PROJETO 3 - Introdução à Física Computacional - 2023-2
MÉTODOS BÁSICOS INTEGRO-DIFERENCIAIS
Prof. F. C. Alcaraz
Data de entrega 26/10/2023 (quinta)

A) Escreva um código FORTRAN que operando em precisão dupla (real*8) forneça os dados da tabela abaixo para as derivadas da função $f(x) = e^{x/2}\tan(2x)$ para $x = 1/2$. Escreva apenas os desvios em relação aos resultados exatos. Na última linha escreva os valores numéricos com precisão 10^{-11} obtidos mediante a expressão analítica que você deve derivar.

h	derivada simétrica 3 pontos	derivada p/frente 2 pontos	derivada p/traz 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						
EXATOS						

Diga em cada caso qual o valor de h mais apropriado para uso. Justifique seus resultados.

B) Escreva um código FORTRAN que calcule a integral $\int_0^1 \exp(-x)\cos(2\pi x)dx$ usando diversos métodos e para diferentes números de pontos. Estime apenas os desvios em relação ao valor exato. Na última linha da tabela escreva o valor numérico exato com precisão 10^{-11} obtido pela expressão analítica que você deve calcular.

Diga em cada caso qual o valor apropriado para N. Justifique seus resultados.

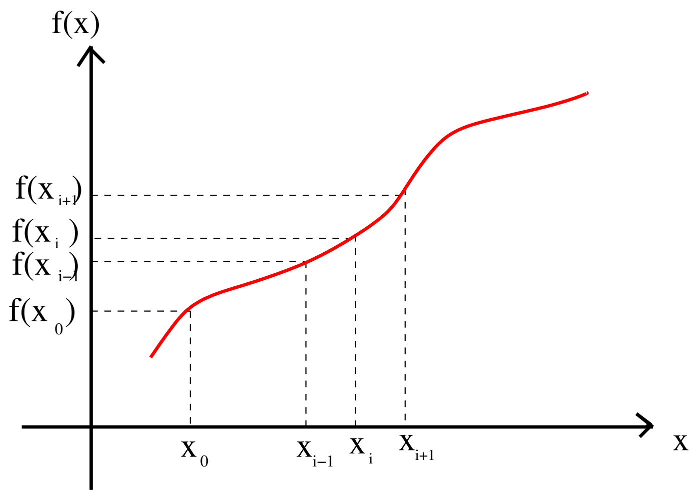
C) Faça um programa que calcule as raízes positivas e negativas de $f(x) = x^3 - 4x^2 - 59x + 126$, preenchendo a tabela a seguir. Eleja uma tolerância de 10^{-6}. Inicie a sua procura em $x = -10$ na busca direta ou como ponto inicial nos outros métodos. Eleja na busca direta um espaçamento inicial de 0.1. No caso da busca direta r_1, r_2 e r_3 são os valores quando existe mudança de sinal em $f(x)$. Na última linha da tabela coloque os valores exatos.

N	$h=(b-a)/N$	Regra do Trapézio	Regra de Simpson	Regra de Boole
12	1/12			
24	1/24			
48	1/48			
96	1/96			
192	1/192			
384	1/384			
768	1/768			
1536	1/1536			
3072	1/3072			
6144	1/6144			
EXATOS	-			

	Procura Direta			Newton-Raphson			Método da Secante		
Iteração	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									
EXATOS									

RELAÇÕES AUXILIARES

A) Diferenciação numérica



$$x_n \equiv x_0 + nh, \quad (n = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots) \tag{0.1}$$

$$f_n \equiv f(x_n) = f(x_0 + nh), \quad (n = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots) \tag{0.2}$$

Expansão em Taylor ao redor de x_0

$$f(x) = f_0 + (x - x_0)f' + \frac{(x-x_0)^2}{2!}f'' + \frac{(x-x_0)^3}{3!}f''' + \cdots \tag{0.3}$$

onde

$$f' = \frac{df}{dx}|_{x=x_0}, \quad f'' = \frac{d^2x}{dx^2}|_{x=x_0}. \tag{0.4}$$

De (3) tem-se que

$$f_n = f_0 + nhf' + \frac{n^2h^2}{2!}f'' + \frac{n^3h^3}{3!}f''' + \cdots, \tag{0.5}$$

De onde tiramos as relações:

derivada para frente de dois pontos

$$f' = \frac{f_1 - f_0}{h} + O(h) \tag{0.6}$$

derivada para traz de dois pontos

$$f' = \frac{f_0 - f_{-1}}{h} + O(h) \tag{0.7}$$

derivada simétrica de 3 pontos

$$f' = \frac{f_1 - f_{-1}}{2h} + O(h^2) \tag{0.8}$$

derivada simétrica de 5 pontos

$$f' = \frac{f_{-2} - 8f_{-1} + 8f_1 - f_2}{12h} + O(h^4) \tag{0.9}$$

derivada segunda simétrica de 3 pontos

$$f'' = \frac{f_{-1} - 2f_0 + f_1}{h^2} + O(h^2) \tag{0.10}$$

derivada terceira assimétrica de 4 pontos

$$f''' = \pm\frac{-f_{\mp 1} + 3f_0 - 3f_{\pm 1} + f_{\pm 2}}{h^3} + O(h) \tag{0.11}$$

derivada segunda simétrica de 5 pontos

$$f'' = \frac{-f_{-2} + 16f_{-1} - 30f_0 + 16f_1 - f_2}{12h^2} + O(h^4) \tag{0.12}$$

derivada terceira anti-simétrica de 5 pontos

$$f''' = \frac{-f_{-2} + 2f_{-1} - 2f_1 + f_2}{2h^3} + O(h^2) \tag{0.13}$$

B) QUADRATURA NUMÉRICA

Seja $N = \frac{b-a}{h}$ um número inteiro par e

$$\int_a^b f(x)dx = \int_a^{a+2h} f(x)dx + \int_{a+2h}^{a+4h} f(x)dx + \cdots + \int_{b-2h}^b f(x)dx. \tag{0.14}$$

regra do trapézio

$$\int_{-h}^h f(x)dx = \frac{h}{2}(f_{-1} + 2f_0 + f_1) + O(h^3). \tag{0.15}$$

Integrando-se $f(x) = f_0 + \frac{f_1 - f_{-1}}{2h}x + \frac{f_1 - 2f_0 + f_{-1}}{2h^2}x^2 + O(x^3)$ tem-se
regra de Simpson

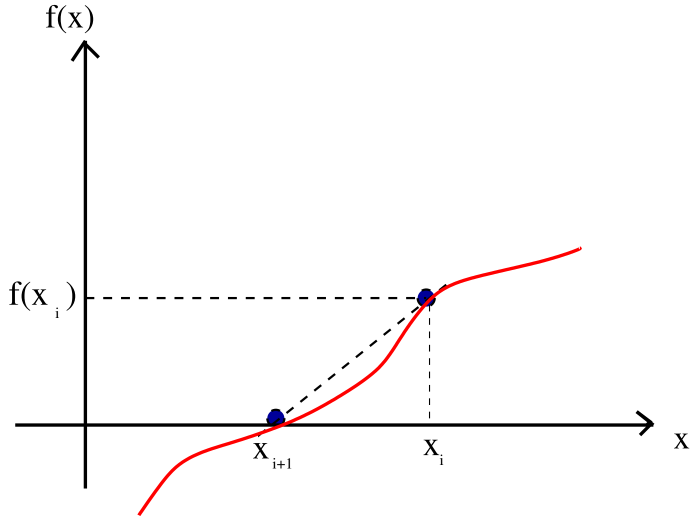
$$\int_{-h}^h f(x)dx = \frac{h}{3}(f_1 + 4f_0 + f_{-1}) + O(h^5). \tag{0.16}$$

Usando-se outras formas discretizadas para as derivadas obtem-se:
regra de Simpson 3/8

$$\int_{x_0}^{x_3} f(x)dx = \frac{3h}{8}(f_0 + 3f_1 + 3f_2 + f_3) + O(h^5). \tag{0.17}$$

regra de Boole (impropriamente chamada de regra de Bode)

$$\int_{x_0}^{x_4} f(x)dx = \frac{2h}{45}(7f_0 + 32f_1 + 12f_2 + 32f_3 + 7f_4) + O(h^7). \tag{0.18}$$



C) Cálculo de raízes de equações

Método de busca direta
Método de Newton-Raphson

$$x^{i+1} = x^i - \frac{f(x^i)}{f'(x^i)} \tag{0.19}$$

explorando-se que $f'(x^i) = \frac{f(x^i)-f(x^{i-1})}{x^i - x^{i-1}}$ temos
Método da secante

$$x^{i+1} = x^i - f(x^i)\frac{x^i - x^{i-1}}{f(x^i) - f(x^{i-1})}. \tag{0.20}$$