

7600017 – Introdução à Física Computacional

Terceiro Projeto (prazo até 30/04/17)

Instruções

- Crie um diretório “PROJ3_#usp” em /home/public/FISCOMP17/PROJ3
- Proteja seu diretório para não ser lido por “g” e “o”
- Deixe no diretório apenas 3 arquivos, de nomes “**exerA.f**”, “**exerB.f**” e “**exerC.f**”
- Os códigos devem seguir rigorosamente os padrões especificados abaixo para entrada/saída
- Note: se deixar de fazer algum exercício não inclua o arquivo correspondente

Exercícios

NOTE: Foi corrigido um erro no enunciado da derivada de 5 pontos (agradecimentos a P. Consoli!)

A) Considere o problema da **diferenciação numérica**. Dada uma função

$$f_n = f(x_n) = f(x_0 + nh) \text{ com } n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

pode-se usar a expansão de Taylor ao redor de x_0

$$f(x) = f_0 + (x - x_0)f' + \frac{(x - x_0)^2}{2!}f'' + \frac{(x - x_0)^3}{3!}f''' + \dots$$

onde

$$f' = \left. \frac{df}{dx} \right|_{x=x_0} \quad f'' = \left. \frac{d^2f}{dx^2} \right|_{x=x_0} \quad f''' = \left. \frac{d^3f}{dx^3} \right|_{x=x_0} \quad \dots$$

Usando a relação $x_n = x_0 + nh$ podemos também escrever

$$f_n = f_0 + nhf' + \frac{n^2h^2}{2!}f'' + \frac{n^3h^3}{3!}f''' + \dots$$

Isso nos permite obter as relações :

– derivada para frente de 2 pontos

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

– derivada para trás de 2 pontos

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

– derivada simétrica de 3 pontos

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

– derivada simétrica de 5 pontos

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

– derivada segunda simétrica de 3 pontos

$$f'' = \frac{f_1 - 2f_0 + f_{-1}}{h^2} + \mathcal{O}(h^2)$$

– derivada segunda simétrica de 5 pontos

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

– derivada terceira anti-simétrica de 5 pontos

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

Escreva um código que forneça os dados da tabela abaixo para as derivadas da função $f(x) = \exp(4x) \cos(x/2)$ para $x = 1/3$. Escreva na tabela apenas os desvios (não se preocupe com o sinal do desvio) em relação aos resultados exatos.

Leia a partir de um arquivo de entrada “tab1_in.dat”:

1. o número de valores de h (na primeira linha)
2. a sequência destes valores de h (na segunda linha) a serem testados.

O ponto de cálculo da função ($x = 1/3$) deverá ser fixo como parâmetro do programa. A saída deve ser uma tabela, no arquivo “tab1_out.dat”, contendo na primeira coluna o valor de h e nas colunas seguintes os resultados dos vários desvios, como descrito na tabela abaixo. **Obs:** a primeira linha do arquivo de saída pode ser reservada para descrição das colunas, desde que seja uma linha só. Deste modo, a tabela para 14 valores de h poderá ter 15 linhas. Enfim, no terminal, diga em cada caso qual o valor mais apropriado de h e justifique sua escolha (no formato que achar melhor).

| h | derivada simétrica 3 pontos | derivada p/frente 2 pontos | derivada p/tras 2 pontos | derivada simétrica 5 pontos | derivada segunda simétrica 5 pontos | derivada terceira anti-simétrica 5 pontos |
|------------|-----------------------------------|----------------------------------|--------------------------------|-----------------------------------|--|--|
| 0.5 | | | | | | |
| 0.2 | | | | | | |
| 0.1 | | | | | | |
| 0.05 | | | | | | |
| 0.01 | | | | | | |
| 0.005 | | | | | | |
| 0.001 | | | | | | |
| 0.0005 | | | | | | |
| 0.0001 | | | | | | |
| 0.00005 | | | | | | |
| 0.00001 | | | | | | |
| 0.000001 | | | | | | |
| 0.0000001 | | | | | | |
| 0.00000001 | | | | | | |

B) Considere o problema da **quadratura numérica**. Dada a integral

$$\int_a^b f(x)dx ,$$

seja $N = (b - a)/h$ um número inteiro par. Podemos então escrever

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x)dx &= \int_a^{a+2h} f(x)dx + \int_{a+2h}^{a+4h} f(x)dx \\ &+ \int_{a+4h}^{a+6h} f(x)dx + \dots + \int_{b-2h}^b f(x)dx . \end{aligned}$$

Para cada intervalo de extensão $2h$, i.e. para cada integral do tipo

$$\int_{-h}^h f(x)dx ,$$

podemos usar uma das seguintes regras:

– regra do trapézio

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

– regra de Simpson

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

onde $f_{\pm 1} = f(\pm h)$ e $f_0 = f(0)$.

No caso de um intervalo de extensão $4h$, i.e. para cada integral do tipo

$$\int_{x_0}^{x_4} f(x)dx ,$$

podemos usar a regra:

– regra de Bode

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

onde $f_i = f(x_i)$, $x_1 = x_0 + h$, $x_2 = x_0 + 2h$, $x_3 = x_0 + 3h$ e $x_4 = x_0 + 4h$. Claramente, neste caso N deve ser um múltiplo inteiro de 4.

Escreva um código que calcule a integral $\int_0^1 \exp(x/4) \sin(x)dx$ usando os diversos métodos acima e para diferentes números N de pontos. Estime apenas os desvios (não se preocupe com o sinal dos desvios) em relação ao valor exato.

Leia a partir de um arquivo de entrada “tab2.in.dat”:

| N | h | Regra do Trapézio | Regra de Simpson | Regra de Bode |
|------|------------|-------------------|------------------|---------------|
| 4 | 0.25000000 | | | |
| 8 | 0.12500000 | | | |
| 16 | 0.06250000 | | | |
| 32 | 0.03125000 | | | |
| 64 | 0.15625000 | | | |
| 128 | 0.00781250 | | | |
| 256 | 0.00399625 | | | |
| 512 | 0.00195312 | | | |
| 1024 | 0.00097656 | | | |
| 2048 | 0.00048828 | | | |
| 4096 | 0.00024414 | | | |

1. o número de valores de N (na primeira linha)
2. a sequência destes valores de N (na segunda linha) a serem testados.

Seu programa calculará os valores correspondentes de h . A saída deverá ser uma tabela, no arquivo “tab2.out.dat”, contendo na primeira coluna o valor de N , na segunda coluna o valor de h e nas colunas seguintes os resultados dos vários desvios, como descrito na tabela acima. **Obs:** a primeira linha do arquivo de saída pode ser reservada para descrição das colunas, desde que seja uma linha só. Enfim, no terminal, diga em cada caso qual o valor mais apropriado de N e justifique sua escolha (no formato que achar melhor).

C) Considere o problema de **encontrar raízes de uma função** $f(x)$. Como primeira tentativa, podem-se “chutar” iterativamente valores x_i ao redor da raiz e verificar quando o valor de $f(x)$ se aproxima de zero, por exemplo verificando as mudanças de sinal de $f(x_i)$. Este método de **busca direta** claramente não será o mais eficiente.

No método de **Newton-Raphson** as raízes de $f(x)$ são calculadas usando as seguintes iterações

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)} \quad \text{com } i = 0, 1, 2, \dots$$

Para entender essa relação observe que a equação da tangente à função no ponto x_i é dada por $f(x_i) + (x - x_i) f'(x_i)$. Assim x_{i+1} representa o intersecção da tangente com o eixo das abscissas. Note que a convergência (ou a não convergência) do método de Newton-Raphson depende da escolha do chute inicial x_0 .

No método da secante as iterações podem ser escritas como

$$x_{i+1} = x_i - f(x_i) \frac{x_i - x_{i-1}}{f(x_i) - f(x_{i-1})} \quad \text{com } i = 0, 1, 2, \dots .$$

Essa relação coincide com a relação do método de Newton-Raphson usando-se para a derivada no ponto x_i a aproximação

$$f'(x_i) = \frac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{x_i - x_{i-1}} .$$

Geometricamente, note que

$$f(x_i) + (x - x_i) \frac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{x_i - x_{i-1}}$$

é a equação da reta que passa nos pontos $(x_{i-1}, f(x_{i-1}))$ e $(x_i, f(x_i))$, i.e. da secante à função $f(x)$ nesses dois pontos. Assim, x_{i+1} é a intersecção da secante com o eixo das abscissas. Claramente, o método da secante requer dois valores iniciais, i.e. x_0 e x_1 , que devem ser preferencialmente escolhidos próximos da raiz.

Escreva um código que calcule as (três) raízes (positivas e/ou negativas) da função

$$f(x) = 18x^3 - 9x^2 - 5x + 2 ,$$

usando os diferentes métodos acima para cálculo de raízes.

Leia do terminal o número de iterações (e.g. 6) a serem realizadas. A escolha dos valores iniciais será feita dentro do próprio programa. Escreva a saída no arquivo “tab3_out.dat”, contendo 10 colunas, como na tabela abaixo. A primeira linha pode ser usada para descrição das colunas, por exemplo:

```
iter  dir1  dir2  dir3  NR1  NR2  NR3  sec1  sec2  sec3
```

Dica: para chutar os valores iniciais para busca oriente-se pelo gráfico de $f(x)$, obtido com o programa `gnuplot`.

| Iteração | Busca Direta | | | Newton-Raphson | | | Método da Secante | | |
|----------|--------------|-------|-------|----------------|-------|-------|-------------------|-------|-------|
| | 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 | | | | | | | | | |