Resolução de zero de funções envolvendo Equações Transcendentais

ALEXANDRE VARGAS ILHA[1]; Carlos Alberto Vaz de Morais Junior[2]

[1] *Universidade Federal de Pelotas– cafine.ilha@gmail.com*
[2] *Universidade Federal de Pelotas– carlosavjr@gmail.com*

1. INTRODUÇÃO

O estudo científico, em especial na física, requer a utilização de um amplo ferramental matemático para tratamento de problemas distintos. Essencialmente, as mais diferentes áreas do conhecimento que possuem proximidade com a matemática, como por exemplo a já citada física, e se deparam eventualmente com relações matemáticas que chamamos de equações transcendentais. Para esse tipo de equações a obtenção das raízes das funções, ou seja, o zero das funções, pode ser uma tarefa trabalhosa. Para resolução das equações transcendentais, basicamente duas maneiras de obtenção dos zeros podem ser propostas: i) a determinação analítica dos valores, e ii) a solução numérica. Um caso importante dentro da termodinâmica e mecânica estatística, são as equações de estado transcendentais. Tais equações podem ser expressas na forma de parâmetros de ordem, o qual definem a transições de fase de sistema de interesse. Em particular, o tratamento analítico do modelo de alcance infinito [1], se obtêm uma equação de estado transcendental que pode ser resolvida a partir de cálculo numérico. Dentro do ferramental teórico do modelo de Ising de alcance infinito, teremos a expressão escrita na forma $x-f(x)=0$. Uma possibilidade de resolução analítica envolve a realização de expansões analíticas. Contudo, no presente trabalho ateremos ao cálculo numérico de soluções para equações desse tipo.

2. METODOLOGIA

Para o cálculo da determinação do zero de funções, uma possível maneira de resolução numérica emprega o chamado método de iteração linear, pertencente a classe dos métodos iterativos. Se o objetivo for a determinação de uma raiz da nossa função, dentro de um intervalo bem definido, podemos transformar o problema em uma questão de determinar um ponto fixo dentro de uma função equivalente (ver figura 1.). Para determinarmos f(x)=0, pelo método iterativo em questão devemos determinar uma função semelhante x=g(x) e então, determinar uma solução inicial aproximada de modo que após uma sequência de aproximações, somos capazes de determinar a solução.

Originalmente tínhamos a necessidade de determinar f(x)=0, o que pode ser uma tarefa nem um pouco simples. O nosso problema agora é determinar um ponto fixo g(x) para buscarmos a solução do nosso zero da função [2]. A partir da Figura 1, podemos identificar os passos do processo de obtenção de raízes. Primeiramente devemos determinar uma tolerância para o programa, depois, definimos uma solução inicial x_0 e o número máximo de iterações $k_{máx}$. Após isso, é feito a avaliação de $x=g(x_0)$ em um x_0 , de modo que o passo seguinte é a determinação do erro. Sendo este menor ou igual a tolerância (um resultado dentro do padrão desejado) ou com k maior que o k máximo podemos imprimir o valor de x e encerrar o problema, ou, se a condição não é satisfeita, fazemos um acréscimo em k, atribuindo um novo valor de x e retornando para a solução inicial. Esse processo é o responsável pelo refinamento da raiz, ele vai truncar o programa quando o objetivo for atingido.

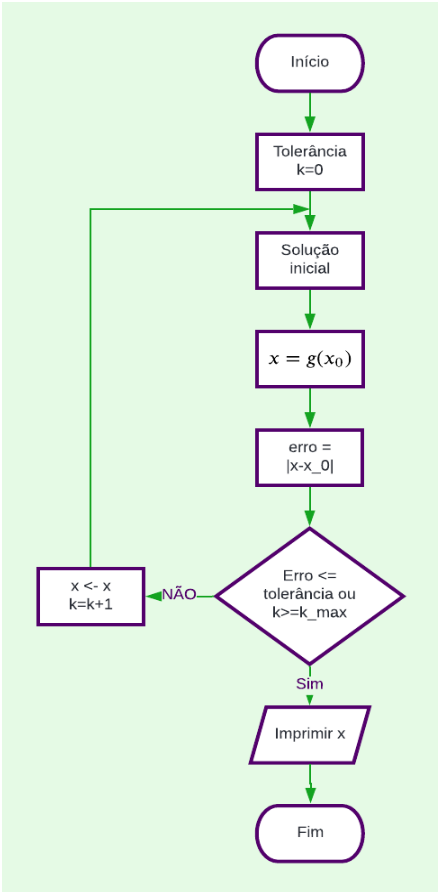

Figura 1: Fluxograma para o método do ponto fixo

Esse método é usado para a determinação do zero de funções para uma equação única. De maneira semelhante, teremos o método iterativo para equações múltiplas. No contexto do presente trabalho a atenção é focada no cálculo da equação do parâmetro de ordem x – tanh(x/T). Outro método importante, que pode ser usado para determinar as raízes, é utilizando o recurso interpretativo a partir do método gráfico. Podemos realizar as projeções gráficas do comportamento do parâmetro e então determinar os zeros das funções.

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Na Figura 2, temos a sobreposição de duas curvas, uma curva f(x)=x e outra curva g(x)=tanh(x/0.8). Podemos ver, a partir da figura, três raízes distintas, sendo uma delas a solução trivial (zero) e outras duas iguais de sinais opostos, aproximadamente 0.71.

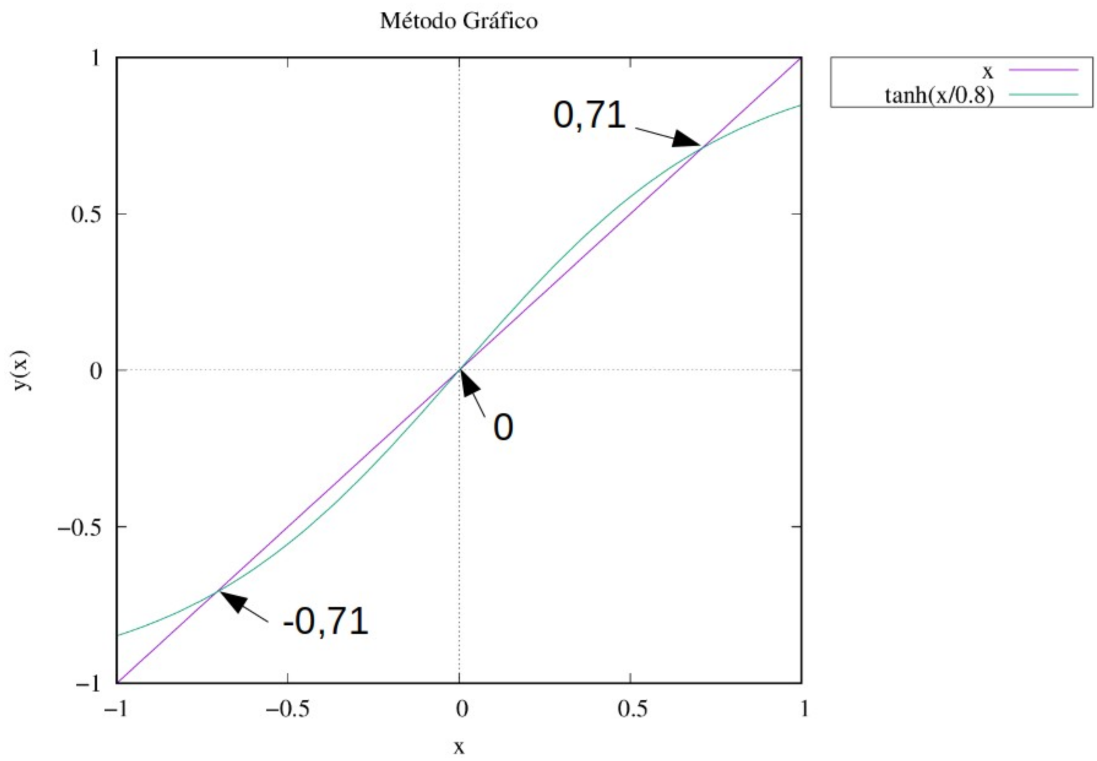

Figura 2: Método gráfico para obtenção da solução

Utilizando o método do ponto iterativo, que já foi descrito anteriormente, para o sistema da função tangente hiperbólico, teremos um resultado parecido. Desenvolvendo o código que respeite o Fluxograma da Figura 1, conseguimos determinar, suficientemente bem o resultado do nosso problema.

```fortran
! subrotina metodo ponto fixo
SUBROUTINE mpf ( x0 , x , erro )
IMPLICIT NONE
REAL :: x0
REAL :: x,erro,tol
REAL :: f
INTEGER :: k, kmax

Kmax = 120
K = 0
tol = 1d-6
DO
x = f ( x0 ) ! funcao
erro = ABS ( x - x0 )
IF ( erro <= tol ) EXIT
IF ( k >= kmax ) EXIT
x0 = x
K = K + 1
END DO
END SUBROUTINE mpf
```

```
alexandre@DesktopUbuntu:~/Área de Trabalho/SIIEPE 2020/dados/iterativo$
alexandre@DesktopUbuntu:~/Área de Trabalho/SIIEPE 2020/dados/iterativo$
 Primeiro caso

 k :  1 , erro :    1.0134
 k :  2 , erro :    0.1431
 k :  3 , erro :    0.0600
 k :  4 , erro :    0.0307
 k :  5 , erro :    0.0171
 raiz :    0.7257 , erro :    0.0100
alexandre@DesktopUbuntu:~/Área de Trabalho/SIIEPE 2020/dados/iterativo$
alexandre@DesktopUbuntu:~/Área de Trabalho/SIIEPE 2020/dados/iterativo$
 Segundo caso

 k :  1 , erro :    1.0134
 k :  2 , erro :    0.1431
 k :  3 , erro :    0.0600
 k :  4 , erro :    0.0307
 k :  5 , erro :    0.0171
 k :  6 , erro :    0.0100
 k :  7 , erro :    0.0060
 k :  8 , erro :    0.0036
 k :  9 , erro :    0.0022
 k : 10 , erro :    0.0014
 k : 11 , erro :    0.0008
 k : 12 , erro :    0.0005
 k : 13 , erro :    0.0003
 k : 14 , erro :    0.0002
 k : 15 , erro :    0.0001
 k : 16 , erro :    0.0001
 k : 17 , erro :    0.0000
 k : 18 , erro :    0.0000
 k : 19 , erro :    0.0000
 k : 20 , erro :    0.0000
 k : 21 , erro :    0.0000
 k : 22 , erro :    0.0000
 k : 23 , erro :    0.0000
 k : 24 , erro :    0.0000
 k : 25 , erro :    0.0000
 raiz :  0.710413 , erro :  0.000001
alexandre@DesktopUbuntu:~/Área de Trabalho/SIIEPE 2020/dados/iterativo$
```

Figura 3: a) Método iterativo em Fortran. b) Dados dos programas utilizando o Método Iterativo

Na Figura 3 (a), temos um recorte do programa que aborda especificamente o método do ponto fixo. Estipulando no código da Figura 3 (a), a mesma função usada na Figura 2, e determinando uma solução tentativa inicial sendo igual a 2, determinamos numericamente o valor de 0.72 com um erro de 0.01 após 5 iterações. Podemos ainda diminuir o erro para um valor de 0.000001, isso demanda um recurso maior já que foram necessárias 25 iterações para determinarmos o valor mais preciso de 0.710413. Para ambos os casos, podemos ver os resultados dispostos na Figura 3 (b), onde o programa determinou a raiz mais próxima da nossa solução tentativa inicial de 2.

Para esse problema, podemos identificar as raízes a partir do método gráfico, como foi visto na Figura 2, e a partir do método numérico iterativo. A solução carregará o nível de precisão que o problema exija, lembrando sempre que uma solução mais precisa demanda um recurso computacional maior. Atualmente, existem bibliotecas prontas com o objetivo de auxiliar na obtenção das soluções numéricas com um bom grau de aproximação. Porém, para esse trabalho, foi utilizado o cálculo numérico a partir da linguagem de programação Fortran. Nem sempre o problema a ser solucionado será encontrado dentro de bibliotecas prontas, cabendo então o desenvolvimento do código do programa para a solução. O cálculo numérico desses problemas é muito significativo para diversas áreas da física. Resolver equações desse tipo são um grande desafio para diversas áreas da física, e em especial para a mecânica estatística. Os próximos passos serão de implementação desse ferramental numérico para a solução de problemas relacionados a transições de fases magnéticas.

4. CONCLUSÕES

A demanda da utilização de métodos numéricos para a solução de equações transcendentais é muito presente em várias áreas distintas. No estudo da transição de fases, equações desse tipo são comuns de serem encontradas. Tanto a utilização do método gráfico quanto o método de iteração, ambos apresentam uma aplicabilidade efetiva, uma vez que eles conseguem solucionar diversos problemas físicos. Cabe ressaltar, que o método gráfico é um ótimo ponto de partida, servindo como uma ferramenta muito útil para a determinação do ponto de partida. Porém, o método gráfico necessita de uma interpretação, é necessário olhar para o resultado e extrair as informações desejadas. Aqui, vimos alguns resultados, mas todos referentes a uma temperatura em específico. Para o método gráfico, devo fazer um gráfico parecido com o da Figura 2, para cada uma das temperaturas. Isso se torna muito mais otimizado ao utilizarmos o método numérico. O método nos permite calcular de forma rápida e otimizada esses valores que graficamente representariam um trabalho maior.

5. AGRADECIMENTOS

O autor gostaria de agradecer ao Programa de Educação Tutorial – PET e ao Fundo Nacional de Desenvolvimento da Educação – FNDE na condição de bolsista.

6. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

[1] NISHIMORI, Hidetoshi. **Statistical physics of spin glasses and information processing: an introduction**. Clarendon Press, 2001.

[2] Morais, C. V. **Métodos Numéricos para a Física.** 2020.