



INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS  
UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

[7600017] - INTRODUÇÃO À FÍSICA COMPUTACIONAL

---

## Projeto 3

---

**Docente:**

Francisco Castilho Alcaraz

**Aluno:**

Breno Henrique Pelegrin da Silva (13687303)

26 de outubro de 2023

## Sumário

<b>1</b>	<b>Contexto</b>	<b>2</b>
<b>2</b>	<b>Tarefa A</b>	<b>2</b>
<b>3</b>	<b>Tarefa B</b>	<b>6</b>
<b>4</b>	<b>Tarefa C</b>	<b>12</b>

## Lista de Figuras

1	Código-fonte da tarefa A . . . . .	4
2	Diferença absoluta em função do passo . . . . .	6
3	Código-fonte da tarefa B (parte 1) . . . . .	8
4	Código-fonte da tarefa B (parte 2) . . . . .	9
5	Código-fonte da tarefa B (parte 3) . . . . .	10
6	Desvios dos métodos de integração em função de $N$ . . . . .	11

## 1 Contexto

Nesse projeto, foram explorados diversos métodos numéricos de derivação e integração, que podem auxiliar em diversos processos relacionados à tópicos de Física Computacional. Além disso, também foram explorados vários métodos para encontrar raízes de polinômios, que também podem ser úteis na resolução de problemas de física.

## 2 Tarefa A

Nessa tarefa, foi criado um programa para calcular numericamente as derivadas de 1ª ordem, 2ª ordem e 3ª ordem da função  $f(x)$  expressa na equação 1, utilizando métodos numéricos diferentes. Os métodos utilizados para calcular as derivadas foram: derivada simétrica de 3 pontos (d1s3p), derivada para frente de 2 pontos (d1f2p), derivada para trás de 2 pontos (d1t2p), derivada simétrica de 5 pontos (d1s5p), derivada segunda simétrica de 5 pontos (d2s5p), derivada terceira anti-simétrica de 5 pontos (d3s5p).

As relações para calcular cada uma das derivadas citadas estão expostas nas equações 3, 4, 5, 6, 7 e 8, respectivamente. Nas relações, utiliza-se uma notação  $f_n$ , cujo significado é dado pela equação 2, onde  $h$  é um passo arbitrário no eixo  $x$  e  $x_0$  é um ponto arbitrário do eixo  $x$  onde deseja-se calcular o valor da derivada. Para essa tarefa, escolheu-se  $x_0 = \frac{1}{2}$ . Além disso, o símbolo  $O(h^n)$  significa que é esperado um erro da ordem de  $h^n$ .

$$f(x) = e^{\frac{x}{2}} \tan(2x) \quad (1)$$

$$f_n = f(x_0 + nh), \text{ com } n \in \mathbb{Z} \quad (2)$$

$$f' = \frac{f_1 - f_{-1}}{2h} + O(h^2) \quad (3)$$

$$f' = \frac{f_1 - f_0}{h} + O(h) \quad (4)$$

$$f' = \frac{f_0 - f_{-1}}{h} + O(h) \quad (5)$$

$$f' = \frac{f_{-2} - 8f_{-1} + 8f_1 - f_2}{12h} + O(h^4) \quad (6)$$

$$f'' = \frac{-f_{-2} + 16f_{-1} - 30f_0 + 16f_1 - f_2}{12h^2} + O(h^4) \quad (7)$$

$$f'' = \frac{-f_{-2} + 2f_{-1} - 2f_1 + f_2}{2h^3} + O(h^2) \quad (8)$$

As expressões analíticas para as derivadas de 1<sup>a</sup>, 2<sup>a</sup> e 3<sup>a</sup> ordem da função  $f(x)$  estão expostas nas equações 9, 10 e 11.

$$f' = (2 \tan^2(2x) + 2) e^{\frac{x}{2}} + \frac{e^{\frac{x}{2}} \tan(2x)}{2} \quad (9)$$

$$f'' = (2 \tan^2(2x) + 2) e^{\frac{x}{2}} + 2 \cdot (4 \tan^2(2x) + 4) e^{\frac{x}{2}} \tan(2x) + \frac{e^{\frac{x}{2}} \tan(2x)}{4} \quad (10)$$

$$\begin{aligned} f''' = & (2 \tan^2(2x) + 2) (8 \tan^2(2x) + 8) e^{\frac{x}{2}} + \frac{3 \cdot (2 \tan^2(2x) + 2) e^{\frac{x}{2}}}{4} \\ & + 8 \cdot (4 \tan^2(2x) + 4) e^{\frac{x}{2}} \tan^2(2x) + 2 \cdot (4 \tan^2(2x) + 4) e^{\frac{x}{2}} \tan(2x) \\ & + \frac{(8 \tan^2(2x) + 8) e^{\frac{x}{2}} \tan(2x)}{2} + \frac{e^{\frac{x}{2}} \tan(2x)}{8} \end{aligned} \quad (11)$$

$$f'(x_0) = 9.79678201384$$

$$f''(x_0) = 64.09832454947$$

$$f'''(x_0) = 671.51461345787$$

Utilizando as relações numéricas apresentadas, calculou-se as derivadas citadas para diferentes passos  $h$ , utilizando  $x_0 = \frac{1}{2}$ , estando os valores de  $h$  e os resultados obtidos para cada método expostos na tabela 1, bem como os valores exatos com 11 casas decimais de precisão para cada derivada, para fins de comparação.

lém disso, na tabela 2, estão expostas as diferenças absolutas ( $|calculado - analitico|$ ) entre o cálculo numérico e o resultado analítico, a fim de observar o comportamento do erro associado ao cálculo. O código elaborado para essa tarefa está exposto na figura 1, e sua explicação é dada logo em seguida no verbete 1.

Figura 1: Código-fonte da tarefa A

```

1      program Derivadas
2          implicit real*8 (a-h,o-z)
3          dimension h(14)
4          parameter(d1=9.79678201384)
5          parameter(d2=64.09832454947)
6          parameter(d3=671.51461345787)
7          h = [5.0E-1, 2.0E-1, 1.0E-1, 5.0E-2, 1.0E-2, 5.0E-3, 1.0E-3,
8 &5.0E-4, 1.0E-4, 5.0E-5, 1.0E-5, 1.0E-6, 1.0E-7, 1.0E-8]
9          x0 = 0.5d0
10         open(unit=50, file='saida-1-diff-13687303.csv')
11         open(unit=51, file='saida-2-comp-13687303.csv')
12         write(50,100) "h", "d1s3p", "d1f2p", "d1t2p", "d1s5p", "d2s5p"
13 &,"d3a5p"
14         write(51,100) "h", "d1s3p", "d1f2p", "d1t2p", "d1s5p", "d2s5p"
15 &,"d3a5p"
16 100    format(a, ",", a, ",", a, ",", a, ",", a, ",", a, ",", a)
17        do i=1, 14, 1
18            d1s3p = (fn(x0, 1, h(i)) - fn(x0, -1, h(i)))/(2*h(i))
19            d1f2p = (fn(x0, 1, h(i)) - fn(x0, 0, h(i)))/(h(i))
20            d1t2p = (fn(x0, 0, h(i)) - fn(x0, -1, h(i)))/(h(i))
21            d1s5p = (fn(x0, -2, h(i)) - 8*fn(x0, -1, h(i))
22 & + 8*fn(x0, 1, h(i)) - fn(x0, 2, h(i))) / (12*h(i))
23            d2s5p = (-fn(x0, -2, h(i)) + 16*fn(x0, -1, h(i))
24 & - 30*fn(x0, 0, h(i)) + 16*fn(x0, 1, h(i)) - fn(x0, 2, h(i)))
25 & / (12*(h(i)**2))
26            d3a5p = (-fn(x0, -2, h(i)) + 2*fn(x0, -1, h(i))
27 & - 2*fn(x0, 1, h(i)) + fn(x0, 2, h(i)))/(2*(h(i)**3))
28            write(50,101) h(i), d1s3p, d1f2p, d1t2p, d1s5p, d2s5p, d3a5p
29            write(51,101) h(i), abs(d1s3p-d1), abs(d1f2p-d1), abs(d1t2p-d1
30 &), abs(d1s5p-d1), abs(d2s5p-d2), abs(d3a5p-d3)
31 101    format(E16.2, ",", F24.11, ",", F24.11, ",", F24.11, ",",
32 & F24.11, ",", F24.11, ",", F24.11)
33        end do
34        write(50,102) d1, d1, d1, d1, d2, d3
35 102    format("exatos", ",", F24.11, ",", F24.11, ",", F24.11, ",",
36 & F24.11, ",", F24.11, ",", F24.11)
37        close(50)
38        close(51)
39    end program
40
41    function func(x)
42        implicit real*8 (a-h,o-z)
43        func = exp(x/2.0d0) * tan(2.0d0*x)
44        return
45    end function func
46
47    function fn(x0, n, h)
48        implicit real*8 (a-h,o-z)
49        fn = func(x0 + n*h)
50        return
51    end function fn
52

```

## Verbetes 1: Explicação do código da tarefa A

Inicialmente, inicializa-se o vetor de passos, onde serão armazenados os passos a serem utilizados nos cálculos e define-se como parâmetros os valores exatos das derivadas de 1<sup>a</sup>, 2<sup>a</sup> e 3<sup>a</sup> ordem, a fim de calcular a diferença entre os valores calculados e os valores exatos. Depois, calcula-se as derivadas utilizando as expressões analíticas, com o apoio de duas funções que foram definidas no código, uma para a expressão  $f_n$  e outra para a função  $f(x)$ .

Os resultados das derivadas são escritos em formato CSV (valores separados por vírgula) em um arquivo *saida-1-diff-13687303.csv* e os resultados da diferença absoluta entre os valores calculados e os valores exatos são escritos em outro arquivo CSV, chamado *saida-2-comp-13687303.csv*.

Tabela 1: Valores calculados e exatos para cada método de derivação

h	d1s3p	d1f2p	d1t2p	d1s5p	d2s5p	d3a5p
0.50E+00	-3.60252169989	-11.20454560498	3.99950220521	-4.95521882009	-38.70606629556	32.46473088496
0.20E+00	18.58183816540	31.13918870401	6.02448762678	27.66549220246	189.32424380495	-1362.54806495201
0.10E+00	11.07219078361	14.72290430232	7.42147726491	8.56897498968	55.49452454316	1501.92943159643
0.50E-01	10.08541596563	11.73830513320	8.43252679806	9.75649102631	63.81599786143	789.41983085453
0.10E-01	9.80798764441	10.12887080566	9.48710448315	9.79672685963	64.09793807834	675.64711688441
0.50E-02	9.79958084803	9.95987555395	9.63928614211	9.79677858257	64.09830050628	672.54374001045
0.10E-02	9.79689393432	9.82894348919	9.76484437945	9.79678200836	64.09832451234	671.55572725930
0.50E-03	9.79680999370	9.81283462448	9.78078536292	9.79678201350	64.09832454831	671.52489281759
0.10E-03	9.79678313303	9.79998804956	9.79357821649	9.79678201384	64.09832449668	671.51533871177
0.50E-04	9.79678229364	9.79838475176	9.79517983551	9.79678201384	64.09832468912	671.51445053328
0.10E-04	9.79678202504	9.79710251663	9.79646153344	9.79678201385	64.09832100318	671.46293618103
0.10E-05	9.79678201405	9.79681406319	9.79674996491	9.79678201390	64.09846759836	555.11151651714
0.10E-06	9.79678201216	9.79678521738	9.79677880695	9.79678201216	64.13018114690	222044.59714052684
0.10E-07	9.79678200078	9.79678233385	9.79678166771	9.79678199893	68.64879119041	222044608.97344028950
EXATOS	9.79678153992	9.79678153992	9.79678153992	9.79678153992	64.09832763672	671.51458740234

Fonte: Autoria própria

Tabela 2: Diferenças absolutas para cada método de derivação

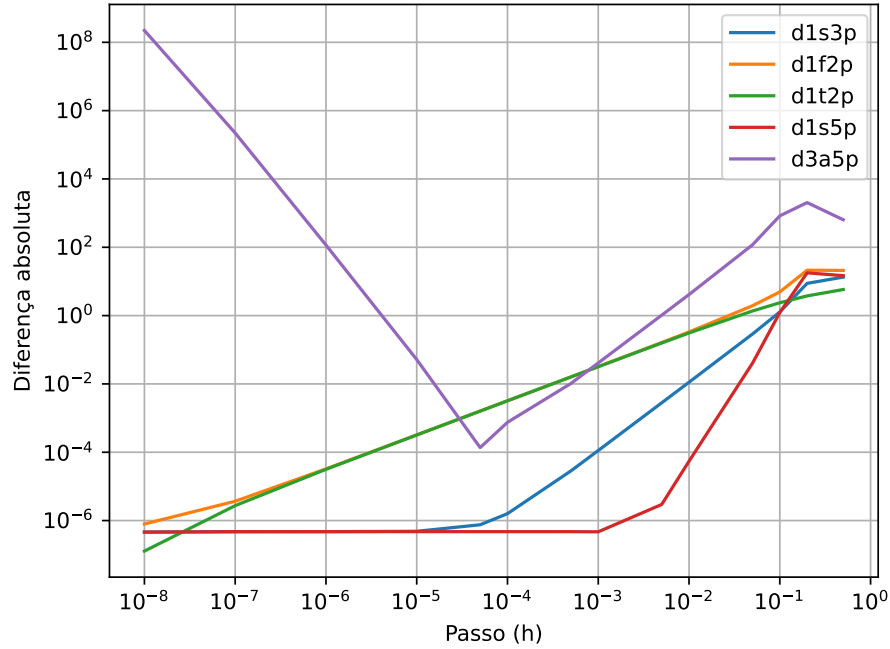
h	d1s3p	d1f2p	d1t2p	d1s5p	d2s5p	d3a5p
0.50E+00	13.39930323980	21.00132714490	5.79727933471	14.75200036001	102.80439393228	639.04985651738
0.20E+00	8.78505662548	21.34240716409	3.77229391313	17.86871066254	125.22591616823	2034.06265235436
0.10E+00	1.27540924369	4.92612276240	2.37530427501	1.22780655023	8.60380309355	830.41484419408
0.50E-01	0.28863442572	1.94152359329	1.36425474185	0.04029051361	0.28232977529	117.90524345218
0.10E-01	0.01120610449	0.33208926575	0.30967705677	0.00005468029	0.00038955837	4.13252948207
0.50E-02	0.00279930812	0.16309401404	0.15749539780	0.00000295734	0.00002713044	1.02915260810
0.10E-02	0.00011239440	0.03216194927	0.03193716046	0.00000046844	0.00000312438	0.04113985696
0.50E-03	0.00002845378	0.01605308457	0.01599617700	0.00000047358	0.00000308841	0.01030541525
0.10E-03	0.00000159311	0.00320650965	0.00320332342	0.00000047392	0.00000314004	0.00075130942
0.50E-04	0.00000075372	0.00160321184	0.00160170440	0.00000047392	0.00000294760	0.00013686906
0.10E-04	0.00000048512	0.00032097672	0.00032000648	0.00000047393	0.00000663354	0.05165122131
0.10E-05	0.00000047413	0.00003252327	0.00003157501	0.00000047398	0.00013996164	116.40307088520
0.10E-06	0.00000047224	0.00000367746	0.00000273297	0.00000047224	0.03185351018	221373.08255312449
0.10E-07	0.00000046086	0.00000079393	0.00000012780	0.00000045901	4.55046355369	222043937.45885288715

Fonte: Autoria própria

A partir das diferenças absolutas entre os cálculos numéricos e os resultados analíticos, expostas na tabela 2, foi criado um gráfico das diferenças em função do

passo  $h$  para cada método de derivada, exposto na figura 2, na qual ambos os eixos cartesianos estão em escala log-log. A partir da análise do gráfico, pode-se verificar que o passo  $h$  ótimo é  $0,5 \times 10^{-4}$ , já que a maioria dos métodos de derivação apresenta erro mínimo para esse passo.

Figura 2: Diferença absoluta em função do passo



Fonte: Autoria própria

### 3 Tarefa B

Nessa tarefa, criou-se um programa para calcular a integral da função  $f(x)$  dada na equação 12, no intervalo de 0 a 1, utilizando diversos métodos numéricos diferentes, sendo eles: regra do trapézio (tr), regra de Simpson (sp) e regra de Boole (bl), para diferentes divisões  $N$  do intervalo de 0 a 1. A partir do número de divisões  $N$  do intervalo de integração, pode-se definir o tamanho de cada divisão como  $h = (b - a)/N$ , onde  $b$  é o limite superior e  $a$  o limite inferior.

Assim, no caso da integral citada, como  $b = 1$  e  $a = 0$ , o tamanho  $h$  é  $1/N$ . A integral analítica está expressa na equação 13, e as expressões para a integração de cada método estão expostas, respectivamente, nas equações 15, 16 e 17. Nas expressões das integrais numéricas, utiliza-se a expressão  $f_n$ , cujo significado é dado pela equação 14, onde  $x_0$  é o ponto atual onde a integral está sendo calculada. A expressão  $O(h^n)$  denota que a integral numérica pode ter um erro na ordem de  $h^n$ .

$$f(x) = e^{-x} \cos(2\pi x) \quad (12)$$

$$I = \int_0^1 f(x)dx = \left( \frac{2\pi \sin(2\pi x)}{e^x + 4\pi^2 e^x} - \frac{\cos(2\pi x)}{e^x + 4\pi^2 e^x} \right) \Big|_0^1 = -\frac{1}{e + 4e\pi^2} + \frac{1}{1 + 4\pi^2} \quad (13)$$

$$\int_0^1 f(x)dx = 0.015616236904$$

$$f_n = f(x_0 + nh), \text{ com } n \in \mathbb{Z} \quad (14)$$

$$\int_{-h}^h f(x)dx = \frac{h}{2}(f_{-1} + 2f_0 + f_1) + O(h^3) \quad (15)$$

$$\int_{-h}^h f(x)dx = \frac{h}{3}(f_1 + 4f_0 + f_{-1}) + O(h^5) \quad (16)$$

$$\int_{x_0}^{x_4} f(x)dx = \frac{2h}{45}(7f_0 + 32f_1 + 12f_2 + 32f_3 + 7f_4) + O(h^7) \quad (17)$$

Para calcular a integral no método do trapézio, itera-se para cada  $x_0$  do eixo  $x$ , começando em  $x_0 = a + h$  e indo até  $x_0 = b - h$  em passos de  $2h$ , já que o método do trapézio calcula a área formada pelo trapézio anterior e posterior ao ponto  $x_0$  de interesse. A mesma relação vale para o método de Simpson. Já no método de Boole, inicia-se a iteração em  $x_0 = a$ , indo até  $x_0 = b - 4h$  em passos de  $4h$ , uma vez que esse método considera a área de quatro seções após o ponto  $x_0$  de interesse.

O código-fonte do programa desenvolvido para essa tarefa está exposto em 3 partes, nas figuras 3, 4 e 5, respectivamente. A explicação para o código é dada logo em seguida, no verbete 2, e os resultados para a diferença absoluta entre os valores calculados e os valores analíticos em cada método são exibidos na tabela 3.



Figura 3: Código-fonte da tarefa B (parte 1)

```
1      program Integrais
2          implicit real*8 (a-h, o-z)
3          parameter (anlint = 0.015616236904)
4          dimension n(10)
5
6          n(1) = 12
7
8          do i=2, 10, 1
9              n(i) = n(i-1)*2
10         end do
11         x0 = 0.0d0
12
13         open(unit=50, file='saida-1-int-13687303.csv')
14         open(unit=51, file='saida-2-erro-13687303.csv')
15
16         write(50,100)
17         write(51,100)
18 100     format("n", ",", "h", ",", "tr", ",", "sp", ",", "bl")
19         tr=0
20         sp=0
21         bl=0
22         do i=1, 10, 1
23             h = 1.0d0/n(i)
24             tr = trint(0.0d0, 1.0d0, n(i))
25             sp = spint(0.0d0, 1.0d0, n(i))
26             bl = blint(0.0d0, 1.0d0, n(i))
27             write(50,102) n(i), h, tr, sp, bl
28             write(51,102) n(i), h, tr, sp, bl
29 102     format(I0, ",", F24.11, ",", F24.11, ",", F24.11, ",", F24.1
30         &1)
31         end do
32         write(50,*) "exatos", ",", "exatos", ",", anlint, ",", anlint,
33         & ",", anlint
34         close(50)
35         close(51)
36     end program
```

Figura 4: Código-fonte da tarefa B (parte 2)

```
1      function func(x)
2          implicit real*8 (a-h,o-z)
3          pi = 4.0d0*atan(1.0d0)
4          func = exp(-x) * cos(2.0d0*pi*x)
5          return
6      end function func
7
8      function fn(x0, n, h)
9          implicit real*8 (a-h,o-z)
10         fn = func(x0 + n*h)
11         return
12     end function fn
13
14     function trint(a,b,n)
15         implicit real*8 (a-h,o-z)
16         trint=0
17         h=(b-a)/n
18         do i=1, n-1, 2
19             x0=a+i*h
20             trint=trint+(h/2.0d0)*(fn(x0, -1, h) + 2.0d0*fn(x0, 0, h)+f
21 &n(x0,1, h))
22         end do
23         return
24     end function
25
26     function spint(a,b,n)
27         implicit real*8 (a-h,o-z)
28         spint=0
29         h=(b-a)/n
30         do i=1, n-1, 2
31             x0=a+i*h
32             spint=spint+(h/3.0d0)*(fn(x0, 1, h) + 4.0d0*fn(x0, 0, h) +
33 &fn(x0,-1, h))
34         end do
35         return
36     end function
```

Figura 5: Código-fonte da tarefa B (parte 3)

```

1      function blint(a,b,n)
2          implicit real*8 (a-h,o-z)
3          blint=0
4          h=(b-a)/n
5          do i=0, n-4, 4
6              x0=a+i*h
7              blint=blint+(2.0d0*h/45.0d0)*(7.0d0*fn(x0, 0, h) + 32.0d0*f
8  &n(x0,1, h) + 12.0d0*fn(x0, 2, h) + 32.0d0*fn(x0, 3, h) + 7.0d0*fn
9  &(x0,4, h))
10             end do
11             return
12         end function
13
14     function anlint2(x)
15         implicit real*8 (a-h,o-z)
16         anlint2=0
17         pi = 4.0d0*atan(1.0d0)
18         anlint2=(exp(-x)/(1-4*(pi**2)))*(cos(2*pi*x) - 2*pi*sin(2
19  &*pi*x))
20         return
21     end function

```

#### Verbetes 2: Explicação do código da tarefa B

Inicialmente, define-se o vetor de divisões  $N$  e o valor analítico da integral. Em seguida, o vetor  $N$  é preenchido, e inicia-se um laço para calcular as integrais dos três métodos para cada  $N$  do vetor. Após calculadas as integrais, os resultados brutos são escritos no arquivo *saida-1-int-13687303.csv* e as diferenças absolutas entre os resultados calculados e o valor analítico são escritas no arquivo *saida-1-comp-13687303.csv*. Ambos os arquivos estão em formato CSV (valores separados por vírgula).

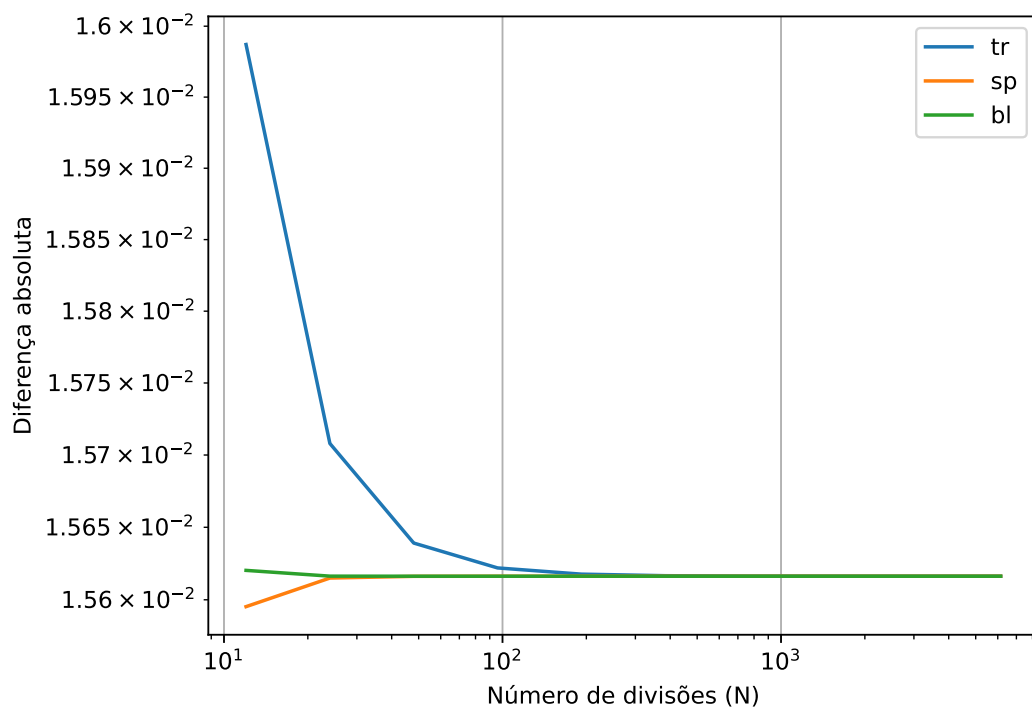
O cálculo das integrais é implementado em suas respectivas funções: a integral do trapézio na função *trint*, de Simpson na função *spint* e de Boole na função *blint*, utilizando as equações e limites de iteração citadas anteriormente no texto. Além disso, a fim de auxiliar o usuário, a integral analítica foi implementada na função *anlint2*.

Tabela 3: Diferenças absolutas para cada método de integração

N	h	Trapézio (tr)	Simpson (sp)	Boole (bl)
12	0.08333333333	0.01598707178	0.01559527278	0.01562026045
24	0.04166666667	0.01570800110	0.01561497754	0.01561629119
48	0.02083333333	0.01563911950	0.01561615896	0.01561623772
96	0.01041666667	0.01562195391	0.01561623204	0.01561623692
192	0.00520833333	0.01561766593	0.01561623660	0.01561623690
384	0.00260416667	0.01561659415	0.01561623689	0.01561623690
768	0.00130208333	0.01561632621	0.01561623690	0.01561623690
1536	0.00065104167	0.01561625923	0.01561623690	0.01561623690
3072	0.00032552083	0.01561624249	0.01561623690	0.01561623690
6144	0.00016276042	0.01561623830	0.01561623690	0.01561623690

Fonte: Autoria própria

A partir das diferenças absolutas entre os métodos numéricos e o resultado analítico expostas na tabela 3, foi criado um gráfico das diferenças em função do número de divisões  $N$ , exposto na figura 6, a fim de observar o desvio do resultado numérico em função de  $N$ . Ao analisar a figura, observa-se que o número de divisões ideal é 768, pois todos os métodos de integração apresentam erro mínimo a partir desse  $N$ .

Figura 6: Desvios dos métodos de integração em função de  $N$ 

Fonte: Autoria própria

## 4 Tarefa C

Ainda não há nada aqui.