حل معادلات تعینی با روش‌های تصادفی

درس‌نامه‌ی کاربرد کامپیوتر در فیزیک

(اجتهادی، شریف، پاییز ۸۵)

۱ مقدمه

در این بخش می‌خواهیم ببینیم که چگونه می‌توان با روش‌های تصادفی مسئله‌های تعینی را راحت‌تر حل کرد. به عنوان مثال از مسئله‌های تعینی، انتگرال‌گیری را بررسی می‌کنیم.

۲ مروری بر روش‌های تعینی انتگرال‌گیری

فرض کنید تابع دلخواهی مانند $f(x)$ داریم و می‌خواهیم انتگرال این تابع را در بازه‌ی $[a,b]$ به دست آوریم (شکل ۱).

$$I = \int_a^b f(x)dx \tag{۱}$$

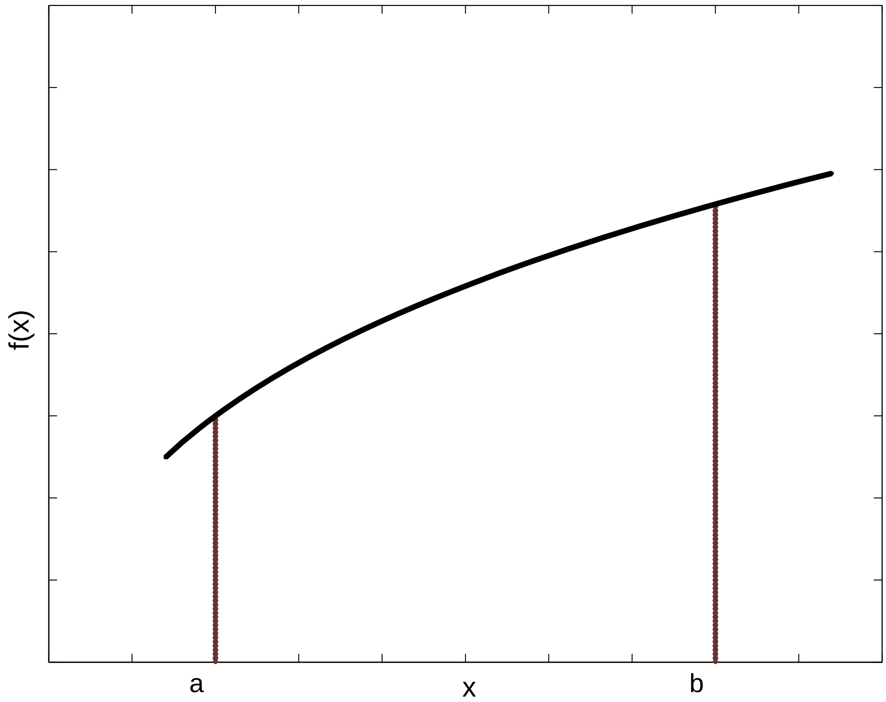
برای این کار باید مساحت زیر نمودار را در بازه‌ی داده شده پیدا کرد و برای این کار باید یک مسئله‌ی پیوسته را به یک مسئله‌ی گسسته تبدیل کرد. برای گسسته‌سازی کافی است بازه‌ی $[a,b]$ را N قسمت با عرض h تقسیم کنیم که N هست:

$$N = \frac{b-a}{h} \tag{۲}$$

حال تقریبی که می‌شود برای محاسبه‌ی انتگرال زد این است که مقدار تابع در ابتدای هر بازه را به عنوان مقدار تابع در کل بازه‌ی h در نظر گرفت و برای محاسبه‌ی مساحت زیر نمودار، مساحت مستطیل‌ها را با هم جمع زد (شکل ۲). در این صورت مساحت زیر نمودار را می‌توان به صورت زیر نوشت:

$$I = \sum_{i=۱}^{N} f(a+ih) \times h \tag{۳}$$

که این جمع به «سری ریمان» معروف است. می‌دانیم که وقتی h به سمت صفر میل کند (معادلاً N به سمت بی‌نهایت میل کند)، مقدار این جمع به مقدار واقعی انتگرال میل خواهد کرد. خطای که در محاسبه‌ی انتگرال مرتکب می‌شویم، از



شکل ۱: تابع $f(x)$ در بازه‌ی انتگرال‌گیری

مرتبه‌ی h است و ناشی از صرف نظر کردن از ناحیه‌های بین مستطیل‌ها و خم است. ولی همان طور که می‌دانید، در کامپیوتر h را از حدی کوچکتر نمی‌توان کرد؛ چون آن وقت خطای گرد کردن ظاهر می‌شود و باعث می‌شود که خطا زیاد شود. بنابراین این انتگرال را با این روش از حدی دقیق‌تر نمی‌توان با کامپیوتر حساب کرد.

همچنین فرقی نمی‌کند که نقطه‌ی ابتدایی هر بازه را برای محاسبه‌ی مساحت مستطیل‌ها در نظر بگیریم یا نقطه‌ی انتهایی هر بازه را. در هر دو حالت، مساحت جملاتی که دور می‌ریزیم از مرتبه‌ی h است. در تقریبی بهتر می‌توان به جای استفاده از مستطیل برای محاسبه‌ی مساحت هر بازه، از ذوزنقه استفاده کرد. مساحت ذوزنقه‌ی محاط در بازه‌ی i ام برابر

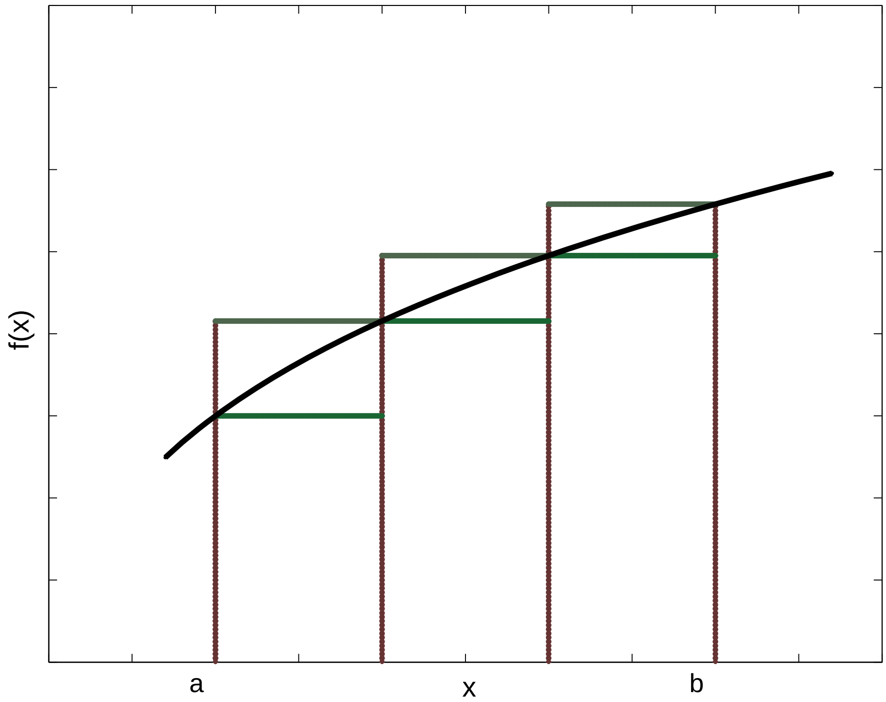
$$S_i = \frac{f(x_i) + f(x_{i+1})}{2} \times h \tag{۴}$$

است که اگر این مساحت‌ها را در کل بازه جمع بزنیم، برای مساحت زیر تابع داریم:

$$I = (\frac{f(x_1)}{2} + \sum_{i=2}^{N} f(x_i) + \frac{f(x_{N+1})}{2}) \times h \tag{۵}$$

همان طور که می‌بینید، در این جا اگرچه تقریب بهتری به کار بردیم، اما مقدار مساحت تنها در جمله‌ی اول و آخر با معادله‌ی ۳ فرق دارد.

قدم دیگری که برای محاسبه‌ی دقیق‌تر مساحت زیر نمودار می‌توان برداشت، این است که از نقاط بیشتری برای تخمین مقدار تابع در هر بازه استفاده کنیم. در تقریب مستطیل، از یک نقطه (انتهایی یا ابتدایی)، و در تقریب ذوزنقه از



شکل ۲: تابع $f(x)$ در بازه‌ی انتگرال‌گیری

دو نقطه‌ی ابتدایی و انتهایی بازه استفاده کرده و یک خط راست از آن‌ها گذراندیم. در ادامه می‌توان از هر سه نقطه‌ی متوالی استفاده کرد و از هر سه نقطه، یک خم درجه دو گذراند. با این کار، به جای این که تابع $f(x)$ را در هر بازه با خط راست تقریب بزنیم، تابع را با سهمی تقریب می‌زنیم که به وضوح تقریب بهتری است (شکل ٦). این جا هم کافی است برای هر بازه، مساحت زیر معادله درجه‌ی دو را به طور تحلیلی حل کرد و این مساحت‌ها را با هم جمع زد.

روش‌های دیگری هم برای کاهش خطا می‌توان به کار برد. برای مثال می‌توان در تقریب مستطیل، یکی‌درمیان مستطیل‌های بالایی و پایینی را به کار برد. همچنین می‌توان از تعداد نقاط بیشتری برای تخمین مقدار تابع $f(x)$ استفاده کرد و با این کار تابع را تا مرتبه‌ی بیشتری نگه داشته‌ایم و بدین وسیله خطا را تا هر مرتبه‌ای که می‌خواهیم، کاهش بدهیم.

۳ انتگرال‌گیری به روش‌های تصادفی

این بخش را با یک مسئله شروع می‌کنیم: فرض کنید که بیرون یک باغ با دیوارهای بلند هستید و به هیچ روشی نمی‌توانید داخل باغ را ببینید. از شما می‌خواهند که مساحت استخری را که داخل باغ است را تخمین بزنید.

یک روش ساده این است که می‌توان به صورت تصادفی داخل باغ سنگ انداخت؛ اگر سنگ به زمین خورد، صدای تِلِپ و اگر داخل استخر آب افتاد، صدای شِلِپ می‌دهد. حال اگر مساحت باغ را اندازه بگیریم و نسبت صدای شلپ به صدای تلپ را هم بشمریم، می‌توانیم به راحتی مساحت استخر را تخمین بزنیم. کیفیت تخمین ما به چند چیز بستگی دارد: اول این که چه قدر به صورت تصادفی سنگ‌ها را به داخل باغ می‌اندازیم. این بدین معنی است که

شکل ۳: تقریب سهمی برای تابع $f(x)$ در بازه‌ی انتگرال‌گیری

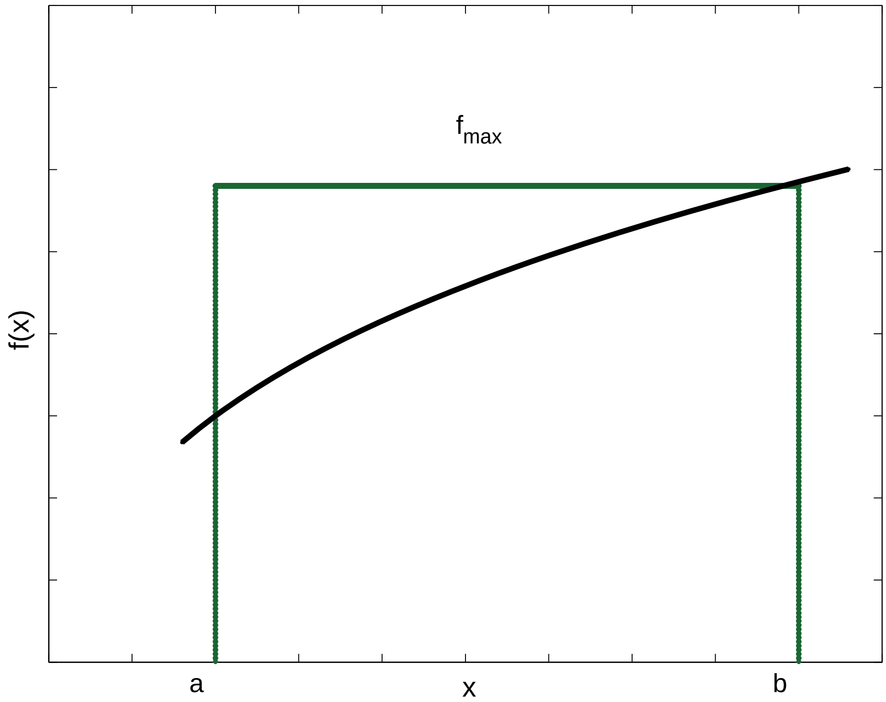
سنگ‌ها باید با احتمال برابر در کل باغ بیفتد. دوم این که چه تعداد سنگ داخل باغ می‌اندازیم. طبعاً با دو یا سه تا سنگ نمی‌توان مساحت استخر را خوب تخمین زد.

به طور مشابه از این روش برای محاسبه‌ی مساحت زیر منحنی $f(x)$ در بازه‌ی $[a,b]$ هم استفاده می‌کنیم. برای این کار جعبه‌ای درست می‌کنیم به ابعاد $b-a$ و f_{max} و در نتیجه مساحت باغ خواهد بود

$$A = f_{max}(b-a) \tag{٦}$$

و به کمک مولد عدد تصادفی کامپیوتر شروع به سنگ انداختن می‌کنیم. در این جا سنگ انداختن بدین معنی است که دو عدد x و y ای را که در این محدوده‌ها باشند، انتخاب کنیم. بعد بررسی می‌کنیم که این نقطه آیا بالای منحنی است یا پایین آن. اگر زیر منحنی بود شلپ و اگر بالای منحنی بود تلپ. درصد شلپ‌ها در مساحت مستطیل، مساحت زیر منحنی را خواهد داد. همان‌طور که می‌بینید اگر چه مسئله کاملاً تعینی است ولی الگوریتمی که برای حل آن استفاده می‌کنیم از یک سری اعداد تصادفی کمک می‌گیرد و همان‌طور که گفته شد کیفیت الگوریتم بستگی به این دارد که چه قدر اعداد تصادفی خوب انتخاب شده‌اند. این الگوریتم به صورت شبه‌کد در این جا نوشته شده است:

```
A = Fmax * (b-a)
Loop N
   x = rand(a,b)
   y = rand(0,Fmax)
   if f(x) < y then
```



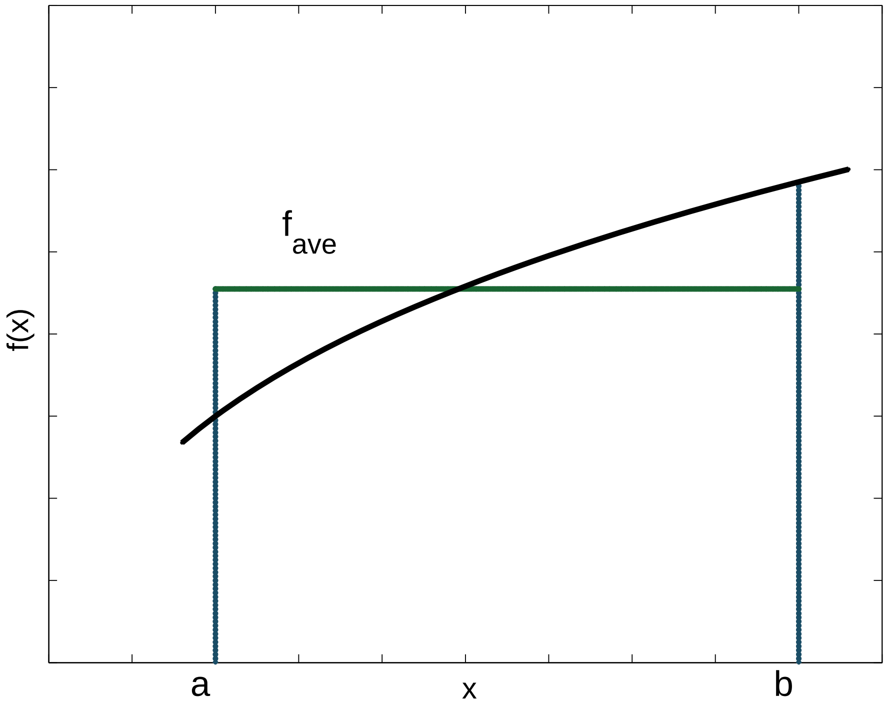
شکل ۴: مساحت مستطیل $f_{max}(b-a)$ است.

```
      do nothing
   else
      I++
End Loop
I = I/N * A
```

اگر بخواهیم خوبی یا بدی این الگوریتم تصادفی را با الگوریتم‌های تعینی که در بخش‌های قبل معرفی کردیم مقایسه کنیم، به دو چیز باید توجه کنیم: اول این که این الگوریتم چه‌قدر سریع‌تر است و دوم این که چه قدر دقیق‌تر است. خوبی این الگوریتم در این است که با فرض این که مولد عدد تصادفی‌مان مولد خوبی هست، در دقت‌اش محدودیت وجود ندارد. در واقع اگر بسیار صبر کنیم مثل این است که در تمام نقاط زیر منحنی سنگ انداخته‌ایم و همه‌ی نقاط را با توجه به رزلوشن کامپیوتر شمرده‌ایم. در صورتی که دیدیم الگوریتم‌های تعینی محاسبه‌ی انتگرال خطاهای ساختاری دارند که از حدی دقیق‌تر نمی‌توان مساحت زیر منحنی را حساب کرد.

از نظر زمان نمی‌توان این دو الگوریتم را با هم مقایسه کرد؛ به این علت که برای این کار باید صبر کنیم که هر دو الگوریتم با دقت یکسان اجرا شوند. ولی مزیت این الگوریتم در این است که در حین اجرای برنامه در هر لحظه دقت محاسبه‌ی انتگرال را می‌دانیم.

ارزش این مثال این است که امکان‌پذیر بودن استفاده از یک الگوریتم تصادفی را برای حل یک مسئله‌ی تعینی نشان می‌دهد. طبعاً این الگوریتم، الگوریتم خوبی نیست و بسیار زمان‌بر است. در ادامه خواهیم دید که چگونه می‌توان این



شکل ۵: ...

الگوریتم را اصلاح و بهینه کرد.

می‌دانیم که انتگرال تابع $f(x)$ در بازه‌ی $[a,b]$ را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$I = \int_a^b f(x)dx = \bar{f}(b-a) \tag{۷}$$

که $\bar{f}$ متوسط تابع $f(x)$ در بازه‌ی $[a,b]$ است. دقت کنید که رابطه‌ی ۷ در واقع تعریف متوسط تابع $f(x)$ است. حال اگر بتوان به روشی $\bar{f}$ را در بازه‌ی $[a,b]$ به دست آورد، مقدار انتگرال به راحتی محاسبه می‌شود. این کار از لحاظ زمان اجرا خیلی کمتر از الگوریتم قبلی وقت می‌گیرد. به این علت که در الگوریتم قبلی در هر بار یک جفت عدد تصادفی نیاز بود و باید بررسی می‌کردیم که آیا در زیر منحنی است یا نه، ولی در این جا صرفاً باید متوسط تابع $f(x)$ را محاسبه کنیم. این کار به راحتی امکان‌پذیر است. اگر x_i یک رشته‌ی اعداد تصادفی در بازه‌ی $[a,b]$ باشند، داریم:

$$\bar{f} = \frac{۱}{N}\sum_{i=۱}^{N} f(x_i) \tag{۸}$$

این بدین معنی است که می‌توان با تعدادی نمونه‌برداری از بازه‌ی $[a,b]$ می‌توان مقدار متوسط تابع $f(x)$ را به دست آورد. نمونه‌برداری این الگوریتم بسیار ساده‌تر از نمونه‌برداری الگوریتم قبلی است. به این علت که در الگوریتم قبلی برای هر مختصه‌ی x مشخص، تعداد زیادی عدد تصادفی y نیاز بود تا تعیین کند که چه تعداد از نقاط زیر منحنی هستند؛ در صورتی که در این الگوریتم تنها با داشتن یک عدد تصادفی و محاسبه‌ی مقدار تابع در آن نقطه این کار را انجام می‌دهیم. شبه‌کد این الگوریتم به صورت زیر است:

```
f = 0
Loop N
   f += f(rand(a,b))
End Loop
I = f/N * (b-a)
```

یکی از مزایای این روش انتگرال‌گیری این است که خیلی ساده قابل تعمیم به انتگرال‌های چندبعدی است. این انتگرال‌گیری‌های چندبعدی در فیزیک بسیار ظاهر می‌شوند.

$$\bar{f} = \frac{\int_a^b f(x).p(x)\ dx}{\int_a^b p(x)\ dx} \tag{۹}$$

$$\bar{f} = \frac{I}{b-a} \tag{۱۰}$$

۴ خطای محاسبه

$$\sigma = \sqrt{\frac{۱}{N}\sum_{i=۱}^{N}(x_i - \bar{x})^۲} \equiv \langle x^۲ \rangle - \langle x \rangle^۲ \tag{۱۱}$$

```
f2 = f = 0
Loop N
   x = rand(a,b)
   f += f(x)
   f2 += f(x)*f(x)
End Loop
I = f/N * (b-a)
sigma = f2/N - (f/N)*(f/N)
Delta = sigma/sqrt(N) * (b-a)
```

$$\sigma' = \frac{\sigma}{\sqrt{n}} \tag{۱۲}$$

$$M_\alpha = \sum_{i=1}^{n} x_{i,\alpha} \tag{13}$$

$$\bar{M} = \frac{1}{m}\sum_{\alpha=1}^{m} M_\alpha = \frac{1}{mn}\sum_{\alpha=1}^{m}\sum_{i=1}^{n} x_{i,\alpha} \tag{14}$$

$$e_\alpha = M_\alpha - \bar{M} \tag{15}$$

$$d_{i,\alpha} = x_{i,\alpha} - \bar{M}$$

$$\sigma_m^2 = \frac{1}{m}\sum_{\alpha=1}^{m} e_\alpha^2 \tag{16}$$

$$\sigma^2 = \frac{1}{mn}\sum_{\alpha=1}^{m} d_{i,\alpha}^2 \tag{17}$$

$$e_\alpha = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(x_{i,\alpha} - \bar{M}) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} d_{i,\alpha}^2 \tag{18}$$

$$\sigma_m^2 = \frac{1}{m}\sum_{\alpha=1}^{m}(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} d_{i,\alpha})^2 = \frac{1}{m}\sum_{\alpha=1}^{m}(\frac{1}{n^2}\sum_{i=1}^{n} d_{i,\alpha}^2 + \frac{1}{n^2}\sum_{\substack{i=1\\ i\neq j}}^{n} d_{i,\alpha}d_{j,\alpha}) \tag{19}$$

۵ تولید عدد تصادفی

$$x_{n+1} = (ax_n + b)\ mod\ c \tag{20}$$

٦ ساختن مولد عدد تصادفی با توزیع دلخواه

$$I = \int_a^b f(x)dx = \int_a^b \frac{f(x)}{P(x)} P(x)dx \tag{۲۱}$$

$$I = \int_a^b g(x)P(x)dx = \bar{g} \tag{۲۲}$$

$$g(x) = \frac{f(x)}{P(x)} \tag{۲۳}$$

$$\bar{g} = \frac{۱}{N} \sum_{i=۱}^{N} g(x_i) \tag{۲۴}$$

۱.٦ توزیع یکنواخت

$$P_u(r)dr = P(x)dx \tag{۲۵}$$

$$P(x) = \int_{-\infty}^{x} p(x)dx \tag{۲٦}$$

$$P(x) = \int_{-\infty}^{x} p(x)dx = \int_{-\infty}^{a} p(x)dx + \int_{a}^{x} p(x)dx \tag{۲۷}$$

$$= \frac{۱}{b-a} \int_a^x dx$$

$$= \frac{x-a}{b-a} = r$$

$$x = (b-a)r + a \tag{۲۸}$$

$$g(x) = \frac{f}{\frac{۱}{b-a}} = (b-a)f(x) \tag{۲۹}$$

۲.۶ توزیع نمایی

$$P(x) = \int_{۰}^{x} ae^{-ax}dx = ۱ - e^{-ax} = r \tag{۳۰}$$

$$\begin{aligned} x &= -\frac{۱}{a}\ln(۱-r) \qquad (۳۱) \\ &= -\frac{۱}{a}\ln r \end{aligned}$$

۳.۶ توزیع گاوسی

$$p(x)p(y) = \frac{۱}{\sigma^{۲}۲\pi}e^{-(x^{۲}+y^{۲})/۲\sigma^{۲}} \tag{۳۲}$$

$$p(x,y)\ dxdy = p(\rho,\theta)\ d\rho d\theta \tag{۳۳}$$

$$p(\rho) = \int_{۰}^{r} \frac{۱}{\sigma^{۲}}e^{-\rho^{۲}/۲\sigma^{۲}}\ \rho d\rho = ۱ - e^{-\rho^{۲}/۲\sigma^{۲}} \tag{۳۴}$$

$$\rho = \sqrt{-۲\sigma^{۲}\ln r} \qquad ۰ \leq r \leq ۱ \tag{۳۵}$$

$$\theta = ۲\pi r$$

$$x = \rho\cos\theta \tag{۳۶}$$

$$y = \rho\sin\theta$$

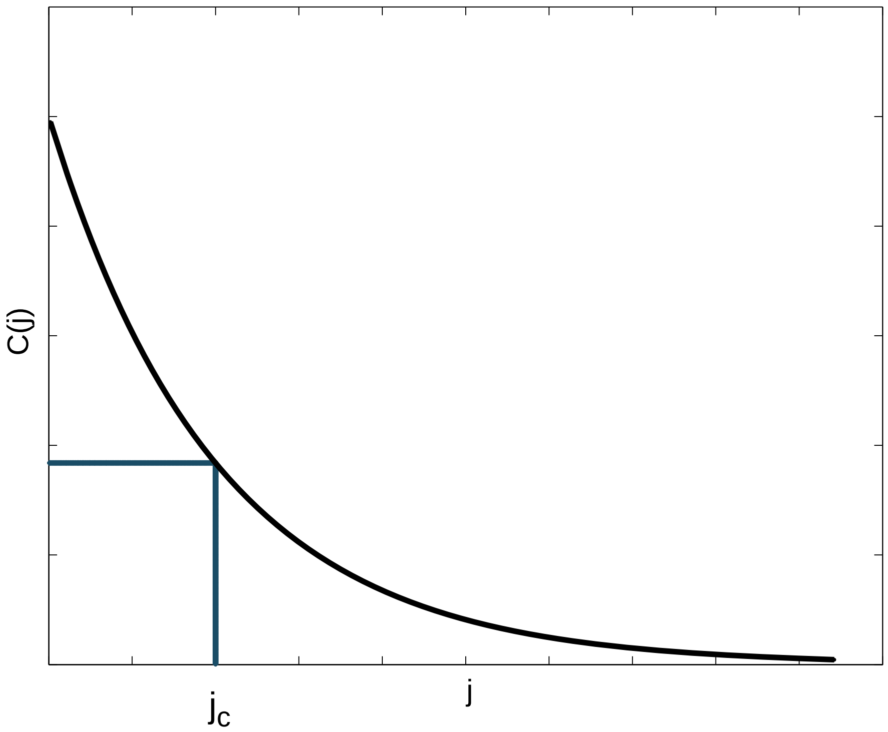
۷ قضیه‌ی حد مرکزی

$$y = \frac{۱}{N\bar{x}}\sum_{i=۱}^{N} x_i - ۱ \tag{۳۷}$$

$$p(y) \propto e^{-y^۲/۲\sigma^۲} \tag{۳۸}$$

۸ بهینه کردن مولد تصادفی

$$C(j) = \frac{\langle x_i x_{i+j}\rangle_i - \langle x_i\rangle_i^۲}{\langle x_i^۲\rangle_i - \langle x_i\rangle_i^۲} \tag{۳۹}$$



شکل ٦: تابع خودهمبستگی بر حسب طول قدم.