AULAS 29 E 30: FIS271 - Física Computacional I

Neste Roteiro vamos introduzir o software de computação algébrica Maxima [1]. A maioria dos comandos a serem utilizados estão listados no **Guia Rápido**, porém os *sites* de ajuda também devem ser consultados [2,3].

Exercício 0. Familiarize-se com os comandos básicos do Maxima. Em particular, teste carregar e executar comandos tanto via linha de comando quando através da subrotina intrínseca do Maxima:

```
batch("nome_do_arquivo");
```

Todos os items dos exercícios deverão ser escritos em arquivos em diretórios separados para serem carregados no Maxima via `batch`. Resultados, comentários e discussões deverão ser apresentados no arquivo *.pdf* do Trabalho.

Exercício 1. Representações numéricas e simbólicas do Maxima.
a) Definindo `x:%pi` e `y:float(x)`, compare os resultados `%pi/x`, `%pi/y`, `1.0*%pi/x`, `1.0*%pi/y`, `float(%pi)/x` e `float(%pi)/y`.
b) Definindo `z:%e^(-1)` e `w:%e^(-1.0)`, compare os resultados `%e*z`, `%e*w`, `float(%e)*z` e `float(%e)*w`.
c) Definindo `a:411` e `b:548`, compare os resultados `c:a/b`, `d1:float(a)/float(b)` e `d2:rationalize(d1)`. Comente pra que serve o comando `rationalize` faz.
d) Definindo `a:10` e `b:100`, compare os resultados `c:a/b`, `d1:float(a)/float(b)` e `d2:rationalize(d1)`. Baseado no Roteiro 03, discuta por que `d2` não é exatamente igual à `c`.
e) Utilizando o comando `limit` e a representação para infinito `inf`, calcule os limites da função $f(x) = \sin(x)/x$ quando $x \to 0$ e da função $g(t) = 2.3e^{-2.3t}$ quando $t \to \infty$.
f) Definindo a função polinomial `p(x):=-4+2*x+0.1*x^2`, utilize o comando `derivative` para obter a derivada simbólica $g(x) = dp(x)/dx$.

Exercício 2. Considere a equação de estado de um gás de van der Waals (como na Prova 1):

$$\left(p + \frac{N^2 a'}{V^2}\right)(V - Nb') = Nk_B T \quad ,$$

onde p, V, T e N são, respectivamente, a pressão (atm), o volume (L), a temperatura (K) e o número de moléculas do gás; k_B é conhecida como constante de Boltzmann e relaciona-se com a constante do gases ideais R e o número de Avogadro N_A como $R = k_B N_A = 8,3144598\,\text{J.K}^{-1}.\text{mol}^{-1}$. Assumindo $n = N/N_A = 2\,\text{mols}$ e as constantes $a = a'N_A^2 = 1.3373\,\text{atm.L}^2.\text{mol}^{-2}$ e $b = b'N_A = 0.0320\,\text{L.mol}^{-1}$, utilize o comando `plot2d` para fazer um ÚNICO gráfico da pressão p (em atm) em função do volume V (em L) que inclua curvas correspondentes à três temperaturas diferentes: $T = 0.9T_c$, $T = T_c$ e $T = 1.1T_c$, sendo $T_c = 8a'/(27k_B b')$ (forneça os valores das temperaturas em Kelvin na legenda do seu gráfico).

Exercício 3. Derivadas e integrais simbólicas.
a) Considere a função posição de uma partícula dada por $x(t) = A\cos(wt + q)$, onde a frequência angular w e fase q devem ser definidos por você. Faça o gráfico de $x(t)$ utilizando a subrotina `plot2d`.
b) Utilize o comando `derivative` para definir as funções velocidade $v(t)$ e aceleração $a(t)$ como sendo a primeira e a segunda derivada de $x(t)$ em relação ao tempo, respectivamente. Inclua gráfico dessas funções e verifique se o comportamento é consistente com o esperado.
c) Utilize o comando `integrate` para obter a função $u(t) = \int a(t')dt'$. Faça um gráfico das funções $v(t)$ e $u(t)$ juntas para comparar os resultados.
c) Considerando a solução analítica $\bar{r}(t)$ do oscilador de Morse (Exercício 2 do Roteiro das Aulas 17 e 18), obtenha algebricamente as funções velocidade $v(t)$ e força resultante $F(t) = a(t)/m$. Faça gráficos dessas quantidades considerando os valores numéricos dos parâmetros definidos no Roteiro das Aulas 17 e 18.

Exercício 4. Utilizando o comando `integrate`, refaça os items o Exercício 2 do Roteiro das Aulas 19 e 20.

Exercício 5. Raízes de funções.
a) Utilizando os comandos `solve` e `plot2d`, refaça os items (a) e (b) do Exercício 1 do Roteiro das Aulas 9 e 10 sobre a função $f(x)$.
b) Utilizando o comando `solve`, refaça o item (a) do Exercício 1 do Roteiro das Aulas 13 e 14 e encontre as raízes dos polinômio característico $p(\lambda)$ definido pelo problema de auto-valores.

Exercício 6. Considere a equação diferencial ordinária (EDO) do modelo de Verhulst descrita no Exercício 2 do Roteiro Aulas 15 e 16. Utilize o comando `ode2` para resolver a EDO e forneça a relação algébrica entre y e t comparando-a com a expressão exata $\bar{y}(t)$.

Exercício 7. Explore a notação vetorial e matricial do Maxima para resolver o item (a) do Exercício 1 do Roteiro das Aulas 11 e 12 correspondente ao circuito elétrico da ponte de Wheatstone. Forneça tanto o resultado algébrico quanto o resultado numérico assumindo os valores dados no item (c). Utilizando a matriz inversa $\mathbf{R}^{-1}$, obtenha o vetor corrente $\mathbf{i}=\mathbf{R}^{-1}\cdot\mathbf{V}$ e comente se a ponte está balanceada ou não.

Referências:

[1] Maxima `http://maxima.sourceforge.net/pt/index.html`
[2] Manual do Maxima `http://maxima.sourceforge.net/docs/manual/maxima_toc.html`
[3] Tutorial: `http://hostel.ufabc.edu.br/~daniel.miranda/maxima/index.html`