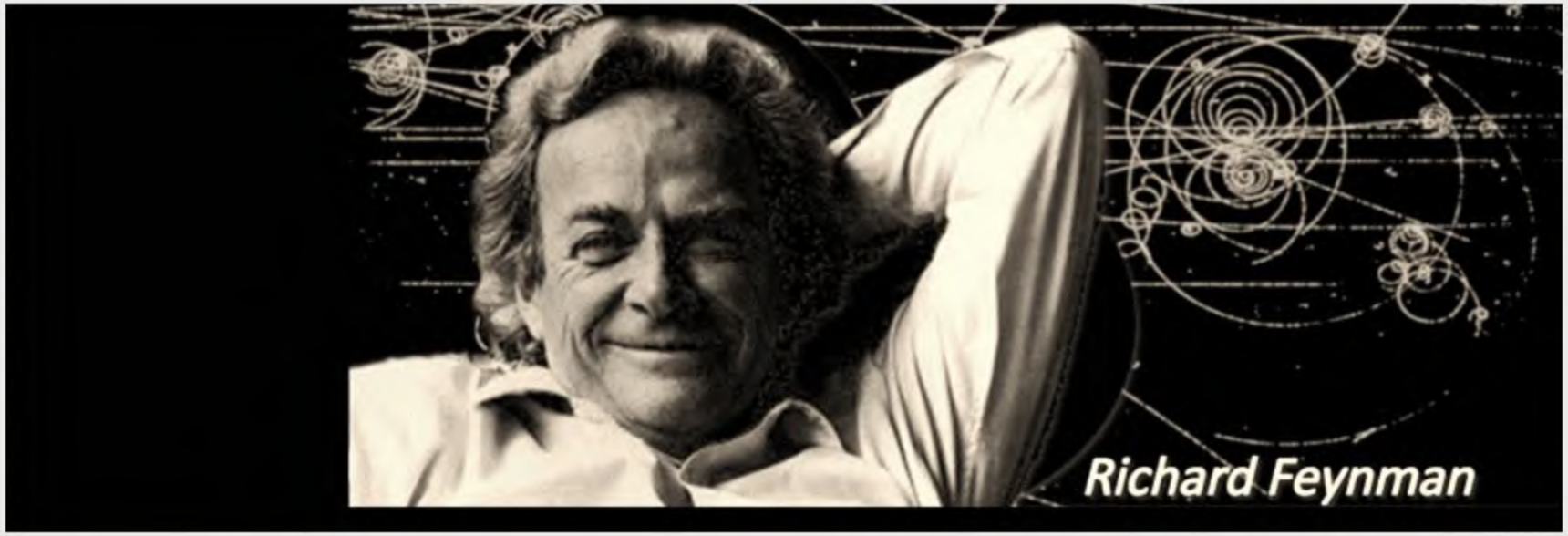
Numerical Calculations

Faculty of Physics-Kharazmi University

Dr. Faramarz Kanjouri

Spring 2022

دانشگاه خوارزمی



اگر همواره مانند گذشته بیندیشید، همیشه همان چیزهایی را به‌دست می‌آورید که تا کنون کسب کرده‌اید

فاینمن

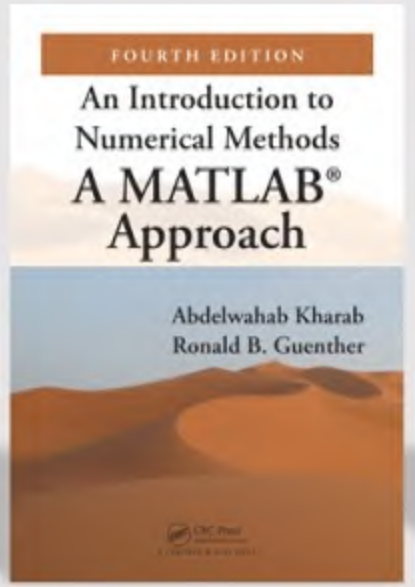
نام درس: محاسبات عددی

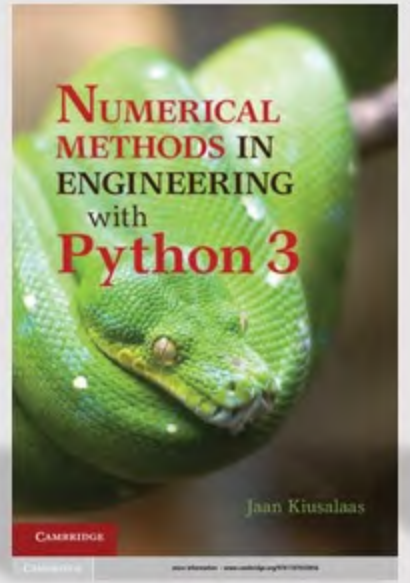
تعداد واحد: ۳ (۲ واحد نظری و ۱ واحد عملی)

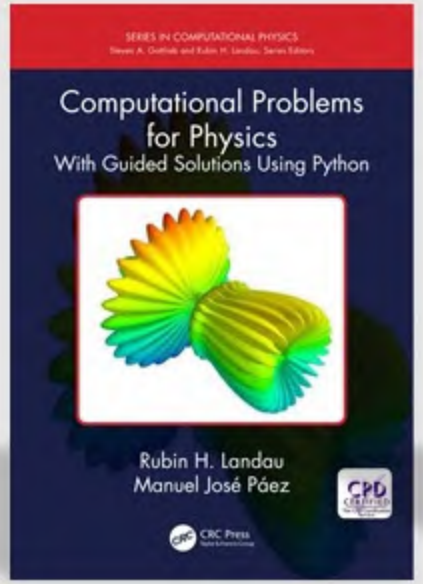
رئوس مطالب:

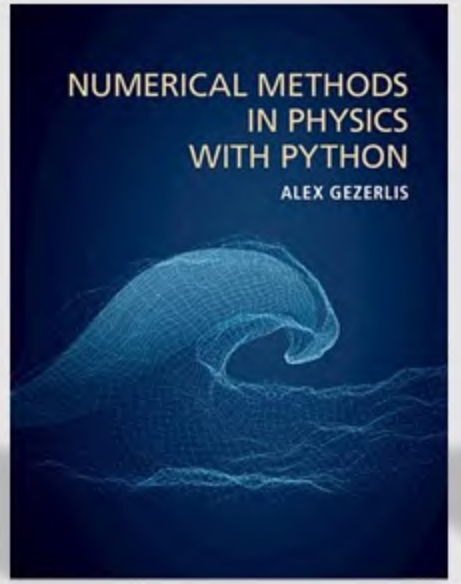
آنالیز خطا، حل عددی معادلات غیرخطی، درون‌یابی و برازش منحنی، انتگرال‌گیری و مشتق‌گیری عددی، حل عددی معادلات دیفرانسیل، حل عددی دستگاه معادلات خطی

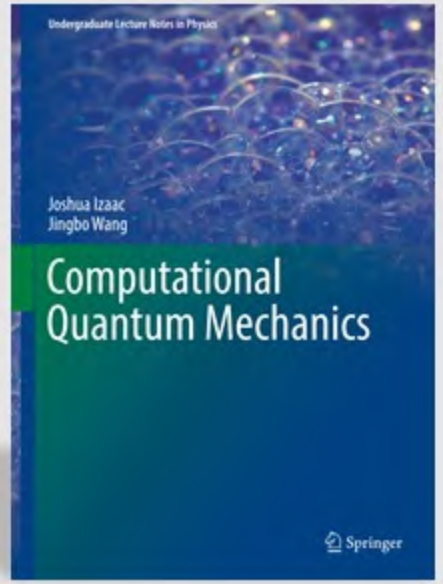
زبان پایتون و نرم‌افزار متمتیکا


FOURTH EDITION
An Introduction to Numerical Methods
A MATLAB® Approach
Abdelwahab Kharab
Ronald B. Guenther


NUMERICAL METHODS IN ENGINEERING with Python 3
Jaan Kiusalaas
CAMBRIDGE


Computational Problems for Physics
With Guided Solutions Using Python
Rubin H. Landau
Manuel José Páez
CRC Press


NUMERICAL METHODS IN PHYSICS WITH PYTHON
ALEX GEZERLIS


Joshua Izaac
Jingbo Wang
Computational Quantum Mechanics
Springer

درس اول

آنالیز خطا

Error Analysis

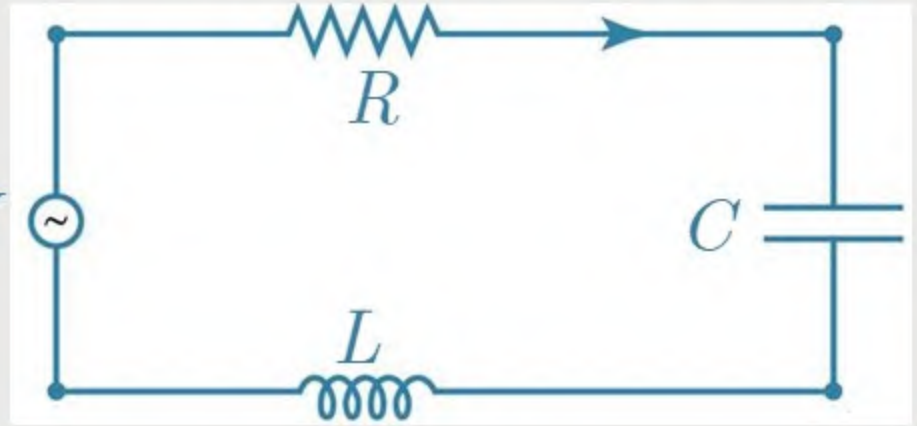
در حل یک مسئله‌ی واقعی، در نخستین گام برای توصیفِ مسئله، یک مدلِ ریاضی ارائه می کنیم.

مدل ریاضی: فرمول یا معادله‌ای است که رابطه‌ی بین کمیت‌های اساسی و مهم در مسئله را مشخص می کند. $y=F(x)$

مثال: معادله‌ی حاکم بر یک مدار الکتریکی RLC

$$L\frac{dI}{dt}+\frac{q}{C}+RI=V_0\cos\omega t$$

$$\frac{d^2q}{dt^2}+\frac{1}{LC}q+\frac{R}{L}\frac{dq}{dt}=\frac{V_0}{L}\cos\omega t$$



$\left\{\begin{array}{l} R \\ L \\ C \\ \omega \\ V_0 \end{array}\right.$ ← پارامترهایی که در چگونگی رفتار سیستم نقش دارند

هدف از حل مسئله یافتن q بر حسب زمان است

حل مسئله: ۱ - تحلیلی ۲ - عددی

روش‌های عددی (Numerical Methods): مجموعه‌ای از عملیات محاسباتی که با آن‌ها بتوانیم یک مدل ریاضی را با تقریب قابل قبول حل کنیم.

یک روش یگانه برای حل مسئله وجود ندارد و افراد مختلف روش‌های مختلفی پیشنهاد می‌دهند. این روش‌ها را الگوریتم می‌نامیم

دو نکته‌ی مهم در محاسبات عددی:

۱ - دقتِ محاسبات **How good is the solution (accuracy)?**

۲ - سرعتِ محاسبات **How long does it take to compute the solution (efficiency)?**

دانشگاه خوارزمی

۱ - در مدل ریاضی $y=F(x)$، کمیت‌های x و y معلوم‌اند. می‌خواهیم رابطه‌ی بین آن‌ها را پیدا کنیم.

مثلاً رابطه‌ی بین جریان و ولتاژ در یک رسانا

V	0	1	2	3	4	5
I	0	0.23	0.41	0.67	0.95	1.3

---

۲ - x و F معلوم‌اند. می‌خواهیم y را پیدا کنیم. مثل محاسبه‌ی یک انتگرال

$$y = \int_0^1 \sin t e^{-t^2}\, dt$$

---

۳ - y و F معلوم‌اند. می‌خواهیم x را پیدا کنیم. مثل حل معادلات جبری یا معادلات دیفرانسیل

$$\tan x - x = 0$$

نمادگذاری علمی: قرار دادنِ ممیز بعد از نخستین رقم مخالف صفر و استفاده از توان مناسبی از ۱۰

ثابت پلانک: $h = 6.626 \times 10^{-34}\,\mathrm{J.s}$

نمایش ممیز شناور (Floating Point): در نمایش ممیز شناور از تعداد ثابتی ارقام با معنی استفاده می‌شود که اولین رقم بعد از ممیز همواره مخالف صفر است

$$0.1603 \times 10^{-5}$$

بسط یک عدد در مبنای β : اگر x عددی حقیقی مثبت باشد، بسط آن در مبنای β به شکل زیر نوشته می‌شود:

$$x = x_n \times \beta^n + x_{n-1} \times \beta^{n-1} + \cdots$$

$$n \in \mathbb{Z} \qquad 0 \leq x_n, x_{n-1}, \cdots \leq \beta - 1 \qquad x_n \neq 0$$

بسط یک عدد در مبنای ۱۰ : اگر x عددی حقیقی مثبت باشد، بسط آن در مبنای ۱۰ به شکل زیر نوشته می‌شود:

$$x = x_n \times 10^n + x_{n-1} \times 10^{n-1} + x_{n-2} \times 10^{n-2} + \cdots$$

$$0 \leq x_n, x_{n-1}, \cdots \leq 9 \qquad x_n \neq 0$$

$$237 = 2 \times 10^2 + 3 \times 10^1 + 7 \times 10^0$$

$$3.14 = 3 \times 10^0 + 1 \times 10^{-1} + 4 \times 10^{-2}$$

$$0.0245 = 2 \times 10^{-2} + 4 \times 10^{-3} + 5 \times 10^{-4}$$

بسط یک عدد در مبنای ۲ : اگر x عددی حقیقی مثبت باشد، بسط آن در مبنای ۲ به شکل زیر نوشته می‌شود:

$$x = x_n \times 2^n + x_{n-1} \times 2^{n-1} + x_{n-2} \times 2^{n-2} + \cdots$$

$$x_n = 1; \quad \left(x_i = 0 \text{ or } 1 \qquad i = n-1, n-2, \cdots \right)$$

هر عدد حقیقی را می‌توان به شکل زیر نوشت:

$$x = \pm f \times \beta^{e}$$

اگر $\frac{1}{\beta} \leq f < 1$ عدد را نرمال می‌نامیم. در مورد مبنای 10 داریم: $0.1 \leq f < 1$

عدد حقیقی زیر را در نظر بگیرید: $x = \pm\left(0.b_1 b_2 \cdots b_n b_{n+1} \cdots\right) \times \beta^{e}$

اگر x را به n رقم ختم کنیم، نمایش ممیز شناور آن به شکل زیر خواهد بود $f_l(x) = \pm\left(0.b_1 b_2 \cdots b_n\right) \times \beta^{e}$

در کامپیوتر از دستگاه دودویی (مبنای ۲) استفاده می‌شود. نمایش دودویی نرمال شده به شکل زیر است

$$f_l(x) = \pm\left(0.1 b_2 \cdots b_n\right) \times 2^{e}$$

که در آن مانتیس، دنباله‌ای از صفرها و یک‌هاست.

عمل ختم به n رقم را به دو روش انجام می‌دهیم: $x = \pm\left(0.b_1b_2\cdots b_nb_{n+1}\cdots\right)\times\beta^c$

۱) گرد کردن (rounding) ۲) قطع کردن (chopping)

❑ گرد کردن :

الف) اگر $b_{n+1} \geq \frac{\beta}{2}$ آن‌گاه $f_l(x) = \pm\left(0.b_1b_2\cdots b_n + \beta^{-n}\right)\times\beta^c$

ب) اگر $b_{n+1} < \frac{\beta}{2}$ آن‌گاه $f_l(x) = \pm\left(0.b_1b_2\cdots b_n\right)\times\beta^c$

❑ قطع کردن: $f_l(x) = \pm\left(0.b_1b_2\cdots b_n\right)\times\beta^c$

عدد ماشینی در کامپیوتری با دقت ساده (۳۲ بیتی) به شکل زیر است:

مانتیس (۲۴ بیت)	توان (۷ بیت)	علامت (۱ بیت)

مثال:

۱۱۰۱۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰	۰۰۰۰۰۱۰	۱

عدد فوق منفی است (عدد مربوط به علامت، ۱ است. اگر عدد مربوط به علامت صفر باشد، عدد مزبور مثبت خواهد بود).

توان برابر است با $\beta = 0 \times 2^0 + 1 \times 2^1 + 0 \times 2^2 + 0 \times 2^3 + 0 \times 2^4 + 0 \times 2^5 = (2)_{10}$

مانتیس برابر است با $f = 1 \times 2^{-1} + 1 \times 2^{-2} + 0 \times 2^{-3} + 1 \times 2^{-4} = (0.8125)_{10}$

بنابر این عدد فوق برابر است با $-0.8125 \times 2^2 = (-3.25)_{10}$

عدد 42.78125 (در مبنای ۱۰) را به شکل عدد نرمال مبنای ۲ بنویسید

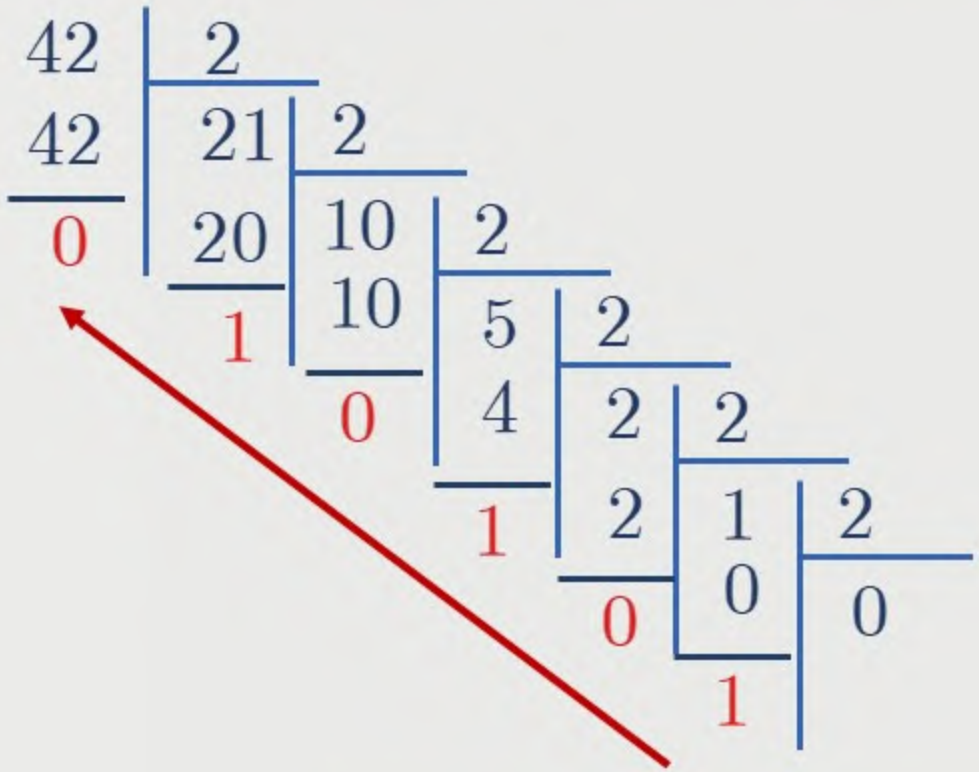
حل:

$$(42)_{10} = (101010)_2 \qquad (0.78125)_{10} = (0.110010)_2$$

$$(42.78125)_{10} = (101010.110010)_2 = (0.101010110010)_2 \times 2^{6}$$

$$(6)_{10} = (110)_2$$

۰	۰۰۰۰۱۱۰	۱۰۱۰۱۰۱۱۰۰۱۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰



$$(42)_{10} = (101010)_2$$

$$42 = 2^5 + 2^3 + 2^1$$

$$42 = 1 \times 2^5 + 0 \times 2^4 + 1 \times 2^3 + 0 \times 2^2 + 1 \times 2^1 + 0 \times 2^0$$

$$(0.78125)_{10} = (0.b_1b_2b_3\cdots b_n)_2$$

$$(A)_{10} = (0.b_1b_2b_3\cdots b_n)_2$$

$$A = b_1\times 2^{-1} + b_2\times 2^{-2} + b_3\times 2^{-3}\cdots + b_n\times 2^{-n}$$

$$A = \frac{b_1}{2} + \frac{b_2}{2^2} + \frac{b_3}{2^3} + \cdots + \frac{b_n}{2^n}$$

$$2A = b_1 + \frac{b_2}{2} + \frac{b_3}{2^2} + \cdots + \frac{b_n}{2^{n-1}}$$

$$b_1 = [2A]$$

$$2(2A - b_1) = b_2 + \frac{b_3}{2} + \cdots + \frac{b_n}{2^{n-2}}$$

$$b_2 = [2(2A - b_1)]$$

$$b_1 = [2\times 0.78125] = [1.56250] = 1$$

$$b_2 = [2\times(1.56250 - 1)] = [1.12500] = 1$$

$$b_3 = [2\times(1.12500 - 1)] = [0.25000] = 0$$

$$b_4 = [2\times(0.25000 - 0)] = [0.50000] = 0$$

$$b_4 = [2\times(0.50000 - 0)] = [1.00000] = 1$$

$$b_5 = [2\times(1.00000 - 1)] = [0.00000] = 0$$

$$(0.78125)_{10} = (0.110010)_2$$

در بیش‌تر کامپیوترهای جدید از استاندارد IEEE برای حساب ممیز شناور استفاده می‌کنند. با این استاندارد، در دقت ساده، نمایش ممیز شناور یک عدد به شکل زیر است:

$$f_l(x) = (-1)^s \times \left(1.f\right) \times (2^{c-127})_{10} \qquad s = 0, 1$$

استاندارد IEEE با دقت ساده (۳۲ بیتی) به شکل زیر است:

بخش اعشاری مانتیس نرمال شده (۲۳ بیت)	توان تعدیل یافته، c (۸ بیت)	علامت، s (۱ بیت)

استاندارد IEEE با دقت مضاعف (۶۴ بیتی) به شکل زیر است:

بخش اعشاری مانتیس نرمال شده (۵۲ بیت)	توان تعدیل یافته، c (۱۱ بیت)	علامت، s (۱ بیت)

عدد زیر را با استاندارد IEEE نمایش دهید. $x = -45.8125$

حل:

$$(-45)_{10} = (-101101)_2$$

$$(0.8125)_{10} = (0.110100)_2$$

$$(-45.8125)_{10} = (-101101.110100)_2 = (-1.01101110100)_2 \times 2^5$$

$$c = 127 + 5 = (132)_{10} = (10000100)_2$$

۱	۱۰۰۰۰۱۰۰	۰۱۱۰۱۱۱۰۱۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰۰

شاد و مهربان باشید