

Projeto 3: Decaimento radioativo e números aleatórios

Pedro de Carvalho Braga Ilídio Silva - 9762595

Maio de 2017

1 Introdução

As aproximações para cálculo diferencial estão presentes em quase todo computador atualmente. Elas são indispensáveis para automatizar os processos de integração e derivação, pois oferecem, com a desvantagem da imprecisão, algoritmos simples para realizar tais operações. O vigente projeto busca explorar essas características, demonstrando como desenvolver métodos computacionais para a resolução de problemas no âmbito do cálculo numérico.

2 Derivada numérica

Neste programa, criou-se funções FORTRAN para calcular derivadas numéricas da função matemática $f(x) = e^{2x} \sin x$. Cada função FORTRAN levava dois argumentos: x e h ; e retornava o resultado de uma das fórmulas a seguir:

- Derivada frontal de 2 pontos: $f'_f(x) = \frac{f(x+h)-f(x)}{h}$
- Derivada traseira de 2 pontos: $f'_t(x) = \frac{f(x)-f(x-h)}{h}$
- Derivada simétrica de 3 pontos: $f'_{3s}(x) = \frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h}$
- Derivada simétrica de 5 pontos: $f'_{5s}(x) = \frac{-f(x+2h)+8f(x+h)-8f(x-h)+f(x-2h)}{12h}$
- Derivada segunda simétrica de 3 pontos: $f''_{3s}(x) = \frac{f(x+h)-2f(x)+f(x-h)}{h^2}$
- Derivada segunda simétrica de 5 pontos: $f''_{5s}(x) = \frac{-f(x+2h)+16f(x-h)-30f(x)+16f(x+h)-f(x+2h)}{12h^2}$

Todos as variáveis deste programa foram criadas com dupla precisão. Organizou-se os valores retornados pelas funções criadas, para $x = 1$ e diferentes valores de h , nas tabelas 1 e 2.

| h | $f'_f(1)$ | $f'_t(1)$ | $f'_{3s}(1)$ |
|-------------------------|--------------------|--------------------|--------------------|
| 0.5000000000000000 | 27.635092143524716 | 9.8289251653619445 | 18.732008654443330 |
| 0.10000000000000001 | 18.254821429815323 | 14.788246597336334 | 16.521534013575828 |
| 5.0000000000000003E-002 | 17.316982678805513 | 15.585322192658158 | 16.451152435731835 |
| 1.0000000000000000E-002 | 16.601729653493447 | 16.255502044667747 | 16.428615849080597 |
| 5.0000000000000001E-003 | 16.514467553466083 | 16.341355383107903 | 16.427911468286993 |
| 1.0000000000000000E-003 | 16.444997229738689 | 16.410374900250879 | 16.427686064994784 |
| 5.0000000000000001E-004 | 16.436334602687452 | 16.419023439574687 | 16.427679021131070 |
| 1.0000000000000000E-004 | 16.429407883356006 | 16.425945650837548 | 16.427676767096777 |
| 5.0000000000000002E-005 | 16.428542254836032 | 16.426811138519071 | 16.427676696677551 |
| 1.0000000000000001E-005 | 16.427849785838333 | 16.427503562344015 | 16.427676674091174 |
| 4.9999999999999996E-006 | 16.427763229387438 | 16.427590117729096 | 16.427676673558267 |
| 9.9999999999999995E-007 | 16.427693983800395 | 16.427659362605596 | 16.427676673202996 |
| 4.9999999999999998E-007 | 16.427685331166231 | 16.427668015239760 | 16.427676673202996 |
| 9.9999999999999995E-008 | 16.427678417585412 | 16.427674927044222 | 16.427676672314817 |
| 4.9999999999999998E-008 | 16.427677511643424 | 16.427675806340858 | 16.427676658992141 |
| 1.0000000000000000E-008 | 16.427676818864256 | 16.427676552410730 | 16.427676685637493 |

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

Em seguida, por meio de métodos não computacionais, chegou-se à real fórmula para a derivada de $f(x)$:

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

e para sua derivada segunda:

$$f''(x) = e^{2x}(3 \sin x + 4 \cos x)$$

Criou-se, a partir dessas últimas duas fórmulas, funções em FORTRAN para calcular o real valor das derivadas de $f(x)$, fazendo uso das funções nativas DEXP, DSIN e DCOS. Os valores reais das derivadas para $x = 1$ e diferentes valores de h

| h | $f'_{5s}(1)$ | $f''_{3s}(1)$ | $f'''_{5s}(1)$ |
|---------------------------|--------------------|--------------------|--------------------|
| 0.50000000000000000000 | 16.701685316827678 | 35.612333956325536 | 35.079577038485837 |
| 0.10000000000000000001 | 16.427925967929394 | 34.665748324789895 | 34.622942836424549 |
| 5.000000000000000003E-002 | 16.427691909783839 | 34.633209722947093 | 34.622363522332883 |
| 1.000000000000000000E-002 | 16.427676697379990 | 34.622760882569992 | 34.622325192201018 |
| 5.000000000000000001E-003 | 16.427676674689096 | 34.622434071636121 | 34.622325134658162 |
| 1.000000000000000000E-003 | 16.427676673177757 | 34.622329487810077 | 34.622325130924857 |
| 5.000000000000000001E-004 | 16.427676673176499 | 34.622326225530742 | 34.622325142249132 |
| 1.000000000000000000E-004 | 16.427676673177828 | 34.622325184585634 | 34.622325199388605 |
| 5.000000000000000002E-005 | 16.427676673208914 | 34.622326339217580 | 34.622326812912732 |
| 1.000000000000000001E-005 | 16.427676673151183 | 34.622349431856485 | 34.622367935573564 |
| 4.9999999999999996E-006 | 16.427676673439844 | 34.622331668288105 | 34.622355353045961 |
| 9.9999999999999995E-007 | 16.427676673128982 | 34.621194799910882 | 34.621120785042571 |
| 4.9999999999999998E-007 | 16.427676672758906 | 34.631852940947283 | 34.635701714099312 |
| 9.9999999999999995E-008 | 16.427676672314817 | 34.905411894214929 | 35.068244604493280 |
| 4.9999999999999998E-008 | 16.427676657511846 | 34.106051316484816 | 34.194869158454821 |
| 1.0000000000000000E-008 | 16.427676700440465 | 26.645352591003753 | 23.684757858670004 |

Table 2: Derivadas numéricas de $f(x)$ no ponto $x = 1$ por meio de diferentes aproximações em função do passo h .

| h | $f'_f(1)$ | $f'_t(1)$ | $f'_{3s}(1)$ |
|---------------------------|-------------------------|-------------------------|-------------------------|
| 0.50000000000000000000 | 11.207415470347506 | 6.5987515078152654 | 2.3043319812661203 |
| 0.10000000000000000001 | 1.8271447566381127 | 1.6394300758408757 | 9.3857340398617595E-002 |
| 5.000000000000000003E-002 | 0.88930600562830264 | 0.84235448051905237 | 2.3475762554625135E-002 |
| 1.000000000000000000E-002 | 0.17405298031623673 | 0.17217462850946319 | 9.3917590338676860E-004 |
| 5.000000000000000001E-003 | 8.6790880288873495E-002 | 8.6321290069307111E-002 | 2.3479510978319240E-004 |
| 1.000000000000000000E-003 | 1.7320556561479350E-002 | 1.7301772926330727E-002 | 9.3918175743112897E-006 |
| 5.000000000000000001E-004 | 8.6579295102424680E-003 | 8.6532336025229029E-003 | 2.3479538597825922E-006 |
| 1.000000000000000000E-004 | 1.7312101787965162E-003 | 1.7310223396620472E-003 | 9.3919567234479473E-008 |
| 5.000000000000000002E-005 | 8.6558165882166804E-004 | 8.6553465813921093E-004 | 2.3500341228555044E-008 |
| 1.000000000000000001E-005 | 1.7311266112329804E-004 | 1.7311083319526688E-004 | 9.1396401558085927E-010 |
| 4.9999999999999996E-006 | 8.6556210227684005E-005 | 8.6555448113756484E-005 | 3.8105696376078413E-010 |
| 9.9999999999999995E-007 | 1.7310623185551322E-005 | 1.7310571614359560E-005 | 2.5785595880734036E-011 |
| 4.9999999999999998E-007 | 8.6579890208327015E-006 | 8.6579374496409400E-006 | 2.5785595880734036E-011 |
| 9.9999999999999995E-008 | 1.7444082018869267E-006 | 1.7461329875345655E-006 | 8.6239282381939120E-010 |
| 4.9999999999999998E-008 | 8.3846621379279895E-007 | 8.6683635203144149E-007 | 1.4185069119321270E-008 |
| 1.0000000000000000E-008 | 1.4568704642670127E-007 | 1.2076647948333630E-007 | 1.2460283471682487E-008 |

Table 3: Valor absoluto dos desvios em relação aos resultados exatos das derivadas numéricas de $f(x)$ no ponto $x = 1$ obtidas por meio de diferentes aproximações em função do passo h .

foram comparados com os retornados pelas funções numéricas, sendo suas diferenças absolutas $|\epsilon|$ apresentadas pelas tabelas 3 e 4.

Observa-se inicialmente que, conforme se diminui h , a precisão da aproximação aumenta: os valores das duas primeiras tabelas tendem aos valores esperados para $f'(1)$, 16.427676673177210, e $f''(1)$, 34.622325130868994; ao passo que $|\epsilon|$ mostra-se cada vez menor nas tabelas 3 e 4.

Contudo, após atingir máxima precisão em algum valor de h diferente em cada caso, vê-se que acuidade dos valores começa a se perder, fato que se torna claro pelo posterior aumento de $|\epsilon|$ nas duas últimas tabelas apresentadas. Os valores ótimos de h , que geraram menor desvio das aproximações, obtidos pela análise das tabelas criadas então são:

- f'_f e f'_t : Como o posterior aumento de $|\epsilon|$ após queda inicial não foi observado nesses casos, não é possível saber ao certo se o valor de h que gerou o mínimo desvio é, de fato, o valor ótimo. Operações com h menores devem ser realizadas para se determinar isso.
- f'_{3s} : 9.9999999999999995E-007 e 4.9999999999999998E-007 geraram ambos o mesmo valor de $|\epsilon|$, o menor obtido.
- f'_{5s} : 1.0000000000000000E-003
- f''_{3s} : 1.0000000000000000E-004
- f''_{5s} : 1.0000000000000000E-003

O comportamento constatado de $|\epsilon|$ é facilmente observado ao plotar-se $\log 10|\epsilon|$ em função do $\log 10h$ (Gráfico 1). Percebe-se que quanto maior a ordem de aproximação, embora sejam atingidos valores mais baixos para o desvio, maior é o h ótimo (abscissa do ponto mínimo de cada série no gráfico 1). Isto se deve ao fato de que $|\epsilon|$ diminui com dependência maior de h

| h | $f'_{5s}(1)$ | $f''_{3s}(1)$ | $f'''_{5s}(1)$ |
|-------------------------|-------------------------|-------------------------|-------------------------|
| 0.5000000000000000 | 0.27400864365046829 | 0.99000882545654179 | 0.45725190761684331 |
| 0.10000000000000001 | 2.4929475218371522E-004 | 4.3423193920901326E-002 | 6.1770555555540341E-004 |
| 5.0000000000000003E-002 | 1.5236606628832305E-005 | 1.0884592078099331E-002 | 3.839146388842736E-005 |
| 1.0000000000000000E-002 | 2.4202780224413800E-008 | 4.3575170099785510E-004 | 6.1332023904014932E-008 |
| 5.0000000000000001E-003 | 1.5118857277229836E-009 | 1.0894076712730794E-004 | 3.7891680904067471E-009 |
| 1.0000000000000000E-003 | 5.4711790653527714E-013 | 4.3569410834720657E-006 | 5.5862869885459077E-011 |
| 5.0000000000000001E-004 | 7.1054273576010019E-013 | 1.0946617479135057E-006 | 1.1380137721062056E-008 |
| 1.0000000000000000E-004 | 6.1817218011128716E-013 | 5.3716640024958906E-008 | 6.8519611318151874E-008 |
| 5.0000000000000002E-005 | 3.1704416869615670E-011 | 1.2083485856351217E-006 | 1.6820437380715703E-006 |
| 1.0000000000000001E-005 | 2.6027180410892470E-011 | 2.4300987490732950E-005 | 4.2804704570187369E-005 |
| 4.9999999999999996E-006 | 2.6263435870532703E-010 | 6.5374191109413005E-006 | 3.0222176967242831E-005 |
| 9.9999999999999995E-007 | 4.8228088189716800E-011 | 1.1303309581123244E-003 | 1.2043458264230367E-003 |
| 4.9999999999999998E-007 | 4.1830361396932858E-010 | 9.5278100782891784E-003 | 1.3376583230318317E-002 |
| 9.9999999999999995E-008 | 8.6239282381939120E-010 | 0.28308676334593486 | 0.44591947362428641 |
| 4.9999999999999998E-008 | 1.5665364117012359E-008 | 0.51627381438417785 | 0.42745597241417244 |
| 1.0000000000000000E-008 | 2.7263254764875455E-008 | 7.9769725398652405 | 10.937567272198990 |

Table 4: Valor absoluto dos desvios em relação aos resultados exatos das derivadas numéricas de $f(x)$ no ponto $x = 1$ obtidas por meio de diferentes aproximações em função do passo h .

quanto maior for a ordem de aproximação. Desta forma, enquanto h diminui, as aproximações de ordem mais elevada mais rapidamente atingem um valor de $|\epsilon|$ não suportado pela precisão utilizada, divergindo.

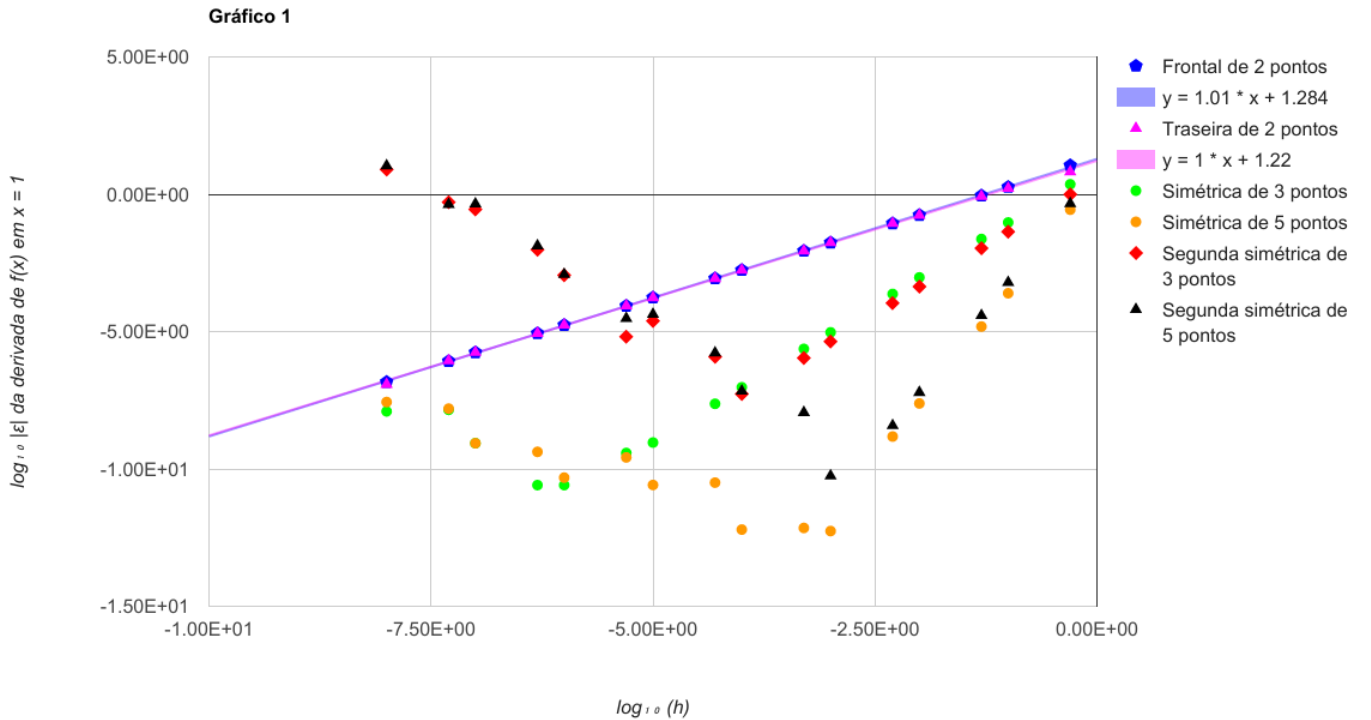


Figure 1: $\log_{10}|\epsilon|$ das derivadas numéricas de $f(x)$ no ponto $x = 1$, obtidas por meio de diferentes aproximações, em função de $\log_{10}h$.

Foram calculados somente os coeficientes de regressão linear do erro associado às derivadas de 2 pontos, pois no caso das demais, os problemas associados à precisão (aumento inesperado de $|\epsilon|$) impediram que se constatasse a real ordem das aproximações. Para ambos os casos em que isso foi possível, obteve-se valor próximo de 1 para os coeficientes, exatamente como esperado de uma aproximação de primeira ordem e como mostrado no gráfico.

3 Integração numérica

Foram elaboradas duas funções FORTRAN de precisão dupla, TRAP e SIMP, para aplicar, respectivamente os métodos do Trapézio

$$\int_a^b f(x)dx \approx h[0.5f(a) + f(a+h) + f(a+2h) + f(a+3h) + \dots + f(b-h) + 0.5f(b)]$$

e de Simpson

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{3}[f(a) + 4f(a+h) + 2f(a+2h) + 4f(a+3h) + 2f(a+4h)\dots + f(b)]$$

para cálculo de integrais numéricas no intervalo $[0, 1]$ à função $f(x) = e^{2x} \cos x/4$.

```

REAL*8  FUNCTION F(X)
  REAL*8  X
  F = DEXP(2*X)*DCOS(X/4.D0)
  RETURN
END FUNCTION F

REAL*8  FUNCTION TRAP(H)
  REAL*8  H

  TRAP=0.
  DO I=1, 1/H-1
    TRAP = TRAP + F(I*H)
  END DO

  TRAP = H * (TRAP + 0.5D0 * (F(0.0D0) + F(1.D0)))
  RETURN
END FUNCTION TRAP

REAL*8  FUNCTION SIMP(H)
  REAL*8  H

  SIMP=0.
  DO I=1, 1/H-1
    SIMP = SIMP + (3+(-1)**(I+1)) *F(I*H)
  END DO

  SIMP = H/3.D0 * (SIMP + (F(0.0D0) + F(1.D0)))
  RETURN
END FUNCTION SIMP

```

Retornos para diferentes valores de h das funções acima foram comparados ao valor real da integral (3.14479185512583..., com número de casas correspondente aos 8 bytes disponíveis). Os valores absolutos para o desvio ($|\epsilon|$) são compilados pela tabela 5.

| h | TRAP | SIMP |
|-----------|----------------------|----------------------|
| 2^{-1} | 2.43581649151307E-01 | 1.31481107485722E-02 |
| 2^{-2} | 6.15554143340575E-02 | 8.80002728306905E-04 |
| 2^{-3} | 1.54308320420377E-02 | 5.59712780314747E-05 |
| 2^{-4} | 3.86034323131934E-03 | 3.51362774608787E-06 |
| 2^{-5} | 9.65250690605046E-04 | 2.19843700133282E-07 |
| 2^{-6} | 2.41322980663039E-04 | 1.37440157033097E-08 |
| 2^{-7} | 6.03313894593782E-05 | 8.59058157942627E-10 |
| 2^{-8} | 1.50828876330777E-05 | 5.36890532032430E-11 |
| 2^{-9} | 3.77072442159231E-06 | 3.35509398041722E-12 |
| 2^{-10} | 9.42681266380418E-07 | 2.09610107049229E-13 |
| 2^{-11} | 2.35670328585513E-07 | 2.08721928629529E-14 |
| 2^{-12} | 5.89175819243337E-08 | 2.22044604925031E-15 |
| 2^{-13} | 1.47294012542431E-08 | 3.10862446895043E-15 |

Table 5: Integral numérica de $f(x)$ no intervalo $[0, 1]$ por meio de duas diferentes aproximações como função da partição do intervalo h .

E plotou-se $\log_{10}|\epsilon|$ versus $\log_{10}h$ para avaliar o comportamento do desvio (Gráfico 2).

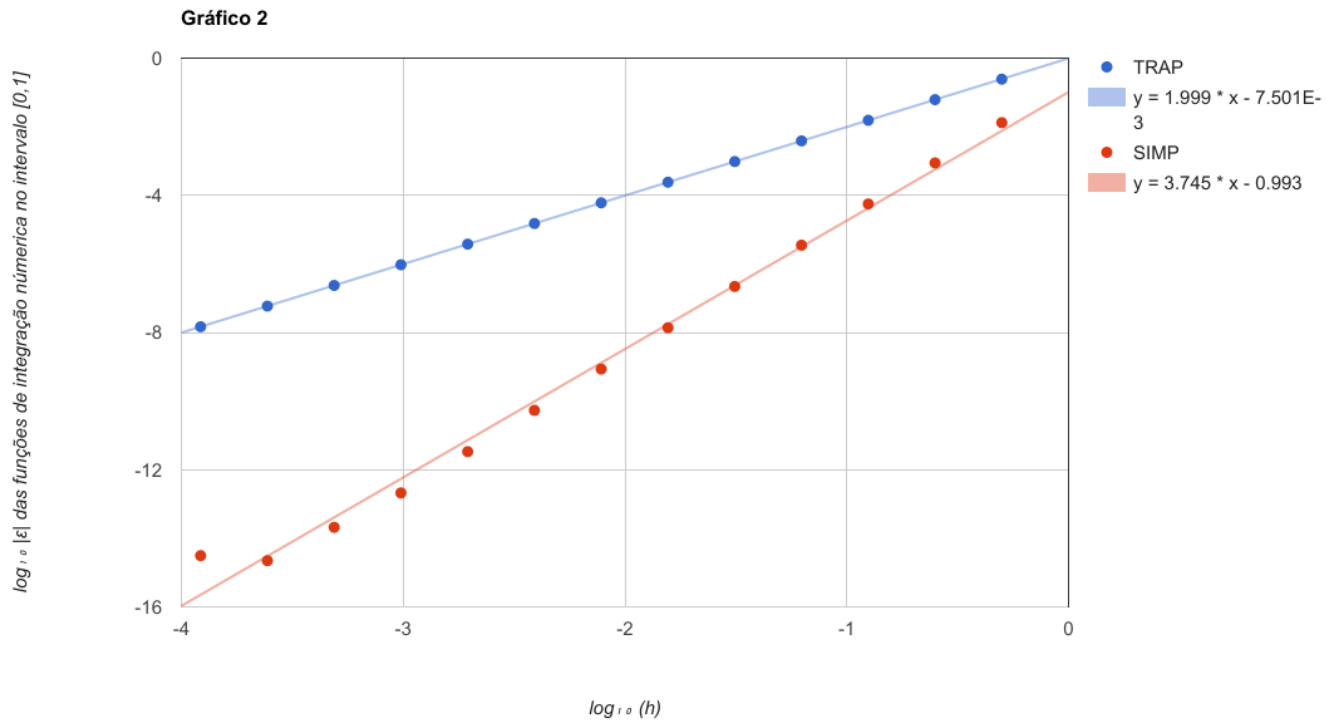


Figure 2: Integral numérica de $f(x)$ no intervalo $[0, 1]$ por meio das aproximações do Trapézio (TRAP) e de Simpson (SIMP) como função da partição do intervalo h .

Para os valores de h utilizados, não se observou perda de precisão da aproximação pelo método dos trapézios à medida que h diminuía, de forma que o valor mínimo de h (2^{-13}) gerou o valor mínimo de $|\epsilon|$. Disto decorre que não é possível afirmar que h será o valor ótimo da aproximação para todo h nas vigentes condições de precisão, já que valores menores de h não foram testados.

No que se refere ao segundo caso, a aproximação de Simpson, observa-se claramente pelo gráfico que o último valor contrapôs a tendência de descida dos demais pontos. A isto se atribui a causa da falta de precisão necessária, de forma que o valor ótimo de h para as condições de precisão utilizadas foi 2^{-12} .

A regressão linear revelou ordem de convergência muito próxima de 2 para a aproximação dos Trapézios, de fato como esperado, e aproximadamente 3.735 para o método de Simpson, para o qual esperava-se obter 4. O desvio, como claramente visto pelo Gráfico 2, se deve à não acuidade do valor da aproximação em $h = 2^{13}$, devido aos problemas de alocamento de memória insuficiente.

A correção das adversidades encontradas deve se basear na utilização de mais espaço de memória para as quantias com as quais se trabalhou (pelo menos 16 bytes em vez de 8) e a utilização de mais valores de h para determinar mais precisamente seu valor ótimo.