

Introdução à Física Computacional - 7600017 - 2S/2024
Projeto 3 — Métodos básicos integro-diferenciais
Prazo de entrega: 08/10

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 discutido no final deste projeto, o ingrediente básico que permeia todos esses métodos (exceto por um) é a expansão em série de Taylor

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

Para este projeto, todos os seus programas devem usar precisão real dupla (real*8).

- Derivação numérica:** Escreva um código FORTRAN que forneça os dados da tabela I para as derivadas da função

$$f(x) = e^{x^2} \cot(2x) \quad (2)$$

para $x = \frac{1}{2}$. Na última linha escreva os valores numéricos exatos com precisão 10^{-11} obtidos mediante a expressão analítica que você deve derivar. Diga em cada caso qual o valor de h mais apropriado para uso. Explique seus resultados.

| h | $f'_{2f}(x)$ | $f'_{2t}(x)$ | $f'_{3s}(x)$ | $f'_{5s}(x)$ | $f''_{3s}(x)$ | $f''_{5s}(x)$ |
|-----------|--------------|--------------|--------------|--------------|---------------|---------------|
| 5^{-1} | | | | | | |
| 5^{-2} | | | | | | |
| 5^{-3} | | | | | | |
| \vdots | \vdots | \vdots | \vdots | \vdots | \vdots | \vdots |
| 5^{-11} | | | | | | |
| 5^{-12} | | | | | | |
| Exato | | | | | | |

Tabela I. Derivadas numéricas de $f(x)$ em (2) no ponto $x = \frac{1}{2}$ por meio de diferentes aproximações em função do passo h .

- Quadratura numérica:** Escreva um código FORTRAN que calcule uma aproximação da integral

$$I = \int_0^{2\pi} e^{-x} \cos(x) dx \quad (3)$$

usando os métodos e intervalos para preencher a tabela II. Na última linha da tabela escreva o valor numérico exato com precisão 10^{-11} obtido pela expressão analítica que você deve calcular. Aponte o valor ótimo de h em cada um dos casos e discuta seus resultados.

- Raízes de funções:** Faça um programa que calcule as raízes reais de

$$f(x) = 27x^3 - 522x^2 + 3003x - 4508 \quad (4)$$

no intervalo $x \in [-10, 10]$, preenchendo a tabela III abaixo. Eleja uma tolerância de 10^{-6} . Inicie fazendo uma **busca direta** usando como ponto inicial $x = -10$ e um espaçamento inicial de 0,1. Quando verificar a mudança de sinal em $f(x)$, use o intervalo correspondente $]x_-, x_+[$ para iniciar o método da bisseção e conte as iterações a partir daí. Para o método da secante, use os extremos desse intervalo como pontos iniciais x_{-1} e x_0 . Para o método de Newton-Raphson, use um dos extremos como ponto inicial x_0 . Finalmente, na última linha da tabela coloque os valores exatos. (Note que o número total de tabelas é igual ao número de raízes dentro do intervalo $x \in [-10, 10]$.)

| $2\pi \times h^{-1}$ | Regra do trapézio | Regra de Simpson | Regra de Boole |
|----------------------|-------------------|------------------|----------------|
| 2^2 | | | |
| 2^3 | | | |
| 2^4 | | | |
| \vdots | \vdots | \vdots | \vdots |
| 2^{12} | | | |
| 2^{13} | | | |
| Exato | | | |

Tabela II. Integral numérica de $f(x)$ em (3) no intervalo $[0, 1]$ por meio de diferentes métodos e partições do intervalo h .

| Iteração | Bisseção | | Newton-Raphson | Método da Secante | |
|----------|-----------|-----------|----------------|-------------------|-------|
| | $x_{i,-}$ | $x_{i,+}$ | x_i | x_{i-1} | x_i |
| $i = 0$ | | | | | |
| 1 | | | | | |
| 2 | | | | | |
| 3 | | | | | |
| 4 | | | | | |
| 5 | | | | | |
| \vdots | | | | | |
| Exato | | | | | |

Tabela III. Raízes de $f(x)$ em (4) por meio de diferentes métodos e números de iterações.

BREVE DISCUSSÃO SOBRE A EXECUÇÃO DOS PROBLEMAS

Derivação numérica

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

$$f'(x) \equiv \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h}. \quad (5)$$

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

$$f'_{2f}(x) \equiv \frac{f(x+h) - f(x)}{h}. \quad (6)$$

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 mais tarde, há outras opções.

Nota-se que

$$f'_{2f}(x) = f'(x) + \mathcal{O}(h), \quad (7)$$

onde o símbolo $\mathcal{O}(h)$ quer dizer que o erro que cometemos ao truncar a expansão em série de Taylor (1) para o cálculo de $f'(x)$ é da ordem de h . Analogamente, podemos calcular a **derivada para trás de 2 pontos**

$$f'_{2t}(x) = \frac{f(x) - f(x-h)}{h} + \mathcal{O}(h). \quad (8)$$

Se combinarmos as equações (6) e (8) podemos escrever a **derivada simétrica de 3 pontos**

$$\begin{aligned} f'_{3s}(x) &\equiv \frac{1}{2} (f'_{2f}(x) + f'_{2t}(x)) \\ &= \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} + \mathcal{O}(h^2). \end{aligned} \quad (9)$$

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. Por exemplo, a **derivada simétrica de 5 pontos** é

$$f'_{5s}(x) = \frac{f(x-2h) - 8f(x-h) + 8f(x+h) - f(x+2h)}{12h} + \mathcal{O}(h^4). \quad (10)$$

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**

$$f''_{3s}(x) = \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2} + \mathcal{O}(h^2). \quad (11)$$

Podemos continuar a manipulação algébrica de série de Taylor e obter a **derivada segunda simétrica de 5 pontos**

$$f''_{5s} = \frac{-f(x-2h) + 16f(x-h) - 30f(x) + 16f(x+h) - f(x+2h)}{12h^2} + \mathcal{O}(h^4), \quad (12)$$

a **derivada terceira assimétrica de 4 pontos**

$$f'''_{4a} = \pm \frac{-f(x \mp h) + 3f(x) - 3f(x \pm h) + f(x \pm 2h)}{h^3} + \mathcal{O}(h), \quad (13)$$

e a **derivada terceira anti-simétrica de 5 pontos**

$$f'''_{5a} = \frac{-f(x-2h) + 2f(x-h) - 2f(x+h) + f(x+2h)}{2h^3} + \mathcal{O}(h^2). \quad (14)$$

Integração (ou quadratura) numérica

A integral

$$I = \int_a^b f(x) dx \equiv \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^{N-1} f(x_i) h, \quad (15)$$

onde $x_i = a + (i-1)h$ e $h = \frac{b-a}{N-1}$, 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

$$I = \int_a^{a+h} f(x) dx + \int_{a+h}^{a+2h} f(x) dx + \dots + \int_{b-h}^b f(x) dx. \quad (16)$$

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(a). Nesta aproximação, chamada de **regra do retângulo** (para frente), 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,

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

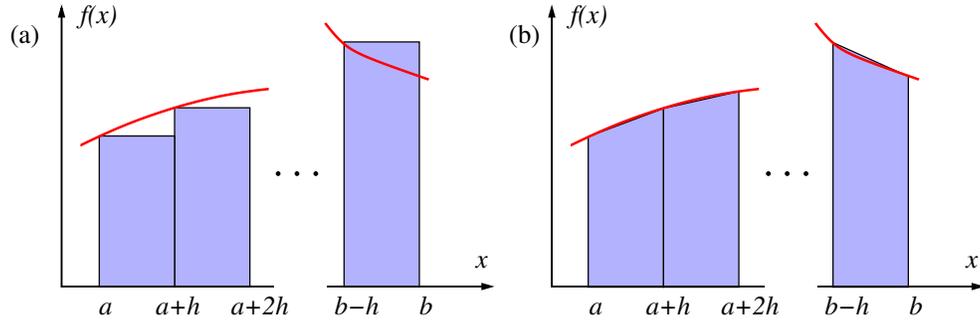


Figura 1. Representação geométrica do cálculo de uma integral pelos métodos da (a) regra do retângulo e da (b) regra do trapézio.

onde utilizamos a Eq. (6) na última passagem. Logo,

$$\int_{x_i}^{x_i+h} f(x) dx = \int_{x_i}^{x_{i+1}} \left(f(x_i) + \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h} (x - x_i) \right) dx = \frac{1}{2}h (f(x_{i+1}) + f(x_i)), \quad (17)$$

que é conhecida como **regra do trapézio** [vide Fig. 1(b)]. 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

$$I_T \approx h \left(\frac{1}{2}f(a) + f(a+h) + f(a+2h) + f(a+3h) + \dots + f(b-h) + \frac{1}{2}f(b) \right). \quad (18)$$

Podemos continuar este raciocínio expandindo até ordem quadrática para $f(x)$, ou seja,

$$f(x) \approx f(x_i) + \left(\frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h} \right) (x - x_i) + \frac{1}{2} \left(\frac{f(x_{i+1}) - 2f(x_i) + f(x_{i-1}))}{h^2} \right) (x - x_i)^2,$$

ou seja, precisa-se de três pontos no intervalo de integração. Logo, a integral a ser avaliada é

$$\begin{aligned} \int_{x_{i-h}}^{x_i+h} f(x) dx &= f(x_i) 2h + \frac{h}{3} (f(x_{i+1}) - 2f(x_i) + f(x_{i-1})) + \mathcal{O}(h^5) \\ &= \frac{h}{3} (f(x_i+h) + 4f(x_i) + f(x_i-h)) + \mathcal{O}(h^5), \end{aligned} \quad (19)$$

que é conhecida como a **regra de Simpson** (ou regra de Simpson 1/3). Seu erro global é $\mathcal{O}(h^4)$. A integral no intervalo $[a, b]$ é então dada por

$$I_S \approx \frac{h}{3} (f(a) + 4f(a+h) + 2f(a+2h) + 4f(a+3h) + 2f(a+4h) \dots + f(b)). \quad (20)$$

Usando-se outras formas discretizadas para as derivadas obtém-se a **regra de Simpson 3/8**

$$\int_{x_0}^{x_3} f(x) dx = \frac{3h}{8} (f(x_0) + 3f(x_1) + 3f(x_2) + f(x_3)) + \mathcal{O}(h^5) \quad (21)$$

e a **regra de Boole** (impropriamente chamada de regra de Bode)

$$I_B \equiv \int_{x_{i-2h}}^{x_{i+2h}} f(x) dx = \frac{2h}{45} (7f(x_{i-2}) + 32f(x_{i-1}) + 12f(x_i) + 32f(x_{i+1}) + 7f(x_{i+2})) + \mathcal{O}(h^7).$$

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 (ou o tamanho do intervalo $h = x_{i+1} - x_i$) até obter-se a precisão desejada.

Equações algébricas não lineares

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

$$f(x) = 0. \quad (22)$$

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

$$f(x_{+,n}) f(x_{-,n}) < 0. \quad (23)$$

A desigualdade (23) 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

$$x_m = \frac{x_{+,n} + x_{-,n}}{2}. \quad (24)$$

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

$$|x_{+,n} - x_{-,n}| < \varepsilon = \text{tolerância}. \quad (25)$$

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.

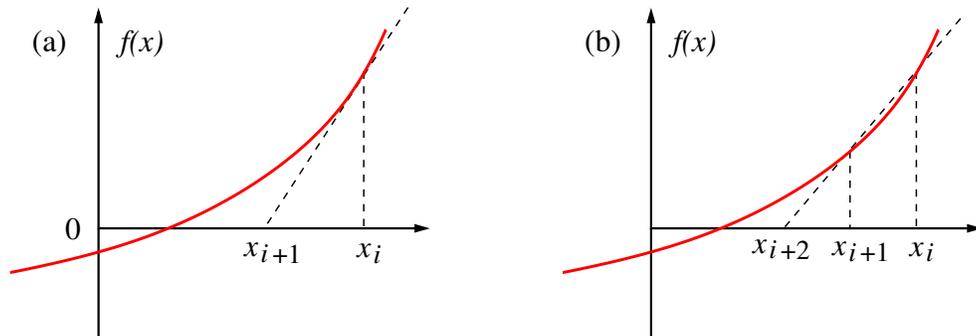


Figura 2. Representação geométrica dos métodos de (a) Newton-Raphson e (b) da secante.

Um outro método bastante popular (e de convergência mais rápida caso seja possível calcular a derivada analiticamente) é o **método de Newton-Raphson** [vide Fig. 2(a)]. Nesse caso, a estimativa da raiz é iterada via

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}, \quad (26)$$

até um critério de convergência desejado como, por exemplo,

$$|x_{n+1} - x_n| < \varepsilon = \text{tolerância}. \quad (27)$$

Quando a derivada não é disponível, pode-se substituí-la pela sua derivada para trás de dois pontos. Este é o **método da secante** [vide Fig. 2(b)] que resulta em

$$x_{n+1} = x_n - f(x_n) \frac{x_n - x_{n-1}}{f(x_n) - f(x_{n-1})}. \quad (28)$$