Computação Básica Para Física 2022/1
Gabarito Lista 5: Derivada Num. (Testando a estabilidade

1. Calcule a derivada primeira através das seguintes fórmulas:

a) Fórmula de 2 dois pontos backward (para trás) ou diferença finita regressiva:

$$f' \approx \frac{f_0 - f_1}{h};$$

b) Fórmula de 2 dois pontos forward (para frete) ou diferença finita progressiva:

$$f' \approx \frac{f_1 - f_0}{h};$$

c) Fórmula de 3 pontos (simetrizada):

$$f' \approx \frac{f_1 - f_{-1}}{2h};$$

d) Fórmula de 5 pontos (simetrizada):

$$f' \approx \frac{f_{-2} - 8f_{-1} + 8f_1 - f_2}{12h}.$$

2. Agora, implemente os scripts para as derivadas de ordem 2 utilizando as seguintes fórmulas.

   (a) Fórmula de 3 pontos:
$$f'' \approx \frac{f_{-1} - 2f_0 + f_1}{h^2};$$

   (b) Fórmula de 5 pontos:

$$f'' \approx \frac{1}{12}\frac{(-f_{-2} + 16f_{-1} - 30f_0 + 16f_1 - f_2)}{h^2}.$$

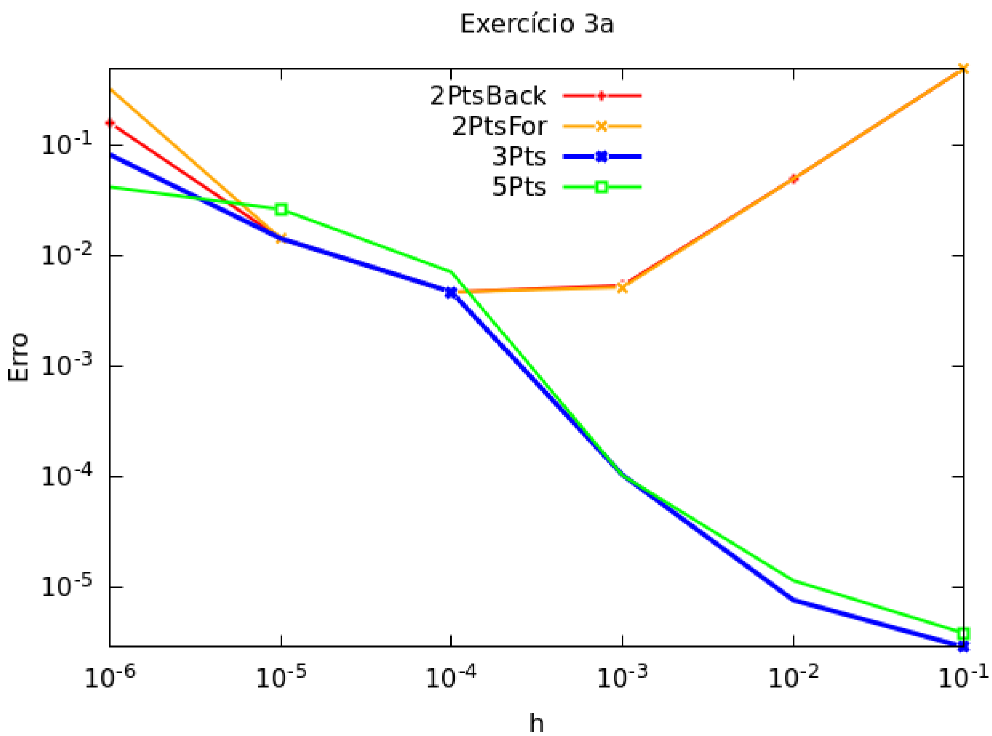
3. Aplique as fórmulas para derivada numéricas de ordem 1 (apenas esta por enquanto), para as seguintes funções:

   (a) Função horária da posição (que é uma função quadrática) no ponto $t = 1$:

$$x(t) = x_0 + v_0 t + \frac{1}{2} g t^2$$

   para $x_0 = 0m$, $v_0 = 1m/s$, $g = 9,81m/s^2$. A derivada exata (que resulta em $v(t)$) é justamente a expressão do exercício abaixo.

   Solução:



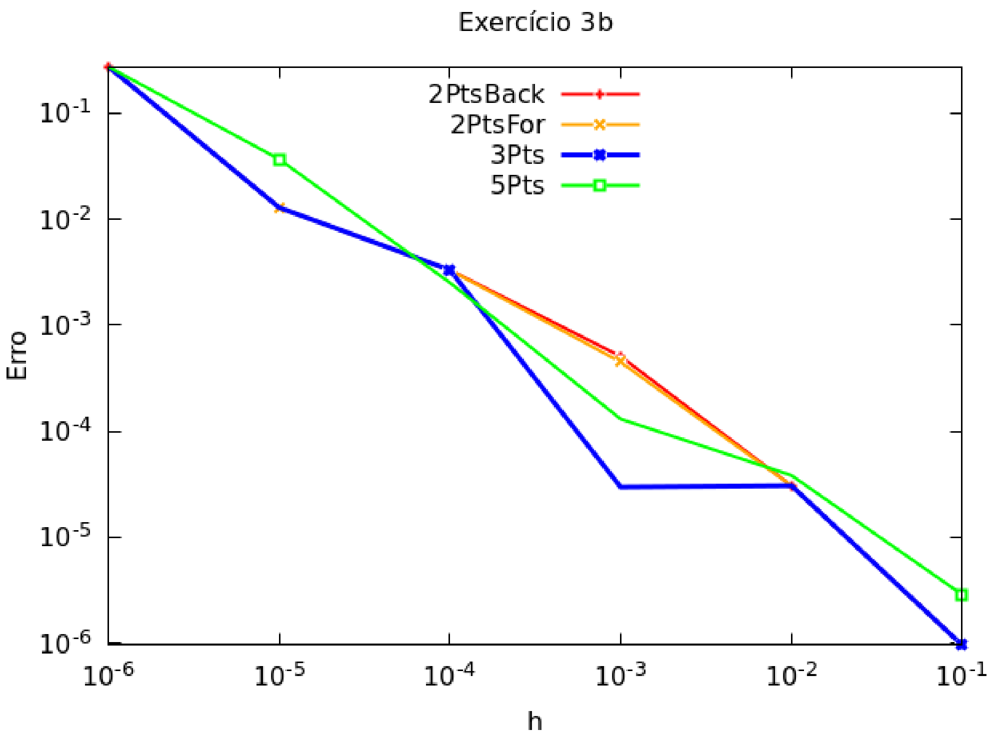
(b) Função horária da velocidade (que é uma função linear) no ponto $t = 1$:

$$v(t) = v_0 + gt$$

para $v_0 = 1m/s$, $g = 9,81m/s^2$. Cuja derivada exata é

$$\frac{dv}{dt} = g = 9,81.$$

Solução:



(c) Função horária do oscilador harmônico (que é uma função trigonométrica) no ponto $t = 1$:

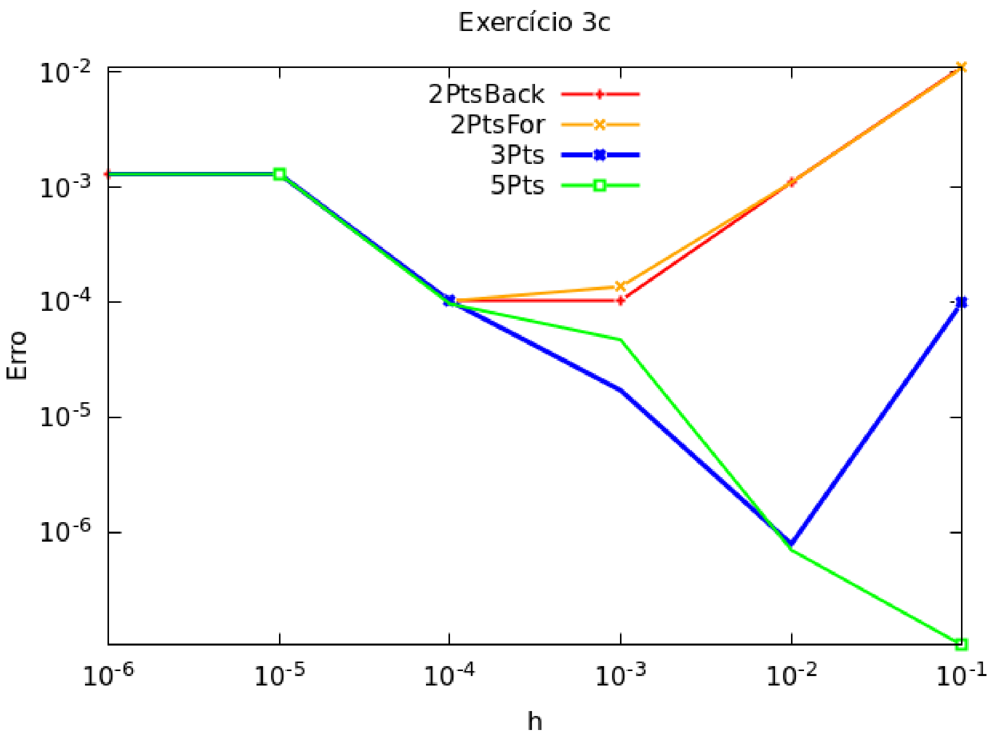
$$x(t) = A\cos(\omega t + \phi),$$

onde $A = 1m$ é a amplitude, $\phi = 0$ é a fase e $\omega = 0,5s^{-1}$ é a frequência angular. A derivada exata é

$$\frac{dx}{dt} = v = -A\omega sen(\omega t + \phi).$$

Moysés

Solução:



(d) O ln da função de partição de um oscilador harmônico aplicado no modelo do sólido de Einstein (que é uma função tipo logarítmica) pode ser escrita como

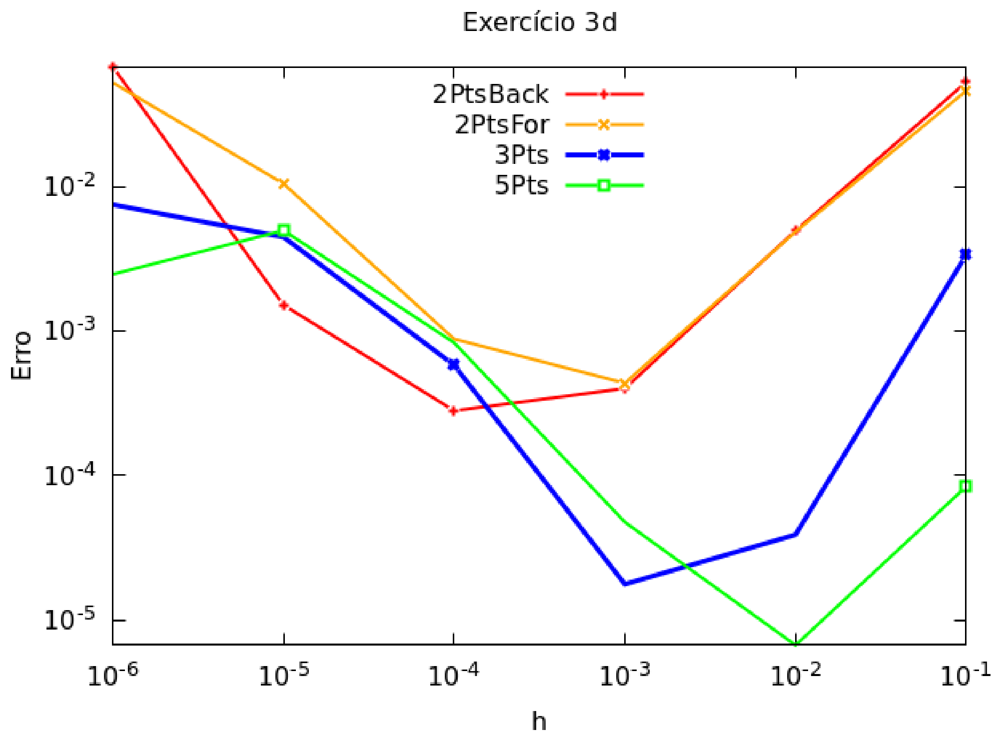
$$\ln|Z(\beta)| = \ln\left[\frac{\exp\left(-\frac{1}{2}\beta\hbar\omega\right)}{1-\exp\left(-\beta\hbar\omega\right)}\right],$$

aplique a derivada para o ponto $\beta = 1$. Considere $\hbar\omega = 0,5$. Onde $\hbar$ é a constante de Planck dividida por 2π e ω é a frequência angular de cada oscilador. A derivada exata em relação a β é

$$\frac{d\ln|Z(\beta)|}{d\beta} = -u = -\frac{\hbar\omega}{2} - \frac{\hbar\omega}{\exp\left(\beta h\omega\right)-1},$$

onde u vem a ser a energia por oscilador. Salinas

Solução:



(e) A lei de Stefan-Boltzmann para um cavidade no modelo da radiação de corpo negro pode ser escrita como

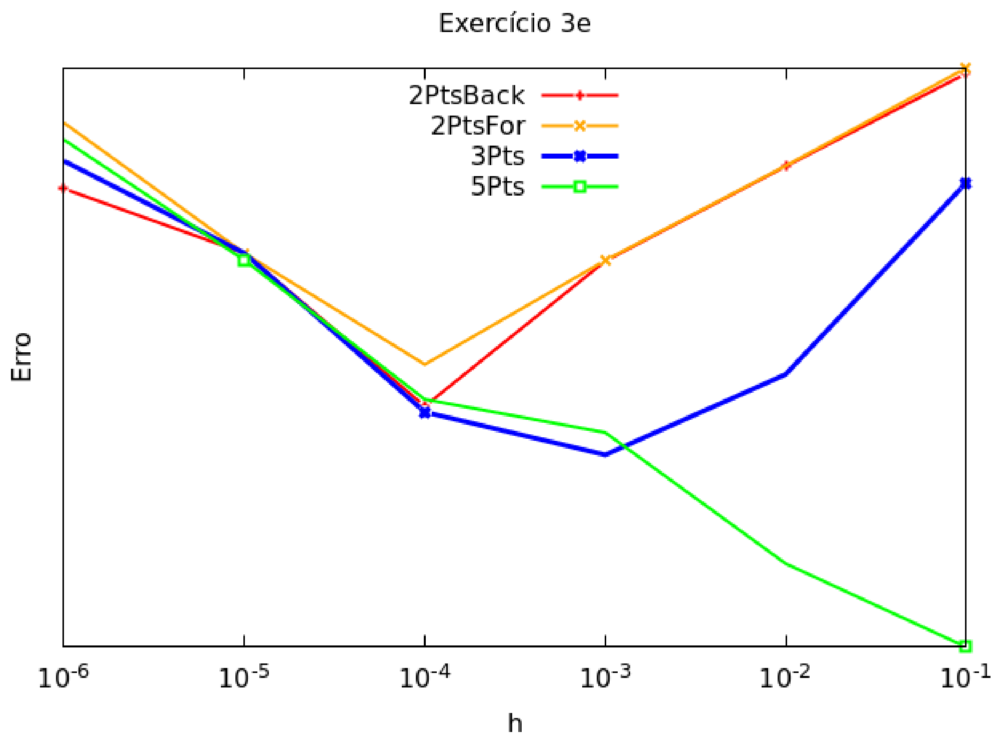
$$U = bVT^4,$$

onde $b = 7,56 \times 10^{-16} J/m^3K^4$ é uma constante, $V = 10^{-3}m$ é o volume da cavidade. Aplique as derivadas para o ponto $T = 1$, cuja derivada exata em relação a T é

$$\frac{dU}{dT} = C_v = 4bVT^3.$$

Com C_v sendo o calor específico a volume constante.Callen Pág.78.

Solução:



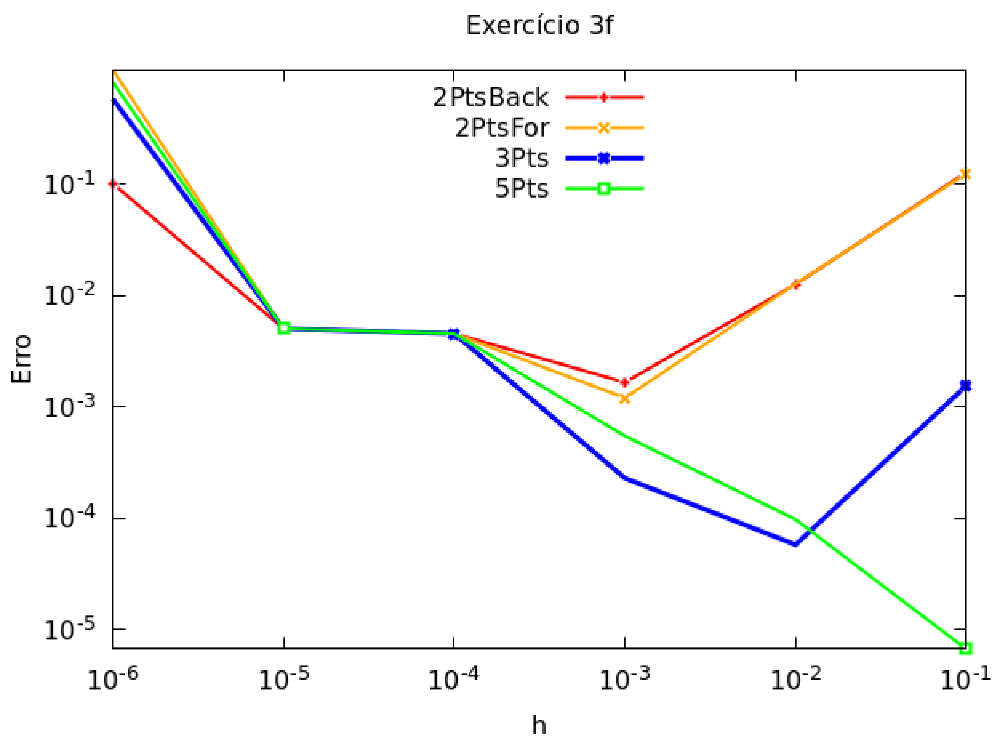
(f) A velocidade (considerando o força de arrasto do ar) como função do tempo (que é uma função exponencial) de uma partícula é

$$v_{drag}\left(t\right) = v_T\left(e^{-gt/v_T} - 1\right),$$

Aplique a derivada para o ponto $t = 1$, com $v_T = \frac{mg}{k_v}$, $m = 5 \times 10^{-7} Kg$, $k_v = 1,85 \times 10^{-7} Ns/m$, $g = 9,81 m/s^2$ e "drag"denota "arrasto". A derivada exata é

$$\frac{dv_{drag}}{dt} = a_{drag} = -ge^{-gt/v_T}.$$

Solução:



4. Agora, vamos aplicar as fórmulas para derivada numéricas de ordem 2 para as funções abaixo. Novamente, crie um plot para cada função, para agora comparar o erro ao calcular a derivada segunda conforme variamos função e também variamos h.

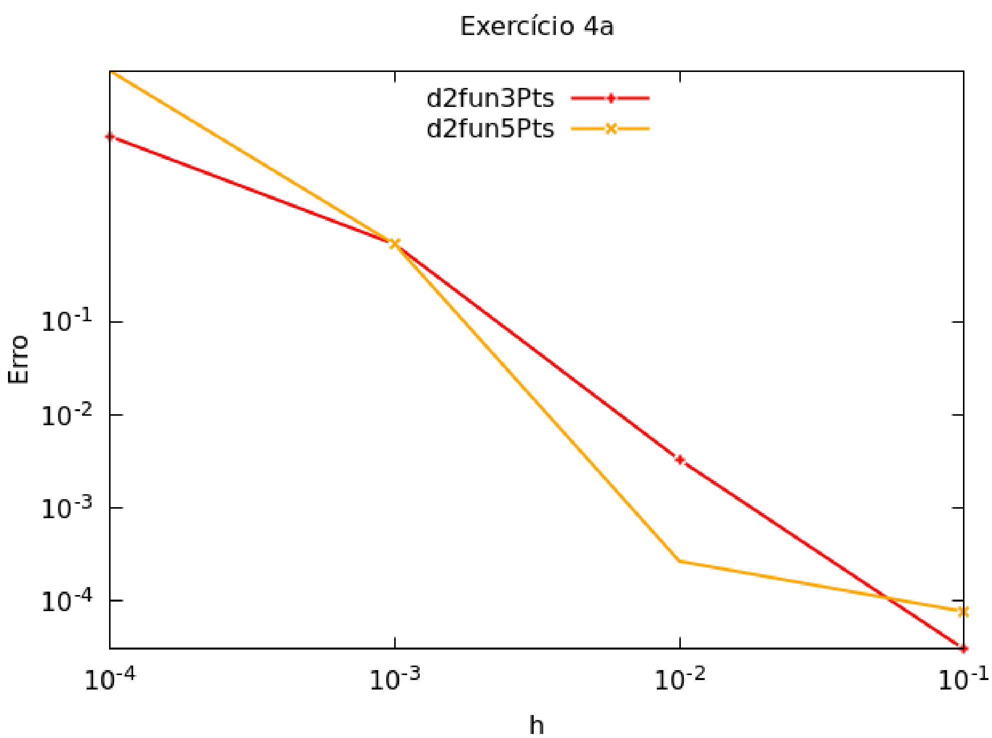
   (a) Função horária da posição é

   $$x(t) = x_0 + v_0 t + \frac{1}{2} g t^2,$$

   aplique a derivada no ponto $t = 1$, com $x_0 = 0m$, $v_0 = 1m/s$, $g = 9,81m/s^2$. A derivada exata é

   $$\frac{d^2x}{dt^2} = g = 9,81.$$

   Solução:



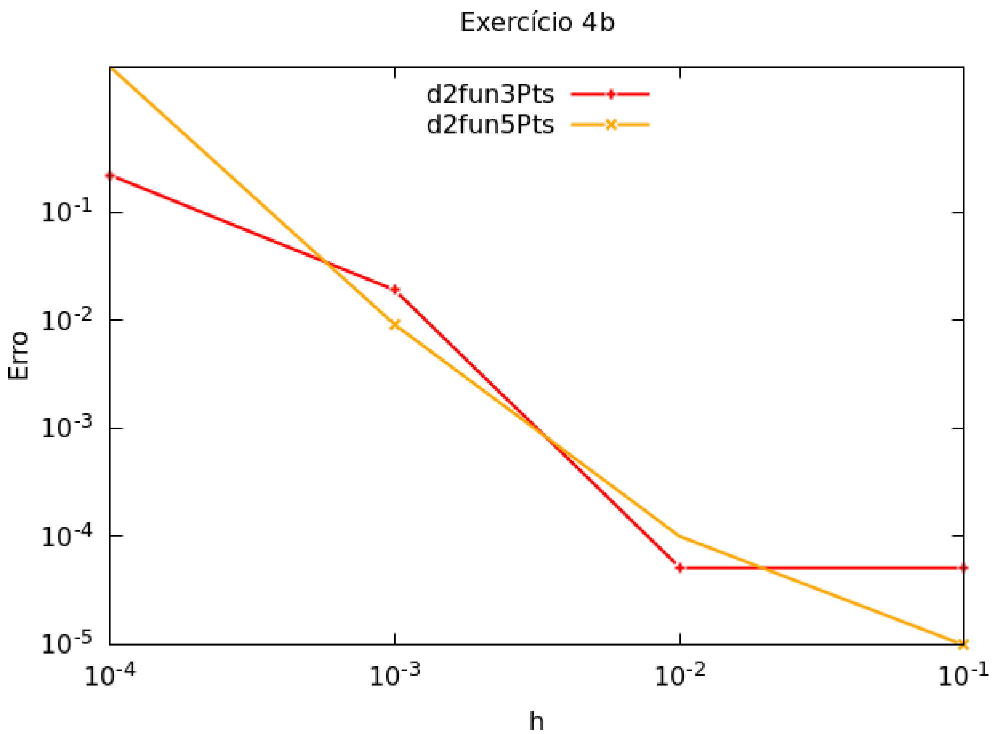
(b) Para a função horária do oscilador harmônico

$$x(t) = A\cos(\omega t + \phi),$$

aplique a derivada no ponto $t = 1$, com $A = 1m$ é a amplitude, $\phi = 0$ é a fase e $\omega = 0,5s^{-1}$ é a frequência angular. A derivada exata é

$$a(t) = -A\omega^2 \cos(\omega t + \phi).$$

Solução:



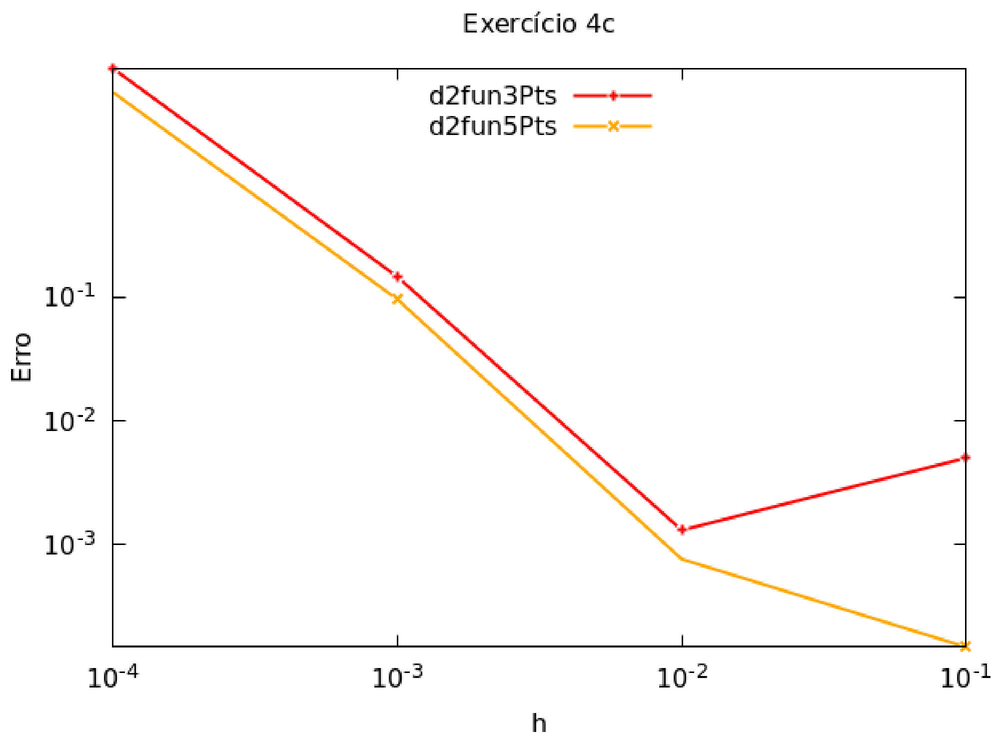
(c) O ln da função de partição do modelo do sólido de Einstein pode ser escrita como

$$\ln|Z(T)| = \ln\left|\frac{\exp\left(-\frac{1}{2}\beta\hbar\omega\right)}{1-\exp\left(-\beta\hbar\omega\right)}\right|,$$

aplique a derivada para o ponto $\beta = 1$. Considere $\hbar\omega = 0,5$. A derivada exata de ordem 2 em relação a β é

$$\frac{d^2 \ln|Z(\beta)|}{d\beta^2} = \left\langle \left(E - \langle E\rangle\right)^2 \right\rangle = \frac{(\hbar\omega)^2 \exp(\beta\hbar\omega)}{\left[\exp(\beta\hbar\omega) - 1\right]^2},$$

Com $\left\langle \left(E - \langle E\rangle\right)^2 \right\rangle$ conhecida também como a variância na medida da energia E.
Solução:



5. Vamos as conclusões deste estudo:

   (a) O que aconteceu com o valor do erro absoluto quando h foi tomado muito pequeno?

   Solução

   O valor do erro explodiu, ocorrido por causa do cancelamento catastrófico. Portanto, não devemos tomar o valor de h tão pequeno.

   (b) A fórmula de 5 pontos se mostrou melhor que todas as demais para qualquer valor de h ou função testada?

   Solução

   Não, a fórmula de 3 pontos tomou a "liderança"em muitas ocasiões, no geral a de 5 pontos é melhor na faixa 10^{-1} a 10^{-2}

   (c) E para diferentes funções, considerando $h = 10^{-2}$ a fórmula de 5 pontos se mostrou superior frente as demais?

   Solução Em todos, menos em alguns casos em que envolviam a função horária da posição, que tinha um comportamento quadrático, o motivo é que a fórmula de 3 pontos funciona melhor para polinômios de grau dois, a fórmula é obtida supondo que a função seja bem aproximada por um polinômio deste tipo. As exceções foram: 3a, 3b e 4a.

   (d) Para diferentes funções, com $h = 10^{-4}$, você destacaria algum método como melhor, ou não? Justifique a resposta.

   Solução

   Não, pois parece que todos convergem em 10^{-4}, talvez o motivo disso seja a precisão, uma vez que foi considerado os valores como reais (4 dígitos), ou talvez por isso esse seja o padrão. Poderia num futuro considerar mais casas e ver o resultado

   (e) Se fosse pedido para você calcular a derivada numérica de uma certa função, qual método fosse escolheria? E qual seria o valor de h?

   Solução

   Livre, mas esperas-se que a resposta seja fórmula de 3 pontos no geral para $= 10^{-2}$ ou então fórmula de 5 pontos para $h = 10^{-1}$

   (f) Você deve ter se perguntado por qual razão mudados a faixa de h, na derivada segunda, bem como você deve ter visto nos gráficos gerados, o erro diverge rapidamente. Você suspeira o motivo da imprecisão aumentar com o aumento de h mais rápido do que no cálculo da derivada de ordem 1? Em caso afirmativo, comente.

   Solução

   Porque agora h vai com o quadrado, o que na derivada primeira se comportaria como 10^{-3}, na derivada segunda ele vai com 10^{-6}, este seria o motivo da "divergência"ser mais rápida neste. O melhor é pegar h não tão pequeno, algo em torno de 10^{-1} é suficiente.