Introdução à Física Computacional - 7600017 - 1S/2019

Projeto 2 — Cálculo numérico

Descrição:

Este projeto tem por objetivo discutir brevemente alguns conceitos básicos de cálculo numérico úteis no dia a dia da pesquisa. Neste, discutiremos sobre métodos de derivação e integração numérica, e sobre métodos para estimar as raízes de uma função. Como veremos a seguir, o ingrediente básico que permeia todos esses métodos (exceto por um) é a expansão em série de Taylor

$$f(x+h) = f(x) + f'(x)h + \frac{1}{2!}f''(x)h^2 + \frac{1}{3!}f'''(x)h^3 + \ldots. \tag{1}$$

1. **Derivação numérica**
   O objetivo é obter aproximações para a derivada de $f(x)$, cuja definição é

$$f'(x) \equiv \lim_{h\to 0}\frac{f(x+h)-f(x)}{h}. \tag{2}$$

Talvez a aproximação mais intuitiva seja a derivada para frente de 2 pontos, definida como

$$f'_f(x) \equiv \frac{f(x+h)-f(x)}{h}. \tag{3}$$

Aparentemente tudo que precisamos fazer é escolher um valor de h bem pequeno. Entretanto, se h for muito pequeno corremos o risco de perder precisão numérica no cálculo de $f(x+h)-f(x)$. Como veremos a seguir, há outras opções.
Comparando (2) com (3), nota-se que

$$f'_f(x) = f'(x) + \mathcal{O}(h), \tag{4}$$

onde o símbolo $\mathcal{O}(h)$ quer dizer que o erro que cometemos ao truncar a expansão em série de Taylor para o cálculo de $f'(x)$ é da ordem de h.
Analogamente, podemos calcular a derivada para trás de 2 pontos

$$f'_t(x) = \frac{f(x)-f(x-h)}{h} + \mathcal{O}(h). \tag{5}$$

Se combinarmos as equações (3) e (5) podemos escrever a derivada simétrica de 3 pontos

$$\begin{aligned} f'_{3s}(x) &\equiv \frac{1}{2}\left(f'_f(x) + f'_t(x)\right) \\ &= \frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h} + \mathcal{O}\left(h^2\right). \end{aligned} \tag{6}$$

Note que essa aproximação é melhor pois o erro é $\mathcal{O}\left(h^2\right)$. Isso ocorre porque o termo envolvendo a derivada segunda na expansão em Taylor é simétrico em h e assim a primeira correção vem apenas do termo cúbico. Naturalmente, derivadas simétricas envolvendo mais pontos podem ser construídas de modo análogo.
Podemos aplicar a mesma ideia para calcularmos numericamente a derivada segunda de uma função. Partindo da seguinte igualdade

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

chegamos à derivada segunda simétrica de três pontos

$$f''_{3s}(x) = \frac{f(x+h)-2f(x)+f(x-h)}{h^2} + \mathcal{O}\left(h^2\right). \tag{7}$$

Baseado nessa discussão, considere agora a seguinte função

$$f(x) = e^{2x}\cos\frac{x}{4}, \tag{8}$$

e responda:

h	$f'_f(1)$	$f'_t(1)$	$f'_{3s}(1)$	$f'_{5s}(1)$	$f''_{3s}(1)$
5×10^{-1}					
1×10^{-1}					
5×10^{-2}					
1×10^{-2}					
5×10^{-3}					
1×10^{-3}					
5×10^{-4}					
1×10^{-4}					
5×10^{-5}					
1×10^{-5}					
5×10^{-6}					
1×10^{-6}					
1×10^{-7}					
1×10^{-8}					

Tabela I: Derivadas numéricas de $f(x)$ em (8) no ponto $x=1$ por meio de diferentes aproximações em função do passo h.

(a) Calcule a ordem do erro cometido para a seguinte aproximação de primeira derivada

$$f'_{5s}(x) \equiv \frac{-f(x+2h)+8f(x+h)-8f(x-h)+f(x-2h)}{12h}.$$

(b) Escreva um programa FORTRAN e preencha a tabela I com o valor absoluto dos desvios em relação aos resultados exatos $|\varepsilon|$. Aponte o valor ótimo de h em cada um dos casos e discuta seus resultados.

(c) Faça um gráfico de $\log_{10}|\varepsilon| \times \log_{10}h$ para $f'_f(1)$, $f'_{3s}(1)$ e $f'_{5s}(1)$, variando h desde 10^{-15} até 10^0. (Planeje muito bem os valores de h escolhidos para que eles apareçam igualmente espaçados no gráfico log-log.) Discuta detalhadamente o comportamento das curvas em seu gráfico. Verifique se a ordem da convergência das aproximações coincide com aquela esperada teoricamente.

2. **Integração numérica**
A integral

$$I = \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \equiv \lim_{N\to\infty}\sum_{i=1}^{N} f(x_i)\,h, \tag{9}$$

onde $x_i = a+(i-1)\,h$ e $h=\frac{b-a}{N}$, possui um significado geométrico muito simples: a área contida sob a curva descrita pela função $f(x)$ indo de $x=a$ até $x=b$.
A ideia por trás dos métodos básicos de integração é dividir o intervalo $[a,b]$ em um número finito N de subintervalos de tamanho h, de tal forma que a integral é agora dada por

$$I = \int_a^{a+h} f(x)\,dx + \int_{a+h}^{a+2h} f(x)\,dx + \dots \int_{b-h}^{b} f(x)\,dx. \tag{10}$$

Para proceder, usa-se agora diferentes aproximações de $f(x)$ conforme (1). A aproximação mais simples é aquela em que $f(x)=f(x_i)$ no intervalo $[x_i,x_{i+1}]$. Dessa maneira, $\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)\,\mathrm{d}x \approx f(x_i)\,h$ e a integral se torna

$$I_R \approx h\left(f(a)+f(a+h)+\dots+f(b-2h)+f(b-h)\right),$$

como ilustrado na Fig. 1. Nesta aproximação, comete-se um erro $\mathcal{O}\left(h^2\right)$ em cada integração. Logo, o erro total deve ser da ordem de Nh que é $\mathcal{O}(h)$.
Evidentemente, podemos melhorar nossa aproximação indo até ordem linear para $f(x)$ em (1), ou seja,

$$f(x) \approx f(x_i) + f'(x_i)(x-x_i) \approx f(x_i) + \frac{f(x_{i+1})-f(x_i)}{h}(x-x_i),$$

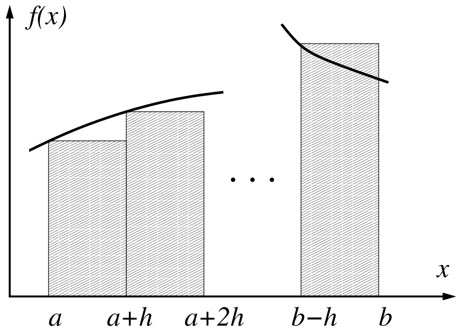

Figura 1: Representação geométrica do cálculo de uma integral.

onde utilizamos a Eq. (3) na última passagem. Logo,

$$\int_{x_i}^{x_i+h} f(x)\,\mathrm{d}x = \int_{x_i}^{x_{i+1}} \left(f(x_i) + \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h} (x - x_i) \right) \mathrm{d}x = \frac{1}{2} h \left(f(x_{i+1}) + f(x_i) \right), \tag{11}$$

que é conhecida como regra do trapézio. Seu erro "local" é $\mathcal{O}\left(h^3\right)$ e o erro "global" é $\mathcal{O}\left(h^2\right)$. A integral no intervalo $[a, b]$ é então dada por

$$I_T \approx h \left[0.5 f(a) + f(a+h) + f(a+2h) + f(a+3h) + \ldots + f(b-h) + 0.5 f(b) \right]. \tag{12}$$

Expandindo até ordem quadrática para $f(x)$,

$$f(x) \approx f(x_i) + \left[\frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h} \right] (x - x_i) + \frac{1}{2} \left[\frac{f(x_{i+1}) - 2f(x_i) + f(x_{i-1})}{h^2} \right] (x - x_i)^2,$$

ou seja, precisa-se de três pontos no intervalo de integração. Logo, a integral a ser avaliada é

$$\int_{x_i-h}^{x_i+h} f(x)\,\mathrm{d}x = f(x_i)\, 2h + \frac{h}{3} \left(f(x_{i+1}) - 2f(x_i) + f(x_{i-1}) \right) = \frac{1}{3} \left(f(x_i + h) + 4f(x_i) + f(x_i - h) \right), \tag{13}$$

que é conhecida como a regra de Simpson. Seu erro global é $\mathcal{O}\left(h^4\right)$. A integral no intervalo $[a, b]$ é então dada por

$$I_S \approx \frac{h}{3} \left[f(a) + 4f(a+h) + 2f(a+2h) + 4f(a+3h) + 2f(a+4h) \ldots + f(b) \right].$$

Podemos continuar esse processo e considerar polinômios de graus superiores nas aproximações de $f(x)$. Contudo, a série de Taylor converge apenas localmente e, portanto, não é imediato que um polinômio de ordem maior traduza-se em uma melhor convergência global. As aproximações descritas acima formam a base de métodos bem robustos para avaliar integrais mesmo de funções não muito suaves. O sucesso desses métodos pode ser verificado variando-se o número de partições N até obter-se a precisão desejada.
Baseado nessa discussão, considere agora a seguinte função

$$f(x) = e^{2x} \mathrm{sen} x, \tag{14}$$

e responda:

(a) Considere a integral $I \equiv \int_{x_i-2h}^{x_i+2h} f(x)\,\mathrm{d}x$. Calcule a ordem do erro para a aproximação de Boole para I,

$$I_B = \frac{2h}{45} \left(7f(x_{i-2}) + 32f(x_{i-1}) + 12f(x_i) + 32f(x_{i+1}) + 7f(x_{i+2}) \right).$$

(b) Escreva um programa FORTRAN que calcule uma aproximação de $I = \int_0^1 f(x)\,\mathrm{d}x$ tanto pelo método do trapézio quanto pelo de Simpson para diferentes valores da partição $h = 1/N$ e preencha a tabela II com o valor absoluto dos desvios em relação ao resultado exato $|\varepsilon|$. Aponte o valor ótimo de h em cada um dos casos e discuta seus resultados.

h	Regra do trapézio	Regra de Simpson	Regra de Boole
2^{-1}			
2^{-2}			
2^{-3}			
2^{-4}			
2^{-5}			
2^{-6}			
2^{-7}			
2^{-8}			
2^{-9}			
2^{-10}			
2^{-11}			
2^{-12}			
2^{-13}			

Tabela II: Integral numérica de $f(x)$ em (14) no intervalo $[0,1]$ por meio de duas diferentes aproximações como função da partição do intervalo h.

(c) Faça um gráfico de $\log_{10}|\varepsilon| \times \log_{10}h$ para ambos os métodos, variando h desde 10^{-15} até 10^{0}. Verifique se a ordem da convergência das aproximações coincide com aquela esperada teoricamente e discuta seus resultados.

3. **Equações algébricas não lineares**
Muitas vezes, estamos interessados nas raízes de uma função contínua $f(x)$ que são soluções da equação

$$f(x) = 0. \tag{15}$$

Um exemplo clássico é dado por $f(x) = x^2 - 2bx + c$, com soluções $x = -b \pm \sqrt{b^2 - c}$. Entretanto, não existe uma solução analítica de maneira geral e, portanto, soluções numéricas se fazem necessárias.
Talvez o algoritmo mais simples para resolver esse tipo de problema é o chamado método da bisseção. Ele consiste em iterar os valores de um intervalo $]x_{-,n}, x_{+,n}[$ (com $n = 0, 1, 2, \dots$) tal que

$$f(x_{+,n}) \times f(x_{-,n}) < 0. \tag{16}$$

A desigualdade (16) garante que pelo menos 1 raiz de $f(x)$ está contida no intervalo $]x_{-,n}, x_{+,n}[$. Os valores de $x_{\pm,n}$ são iterados da seguinte maneira: calcula-se o ponto médio do intervalo

$$x_m = \frac{x_{+,n} + x_{-,n}}{2}. \tag{17}$$

Se $f(x_m) \times f(x_{+,n}) > 0$, então $x_{+,n+1} = x_m$ e $x_{-,n+1} = x_{-,n}$, caso contrário, $x_{-,n+1} = x_m$ e $x_{+,n+1} = x_{+,n}$. Note que a desigualdade (16) é preservada. Finalmente, itera-se o processo até a convergência desejada, quantificada, por exemplo, através de

$$|x_{+,n} - x_{-,n}| < \varepsilon = \text{tolerância}. \tag{18}$$

Pode-se checar que, após convergência, $f(x_{+,n}) \approx f(x_{-,n}) \approx 0$. Embora pareça simplório, o método da bisseção tem sucesso garantido, mesmo que sua convergência seja lenta.
Um outro método bastante popular (e de convergência mais rápida caso seja possível calcular a derivada analiticamente) é o método de Newton-Raphson. Nesse caso, a estimativa da raíz é iterada via

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}, \tag{19}$$

até um critério de convergência desejado como, por exemplo,

$$|x_{n+1} - x_n| < \varepsilon = \text{tolerância}. \tag{20}$$

n	$m_{-,n}$	$m_{-,n}$	$\lvert m_{+,n} - m_{-,n}\rvert$	m_n	$\lvert m_{n+1} - m_n\rvert$
0	0	1	1	1	
1					
$\vdots$					

Tabela III: Tabela da maior solução da equação (21), M, pelos métodos da bisseção e de Newton-Raphson para tolerância igual a $\varepsilon = 10^{-6}$ e temperatura $T = 0.5$.

Baseado nessa discussão, considere agora a seguinte equação transcendental

$$m = \tanh\left(m/T\right), \tag{21}$$

onde deseja-se resolvê-la para m, e T é apenas uma constante. Esta equação relaciona a magnetização e a temperatura (adimensionais) de um magneto de Ising na aproximação de campo médio.)

(a) Mostre graficamente que para $T > 1$ só há uma solução, $m = 0$, e que para $T < 1$ temos três soluções para essa equação: $m = 0$ e $m = \pm M \neq 0$. *Dica*: Faça o gráfico das funções $f_1(x) = x$ e $g_1(x) = \tanh(x/T)$ e veja onde as curvas se cruzam.

(b) (Opcional) Sabendo que as funções $f_{1,2}(x)$ são monotônicas, prove analiticamente que $T = T_c = 1$ é a temperatura acima da qual só existe a solução sem magnetização $m = 0$. (Essa é denominada de temperatura crítica T_c.)

(c) Escreva um programa FORTRAN que encontre a maior solução de (21), M, e complete a tabela III até a convergência estipulada.

(d) Faça um gráfico de $\log_{10}\varepsilon \times \log_{10} n_{\max}$ variando ε de 10^{-14} até 10^0 onde $n_{\max}$ é o número de iterações necessárias para se alcançar a precisão desejada. Use que $T = 0.9$. (No mesmo gráfico, traga $n_{\max}$ para ambos os métodos da bisseção e de Newton-Raphson.)

(e) Repita o item anterior para $T = 0.3$. Discuta as diferenças e semelhanças.

(f) Utilizando a tolerância de precisão de máquina (lembre-se de usar REAL*8) e o método de Newton-Raphson, faça um gráfico de $M \times T$ para $0 \leq T \leq 2$. (Para melhor performance, qual o valor inicial m_0 que você deve usar para cada nova temperatura?)

Breve discussão sobre a execução dos problemas

Nos problemas 1 e 2 (e analogamente para o problema 3), pede-se um gráfico $\log_{10}|\varepsilon| \times \log_{10}h$. A ideia é descobrir como o erro $|\varepsilon|$ depende de h. Em geral, para $h \ll 1$, tem-se uma lei de potência

$$|\varepsilon| = Ah^{\alpha}, \tag{22}$$

onde A é uma constante numérica sem importância para nossa discussão e α é o expoente no qual estamos interessados. Por exemplo quando diz-se que a convergência de um método é linear, então $\alpha = 1$. Uma convergência quadrática significa $\alpha = 2$, e assim por diante.

Em situações nas quais temos uma dependência do tipo lei de potência, é conveniente reescrever (23) como

$$\begin{aligned} \log_{10}|\varepsilon| &= \log_{10}Ah^{\alpha}, \\ &= \log_{10}A + \alpha\log_{10}h. \end{aligned} \tag{23}$$

Dessa maneira, uma simples regressão linear da curva $\log_{10}|\varepsilon| \times \log_{10}h$ nos fornece diretamente o expoente α.

Para calcular o log na base 10, basta utilizar a função DLOG10(). Vocês deverão então gerar um gráfico no Xmgrace com essa curva. O próximo passo é realizar uma regressão linear para calcularmos α.

- Para ler o arquivo arquivo.dat e graficá-lo faça: Data -> Import -> ASCII e escolha arquivo.dat.
- Para realizar a regressão linear faça: Data -> Transformation -> Regression. Uma janela se abrirá. Basta clicar em Accept, pois a opção padrão é a regressão linear. Pronto, a curva já é gerada automaticamente. Pode-se, se assim desejar, selecionar um subconjunto dos dados a serem considerados para a regressão.

```
Number of observations                  = 100001
Mean of independent variable            = -1.434316
Mean of dependent variable              = -0.1842457
Standard dev. of ind. variable          = 0.4344598
Standard dev. of dep. variable          = 0.440337
Correlation coefficient                 = 0.9999705
Regression coefficient (SLOPE)          = 1.013498
Standard error of coefficient           = 2.461248e-05
t - value for coefficient               = 41178.2
Regression constant (INTERCEPT)         = 1.269431
Standard error of constant              = 3.688603e-05
t - value for constant                  = 34414.94

Analysis of variance
Source           d.f     Sum of squares  Mean Square     F
Regression          1    19388.52        19388.52        1.695644e+09
Residual        99999    1.143419        1.143431e-05
Total          100000    19389.66


y = 1.2694 + 1.0135 * x

Regression of set 0 results to set 1
```

Figura 2: Exemplo de um console do Xmgrace com os resultados de uma regressão linear.

- Para visualizar a expressão analítica da curva, vá em Window -> Console. No exemplo da Fig. 2, tem-se $y = 1.2694 + 1.0135 * x$. O valor do coeficiente angular é então $1.01350\,(2)$ ou $1.01350 \pm 2\,10^{-5}$, já com o erro. O erro pode ser encontrado na linha “Standard error of coefficient” e nesse exemplo é dado por 2.46×10^{-5}.