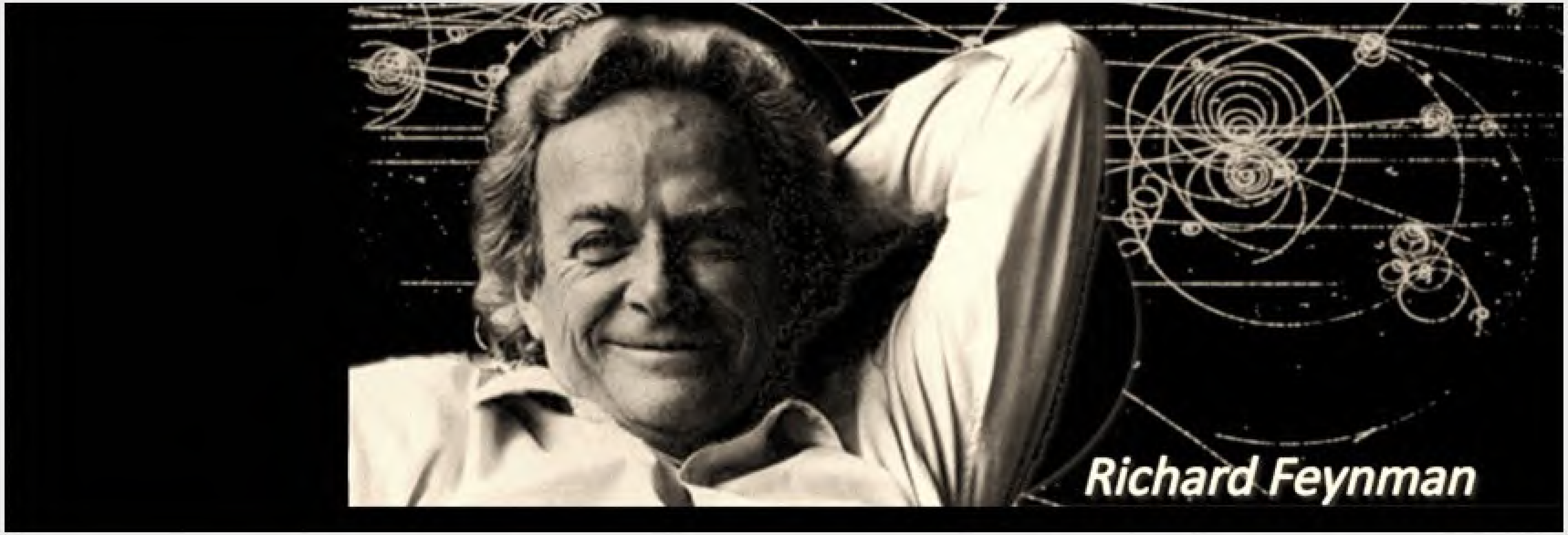
Numerical Calculations

Faculty of Physics-Kharazmi University

Dr. Faramarz Kanjouri

Spring 2022



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

فاینمن

درس سوم

مشتق گیری

Derivatives

دانشگاه خوارزمی

مثال‌هایی از مشتق‌گیری در فیزیک:

تعریف سرعت یک ذره در مکانیک:

بردار سرعت

$$\mathbf{v} = \frac{d\mathbf{r}}{dt}$$

بردار مکان ذره

رابطه‌ی بین میدان الکتریکی و پتانسیل‌های الکتریکی و مغناطیسی

$$\mathbf{E} = -\nabla\Phi - \frac{\partial \mathbf{A}}{dt}$$

پتانسیل برداری مغناطیسی

پتانسیل اسکالر الکتریکی

چگالی لاگرانژی مربوط به ارتعاشات یک میله

$$L = \frac{1}{2}\left[\frac{1}{v^2}\left(\frac{\partial u(x,t)}{\partial t}\right)^2 - \left(\frac{\partial u(x,t)}{\partial x}\right)^2\right]$$

سرعت امواج الاستیکی عرضی

متغیر دینامیکی

می‌خواهیم مشتق تابعی را در یک نقطه حساب کنیم. $f(x) \quad \rightarrow \quad f'(x)$

اگر شکل تابع f را برحسب x داشته باشیم که مسئله روشن است

اما در بسیاری موارد، به جای تابع، جدولی از داده‌های گسسته داریم

$$\left(x_i, y_i\right) = \left(x_i, f(x_i)\right)$$

$$i = 0,1,2,\cdots,n-1$$

x	y
x_0	y_0
x_1	y_1
x_2	y_2
x_3	y_3
x_n	y_n

یک رهیافت برای حل مسئله، استفاده از روش درون‌یابی یا برازش است.

رهیافت دیگر، روش تفاضل محدود یا مشتق گیری عددی است.

تعریف مشتق تابع f در نقطه‌ی x:

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

البته در عمل برای محاسبه‌ی مشتق هر بار تعریف را به کار نمی بریم، بلکه از قواعد مشتق‌گیری استفاده می کنیم.

$$\frac{d}{dx}e^{\sin(2x)} = 2\cos(2x)e^{\sin(2x)}$$

دانشگاه خوارزمی

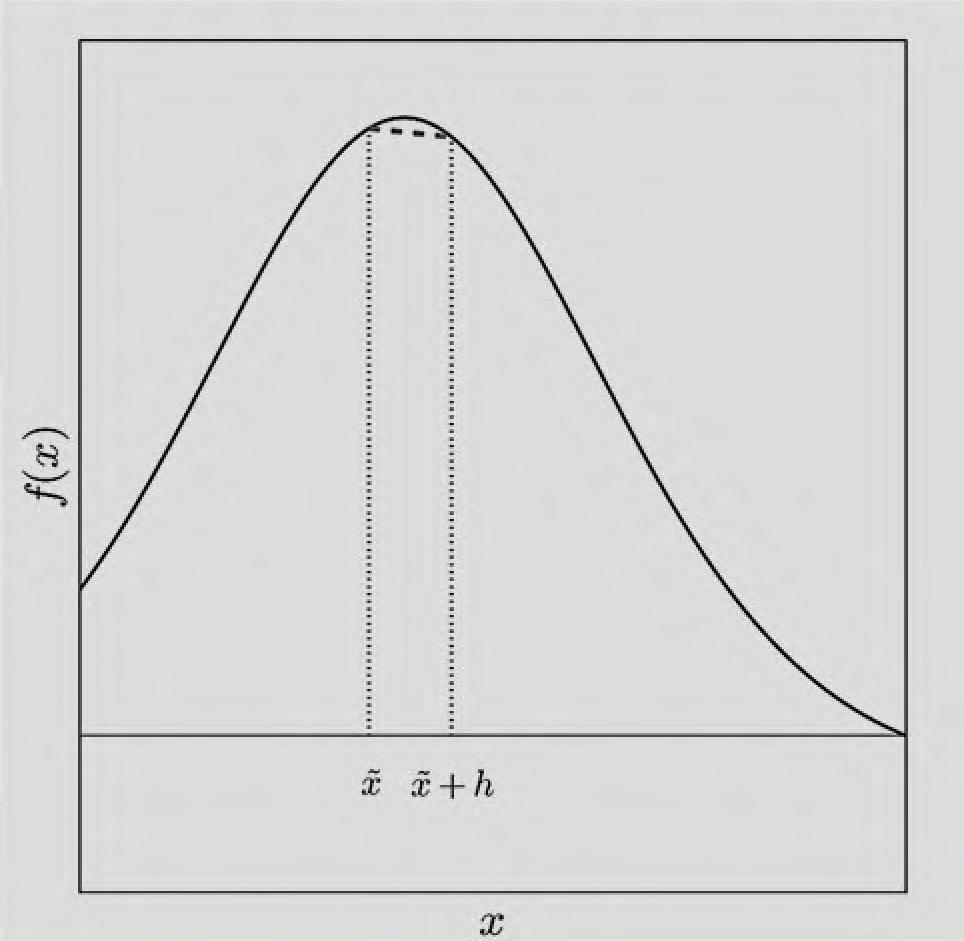
Forward Difference

بسط تیلور $f(x+h)$ حول x

$$f(x+h) = f(x) + \frac{hf'(x)}{1!} + \frac{h^2 f''(x)}{2!} + \frac{h^3 f'''(x)}{3!} + \frac{h^4 f^{(4)}(x)}{4!} + \cdots$$

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2 f''(x)}{2} + \frac{h^3 f'''(x)}{6} + \frac{h^4 f^{(4)}(x)}{24} + \cdots$$

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} - \frac{hf''(x)}{2} - \frac{h^2 f'''(x)}{6} - \frac{h^3 f^{(4)}(x)}{24} + \cdots$$



$$\boxed{f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} + O(h)}$$

forward-difference approximation

دانشگاه خوارزمی

Backward Difference

بسط تیلور $f(x\text{-}h)$ حول x

$$f(x-h) = f(x) - \frac{hf'(x)}{1!} + \frac{h^2 f''(x)}{2!} - \frac{h^3 f'''(x)}{3!} + \frac{h^4 f^{(4)}(x)}{4!} + \cdots$$

$$f(x-h) = f(x) - hf'(x) + \frac{h^2 f''(x)}{2} - \frac{h^3 f'''(x)}{6} + \frac{h^4 f^{(4)}(x)}{24} + \cdots$$

$$f'(x) = \frac{f(x) - f(x-h)}{h} + \frac{hf''(x)}{2} - \frac{h^2 f'''(x)}{6} + \frac{h^3 f^{(4)}(x)}{24} + \cdots$$

$$f'(x) = \frac{f(x) - f(x-h)}{h} + O(h)$$

backward-difference approximation

Error Analysis for the Forward Difference

از یک سو هر چه h کوچک‌تر باشد، خطای روش تفاضل محدود کم‌تر می‌شود. از سوی دیگر کوچک شدن h خطای گرد کردن را افزایش می‌یابد. باید برای h مقدار مناسب پیدا کنیم.

$$E_{app} = \frac{h}{2}\left|f''(\xi)\right| \approx \frac{h}{2}\left|f''(x)\right|$$ خطای برشی بسط تیلور

$$E_{ro} = \frac{2\left|f(x)\right|\epsilon_m}{h}$$ خطای گرد کردن $\epsilon_m \approx 2.2\times 10^{-16}$

$$E = E_{ro} + E_{app} = \frac{2\left|f(x)\right|\epsilon_m}{h} + \frac{h}{2}\left|f''(x)\right|$$

$$\left.\frac{dE}{dh}\right|_{h_{opt}} = 0 \Rightarrow -\frac{2\left|f(x)\right|\epsilon}{h_{opt}^2} + \frac{1}{2}\left|f''(x)\right| = 0$$

$$h_{opt} = \sqrt{4\left|\frac{f(x)}{f''(x)}\right|\epsilon_m} \approx \sqrt{4\epsilon_m} \approx 3\times 10^{-8}$$

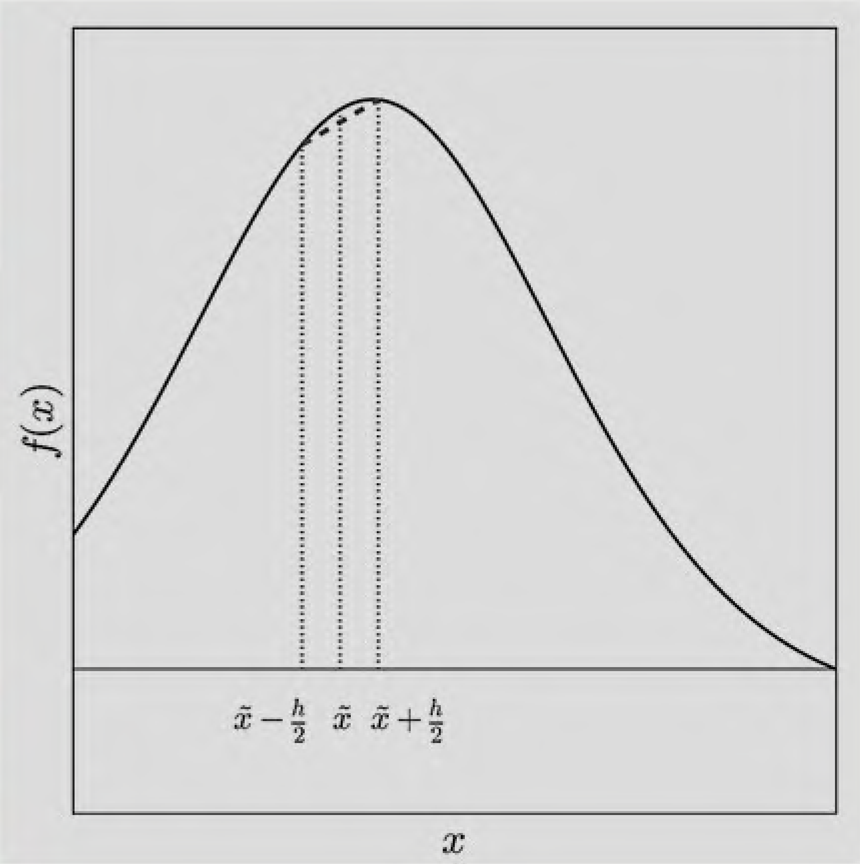
$$E_{opt} = \sqrt{4\epsilon_m\left|f(x)\right|\left|f'''(x)\right|} \approx \sqrt{4\epsilon_m} \approx 3\times 10^{-8}$$

Central-Difference Approximation

$$f\left(x+\tfrac{h}{2}\right)=f(x)+\frac{h}{2}f'(x)+\frac{h^2}{8}f''(x)+\frac{h^3}{48}f'''(x)+\frac{h^4}{384}f^{(4)}(x)+\cdots$$

$$f\left(x-\tfrac{h}{2}\right)=f(x)-\frac{h}{2}f'(x)+\frac{h^2}{8}f''(x)-\frac{h^3}{48}f'''(x)+\frac{h^4}{384}f^{(4)}(x)+\cdots$$

$$f'(x)=\frac{f(x+\frac{h}{2})-f(x-\frac{h}{2})}{h}-\frac{h^2}{24}f'''(x)+\cdots$$



$$f'(x)=\frac{f(x+\frac{h}{2})-f(x-\frac{h}{2})}{h}+O(h^2)$$

central difference approximation

Error Analysis for the Central Difference

$$E_{app} = \frac{h^2}{24}\left|f'''(\xi)\right| \approx \frac{h^2}{24}\left|f'''(x)\right|$$ **خطای برشی بسط تیلور**

$$E_{ro} = \frac{2\left|f(x)\right|\epsilon_m}{h}$$ **خطای گرد کردن** $\epsilon_m \approx 2.2\times 10^{-16}$

$$E = E_{ro} + E_{app} = \frac{2\left|f(x)\right|\epsilon_m}{h} + \frac{h^2}{24}\left|f'''(x)\right|$$

$$\left.\frac{dE}{dh}\right|_{h_{opt}} = 0 \Rightarrow -\frac{2\left|f(x)\right|\epsilon}{h_{opt}^2} + \frac{h_{opt}}{12}\left|f''(x)\right| = 0$$

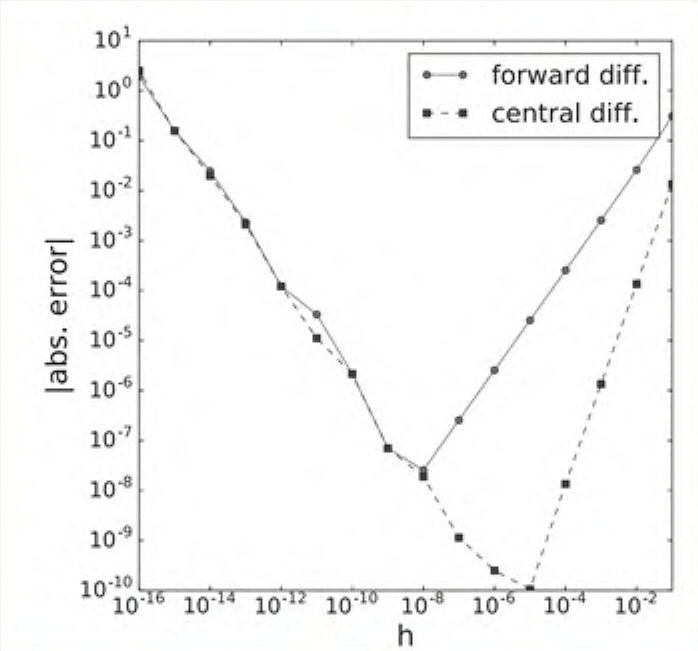
$$h_{opt} = \left(24\left|\frac{f(x)}{f'''(x)}\right|\epsilon_m\right)^{\frac{1}{3}} \sim \sqrt{24\epsilon_m} \approx 2\times 10^{-5}$$

$$E_{opt} = \left(\frac{9}{8}\epsilon_m^2\left|f(x)\right|^2\left|f'''(x)\right|\right)^{\frac{1}{3}} \sim \left(\frac{9}{8}\epsilon_m^2\right)^{\frac{1}{3}} \approx 4\times 10^{-11}$$

$$f(x) = e^{\sin(2x)}$$

```python
from math import exp, sin, cos
def f(x):
    return exp(sin(2*x))
def fprime(x):
    return 2*exp(sin(2*x))*cos(2*x)
def calc_fd(f,x,h):
    fd = (f(x+h) - f(x))/h
    return fd
def calc_cd(f,x,h):
    cd = (f(x+h/2) - f(x-h/2))/h
    return cd
if __name__ == '__main__':
    x = 0.5
    an = fprime(x)
    hs = [10**(-i) for i in range(1,12)]
    fds = [abs(calc_fd(f,x,h) - an) for h in hs]
    cds = [abs(calc_cd(f,x,h) - an) for h in hs]
    rowf = "{0:1.0e} {1:1.16f} {2:1.16f}"
    print("h abs. error in fd abs. error in cd")
    for h,fd,cd in zip(hs,fds,cds):
        print(rowf.format(h,fd,cd))
```

```
h abs. error in fd abs. error in cd
1e-01 0.3077044583376249 0.0134656094697734
1e-02 0.0260359156900742 0.0001350472493096
1e-03 0.0025550421497806 0.0000013505120728
1e-04 0.0002550180941236 0.0000000135077878
1e-05 0.0000254969542519 0.0000000001495843
1e-06 0.0000025492660578 0.0000000002500959
1e-07 0.0000002564334673 0.0000000011382744
1e-08 0.0000000189018428 0.0000000189018428
1e-09 0.0000003741732106 0.0000000699159992
1e-10 0.0000021505300500 0.0000021505300500
1e-11 0.0000332367747395 0.0000111721462455
```



$$\boxed{f'(x) = \frac{4f(x+\frac{h}{2}) - f(x+h) - 3f(x)}{h} + \frac{h^2}{12} f'''(x) + \cdots}$$

second forward-difference approximation

$$\boxed{f'(x) = \frac{27f(x+\frac{h}{2}) + f(x-\frac{3}{2}h) - 27f(x-\frac{h}{2}) - f(x+\frac{3}{2}h)}{24h} + \frac{3h^4}{640} f^{(5)}(x) + \cdots}$$

second central-difference approximation

دانشگاه خوارزمی

$$f\left(x+\tfrac{h}{2}\right) = f(x) + \frac{h}{2}f'(x) + \frac{h^2}{8}f''(x) + \frac{h^3}{48}f'''(x) + \frac{h^4}{384}f^{(4)}(x) + \cdots$$

$$f\left(x-\tfrac{h}{2}\right) = f(x) - \frac{h}{2}f'(x) + \frac{h^2}{8}f''(x) - \frac{h^3}{48}f'''(x) + \frac{h^4}{384}f^{(4)}(x) + \cdots$$

$$f''(x) = 4\,\frac{f(x+\frac{h}{2}) + f(x-\frac{h}{2}) - 2f(x)}{h^2} - \frac{h^2}{48}f^{(4)}(x) + \cdots$$

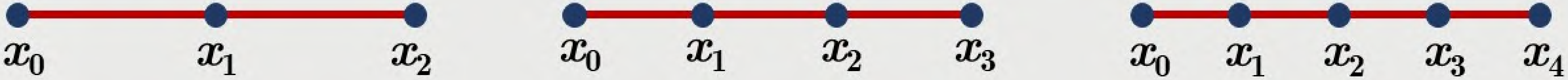
$$f''(x) = 4\,\frac{f(x+\frac{h}{2}) + f(x-\frac{h}{2}) - 2f(x)}{h^2} + O(h^2)$$

central-difference approximation
to the second derivative

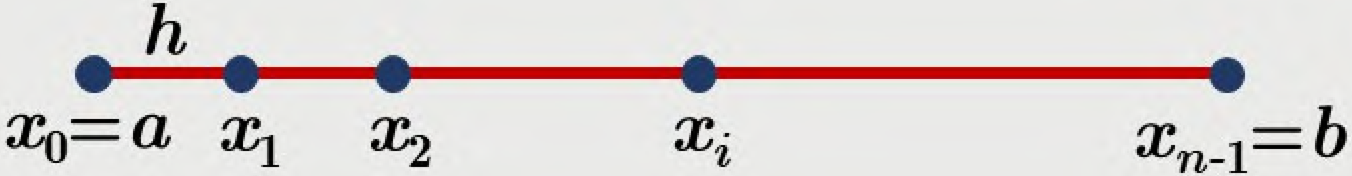
دانشگاه خوارزمی

نقاط شبکه

در بسیاری موارد تعداد محدودی از داده‌های گسسته در یک بازه را در اختیار داریم.



گاهی با شبکه‌ای از نقاط با فواصل یکسان سروکار داریم.



$$x_i = a + ih$$

$$b = a + (n-1)h$$

$$h = \frac{b-a}{n-1}$$

$$x_{i+1} = x_i + h$$

فرض کنید بازه‌ی $[a,b]=[0,5]$ به 100 قسمت تقسیم شده باشد (101 نقطه) بنابر این $h=0.05$. برای هر یک از این نقاط

مقادیر تابع را داریم $f(x_i)$. می‌خواهیم مشتق تابع را در نقطه‌ی 3.7 پیدا کنیم.

x_i	$f(x_i)$
0	$f(0)$
0.05	$f(0.05)$
$\vdots$	$\vdots$
3.65	$f(3.65)$
3.7	$f(3.7)$
3.75	$f(3.75)$
$\vdots$	$\vdots$

تفاضل پیش‌رو

$$\boxed{f'(3.7)=\frac{f(3.7+h)-f(3.7)}{h}=\frac{f(3.75)-f(3.7)}{0.05}}$$

تفاضل مرکزی

$$\boxed{f'(3.7)=\frac{f(3.7+\frac{h}{2})-f(3.7-\frac{h}{2})}{h}=\frac{f(3.725)-f(3.625)}{0.05}}\ ?$$

تفاضل مرکزی

$$\boxed{f'(3.7)=\frac{f(3.7+\frac{2h}{2})-f(3.7-\frac{2h}{2})}{2h}=\frac{f(3.75)-f(3.65)}{0.1}}$$

می‌خواهیم مقدار کمیت G را پیدا کنیم. فرض کنید مقدار تقریبی آن $g(h)$ است (که به پارامتر h بستگی دارد)

$$G = g(h) + E_{app}(h)$$

$$E_{app}(h) = Ah^p + Bh^{p+q} + Ch^{p+2q} + \cdots$$

$$G = g(h) + Ah^p + O\left(h^{p+q}\right)$$

$$G = g\left(\frac{h}{2}\right) + A\frac{h^p}{2^p} + O\left(h^{p+q}\right)$$

$$g(h) + Ah^p = g\left(\frac{h}{2}\right) + A\frac{h^p}{2^p} + O\left(h^{p+q}\right)$$

$$Ah^p = \frac{2^p}{2^p - 1}\left[g\left(\frac{h}{2}\right) - g(h)\right] + O\left(h^{p+q}\right)$$

$$G = \frac{2^p\, g\left(\frac{h}{2}\right) - g(h)}{2^p - 1} + O\left(h^{p+q}\right)$$

دانشگاه خوارزمی

تفاضل محدود پیش‌رو

$$D_{fd}(h) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$

$$G = \frac{2^p\, g\left(\frac{h}{2}\right) - g(h)}{2^p - 1} + O\left(h^{p+q}\right)$$

$$R_{fd} = 2D_{fd}\left(\tfrac{h}{2}\right) - D_{fd}(h) + O(h^2) = 2\,\frac{f(x+\frac{h}{2}) - f(x)}{\frac{h}{2}} - \frac{f(x+h) - f(x)}{h} + O(h^2)$$

$$R_{fd} = \frac{4f(x+\frac{h}{2}) - f(x+h) - 3f(x)}{h} + O(h^2)$$

دانشگاه خوارزمی

تفاضل محدود نقطه‌ی مرکزی

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

$$G = \frac{2^p\, g\left(\frac{h}{2}\right) - g(h)}{2^p - 1} + O\left(h^{p+q}\right)$$

$$R_{cd} = \tfrac{4}{3} D_{cd}(\tfrac{h}{2}) - \tfrac{1}{3} D_{cd}(h) + O(h^2) = \frac{4}{3}\frac{f(x+\frac{h}{4}) - f(x-\frac{h}{4})}{\frac{h}{2}} - \frac{1}{3}\frac{f(x+\frac{h}{2}) - f(x-\frac{h}{2})}{h} + O(h^4)$$

$$R_{cd} = \frac{8f(x+\frac{h}{4}) + f(x-\frac{h}{2}) - f(x+\frac{h}{2}) - 8f(x-\frac{h}{4})}{3h} + O(h^4)$$

مشتق‌گیری خودکار (یا مشتق گیری الگوریتمی)

$$automatic\ \ differentiation\ (or\ algorithmic\ \ differentiation)$$

تا این‌جا گفتیم که مشتق گیری یا به روش تحلیل انجام می‌شود یا عددی. اما روش دیگری موسوم به مشتق‌گیری خودکار که با دقتی مشابه روش تحلیلی می توان مشتق را محاسبه کرد بدون آن که لازم باشد تابع مشتق را حساب کنیم.

$$\boxed{\mathbf{a} = a + da'}$$

$$\boxed{\mathbf{a} = (a, a')}$$

عدد اول را مقدار تابع در یک نقطه‌ی خاص و عدد دوم مشتق آن تابع در آن نقطه می گیریم.

$$\boxed{\begin{aligned}
\mathbf{a} + \mathbf{b} &= (a + b, a' + b') \\
\mathbf{a} - \mathbf{b} &= (a - b, a' - b') \\
\mathbf{a} \times \mathbf{b} &= (ab, a'b + ab') \\
\mathbf{a} \div \mathbf{b} &= \left(a \div b, \frac{a'b - ab'}{b^2}\right)
\end{aligned}}$$

$\mathbf{A} = (A, 0) \longrightarrow$ ثابت‌ها

$\mathbf{x} = (x, 1) \longrightarrow$ متغیرها

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) = (f(x), f'(x))$$

$$\boxed{f(x) = \frac{(x-2)(x-3)}{x-4}}$$

$$\boxed{\begin{aligned} f(6) &= ? \\ f'(6) &= ? \end{aligned}}$$

$$\boxed{f(6) = \frac{(6-2)(6-3)}{6-4} = \frac{4\times 3}{2} = 6}$$

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) = (\mathbf{x}-2)\times(\mathbf{x}-3)\div(\mathbf{x}-4)$$

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \left[(x,1)-(2,0)\right]\times\left[(x,1)-(3,0)\right]\div\left[(x,1)-(4,0)\right]$$

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) = (x-2,1)\times(x-3,1)\div(x-4,1)$$

$$\boxed{\mathbf{x} = (6,1)}$$

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) = (f(6), f'(6)) = (4,1)\times(3,1)\div(2,1)$$

$$(f(6), f'(6)) = (12,7)\div(2,1)$$

$$(f(6), f'(6)) = \left(\frac{12}{2}, \frac{14-12}{4}\right) = \left(6, \frac{1}{2}\right)$$

$$\boxed{\begin{aligned} f(6) &= 6 \\ f'(6) &= \frac{1}{2} \end{aligned}}$$

$$p(a) = c_0 + c_1 a + c_2 a^2 + c_3 a^3 + \cdots + c_{n-1} a^{n-1}$$

$$\mathbf{a} = (a, a')$$
$$\mathbf{c} = (c, 0)$$

$$\mathbf{a}^2 = \mathbf{a} \times \mathbf{a} = (a^2, 2aa')$$
$$\mathbf{a}^3 = \mathbf{a} \times \mathbf{a}^2 = (a^3, 3a^2a')$$

$$\mathbf{p}(\mathbf{a}) = \mathbf{c}_0 + \mathbf{c}_1\mathbf{a} + \mathbf{c}_2\mathbf{a}^2 + \mathbf{c}_3\mathbf{a}^3 + \cdots + \mathbf{c}_{n-1}\mathbf{a}^{n-1}$$

$$\mathbf{p}(\mathbf{a}) = (c_0, 0) + (c_1, 0)\mathbf{a} + (c_2, 0)\mathbf{a}^2 + (c_3, 0)\mathbf{a}^3 + \cdots + (c_{n-1}, 0)\mathbf{a}^{n-1}$$

$$\mathbf{p}(\mathbf{a}) = (c_0, 0) + (c_1 a, c_1 a') + (c_2 a^2, c_2 2aa') + \cdots + (c_{n-1} a^{n-1}, c_{n-1}(n-1)a^{n-2}a')$$

$$\mathbf{p}(\mathbf{a}) = (c_0 + c_1 a + c_2 a^2 + \cdots + c_{n-1}a^{n-1}, c_1 a' + c_2 2aa' + \cdots + c_{n-1}(n-1)a^{n-2}a')$$

$$\mathbf{p}(\mathbf{a}) = (p(a), a'p'(a))$$

دانشگاه خوارزمی

$$\boxed{\mathbf{g}(\mathbf{a}) = \mathbf{g}((a, a')) = (g(a), a'g'(a))}$$

$$\mathbf{sin}(\mathbf{a}) = \mathbf{sin}((a, a')) = (\sin a, a' \cos a)$$

$$\mathbf{cos}(\mathbf{a}) = \mathbf{cos}((a, a')) = (\cos a, -a' \sin a)$$

$$\mathbf{e}^{\mathbf{a}} = \mathbf{e}^{(a, a')} = (e^{a}, a' e^{a})$$

$$\mathbf{ln}(\mathbf{a}) = \mathbf{ln}((a, a')) = \left(\ln a, \frac{a'}{a}\right)$$

$$\mathbf{sqrt}(\mathbf{a}) =$$

$$\mathbf{sqrt}((a, a')) = \left(\sqrt{a}, \frac{a'}{2\sqrt{a}}\right)$$

$$f(x) = e^{\sin(2x)}$$

$$f'(0.5) = ?$$

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{e}^{\mathbf{sin}((2,0)\times(x,1))}$$

$$\mathbf{f}((0.5,1)) = \mathbf{e}^{\mathbf{sin}((2,0)\times(0.5,1))} = \mathbf{e}^{\mathbf{sin}(1,2)} = \mathbf{e}^{(\sin(1),2\cos(1))} = \left(e^{\sin(1)}, 2\cos(1)e^{\sin(1)}\right)$$

$$f(0.5) = e^{\sin(1)} \approx 2.319776824715853$$

$$f'(0.5) = 2\cos(1)e^{\sin(1)} \approx 2.506761534986894$$

دانشگاه خوارزمی

شاد و مهربان باشید

دانشگاه خوارزمی