

Física Computacional I

Aula de Revisão 1

Josiel Mendonça Soares de Souza

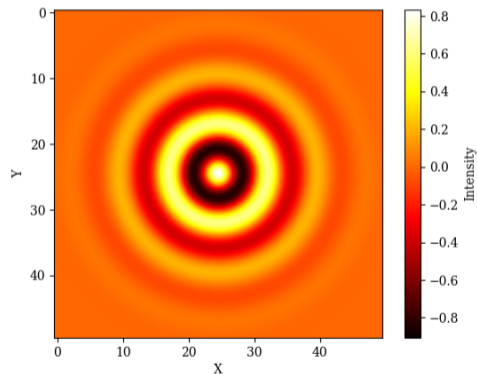
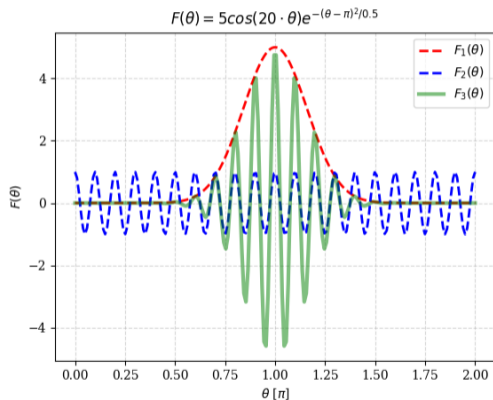
Universidade Federal do Rio Grande do Norte
Departamento de Física Teórica e Experimental

15 de Julho de 2021

Tópicos da Aula de Hoje

- 1 Gráficos e Visualização
- 2 Precisão e Velocidade
 - Valores Máximos e Mínimos para *floats*
 - Erros de Arredondamento
- 3 Integração Numérica
 - Método do Trapezóide
 - Regra do Trapézio Adaptativa
 - Método de Simpson

Gráficos e Visualização



Dúvidas sobre como gerar gráficos como estes acima?

Precisão e Velocidade: Valores Máximos e Mínimos

Quando tratamos como variáveis de ponto flutuante, os *floats*, devemos considerar a precisão no resultado de operações usando esses tipos de variáveis.

Primeiramente devemos considerar os valores máximos e mínimos que o Python pode armazenar em variáveis do tipo *float*.

Valores Máximos e Mínimos

$$\left\{ \begin{array}{l} V_{max}^{(+)} = 10^{308} \Rightarrow \text{if}(x > V_{max}^{(+)}) : \\ \qquad \qquad \qquad x = inf \\ V_{max}^{(-)} = -10^{308} \Rightarrow \text{if}(x < V_{max}^{(-)}) : \\ \qquad \qquad \qquad x = -inf \\ V_{min} = 10^{-308} \Rightarrow \text{if}(-V_{min} < x < V_{min}) : \\ \qquad \qquad \qquad x = 0 \end{array} \right.$$

Precisão e Velocidade: Erros de Arredondamento

Um outro erro comum, que ocorre em resultados de operações utilizando *floats*, está associado ao arredondamento até o **16º dígito significativo** da minha variável.

Precisão e Velocidade: Erros de Arredondamento

Um outro erro comum, que ocorre em resultados de operações utilizando *floats*, está associado ao arredondamento até o **16º dígito significativo** da minha variável.

Por exemplo, suponha que o resultado exato de uma operação entre dois números seja 1.2, o resultado dessa operação no python será algo como 1.2000000000000001 ou 1.1999999999999999. Em

outras palavras, o resultado obtido será do tipo 1.2 ± 10^{-16} .

Precisão e Velocidade: Erros de Arredondamento

Um outro erro comum, que ocorre em resultados de operações utilizando *floats*, está associado ao arredondamento até o **16º dígito significativo** da minha variável.

Por exemplo, suponha que o resultado exato de uma operação entre dois números seja 1.2, o resultado dessa operação no python será algo como 1.2000000000000001 ou 1.1999999999999999. Em

outras palavras, o resultado obtido será do tipo 1.2 ± 10^{-16} .

Assim, dizemos que o erro associado ao arredondamento de uma variável x é igual a um número aleatório (uniformemente distribuído) com desvio padrão $\sigma = Cx$, onde $C \approx 10^{-16}$.

$$\sigma_{arr} = Cx, \text{ onde } C \approx 10^{-16}$$

Precisão e Velocidade: Erros de Arredondamento

Um outro erro comum, que ocorre em resultados de operações utilizando *floats*, está associado ao arredondamento até o **16º dígito significativo** da minha variável.

Por exemplo, suponha que o resultado exato de uma operação entre dois números seja 1.2, o resultado dessa operação no python será algo como 1.2000000000000001 ou 1.1999999999999999. Em

Comando útil para se verificar o progresso do seu código ao usar o laço *for*:

outras palavras, o resultado obtido será do tipo 1.2 ± 10^{-16} .

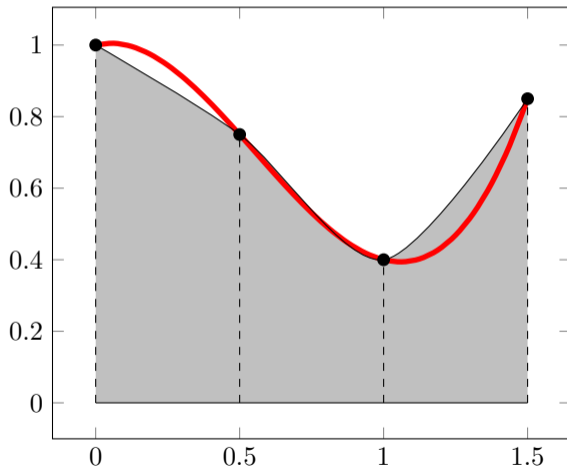
Assim, dizemos que o erro associado ao arredondamento de uma variável x é igual a um número aleatório (uniformemente distribuído) com desvio padrão $\sigma = Cx$, onde $C \approx 10^{-16}$.

$$\sigma_{arr} = Cx, \text{ onde } C \approx 10^{-16}$$

```
from tqdm import trange  
for i in trange(N):
```

Método do Trapezoíde

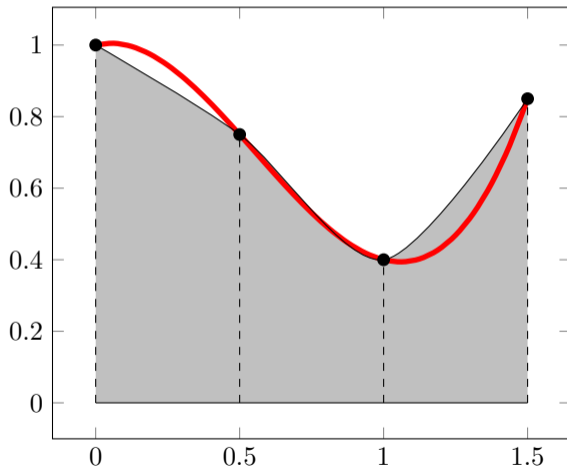
$$A_k = \frac{1}{2}(f_{k+1} + f_k)h$$



Método do Trapezóide

$$A_k = \frac{1}{2}(f_{k+1} + f_k)h$$

$$I \equiv \int_a^b f(x)dx \approx \sum_{k=0}^N A_k$$

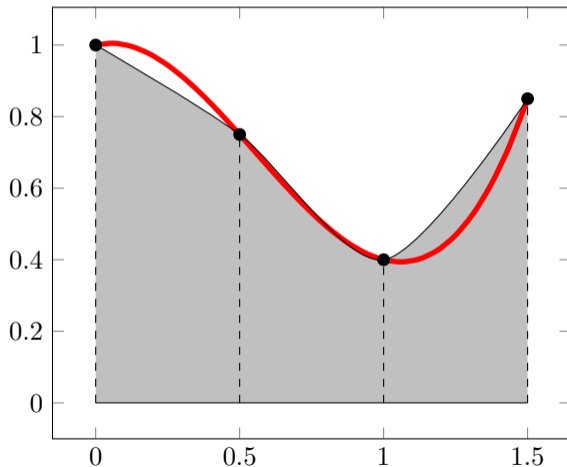


Método do Trapezoíde

$$A_k = \frac{1}{2}(f_{k+1} + f_k)h$$

$$I \equiv \int_a^b f(x)dx \approx \sum_{k=0}^N A_k$$

$$I \approx \frac{h}{2}[(f_0 + f_1) + (f_1 + f_2) + \dots + (f_{N-1} + f_N)]$$



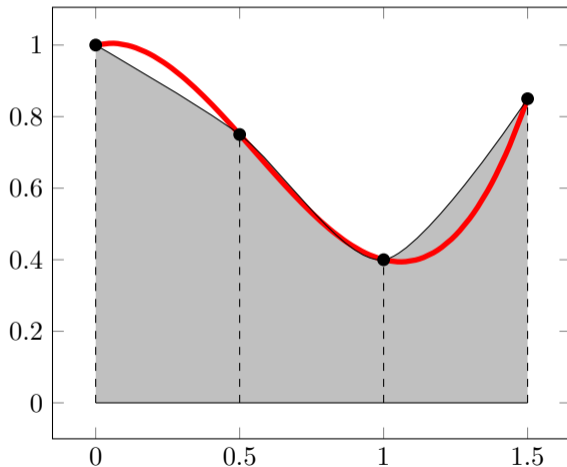
Método do Trapezoide

$$A_k = \frac{1}{2}(f_{k+1} + f_k)h$$

$$I \equiv \int_a^b f(x)dx \approx \sum_{k=0}^{N-1} A_k$$

$$I \approx \frac{h}{2} [(f_0 + f_1) + (f_1 + f_2) + \dots + (f_{N-1} + f_N)]$$

$$I \approx \sum_{k=0}^{N-1} A_k = h \left[\frac{1}{2}(f_0 + f_N) + \sum_{k=1}^{N-1} f_k \right]$$



Método do Trapezóide: Incerteza

Vimos que para se determinar a ordem de imprecisão da nossa integral via método do trapezóide precisávamos verificar a integração de uma função expandida em séries de Taylor em torno de um dado número.

Expandindo $f(x)$ em torno de x_k e de x_{k-1} tínhamos:

$$f(x) \approx f_k + f'_k(x - x_k) + \frac{1}{2}f''_k(x - x_k)^2 + \dots$$

$$f(x) \approx f_{k-1} + f'_{k-1}(x - x_{k-1}) + \frac{1}{2}f''_{k-1}(x - x_{k-1})^2 + \dots$$

onde, $f_k \equiv f(x_k)$ e $f_{k-1} \equiv f(x_{k-1})$ e suas respectivas derivadas.

Método do Trapezóide: Incerteza

Integrando $f(x)$ entre x_{k-1} e x_k , com $h \equiv x_k - x_{k-1}$, temos:

$$\int_{x_{k-1}}^{x_k} f(x) dx \approx hf_k - \frac{h^2}{2} f'_k + \frac{h^3}{6} f''_k + O(h^4)$$
$$\int_{x_{k-1}}^{x_k} f(x) dx \approx hf_{k-1} + \frac{h^2}{2} f'_{k-1} + \frac{h^3}{6} f''_{k-1} + O(h^4)$$

Método do Trapezóide: Incerteza

Integrando $f(x)$ entre x_{k-1} e x_k , com $h \equiv x_k - x_{k-1}$, temos:

$$\int_{x_{k-1}}^{x_k} f(x)dx \approx hf_k - \frac{h^2}{2}f'_k + \frac{h^3}{6}f''_k + O(h^4)$$
$$\int_{x_{k-1}}^{x_k} f(x)dx \approx hf_{k-1} + \frac{h^2}{2}f'_{k-1} + \frac{h^3}{6}f''_{k-1} + O(h^4)$$

Tomando a média das duas integrais:

$$\int_{x_{k-1}}^{x_k} f(x)dx \approx \left[\frac{h}{2}(f_k + f_{k-1}) \right] + \frac{h^2}{4}[f'_{k-1} - f'_k] + \frac{h^3}{12}[f''_{k-1} + f''_k] + O(h^4)$$

Método do Trapezóide: Incerteza

Como estamos interessado na integral de $f(x)$ no intervalo de $x_0 = a$ e de $x_N = b$ temos:

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{k=1}^N \int_{x_{k-1}}^{x_k} f(x)dx$$

Método do Trapezóide: Incerteza

Como estamos interessado na integral de $f(x)$ no intervalo de $x_0 = a$ e de $x_N = b$ temos:

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{k=1}^N \int_{x_{k-1}}^{x_k} f(x)dx$$

Com isso temos:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \underbrace{\left[\frac{h}{2} \sum_{k=1}^N (f_k + f_{k-1}) \right]}_{\text{Regra do Trapézio}} + \underbrace{\frac{h^2}{4} \sum_{k=1}^N [f'_{k-1} - f'_k] + \frac{h^3}{12} \sum_{k=1}^N [f''_{k-1} + f''_k] + O(h^4)}_{\text{Termos de Correção}}$$

Método do Trapezóide: Incerteza

Como estamos interessado na integral de $f(x)$ no intervalo de $x_0 = a$ e de $x_N = b$ temos:

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{k=1}^N \int_{x_{k-1}}^{x_k} f(x)dx$$

Com isso temos:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \underbrace{\left[\frac{h}{2} \sum_{k=1}^N (f_k + f_{k-1}) \right]}_{\text{Regra do Trapézio}} + \underbrace{\frac{h^2}{4} \sum_{k=1}^N [f'_{k-1} - f'_k] + \frac{h^3}{12} \sum_{k=1}^N [f''_{k-1} + f''_k]}_{\text{Termos de Correção}} + O(h^4)$$

Logo nosso método o trapézio é uma **aproximação de primeira ordem em h**, da nossa integral original.

Método do Trapezóide: Incerteza

Focando agora nos 2 termos seguintes de ordem quadrática e superior em h .

Veja que quase todos os termos do segundo somatório se anulam, exceto pelos valores das derivadas de f nas extremidades:

$$\frac{h^2}{4} \sum_{k=1}^N [f'_{k-1} - f'_k] = \frac{h^2}{4} [(f'_0 - f'_1) + (f'_1 - f'_2) + (f'_2 - f'_3) + \dots + (f'_{N-1} - f'_N)] = \frac{h^2}{4} (f'_0 - f'_N)$$

Método do Trapezóide: Incerteza

Focando agora nos 2 termos seguintes de ordem quadrática e superior em h .

Veja que quase todos os termos do segundo somatório se anulam, exceto pelos valores das derivadas de f nas extremidades:

$$\frac{h^2}{4} \sum_{k=1}^N [f'_{k-1} - f'_k] = \frac{h^2}{4} [(f'_0 - f'_1) + (f'_1 - f'_2) + (f'_2 - f'_3) + \dots + (f'_{N-1} - f'_N)] = \frac{h^2}{4} (f'_0 - f'_N)$$

Já o terceiro somatório pode ser manipulado de modo semelhante ao regra do trapézio:

$$\frac{h^2}{6} \left[\frac{h}{2} \sum_{k=1}^N (f''_{k-1} + f''_k) \right] \approx \frac{h^2}{6} \int_a^b f''(x) dx = \frac{h^2}{6} (f'_N - f'_0)$$

Método do Trapezóide: Incerteza

Focando agora nos 2 termos seguintes de ordem quadrática e superior em h .

Veja que quase todos os termos do segundo somatório se anulam, exceto pelos valores das derivadas de f nas extremidades:

$$\frac{h^2}{4} \sum_{k=1}^N [f'_{k-1} - f'_k] = \frac{h^2}{4} [(f'_0 - f'_1) + (f'_1 - f'_2) + (f'_2 - f'_3) + \dots + (f'_{N-1} - f'_N)] = \frac{h^2}{4} (f'_0 - f'_N)$$

Já o terceiro somatório pode ser manipulado de modo semelhante ao regra do trapézio:

$$\frac{h^2}{6} \left[\frac{h}{2} \sum_{k=1}^N (f''_{k-1} + f''_k) \right] \approx \frac{h^2}{6} \int_a^b f''(x) dx = \frac{h^2}{6} (f'_N - f'_0)$$

Somando os dois termos em vermelho encontramos o termo de correção quadrática da nossa integral inicial:

$$\epsilon \equiv \frac{h^2}{4} \sum_{k=1}^N [f'_{k-1} - f'_k] + \frac{h^3}{12} \sum_{k=1}^N [f''_{k-1} + f''_k] \Rightarrow \underbrace{\epsilon = \frac{h^2}{12} (f'_0 - f'_N)}$$

Fórmula de Euler-Maclaurin

Método do Trapezóide: Incerteza

Desprezando os termos seguintes de ordem superior em h , temos que o erro de aproximação da nossa integral escala com h^2 , ou seja, com $1/N^2$. Contudo, como já vimos, além do erro de aproximação temos também os erros de arredondamento devido a limitação do python para armazenar variáveis do tipo *float*. Sendo assim, no limite onde ambos os erros se igualam:

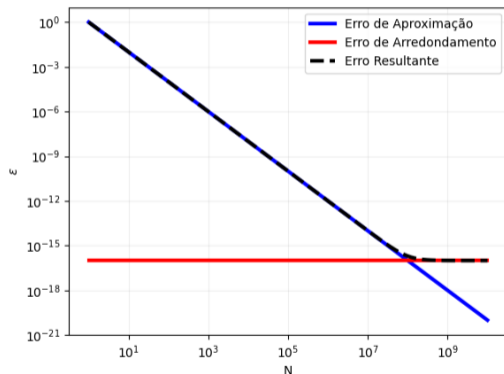
$$\epsilon = \frac{h^2}{12}(f'_0 - f'_N) \approx C \int_a^b f(x)dx$$

Método do Trapezóide: Incerteza

Desprezando os termos seguintes de ordem superior em h , temos que o erro de aproximação da nossa integral escala com h^2 , ou seja, com $1/N^2$. Contudo, como já vimos, além do erro de aproximação temos também os erros de arredondamento devido a limitação do python para armazenar variáveis do tipo *float*. Sendo assim, no limite onde ambos os erros se igualam:

$$\epsilon = \frac{h^2}{12}(f'_0 - f'_N) \approx C \int_a^b f(x)dx$$

$$N \approx (b - a) \sqrt{\frac{f'_0 - f'_N}{12C \int_a^b f(x)dx}}$$



Como $C \approx 10^{-16} \Rightarrow N \approx 100.000.000$.

Método do Trapezóide: Incerteza

Vamos relembrar também como se estimar, de modo prático, a incerteza em nossa integral aproximada.

Desprezando correções de ordens maiores do que h^2 , temos que:

$$\int_a^b f(x)dx \approx I_i + \alpha h_i^2$$

Método do Trapezóide: Incerteza

Vamos relembrar também como se estimar, de modo prático, a incerteza em nossa integral aproximada.

Desprezando correções de ordens maiores do que h^2 , temos que:

$$\int_a^b f(x)dx \approx I_i + \alpha h_i^2$$

Calculando de duas integrais aproximadas, o primeiro com o dobro de fatias do segundo:

$$\int_a^b f(x)dx \approx I_{2N} + \alpha h_{2N}^2 = I_N + \alpha h_N^2$$

$$I_{2N} - I_N = \alpha(h_N^2 - h_{2N}^2)$$

Método do Trapezóide: Incerteza

Vamos lembrar também como se estimar, de modo prático, a incerteza em nossa integral aproximada.

Desprezando correções de ordens maiores do que h^2 , temos que:

$$\int_a^b f(x)dx \approx I_i + \alpha h_i^2$$

Calculando de duas integrais aproximadas, o primeiro com o dobro de fatias do segundo:

$$\int_a^b f(x)dx \approx I_{2N} + \alpha h_{2N}^2 = I_N + \alpha h_N^2$$

$$I_{2N} - I_N = \alpha(h_N^2 - h_{2N}^2)$$

Como, $h_N = (b - a)/N$ e $h_{2N} = (b - a)/(2N)$:

$$I_{2N} - I_N = \alpha h_{2N}^2(4 - 1) = 3\epsilon_{2N}$$

$$\epsilon_{2N} = \frac{I_{2N} - I_N}{3}$$

Problema 3 da Lista 2.

Regra do Trapézio Adaptativa

Quando queremos melhorar a precisão da nossa integral aproximada até atingir um nível de incerteza aceitável, mas não sabemos ao certo quantas fatias será necessário para esse fim, podemos usar o método de integração adaptativa.

Regra do Trapézio Adaptativa

Quando queremos melhorar a precisão da nossa integral aproximada até atingir um nível de incerteza aceitável, mas não sabemos ao certo quantas fatias será necessário para esse fim, podemos usar o método de integração adaptativa.

Seja I_i a nossa integral aproximada com N_i (par) fatias igualmente espaçada $h_i = (b - a)/N_i$, e I_{i-1} outra integral aproximada com metade das fatias usadas em I_i , de modo que $N_{i-1} = N_i/2$ e $h_{i-1} = 2h_i$.

Regra do Trapézio Adaptativa

Quando queremos melhorar a precisão da nossa integral aproximada até atingir um nível de incerteza aceitável, mas não sabemos ao certo quantas fatias será necessário para esse fim, podemos usar o método de integração adaptativa.

Seja I_i a nossa integral aproximada com N_i (par) fatias igualmente espaçada $h_i = (b - a)/N_i$, e I_{i-1} outra integral aproximada com metade das fatias usadas em I_i , de modo que $N_{i-1} = N_i/2$ e $h_{i-1} = 2h_i$.

$$I_i = \frac{\delta_i}{2}[f(a) + f(b)] + \delta_i \sum_{k=1}^{N_i-1} f(a + k\delta_i)$$

Regra do Trapézio Adaptativa

Quando queremos melhorar a precisão da nossa integral aproximada até atingir um nível de incerteza aceitável, mas não sabemos ao certo quantas fatias será necessário para esse fim, podemos usar o método de integração adaptativa.

Seja I_i a nossa integral aproximada com N_i (par) fatias igualmente espaçada $h_i = (b - a)/N_i$, e I_{i-1} outra integral aproximada com metade das fatias usadas em I_i , de modo que $N_{i-1} = N_i/2$ e $h_{i-1} = 2h_i$.

$$I_i = \frac{\delta_i}{2}[f(a) + f(b)] + \delta_i \sum_{k=1}^{N_i-1} f(a + k\delta_i)$$

$$\sum_{k=1}^{N_i-1} f(a + k\delta_i) = \underbrace{\sum_{k=1}^{N_i-1} f(a + k\delta_i)}_{k \text{ ímpar}} + \underbrace{\sum_{k=2}^{N_i-2} f(a + k\delta_i)}_{k \text{ par}}$$

Regra do Trapézio Adaptativa

$$\underbrace{\sum_{k=2}^{N_i-2} f(a + k\delta_i)}_{k \text{ par}} = \sum_{k=1}^{N_{i-1}-1} f(a + 2k\delta_i) = \sum_{k=1}^{N_{i-1}-1} f(a + k\delta_{i-1})$$

Regra do Trapézio Adaptativa

$$\underbrace{\sum_{k=2}^{N_i-2} f(a + k\delta_i)}_{k \text{ par}} = \sum_{k=1}^{N_{i-1}-1} f(a + 2k\delta_i) = \sum_{k=1}^{N_{i-1}-1} f(a + k\delta_{i-1})$$

$$I_i = \frac{\delta_i}{2} [f(a) + f(b)] + \delta_i \left[\underbrace{\sum_{k=1}^{N_i-1} f(a + k\delta_i)}_{k \text{ ímpar}} + \sum_{k=1}^{N_{i-1}-1} f(a + k\delta_{i-1}) \right]$$

Regra do Trapézio Adaptativa

$$\underbrace{\sum_{k=2}^{N_i-2} f(a + k\delta_i)}_{k \text{ par}} = \sum_{k=1}^{N_{i-1}-1} f(a + 2k\delta_i) = \sum_{k=1}^{N_{i-1}-1} f(a + k\delta_{i-1})$$

$$I_i = \frac{\delta_i}{2} [f(a) + f(b)] + \delta_i \left[\underbrace{\sum_{k=1}^{N_i-1} f(a + k\delta_i)}_{k \text{ ímpar}} + \sum_{k=1}^{N_{i-1}-1} f(a + k\delta_{i-1}) \right]$$

$$I_i = \frac{1}{2} \left[\frac{\delta_{i-1}}{2} [f(a) + f(b)] \sum_{k=1}^{N_{i-1}-1} f(a + k\delta_{i-1}) \right] + \delta_i \underbrace{\sum_{k=1}^{N_i-1} f(a + k\delta_i)}_{k \text{ ímpar}}$$

Regra do Trapézio Adaptativa

Com isso chegamos a nossa forma adaptativa da regra do trapézio, onde podemos aproveitar os somatórios com um dado número de fatias, para uma aproximação melhorada com o dobro do número de fatias:

$$I_i = \frac{1}{2}I_{i-1} + \delta_i \underbrace{\sum_{k=1}^{N_i-1} f(a + k\delta_i)}_{k \text{ ímpar}}$$

Regra do Trapézio Adaptativa

Com isso chegamos a nossa forma adaptativa da regra do trapézio, onde podemos aproveitar os somatórios com um dado número de fatias, para uma aproximação melhorada com o dobro do número de fatias:

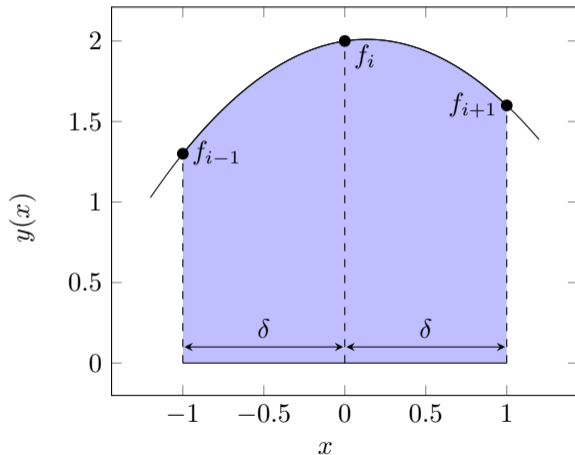
$$I_i = \frac{1}{2}I_{i-1} + \delta_i \underbrace{\sum_{k=1}^{N_i-1} f(a + k\delta_i)}_{k \text{ ímpar}}$$

Problema 4 da Lista 2.

Método de Simpson

Utilizando 3 pontos de uma curva para definir um polinômio de segundo grau.

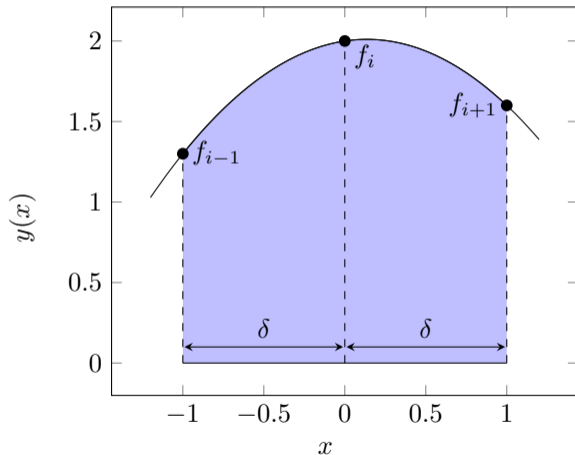
- $y(x) = Ax^2 + Bx + C$



Método de Simpson

Utilizando 3 pontos de uma curva para definir um polinômio de segundo grau.

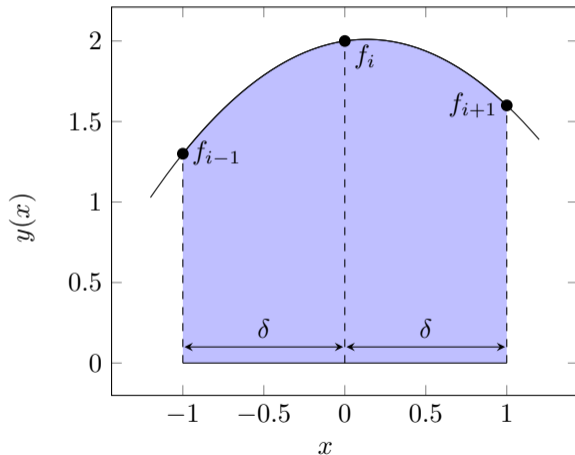
- $y(x) = Ax^2 + Bx + C$
- $y(-\delta) = f_{i-1} = A\delta^2 - B\delta + C$



Método de Simpson

Utilizando 3 pontos de uma curva para definir um polinômio de segundo grau.

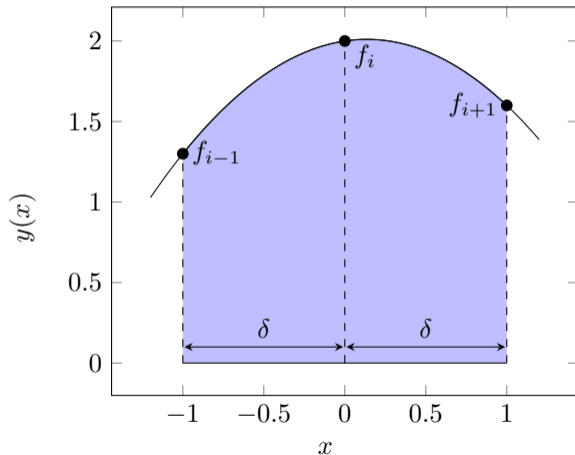
- $y(x) = Ax^2 + Bx + C$
- $y(-\delta) = f_{i-1} = A\delta^2 - B\delta + C$
- $y(0) = f_i = C$



Método de Simpson

Utilizando 3 pontos de uma curva para definir um polinômio de segundo grau.

- $y(x) = Ax^2 + Bx + C$
- $y(-\delta) = f_{i-1} = A\delta^2 - B\delta + C$
- $y(0) = f_i = C$
- $y(\delta) = f_{i+1} = A\delta^2 + B\delta + C$



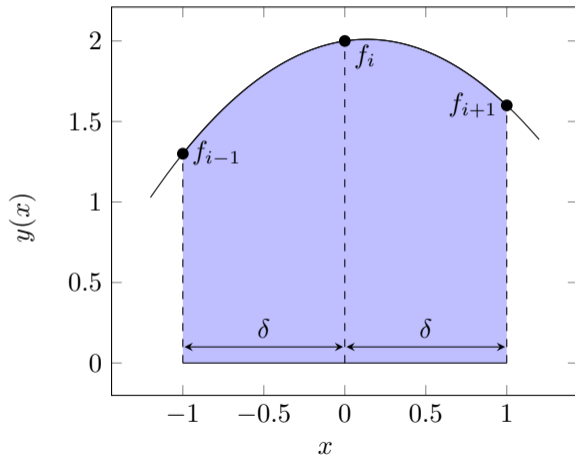
Método de Simpson

Utilizando 3 pontos de uma curva para definir um polinômio de segundo grau.

$$A = \frac{1}{2\delta^2}(f_{i-1} + f_{i-1} - 2f_i)$$

$$B = \frac{1}{2\delta}(f_{i+1} - f_{i-1})$$

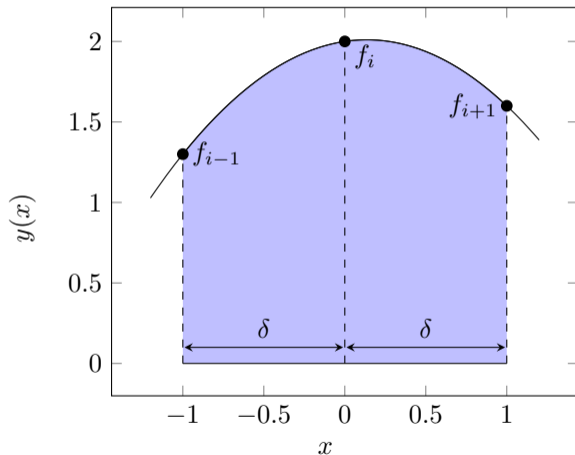
$$C = f_i$$



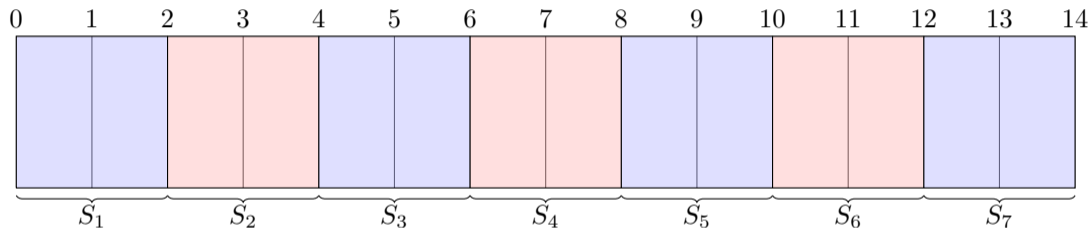
Método de Simpson

Utilizando 3 pontos de uma curva para definir um polinômio de segundo grau.

$$\begin{aligned} S_i &\equiv \int_{-\delta}^{\delta} y(x) dx = \frac{2}{3} A \delta^2 + 2C \delta \\ &= \frac{\delta}{3} (f_{i+1} + f_{i-1} + 4f_i) \end{aligned}$$

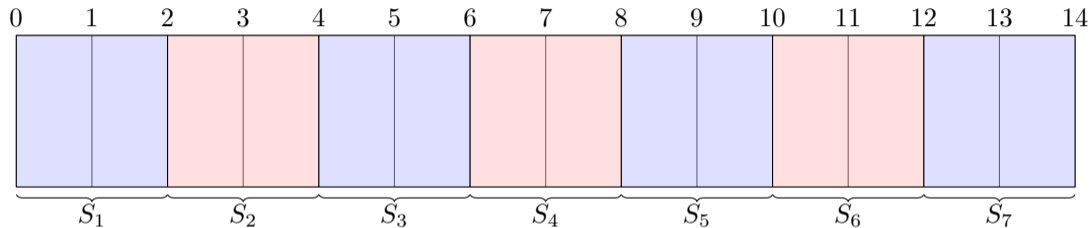


Método de Simpson



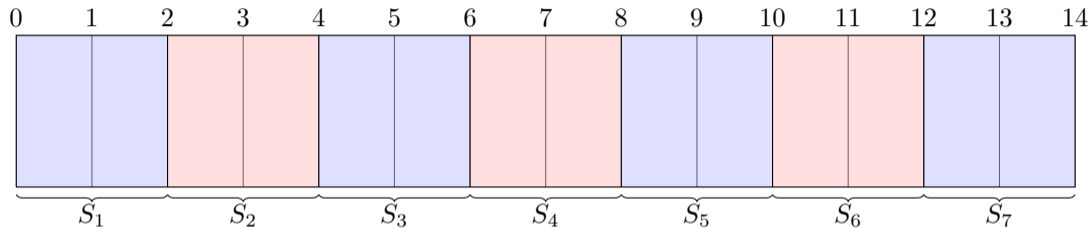
$$\int_{x_0}^{x_{14}} y(x) dx \approx \sum_{i=1}^7 S_i$$

Método de Simpson



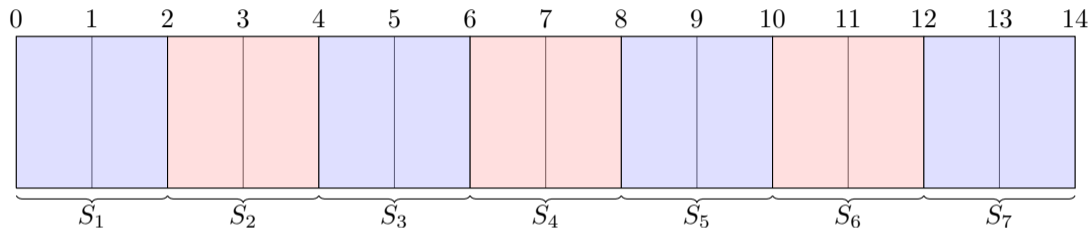
$$\int_{x_0}^{x_{14}} y(x) dx \approx \frac{\delta}{3} [(f_2 + f_0 + 4f_1) + (f_4 + f_2 + 4f_3) + (f_6 + f_4 + 4f_5) \\ + (f_8 + f_6 + 4f_7) + (f_{10} + f_8 + 4f_9) + (f_{12} + f_{10} + 4f_{11}) + (f_{14} + f_{12} + 4f_{13})]$$

Método de Simpson



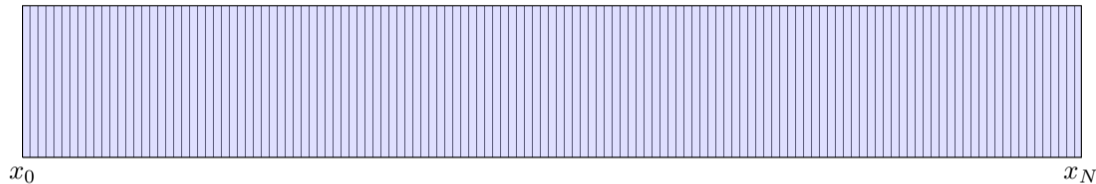
$$\int_{x_0}^{x_{14}} y(x) dx \approx \frac{\delta}{3} [(f_0 + f_{14}) + 2(f_2 + f_4 + f_6 + f_8 + f_{10} + f_{12}) + 4(f_1 + f_3 + f_5 + f_7 + f_9 + f_{11} + f_{13})]$$

Método de Simpson



$$\int_{x_0}^{x_{14}} y(x) dx \approx \frac{\delta}{3} \left\{ (f_0 + f_{14}) + 2 \left[\sum_{i=1}^6 f_{2i} \right] + 4 \left[\sum_{i=0}^5 f_{2i+1} \right] \right\}$$

Método de Simpson



$$\int_{x_0}^{x_N} y(x) dx \approx \frac{\delta}{3} \left\{ (f_0 + f_N) + 2 \left[\sum_{i=1}^{N/2-1} f_{2i} \right] + 4 \left[\sum_{i=0}^{N/2-2} f_{2i+1} \right] \right\}$$