3. Derivadas

3.1. Aproximações para derivadas

Vários problemas em física exigem o cálculo da derivada de uma função. Este é um problema comum na solução numérica de equações diferenciais ou na determinação do mínimo ou zero de uma função. Ao contrário do processo de integração que pode ser muito difícil, nós sabemos como calcular uma derivada. O processo pode ser tedioso, mas sempre podemos usar a definição para calcular a derivada (neste exemplo em uma dimensão)

$$f'(x) = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x} \quad . \qquad \textit{Eq. 3.1}$$

Existem teoremas que garantem a existência e unicidade da derivada em várias circunstâncias, mas este não é assunto para este curso.

A pergunta que vem à mente é "Se sabemos calcular a derivada, por que necessitamos de uma aproximação numérica". Existem várias razões. Em muitos casos podemos obter uma fórmula exata para a derivada, mas ela pode ser tão complicada que seu cálculo pode demandar um longo tempo. Em outros casos não temos a forma analítica da função, mas sim um conjunto de pontos em uma tabela. Finalmente, a solução numérica de uma equação diferencial sempre envolve a estimativa numérica de derivadas. Dada sua importância vamos dedicar esta parte do curso para discutir alguns métodos de uso geral para a aproximação numérica de derivadas.

3.2. Série de Taylor

Durante este curso nós vamos usar muitas vezes a representação de uma função em sua série de Taylor. O teorema de Taylor diz que:

Se f é uma função $(n+1)$ vezes diferenciável em um intervalo aberto contendo os pontos x e $x + \Delta x$, então f tem uma representação

$$f(x + \Delta x) = f(x) + \Delta x f'(x) + \frac{\Delta x^2}{2!} f''(x) + \cdots + \frac{\Delta x^n}{n!} f^{(n)}(x) + R_{n+1}. \qquad \textit{Eq. 3.2}$$

onde R_{n+1} é um erro da ordem Δx^{n+1}. Este resultado é de importância central para o que vamos discutir a seguir.

3.3. Aproximações para derivadas de primeira ordem

Uma aproximação simples para a derivada consiste em cortar a série da equação Eq.3.2, tomando os dois primeiros termos como uma aproximação

$$f(x + \Delta x) = f(x) + \Delta x f'(x) + \Delta x^2 . \qquad \textbf{Eq. 3.3}$$

De modo que, omitindo termos de ordem mais alta, aproximamos

$$f'(x) = \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x} . \qquad \textbf{Eq. 3.4}$$

Uma olhada rápida na fórmula Eq.3.3 mostra que cometemos um erro de ordem Δx^2 usando esta fórmula. Dizemos que esta aproximação é de primeira ordem. Esta fórmula é conhecida como *forward difference* ou *one-sided difference.*

Exercícios 3.1

1. Usando a equação Eq. 3.4 obtenha uma estimativa para as derivadas das funções abaixo nos pontos indicados e analise o erro cometido em cada caso.
   a. $\sin(x), x = 0, \frac{\pi}{4}\ e\ \frac{\pi}{2}$
   b. $e^{-ax^2}, para\ a = 0.1, 1.0\ \ e\ 10.0\ nos\ pontos\ x = 0, 1\ e\ 10$
   c. $\mathrm{tg}(x), x = 0, \frac{\pi}{4}\ e\ \frac{\pi}{2}$

Uma expressão que dá um erro de ordem (Δx^3) pode ser obtida fazendo a *diferença central*

$$\begin{aligned} f(x - \Delta x) &= f(x) - \Delta x f'(x) + \frac{\Delta x^2}{2!} f''(x) \\ f(x + \Delta x) &= f(x) + \Delta x f'(x) + \frac{\Delta x^2}{2!} f''(x) \end{aligned} \qquad \textbf{Eq. 3.5}$$

Subtraindo estas duas equações obtemos

$$f'(x) = \frac{f(x + \Delta x) + f(x - \Delta x)}{2\Delta x} . \qquad \textbf{Eq. 3.6}$$

Exercícios 3.2

Usando a equação *Eq. 3.6* recalcule as derivadas do exercício 1 e compare os resultados.

Existem vários outros métodos para aproximar a derivada em um ponto baseados na interpolação entre valores de uma tabela. Contudo, eles não serão de uso prático neste curso **[Carnahan].**

3.4. Derivadas de ordem mais alta

Em vários problemas nos deparamos com a necessidade de calcular derivadas de ordem mais alta de uma função. Por exemplo, na solução da equação de Schröndinger, equação de calor, equações clássicas de movimento e mais uma grande variedade. Estas derivadas podem ser obtidas de maneira similar ao que foi feito acima. Ao invés de subtrair as equações Eq. 3.5 e Eq. 3.6, vamos somá-las. Obtemos

$$f''(x) = \frac{f(x+\Delta x) - 2f(x) + f(x-\Delta x)}{\Delta x^2} + (\Delta x^4) \quad . \qquad \textbf{Eq. 3.7}$$

Esta expressão dá uma aproximação para a derivada segunda com precisão de ordem Δx^4. Existem técnicas de interpolação para o cálculo de derivadas superiores **[Carnahan]**, no entanto, é preciso ter em mente que à medida que a ordem da derivada aumenta as aproximações vão ficando piores.

Exercícios 3.3

1. Usando a equação Eq. 3.7 calcule as derivadas de segunda ordem das funções do exercício anterior e compare com resultados exatos.

3.5. Derivadas parciais

Problemas em mais que uma dimensão exigem o cálculo de derivadas parciais, em mais de uma dimensão espacial e/ou no tempo. Vamos tratar primeiro as derivadas espaciais. O cálculo destas derivadas segue de perto o que fizemos anteriormente. Suponha que a função $f(x,y)$ é uma função contínua definida em uma região retangular do espaço e seu valor seja conhecido nos pontos $f(x,y)$, $f(x+\Delta x,y), f(x-\Delta x,y), f(x,y+\Delta y), f(x,y-\Delta y)$. Procuramos uma aproximação para a derivada de f no ponto (x,y).

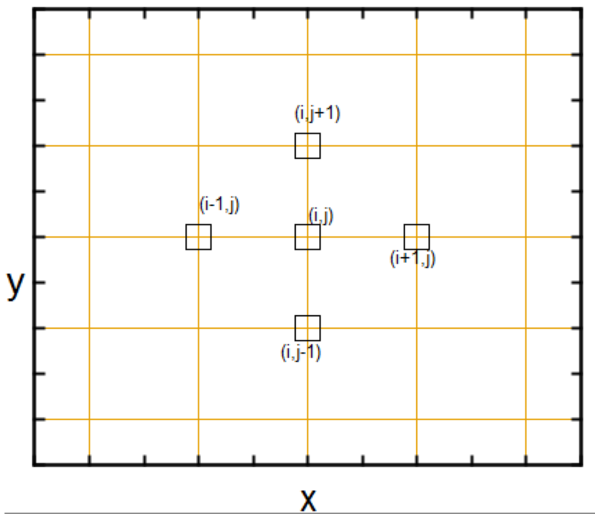


Figura 3.1 *Esquema para a aproximação discreta de uma derivada em duas variáveis*

A Figura 3.1 mostra um esquema para a aproximação numérica das derivas parciais de uma função $f(x,y)$. Nesta figura discretizamos o problema, dividindo o espaço em uma rede de pontos (i,j), de modo que $x = i\Delta x$. Dados Δx e i o ponto x onde procuramos a derivada fica imediatamente determinado. Por simplicidade passaremos a usar a notação $f(x,y) = f(i\Delta x, j\Delta y) = f_{i,j}$. O procedimento segue de perto o que fizemos na seção anterior. Escrevemos a "forward difference" como

$$\frac{\partial f(x,y)}{\partial x} \approx \frac{f(x+\Delta x,y) - f(x,y)}{\Delta x} = f_x(x,y) \quad . \qquad \textit{Eq. 3.8a}$$

De modo similar a "backward diferença"

$$\frac{\partial f(x,y)}{\partial x} \approx \frac{f(x,y) - f(x-\Delta x,y)}{\Delta x} = f_x(x,y) \quad . \qquad \textit{Eq. 3.8b}$$

Somando as duas equações obtemos

$$\frac{\partial f(x,y)}{\partial x} \approx \frac{f(x+\Delta x,y) - f(x+\Delta x,y)}{2\Delta x} = f_x(x,y). \qquad \textit{Eq. 3.8c}$$

Que é conhecida como diferença central. Para calcular a derivada segunda basta usar as equações Eq. 3.8a e Eq. 3.8b:

$$\frac{\partial^2 f(x,y)}{\partial x^2} \approx \frac{\frac{f(x+\Delta x,y) - f(x,y)}{\Delta x} - \frac{f(x,y) - f(x+\Delta x,y)}{\Delta x}}{\Delta x} = f_{xx}(x,y) \qquad \textit{Eq. 3.9}$$

Que fornece imediatamente

$$\frac{\partial^2 f(x,y)}{\partial x^2} \approx \frac{f(x+\Delta x,y) - 2f(x,y) + f(x-\Delta x,y)}{\Delta x^2} \quad . \qquad \textit{Eq. 3.10}$$

Um procedimento similar fornece as derivadas em relação a y.

Para exemplificar, considere a equação de Poisson em duas dimensões:

$$\nabla^2 \varphi(x,y) = \rho(x,y) \quad . \qquad \textit{Eq. 3.11}$$

Nesta equação $\varphi(x,y)$ é o potencial a ser determinado na região de interesse e $\rho(x,y)$ é a distribuição de carga na região. O problema, para ser completo deve vir acompanhado das condições de contorno, isto é, o potencial (condições de Dirichlet) ou derivadas (condições de Newmann) do potencial na região de contorno (condições mais complicadas podem aparecer!). Um possível esquema para a solução numérica deste problema seria:

$$\frac{\varphi(x+\Delta x,y) - 2\varphi(x,y) + \varphi(x-\Delta x,y)}{\Delta x^2} + \frac{\varphi(x,y+\Delta y) - 2\varphi(x,y) + \varphi(x,y-\Delta y)}{\Delta y^2} = \rho(x,y) \quad . \qquad \textit{Eq. 3.12}$$

Ou em termos de i,j

$$\frac{\varphi_{i+1,j} - 2\varphi_{i,j} + \varphi_{i-1,j}}{\Delta x^2} + \frac{\varphi_{i,j+1} - 2\varphi_{i,j} + \varphi_{i,j-1}}{\Delta y^2} = \rho_{i,j} \quad . \qquad \textit{Eq. 3.13}$$

Apesar de parecer simples, a solução deste problema é em geral difícil e muitos métodos para melhorar esta aproximação podem ser encontrados na literatura [**Potter**].

Derivadas no tempo

Em geral, nos problemas em física, procuramos obter as soluções para uma situação onde o sistema evolui no tempo. As equações descrevendo a dinâmica são, comumente, dados em termos de equações integrais ou diferenciais. Como exemplo tomemos a equação de calor, ou equação de difusão, em uma dimensão

$$\frac{\partial u}{\partial t} - k\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0 \quad . \qquad \textbf{Eq. 3.14}$$

Com condição inicial $u(x,0) = f(x)$ e condição de contorno $u(x=0) = u_0$ e $u(x=L) = u_L$. A derivada no tempo é de primeira ordem por esta razão precisamos só de uma condição inicial, enquanto a parte espacial aparece como uma derivada segunda e são necessárias duas condições, que são dados pelas condições de contorno nos pontos inicial e final. Nossa questão é: Como escrever a derivada no tempo? O procedimento é similar ao que foi feito anteriormente. Tomamos:

$$f(x,t+\Delta t) \approx f(x,t) + \Delta t\dot{f}(x,t) \quad . \qquad \textbf{Eq. 3.15}$$

Esta é a aproximação mais simples possível e tem o nome de método de Euler. A equação Eq. 3.14, nesta aproximação, é escrita como

$$u(x,t + \Delta t) \approx u(x,t) + k\frac{\Delta t}{\Delta x^2}\left[u(x + \Delta x,t) - 2u(x,t) + u(x - \Delta x,t)\right] \quad . \qquad \textbf{Eq. 3.16}$$

Ou em termos dos índices (i,n). Aqui usamos o índice i para espaço e n para tempo.

$$u_{i,n+1} \approx u_{i,n} + k\frac{\Delta t}{\Delta x^2}\left[u_{i+1,n} - 2u_{i,n} + u_{i-1,n}\right] \quad . \qquad \textbf{Eq. 3.17}$$

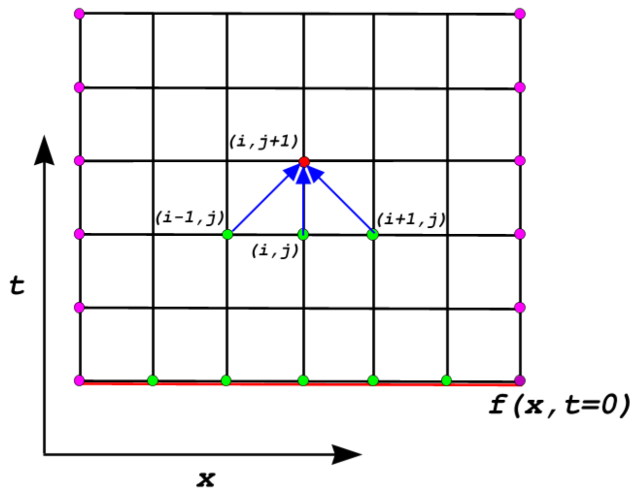


Figura 3.2 *Observe na figura a condição inicial f(x,t=0). Os pontos em verde mostram isto em nosso universo discreto. As condições de contorno, que se mantêm ao longo da evolução temporal, estão marcadas em ciano. Para obter o ponto f_(i,j+1) precisamos conhecer* $f_{i,n}$, $f_{i-1,n}$ e $f_{i+1,n}$.

Um possível algoritmo para a solução de equações diferenciais numa forma discreta é como dado abaixo.

Algoritmo 3.1

1. **Divida o comprimento L em pequenos intervalos Δx.**
2. **Crie um vetor, $f0(ix)$ de comprimento $Nx = \frac{L}{\Delta x} + 1$ que conterá, neste primeiro passo os dados inicais.**
3. **Inicialize o vetor com: $f0(0) = f(x = 0, 0), f0(1) = f(x = \Delta x, 0), \ldots, f(x = Nx \times \Delta x, 0)$ Lembre-se que $f0(0)$ e $f(x = Nx \times \Delta x, 0)$ fazem parte do contorno e são fixos durante todo o cálculo**
4. **Crie outro vetor $ft(ix)$ de mesma dimensão de $f0(ix)$ que conterá a evolução temporal.**
5. **Escolha um intervalo de tempo Δt para fazer a evolução.**
6. **Obtenha a primeira linha $ft(ix)$, isto é, a solução no instante de tempo Δt. Armazene em disco, em um arquivo "Evolucao.dat" esta primeira linha.**
7. **Ao terminar faça $f0(ix) = ft(ix)$ e use para determinar a solução da próxima linha ($n = 2 \times \Delta t$). Armazene em "Evolucao.dat" e assim por diante.**

Ao terminar você pode querer alguma coisa a mais que dados numéricos em um arquivo. Para visualizá-los use um programa gráfico. Existem vários programa de visualização disponíveis para quase qualquer plataforma. Uma boa escolha é o **gnuplot** que é bastante flexível, fazendo gráficos de todos os tipos em 2 e 3 dimensões e tem o melhor conjunto de rotinas para análise de dados científicos. Você pode encontrá-lo na referência **[gnuplot]**.

Exercícios 3.4

8. Resolva a equação Eq. 3.14 numericamente para uma barra de comprimento $L = 20.5$ com condições de contorno $u(x = 0, t) = 0$ e $u(x = L, t) = 2.25$ e condição inicial $u(x, t = 0) = 3.25Sin(x)$.
9. A aproximação de Euler para a solução da equação no tempo é de primeira ordem. Você conseguiria elaborar uma melhor aproximação? Como aplicá-la ao problema acima?

3.5 Outros esquemas para o problema de valor inicial

Considere a seguinte equação diferencial ordinária:

$$\frac{df(t)}{dt} = g(t) \quad , \text{ com condição inicial } f(t = 0) = f_0 \qquad \textit{Eq. 3.18}$$

Esta equação pode ser formalmente integrada:

$$\int_0^t \frac{df(t')}{dt'} dt' = \int_0^t g(t') dt' \quad , \qquad \textit{Eq. 3.19}$$

$$f(t) = f(0) + \int_0^t g(t') dt' \quad . \qquad \textit{Eq. 3.20}$$

Como $g(t)$ é uma função conhecida, a integral do lado direito da equação Eq. 3.20 pode ser feita usando as técnicas que vimos na primeira parte do curso. A ideia é bastante simples. Novamente discretizamos o tempo, $T_{total} = N\Delta t$. A solução $f(t)$ é obtida para cada pequeno intervalo

$$
\begin{gathered}
f(\Delta t) = f(0) + \int_0^{\Delta t} g(t')dt' \\
f(2\Delta t) = f(\Delta t) + \int_0^{2\Delta t} g(t')dt' \\
\dots\dots\dots \\
f(N\Delta t) = f\big((N-1)\Delta t\big) + \int_0^{N\Delta t} g(t')dt'
\end{gathered}
\qquad \textbf{Eq. 3.21}
$$

As integrais podem ser feitas usando o esquema mais adequado à situação.

3.6 Equações diferenciais de segunda ordem no tempo

Considere o movimento de uma partícula de massa m sob ação de uma força $\vec{F}$. A equação clássica descrevendo sua dinâmica é pela lei de Newton:

$$
m\frac{d^2\vec{r}}{dt^2} = \vec{F} \quad , \qquad \textbf{Eq. 3.22}
$$

com condições iniciais e de contorno adequadas. Em geral a força $\vec{F}$ é descrita por um potencial V, de modo que

$$
\vec{F} = -\vec{\nabla}V \quad . \qquad \textbf{Eq. 3.23}
$$

Observe que nesta equação a derivada no tempo é de segunda ordem. Para integrá-la a transformamos em duas equações diferenciais de primeira ordem

$$
\begin{gathered}
\frac{d\vec{v}(t)}{dt} = -\vec{\nabla}V \quad , \\
\frac{d\vec{r}(t)}{dt} = \vec{v}(t) \quad .
\end{gathered}
\qquad \textbf{Eq. 3.24}
$$

Agora é possível aplicar as técnicas aprendidas anteriormente. Como exemplo vamos tomar um problema unidimensional.

$$
\begin{gathered}
\frac{dv(t)}{dt} = -\frac{1}{m}\frac{dV}{dx} = F \\
\frac{dx(t)}{dt} = v(t)
\end{gathered}
\qquad \textbf{Eq. 3.25}
$$

Com condições iniciais, $x(0) = x_0$ e $v(0) = v_0$. Usando a equação Eq. 3.15 temos imediatamente:

$$v_{n+1} = v_n + \frac{\Delta t}{m} F(x_n)$$
$$x_{n+1} = x_n + \Delta t v_n$$ ***Eq. 3.26***

Algoritmo 3.2

Obtenha v_1 e x_1 da condições iniciai v_0 e x_0 usando Eq. 3.26
Conhecendo v_1 e x_1 continue até obter v_N e x_N

Exercícios 3.5

1. Resolva numericamente a equação diferencial
$$\frac{df}{dt} = -f + \sin(t) + \cos(t)$$
com condição inicial: $f(t = 0) = 1$.
A solução, analítica, desta equação é $f(t) = \sin(t) + e^{-t}$. Compare seu resultado com a solução analítica.

2. O modelo populacional mais simples é conhecido como Lotka-Volterra. Este modelo procura descrever um ambiente fechado onde existem presas e predadores, supondo o seguinte cenário:
   - A espécie predadora é completamente dependente de uma única presa como fonte de alimento
   - A presa tem a seu dispor uma quantidade ilimitada de alimento

   Se x e y são os números de presas e predadores, respectivamente, existentes em um determinado instante de tempo t. O modelo Lotka-Volterra estabece as seguintes equações diferenciais acopladas para as populações
$$\frac{dx}{dt} = ax - bxy$$
$$\frac{dy}{dt} = -c + pxy$$

Onde a, b, c e p são constantes positivas. Neste modelo estas quantidades representam:

a: aumento da população de presas sem predadores
b: taxa com que as presas são predadas
c: taxa de reprodução dos predadores
p: taxa de mortalidade dos predadores

a. Na equação Lotka-Volterra, considere o modelo sem predadores. Resolva numericamente a equação e descubra como é o aumento da população de presas.

b. Mantenha o número de predadores constante e resolva numericamente as equações.
c. Mantenha o número de presas constante e resolva numericamente as equações.
d. Mantenha fixos a, b e c e resolva as equações para alguns valores de p. (Tente $p = 0.1, 05, 1.0$).
e. Faça gráficos $x \times t$, $y \times t$ e $x \times y$ para seus resultados

Habitue-se a sempre fazer uma figura com seus resultados. A visualização é uma ferramenta sempre essencial.

3. *O oscilador harmônico*. Use as fórmulas Eq. 3.26 para obter a solução numérica das equações de movimento para o oscilador harmônico em uma dimensão com condições iniciais $x_0 = 2.0$ e $v_0 = 1.0$. O potencial é $V = \frac{1}{2}kx^2$. Varie $k = 0.1, 0.5, 1.0$. Faça um gráfico com suas soluções para $x \times t$, $v \times t$ e $x \times v$. Analise seus resultados.

3.8 Métodos de ordem mais alta para problemas de valor inicial

3.8.1 Equações de Movimento

Em muitos casos o método de Euler, que é de primeira ordem em Δt não dá a precisão adequada para a solução numérica de um problema. Existem, felizmente, outros métodos de ordem mais alta em Δt que são relativamente simples. Um dos mais usados em aplicações de dinâmica molecular é conhecido como método de Verlet e sua variação, o método de Beeman [**Verlet**]. Considere as equações Eq. 3.5, com x como uma função de t:

$$\begin{aligned} x_{n+1} &= x_n + \Delta t v_n + \frac{\Delta t^2}{2} a_n + \cdots \\ x_{n-1} &= x_n - \Delta t v_n + \frac{\Delta t^2}{2} a_n - \cdots \end{aligned} , \qquad \textit{Eq. 3.27}$$

onde substituímos, $v = \frac{dx}{dt}$ e $a = \frac{1}{m}F(x)$. Somando estas duas equações temos imediatamente

$$x_{n+1} = 2x_n - x_{n-1} + \Delta t^2 a_n + \cdots \qquad \textit{Eq. 3.28}$$

Subtraindo as duas equações obtemos

$$v_n = \frac{x_{n+1-}x_{n-1}}{2\Delta t} + \cdots \qquad \textit{Eq. 3.29}$$

Neste caso o erro associado ao algoritmo é de quarta ordem em x e terceira ordem na velocidade v. Contudo nada é de graça, ganhamos na precisão, mas agora o algoritmo precisa de dois pontos: x_{n-1} e x_n para fazer a evolução. Como inicialmente temos somente um ponto, correspondendo à condição inicial é necessário usar algum outro método para obter um segundo ponto. (Dizemos que o algoritmo não é "self starting"). Isto, contudo, pode ser remediado da seguinte forma. Use a equação Eq. 3.29 e resolva para x_{n-1}

$$x_{n-1} = x_{n+1} - 2\Delta t v_n \qquad \textit{Eq. 3.30}$$

Use esta equação para eliminar x_{n-1} na equação Eq. 3.28

$$x_{n+1} = 2x_n - x_{n+1} + 2\Delta t v_n + \Delta t^2 a_n \quad , \qquad \textit{Eq. 3.31}$$

e resolva para x_{n+1}

$$x_{n+1} = x_n + \Delta t v_n + \frac{\Delta t^2}{2} a_n \quad . \qquad \textit{Eq. 3.32}$$

Agora, use a equação Eq. 3.30 para escrever uma expressão para v_{n+1}

$$v_{n+1} = \frac{x_{n+2-}x_n}{2\Delta t} \quad , \qquad \textit{Eq. 3.33}$$

e a equação Eq. 3.32 para escrever uma expressão para x_{n+2}

$$x_{n+2} = x_{n+1} + \Delta t v_{n+1} + \frac{\Delta t^2}{2} a_{n+1} \quad . \qquad \textit{Eq. 3.34}$$

Substitua esta expressão em v_{n+1}

$$v_{n+1} = \frac{x_{n+1} + \Delta t v_{n+1} + \frac{\Delta t^2}{2} a_{n+1} - x_n}{2\Delta t} \qquad \textit{Eq. 3.35}$$

Resolvendo para v_{n+1}, obtemos

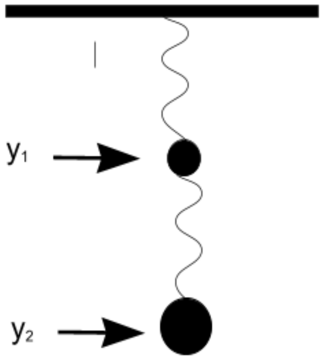
$$v_{n+1} = v_n + \frac{1}{2}(a_n + a_{n+1})\Delta t \quad (2.25.b) \qquad \textit{Eq. 3.36}$$

As equações Eq. 3.32 e Eq. 3.36 formam um par que necessitam apenas dos pontos (v_n, x_n) uma vez que a força (ou aceleração) é conhecida em todos os pontos.

Exercícios 3.6

1. Use as equações Eq. 3.32 e Eq. 3.36 para resolver o problema (1) da lista 3.5. Compare aqueles resultados com estes.

2. Considere que duas partículas de massas m_1 e m_2 interagem via potencial do tipo $\frac{a}{r}$. Use as equações Eq. 3.32 e Eq. 3.36 para resolver as equações de movimento deste sistema com condições iniciais $v(0) = v_0$ e $r(0) = r_0$, com $r_0 = 1.0, 2.0$ e $v_0 = 1.0, 10.0$.



3. Considere dois pêndulos acoplados por molas e sob ação da gravidade, como mostra a figura ao lado. O hamiltoniano para este sistema é dado por:
$H = \frac{1}{2}m_1\dot{y}_1^2 + \frac{1}{2}m_2\dot{y}_2^2 + m_1 g(h_1 + y_1) + m_2 g(h_2 + y_2) + \frac{1}{2}k_1 y_1^2 + \frac{1}{2}k_2 y_2^2$,
onde h_1 e h_2 são as posições de equilíbrio das molas 1 e 2 respectivamente. Escolha valores razoáveis para h_1, h_2, m_1, m_2 e as constantes de mola e obtenha, numericamente as soluções para y_1 e y_2 como função do tempo considerando as condições iniciais: $v_1(0) = 0.0$ e $v_2(0) = 1.0$ e $y_1(0) = 0$ e $y_2(0) = 2.0$