Introdução à Física Computacional - 7600017 - 2S/2023
Projeto 3 — Métodos básicos integro-diferenciais
Prazo de entrega: 22/10

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 discutido no final deste projeto, o ingrediente básico que permeia todos esses métodos (exceto por um) é a expansão em série de Taylor

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

Para este projeto, todos os seus programas devem usar precisão real dupla (real*8).

1. **Derivação numérica:** Escreva um código FORTRAN que forneça os dados da tabela I para as derivadas da função

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

para $x = \frac{1}{2}$. Escreva apenas os desvios em relação aos resultados exatos. Na última linha escreva os valores numéricos exatos com precisão 10^{-11} obtidos mediante a expressão analítica que você deve derivar. Diga em cada caso qual o valor de h mais apropriado para uso. Explique seus resultados.

h	$f'_{2f}(x)$	$f'_{2t}(x)$	$f'_{3s}(x)$	$f'_{5s}(x)$	$f''_{3s}(x)$	$f''_{5s}(x)$	$f'''_{5a}(x)$
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}							
Exato							

Tabela I. Derivadas numéricas de $f(x)$ em (2) no ponto $x = \frac{1}{2}$ por meio de diferentes aproximações em função do passo h.

2. **Quadratura numérica:** Escreva um código FORTRAN que calcule uma aproximação da integral

$$I = \int_0^1 e^{-x}\cos(2\pi x)\,dx \tag{3}$$

usando diversos métodos e para diferentes números de pontos e preencha a tabela II com o valor dos desvios em relação ao resultado exato. Na última linha da tabela escreva o valor numérico exato com precisão 10^{-11} obtido pela expressão analítica que você deve calcular. Aponte o valor ótimo de h em cada um dos casos e discuta seus resultados.

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

Tabela II. Integral numérica de $f(x)$ em (3) no intervalo $[0,1]$ por meio de diferentes métodos e partições do intervalo h.

3. **Raízes de funções:** Faça um programa que calcule as raízes raízes reais de

$$f(x) = x^3 - 4x^2 - 59x + 126 \tag{4}$$

no intervalo $x \in [-10, 10]$, preenchendo a tabela III abaixo. Eleja uma tolerância de 10^{-6}. Inicie fazendo uma **busca direta** usando como ponto inicial $x = -10$ e um espaçamento inicial de 0,1. Quando verificar a mudança de sinal em $f(x)$, use o intervalo correspondente para iniciar o método da bisseção e conte as iterações a partir daí. Para os outros métodos, use o(s) extremo(s) desse intervalo como ponto(s) inicial(is). Na última linha da tabela coloque os valores exatos.

	Bisseção			Newton-Raphson			Método da Secante		
Iteração	r_1	r_2	r_3	r_1	r_2	r_3	r_1	r_2	r_3
0									
1									
2									
3									
4									
5									
6									
Exato									

Tabela III. Raízes de $f(x)$ em (4) por meio de diferentes métodos e números de iterações.

BREVE DISCUSSÃO SOBRE A EXECUÇÃO DOS PROBLEMAS

Derivação numérica

O objetivo é obter aproximações para a derivada de $f(x)$, cuja definição é

$$f'(x) \equiv \lim_{h\to 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h}. \tag{5}$$

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

$$f'_{2f}(x) \equiv \frac{f(x+h) - f(x)}{h}. \tag{6}$$

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 mais tarde, há outras opções.

Nota-se que

$$f'_{2f}(x) = f'(x) + \mathcal{O}(h), \tag{7}$$

onde o símbolo $\mathcal{O}(h)$ quer dizer que o erro que cometemos ao truncar a expansão em série de Taylor (1) para o cálculo de $f'(x)$ é da ordem de h. Analogamente, podemos calcular a **derivada para trás de 2 pontos**

$$f'_{2t}(x) = \frac{f(x) - f(x-h)}{h} + \mathcal{O}(h). \tag{8}$$

Se combinarmos as equações (6) e (8) podemos escrever a **derivada simétrica de 3 pontos**

$$\begin{aligned} f'_{3s}(x) &\equiv \frac{1}{2}\left(f'_f(x) + f'_t(x)\right) \\ &= \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} + \mathcal{O}\left(h^2\right). \end{aligned} \tag{9}$$

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. Por exemplo, a **derivada simétrica de 5 pontos** é

$$f'_{5s}(x) = \frac{f(x-2h) - 8f(x-h) + 8f(x+h) - f(x+2h)}{12h} + O(h^4). \tag{10}$$

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**

$$f''_{3s}(x) = \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2} + \mathcal{O}\left(h^2\right). \tag{11}$$

Podemos continuar a manipulação algébrica de série de Taylor e obter a **derivada segunda simétrica de 5 pontos**

$$f''_{5s} = \frac{-f(x-2h) + 16f(x-h) - 30f(x) + 16f(x+h) - f(x+2h)}{12h^2} + \mathcal{O}\left(h^4\right), \tag{12}$$

a **derivada terceira assimétrica de 4 pontos**

$$f'''_{4a} = \pm\frac{-f(x\mp h) + 3f(x) - 3f(x\pm h) + f(x\pm 2h)}{h^3} + \mathcal{O}(h), \tag{13}$$

e a **derivada terceira anti-simétrica de 5 pontos**

$$f'''_{5a} = \frac{-f(x-2h) + 2f(x-h) - 2f(x+h) + f(x+2h)}{2h^3} + \mathcal{O}\left(h^2\right). \tag{14}$$

Integração (ou quadratura) numérica

A integral

$$I = \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \equiv \lim_{N\to\infty} \sum_{i=1}^{N} f(x_i)\,h, \tag{15}$$

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

$$I = \int_a^{a+h} f(x)\,dx + \int_{a+h}^{a+2h} f(x)\,dx + \ldots \int_{b-h}^{b} f(x)\,dx. \tag{16}$$

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

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

como ilustrado na Fig. 1(a). Nesta aproximação, chamada de **regra do retângulo** (para frente), 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 $\mathcal{O}(h)$.

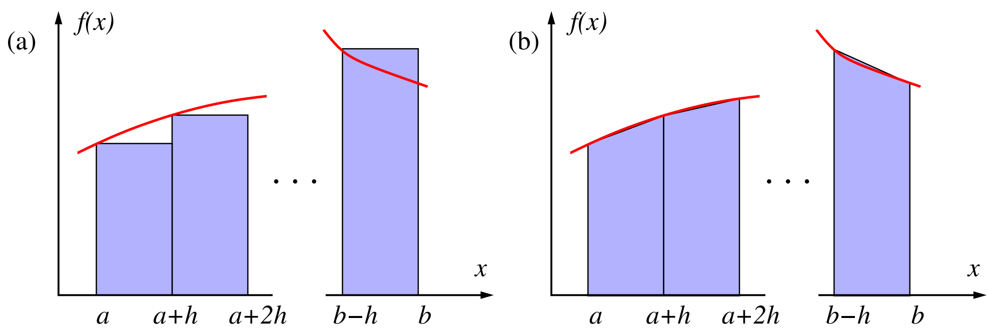

Figura 1. Representação geométrica do cálculo de uma integral pelos métodos da (a) regra do retângulo e da (b) regra do trapézio.

Evidentemente, podemos melhorar nossa aproximação indo até ordem linear para $f(x)$ em (1), ou seja,

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

onde utilizamos a Eq. (6) na última passagem. Logo,

$$\int_{x_i}^{x_i+h} f(x)\,\mathrm{d}x = \int_{x_i}^{x_{i+1}} \left(f(x_i) + \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h}(x - x_i)\right)\mathrm{d}x = \frac{1}{2}h\left(f(x_{i+1}) + f(x_i)\right), \tag{17}$$

que é conhecida como **regra do trapézio** [vide Fig. 1(b)]. 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

$$I_T \approx h\left(\frac{1}{2}f(a) + f(a+h) + f(a+2h) + f(a+3h) + \ldots + f(b-h) + \frac{1}{2}f(b)\right). \tag{18}$$

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

$$\int_{x_i-h}^{x_i+h} f(x)\,\mathrm{d}x = f(x_i)\,2h + \frac{h}{3}\left(f(x_{i+1}) - 2f(x_i) + f(x_{i-1})\right) = \frac{h}{3}\left(f(x_i+h) + 4f(x_i) + f(x_i-h)\right), \tag{19}$$

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

$$I_S \approx \frac{h}{3}\left(f(a) + 4f(a+h) + 2f(a+2h) + 4f(a+3h) + 2f(a+4h)\ldots + f(b)\right). \tag{20}$$

Usando-se outras formas discretizadas para as derivadas obtem-se a **regra de Simpson 3/8**

$$\int_{x_0}^{x_3} f(x)dx = \frac{3h}{8}\left(f(x_0) + 3f(x_1) + 3f(x_2) + f(x_3)\right) + \mathcal{O}\left(h^5\right) \tag{21}$$

e a **regra de Boole** (impropriamente chamada de regra de Bode)

$$I_B \equiv \int_{x_i-2h}^{x_i+2h} f(x)\,\mathrm{d}x = \frac{2h}{45}\left(7f(x_{i-2}) + 32f(x_{i-1}) + 12f(x_i) + 32f(x_{i+1}) + 7f(x_{i+2})\right).$$

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.

Equações algébricas não lineares

Muitas vezes, estamos interessados nas raízes de uma função contínua $f(x)$ que são soluções da equação

$$f(x) = 0. \tag{22}$$

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 $n = 0, 1, 2, \ldots$) tal que

$$f(x_{+,n})\, f(x_{-,n}) < 0. \tag{23}$$

A desigualdade (23) 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

$$x_m = \frac{x_{+,n} + x_{-,n}}{2}. \tag{24}$$

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 (23) é preservada. Finalmente, itera-se o processo até a convergência desejada, quantificada, por exemplo, através de

$$|x_{+,n} - x_{-,n}| < \varepsilon = \text{tolerância}. \tag{25}$$

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** [vide Fig. 2(a)]. Nesse caso, a estimativa da raiz é iterada via

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}, \tag{26}$$

até um critério de convergência desejado como, por exemplo,

$$|x_{n+1} - x_n| < \varepsilon = \text{tolerância}. \tag{27}$$

Quando a derivada não é disponível, pode-se substituí-la pela sua derivada para trás de dois pontos. Este é o **método da secante** [vide Fig. 2(b)] que resulta em

$$x_{n+1} = x_n - f(x_n)\frac{x_n - x_{n-1}}{f(x_n) - f(x_{n-1})}. \tag{28}$$

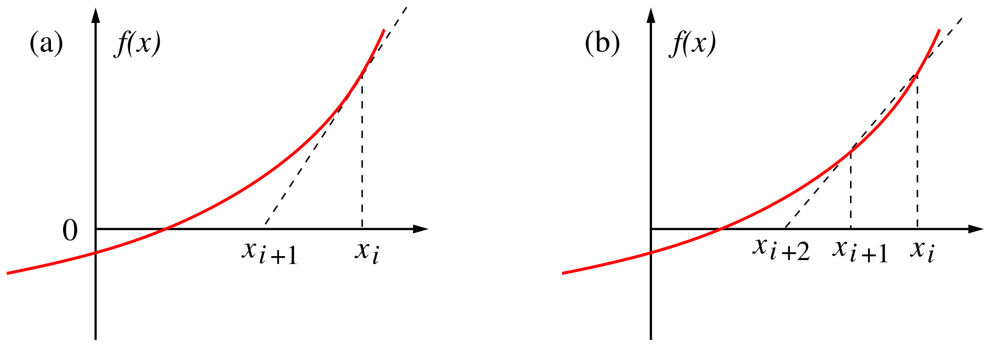

Figura 2. Representação geométrica dos métodos de (a) Newton-Raphson e (b) da secante.