Introdução à Física Computacional (4300218)

Profa. Kaline Coutinho
kaline@if.usp.br
Sala 2056 – Edifício Principal

Aula 7

Programação em Pythom para físicos:
Precisão numérica com python

Precisão numérica

- Computadores não podem guardar números reais com quatidade infinita de casas decimais.
- O maior número real que pode ser armazenado é $1.7979 \times 10^{308} = 2^{1024}$. Quando o número excede este máximo (*overflow*) recebe o valor "inf" no python não gerando mensagem de erro.
- O menor número real que pode ser armazenado é $2.22507 \times 10^{-308} = 2^{-1022}$. Quando o número excede este mínimo (*underflow*) recebe o valor "0.0" no python não gerando mensagem de erro.

Precisão no python

- Os números reais no python apresentam restrição de 16 algarismos significativos.
- Já os números inteiros no python não apresentam restrição de algarismos significativos. Porém operações com muitos dígitos podem levar muito tempo.
- Sugestão: teste o tempo de execução para realizar o cálculo de fatorial de 200 com variável real e inteira.

16 algarismos significativos

- Os valores de π ou √2 serão truncados após 16 algarismos, mas somando 1.1 a 2.2 é possível obter 3.2999999999999999. Por isto nunca se `if` para comparar números reais.

ERRADO

```
if x == 3.3:
print(x)
```

CORRETO

```
epsilon = 1e-12
if abs(x-3.3) < epsilon:
   print(x)
```

Cuidado com as operações, principalmente subtração

- Exemplo 1:

Subtrair: `x= 100 000 000 000 000` com

`y= 100 000 000 000 001.23456789`

`y - x = 1.2`

- Exemplo 2: $x=1$ e $y=1+10^{-14}\sqrt{2} \Rightarrow 10^{14}(y-x)=\sqrt{2}$

```
from math import *
x=1.0
y=1.0+(1e-14)*sqrt(2)
print(1e14*(y-x))          ➔ 1.42108547152
print(sqrt(2))             ➔ 1.41421356237
```

Exemplo 3:

- Achar as raizes da equação de 2º grau $ax^2 + bx + c = 0$ onde $a = c = 0.001$ e $b = 1000$

usando a solução 1: $$x = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}$$

e a solução 2: $$x = \frac{2c}{-b \mp \sqrt{b^2 - 4ac}}$$

(a) Comparar as duas raizes das duas soluções;

(b) Qual destas soluções é a mais precisa e por que?

Programa

```
from math import *

print("Dada a equação do 2o grau: ax**2 + bx + c = 0 ")
a = float(input("Entre com o valor de a: "))
print("O valor de a é",a)
b = float(input("Entre com o valor de b: "))
print("O valor de a é",b)
c = float(input("Entre com o valor de c: "))
print("O valor de a é",c)

delta = sqrt(b**2 - 4.0*a*c)
print("delta=", delta)
print("-b - delta", -b - delta)
print("-b + delta", -b + delta)
print(" ")
a2 = 2.0*a
x11 = (-b - delta)/a2
x12 = (-b + delta)/a2
print("Solução 1: (-b +/- delta)/2a")
print("As duas raizes são: ", x11, " e ", x12)
print("Raiz 1: ",a,"x**2 + ",b,"x + ",c,"= ", a*x11**2 + b*x11 + c)
print("Raiz 2: ",a,"x**2 + ",b,"x + ",c,"= ", a*x12**2 + b*x12 + c)

c2 = 2.0*c
x21 = c2/(-b + delta)
x22 = c2/(-b - delta)
print("Solução 2: 2c/(-b +/- delta)")
print("As duas raizes são: ", x21, " e ", x22)
print("Raiz 1: ",a,"x**2 + ",b,"x + ",c,"= ", a*x21**2 + b*x21 + c)
print("Raiz 2: ",a,"x**2 + ",b,"x + ",c,"= ", a*x22**2 + b*x22 + c)


print("Diferenças das soluções: ", x11-x21, " e ", x12-x22)
```

Execução

```
Dada a equação do 2o grau: ax**2 + bx + c = 0
Entre com o valor de a: 0.001
O valor de a é 0.001
Entre com o valor de b: 1000
O valor de a é 1000.0
Entre com o valor de c: 0.001
O valor de a é 0.001
delta= 999.999999998
-b - delta -1999.999999998
-b + delta -1.999978849198669e-09

Solução 1: (-b +/- delta)/2a
As duas raizes são:  -999999.999999  e  -9.999894245993346e-07
Raiz 1:  0.001 x**2 +  1000.0 x +  0.001 =  7.247924804689582e-08
Raiz 2:  0.001 x**2 +  1000.0 x +  0.001 =  1.0575401665491313e-08
Solução 2: 2c/(-b +/- delta)
As duas raizes são:  -1000010.5755125057  e  -1.000000000001e-06
Raiz 1:  0.001 x**2 +  1000.0 x +  0.001 =  10575.62534720993
Raiz 2:  0.001 x**2 +  1000.0 x +  0.001 =  0.0
Diferenças das soluções:  10.575513505726121  e  1.0575401665491313e-11
```

Mais preciso

Exercício 1:

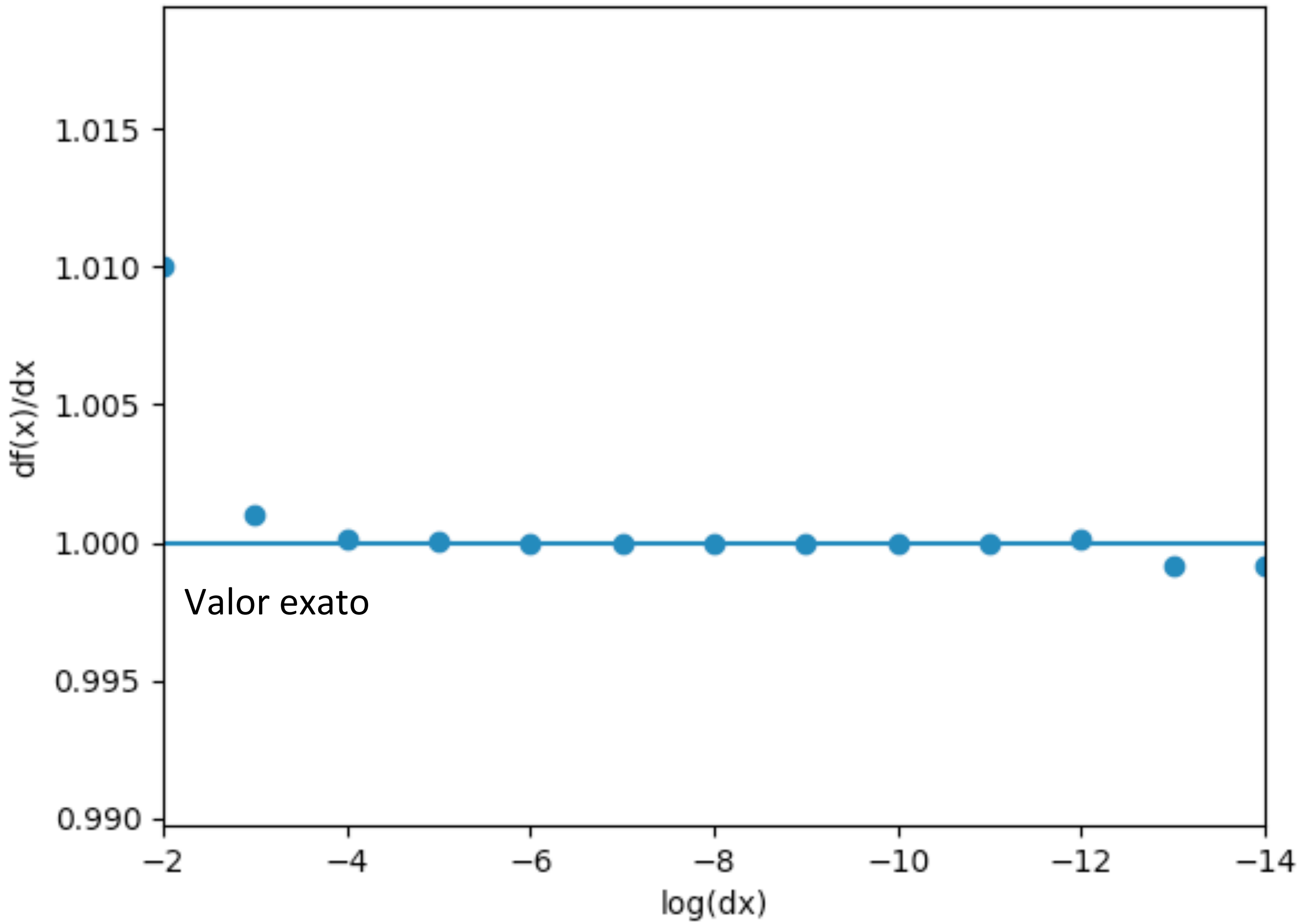
- Usar a definição de derivada por diferenças finitas

$$\frac{df}{dx} = \lim_{\delta \to 0} \frac{f(x+\delta/2) - f(x-\delta/2)}{\delta}$$

e efetuar a derivada numérica num valor x_0 a ser lido pelo programa para os valores de $\delta = 10^{-2}$, 10^{-4}, 10^{-6}, 10^{-8}, 10^{-10}, 10^{-12} e 10^{-14}, considerando $f(x) = x(x-1)$

Analisar os resultados comparativamente a derivada analítica e graficar os resultados.

Derivada de f(x)=x(x-1) em $x_0 = 1$ variando com δ



Exercício 2:

- Efetuar a integração por retângulo

$$I = \int_{-1}^{1} \sqrt{1 - x^2} dx = \sum_{i=1}^{N} \sqrt{1 - x_i^2} \Delta x$$

para os valores de N = 50, 100, 150, 200, ..., 1500. (Sugestão: ler o valor máximo de N e o intervalo)

Analisar os resultados comparativamente a integração analítica e graficar os resultados.

Integração com o método do trapézio variando a quantidade de trazézios