

# FÍSICA COMPUTACIONAL

## PRÁCTICO 1a - 2021

Entregar problemas 4 y 6, hasta el 29/03/21

1. Las siguientes expresiones son legales o ilegales en Fortran 90? Si son legales cuál es su resultado? Si son ilegales, qué hay de malo en ellas?

37 / 3	2. ** 2. ** 3.
37 + 17 / 3	2. ** (-2.)
28 / 3 / 4	(-2) ** 2
( 28 / 3 ) / 4	(-2.) ** (-2.2)
28 / (3 / 4)	(-2.) ** NINT (-2.2)
-3. ** 4. / 2.	1 + 1/4
3. ** (-4. / 2.)	1. + 1/4
4. ** -3	1 * 1./4

### 2. Diferenciación numérica

Sea  $F(x) = e^x$ . Evalúe  $f'(1)$  mediante la fórmula centrada de dos puntos

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} + \mathcal{O}(h^2)$$

para distintos valores de  $h$  y calcule el incremento óptimo  $h_o$  teniendo en cuenta los errores de truncamiento y redondeo. Grafique el error (usando el valor exacto de la derivada) versus  $h$  (elija  $h = 10^{-k}$ , con  $k$  entero, y grafique usando escala *log-log*).

### 3. Integración numérica. Puntos equiespaciados: Comparación Trapezoidal vs. Simpson

Considere la integral definida:

$$I = \int_0^1 e^x dx = e - 1 = 1,718282 \dots$$

- a) Escriba un código que calcule la aproximación  $F_n$  de  $I$  utilizando la regla del trapecio (1) y la regla de Simpson (2):

$$\begin{aligned} \int_{x_0}^{x_n} f(x) dx &= h \left[ \frac{1}{2} f_0 + f_1 + \dots + f_{n-1} + \frac{1}{2} f_n \right] + \mathcal{O}(h^2) \\ \int_{x_0}^{x_n} f(x) dx &= h \left[ \frac{1}{3} f_0 + \frac{4}{3} f_1 + \frac{2}{3} f_2 + \dots + \right. \\ &\quad \left. + \frac{2}{3} f_{n-2} + \frac{4}{3} f_{n-1} + \frac{1}{3} f_n \right] + \mathcal{O}(h^4) \end{aligned}$$

donde  $n$  (par) es el número de divisiones en el intervalo de integración, y  $h = \frac{x_n - x_0}{n}$  es el ancho de cada división. Elija  $n = 2^k$  con  $k = 2, \dots, 8$ . (Esta elección es útil para mostrar la dependencia del error asintótico con un gráfico *log-log*).

- b) ¿Cuál es la dependencia con  $n$  del error  $\Delta_n = |F_n - I|$  para ambas reglas de integración?

#### 4. Cuadratura de Gauss-Legendre. Comparación con otros métodos

- a) Utilizando el programa disponible en la página de la materia, calcular la integral

$$I = \int_0^1 e^{-t} dt = 1 - e^{-1}$$

utilizando la cuadratura de Gauss-Legendre, la regla de Simpson y del trapecio.

- b) Calcule el error relativo  $\epsilon = |(numérico - exacto)/exacto|$  en cada caso para distintos valores de número de puntos de integración ( $N$ ). Considere, **por ejemplo**,  $N = 2, 10, 20, 40, 80, 160, \dots$
- c) Haga un gráfico *log-log* del error relativo *versus*  $N$ . Observe que

$$\epsilon \approx CN^\alpha \Rightarrow \log \epsilon = \alpha \log N + \text{constante}.$$

Esto significa que una dependencia como ley de potencia aparece como una línea recta en un gráfico *log-log*.

- d) Use el gráfico para estimar la ley de potencia de la dependencia del error  $\epsilon$  con el número de puntos  $N$ . y para determinar el número cifras decimales de precisión en su cálculo. Haga esto para la regla del trapecio y para la regla de Simpson, tanto para el error del algoritmo como para el de redondeo.

#### 5. Resolver analíticamente

$$\frac{dy}{dx} = -xy$$

con la condición inicial:  $y(x = 0) = 1$ .

Integrar numéricamente hasta  $x = 1$ , usando los algoritmos:

- i) Euler
- ii) Runge-Kutta 2
- iii) Runge Kutta 4

- a) Comparar con el resultado exacto.

- b) Comparar el costo computacional de cada uno (estimarlos con el tiempo de ejecución que requiere un dado método para alcanzar un cierto nivel de error, use comando `time` en linux).

## 6. Oscilador armónico

Integrar la ecuación del oscilador armónico,

$$\ddot{x} = -kx$$

usando los siguientes algoritmos (para el caso  $k = 1$ , y  $t$  entre 0 y 10, usando  $x(0) = \dot{x}(0) = 1$ ):

- i) Euler
- iii) Runge-Kutta 2
- iv) Runge Kutta 4

Note que puede escribirse como un sistema de 2 ecuaciones diferenciales de primer orden.

- a) Comparar los resultados obtenidos con los distintos métodos (utilizando el valor de  $h$  óptimo respectivo) con el resultado exacto graficando  $x$  y  $\dot{x}$  *versus*  $t$ .
- b) Evaluar la energía del sistema como función del tiempo. Cúal método es más eficiente?.
- c) Definimos el error global en el intervalo  $[0,10]$ , como  $\epsilon_g = |x_{numérico}(10) - x_{exacto}(10)|/x_{exacto}(10)$ . Muestre en un gráfico *log-log* de  $\epsilon_g$  *versus*  $h^{-1}$  (proporcional al número de pasos), como *escalean* los errores de los distintos métodos con el tamaño del paso). Encuentre las respectivas leyes de potencia (tome valores de  $h$  entre 1 y  $10^{-6}$ ).