack{1\le i\le n\\ n+2\le j\le 2n+1}} = (\delta_{i,j-n-1})_{\substack{1\le i\le n\\ n+2\le j\le 2n+1}}$ يمثل المصفوفة الواحدية التي في الأخير تنتج المصفوفة العكسية، أي من الشكل:

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} & b_1 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} & b_2 & 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} & b_n & 0 & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix} \quad (50.$$

نطبق الخوارزمية السابقة ولكن بشكل موسع فبذلك فإن العناصر الناتجة هنا هي:

$$\begin{cases} a_{k,k}^{(k)} = 1 \\ a_{k,j}^{(k)} = \dfrac{a_{k,j}^{(k-1)}}{a_{k,k}^{(k-1)}} \; ; k+1 \le j \le 2n+1 \end{cases} \quad (51.$$

$$\begin{cases} a_{i,k}^{(k)} = 0 \\ a_{i,j}^{(k)} = a_{i,j}^{(k-1)} - a_{i,k}^{(k-1)} a_{k,j}^{(k)} \end{cases} \begin{pmatrix} k+1 \le j \le 2n+1 \\ 1 \le i \le n; i \ne k \end{pmatrix} \quad (52.$$

وبذلك فإن الحلول الناتجة بعد تطبيق الخوارزمية تكون في العمود $n+1$، والمصفوفة العكسية في الجزء $(a_{i,j})_{\substack{1\le i\le n\\ n+2\le j\le 2n+1}}$

مثال : إيجاد الحلول والمصفوفة العكسية ومحدد المصفوفة A لجملة المعادلات $A.X = B$، حيث:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & -2 \\ -2 & 1 & 1 \\ -1 & 1 & 2 \end{pmatrix} ; X = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} ; B = \begin{pmatrix} 4 \\ -2 \\ -2 \end{pmatrix} \quad (53.$$

الحل: يمكن كتابة المصفوفة على الشكل الموسع التالي

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & -2 & 4 & 1 & 0 & 0 \\ -2 & 1 & 1 & -2 & 0 & 1 & 0 \\ -1 & 1 & 2 & -2 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \qquad .54)$$

نبحث في العمود الأول عن القيمة العظمى بالقيمة المطلقة وهي كما نلاحظ هي -2 وهي موجودة في السطر (2)، نقوم بعملية تبادل بين هذا السطر والسطر (1) لذلك فان المصفوفة الموسعة (1.54) تصبح:

$$\begin{pmatrix} -2 & 1 & 1 & -2 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & -2 & 4 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & 2 & -2 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \qquad .55)$$

نقوم بقسمة السطر الأول على القيمة القطرية $2-$، ونضرب السطر الأول الناتج في -1 وجمعه مع السطر الثاني وكذلك ضرب السطر الأول في 1 وجمعة مع السطر الثالث، ومنه فالمصفوفة الموسعة (1.55) تتحول إلى:

$$\begin{pmatrix} 1 & -1/2 & -1/2 & 1 & 0 & -1/2 & 0 \\ 0 & 3/2 & -3/2 & 3 & 1 & 1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 & 3/2 & -1 & 0 & -1/2 & 1 \end{pmatrix} \qquad .56)$$

نبحث في العمود الثاني على القيمة العظمى، وكما نلاحظ فان القيمة العظمى هي $3/2$. لذلك لا نقوم بعملية تبادل.

نقوم بقسمة السطر الثاني على القيمة القطرية العظمى $3/2$، وكذلك نضرب السطر الثاني الناتج في القيمة $-1/2$ وجمعه مع السطر الثالث، ونضرب كذلك السطر الثاني الناتج في القيمة $1/2$ وجمعه مع السطر الأول، وبذلك (1.56) تصبح

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 & 2 & 1/3 & -1/3 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 2 & 2/3 & 1/3 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & -2 & -1/3 & -2/3 & 1 \end{pmatrix} \qquad .57)$$

نبحث الان في العمود الثالث على القيمة العظمى بالقيمة المطلقة، كما نلاحظ فإن القيمة العظمى هنا هي 2 موجودة على القطر لذلك لا نقوم بعملية تبادل.

نقوم الان بقسمة السطر الثالث على القيمة العظمى 2. نضرب السطر الثالث الناتج في 1 وجمعه مع السطر الثاني والثالث. فنجد في الأخير أن المصفوفة الموسعة (1.57) تتحول إلى

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 & 1/6 & -2/3 & 1/2 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 1/2 & 0 & 1/2 \\ 0 & 0 & 1 & -1 & -1/6 & -1/3 & 1/2 \end{pmatrix} \qquad .58)$$

وكما نلاحظ فإن الحلول موجودة في العمود الرابع وهي $x_1 = 1; x_2 = 1; x_3 = -1$ والمصفوفة العكسية موجودة في الجزء بين العمود الخامس والعمود السابع

$$A^{-1} = \begin{pmatrix} 1/6 & -2/3 & 1/2 \\ 1/2 & 0 & 1/2 \\ -1/6 & -1/3 & 1/2 \end{pmatrix} \qquad .59)$$

يمكن التأكد من ذلك بضرب $A.A^{-1} = I$.

وأما محدد مصفوفة فهو ناتج بضرب القواسم (محددة باللون الأحمر) وكذلك في -1 أس عدد التبديلات.

كما نلاحظ أننا قمنا بالقسمة على -2 ، $3/2$ و 2، ولقد قمنا بتبديله واحدة، لذلك فمحدد المصفوفة هو:

$$\det(A) = (-1)^1 \times (-2) \times (3/2) \times (2) = 6$$

خوارزمية غوس-جوردن

نستخدم طريقة المصفوفة الموسعة.

نحدد في البداية قيم إشارة التبادل و محدد المصفوفة و العتبة الصفرية كما يلي:

sig=1

det=1

thre=10^{-16}

نبدا من العمود k=1 إلى غاية العمود الأخير n

Do k=1,n

نبحث عن القيمة العظمى بالقيمة المطلقة في العمود k ونحدد السطر الذي نجد فيه القيمة العظمى (المحور) بـ p

maxP= $|a_{kk}|$

p = k

Do i=k+1

If ($|a_{ik}|$>maxP)

maxP = $|a_{ik}|$

p = i

End If

End Do

نتأكد ما إذا كان أكبر قيمة تساوي الصفر فإن الحل لا يوجد

If(maxP<thre)

Print "Singularité! la solution impossible"

Stop

End If

نقوم بعملية مبادلة في حالة ما إذا كانت القيمة العظمى غير موجودة على القطر. إذا كانت هناك مبادلة فإن الإشارة sig تغير اشارتها والتي نستخدمها لحساب محدد المصفوفة det.

عملية المبادلة تتم عن طريق الدلة Swap والتي يمكن برمجتها كما يلي:

```
Swap(A,B)

temp=A

A=B

B=temp

End Swap
```

إذن نكمل الخوارزمية كما يلي

If$(p \neq k)$

sig=−sig

Do i=k,m

Swap(a(k,i),a(p,i))

End Do

End If

حساب المحدد كما يلي.

det=det×sig× a_{kk}

نستخدم الان العلاقات (1.51) و (1.52) كما يلي

$t = 1/a_{kk}$

Do j=k+1,2n+1

$a_{kj} = ta_{kj}$

End Do

Do i=1,n

If$(i \neq k)$

Do j=k+1,2n+1

$a_{ij} = a_{ij} - a_{ik}a_{kj}$

End Do

End If

End Do

وأخيرا ننهي الحلقة حول k

End Do

التطبيق رقم 3 يمثل برنامج خاص بحلول المعادلات الخطية باستخدام طريقة غوس–جوردان وكذلك إيجاد المصفوفة العكسية ومحدد مصفوفة.

في الأخير من الأفضل استخدام طريقة حذف غوس من أجل حساب حلول المعادلات ومحدد المصفوفة بينما نستخدم طريقة غوس–جوردان لحساب المصفوفة العكسية وهذا من أجل كفاءة أحسن أثناء إجراء الحسابات بواسطة الكمبيوتر.

2. القيم الذاتية والاشعة الذاتية لمصفوفة متناظرة

في دراسة الظواهر الفيزيائية فإننا دائما نستخدم المصفوفات المتناظرة، مثال على ذلك هاملتون جملة فيزيائية يكون دائما لهو معنى فيزيائي إلا إذا كان هرميتي (متناظر).

لذلك سوف نقتصر دراستنا على كيفية ايجاد القيم الذاتية والاشعة الذاتية لمصفوفة متناظرة.

كل مصفوفة متناظرة تكون قيمها متناظرة بالنسبة لقطرها، أي أن

$$a_{i,j} = a_{j,i} \qquad .60)$$

حيث $i, j = 1 \dots n$ و n يمثل بعد المصفوفة المربعة.

خوارزمية جاكوبي

لتكن مصفوفة مربعة متناظرة A بعدها n وعناصرها اعداد حقيقية، القيم الذاتية λ والأشعة الذاتية V لهذه لمصفوفة معرف بالعلاقة الرياضية:

$$AV = \lambda V \qquad .61)$$

تعتمد طريقة جاكوبي على تحويل المصفوفة الغير مقطرة والمتناظرة A إلى فضاء اخر تكون فيه هذه المصفوفة مقطرة، وذلك بواسطة مصفوفة الدوران R.

لفهم طريقة عمل خوارزمية جاكوبي نأخذ مثال مصفوفة مربعة متناظرة بعدها $n = 2$

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{12} & a_{22} \end{pmatrix} \qquad .62)$$

حيث اعتبرنا هنا ان $a_{21} = a_{12}$ لأن المصفوفة متناظرة.

مصفوفة الدوران في الفضاء ذو بعدين معرفة كما يلي :

$$R = \begin{pmatrix} cos(\theta) & -sin(\theta) \\ sin(\theta) & cos(\theta) \end{pmatrix} \qquad .63)$$

يمكن أن تحول المصفوفة A الى فضاء اخر تكون فيه هذه الأخيرة مقطرة وذلك عن طريق مصفوفة الدوران R بالعلاقة :

$$D = R^t AR \qquad .64)$$

حيث R^t هي منقول المصفوفة R و D هي المصفوفة المقطرة ل A.

يمكن كتابة المصفوفة المقطرة على الشكل :

$$D = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix} \qquad .65)$$

حيث λ_1 و λ_2 تسمى القيم الذاتية للمصفوفة A.

يمكن البرهان كذلك على أن $R^t = R^{-1}$.

لإيجاد القيم الذاتية، نستخدم العلاقات السابقة نجد أن :

$$\begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} cos(\theta) & sin(\theta) \\ -sin(\theta) & cos(\theta) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{12} & a_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} cos(\theta) & -sin(\theta) \\ sin(\theta) & cos(\theta) \end{pmatrix}$$

نقوم بالنشر فنجد أن :

$$\left(cos^2(\theta) - sin^2(\theta)\right)a_{12} + cos(\theta)sin(\theta)(a_{11} - a_{22}) = 0 \qquad .66)$$

$$\lambda_1 = cos^2(\theta)a_{11} - 2cos(\theta)sin(\theta)a_{12} + sin^2(\theta)a_{22} \qquad .67)$$

$$\lambda_2 = cos^2(\theta)a_{11} + 2cos(\theta)sin(\theta)a_{12} + sin^2(\theta)a_{22} \qquad .68)$$

من العلاقة (1.66) يمكن ايجاد قيمة θ كما يلي :

$$\frac{a_{22} - a_{11}}{2a_{12}} = \frac{cos^2(\theta) - sin^2(\theta)}{2cos(\theta)sin(\theta)} = \frac{\cos(2\theta)}{\sin(2\theta)} = \cot(2\theta) \qquad .69)$$

ومنه يمكن إيجاد قيمة θ من العلاقة السابقة (1.69) وتعويضها في العلاقتين (1.67) و (1.68) مما يمكننا من إيجاد القيم الذاتية للمصفوفة المربعة (1.62) λ_1 و λ_2.

بعد إيجاد قيم $sin(\theta)$ و $cos(\theta)$ فإنه يمكننا إيجاد الأشعة الذاتية $\overrightarrow{u_1}$ و $\overrightarrow{u_2}$ للمصفوفة المربعة A بكل سهولة وذلك بتطبيق المصفوفة R على أشعة الوحدة ولتكن هنا $\vec{\imath}$ و $\vec{\jmath}$ كما يلي :

$$\begin{pmatrix} \overrightarrow{u_1} \\ \overrightarrow{u_2} \end{pmatrix} = R \begin{pmatrix} \vec{\imath} \\ \vec{\jmath} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} cos(\theta) & -sin(\theta) \\ sin(\theta) & cos(\theta) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{\imath} \\ \vec{\jmath} \end{pmatrix} \qquad .70)$$

أي أن :

$$\overrightarrow{u_1} = cos(\theta)\vec{\imath} - sin(\theta)\vec{\jmath}$$
$$\overrightarrow{u_2} = sin(\theta)\vec{\imath} + cos(\theta)\vec{\jmath} \qquad .71)$$

تعميم

مصفوفة الدوران

في المثال السابق $n = 2$ مصفوفة الدوران تدور حول المحور (Oz)،أما في حالة مصفوفة بعدها $n = 3$ فإن هذه المصفوفة يمكنها الدوران في المستويات الثلاث وذلك حول الثلاث المحاور الأساسية، لتكن المصفوفة R_x هي مصفوفة الدوران حول المحور (Ox)، R_y بالنسبة للمحور (Oy) و R_z بالنسبة للمحور (Oz)، تكتب هذه المصفوفات على الشكل :

$$R_z = \begin{pmatrix} c & -s & 0 \\ s & c & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} ، R_y = \begin{pmatrix} c & 0 & -s \\ 0 & 1 & 0 \\ s & 0 & c \end{pmatrix} ، R_x = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & c & -s \\ 0 & s & c \end{pmatrix} .72)$$

حيث :

$$c = \cos(\theta); s = \sin(\theta) \qquad .73)$$

في الحالة العام، مصفوفة الدوران في المستوي (p,q) تكتب على الشكل :

$$R_{pq} = \begin{array}{c} \begin{pmatrix} 1 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ 0 & \cdots & c & \cdots & -s & \cdots & 0 \\ \vdots & & \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots \\ 0 & \cdots & s & \cdots & c & \cdots & 0 \\ \vdots & & \vdots & & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix} \begin{array}{c} \\ \\ p \\ \\ q \\ \\ \\ \end{array} \\ \begin{array}{ccccccc} \quad & \quad & p & \qquad & q & \quad & \quad \end{array} \end{array} \qquad .74)$$

حيث $p \neq q$

المصفوفة $R_{pq}(\theta)=\left(r_{ij}\right)_{\substack{1\leqslant i\leqslant n\\ 1\leqslant j\leqslant n}}$ المعرفة بالعلاقة (1.74) هي مصفوفة واحدية مع تغير أربع عناصر

كما يلي:

$$\begin{cases} r_{ij}=\delta_{ij}\,; i\neq p, i\neq q\,, j\neq p, j\neq q \\ r_{pp}=r_{qq}=c \\ r_{qp}=-r_{pq}=s \end{cases} \qquad .75)$$

حيث δ_{ij} هو دلتا كرونيكر.

لتكن $A'=\left(a'_{ij}\right)_{\substack{1\leqslant i\leqslant n\\ 1\leqslant j\leqslant n}}$ هي المصفوفة الناتجة من دوران المصفوفة A في المستوي (p,q) إذن:

$$A'=R^{t}_{pq}AR_{pq} \qquad .76)$$

حيث أن A' تبقى مصفوفة متناظرة بعد التطبيق المباشر للعلاقة (1.76) وعناصرها تكون من الشكل:

$$\begin{cases} a'_{pq}=a'_{qp}=(c^2-s^2)a_{pq}+cs\left(a_{pp}-a_{qq}\right); (p\neq q)(1) \\ a'_{pp}=c^2a_{pp}+s^2a_{qq}-2csa_{pq}(2) \\ a'_{qq}=s^2a_{pp}+c^2a_{qq}+2csa_{qp}(3) \\ a'_{pk}=a'_{kp}=ca_{pk}-sa_{qk}; (k\neq p, k\neq q)(4) \\ a'_{qk}=a'_{kq}=sa_{pk}+ca_{qk}; (k\neq p, k\neq q)(5) \\ a'_{ij}=a'_{ji}=a_{ij}; (i,j\neq p,q)(6) \end{cases} \qquad .77)$$

نعدم العناصر $a'_{pq}=a'_{qp}=0$ الممثلة بالعلاقة (1) من (1.77) مما يمكننا من ايجاد قيمة زاوية

الدوران اللازمة لذلك θ كما يلي :

$$\frac{a_{qq}-a_{pp}}{2a_{pq}}=\frac{c^2-s^2}{2cs}=\frac{1-\left(\frac{s}{c}\right)^2}{2\left(\frac{s}{c}\right)}=\frac{1-t^2}{2t}=w \qquad .78)$$

حيث هنا عرفنا المتغيرين t و w كما يلي :

$$t = tan(\theta) = \frac{s}{c} \qquad .79)$$

$$w = \frac{a_{qq} - a_{pp}}{2a_{pq}} \qquad .80)$$

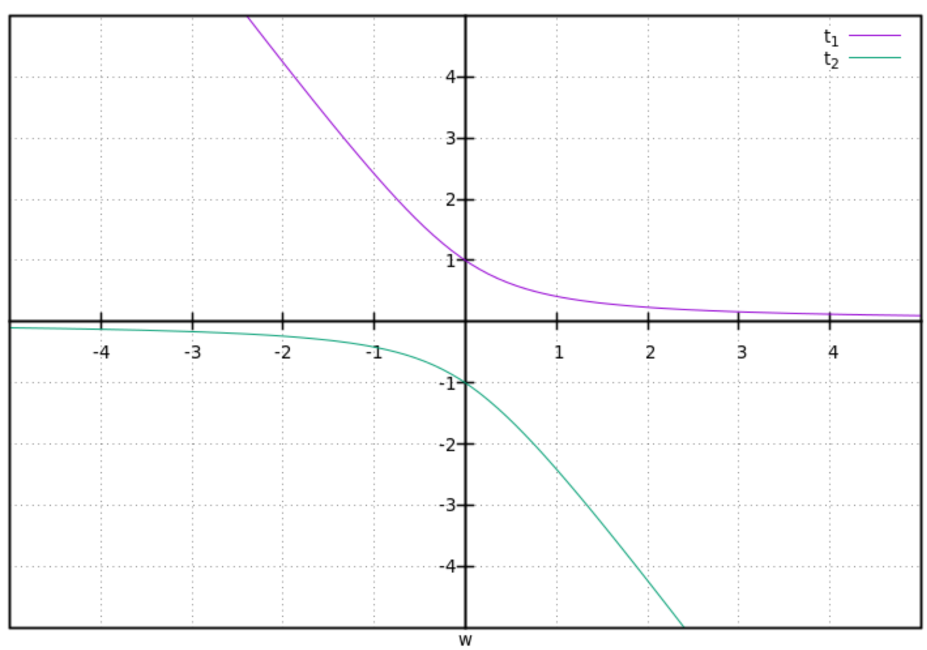
من العلاقة (1.78) يمكن ايجاد قيمة t بحل المعادلة :

$$t^2 + 2tw - 1 = 0 \qquad .81)$$

يمكن حل المعادلة (1.81) ببساطة فنجد :

$$t_1 = -w + \sqrt{w^2 + 1}; t_2 = -w - \sqrt{w^2 + 1} \qquad .82)$$

نقوم باختيار احد الحلين t_1 أو t_2، لذلك سوف نختار الحل الذي تكون فيه قيمة t أقل ما يمكن وهذا من أجل دقة أفضل أثناء اجراء الحسابات، لذلك نرسم المخطط البياني ل t_1 و t_2 بدلالة w فنجد المنحنيات الممثلة في الشكل 1.



شكل 1 : المنحنى البياني للدالتين t_1 وt_2 بدلالة w

وكما نلاحظ في الشكل 1 فإن t_1 تكون له قيم صغيرة $0 < t \leqslant 1$ من أجل $w > 0$ و t_2 له قيم صغيرة $0 < t \leqslant -1$ من أجل $w < 0$ لذلك فإن اختيار قيم t يكون كما يلي :

$$t = -w + \sqrt{w^2 + 1}; w > 0 \qquad .83)$$

$$t = -w - \sqrt{w^2 + 1}; w < 0 \qquad .84)$$

في حالة $w = 0$ فإننا هنا نأخذ قيمة $t = \pm 1$ حسب اشارة a_{pq} لذلك فإن :

$$w = 0; a_{pq} > 0 \Rightarrow t = 1 \qquad .85)$$

$$w = 0; a_{pq} < 0 \Rightarrow t = -1 \qquad .86)$$

في كل الحالات السابقة نجد أن $|t| \leqslant 1$.

يمكن كتابة كل من s و c بدلالة $t = tan(\theta)$ كما يلي :

$$c = \cos(\theta) = \frac{1}{\sqrt{1 + tan^{2(\theta)}}} = \frac{1}{\sqrt{1 + t^2}} \qquad .87)$$

$$s = \sin(\theta) = \frac{tan(\theta)}{\sqrt{1 + tan^{2(\theta)}}} = \frac{t}{\sqrt{1 + t^2}} = tc \qquad .88)$$

وكخلاصة للعلاقات السابقة، نبحث عن القيمة w باستخدام العلاقة (1.80)، ثم نجد قيمة t من العلاقات (1.83)، (1.84)، (1.85) و (1.86) وهذا حسب اشارة w، ثم نعوض بقيمة t في العلاقتين (1.87) و (1.88) من أجل ايجاد قيم كل من s و c، في الأخير نعوض بقيم الأخيرتين في العلاقات (2)، (3)، (4) و (5) من (1.77) وهذا لإيجاد عناصر مصفوفة التحويل A'.

نلاحظ من العلاقة (1.80) أنه يمكن كتابة a_{pp} على الشكل:

$$a_{pp} = a_{qq} - 2wa_{pq} \qquad .89)$$

بتعويض بالمساوات السابقة (1.89) في العلاقة (2) و (3) من المجموعة (1.77)، و كذلك تعويض قيمة s من (1.88) في العلاقات (4) و (5) فإنه يمكن تبسيط مجموعة العلاقات (1.77) السابقة كما يلي

$$\begin{cases} a'_{pp} = a_{pp} - ta_{pq}(1) \\ a'_{qq} = a_{qq} + ta_{pq}(2) \\ a'_{pk} = a'_{kp} = c\left(a_{pk} - ta_{qk}\right); (k \neq p, q)(3) \\ a'_{qk} = a'_{kq} = c\left(a_{qk} + ta_{pk}\right); (k \neq p, q)(4) \\ a'_{ij} = a'_{ji} = a_{ij}; (i, j \neq p, q)(5) \end{cases} \qquad .90)$$

وكما نلاحظ فإن القيم الغير قطرية (3) و (4) من المجموعة (1.90) للمصفوفة الناتجة من الدوران A' تتناقص قيمها (لأنها مضروبة في $1 > |\cos(\theta)| = |c|$ و $1 > |t|$) وبذلك فإن هذه العملية تتكرر في كل مرة وهذا بتصفير القيمة العظمى بالقيمة المطلقة من بين العناصر الغير قطرية للمصفوفة المتناظرة A.

أي أنه نبحث عن العنصر الكبير بالقيمة المطلقة من بين العناصر الغير قطرية للمصفوفة A وعند ايجاده في الموضع (p, q) نقوم بتصفيره عن طريق تطبيق مصفوفة الدوران في المستوي السابق $R_1 = R_{pq}$ وذلك باستخدام العلاقة $A' = R_1^T A R_1$، و عند ملاحظة أن العناصر الغير قطرية للمصفوفة الناتجة A' لا تقترب من الصفر فأننا نعيد البحث عن القيمة العظمى المطلقة في المصفوفة الناتجة A' ونطبق دوران R_2 باستخدام العلاقة $A" = R_2^T A' R_2 = R_2^T R_1^T A R_1 R_2$، وهكذا نعيد الكرة الى أن نصل الى الحد k الذي تكون فيه العناصر الغير قطرية للمصفوفة الناتجة $A^{(k)}$ معدومة تقريبا، أي أن هذه المصفوفة الناتجة هي مصفوفة مقطرة D. أي أنه يمكن كتابة المصفوفة الأخيرة على الشكل:

$$A^{(k)} = D = R_k^T \dots R_1^T A R_1 \dots R_k = V^T A V \qquad .91)$$

حيث V تمثل مصفوفة الأشعة الذاتية:

$$V = R_1 \dots R_k \qquad (92.$$

وبهذه الطريقة فإننا نتمكن من إيجاد القيم الذاتية والأشعة الذاتية للمصفوفة المربعة المتناظرة ذات البعد الكيفي n.

خوارزمية جاكوبي للقيم الذاتية

مما سبق فإنه يمكن كتابة الخوارزمية من الشكل:

أولا نضع الخوارزمية تحت حلقة تكرارية غير منتهية كما يلي

```
Do While (True)
```

نبحث أولا عن موضع القيمة العظمى بالقيمة المطلقة (p, q) وذلك عن طريق البحث عنها في القيم الغير القطرية العلوية (أو السفلية لأن المصفوفة متناظرة).

```
maxp = 0
Do i=1,n−1
Do j = i+1,n
if(|a_ij| >maxp)
maxp=|a_ij|
p=i
q=j
End If
End Do
```

End Do

نتأكد الان من أن أكبر قيمة ليست أقل من عتبة الصفر، نعتبر هنا أن العتبة thre مثلا تساوي 10^{-16}،

فإذا كان maxp أقل من العتبة thre فإن المصفوفة هنا تعتبر مقطرة تقريباً.

If(maxp<thre)

Exit

End If

الان نطبق العلاقة (1.80) لحساب قيمة w.

$w = 0.5(a_{qq} - a_{pp})/a_{pq}$

نقوم الان بحساب قيمة t باستخدام العلاقات (1.83)، (1.84)، (1.85) و (1.86) وهذا حسب قيم w،

حيث أنه إذا كان $w = 0$ فإننا نميز حالتين حسب إشارة a_{pq} كالتالي:

If($w == 0$)

If($a_{pq} < 0$)

$t = -1$

Else

$t = 1$

End If

وإذا كان w غير معدوم فإن t تأخذ قيمها حسب إشارة w باستخدام العلاقتين (1.85) و (1.86) أي:

Else

If($w > 0$)

$t = -w + \sqrt{1 + w^2}$

Else

$t = -w - \sqrt{1 + w^2}$

End If

End If

نقوم الان بحساب ال $c = \cos(\theta)$ حسب العلاقة (1.87) ونطبق مجموعة العلاقات السابقة (1.90) من أجل حساب عناصر المصفوفة الناتجة من الدوران حول المستوي (p, q).

$c = 1/\sqrt{1 + t^2}$

$a_{pp} = a_{pp} - t a_{pq}$

$a_{qq} = a_{qq} + t a_{pq}$

($a_{pq} = 0$ تصفير العنصر الكبير الغير قطري)

$a_{qp} = 0$ (تصفير العنصر الكبير الغير قطري)

Do k=1,n

If($k \neq p \ \ And \ k \neq q$)

$a_{pk} = c\left(a_{pk} - t a_{qk}\right)$

$a_{qk} = c\left(a_{qk} + t a_{kp}\right)$

$a_{kp} = a_{pk}$

$a_{kq} = a_{qk}$

End If

End Do

وهكذا الحلقة While سوف تعيد الخوارزمية إلا أن يتحقق الشرط السابق للعتبة وتنتهي ب

End Do

التطبيق رقم 4 يمثل برنامج لحساب القيم الذاتية باستخدام الخوارزمية السابقة.

الاستيفاء وملائمة الانحناءات Interpolation and curve fitting

في المسائل الرقمية، نقوم في كثير من الأحيان بتعويض الدالة $f(x)$ المعروفة في عدد محدود من النقاط x_0، x_1، ...، x_n بدالة $P(x)$ أبسط وأسهل حسابًا: وهذا ما نسميه التقريب. بتعبير رياضي، يتمثل التقريب في تقليل المسافة بين الدوال $f(x)$ و $P(x)$. تفرض التكامل بالإضافة إلى ذلك تطابق الدوال $f(x)$ و $P(x)$ في نقاط x_i. عندما تمثل الدالة $P(x)$ الدالة $f(x)$ الموصوفة بمجموعة نقاط تجريبية $\left(x_i، f(x_i)\right)$ ، نشير إلى هذا بالتنعيم. يرتبط تقريب الدالة بمسائل تمثيل الدوال كحدود لدوال أبسط (تطويرات في السلسلة، تطويرات في سلسلة فورييه، تمثيلات متكاملة، إلخ). في الممارسة، نحاول بناء سلسلة من الدوال $f_n(x)$ التي تتقدم نحو الدالة الأساسية $f(x)$. عندما تكون الدوال $f_n(x)$ متعددة الحدود، نشير إلى هذا

بالتقريب متعدد الحدود. التقريب متعدد الحدود هو واحد من أكثر الأساليب استخدامًا، لأنه يسهل جدًا جعل خطأ التقريب صغيرًا إلى أقصى حد بزيادة درجة المتعدد الحدود. يستند إلى نظرية فيرشتراس (1866) التي تقول إن أي دالة مستمرة على فترة $\left[a،b\right]$ هي حد متسلسل لمتسلسل من الدوال متعددة الحدود.

2.1 استيفاء لغرانج Lagrange Interpolation

التكامل التكاملي لاجرانج هو طريقة تُستخدم في التحليل العددي والرياضيات لإنشاء متعددة الحدود تمر عبر مجموعة معينة من النقاط. يكون ذلك مفيدًا بشكل خاص عندما تكون لديك مجموعة من النقاط البيانية المتقطعة وترغب في العثور على دالة متعددة الحدود تمثل تلك النقاط.

يُعطى متعدد التكامل التكاملي لاجرانج للدرجة n لمجموعة من $n+1$ نقاط بيانات $(x_0, y_0), (x_1, y_1), \ldots, (x_n, y_n)$ كالتالي:

$$P(x) = \sum_{i=0}^{n} y_i \cdot l_i(x)$$

حيث يُعرف $l_i(x)$ كمتعدد أساسي لاجرانج على النحو التالي:

$$l_i(x) = \prod_{j=0, j\neq i}^{n} \frac{x - x_j}{x_i - x_j}$$

سيمر هذا المتعدد $P(x)$ عبر جميع النقاط البيانية المعطاة. ميزة التكامل التكاملي لاجرانج هي أنه من السهل نسبيًا فهمه وتنفيذه. ومع ذلك، قد يصبح متعدد التكامل التكاملي باهظ التكلفة عندما يتعلق الأمر بمجموعات بيانات كبيرة.

2.1 استيفاء التشيبيشيف Tchebychev Interpolation

التكامل التشيبيشيف هو طريقة للتكامل تستخدم نقاط تشيبيشيف كنقاط تكامل. تعرف هذه النقاط على أنها جذور للمتعدد التشيبيشيف من النوع الأول. على عكس التكامل البولينومي التقليدي، الذي قد يؤدي إلى ظواهر "رونج" على حواف فترة التكامل، يقلل التكامل التشيبيشيف من هذه الآثار من خلال اختيار نقاط التكامل بعناية.

تُعرف نقاط تشيبيشيف، وتُرمز لها ب\(x_k\)، على فترة \($[-1, 1]$\) كالتالي:

$$x_k = \cos\left(\frac{(2k+1)\pi}{2n+2}\right)$$

ل$(k = 0, 1, \dots, n)$، حيث \(*n*\) هو درجة المتعدد التكامل.

بعد تحديد نقاط التكامل التشيبيشيف، يمكن استخدام طرق تكامل مختلفة لإيجاد المتعدد التكامل، مثل طريقة الفروق المقسمة لنيوتن أو طريقة معاملات التكامل لاجرانج.

يكمن ميزة التكامل التشيبيشيف في قدرته على تقليل أخطاء التكامل على حواف الفترة، مما قد يؤدي إلى نتائج أكثر دقة، خاصةً عندما تكون درجة المتعدد التكامل مرتفعة.

الفروق المقسمة *Divided differences*

الفروق المقسمة، التي غالباً ما تُستخدم في طريقة التكامل بفروق نيوتن المُقسمة، هي طريقة لتمثيل معاملات متعدد التكامل.

بالنظر إلى مجموعة من \(*n+1*\) نقطة بيانات \(*(x_0, y_0), (x_1, y_1), \ldots, (x_n, y_n)*\)، حيث \(*x_0, x_1, \ldots, x_n*\) مختلفة، يُعرف الفروق المقسمة بشكل تكراري كالتالي:

لـ \(*k = 0, 1, \ldots, n*\)، فإن الفرق المقسم الصفري هو ببساطة قيمة الدالة في النقطة المقابلة:

$$f[x_k] = y_k$$

لـ \(k = 0, 1, \ldots, n−1\) و \(j = k+1, k+2, \ldots, n\)، يُحسب الفرق المقسم \(k\) بالشكل التالي:

$$f[x_k, x_{k+1}, \dots, x_j] = \frac{f[x_{k+1}, x_{k+2}, \dots, x_j] - f[x_k, x_{k+1}, \dots, x_{j-1}]}{x_j - x_k}$$

ثم يُمكن استخدام هذه الفروق المقسمة لبناء معاملات متعدد التكامل.

طريقة التكامل بفروق نيوتن المُقسمة تُستخدم لبناء متعدد التكامل باستخدام هذه الفروق المقسمة. يأخذ متعدد التكامل الشكل التالي:

$$P(x) = f[x_0] + f[x_0, x_1](x - x_0) + f[x_0, x_1, x_2](x - x_0)(x - x_1) + \cdots$$

تعتبر هذه الطريقة مفيدة بشكل خاص لأنها تتيح حسابًا فعالًا لمتعدد التكامل وتقييم الدالة في نقاط جديدة.

العشوائية المحددة

بعض الأشخاص يشعرون بجذب نحو الحوسبة بسبب طبيعتها المحددة؛ فمن الجميل أن يكون هناك شيء في الحياة لا يترك للصدفة. باستثناء أخطاء الآلة العشوائية أو المتغيرات غير المعرفة، يجب أن تحصل على نفس الناتج في كل مرة تزود فيها برنامجك بنفس المدخلات. ومع ذلك، يتم استخدام العديد من دورات الحاسوب لحسابات مونتي كارلو التي تسعى في جوهرها لتضمين بعض عناصر الصدفة. هذه الحسابات هي الحسابات التي يتم فيها استخدام أرقام عشوائية يتم إنشاؤها بواسطة الحاسوب لمحاكاة عمليات عشوائية طبيعية، مثل

الحركة الحرارية أو الانحلال الإشعاعي، أو لحل المعادلات على متوسط. في الواقع، جاء الكثير من اعتراف فيزياء الحوسبة بصفتها تخصصًا من قدرة الحواسيب على حل مشاكل ترموديناميكية وميكانيكا الكم التي كانت لا تُحل في السابق باستخدام تقنيات مونتي كارلو.

تسلسلات عشوائية (النظرية)

نعرّف سلسلة من الأرقام $r_1, r_2, \ldots$ كعشوائية إذا لم تكن هناك ترابطات بين الأرقام في السلسلة. ومع ذلك، لا يعني العشوائية بالضرورة أن جميع الأرقام في السلسلة متساوية الاحتمال للحدوث. إذا كانت جميع الأرقام في سلسلة متساوية الاحتمال للحدوث، فإن السلسلة تكون متوزعة بشكل متساوٍ. على سبيل المثال، 1، 2، 3، 4، ... هي متوزعة بشكل متساوٍ ولكن ربما ليست عشوائية، بينما قد تكون 3، 1، 4، 2، 3، 1، 3، 2، 4، ... عشوائية ولكن لا تبدو متساوية. بالإضافة إلى ذلك، من الممكن أن تحتوي سلسلة من الأرقام التي تكون، بمعنى ما، عشوائية ولكن لديها ترابطات نطاق قصيرة جدًا، على سبيل المثال، $r_1(1-r_1)r_2(1-r_2)r_3(1-r_3)\ldots$. من الناحية الرياضية، يُصف احتمال حدوث رقم عشوائي بواسطة دالة توزيع $P(r)$. هذا يعني أن احتمالية العثور على r_i في الفترة $[r, r + dr]$ هي $P(r)dr$. التوزيع المتساوي يعني أن $P(r)$= ثابت. يولّد مُنشئ الأرقام العشوائية القياسي على الحواسيب توزيعات متساوية ($P = 1$) بين 0 و 1. بعبارة أخرى، يُخرج مُنشئ الأرقام العشوائية القياسي أرقامًا في هذا الفترة، كل منها بنفس احتمالية ولكن كل منها مستقل عن الرقم السابق. كما سنرى، يمكن أيضًا إنتاج أرقام غير متساوية ومع ذلك أن تكون عشوائية. من خلال بنيانها، نعلم أن الحواسيب هي تحديدية وبالتالي لا يمكنها إنشاء تسلسل عشوائي حقيقي. على الرغم من أنه قد يكون هناك بعض العمل، إذا كنا نعرف r_m وعناصره السابقة، من الممكن دائمًا معرفة r_{m+1}. لهذا السبب، تُولِّد الحواسيب أرقامًا عشوائية "شبه"، بطبيعة الحال،

تحتوي الأرقام العشوائية التي تم احتسابها بواسطة الحاسوب على ترابطات وبهذه الطريقة ليست حقيقية عشوائية. (ومع ذلك، بسبب كسلنا العضوي، فلن نكون دائمًا نقول "شبه" كل الوقت.) في حين أن المُنشئين الأكثر تطورًا يقومون بعمل أفضل في إخفاء الترابطات، تظهر الخبرة أنه إذا بحثت بجد أو استخدمت هذه الأرقام بما فيه الكفاية، ستلاحظ الترابطات. بديل بسيط لإنشاء أرقام عشوائية هو قراءة جدول من الأرقام العشوائية الحقيقية، وهي الأرقام التي تُحدد بواسطة عمليات عشوائية طبيعية مثل الانحلال الإشعاعي. على الرغم من أنها ليست وسيلة جذابة لقضاء الوقت، إلا أنه قد توفر مقارنة قيمة.

توليد الأرقام العشوائية (الخوارزمية)

الطريقة الخطية المتبقية أو الطريقة القاسية الباقية هي الطريقة الأكثر شيوعًا لتوليد سلسلة عشوائية "شبه" من الأرقام {*r1*، *r2*، *...*، *rk*} على فترة [0، *1 − M*]. تقوم بضرب الرقم العشوائي السابق *ri−1* بالثابت *a*، وإضافة ثابت آخر *c*، ومن ثم أخذ الباقي على *M*، ومن ثم الاحتفاظ بالجزء العشري (الباقي) كالرقم العشوائي التالي *ri*:

$$r_i = (a \cdot r_{i-1} + c)\backslash modM = remainder\left(\frac{a \cdot r_{i-1} + c}{M}\right)$$

القيمة الأولى لـ \(*r_1* \) (البذرة) غالبًا ما تُقدم من قبل المستخدم، و*mod* هي وظيفة مدمجة في حاسوبك للباقي (قد تُسمى *amod* أو *dmod*). هذه في الأساس عملية تحويل بت تنتهي بالجزء الأقل أهمية من الرقم المدخل، وبالتالي تعتمد على عشوائية الأخطاء التقريبية لإنتاج سلسلة عشوائية.

كمثال، إذا كانت *c = 1*، *a = 4*، *M = 9*، وقد قدمت *r1 = 3*، ثم ستحصل على السلسلة

$$r_1 = 3$$

$$r_2 = \left(\frac{4 \times 3 + 1}{9}\right) \backslash mod9 = \frac{13}{9} \backslash mod9 = rem13\frac{9}{9} = 4$$

$$r_3 = \left(\frac{4 \times 4 + 1}{9}\right) \backslash mod9 = \frac{17}{9} \backslash mod9 = rem17\frac{9}{9} = 8$$

$$r_4 = \left(\frac{4 \times 8 + 1}{9}\right) \backslash mod9 = \frac{33}{9} \backslash mod9 = rem33\frac{9}{9} = 6$$

$$r_5 - 10 = 7,2,0,1,5,3$$

نحصل على سلسلة طولها *M = 9*، بعد ذلك تتكرر السلسلة بالكامل. إذا أردت الأرقام في النطاق [0، 1]، فإننا نقسم الأرقام *r* على *M = 9*

$$0.333, 0.444, 0.889, 0.667, 0.778, 0.222, 0.000, 0.111, 0.555, 0.333$$

لا تزال هذه سلسلة بطول 9، لكنها لم تعد سلسلة من الأعداد الصحيحة. كإجراء تشغيلي عام.

على الرغم من أن هذا ليس اختبارًا رياضيًا صارمًا، فإن قشرة المخ البصرية لديك مُتطورة جدًا في التعرف على الأنماط، وعلى أية حال، من السهل جدًا تنفيذ ذلك. على سبيل المثال، يُظهر الشكل 10.1 النتائج من المُنشئين "جيدين" و"سيئين"؛ فمن السهل حقًا التفريق بينهما.

ينتج القاعدة (10.1) أعدادًا صحيحة في النطاق [0، *M − 1*]، ولكن ليس بالضرورة كل عدد صحيح. عندما يظهر عدد صحيح معين مرة ثانية، يتكرر الدور كاملاً. من أجل الحصول على سلسلة أطول، يجب أن تكون *a* و *M* أرقامًا كبيرة، ولكن ليست كبيرة بما يكفي لتجاوز *ari–1*. على حاسوب علمي يستخدم حساب الأعداد الصحيحة 48 بت، يمكن أن يستخدم المُنشئ العشوائي المدمج قيم *M* تصل إلى 248 مضروبًا في 3 × 1014. يمكن لجهاز 32 بت استخدام *M = 231* مضروبًا في 2 × 109. إذا استخدم برنامجك حوالي هذا العدد من الأرقام العشوائية، فقد تحتاج إلى زرع السلسلة مرة أخرى خلال الخطوات الوسيطة لتجنب التكرارات.

من المحتمل أن يحتوي حاسوبك على مُنشئ أرقام عشوائية أفضل من تلك التي ستقوم بحسابها باستخدام الطريقة القاسية المتبقية. يمكنك التحقق من ذلك في الدليل أو صفحات المساعدة (جرّب الأمر *man* في

Unix)، ثم اختبار السلسلة المُنشأة. قد تحمل هذه الروتينات أسماء مثل *rand*، *rn*، *random*، *srand*، *erand*، *drand*، أو *drand48*.

نوصي باستخدام نسخة من *drand48* كمولد للأرقام العشوائية. يولّد أرقامًا عشوائية في النطاق [0، 1] بخصائص طيفية جيدة باستخدام حساب الأعداد الصحيحة 48 بت بالمعاملات

$$M = 248 \quad c = B_{(16)} = 13_{(8)}$$

$$a = 5DEECE66D_{(16)} = 273673163155_{(8)}$$

لتهيئة السلسلة العشوائية، يجب زراعة بذرة فيها. في فورتران، يمكنك استدعاء البرنامج الفرعي *srand48* لزراعة بذرتك، بينما في جافا يمكنك إصدار البيان *Random randnum = new Random(seed)*;

ستنشئ التعريف (10.1) قيمًا لـ *ri* في النطاق [0، *M*] أو [0، 1] إذا قسمت على *M*. إذا كانت الأرقام العشوائية في النطاق [*A*، *B*] مطلوبة، فإنك تحتاج فقط إلى تحجيم؛ على سبيل المثال

$$x_i = A + (B - A)r_i \quad 0 \le r_i \le 1 \Rightarrow A \le x_i \le B$$

تطبيقات مونتي كارلو

الآن بعد أن لدينا فكرة عن كيفية استخدام الحاسوب لتوليد سلسلة من الأرقام العشوائية "شبه"، يجب أن نبني بعض الثقة في استخدام هذه الأرقام في الحساب كطريقة لدمج عنصر الصدفة في المحاكاة. نقوم بذلك أولاً من خلال محاكاة مشي عشوائي، ثم انحلال ذرة بشكل عفوي. بعد ذلك، نوضح كيفية معرفة إحصاءات الأرقام العشوائية تؤدي إلى أفضل طريقة لتقييم التكاملات متعددة الأبعاد.

مشي عشوائي

هناك العديد من العمليات الفيزيائية، مثل الحركة البراونية ونقل الإلكترونات من خلال المعادن، حيث يبدو أن الجسيم يتحرك عشوائيًا. على سبيل المثال، تخيل جزيئًا من العطر يتحرر في وسط الصف. يتصادم بشكل عشوائي مع جزيئات أخرى في الهواء وفي النهاية يصل إلى أنف المحاضر. المشكلة هي تحديد عدد التصادمات، في المتوسط، التي يجب أن يقوم بها الجزيء ليسافر مسافة شعاعية *R*، إذا كان يسافر بطول خطوة *rrms* في المتوسط (متوسط الجذر المربع) بين التصادمات.

محاكاة المشي العشوائي

هناك العديد من الطرق لمحاكاة المشي العشوائي، وتعطي الافتراضات المختلفة فيزياء مختلفة. سنقدم أبسط النهج للمشي ثنائي الأبعاد، مع الحد الأدنى من النظرية، وسننتهي بنموذج للانتشار الطبيعي. الأدب البحثي مليء بمناقشات حول مختلف الإصدارات لهذه المشكلة. على سبيل المثال، تتوافق الحركة البراونية مع الحد الذي يتقارب فيه أطوال الخطوة الفردية إلى الصفر دون تأخير زمني بين الخطوات. تشمل التنقيحات الإضافية التصادمات داخل وسيط متحرك (انتشار غير طبيعي)، بما في ذلك سرعات الجزيئات، أو حتى التوقف بين الخطوات.

في محاكاة المشي العشوائي، مثل تلك الموجودة في الشكل 11.1 من الشيفرة *Walk.java* على قرص *CD* الخاص بالمحاضر، يقوم مشي العاملة الاصطناعية بخطوات عديدة، عادةً مع اتجاه كل خطوة مستقل عن اتجاه الخطوة السابقة (شكل 11.1). بالنسبة لنموذجنا، نبدأ من الأصل ونأخذ *N* خطوة في المستوى *x–y* بأطوال (وليس إحداثيات)

$$(\Delta x_1, \Delta y_1), (\Delta x_2, \Delta y_2), (\Delta x_3, \Delta y_3), \ldots, (\Delta x_N, \Delta y_N)$$

المسافة الشعاعية *R* من النقطة البدائية المسافة بعد *N* خطوة هي

$$R^2 = (\Delta x_1 + \Delta x_2 + \cdots + \Delta x_N)^2 + (\Delta y_1 + \Delta y_2 + \cdots + \Delta y_N)^2$$

$$= \Delta x_1^2 + \Delta x_2^2 + \cdots + \Delta x_N^2 + 2\Delta x_1 \Delta x_2 + 2\Delta x_1 \Delta x_3 + 2\Delta x_2 \Delta x_1 + \cdots + \left(\text{x تصبح } y\right)$$

المعادلة (11.2) صالحة لأي مشي. إذا كانت عشوائية، فإن الجسيم متساوي الاحتمال في أي اتجاه في كل خطوة. في المتوسط، لعدد كبير من الخطوات العشوائية، ستختفي جميع المصطلحات المتقاطعة في (11.2) وسيتبقى لدينا

$$R^2 \approx N\langle r^2 \rangle \Rightarrow R \approx \sqrt{N} r_{\text{rms}}$$

هنا r_{rms} هو الحجم المتوسط (متوسط الجذر التربيعي) للخطوة.

لتوضيح، (11.3) يشير إلى أنه لمشي يتكون من *N* خطوة تغطي مسافة إجمالية قدرها *Nrrms*، ينتهي المشي، في المتوسط، على مسافة شعاعية

$$\sqrt{Nrrms}$$

من النقطة البدائية. بالنسبة لقيم كبيرة لـ *N*، هذا أقل بكثير من *Nrrms*، ولكن ليس صفرًا (وهو متوسط متجه التشتت). في تجربتنا، تتفق المحاكاة العملية مع هذه النظرية، ولكن نادراً ما تكون مثالية، وذلك يعتمد على كيفية اتخاذ المتوسطات، وكيفية بناء العشوائية في كل خطوة.