فرهنگ و اندیشهٔ ریاضی
سال ۳۸، شمارهٔ ۶۴ (بهار و تابستان ۱۳۹۸) صص. ۱۷ تا ۳۹

آنالیز عددی*

لوید نیکلاس ترِفتِن

مترجم: شاهرخ اسماعیلی

چکیده

آنالیز عددی مطالعهٔ الگوریتم‌های حل مسائل ریاضیات پیوسته مربوط به متغیرهای حقیقی یا مختلط است. در این مقاله، به بررسی برخی از شاخه‌های اصلی آنالیز عددی، دستاوردهای گذشته و روند احتمالی آن در آینده می‌پردازیم.

۱. نیاز به محاسبات عددی

همه می‌دانند هنگامی که دانشمندان و مهندسان به پاسخ‌های عددی مسائل ریاضی نیاز دارند، به رایانه روی می‌آورند. با وجود این، تصوّری نادرست در مورد این فرآیند، رایج است. قدرت اعداد، خارق‌العاده بوده است. بسیار شنیده‌ایم که انقلاب علمی زمانی به وقوع پیوست که گالیله و دیگران اصلی را بنا نهادند که بر پایهٔ آن، همه چیز باید اندازه‌گیری شود. اندازه‌گیری‌های عددی منجر به بیان قوانین فیزیکی با فرمول‌های ریاضی شد و در چرخه‌ای جالب توجه که فوایدش به ما نیز رسیده است، اندازه‌گیری‌های دقیق‌تر به تصحیح قوانین انجامید که این خود، به فناوری بهتر و اندازه‌گیری‌های باز هم دقیق‌تر منجر شده است. زمان آن به سر آمده که بدون ریاضیاتِ عددی، پیشرفتی در علوم فیزیکی قابل دستیابی باشد و یا محصول مهندسیِ بااهمیتی ارائه شود.

عبارات و کلمات کلیدی. آنالیز عددی؛ روش حذفیِ گاوس؛ حل عددیِ معادلات دیفرانسیل؛ بهینه‌سازی عددی؛ پایداریِ روش‌های عددی.

* نام و نشان مقاله به زبان اصلی از این قرار است:
Trefethen Lloyd N., Numerical Analysis, in *The Princeton Companion to Mathematics*, IV.21, 604–615, Princeton University Press, 2008.

© ۱۳۹۸ (انجمن ریاضی ایران)

رایانه‌ها قطعاً در این موضوع نقش دارند اما هنوز سوءتفاهمی دربارهٔ نقش آنها وجود دارد. بسیاری از مردم تصوّر می‌کنند که دانشمندان و ریاضیدانان فرمول‌ها را تولید می‌کنند و سپس با قرار دادن اعداد در این فرمول‌ها، رایانه‌ها نتایج لازم را به‌دست می‌آورند. این تصوّر هیچ شباهتی به واقعیت ندارد. به‌راستی آنچه روی می‌دهد، فرآیندی به‌مراتب جالب‌تر از اجرای *الگوریتم‌ها* است. در اغلب موارد، این کار حتی با فرمول‌ها نمی‌تواند انجام شود، زیرا بسیاری از مسائل ریاضی با دنباله‌ای متناهی از عملیات مقدماتی حل نمی‌شوند. در واقع، آنچه اتفاق می‌افتد این است که الگوریتم‌های سریع به جواب‌های «تقریبی» که تا سه، ده، یا صد رقم دقت دارند، به‌سرعت همگرا می‌شوند. برای کاربردی علمی یا مهندسی، چنین جوابی ممکن است به‌خوبیِ جوابِ دقیق باشد.

با مثالی مقدماتی می‌توان پیچیدگی‌های جواب دقیق را در برابر جواب تقریبی نشان داد. فرض کنیم چندجمله‌ای درجه‌چهارِ

$$p(z) \equiv c_0 + c_1 z + c_2 z^2 + c_3 z^3 + c_4 z^4$$

و چندجمله‌ای درجه‌پنجِ

$$q(z) \equiv d_0 + d_1 z + d_2 z^2 + d_3 z^3 + d_4 z^4 + d_5 z^5$$

داده شده باشند. به‌خوبی می‌دانیم که فرمولی صریح برای بیان ریشه‌های p برحسب رادیکال‌ها وجود دارد اما چنان‌که روفینی[۱] و آبل[۲] [VI.33][۳] ثابت کردند، چنین فرمولی برای ریشه‌های q وجود ندارد (برای مطالعهٔ جزئیات بیشتر دربارهٔ حل‌ناپذیری معادلهٔ درجه‌پنج، [V.21] را مطالعه کنید). بنابراین در چارچوب یک برداشت فلسفی خاص، مسائل ریشه‌یابی p و q به‌کلی متفاوت هستند گرچه در عمل تفاوت چندانی ندارند. اگر دانشمندی یا ریاضیدانی بخواهد ریشه‌های یکی از اینها را بداند، با رایانه در کمتر از یک‌هزارم ثانیه جوابی با شانزده رقم دقت به‌دست می‌آورد. آیا رایانه‌ها از فرمولی صریح استفاده می‌کنند؟ در مورد q قطعاً پاسخ منفی است اما در مورد p چطور؟ بلی! شاید؛ شاید هم خیر! معمولاً کاربر نه می‌داند و نه برایش مهم است که (و شاید از بین یک‌صد ریاضیدان حتی یک نفر نتواند) فرمول ریشه‌های p را از حفظ بنویسد.

در اینجا سه نمونه از مسائلی را ذکر می‌کنیم که در اصل می‌توان آنها را با دنباله‌ای متناهی از عملیات مقدماتی، مانند یافتن ریشه‌های p، حل کرد.

(۱) معادله‌های خطی: حل دستگاهی با n معادلهٔ خطی و n مجهول؛

[۳] ارجاع‌هایی اینچنین در این متن، به قسمت و فصل کتاب The Princeton Companion to Mathematics, 2008 اشاره دارند. برای مثال، منظور از [VI.33]، ارجاع به فصل ۳۳ از قسمت ششم کتاب مذکور است-م.

[۱] Paolo Ruffini [۲] Niels Henrik Abel

(۲) برنامه‌ریزی خطی: کمینه کردن تابعی خطی با n متغیر و m قید خطی؛

(۳) مسئلهٔ فروشندهٔ دوره‌گرد: یافتن کوتاهترین گشت بین n شهر

و پنج مسئله که مانند یافتن ریشه‌های q، در حالت کلی نمی‌توان به این شکل آنها را حل کرد.

(۴) یافتن ویژه‌مقداری [I.3§4.3] از ماتریسی $n \times n$؛

(۵) کمینه کردن تابعی چندمتغیره؛

(۶) یافتن مقدار یک انتگرال؛

(۷) حل یک معادلهٔ دیفرانسیل معمولی؛

(۸) حل یک معادلهٔ دیفرانسیل با مشتقات جزئی.

آیا می‌توان نتیجه گرفت که (۱)–(۳) آسان‌تر از (۴)–(۸) است؟ قطعاً نه. در واقع اگر n مثلاً چندصد یا چندهزار باشد، مسئلهٔ (۳) بسیار دشوار است. مسائل (۶) و (۷) نسبتاً آسان هستند؛ دست‌کم اگر انتگرال در فضای یک‌بُعدی باشد. مسائل (۱) و (۴) تقریباً به یک اندازه دشوار هستند: هنگامی که n کوچک است، مانند ۱۰۰، آسان و هنگامی که n بزرگ است، مانند ۱,۰۰۰,۰۰۰، اغلب بسیار دشوار هستند. در واقع در چنین مواردی اندیشه، راهنمایی ضعیف برای عمل است چنان‌که برای هر سه مسئلهٔ (۱)–(۳)، وقتی n و m بزرگ باشند، اغلب از جواب دقیق چشم‌پوشی می‌شود و در عوض، از روش‌های تقریبی (اما سریع!) استفاده می‌شود.

آنالیز عددی مطالعهٔ الگوریتم‌های حل مسائل ریاضیات پیوسته است مربوط به متغیرهای حقیقی یا مختلط است (این تعریف شامل مسائلی مانند برنامه‌ریزی خطی و مسئلهٔ فروشندهٔ دوره‌گرد است که روی اعداد حقیقی مطرح می‌شوند اما شامل مسائل گسسته متناظرشان نمی‌شود). در ادامهٔ این مقاله، به بررسی برخی از شاخه‌های اصلی آنالیز عددی، دستاوردهای گذشته و روند احتمالی آن در آینده می‌پردازیم.

۲. تاریخچه

در طول تاریخ، ریاضیدانان پیشرو با کاربردهای علمی سروکار داشته‌اند و این در بسیاری از موارد به کشف الگوریتم‌هایی عددی منجر شده است که تا به امروز استفاده می‌شوند. مطابق معمول، گاوس[۱] [VI.26] نمونه‌ای برجسته است. از بین بسیاری از کارهای دیگر او، گاوس پیشرفت‌های تعیین‌کننده‌ای در برازش داده‌ها به روش کمترین مربعات (۱۷۹۵)، دستگاه‌های معادله‌های خطی (۱۸۰۹) و انتگرال‌گیری عددی (۱۸۱۴) پدید آورده است. همچنین تبدیل سریع فوریه را ابداع کرده است [III.26] (۱۸۰۵) هرچند این مورد آخر تا کشف دوبارهٔ آن توسط کولی[۲] و توکی[۳] در سال ۱۹۶۵، چندان شناخته شده نبود.

[۱] Carl Friedrich Gauss [۲] James William Cooley [۳] John Tukey

در حدود سال ۱۹۰۰، خودنمایی جنبهٔ عددی ریاضیات در فعالیت‌های پژوهشی ریاضیدانان رو به کاهش گرایید. این پیامدی از رشد ریاضیات به‌طور کلی و پیشرفت‌های بزرگ در زمینه‌هایی بود که به دلایل فنی، لازم بود دقت زیاد ریاضی در مرکز توجه قرار گیرد. برای مثال، پیشرفت‌های بسیار در اوایل قرن بیستم از توانایی جدید ریاضیدانان در استدلال دقیق در مورد بی‌نهایت برمی‌خواست و این موضوع، از محاسبات عددی نسبتاً دور است. یک نسل گذشت و در دههٔ ۱۹۴۰ رایانه اختراع شد. پس از آن، ریاضیات عددی این بار عمدتاً به‌دست متخصصان شروع به گسترش کرد. مجله‌های جدید مانند *ریاضیات محاسبه*[۱] (۱۹۴۳) و *ریاضیات عددی*[۲] (۱۹۵۹) منتشر شدند. جرقهٔ انقلاب با استفاده از سخت‌افزار زده شد اما شامل توسعه‌های ریاضی و الگوریتمی بود که هیچ پیوندی با سخت‌افزار نداشتند. در نیمهٔ دوم قرن که از دههٔ ۱۹۵۰ آغاز شد، سرعت ماشین‌ها با ضریبی در حدود 10^9 افزایش یافت اما این پدیده در مورد بهترین الگوریتم‌های شناخته‌شده برای برخی مسائل نیز رخ داد و این دو با هم، منجر به افزایش سرعت در مقیاسی تقریباً غیرقابل تصوّر شد.

از نیم قرن پیش به این سو، آنالیز عددی به یکی از بزرگترین شاخه‌های ریاضیات با هزاران پژوهشگر اختصاصی بدل شده است که در تعداد زیادی از مجله‌های ریاضیات و نیز مجله‌های کاربردی در علوم و مهندسی آثار خود را منتشر می‌کنند. به‌لطفِ تلاش‌های چنین افرادی در چندین دههٔ قبل و رایانه‌های قوی‌تر، به جایی رسیده‌ایم که بیشترین مسائل کلاسیک ریاضی در علوم فیزیکی را می‌توان به‌صورت عددی با دقت بالایی حل کرد. بسیاری از الگوریتم‌هایی که این امکان را فراهم می‌کنند، پس از سال ۱۹۵۰ اختراع شدند.

آنالیز عددی بر پایه‌ای قوی ساخته شده است که همان مبحث ریاضی *نظریهٔ تقریب* است. این زمینه شامل مسائل کلاسیک از جمله درونیابی، بسط‌های سری و آنالیز همساز [IV.11] منسوب به نیوتن [VI.14] فوریه [VI.25] گاوس و دیگران؛ مسائل نیمه‌کلاسیک از قبیل چندجمله‌ای‌ها و تقریب مینیماکس گویا منسوب به چبیشف[۳] [VI.45] و برنشتاین[۴]؛ و مباحث مهم نوین شامل اسپلاین‌ها، توابع پایه‌ای شعاعی و موجک‌ها [VII.3] است. ما در اینجا مجال پرداختن به این مباحث را نداریم اما واقعیت این است که تقریباً در هر حوزه از آنالیز عددی، دیر یا زود، بحث به نظریهٔ تقریب کشیده می‌شود.

۳. حساب ماشینی و خطاهای گردکردن

به‌خوبی می‌دانیم که رایانه‌ها نمی‌توانند اعداد حقیقی یا مختلط را دقیقاً نمایش دهند. برای مثال، یافتن مقدار کسری همچون $\frac{1}{7}$ با رایانه، معمولاً منجر به نتیجه‌ای غیردقیق می‌شود. (اگر ماشین‌هایی طراحی کنیم که در پایهٔ ۷ کار کنند، اوضاع متفاوت خواهد بود!) رایانه‌ها اعداد حقیقی را با یک دستگاه

[۱] Mathematics of Computation [۲] Numerische Mathematik [۳] Pafnuty L. Chebyshev [۴] Sergei N. Bernstein

حساب ممیز شناور تقریب می‌زنند که در آن، هر عدد با یک معادل رقمی از نماد علمی نمایش داده می‌شود طوری که مقیاس چندان مهم نیست مگر اینکه عدد چنان بزرگ یا کوچک باشد که سبب سرریز یا پی‌ریز شود. حساب ممیز شناور در دهۀ ۱۹۳۰ توسط کنراد تسوزه[۱] در برلین اختراع و تا پایان دهۀ ۱۹۵۰ در سراسر صنعت رایانه استاندارد شد.

تا دهۀ ۱۹۸۰ رایانه‌های متفاوت، ویژگی‌های حسابی بسیار متفاوتی داشتند. در سال ۱۹۸۵ پس از سال‌ها بحث و گفتگو، استاندارد IEEE (انجمن مهندسان برق و الکترونیک) برای حساب ممیز شناور دودویی یا به اختصار *حساب IEEE* پذیرفته شد. پس از آن، این استاندارد روی بسیاری از انواع پردازنده‌ها تا حدی فراگیر شد. یک عدد حقیقی IEEE (در دقت دو برابر) شامل کلمه‌ای ۶۴ بیتی است که به ۵۳ بیت برای جزء کسری علامتدار در پایۀ ۲ و ۱۱ بیت برای نمای علامتدار تقسیم شده است. چون $۲^{-۵۳} \approx ۱/۱ \times ۱۰^{-۱۶}$، اعداد IEEE با دقتی نسبی در حدود $۱۰^{-۱۶}$ اعداد خط حقیقی را نمایش می‌دهند. چون $۲^{\pm ۲^{۱۰}} \approx ۱۰^{\pm ۳۰۸}$، این دستگاه برای اعدادی در محدودۀ $۱۰^{-۳۰۸}$ تا $۱۰^{۳۰۸}$ استفاده می‌شود.

البته رایانه‌ها تنها اعداد را نمایش نمی‌دهند، آنها عملیاتی مانند جمع، تفریق، ضرب و تقسیم را روی اعداد انجام می‌دهند و نتایج پیچیده‌ترِ دنباله‌هایی از این عملیات مقدماتی را به‌دست می‌آورند. در حساب ممیز شناور، نتیجۀ حاصل از هر عمل مقدماتی تقریباً به‌طور کامل درست است به این مفهوم که اگر «$*$» مطابق نمونۀ واقعی یکی از این چهار عمل و «$\circledast$» شکل رایانه‌ای آن باشد، آن‌گاه برای اعداد ممیز شناور x و y دلخواه که هیچ پی‌ریز یا سرریزی ندارند،

$$x \circledast y = (x * y)(۱ + \varepsilon).$$

در اینجا ε کمیتی بسیار کوچک است و قدرمطلق آن از عددی موسوم به *اپسیلون ماشین* که دقت رایانه را اندازه می‌گیرد و با $\varepsilon_{\text{mach}}$ مشخص می‌شود، بزرگتر نیست. در دستگاه IEEE،

$$\varepsilon_{\text{mach}} = ۲^{-۵۳} \approx ۱/۱ \times ۱۰^{-۱۶}.$$

بنابراین برای مثال، در رایانه بازۀ $[۱, ۲]$ تقریباً با $۱۰^{۱۶}$ عدد نمایش داده می‌شود. مقایسۀ کوچک بودنِ این گسسته‌سازی با گسسته‌سازی‌های فیزیک جالب است. در تعدادی انگشت‌شمار از مواد جامد یا مایع یا در بادکنکی پر از گاز، تعداد اتم‌ها یا ملکول‌ها در مسیری مستقیم از نقطه‌ای تا نقطه‌ای دیگر از مرتبۀ $۱۰^{۸}$ است (ریشۀ سوم عدد آووگادرو). چنین دستگاهی به‌اندازۀ کافی مانند یک پیوستار رفتار می‌کند تا تعریف‌های ما از کمیت‌های فیزیکی مانند چگالی، فشار، تنش، کرنش و دما توجیه شوند. با این همه، حساب رایانه‌ای، بیش از یک میلیون برابر ریزتر از این است. مقایسۀ دیگر با فیزیک به دقت ثابت‌های

[۱] Konrad Zuse

اساسی شناخته‌شده مربوط می‌شود؛ مانند (تقریباً) ۴ رقم برای ثابت گرانشی G، ۷ رقم برای ثابت پلانک h و بار بنیادی e و ۱۲ رقم برای نسبت μ_e/μ_B گشتاور مغناطیسی الکترون بر مگنتون بور. در حال حاضر، تقریباً هیچ چیزی در فیزیک با بیش از ۱۲ یا ۱۳ رقم دقت شناخته‌شده نیست. بنابراین اعداد IEEE چندین مرتبه از هر عددی در علوم، دقیق‌تر هستند (البته کمیت‌های کاملاً ریاضی مانند π، موضوع دیگری است).

بنابراین حساب ممیز شناور در مقایسه با فیزیک، از دو جهت به حالت آرمانی بسیار نزدیک‌تر است. پدیدهٔ عجیب و غریبی است که با وجود این، به‌جای قوانین فیزیک، حساب ممیز شناور به‌طور گسترده‌ای به‌عنوان توافقی زشت و خطرناک تلقی شده است. آنالیزدان‌های عددی تا حدی خودشان را در مورد این وضعیت مقصر می‌دانند. در دهه‌های ۱۹۵۰ و ۱۹۶۰ بنیانگذاران این رشته پی بردند که محاسبهٔ نادقیق می‌تواند منبع خطر باشد و سبب خطا در نتایجی می‌شود که «بایستی» درست باشند. منبع چنین مشکلاتی *ناپایداریِ عددی* است؛ به‌معنای تقویت خطاهای گردکردن از مقیاس ریز به درشت با سبک مشخصی از محاسبات. کسانی مانند فون‌نویمان[۱] [VI.91]، ویلکینسن[۲]، فورسایت[۳] و هنریتسی[۴] دردسرهای فراوانی را متحمل شدند تا خطرهای اتکای بی‌پروا به ماشین‌حساب را به همه بفهمانند. این خطرها بسیار واقعی هستند اما انتقال این پیام چنان موفقیت‌آمیز بود که در دورهٔ معاصر این تصوّر را شایع کرد که وظیفهٔ اصلی آنالیز عددی مقابله با خطاهای گردکردن است. در واقع وظیفهٔ اصلی آنالیز عددی طراحی الگوریتم‌هایی است که به‌سرعت همگرا شوند؛ در حالی که تحلیل خطای گردکردن، اغلب بخشی از این بحث و به‌ندرت موضوع اساسی است. اگر خطاهای گردکردن صفر شود، باز هم ۹۰ درصد آنالیز عددی باقی خواهد ماند.

۴. جبرخطی عددی

در دهه‌های ۱۹۵۰ و ۱۹۶۰ جبرخطی به موضوعی متعارف در برنامه آموزشی کارشناسی ریاضی بدل شد و از آن زمان تاکنون به همان صورت باقی مانده است. دلایل متعددی برای این رخداد وجود دارد اما فکر می‌کنم دلیل اصلی این است که اهمیت جبرخطی از زمان ورود رایانه‌ها بسیار بیشتر شده است.

نقطهٔ آغاز این موضوع، *روش حذفیِ گاوس* است؛ شیوه‌ای که به‌کمک آن می‌توان n معادلهٔ خطی با n مجهول را با مرتبهٔ n^3 عملِ حسابی حل کرد. به عبارت دیگر، در روش حذفیِ گاوس معادله‌هایی به‌شکل $Ax = b$ حل می‌شود که در آن، A ماتریسی $n \times n$ و x و b بردارهایی ستونی با اندازهٔ n هستند. در سراسر جهان و تقریباً در هر زمان که دستگاهی از معادله‌های خطی در رایانه‌ها حل شود، روش حذفیِ گاوس به‌کار گرفته می‌شود. حتی اگر n برابر با ۱۰۰۰ باشد، با استفاده از یک ماشین محاسباتی رومیزی سال ۲۰۰۸، زمان مورد نیاز از یک ثانیه هم کمتر است. ایدهٔ حذف را اولین بار پژوهشگران چینی

[۱] John von Neumann [۲] James H. Wilkinson [۳] Peter Forsyth [۴] Peter Henrici

در حدود ۲۰۰۰ سال پیش و نویسندگان جدید مانند لاگرانژ[۱] [VI.22]، گاوس و ژاکوبی[۲] [VI.35] کشف کردند. با وجود این، روش نوین توصیف چنین الگوریتم‌هایی ظاهراً در اواخر دهۀ ۱۹۳۰ معرفی شد. فرض کنیم مثلاً α برابرِ سطر نخست A از سطر دوم کم شود. این عمل را می‌توان ضرب A از چپ در ماتریس پایین مثلثی M_1 (ماتریسی مشابه ماتریس همانی بجز با درایۀ ناصفر $m_{21} = -\alpha$) تعبیر نمود. سایر عملیات سطری مشابه، با سایر ضرب‌ها از چپ در ماتریس‌های پایین مثلثی M_j متناظر هستند. اگر در k مرحله ماتریس A به ماتریس بالا مثلثی U تبدیل شود، آن‌گاه با فرضِ $M = M_k \cdots M_2 M_1$ داریم $MA = U$ و با فرضِ $L = M^{-1}$ داریم $A = LU$. در اینجا L بالا مثلثی یکه است، یعنی ماتریسی بالا مثلثی که همۀ درایه‌های قطری آن برابر با ۱ است. چون U ساختار هدف را نشان می‌دهد و L عملیات رسیدن به آن را کدگذاری می‌کند، می‌توان گفت که روش حذفیِ گاوس فرآیندی است که *پایین مثلثی را بالا مثلثی می‌سازد*.

بسیاری از الگوریتم‌های دیگر جبرخطی عددی نیز بر اساس نوشتن ماتریسی به‌صورت حاصل‌ضرب ماتریس‌ها بنا شده است که ویژگی‌های خاصی دارند. با اقتباس از تعبیری در زیست‌شناسی، می‌توان گفت این زمینه حول اندیشۀ محوریِ

الگوریتم‌ها $\longleftrightarrow$ تجزیه‌های ماتریسی

شکل گرفته است. در این چارچوب می‌توانیم الگوریتم بعدی را که باید بررسی شود، به‌سرعت توصیف کنیم. هر ماتریسی تجزیۀ LU ندارد؛ مثالی نقض، ماتریس 2×2ی

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

است. پس از به‌کارگیری رایانه‌ها، طولی نکشید دریافتند که حتی برای ماتریس‌هایی که تجزیۀ LU دارند، شکل اولیۀ روش حذفیِ گاوس ناپایدار است، زیرا خطاهای گردکردن بالقوه به مقدار زیادی تقویت می‌شدند. پایداری ممکن است با تعویض سطرها در خلال حذف به‌منظور آوردن درایه‌های بیشینه روی قطر به‌دست آید؛ فرآیندی که به *محورگیری* معروف است. چون محورگیری روی سطرها اعمال می‌شود، با ضرب ماتریس‌های دیگری از چپ در A، متناظر است. تجزیۀ ماتریسیِ متناظر روش حذفیِ گاوس با محورگیری، $PA = LU$ است که در آن، U بالا مثلثی، L پایین مثلثی یکه و P یک ماتریس جایگشت، یعنی ماتریس همانی با سطرهای جابه‌جا شده است. اگر در مرحلۀ kامِ فرآیند حذف، جایگشت‌ها طوری انتخاب شوند که بزرگترین درایه زیر قطر در ستون k در موضع (k, k) جای گرفته باشد، آن‌گاه L برای هر i و j دارای ویژگی اضافی $|\ell_{ij}| \leqslant 1$ خواهد بود.

[۱] Joseph-Louis Lagrange [۲] Carl Gustav Jacob Jacobi

کشف محورگیری به‌سرعت رخ داد اما تجزیه و تحلیل نظریِ آن با دشواری زیادی انجام شد. محورگیری در عمل، روش حذفیِ گاوس را تقریباً به‌طور کامل پایدار می‌کند و این کم و بیش در همهٔ برنامه‌های رایانه‌ای که برای حل دستگاه‌های معادله‌های خطی مورد نیاز هستند، به‌صورت یک روال درآمده است. با این حال، در حدود سال ۱۹۶۰ ویلکینسن و دیگران متوجه شدند که برای بعضی ماتریس‌های استثنایی، روش حذفیِ گاوس حتی با محورگیری هم ناپایدار است. نبودِ توضیحی برای این ویژگی، شکافی ناخواسته در باطن آنالیز عددی محسوب می‌شود. آزمایش‌های عددی نشان می‌دهند که آن بخش از ماتریس‌ها (برای مثال، از بین ماتریس‌های تصادفی با درایه‌های دارای توزیع مستقل نرمال) که روش حذفیِ گاوس، خطاهای گردکردن را برای آنها با عاملی بزرگتر از $\rho n^{\frac{1}{2}}$ افزایش می‌دهد، به معنای مشخصی به‌عنوان تابعی از ρ وقتی $\rho \to \infty$، به‌صورت نمایی کوچک می‌شود که در اینجا n بُعد است. با این حال، هنوز قضیه‌ای با این مضمون ثابت نشده است.

در همین حال، از اواخر دههٔ ۱۹۵۰ زمینهٔ جبرخطی عددی در جهت‌های دیگری توسعه یافت که بر استفاده از الگوریتم‌های مبتنی بر ماتریس‌های متعامد یا یکانی [III.50] استوار بودند، یعنی ماتریس‌های حقیقی با $Q^{-1} = Q^T$ و یا ماتریس‌های مختلط با $Q^{-1} = Q^*$ که در آن، Q^* ترانهادهٔ مزدوج است. اندیشهٔ تجزیهٔ QR نقطهٔ آغاز چنین تحوّلاتی است. اگر A ماتریسی $m \times n$ با $m \geqslant n$ باشد، تجزیهٔ QR ماتریس A عبارت است از $A = QR$ که در آن، Q دارای ستون‌های یکامتعامد و R بالا مثلثی است. این فرمول را می‌توان یک حالت ماتریسی از ایدهٔ آشنای *متعامدسازی گرَم–اشمیت* تعبیر کرد که در آن، ستون‌های q_1، q_2، ... از Q یکی پس از دیگری تعیین می‌شوند. این عملیات ستونی متناظر با ضرب A از راست در ماتریس‌های بالا مثلثی مقدماتی است. می‌توان گفت که الگوریتم گرَم–اشمیت برای رسیدن به Q است و R به‌عنوان پیامدی جانبی به‌دست می‌آید و بنابراین یک فرآیند *متعامدسازی مثلثی* است. پیشامد بزرگ زمانی رخ داد که هَوسهُلدر[1] در سال ۱۹۵۸ نشان داد یک راهبُرد دوگان از *مثلثی‌سازی متعامد* برای حل بسیاری از مسائل، مؤثر است. در این رویکرد، با استفاده از عملیات ماتریسی مقدماتیِ پی‌درپی که هر کدام، قرینهٔ $\mathbb{R}^m$ را نسبت به ابرصفحه‌ای به‌دست می‌آورد، می‌توان A را با عملیات متعامد به شکل بالا مثلثی ساده کرد: هدف، رسیدن به R است و Q به‌عنوان پیامدی جانبی به‌دست می‌آید. روش هَوسهُلدر به‌لحاظ عددی، پایدارتر عمل می‌کند، زیرا عملیات متعامد، نُرم‌ها را حفظ می‌کند و بنابراین خطاهای گردکردن را که در هر مرحله وارد می‌شوند، تقویت نمی‌کند.

از تجزیهٔ QR در دههٔ ۱۹۶۰، مجموعه‌ای پربار از الگوریتم‌های جبرخطی به وجود آمد. تجزیهٔ QR را می‌توان به‌خودیِ خود برای حل مسائل کمترین مربعات و ساختن پایه‌های یکامتعامد به‌کار گرفت. بیشتر کاربرد آن استفاده در مراحل میانی الگوریتم‌های دیگر است. به‌ویژه یکی از مسائل اساسی در جبرخطی

[1] Alston Scott Hauseholder

عددی تعیین ویژه‌مقدارها و ویژه‌بردارهای ماتریس مربعی A است. اگر A دارای مجموعه‌ای کامل از ویژه‌بردارها باشد، آن‌گاه با تشکیل ماتریس X که ستون‌های آن، این ویژه‌بردارها و ماتریس قطری D که درایه‌های قطری آن ویژه‌مقدارهای متناظر هستند، خواهیم داشت $AX = XD$ و بنابراین چون X ناتکین است، $A = XDX^{-1}$ که *تجزیهٔ ویژه‌مقداری* نام دارد. در حالت خاصی که A ارمیتی[۱] [III.50] است، همیشه مجموعه‌ای کامل از ویژه‌بردارهای یکامتعامد وجود دارد و $A = QDQ^*$ که در آن، Q یکانی است. برای پیدا کردنِ این تجزیه‌ها، در اوایل دههٔ ۱۹۶۰ فرانسیس[۲]، کوبلانوفسکایا[۳] و ویلکینسن الگوریتمی استاندارد به‌نام *الگوریتم* QR ابداع کردند. چون معادله‌های چندجمله‌ای از درجهٔ پنج و بیشتر از آن را نمی‌توان با یک فرمول شامل رادیکال‌ها حل کرد، معلوم می‌شود که در حالت کلی ویژه‌مقدارها را نمی‌توان به‌شکل بسته محاسبه کرد. بنابراین الگوریتم QR لزوماً تکراری و شامل دنباله‌ای از تجزیه‌های QR است و در واقع شامل بی‌نهایت جمله است. با وجود این، همگراییِ آن فوق‌العاده سریع است. در حالت متقارن برای ماتریس نوعی A، الگوریتم QR همگرای *مرتبه‌سه* است، به این معنی که در هر مرحله تعداد ارقامِ درست در یک جفت ویژه‌مقدار–ویژه‌بردار، تقریباً سه برابر می‌شود.

الگوریتم QR یکی از بزرگترین دستاوردهای آنالیز عددی است و تأثیر بسیار زیادی بر محصولات نرم‌افزاریِ پرکاربرد داشته است. الگوریتم‌ها و تجزیه و تحلیل بر اساس آن در دههٔ ۱۹۶۰ به کدهای رایانه‌ای در الگول[۴] و فورترن و بعداً به کتابخانهٔ نرم‌افزاریِ EISPACK (بستهٔ ویژه‌دستگاه[۵]) و نسل بعدی آن، LAPACK منجر شد. همان روش‌ها نیز در کتابخانه‌های عددی همه‌منظوره مانند NAG، IMSL و مجموعهٔ *دستورالعمل‌های عددی* و در محیط‌های حل مسئله مانند متلب، میپل و متمتیکا مورد استفاده قرار گرفته‌اند. این پیشرفت‌ها چنان موفق بوده‌اند که محاسبهٔ ویژه‌مقدارهای ماتریس از مدت‌ها پیش تقریباً برای هر دانشمندی به یک عمل «جعبه‌سیاه» تبدیل شده است که جز چند متخصص هیچ‌کس نمی‌داند جزئیات آن چگونه است. به همین صورت LAPACK که نسبت نزدیکی با EISPACK دارد، برای حل دستگاه‌های معادله‌های خطی، عملکردی غیرمنتظره را پذیرفته و به مبنای اصلی معیارهای تمام تولیدکنندگان رایانه برای آزمودن سرعت رایانه‌هایشان تبدیل شده است. اگر ابررایانه‌ای آنقدر خوش‌شانس باشد که در فهرست TOP500 قرار گیرد که از ۱۹۹۳ تاکنون سالی دوبار به‌روز می‌شود، به‌دلیل توانش در حل مسائل مشخص ماتریسی $Ax = b$ با بُعدهایی متغیر از ۱۰۰ تا چند میلیون بوده است.

همهٔ ریاضیدانان با تجزیهٔ ویژه‌مقداری آشنا هستند اما پیشرفت جبرخطی عددی نیز خویشاوند جوانش *تجزیهٔ مقدار تکین* (SVD) را به روی صحنه آورده است. در اواخر قرن نوزدهم، بلترامی[۶]، ژوردان[۷] [VI.52] و سیلوستر[۸] [VI.42] تجزیهٔ مقدار تکین را کشف کردند که حدود سال ۱۹۶۵ با کارهای گالوب[۹]

[۱] Hermitian [۲] John G. F. Francis [۳] Vera N. Kublanovskaya [۴] Algol [۵] eigensystem package
[۶] Eugenio Beltrami [۷] Camille Jordan [۸] James Joseph Sylvester [۹] Gene H. Golub

و آنالیزدان‌های عددی دیگر به شهرت رسید. اگر A ماتریسی $m \times n$ با $m \geqslant n$ باشد، تجزیهٔ مقدار تکینِ A تجزیه به عامل‌های $A = U\Sigma V^*$ است که در آن، U ماتریسی $m \times n$ با ستون‌های یکامتعامد، V ماتریسی $n \times n$ و یکانی و Σ قطری با درایه‌های قطری $\sigma_1 \geqslant \sigma_2 \geqslant \cdots \geqslant \sigma_n \geqslant 0$ است. تجزیهٔ مقدار تکین را می‌توان با مربوط ساختن آن به مسائل ویژه‌مقدار برای AA^* و A^*A محاسبه کرد اما این کار به‌لحاظ عددی ناپایدار است. یک روش بهتر، به‌کارگیریِ صورت دیگری از الگوریتم QR است که A را مجذور نمی‌کند. در حالتی که A مربعی و ناتکین باشد، پیدا کردنِ تجزیهٔ مقدار تکین، مسیری متعارف برای تعیین نُرم ماتریس [III.62] به‌صورت $\|A\| = \sigma_1$ (در اینجا $\|\cdot\|$ نُرم فضای هیلبرت [III.37] یا نُرم ۲ است)، نرم وارون آن $\|A^{-1}\| = 1/\sigma_n$ یا حاصل‌ضرب آنها معروف به عدد *(ضریبِ) وضعیت*[1] است

$$\kappa(A) = \|A\|\|A^{-1}\| = \sigma_1/\sigma_n.$$

تجزیهٔ مقدار تکین همچنین مرحله‌ای میانی در حل مسائل محاسباتی گوناگونی از قبیل کمترین مربعات رتبهٔ ناقص، محاسبهٔ بُردها و فضاهای پوچ، تعیین رتبه‌ها، «کمترین مربعات تام»، تقریب کم-رتبه و تعیین زاویه‌های بین زیرفضاها است.

کل بحث بالا به جبرخطی عددی «کلاسیک» مربوط می‌شود که در دورهٔ ۱۹۵۰-۱۹۷۵ متولد شد. در ربع پایانیِ قرن، شاهد ابداع دسته‌ای کاملاً جدید از ابزارها با عنوان روش‌هایی برای بررسی مسائل بزرگ-مقیاس بر اساس *تکرارهای زیرفضای کریلف*[2] هستیم. ایدهٔ این تکرارها به این شرح است. فرض کنیم مسئله‌ای در جبرخطی داده شده است که شامل ماتریسی با ابعاد بالا، مثلاً $n \gg 1000$ است. جواب مسئله را می‌توان با بردار $x \in \mathbb{R}^n$ توصیف کرد که در یک ویژگی وردشیِ مشخص مانند کمینه کردنِ $\frac{1}{2}x^TAx - x^Tb$ (برای حل $Ax = b$ اگر A متقارن و معینِ مثبت باشد) یا نقطه‌ای ایستا بودن از $(x^TAx)/(x^Tx)$ (برای حل $Ax = \lambda x$ اگر A متقارن باشد) صدق می‌کند. اکنون اگر K_k زیرفضایی kبُعدی از $\mathbb{R}^n$ با $k \ll n$ باشد، آن‌گاه ممکن است بتوان همان مسئلهٔ وردشی را در این زیرفضا خیلی سریع‌تر حل کرد. انتخابی خیلی خوب برای K_k *زیرفضای کریلف*،

$$K_k(A, q) = \operatorname{span}(q, Aq, \ldots, A^{k-1}q)$$

با بردار اولیهٔ q است. به دلایلی که پیوندی جذاب با نظریهٔ تقریب دارد، اگر ویژه‌مقدارهای A به‌صورت مطلوبی توزیع شده باشند، جواب‌ها در این زیرفضا هنگامی که k افزایش می‌یابد، اغلب خیلی سریع به جواب دقیق در $\mathbb{R}^n$ همگرا می‌شوند. برای مثال، می‌توان مسئله‌ای ماتریسی شامل 10^5 مجهول را با ده

[1] condition number [2] Krylov subspace iterations

رقم دقت تنها در چندصد تکرار حل کرد. افزایش سرعت در این روش در مقایسه با الگوریتم‌های کلاسیک، ممکن است هزارها برابر باشد.

در سال ۱۹۵۲ تکرارهای زیرفضای کریلف با گرادیان مزدوج و تکرارهای لَنتسوش[۱] پایه‌گذاری و منتشر شد اما در آن سال‌ها رایانه‌ها به‌اندازهٔ کافی توانایی حل مسائل با مقیاس نسبتاً بزرگ برای این روش‌ها را نداشتند تا بتوانند عملاً رقابت کنند. در دههٔ ۱۹۷۰ این روش‌ها با کارهای رید و پیج و به‌ویژه فَن دِر فورست[۲] و میرینک[۳] که ایدهٔ *پیش‌شرط‌گذاری* را مطرح کردند، سر بر آوردند. در پیش‌شرط‌گذاری، برای ماتریسی ناتکین همچون M، دستگاه $Ax = b$ با یک دستگاه معادل به‌صورت $MAx = Mb$ جایگزین می‌شود. اگر M به‌خوبی انتخاب شده باشد، مسئلهٔ جدید شامل MA دارای ویژه‌مقدارهایی با توزیع مناسب است و تکرار زیرفضای کریلف می‌تواند آن را به‌سرعت حل کند.

از دههٔ ۱۹۷۰ تکرارهای ماتریسیِ پیش‌شرط‌گذاری‌شده به‌عنوان ابزاری ضروری در علوم محاسباتی ظاهر شده‌اند. نشانه‌ای از برتری آنها این است که در سال ۲۰۰۱ معلوم شد که در دههٔ ۱۹۹۰ مقاله‌ای با بیشترین ارجاع در کل ریاضیات، مقالهٔ فَن دِر فورست در سال ۱۹۸۹ بوده است که در آن، روش Bi-CGStab، تعمیمی از گرادیان مزدوج برای ماتریس‌های نامتقارن، معرفی شده است.

سرانجام، بزرگترین مسئلهٔ حل‌نشده در آنالیز عددی را یادآوری می‌کنیم. آیا می‌توان ماتریس $n \times n$ دلخواه A را با $O(n^\alpha)$ عمل برای هر $\alpha > ۲$ معکوس کرد؟ (مسائل حل دستگاه $Ax = b$ یا محاسبه حاصل‌ضرب ماتریسی AB مشابه این هستند.) در روش حذفیِ گاوس، $\alpha = ۳$ و در برخی الگوریتم‌های (هرچند غیرعملیِ) بازگشتی که در سال ۱۹۹۰ با کارهای کوپرسمیت[۴] و وینوگراد[۵] منتشر شد، نما تا ۲٫۳۷۶ کوچک شده است. آیا در آینده یک «وارون‌گیریِ سریع ماتریسی» خواهیم داشت؟

۵. حل عددی معادله‌های دیفرانسیل

پیش از آنکه به جبرخطی توجه زیادی شود، ریاضیدانان روش‌های عددی برای حل مسائل آنالیز را ابداع کرده بودند. مسئلهٔ انتگرال‌گیری عددی یا *کوادراتور* به گاوس و نیوتن [VI.14] و حتی به ارشمیدس [VI.3] منسوب است. فرمول‌های انتگرال‌گیری عددی کلاسیک از اندیشهٔ درونیابی داده‌ها در $n+۱$ نقطه با یک چندجمله‌ای از درجهٔ n و سپس انتگرال‌گیری دقیق از آن چندجمله‌ای نشأت می‌گیرد. نقاط درونیابی هم‌فاصله، *فرمول‌های نیوتن-کوتس*[۶] را به‌دست می‌دهند که برای درجه‌های کوچک قابل استفاده هستند اما هنگامی که $n \to \infty$، با نرخی به بزرگی ۲^n واگرا می‌شوند: موضوعی که *پدیدهٔ رونگه*[۷] خوانده می‌شود.

[۱] کورنلیوس لَنتسوش (Cornelius Lanczos) ریاضیدان و فیزیکدان مجارستانی بود. نام او به‌صورت‌های لَنشوس و لَنچاس نیز تلفظ می‌شود–م.

[۲] Hendrik van der Vorst [۳] J. A. Meijerink [۴] Don Coppersmith [۵] Shmuel Winograd [۶] Newton-Cotes formulas [۷] Runge's phenomenon

اگر نقاط به‌طور بهینه انتخاب شوند، نتیجه *انتگرال‌گیری عددی گاوس* است که به‌سرعت همگرا می‌شود و به‌طور عددی پایدار است. سرانجام مشخص شد که این نقاط بهینه، ریشه‌های چندجمله‌ای‌های لژاندر هستند که حوالی نقاط انتهایی انباشته می‌شوند (طرح کلی اثبات در توابع خاص [III.85] آمده است). برای بیشتر اهداف، *انتگرال‌گیری عددی کلینشا-کرتیس*[۱] با نقاط درونیابی $\cos(j\pi/n)$، $0 \leqslant j \leqslant n$ به همان خوبی عمل می‌کند. این روش انتگرال‌گیری عددی همچنین پایدار و سریعاً همگرا است و برخلافِ انتگرال‌گیری عددی گاوس، می‌توان آن را با تبدیل سریع فوریه و $O(n \log n)$ عمل اجرا کرد. دلیل ضروری بودنِ نقاط انباشته‌شده برای قواعد انتگرال‌گیری عددی کارا در نظریهٔ پتانسیل نهفته است.

در حدود سال ۱۸۵۰ مسئلهٔ دیگری در آنالیز جلب توجه کرد که همان حل معادله‌های دیفرانسیل معمولی بود. *فرمول‌های آدامز* بر اساس درونیابی چندجمله‌ای در نقاط هم‌فاصله هستند که در عمل معمولاً تعداد آنها کمتر از ده است. اینها نخستین فرمول‌هایی بودند که امروزه *روش‌های چندگامی* برای حل معادله‌های دیفرانسیل معمولی نامیده می‌شوند. روش کار در اینجا برای مسئلهٔ مقدار اولیهٔ $u' = f(t, u)$ به این صورت است که گام زمانیِ کوچک $\Delta t > 0$ را برمی‌گزینیم و مجموعه‌ای متناهی از مقادیر زمانی را در نظر می‌گیریم:

$$t_n = n\Delta t, \quad n \geqslant 0.$$

سپس معادلهٔ دیفرانسیل معمولی را با تقریبی جبری جایگزین می‌کنیم که محاسبهٔ مقادیر تقریبی پیاپی

$$v^n \approx u(t_n), \quad n \geqslant 0$$

را ممکن می‌کند (در اینجا بالانویس، توان نیست). ساده‌ترین فرمول تقریبی از این نوع، منسوب به اویلر [VI.19] و به‌صورت

$$v^{n+1} = v^n + \Delta t f(t_n, v^n)$$

یا اگر قرار دهیم $f^n = f(t_n, v^n)$، به‌صورت

$$v^{n+1} = v^n + \Delta t f^n$$

است. ممکن است هم معادلهٔ دیفرانسیل معمولی و هم تقریب عددیِ آن، شامل یک یا چند معادله باشند که این دومی وقتی رخ می‌دهد که $u(x, t)$ و v^n بردارهایی با بُعد مناسب باشند. فرمول‌های آدامز، تعمیم‌هایی مرتبه‌بالاتر از فرمول اویلر و در تولید جواب‌های دقیق، بسیار کاراتر هستند. برای مثال، فرمول

[۱] Clenshaw-Curtis

مرتبه‌چهارِ آدامز-بشفورت[۱] به‌صورت

$$v^{n+۱} = v^n + \frac{۱}{۲۴}\Delta t(۵۵f^n - ۵۹f^{n-۱} + ۳۷f^{n-۲} - ۹f^{n-۳}).$$

است. اصطلاح «مرتبه‌چهار» مبین عنصری جدید در مباحث آنالیز عددی است که همان پیدایش پرسش‌هایی در مورد همگرایی است وقتی که $\Delta t \to ۰$. فرمول بالا از مرتبهٔ چهارم است به این معنی که معمولاً با نرخ $O((\Delta t)^۴)$ همگرا می‌شود. مرتبه‌هایی که در عمل به‌کار گرفته می‌شوند، اغلب در محدودهٔ ۳ تا ۶ قرار دارند و برای انواع محاسبات، دقتی عالی معمولاً در محدودهٔ ۳ تا ۱۰ رقم پدید می‌آورند. هنگامی که دقتِ بیش از این مورد نیاز باشد، فرمول‌های از مرتبهٔ بالاتر نیز استفاده می‌شوند.

متأسفانه عرف جاری در متون آنالیز عددی چنان است که دربارهٔ *همگراییِ* این روش‌های کارای باشکوه صحبت نمی‌شود، بلکه خطای آنها یا به‌طور دقیق‌تر، *گسسته‌سازی* یا *خطای برشی* آنها، متمایز از خطای گردکردن بررسی می‌شود. این زبان مرسوم در تحلیل خطا، لحنی مأیوس‌کننده دارد و به نظر می‌رسد نتوان آن را تغییر داد.

با آغاز قرن بیستم، رونگه، هُین[۲] و کوتا دومین ردهٔ بزرگ از الگوریتم‌های معادله‌های دیفرانسیل معمولی مشهور به *روش‌های رونگه-کوتا*[۳] یا *تک‌گامی* را ارائه کردند. برای مثال، در اینجا فرمول‌هایی از روش معروف مرتبه‌چهار رونگه-کوتا ارائه می‌شود که جوابی عددی (اسکالر یا دستگاه) از گام زمانی t_n تا $t_{n+۱}$ را به‌کمک چهار مقدار از تابع f به‌دست می‌آورد:

$$\begin{aligned}
a &= \Delta t f(t_n, v^n),\\
b &= \Delta t f(t_n + \frac{۱}{۲}\Delta t, v^n + \frac{۱}{۲}a),\\
c &= \Delta t f(t_n + \frac{۱}{۲}\Delta t, v^n + \frac{۱}{۲}b),\\
d &= \Delta t f(t_n + \Delta t, v^n + c),\\
v^{n+۱} &= v^n + \frac{۱}{۶}(a + ۲b + ۲c + d).
\end{aligned}$$

روش‌های رونگه-کوتا در مقایسه با فرمول‌های چندگامی، آسان‌تر اجرا می‌شوند اما تجزیه و تحلیل آنها گاهی مشکل‌تر است. برای مثال، برای هر s به‌دست آوردنِ ضرایب فرمول s-گامیِ آدامز-بشفورت که مرتبهٔ دقت $p = s$ دارد، موضوعی بدیهی و پیشِ پا افتاده است. به‌عکس، برای روش‌های رونگه-کوتا بین تعداد «مراحل» (یعنی مقدار یابی‌های تابع در هر گام) و مرتبهٔ دقت حاصل، پیوندی ساده وجود ندارد.

[۱] Adams-Bashforth [۲] Karl Heun [۳] Runge-Kutta methods

روش‌های کلاسیک با $s = ۱, ۲, ۳, ۴$ که در سال ۱۹۰۱ برای کوتا شناخته شده بودند، مرتبهٔ دقت $p = s$ دارند اما تا سال ۱۹۶۳ ثابت نشده بود که برای رسیدن به دقتی از مرتبهٔ $p = ۵$، روش $s = ۶$-مرحله‌ای لازم است. تجزیه و تحلیل چنین مسائلی، ریاضیات زیبایی از نظریهٔ گراف و سایر حوزه‌ها را شامل می‌شود و از دههٔ ۱۹۶۰ یکی از افراد کلیدی در این حوزه، جان بوچر[۱] بوده است. برای مرتبه‌های $p = ۶, ۷, ۸$، حداقلِ تعداد مراحل، $s = ۷, ۹, ۱۱$ است در حالی که برای $p > ۸$ حداقلِ دقیقِ مراحل نامعلوم است. خوشبختانه برای منظورهای عملی این روش‌های مرتبه‌بالاتر به‌ندرت مورد نیاز هستند.

پس از جنگ جهانی دوم، هنگامی که رایانه‌ها برای حل معادله‌های دیفرانسیل آغاز به‌کار کردند، یک بارِ دیگر *ناپایداری عددی* به‌عنوان بزرگترین پدیدهٔ بااهمیتِ عملی ظاهر شد. مانند قبل، این عبارت به افزایش نامحدود خطاهای موضعی توسط فرآیندی محاسباتی اشاره دارد اما این بار، خطاهای موضعیِ غالب به‌جای گردکردن، معمولاً مربوط به گسسته‌سازی هستند. ناپایداری معمولاً خودش را به‌صورت خطایی نوسانی در جواب محاسبه‌شده آشکار می‌سازد که با انجام گام‌های عددیِ بیشتر، به‌صورت نمایی افزایش می‌یابد. یکی از ریاضیدانان که با این مفهوم سروکار داشت، یرموند دال‌کوییست[۲] بود. دال‌کوییست دید که این پدیده را می‌توان با عمومیت و اقتدار، تجزیه و تحلیل کرد. برخی افراد پیدایش مقالهٔ او در سال ۱۹۵۶ را نشانهٔ تولد آنالیز عددی نوین می‌دانند. این مقالهٔ برجسته آن چیزی را معرفی کرد که می‌توان *قضیهٔ اساسی آنالیز عددی* نامید:

همگرایی = پایداری + سازگاری.

نظریهٔ مربوط، بر اساس تعریف دقیق این سه مفهوم است که اجمالاً در ادامه خواهد آمد. در ویژگی *سازگاری*، فرمول گسسته دارای مرتبهٔ دقت موضعاً مثبت است و بنابراین معادلهٔ دیفرانسیل معمولی را به‌درستی مدل‌سازی می‌کند. در ویژگی *پایداری*، خطاهای تولید شده در یک گام زمانی نمی‌تواند به‌طور بیکران در زمان‌های بعدی رشد کند. در ویژگی *همگرایی*، در نبودِ خطاهای گردکردن وقتی که $\Delta t \to ۰$، جواب عددی به نتیجهٔ دقیق همگرا می‌شود. قبل از مقالهٔ دال‌کوییست نیز ایدهٔ نوعی هم‌ارزی بین پایداری و همگرایی از این نظر مرسوم بود که پژوهشگران متوجه شدند اگر طرحی عددی ناپایدار نباشد، آن‌گاه به احتمال زیاد، تقریب خوبی از جوابِ درست ارائه می‌کند. نظریهٔ او شکلی موشکافانه از آن اندیشه را برای رده‌ای وسیع از روش‌های عددی ارائه کرد.

همان‌طور که روش‌های رایانه‌ای برای معادله‌های دیفرانسیل معمولی توسعه می‌یافت، این اتفاق برای موضوع خیلی بزرگتر معادله‌های دیفرانسیل با مشتقات جزئی نیز پیش آمد. در حدود سال ۱۹۱۰ ریچاردسن[۳] روش‌های عددی گسسته را برای حل معادله‌های دیفرانسیل با مشتقات جزئی به‌منظور کاربرد

[۱] John Butcher [۲] Germund Dahlquist [۳] Lewis Fry Richardson

در تجزیه و تحلیل تنش و علم هواشناسی ابداع کرد و سَوثول[۱] این روش‌ها را بیشتر توسعه داد. همچنین در سال ۱۹۲۸ کورانت [VI.83]، فردریش و لوی مقاله‌ای نظری دربارهٔ روش‌های تفاضل متناهی منتشر کردند. گرچه مقالهٔ کورانت–فردریش–لوی[۲] بعداً شهرت یافت، تأثیر این ایده‌ها قبل از پیشرفت رایانه‌ها محدود بود. پس از آن مرحله، این موضوع به‌سرعت پیشرفت کرد. از جمله گروه‌هایی که به‌طور ویژه‌ای در آن سال‌های نخست تاثیرگذار بودند، دسته‌ای از پژوهشگران گرداگرد فون‌نویمان در آزمایشگاه لوس آلاموس شامل پیتر لَکس[۳] جوان بود.

درست همانند معادله‌های دیفرانسیل معمولی، فون‌نویمان و همکارانش کشف کردند که برخی روش‌های عددی برای معادله‌های دیفرانسیل با مشتقات جزئی نیز به ناپایداری‌های مصیبت‌بار منجر می‌شوند. برای مثال، برای حل عددی معادلهٔ خطی موج $u_t = u_x$ گام مکانی Δx و گام زمانی Δt برای شبکهٔ منظم زیر انتخاب می‌شود:

$$x_j = j\Delta x, \quad t_n = n\Delta t, \quad j, n \geqslant ۰.$$

سپس معادلهٔ دیفرانسیل با مشتقات جزئی با فرمول‌های جبری جایگزین می‌شود تا مقادیر تقریبی پیاپی زیر محاسبه شود:

$$v_j^n \approx u(t_n, x_j), \quad j, n \geqslant ۰.$$

یک گسسته‌سازی شناخته‌شده برای این منظور، با فرضِ $\lambda = \Delta t/\Delta x$، فرمول لَکس–وندروف[۴] است:

$$v_j^{n+۱} = v_j^n + \frac{۱}{۲}\lambda(v_{j+۱}^n - v_{j-۱}^n) + \frac{۱}{۲}\lambda^۲(v_{j+۱}^n - ۲v_j^n + v_{j-۱}^n).$$

این فرمول را می‌توان به دستگاه‌های غیرخطی مربوط به قوانین پایستگی هذلولوی یک‌بُعدی تعمیم داد. برای $u_t = u_x$ اگر λ در مقداری کمتر یا برابر با ۱ ثابت نگه داشته شود، این روش با صرفنظر از خطاهای گردکردن، وقتی که $\Delta x, \Delta t \to ۰$ به جواب درست همگرا خواهد شد. از سوی دیگر، اگر λ بزرگتر از ۱ باشد، جواب عددی از هم می‌پاشد. فون‌نویمان و دیگران پی بردند که بود یا نبودِ چنین ناپایداری‌هایی را می‌توان دست‌کم برای مسائل با ضرایب ثابت خطی، با آنالیز گسستهٔ فوریه [III.27] برحسب x، موسوم به «آنالیز فون‌نویمان»، مورد آزمایش قرار داد. تجربه نشان داد که اگر روشی ناپایدار نباشد، روشی موفق خواهد بود. به‌زودی نظریه‌ای ظاهر شد و این مشاهده‌های تجربی را سر و سامان داد. این نظریه، *قضیهٔ هم‌ارزی لَکس* است که لَکس و ریکتمایر[۵] در سال ۱۹۵۶، یعنی همزمان با چاپ مقالهٔ دال‌کوییست، آن را منتشر کردند. بسیاری از جزئیات متفاوت بودند. این نظریه به معادله‌های خطی محدود بود در حالی که نظریهٔ دال‌کوییست برای معادله‌های دیفرانسیل معمولی در موارد غیرخطی نیز قابل استفاده بود. اما به‌طور

[۱] Richard Vynne Southwell [۲] Courant-Friedrichs-Lewy [۳] Peter Lax [۴] Lax-Wendorff formula
[۵] Robert D. Richtmyer

کلی در این دستاورد جدید همان الگوی برابر گرفتن همگرایی با سازگاری به اضافهٔ پایداری دنبال می‌شد. از دیدگاه ریاضی، نکتهٔ کلیدی، اصل کرانداری یکنواخت بود.

نیم‌قرن پس از درگذشت فون‌نویمان، فرمول لَکس–وندروف و آنچه به آن مربوط می‌شد، به موضوع توانمند مهیجی مشهور به *دینامیک سیالات محاسباتی* تبدیل شد. طولی نکشید که برداشت‌های اولیه از معادله‌های خطی و غیرخطی در فضای یک‌بعُدی به فضای دو بُعدی و سرانجام سه‌بُعدی تعمیم یافتند. اکنون حل مسائلی شامل میلیون‌ها متغیر در شبکه‌های محاسباتی با صدها نقطه در هر یک از سه جهت، امری عادی است. کاربردها همه جا یافت می‌شوند: معادله‌ها خطی باشند یا غیرخطی و شبکه‌ها یکنواخت باشند یا غیریکنواخت، اغلب به‌صورت تطبیقی اصلاح می‌شوند تا به لایه‌های مرزی و دیگر جنبه‌های سریعاً–متغیر، توجه ویژه‌ای شود. روش‌های عددی نخستین بار در طراحی هوابُرها[1]، سپس کل بال‌ها و بعد از آن، در کل هواپیما استفاده شدند. مهندسان هنوز از تونل‌های باد استفاده می‌کنند اما بیشتر به محاسبات متکی هستند.

بسیاری از این موفقیت‌ها با استفاده از روش عددی دیگری برای حل معادله‌های دیفرانسیل با مشتقات جزئی امکان‌پذیر شده است که *عناصر متناهی* نام دارد. این روش با بنیان‌های متنوع مهندسی و ریاضی در دههٔ ۱۹۶۰ پدیدار شد. به‌جای تقریب عملگر دیفرانسیلی با تفاضلِ خارج‌قسمتی، روش‌های عنصر متناهی خودِ جواب را با توابعی چون f که می‌توانند به تکه‌های ساده شکسته شوند، تقریب می‌زنند. برای نمونه، دامنهٔ f را می‌توان به مجموعه‌های مقدماتی مانند مثلث‌ها یا چهاروجهی‌ها افراز کرد و تأکید نمود که تحدید f به هر تکه، یک چندجمله‌ای از درجهٔ کوچک باشد. این جواب با حل یک صورت وردشی از معادلهٔ دیفرانسیل با مشتقات جزئی در زیرفضای متناهی–بُعد متناظر به‌دست می‌آید و اغلب تضمینی وجود دارد که جواب محاسبه‌شده در آن زیرفضا، بهینه است. در روش‌های عنصر متناهی از ابزارهای آنالیز تابعی برای رسیدن به وضعیتی تکامل‌یافته استفاده می‌شود. این روش‌ها به‌دلیل انعطاف‌پذیری در برخورد با هندسه‌های پیچیده مشهور هستند. به‌ویژه در مکانیک ساختاری و مهندسی عمران کاربردی برتری کاملی دارند. تعداد کتاب‌ها و مقاله‌هایی که دربارهٔ روش‌های عنصر متناهی منتشر شده است، بیش از ۱۰۰۰۰ جلد است.

کدام جنبهٔ نوین مطرح در حوزهٔ وسیع و بالغِ حل عددی معادله‌های دیفرانسیل با مشتقات جزئی، ریچاردسن، کورانت، فردریش و یا لوی را بیشتر شگفت‌زده خواهد کرد؟ فکر می‌کنم پاسخ، وابستگیِ فراگیر به الگوریتم‌های نامتعارف جبرخطی باشد. جواب یک مسئلهٔ معادلهٔ دیفرانسیل با مشتقات جزئیِ بزرگ–مقیاس در فضای سه‌بُعدی، ممکن است در هر گامِ زمانی، به حل دستگاهی با یک میلیون معادله نیاز داشته باشد. این جواب ممکن است با تکرار ماتریسی GMRES که از یک پیش‌شرط‌ساز تفاضل متناهی بهره می‌برد و پیاده‌سازی آن با یک تکرار Bi-CGStab که به‌نوبهٔ خود بر پیش‌شرط‌ساز چندشبکه‌ای

[1] airfoils

دیگری متکی است، به‌دست آید. چنین انباشتی از ابزارها قطعاً برای پیشگامانِ اولیهٔ رایانه متصوّر نبوده است. نیاز به این انباشت، سرانجام به ناپایداری عددی باز می‌گردد، زیرا همان‌طور که کرَنک[۱] و نیکلسن[۲] اولین بار در سال ۱۹۴۷ اشاره کردند، راهکار حیاتی برای مقابله با ناپایداری، استفاده از *فرمول‌های ضمنی* است؛ فرمول‌هایی که مجهول‌ها را در گام زمانی جدید t_{n+1} به هم چفت کرده و پیاده‌سازیِ همین چفت‌شدگی است که نیازمند حل دستگاه‌های معادله‌ها است.

در اینجا مثال‌هایی ارائه می‌شود که اتکای موفقیت‌آمیز علوم و مهندسی امروزی را به حل عددی معادله‌های دیفرانسیل با مشتقات جزئی نشان می‌دهند: شیمی (معادلهٔ شرودینگر [III.83])، مکانیک ساختاری (معادله‌های کشسانی)، پیش‌بینی آب و هوا (معادلهٔ زمین‌گَرد[۳])، طراحی توربین (معادله‌های نَویه–استوکس [III.23])، صوت‌شناسی (معادلهٔ هِلمهُلتس)، مخابرات (معادله‌های ماکسول [IV.13])، کیهان‌شناسی (معادله‌های اینشتین)، اکتشاف نفت (معادله‌های نقل مکان)، تصفیه آب‌های زیرزمینی (قانون دارسی)، طراحی مدار یکپارچه‌شده (معادله‌های رانش–پخش)، مدل‌سازی سونامی (معادله‌های آب‌های کم‌عمق)، فیبرهای نوری (معادله‌های غیرخطی موج [III.49])، بهسازی تصویر (معادلهٔ پِرونا–مالیک)، علم کار با فلزها (معادلهٔ کان–هیلیارد)، قیمت‌گذاری اختیار معامله (معادلهٔ بلک–شولز [VII.9]).

۶. بهینه‌سازی عددی

سومین بخش بزرگ آنالیز عددی، بهینه‌سازی است که به معنی کمینه کردنِ توابع چندمتغیره و مسئلهٔ حل دستگاه‌های معادله‌های غیرخطی مرتبط با آن است. پیشرفت بهینه‌سازی تا حدی از بقیهٔ بخش‌های آنالیز عددی مستقل بوده است و گروهی از پژوهشگران نزدیک به تحقیق در عملیات و اقتصاد، آن را با موفقیت به پیش رانده‌اند. دانشجویان در حسابان یاد می‌گیرند که یک تابعِ هموار ممکن است در نقطه‌ای با مشتق صفر یا در نقطه‌ای مرزی، مقدار فرینه داشته باشد. همین دو احتمال، دو کرانهٔ بزرگ از حوزهٔ بهینه‌سازی را مشخص می‌کنند. در یک سو، مسائل یافتن صفرهای درونی و کمینه‌های توابع غیرخطی نامقید با روش‌هایی مربوط به حسابان چندمتغیره وجود دارد. در سوی دیگر، مسائلی از برنامه‌ریزی خطی قرار دارند که در آنها تابعی که می‌بایست کمینه شود، خطی است. فهم این مسائل آسان است و همهٔ چالش در قیدهای مرزی است.

بهینه‌سازی غیرخطی نامقید موضوعی قدیمی است. نیوتن ایدهٔ تقریب توابع با چند جملهٔ اول از آن چیزی را که امروزه سری تیلر آنها می‌نامیم، معرفی کرد. در واقع استدلال آرنولد[۴] این است که سری‌های تیلر «کشف ریاضی اصلی» نیوتن بوده است. همه می‌دانند که برای یافتن صفر x_* تابع F با متغیر حقیقی

[۴] ولادیمیر آرنولد ریاضیدان روسی و از شاگردان کُلموگُروف بود–م.

[۱] John Crank [۲] Phyllis Nicolson [۳] geostrophic

x، ایدهٔ *روش نیوتن* چنین است: در گام kام با معلوم بودن برآوردِ $x_* \approx x^{(k)}$، از مشتق $F'(x^{(k)})$ برای یافتن تقریبی خطی استفاده می‌کنیم و برآورد بهترِ $x^{(k+1)}$ را به‌دست می‌آوریم:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - F(x^{(k)})/F'(x^{(k)}).$$

نیوتن (۱۶۶۹) و رفسُن[1] (۱۶۹۰) این روش را برای چندجمله‌ای‌ها به‌کار بردند و سیمسُن[2] (۱۷۴۰) آن را برای توابع دیگر F و دستگاه‌هایی با دو معادله تعمیم داد. به زبان امروزی، برای دستگاهی با n معادله و n مجهول، F را یک n-بردار در نظر می‌گیریم که مشتق آن در نقطهٔ $x^{(k)} \in \mathbb{R}^n$ ماتریس $n \times n$ ژاکوبی با درایه‌های زیر است:

$$J_{ij}(x^{(k)}) = \frac{\partial F_i}{\partial x_j}(x^{(k)}), \quad 1 \leqslant i, j \leqslant n.$$

این ماتریس، تقریبی خطی برای $F(x)$ تعریف می‌کند که به‌ازای $x \approx x^{(k)}$ دقیق است. اکنون صورت ماتریسیِ روش نیوتن چنین است:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - (J(x^{(k)}))^{-1} F(x^{(k)})$$

و در عمل به این معنی است که برای به‌دست آوردن $x^{(k+1)}$ از $x^{(k)}$، دستگاه معادله‌های خطی زیر را حل می‌کنیم:

$$J(x^{(k)})(x^{(k+1)} - x^{(k)}) = -F(x^{(k)}).$$

مادام که J در x_* لیپشیتس-پیوسته و ناتکین باشد و حدس اولیه به‌اندازهٔ کافی خوب انتخاب شود، این روش تکراری همگرای مرتبه‌دو است:

$$\|x^{(k+1)} - x_*\| = O(\|x^{(k)} - x_*\|^2).$$

دانشجویان اغلب فکر می‌کنند که ایجاد فرمول‌هایی به‌منظور بالا بردن نما در این برآورد به ۳ یا ۴ فکر خوبی است اما این، خیالی باطل است. دو گام همزمان از یک الگوریتمِ همگرای مرتبه‌دو، یک گام الگوریتمِ همگرای مرتبه‌چهار را نتیجه می‌دهد. بنابراین از نظر کارایی، تفاوت بین مرتبهٔ ۲ و مرتبهٔ ۴ حداکثر در یک عامل ثابت است. اگر نمای ۲، ۳، یا ۴ با هر عدد دیگری بزرگتر از ۱ جایگزین شود، وضعیت همین طور خواهد بود. تمایز واقعی بین این الگوریتم‌ها این است که برخی مانند روش نیوتن، همگرایی *زبَرخطی* دارند و برخی همگرایی *خطی* یا *هندسی* دارند که نما فقط ۱ است.

[1] Joseph Raphson [2] Thomas Simpson

از منظر حسابان چندمتغیره، کمینه‌سازی تابع عددی f از متغیر $x \in \mathbb{R}^n$ و حل دستگاهی از معادله‌ها، دو مسئلهٔ نزدیک به هم هستند: برای یافتن کمینه‌ای (موضعی) برای f، باید صفری از گرادیان آن، $g(x) = \nabla f(x)$، را جستجو کنیم که یک n-بردار است. مشتق g ماتریس ژاکوبی آن است و به *هسه‌ای* f با درایه‌های زیر معروف است:

$$H_{ij}(x^{(k)}) = \frac{\partial^{۲} f}{\partial x_i \partial x_j}(x^{(k)}), \quad ۱ \leqslant i, j \leqslant n.$$

این ماتریس را می‌توان درست مانند قبل در فرآیند تکرار نیوتن برای یافتن صفری از $g(x)$ به‌کار برد. ویژگی جدید این است که هسه‌ای همیشه متقارن است.

اگرچه فرمول‌های نیوتن برای کمینه‌سازی و یافتن صفرها قبلاً معرفی شده بود، ورود رایانه‌ها حوزه‌ای جدید از بهینه‌سازی عددی را ایجاد کرد. یکی از موانعی که به‌زودی با آن مواجه شدند این بود که روش نیوتن برای یک حدس اولیه که خوب نباشد، اغلب موفق نیست. این مسئله هم به‌صورت عملی و هم به‌صورت نظری با فناوری‌های الگوریتمی مشهور به *جستجوهای خط* و *نواحی اطمینان*[۱] به‌طور کامل مورد توجه قرار گرفته است.

برای مسائلی با بیش از چند متغیر نیز به‌سرعت مشخص شد که هزینهٔ مقداریابی ژاکوبی‌ها و هسه‌ای‌ها در هر مرحله ممکن است خیلی زیاد باشد. روش‌های سریع‌تر مورد نیاز بود که شاید از ژاکوبی‌ها یا هسه‌ای‌های نادقیق و یا جواب‌های نادقیق معادله‌های خطی متناظر استفاده کند به‌طوری که همگرایی زبَرخطی هنوز قابل دستیابی باشد. در دههٔ ۱۹۶۰ برویدن، دیویدسن، فلِچر و پاوئل[۲] نخستین موفقیت از این نوع را به نام *روش‌های شبه‌نیوتنی*[۳] کشف کردند. در این روش‌ها از اطلاعات جزئی برای بهبود مداوم برآوردهای ژاکوبی یا هسه‌ای واقعی یا عامل‌های ماتریسی آنها استفاده می‌شد. توضیحی برای شدت نیاز به این موضوع در آن زمان، این است که در سال ۱۹۷۰ فرمول به‌روز رسانیِ شبه‌نیوتنیِ معین مثبت متقارن رتبه‌دوی بهینه، به‌طور مستقل توسط حداقل چهار پژوهشگر به نام‌های برویدن، فلِچر، گلدفارب[۴] و شانو[۵] منتشر شد. کشف آنها از آن زمان تاکنون *فرمول BFGS* خوانده می‌شود. در سال‌های بعد، همچنان که اندازهٔ مسائل حل‌شدنی به‌طور نمایی افزایش می‌یافت، ایده‌هایی جدید مانند *مشتق‌گیریِ خودکار*[۶] نیز اهمیت یافتند. این فناوری می‌تواند مشتق‌های توابع محاسبه شده را به‌طور خودکار تعیین کند: از خودِ برنامهٔ رایانه‌ای «مشتق گرفته می‌شود» طوری که مشتق‌های آنها را نیز به همان خوبی، خروجی‌های عددی تولید می‌کند. فکر مشتق‌گیریِ خودکار قدیمی است اما به دلایل گوناگون که تا حدی به پیشرفت‌ها در

[۱] trust regions [۲] Broyden-Davidson-Fletcher-Powell [۳] quasi-Newton methods [۴] Donald Goldfarb
[۵] David Shanno [۶] automatic differentiation

جبرخطی تُنک و تحوّل فرمولبندی‌های «حالت معکوس» مربوط می‌شود، تا ارائهٔ کار بیشوف، کارل و گریوانک[۱] در دههٔ ۱۹۹۰ به‌طور کامل عملیاتی نشد.

مسائل بهینه‌سازی نامقید نسبتاً آسان هستند اما شاخص نیستند. عمق واقعی این حوزه با مطالعهٔ روش‌هایی آشکار می‌شود که برای پرداختن به قیدها ارائه شده‌اند. گیریم قرار باشد تابع $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ با رعایت قیدهای برابریِ $c_j(x) = 0$ و قیدهای نابرابریِ $d_j(x) \geqslant 0$ کمینه شود که در آن، c_j و d_j نیز توابعی از $\mathbb{R}^n$ به $\mathbb{R}$ هستند. حتی مسئلهٔ بیان شرایط بهینگی موضعی برای جواب‌های چنین مسائلی، بدیهی نیست. موضوع به ضرایب لاگرانژ [III.64] و تمایز بین قیدهای مؤثر و غیرمؤثر مربوط می‌شود. این مسئله با استفاده از آنچه که اکنون به *شرایط KKT*[۲] معروف است، حل شد. در سال ۱۹۵۱ کیون و تاکر این شرایط را معرفی کردند و دوازده سال پیش از آن نیز، کاروش به آن شرایط پی برده بود. امروزه توسعهٔ الگوریتم‌های بهینه‌سازی غیرخطی مقید، همچنان یک موضوع پژوهشی فعال است.

مسئلهٔ قیدها ما را به بخشی دیگر از بهینه‌سازی عددی به‌نام برنامه‌ریزی خطی می‌رساند. این موضوع در دهه‌های ۱۹۳۰ و ۱۹۴۰ با کارهای کانتوروویچ[۳] در اتحاد جماهیر شوروی و دانتسیگ[۴] در ایالات متحده متولد شد. دانتسیگ در سال ۱۹۴۷ الگوریتم مشهور سادکی [III.84] را برای حل برنامه‌های خطی ابداع کرد که نتیجه‌ای از پژوهش‌های او برای نیروی هوایی ایالات متحده در زمان جنگ بود. برنامه‌ای خطی چیزی نیست جز مسئلهٔ کمینه‌سازی تابعی خطی از n متغیر با رعایت m قید خطی که به‌صورت برابری و یا نابرابری باشند. این مسئله چگونه می‌تواند چالش‌برانگیز باشد؟ یک پاسخ این است که m و n شاید بزرگ باشند. مسائل بزرگ–مقیاس ممکن است از طریق گسسته‌سازی مسائل پیوسته و همچنین به خودیِ خود ایجاد شوند. نخستین مثال مشهور، نظریهٔ مدل‌های ورودی–خروجی لئونتیف در اقتصاد بود که برای آن جایزه نوبل سال ۱۹۷۳ را بُرد. حتی در دههٔ ۱۹۷۰ اتحاد جماهیر شوروی از یک مدل رایانه‌ای ورودی–خروجی به‌عنوان ابزاری برای برنامه‌ریزی اقتصاد استفاده کرد که شامل هزاران متغیر بود.

الگوریتم سادکی، مسائل برنامه‌ریزی خطی با مقیاس متوسط و بزرگ را قابل حل ساخت. چنین مسئله‌ای با *تابع هدف* آن یعنی تابع $f(x)$ که کمینه می‌شود و *ناحیهٔ شدنیِ* آن، یعنی مجموعه‌ای از بردارهای $x \in \mathbb{R}^n$ که در همهٔ قیدها صدق می‌کنند، تعریف می‌شود. برای برنامه‌ای خطی، ناحیهٔ شدنی یک چندوجهی (حوزه‌ای بسته و کراندار به ابرصفحه‌ها) است و مقدار بهینهٔ f به‌طور تضمینی یکی از نقاط رأسی است. (یک نقطه، *رأسی* خوانده می‌شود اگر جواب یکتای زیرمجموعه‌ای از معادله‌ها باشد که معرف قیدها هستند). الگوریتم سادکی با حرکت به‌طور منظم به سمت پایین از رأسی به رأسی دیگر عمل می‌کند تا زمانی که نقطهٔ بهینه به‌دست آید. همهٔ تکرارها در این الگوریتم روی مرز ناحیهٔ شدنی قرار دارند.

---

[۱] Bischoff-Carl-Griewank [۲] Karush-Kuhn-Tucker conditions [۳] Leonid Kantorovich [۴] George Dantzig

در سال ۱۹۸۴ در این حوزه انقلابی رخ داد که جرقهٔ آن را نَرِندرا کارمارکار[۱] در آزمایشگاه‌های بِل[۲] زد. کارمارکار نشان داد که گاهی می‌توان با کارکردن در درون ناحیهٔ شدنی، خیلی بهتر از الگوریتم سادکی عمل کرد. هنگامی که پیوند بین روش کارمارکار و روش‌های مانع لگاریتمی که فیاکو و مک‌کورمیک[۳] آنها را در دههٔ ۱۹۶۰ رایج کردند، معلوم شد، روش‌های درونی نوین برای برنامه‌ریزی خطی با به‌کارگیری شگردهایی طراحی شدند که پیش از آن تنها برای مسائل غیرخطی مناسب به نظر می‌آمد. ایده مهمِ کار با یک جفت از مسائل اولیه و دوگان در کنار هم، به روش‌های توانمند امروزیِ اولیه–دوگان منجر شد که می‌توانند مسائل بهینه‌سازی پیوسته با میلیون‌ها متغیر و قید را حل کنند. با آغاز پژوهش کارمارکار، نه‌تنها حوزهٔ برنامه‌ریزی خطی به‌طور کامل تغییر کرد، بلکه جنبه‌های خطی و غیرخطیِ بهینه‌سازی، امروزه بیش از آنکه اساساً متفاوت دیده شوند، در پیوند با هم در نظر گرفته می‌شوند.

۷. آینده

آنالیز عددی از ریاضیات پدید آمد و از آن، حوزهٔ علوم رایانه نشأت گرفت. هنگامی که دانشگاه‌ها در دههٔ ۱۹۶۰ بخش‌های علوم رایانه را تأسیس کردند، آنالیزدان‌های عددی اغلب مدیر آن بخش‌ها بودند اما اکنون پس از دو نسل، بیشتر آنها در بخش‌های ریاضی حضور دارند. چه اتفاقی افتاد؟ یک پاسخ این است که آنالیزدان‌های عددی با مسائل ریاضی پیوسته سرو کار دارند، در حالی که دانشمندان علوم رایانه مسائل گسسته را ترجیح می‌دهند و این اختلاف، بسیار قابل توجه است. با وجود این، جنبهٔ علوم رایانه‌ایِ آنالیز عددی اهمیت اساسی دارد و من می‌خواهم با یک پیش‌بینی که روی این جنبه از موضوع تأکید دارد، به بحث پایان دهم. به‌طور سنتی ممکن است الگوریتمی عددی مانند روندی شسته و رُفته تصور شود؛ حلقه‌ای از چندین دستور که تا زمان برآورده شدن معیار خوش‌تعریف پایانی، اجرا می‌شود. برای برخی از محاسبات این تصوّر درست است. از سویی دیگر، در دههٔ ۱۹۶۰ نوعی محاسبهٔ عددی کمتر قطعی به‌نام *الگوریتم‌های تطبیقی* ظهور کرد. در ساده‌ترین نوع، برنامهٔ انتگرال‌گیری عددی تطبیقی، دو برآورد از انتگرال روی هر بخش از شبکه‌ای معلوم، محاسبه و سپس برای تولید برآوردی از خطای موضعی مقایسه می‌شوند. بر اساس این برآورد، شبکه را می‌توان برای بهبود میزان درستی، به‌طور موضعی اصلاح کرد. این فرآیند به گونه‌ای تکراری تا زمانی انجام می‌گیرد که جواب نهایی تا آستانهٔ از پیش تعیین‌شده توسط کاربر، درست باشد. بیشترِ این محاسبات هیچ تضمینی برای درستی ندارند اما یک پیشرفت مداوم هیجان‌انگیز، رشد شگردهای پیچیدهٔ پایشِ پسینِ خطا است که گاهی تضمین‌هایی حتمی را میسّر می‌سازد. اگر الگوریتم‌های تطبیقی با شگردهای *حساب بازه‌ای* ترکیب شوند، امید تضمین درستی با احتساب خطای گردکردن و همچنین خطای گسسته‌سازی وجود دارد.

[۱] Narendra Karmarkar [۲] Bell Laboratories [۳] Phiaco-Mccormick

برنامه‌های رایانه‌ای، نخست برای انتگرال‌گیری عددی و پس از آن برای معادله‌های دیفرانسیل معمولی، تطبیقی شد. گذار به برنامه‌های تطبیقی برای حل معادله‌های دیفرانسیل جزئی در دورهٔ زمانی طولانی‌تری در حال رخ‌دادن است. اخیراً پیشرفت‌هایی در محاسبهٔ تبدیل‌های فوریه، بهینه‌سازی و جبرخطی عددیِ بزرگ-مقیاس حاصل شده است و برخی الگوریتم‌های جدید با معماری رایانه‌ای و همچنین با مسائل ریاضی تطبیق دارند. در دنیایی که برای حل هر مسئله‌ای چندین الگوریتم شناخته‌شده وجود دارد، به‌طور فزاینده‌ای درمی‌یابیم که قوی‌ترین برنامهٔ رایانه‌ای آن است که قابلیت‌های گوناگونی در اختیار دارد و آنها را به‌طور تطبیقی برای ارائه به‌کار می‌گیرد. به عبارت دیگر، محاسبات عددی به‌طور فزاینده‌ای در حلقه‌های کنترل هوشمند تعبیه شده است. به باور من، فرآیند دور کردنِ هرچه بیشترِ دانشمندان از جزئیات محاسبات‌شان و در عوض، ارائهٔ مداوم توان رو به رشد محاسباتی، ادامه خواهد یافت؛ همان‌طور که در بسیاری دیگر از عرصه‌های فناوری نیز اتفاق افتاده است. من انتظار دارم که اغلب برنامه‌های رایانه‌ای عددی در سال ۲۰۵۰ حدود ۹۹ درصد، «بسته‌بندی» هوشمند و تنها ۱ درصد، «الگوریتم» واقعی خواهند بود؛ البته اگر چنین تمایزی بامعنی باشد. به‌سختی می‌توان دریافت که آنها چگونه کار می‌کنند اما بسیار قدرتمند و قابل اعتماد خواهند بود و اغلب نتایجی با درستی تضمین‌شده ارائه خواهند داد.

این گزارش پیامدی ریاضی دارد. یکی از تفاوت‌های اساسی در ریاضیات، بین مسائل خطی که می‌توانند در یک مرحله حل شوند و مسائل غیرخطی که معمولاً به تکرار نیاز دارند، است. تمایزی مرتبط بین مسائل پیشرو (یک مرحله‌ای) و مسائل معکوس (تکراری) است. همچنان که الگوریتم‌های عددی به‌طور فزاینده‌ای در حلقه‌های پایشِ هوشمند تعبیه می‌شوند، تقریباً هر مسئله‌ای بدون در نظر گرفتن موقعیت فلسفی آن، با تکرار حل خواهد شد. مسائل جبر با روش‌های آنالیز حل شده و تمایز بین خطی و غیرخطی یا پیشرو و معکوس محو خواهد شد.

مراجع

[1] Ciarlet, P. G., *The Finite Element Method for Elliptic Problems*, North-Holland, Amsterdam, 1978.

[2] Golub, G. H., Van Loan, C. F., *Matrix Computations*, 3rd edn., Johns Hopkins University Press, Baltimore, MD, 1996.

[3] Hairer, E., Nørsett S. P. (for volume I), Wanner, G., *Solving Ordinary Differential Equations*, volumes I and II, Springer-Verlag, New York, 1993, 1996.

[4] Iserles, A. (ed.), *Acta Numerica* (annual volumes), Cambridge University Press, Cambridge, 1992– .

[5] Nocedal, J., Wright, S. J., *Numerical Optimization*, Springer-Verlag, New York, 1999.

[6] Powell, M. J. D., *Approximation Theory and Methods*, Cambridge University Press, Cambridge, 1981.

[7] Richtmyer, R. D., Morton, K. W., *Difference Methods for Initial-Value Problems*, Wiley Interscience, New York, 1967.

تاریخ ارسال: ۹۶/۳/۸؛ تاریخ بازنگری: ۹۶/۷/۲۸؛ تاریخ پذیرش: ۹۶/۸/۴

شاهرخ اسماعیلی: دانشگاه کردستان، دانشکدهٔ علوم پایه، گروه ریاضی

تارنما: http://sci.uok.ac.ir/esmaeili

رایانامه: sh.esmaeili@uok.ac.ir