LISTA 02: FIS670 - Métodos Computacionais da Física. (Prof. Leandro Rizzi)

Exercício 1. Estimativas numéricas para a derivada de uma função $f(x)$ em relação à variável x podem ser obtidas considerando a expansão em série de Taylor $f(x) = f(x_0) + (x - x_0)f'(x_0) + (x - x_0)^2 f''(x_0)/2! + \ldots$ ao redor de pontos discretizados em intervalos regulares $h = x_{i+1} - x_i$ (vide Ref. [1]). Por exemplo, a derivada $f'_i = f'(x_i)$ pode ser estimada pela expansão de $f(x)$ ao redor de x_i e tomada no ponto x_{i+1}, o que resulta na fórmula de *dois pontos com diferença à direita*:

$$f'_i = \frac{f_{i+1} - f_i}{h} + \mathcal{O}(h) \quad ,$$

onde $\mathcal{O}(h)$ denota todos os termos proporcionais a uma ordem igual ou superior a h, isto é, a ordem do erro local.

a) Considere f_{i+1} e f_{i-1} como os valores da expansão de $f(x)$ ao redor de x_i tomadas nos pontos x_{i+1} e x_{i-1}, respectivamente. Mostre que a derivada de primeira ordem de $f(x)$ pode ser estimada pela fórmula de *três pontos com diferença centrada*

$$f'_i = \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h} + \mathcal{O}(h^2) \quad .$$

b) Considerando os valores f_{i+2}, f_{i+1}, f_{i-1} e f_{i-2} da expansão de $f(x)$ ao redor x_i, é possível obter a fórmula de *cinco pontos com diferença centrada* $f'_i = (f_{i-2} - 8f_{i-1} + 8f_{i+1} - f_{i+2})/12h + \mathcal{O}(h^4)$. Compare as três estimativas acima para obter a derivada de primeira ordem de $f(x) = xe^x$ considerando os valores de $h = 0.10$ e $h = 0.25$. Inclua também gráficos do erro absoluto $\varepsilon(x_i)$ entre os valores obtidos pelas estimativas numéricas e os valores exatos esperados para $f'(x)$ no intervalo $x \in [0, 5]$ (se necessário, use gráficos na escala logarítmica).

c) Considerando o mesmo intervalo, repita a análise de erros do item (b) para a derivada segunda de $f(x) = xe^x$ considerando a fórmula de *três pontos com diferença centrada*

$$f''_i = \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{h^2} + \mathcal{O}(h^2)$$

e a fórmula de *cinco pontos com diferença centrada*: $f''_i = (-f_{i-2} + 16f_{i-1} - 30f_i + 16f_{i+1} - f_{i+2})/(12h^2) + \mathcal{O}(h^4)$.

Exercício 2. Suponha que o deslocamento quadrático médio de uma partícula realizando movimento Browniano em um material viscoelástico possa ser descrito pela expressão $\langle \Delta r^2 \rangle = \xi(1 - e^{-(t/\tau)^p})$.

a) Faça o gráfico log-log de $\langle \Delta r^2 \rangle$ entre os instantes de tempo $t_0 = 10^{-7}$ s e $t_N = 10^{-2}$ s assumindo $\xi = 10^{-4}\,\mu\text{m}^2$, $\tau = 10^{-4}$ s e $p = 0.7$. Considerando $N = 500$, elabore um jeito para que o intervalo entre os tempos t_{k+1} e t_k seja constante na escala logarítmica.

b) Utilize a derivada numérica de *cinco pontos* para obter o expoente β da lei de potência, isto é, $\langle \Delta r^2 \rangle \propto t^\beta$, para distiguir o regime de tempos curtos ($t/\tau \ll 1$) e o regime de tempos longos ($t/\tau \gg 1$):

$$\beta(t) = \frac{d \ln \langle \Delta r^2 \rangle}{d \ln t} \quad .$$

Comente como você resolveu o problema da derivada próximo aos tempos t_0 e t_N.

Exercício 3. Segundo o método de Newton-Raphson (págs. 3 a 5 de [2]), as raízes de uma função $f(x)$ podem ser determinadas iterativamente segundo a expressão

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)} \quad ,$$

como $f'(x_n)$ dada analiticamente ou numericamente (vide Ex. 1). Assim, a partir da escolha de um valor x_0 ("chute inicial"), os valores de x_{n+1} são atualizados iterativamente até possivelmente "convergir" para um valor x^* que satisfaz a igualdade $f(x^*) = 0$. A "convergência" do processo iterativo pode ser determinada de acordo com um critério de parada baseado, por exemplo, no erro relativo do valor da raíz de $f(x)$, isto é, quando $\varepsilon_n = |x_n - x_{n-1}|/|x_n| < \bar{\varepsilon}$.

a) Assumindo $\bar{\varepsilon} = 0.00001$, determine o conjunto de soluções da função $g(x) = [1 + (1 + x^2)\text{sen}(x/5)]/(1 + x^2)$ dentro do intervalo $x \in [-40, 40]$. Comente como você escolheu o(s) valor(es) inicial(is) x_0 e inclua uma tabela com os valores das raízes obtidas.

b) Considerando a mesma função do item (c) e um erro relativo de $\bar{\varepsilon} = 0.00001$, compute o número de passos necessários n^* para que a solução convirja assumindo valores iniciais $x_0 = -2$, $x_0 = -3$ e $x_0 = -4$. Faça os gráficos de x_n versus n com $n = 0, 1, \ldots, n^*$ para cada um dos três casos.

Exercício 4. Assim como os métodos de derivadas numéricas, estimativas para integrais podem ser obtidas a partir de manipulações de expansões da função $f(x)$. Pode-se definir, por exemplo, a relação

$$I_{ab} = \int_a^b f(x)dx = \sum_{i=0}^{n-1} \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx \quad .$$

a) Considerando a expansão $f(x) = f_i + (x - x_i)(f_{i+1} - f_i)/h$, mostre que uma estimativa numérica para a integral da função $f(x)$ no intervalo $h = x_{i+1} - x_i$, pode ser escrita como

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx = \frac{h}{2}(f_{i+1} + f_i) \quad ,$$

a qual é conhecida como a *regra do trapézio* [2]. Qual deve ser a ordem m do erro local cometido, *i.e.*, qual $\mathcal{O}(h^m)$?
b) Utilize a regra do trapézio para estimar a integral I_{ab} da função $f(x) = \mathrm{sen}(x)$ para x no intervalo $a = 0$ e $b = \pi/2$. Calcule o erro absoluto ε entre I_{ab} e o valor exato esperado considerando $n = 100$ e $n = 1000$ intervalos.
c) Refaça a estimativa de I_{ab} e o cálculo de ε do item (b) agora utilizando a *regra de Simpson* [2], isto é,

$$I_{ab} = \int_a^b f(x)dx = \sum_{k=1}^{n/2} I_k \quad ,$$

com $I_k = h(f_{2k-2} + 4f_{2k-1} + f_{2k})/3$. Note que aqui a discretização é definida como $x_i = x_0 + ih$ (com $i = 0, 1, \ldots, n$), sendo n um número par, $x_0 = a$ e $x_n = b$. Tendo em vista que a ordem do erro local para este método é $\mathcal{O}(h^4)$, compare os erros dos resultados obtidos com aqueles os obtidos no item (b).

Exercício 5. Considere um sistema com $n = N/N_A$ mols de átomos aprisionados em uma armadilha óptica à uma temperatura T_1, cuja distribuição de energias cinéticas segue a distribuição de Maxwell-Boltzmann, isto é,

$$g(\varepsilon, T_1) = C(T_1)\varepsilon^{1/2}e^{-\varepsilon/k_BT_1} \quad ,$$

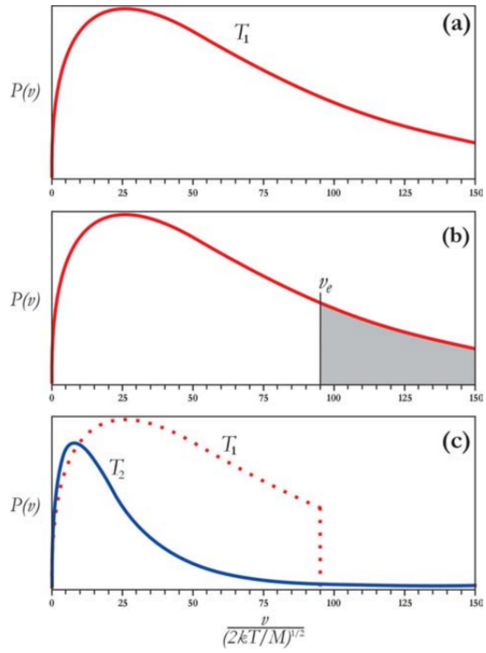
com $C(T_1) = 3.10^{13}/(\sqrt{\pi}(k_BT_1)^{3/2})$, sendo $k_BT_1 > 0$ (J) e $\varepsilon > 0$ (J). Dada a massa atômica M e fazendo $\varepsilon = Mv^2/2$ é possível obter a distribuição de velocidades $P(v)$, a qual é exemplificada na Figura (a) abaixo.

O número total de átomos no sistema pode ser determinado pela normalização da distribuição, isto é, resolvendo a seguinte integral

$$N = \int_0^\infty g(\varepsilon, T_1)d\varepsilon \quad .$$

Como descrito na Ref. [3], é possível retirar um número N_e de átomos do sistema com energias maiores do que um valor ε_e através de um processo de "evaporação". Após a retirada desses átomos, o sistema termaliza à uma temperatura $T_2 < T_1$ que define uma nova distribuição tal como mostra a Figura ao lado. Apesar de não conhecermos o valor de ε_e, sabemos que a temperatura inicial do sistema era de $T_1 = 10\,\mathrm{K}$ e também que 30% dos átomos foram retirados do sistema no processo de evaporação, isto é, $N_e = 0,3N$.
a) Faça um gráfico de $g(\varepsilon, T_1)$ levando em consideração as unidades e ordens de grandeza do número de Avogadro N_A, constante de Boltzmann k_B, energia ε e temperatura T_1 para determinar uma constante C_0 conveniente para reescalar a distribuição $g(\varepsilon, T_1)$ e mantê-la dentro da precisão numérica do seu programa.
b) Calcule numericamente o número de átomos $N_s = N - N_e$ que sobraram no sistema notando que integrais impróprias podem ser realizadas fazendo a seguinte mudança de variáveis, $x = 1/y$ e $dx = -dy/y^2$, e dividindo o limite de integração em duas partes [2], isto é,

$$\int_0^\infty f(x)dx = \int_0^a f(x)dx + \int_0^{1/a} f(1/y)dy/y^2 \quad .$$



Distribuição de velocidades antes de depois da retirada de N_e átomos. Figura extraída de [3].

Assuma o limite analítico de $f(1/y)/y^2$ quando $y \to 0$. Compare a estimativa de N_s feita utilizando a *regra de Simpson* considerando diferentes valores de a (por exemplo: 1.0, 2.0, 3.0 e 4.0), com o resultado analítico exato esperado.

Referências:
[1] J. D. Faires e R. L. Burden. Numerical Methods (3rd ed.)
[2] C. Scherer. Métodos Computacionais da Física (2nd ed.,2010).
[3] A. H. Iavaronni *et al.*. Evaporação em armadilhas atômicas e as temperaturas mais baixas do Universo. Rev. Bras. Ens. Fís. 29 (2007) 209.