

Introdução à Física Computacional - 7600017 - 1S/2019

Projeto 2 — Cálculo numérico

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 veremos a seguir, o ingrediente básico que permeia todos esses métodos (exceto por um) é a expansão em série de Taylor

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

1. Derivação numérica

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

$$f'(x) \equiv \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h}. \quad (2)$$

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

$$f'_f(x) \equiv \frac{f(x+h) - f(x)}{h}. \quad (3)$$

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 a seguir, há outras opções.

Comparando (2) com (3), nota-se que

$$f'_f(x) = f'(x) + \mathcal{O}(h), \quad (4)$$

onde 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

$$f'_t(x) = \frac{f(x) - f(x-h)}{h} + \mathcal{O}(h). \quad (5)$$

Se combinarmos as equações (3) e (5) podemos escrever a derivada simétrica de 3 pontos

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

Note que essa aproximação é melhor pois o erro é $\mathcal{O}(h^2)$. 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.

Podemos aplicar a mesma ideia para calcularmos numericamente a derivada segunda de uma função. Partindo da seguinte igualdade

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

chegamos à derivada segunda simétrica de três pontos

$$f''_{3s}(x) = \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2} + \mathcal{O}(h^2). \quad (7)$$

Baseado nessa discussão, considere agora a seguinte função

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

e responda:

h	$f'_f(1)$	$f'_t(1)$	$f'_{3s}(1)$	$f'_{5s}(1)$	$f''_{3s}(1)$
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 .

- (a) Calcule a ordem do erro cometido para a seguinte aproximação de primeira derivada

$$f'_{5s}(x) \equiv \frac{-f(x+2h) + 8f(x+h) - 8f(x-h) + f(x-2h)}{12h}.$$

- (b) Escreva um programa FORTRAN e 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 $f'_{5s}(1)$, variando h desde 10^{-15} até 10^0 . (Planeje muito bem os valores de h escolhidos para que eles apareçam igualmente espaçados no gráfico log-log.) Discuta detalhadamente o comportamento das curvas em seu gráfico. Verifique se a ordem da convergência das aproximações coincide com aquela esperada teoricamente.

2. Integração numérica

A integral

$$I = \int_a^b f(x) dx \equiv \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^N f(x_i) h, \quad (9)$$

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

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

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, $\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x) dx \approx f(x_i) h$ e a integral se torna

$$I_R \approx h (f(a) + f(a+h) + \dots + f(b-2h) + f(b-h)),$$

como ilustrado na Fig. 1. Nesta aproximação, comete-se um erro $\mathcal{O}(h^2)$ em cada integração. Logo, o erro total deve ser da ordem de Nh que é $\mathcal{O}(h)$.

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

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

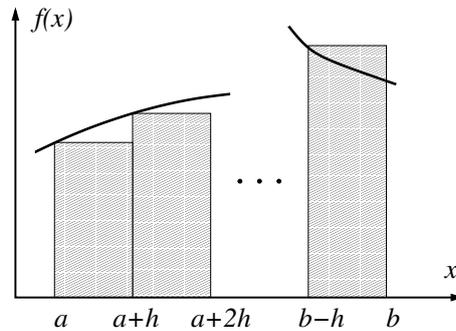


Figura 1: Representação geométrica do cálculo de uma integral.

onde utilizamos a Eq. (3) na última passagem. Logo,

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x) dx = \int_{x_i}^{x_{i+1}} \left(f(x_i) + \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h} (x - x_i) \right) dx = \frac{1}{2} h (f(x_{i+1}) + f(x_i)), \quad (11)$$

que é conhecida como regra do trapézio. Seu erro “local” é $\mathcal{O}(h^3)$ e o erro “global” é $\mathcal{O}(h^2)$. A integral no intervalo $[a, b]$ é então dada por

$$I_T \approx h [0.5f(a) + f(a+h) + f(a+2h) + f(a+3h) + \dots + f(b-h) + 0.5f(b)]. \quad (12)$$

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

$$\int_{x_{i-h}}^{x_{i+h}} f(x) dx = f(x_i) 2h + \frac{h}{3} (f(x_{i+1}) - 2f(x_i) + f(x_{i-1})) = \frac{h}{3} (f(x_{i+h}) + 4f(x_i) + f(x_{i-h})), \quad (13)$$

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

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

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.

Baseado nessa discussão, considere agora a seguinte função

$$f(x) = e^{2x} \text{sen} x, \quad (14)$$

e responda:

- (a) Considere a integral $I \equiv \int_{x_i-2h}^{x_i+2h} f(x) dx$. Calcule a ordem do erro para a aproximação de Boole para I ,

$$I_B = \frac{2h}{45} (7f(x_{i-2}) + 32f(x_{i-1}) + 12f(x_i) + 32f(x_{i+1}) + 7f(x_{i+2})).$$

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

h	Regra do trapézio	Regra de Simpson	Regra de Boole
2^{-1}			
2^{-2}			
2^{-3}			
2^{-4}			
2^{-5}			
2^{-6}			
2^{-7}			
2^{-8}			
2^{-9}			
2^{-10}			
2^{-11}			
2^{-12}			
2^{-13}			

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 .

- (c) Faça um gráfico de $\log_{10} |\varepsilon| \times \log_{10} h$ para ambos os métodos, variando h desde 10^{-15} até 10^0 . Verifique se a ordem da convergência das aproximações coincide com aquela esperada teoricamente e discuta seus resultados.

3. Equações algébricas não lineares

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

$$f(x) = 0. \quad (15)$$

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

$$f(x_{+,n}) \times f(x_{-,n}) < 0. \quad (16)$$

A desigualdade (16) 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

$$x_m = \frac{x_{+,n} + x_{-,n}}{2}. \quad (17)$$

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

$$|x_{+,n} - x_{-,n}| < \varepsilon = \text{tolerância}. \quad (18)$$

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. Nesse caso, a estimativa da raiz é iterada via

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}, \quad (19)$$

até um critério de convergência desejado como, por exemplo,

$$|x_{n+1} - x_n| < \varepsilon = \text{tolerância}. \quad (20)$$

n	$m_{-,n}$	$m_{+,n}$	$ m_{+,n} - m_{-,n} $	m_n	$ m_{n+1} - m_n $
0	0	1	1	1	
1					
\vdots					

Tabela III: Tabela da maior solução da equação (21), M , pelos métodos da bisseção e de Newton-Raphson para tolerância igual a $\varepsilon = 10^{-6}$ e temperatura $T = 0.5$.

Baseado nessa discussão, considere agora a seguinte equação transcendental

$$m = \tanh(m/T), \quad (21)$$

onde deseja-se resolvê-la para m , e T é apenas uma constante. Esta equação relaciona a magnetização e a temperatura (adimensionais) de um magneto de Ising na aproximação de campo médio.)

- 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 $m = \pm M \neq 0$. *Dica:* Faça o gráfico das funções $f_1(x) = x$ e $g_1(x) = \tanh(x/T)$ e veja onde as curvas se cruzam.
- (Opcional) Sabendo que as funções $f_{1,2}(x)$ são monotônicas, prove analiticamente que $T = T_c = 1$ é a temperatura acima da qual só existe a solução sem magnetização $m = 0$. (Essa é denominada de temperatura crítica T_c .)
- Escreva um programa FORTRAN que encontre a maior solução de (21), M , e complete a tabela III até a convergência estipulada.
- Faça um gráfico de $\log_{10} \varepsilon \times \log_{10} n_{\max}$ variando ε de 10^{-14} até 10^0 onde n_{\max} é o número de iterações necessárias para se alcançar a precisão desejada. Use que $T = 0.9$. (No mesmo gráfico, traga n_{\max} para ambos os métodos da bisseção e de Newton-Raphson.)
- Repita o item anterior para $T = 0.3$. Discuta as diferenças e semelhanças.
- Utilizando a tolerância de precisão de máquina (lembre-se de usar REAL*8) e o método de Newton-Raphson, faça um gráfico de $M \times T$ para $0 \leq T \leq 2$. (Para melhor performance, qual o valor inicial m_0 que você deve usar para cada nova temperatura?)

Breve discussão sobre a execução dos problemas

Nos problemas 1 e 2 (e analogamente para o problema 3), pede-se um gráfico $\log_{10} |\varepsilon| \times \log_{10} h$. A ideia é descobrir como o erro $|\varepsilon|$ depende de h . Em geral, para $h \ll 1$, tem-se uma lei de potência

$$|\varepsilon| = Ah^\alpha, \quad (22)$$

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

Em situações nas quais temos uma dependência do tipo lei de potência, é conveniente reescrever (23) como

$$\begin{aligned} \log_{10} |\varepsilon| &= \log_{10} Ah^\alpha, \\ &= \log_{10} A + \alpha \log_{10} h. \end{aligned} \quad (23)$$

Dessa maneira, uma simples regressão linear da curva $\log_{10} |\varepsilon| \times \log_{10} h$ nos fornece diretamente o expoente α .

Para calcular o log na base 10, basta utilizar 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 arquivo.dat e graficá-lo faça: Data -> Import -> ASCII e escolha arquivo.dat.
- Para realizar a regressão linear faça: Data -> Transformation -> Regression. Uma janela se abrirá. Basta clicar em Accept, pois a opção padrão é a regressão linear. Pronto, a curva já é gerada automaticamente. Pode-se, se assim desejar, selecionar um subconjunto dos dados a serem considerados para a regressão.

```

Number of observations          = 100001
Mean of independent variable   = -1.434316
Mean of dependent variable    = -0.184297
Standard dev. of ind. variable = 0.4344938
Standard dev. of dep. variable = 0.440337
Correlation coefficient        = 0.9999705
Regression coefficient (SLOPE) = 1.013498
Standard error of coefficient  = 2.461244e-05
t - value for coefficient      = 41178.7
Regression constant (INTERCEPT) = 1.269431
Standard error of constant    = 3.688803e-05
t - value for constant        = 34414.94

Analysis of variance
Source      d.f.      Sum of squares      Mean Square      F
Regression    1      19388.92      19388.92      1.699644e+03
Residual    99999      1.143419      1.143411e-05
Total      100000      19389.96

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.

- Para visualizar a expressão analítica da curva, vá em Window -> Console. No exemplo da Fig. 2, tem-se $y = 1.2694 + 1.0135 * x$. O valor do coeficiente angular é então 1.01350 (2) ou $1.01350 \pm 2 \cdot 10^{-5}$, 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} .