Introdução à Física Computacional 1S/2018

Projeto 2 — Cálculo numérico

Início: 12 de Março de 2018

Data da entrega do relatório: 02 de Abril de 2018

Prof.: Eric C. Andrade

Descrição:

Discutiremos aqui brevemente alguns conceitos básicos de cálculo numérico que são muito úteis no dia a dia da pesquisa. O ingrediente básico que permeia todos esses métodos é a expansão em série de Taylor de uma função $f(x)$ ao redor de x_0

$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \frac{1}{2!}f''(x_0)(x - x_0)^2 + \frac{1}{3!}f'''(x_0)(x - x_0)^3 + \ldots \tag{1}$$

Sugestão de execução:

Exercício 1: Aula 3. Exercício 2: Aulas 3 e 4. Exercício 3: Aula 4.

1) Derivada numérica

Dada uma função $f(x)$, podemos obter uma aproximação para sua derivada utilizando a definição

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

só que para um h finito

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

À primeira vista, parece que tudo que temos que fazer é escolher um valor de h bem pequeno que obteremos o valor exato da derivada. Como veremos explicitamente em um exemplo, esse não é caso, pois rapidamente perdemos precisão numérica.

A primeira pergunta que nos fazemos é qual é o erro que comentemos ao passar de (2) para (3)? Para respondermos essa questão, escrevemos

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2!}f''(x) + \ldots,$$

donde obtemos a **derivada para frente de 2 pontos**

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

Aqui 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 (4) e (5) podemos escrever a **derivada simétrica de 3 pontos**

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

h	$f'_f(1)$	$f'_t(1)$	$f'_{3s}(1)$	$f''_{3s}(1)$
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.

Note que um há um nesse caso o erro passa agora para $\mathcal{O}\left(h^2\right)$, ou seja melhoramos nossa convergência. 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. Qual é o preço que pagamos para esse ganho em precisão? Temos que agora avaliar tanto $f(x+h)$ quanto $f(x-h)$, o que aumenta o custo computacional. 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. Partimos da seguinte igualdade

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

e chegamos assim 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

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

(a) Escreva um programa FORTRAN que calcule as derivadas de $f(x)$ para as diferentes aproximações e valores de h no ponto $x=1$.

(b) 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 $f''_{3s}(1)$. Verifique que a ordem da convergência das aproximações coincide com aquela esperada teoricamente e discuta seus resultados.

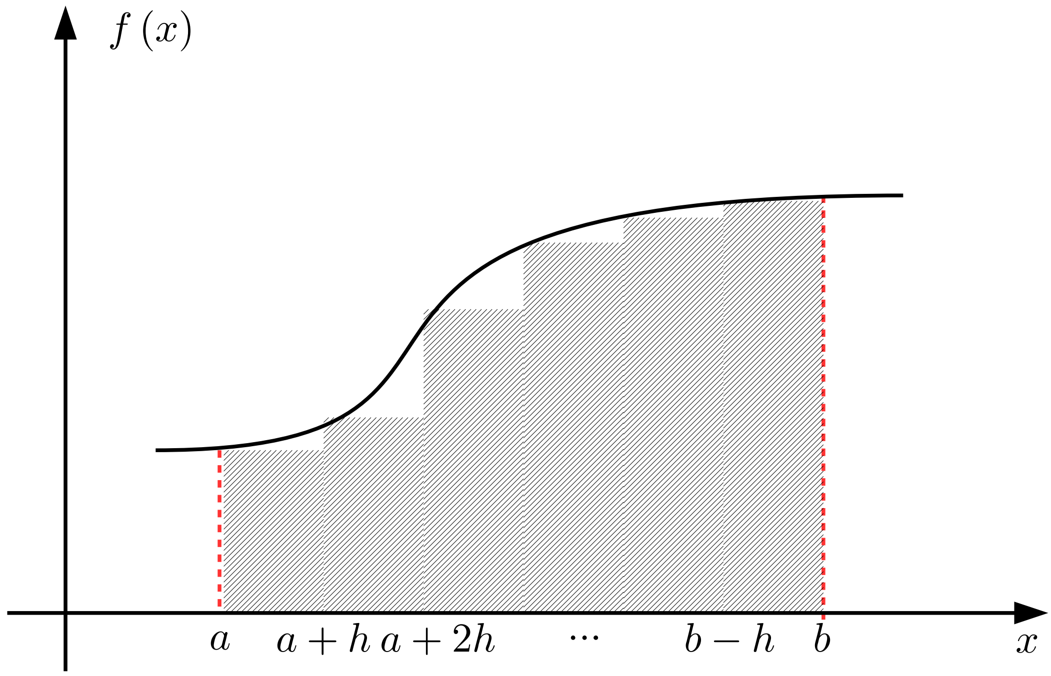

Figura 1: Representação geométrica do cálculo da integral. Dividimos o intervalo $[a, b]$ em N subintervalos de igual tamanho $h = (b-a)/N$.

2) Integração numérica

A integral

$$I = \int_a^b f(x)\,dx, \tag{9}$$

possui um significado geométrico muito simples: ela dá a área contida sob a curva descrita pela função $f(x)$ indo de $x = a$ até $x = b$. A ideia básica por trás dos métodos básicos de integração é dividir o intervalo $[a, b]$ em N subintervalos de igual tamanho $h = (b-a)/N$, de tal forma que a integral é agora dada por, veja figura 1

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

O que fazemos agora é aproximarmos $f(x)$ em cada um dos intervalos por funções simples, para as quais podemos fazer a integral analiticamente. Começamos com uma aproximação linear para $f(x)$ ao redor de $x = u$

$$f(x) \approx f(u) + f'(u)(x-u) \approx f(u) + \frac{f(u+h) - f(u)}{h}(x-u),$$

onde utilizamos a Eq. 4. Temos assim que

$$I = \int_u^{u+h} f(x)\,dx = \int_u^{u+h} \left(f(u) + \frac{f(u+h) - f(u)}{h}(x-u) \right) dx = \frac{1}{2} h \left(f(u+h) + f(u) \right), \tag{11}$$

que é conhecida como **regra do trapézio**. Seu erro local é $\mathcal{O}\left(h^3\right)$ e o erro global é de $\mathcal{O}\left(h^2\right)$.[1] A integral no intervalo

[1] O erro local é o erro em cada uma das N partições. Ele depende de $h = (b-a)/N$. Como temos N partições, temos que somar N erros locais e, por isso, o erro global é sempre uma potência de h menor do que o erro local.

h	Regra do trapézio	Regra de Simpson
1/2		
1/4		
1/8		
1/16		
1/32		
1/64		
1/128		
1/256		
1/1024		
1/2048		
1/4096		
1/8192		

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.

$[a,b]$ é então dada por

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

Para escrever um código com esse método, é mais eficiente calcularmos separadamente a contribuição dos extremos, dada por $0.5h\left(f(a)+f(b)\right)$, e realizarmos um laço para calcularmos as contribuições restantes das partições internas.

Podemos agora considerar uma aproximação quadrática para $f(x)$ ao redor de $x=u$

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

onde utilizamos a Eq. 7. Nesse caso, precisamos de três pontos em nosso intervalo e a integral que avaliaremos é

$$I = \int_{u-h}^{u+h} f(x)\,dx = f(u)\,2h + \frac{h}{3}\left(f(u+h) - 2f(u) + f(u-h)\right) = \frac{1}{3}\left(f(u+h) + 4f(u) + f(u-h)\right), \tag{13}$$

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

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

Novamente, para a confecção do código para esse método, é mais eficiente calcularmos separadamente a contribuição dos extremos, agora dada por $\frac{h}{3}\left(f(a)+f(b)\right)$, e realizarmos um laço para calcularmos as contribuições restantes das partições internas. Note, contudo, que nesse os termos de ordem par e ímpar possuem pesos diferentes.

Podemos continuar esse processo e considerar cada vez mais pontos e polinômios de grau superior como aproximações para $f(x)$. 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 duas aproximações descritas acima formam a base de métodos bem robustos para avaliarmos integrais mesmo de funções não muito suaves. O segredo do sucesso do método está em variarmos o valor das partições N até obtermos a precisão desejada.

Baseado nessa discussão, considere agora a seguinte função

$$f(x) = e^{2x}\text{sen}x. \tag{14}$$

(a) Escreva um programa FORTRAN que calcule $I = \int_0^1 f(x)\,dx$ tanto pelo método do trapézio quanto pelo de Simpson para diferentes valores da partição $h = 1/N$.

(b) 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.

(c) Faça um gráfico de $\log_{10}|\varepsilon| \times \log_{10}h$ para ambos os métodos. Verifique que a ordem da convergência das aproximações coincide com aquela esperada teoricamente e discuta seus resultados.

3) Equações algébricas não lineares

Seja $f(x)$ uma função qualquer, em geral não linear. Muitas vezes, estamos interessados em soluções (raízes) da equação

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

Um exemplo clássico é dado por $f(x) = x^2 - 2bx + c$, com soluções $x = -b \pm \sqrt{b^2 - c}$. De maneira geral, contudo, não é possível encontrarmos uma solução analítica para esse problema e temos que buscar uma solução numérica. O algoritmo mais simples para resolver esse tipo de problema é o chamado **método da bisseção**. Começamos com dois palpites iniciais para a raiz x, designados x_+ e x_- tais que

$$f(x_+) > 0 \text{ e } f(x_-) < 0. \tag{16}$$

Assim a função $f(x)$ muda de sinal no intervalo $[x_+, x_-]$ e, portanto, uma de suas raízes deve estar contida nesse intervalo. Propomos então um novo valor para x, que chamamos de x_{novo} pela fórmula

$$x_{novo} = \frac{x_+ + x_-}{2}. \tag{17}$$

Se $f(x_{novo}) > (<)\, 0$, tomamos $x_{+(-)} = x_{novo}$ e iteramos o processo até convergirmos, por exemplo, de acordo com o critério

$$\varepsilon = \left| \frac{x_+ - x_-}{2} \right| < \text{tolerância}. \tag{18}$$

Embora pareça simplório, o método da bisseção tem sucesso garantido, mesmo que sua convergência seja lenta.

Baseado nessa discussão, considere agora a seguinte equação transcendental

$$m = \tanh(m/T). \tag{19}$$

Essa é uma equação que aparece na solução de campo médio do modelo de Ising. Nesse caso, $-1 \leq m \leq 1$ é a magnetização do problema, o parâmetro T é a temperatura e escolhemos nossas unidades tais que a temperatura crítica $T_c = 1$.

(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 $m = \pm m_0$. Dica: Faça o gráfico das funções $f(x) = x$ e $g(x) = \tanh(x/T)$ e veja onde as curvas se cruzam.

(b) Escreva um programa FORTRAN que encontre a **raiz positiva** de $f(m) = m - \tanh(m/T)$ para $0 \leq T \leq 1$ utilizando o método da bisseção. Discuta seu algoritmo e sua escolha dos critérios de convergência e de sua tolerância. Dicas: tome $x_- = \delta$ e $x_+ = 1 - \delta$, com δ pequeno, e acompanhe a convergência de seu programa passo a passo.

(c) Faça um gráfico da raiz positiva de $f(m)$ como função do parâmetro T no intervalo $0 \leq T \leq 1$. Discuta seus resultados.

```
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.

Breve discussão sobre a execução dos problemas

Nos Exercícios 1 e 2 é pedido que vocês façam um gráfico $\log_{10}|\varepsilon| \times \log_{10} h$. A ideia aqui é o erro $|\varepsilon|$ depende de uma potência de h

$$|\varepsilon| \;=\; Ah^{\alpha}, \tag{20}$$

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

Em situações nas quais temos uma dependência do tipo lei de potência, é conveniente aplicarmos o log dos dois lados para extrairmos o valor do expoente em uma escala linear. Pela Eq. (20) temos então que

$$\begin{aligned} \log_{10}|\varepsilon| &= \log_{10} Ah^{\alpha}, \\ &= \log_{10} A + \alpha \log_{10} h. \end{aligned} \tag{21}$$

Ou seja, ao gerarmos a curva $\log_{10}|\varepsilon| \times \log_{10} h$ concluímos que o coeficiente angular da reta dá diretamente o expoente α. Esse é o número no qual estamos interessados para estudarmos a convergência de cada um dos métodos (o coeficiente linear pode ser ignorado nessa discussão).

Para calcular o log na base 10, basta utilizarem 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 foo.dat e graficá-lo faça: Data -> Import -> ASCII e escolha foo.dat.
- Para realizar a regressão linear faça: Data -> Transformation -> Regression. Isso vai gerar uma janela. Basta clicar em Accept, pois a opção padrão é a regressão linear. Pronto, a curva já é gerada automaticamente
- Para visualizar a expressão analítica da curva, vá em Window -> Console, veja um exemplo na Fig. 2
- A expressão para a reta aparece, no exemplo na Fig. 2, como $y = 1.2694 + 1.0135 * x$. O valor do coeficiente angular é então 1.01350 (2) ou 1.01350 ± 2, 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}.