CONTEÚDO

DERIVADAS

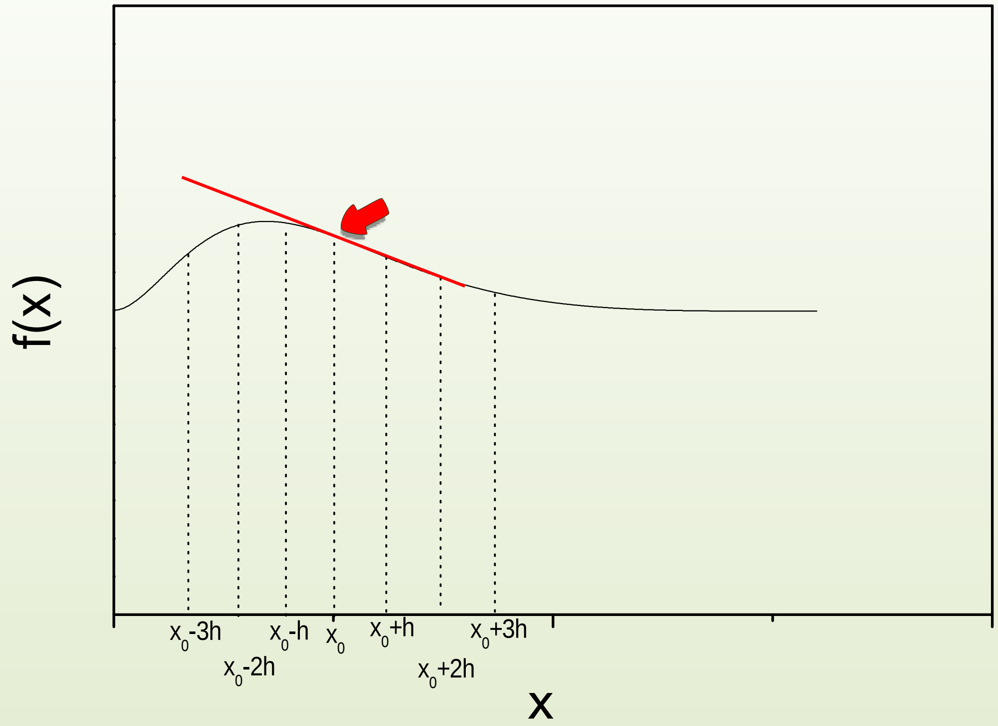
QUADRATURAS

ZEROS DE FUNÇÕES

PROJETO 1 – QUANTIZAÇÃO SEMI-CLÁSSICA DAS VIBRAÇÕES DE MOLÉCULAS DIATÔMICAS

FÍSICA COMPUTACIONAL

DERIVADAS



Utilizamos a serie de Taylor para expandir f em uma vizinhança de x_0

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!}(x - x_0)^n$$

FÍSICA COMPUTACIONAL

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!}(x-x_0)^n$$

$$f(x) = f(x_0) + (x-x_0)f'(x_0) + \frac{(x-x_0)^2}{2}f''(x_0) + \frac{(x-x_0)^3}{6}f'''(x_0) + o(x-x_0)^4$$

Em $x = x_0 \pm h \quad \Rightarrow \quad x - x_0 = \pm h$

$$f(x_0 \pm h) = f(x_0) \pm hf'(x_0) + \frac{h^2}{2}f''(x_0) \pm \frac{h^3}{6}f'''(x_0) + o(h^4)$$

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0+h) - f(x_0)}{h} + \boxed{\frac{-\frac{h^2}{2}f''(x_0) - \frac{h^3}{6}f'''(x_0) + o(h^4)}{h}}$$

Fórmulas de 2 pontos

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0+h) - f(x_0)}{h} + o(h)$$

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0) - f(x_0-h)}{h} + o(h)$$

Assumem que f pode ser bem aproximada por uma função linear no intervalo $x = x_0$ e $x = x_0 \pm h$

Exata para polinômios de ordem 1

FÍSICA COMPUTACIONAL

Vamos tentar melhorar a precisão:

$$f(x_0 \pm h) = f(x_0) \pm hf'(x_0) + \frac{h^2}{2}f''(x_0) \pm \frac{h^3}{6}f'''(x_0) + o(h^4)$$

$$f(x_0 + h) - f(x_0 - h) = f(x_0) - f(x_0) + hf'(x_0) + hf'(x_0) + \ldots$$

$$f(x_0 + h) - f(x_0 - h) = 2hf'(x_0) + \frac{h^3}{3}f'''(x_0) + o(h^5)$$

$$\Downarrow$$

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0 - h)}{2h} \boxed{- \frac{h^2}{6}f'''(x_0) + o(h^4)}$$

Fórmulas de 3 pontos

$$\boxed{f'(x_0) \approx \frac{f(x_0 + h) - f(x_0 - h)}{2h} + o(h^2)}$$

Exata para polinômios de ordem 2

FÍSICA COMPUTACIONAL

Tentando melhorar ainda mais a precisão:

$$f(x) = f(x_0) + (x - x_0)f'(x_0) + \frac{(x - x_0)^2}{2} f''(x_0) + \frac{(x - x_0)^3}{6} f'''(x_0) + o(x - x_0)^4$$

Em $x = x_0 \pm 2h$

$$f(x_0 \pm 2h) = f(x_0) \pm 2hf'(x_0) + \frac{4h^2}{2} f''(x_0) \pm \frac{4h^3}{3} f'''(x_0) + \frac{2h^4}{3} f^{IV}(x_0) + o(h^5)$$

$$f(x_0 + 2h) - f(x_0 - 2h) = 4hf'(x_0) + \frac{8h^3}{3} f'''(x_0) + o(h^5) \qquad (1)$$

$$f(x_0 + h) - f(x_0 - h) = 2hf'(x_0) + \frac{h^3}{3} f'''(x_0) + o(h^5) \qquad (2)$$

De (2) x 8 - (1)

Fórmulas de 5 pontos

$$\boxed{f'(x_0) \approx \frac{f(x_0 - 2h) - 8f(x_0 - h) + 8f(x_0 + h) - f(x_0 + 2h)}{12h} + o(h^4)}$$

Exata para polinômios de ordem 4

FÍSICA COMPUTACIONAL

SEGUNDA DERIVADA

$$f(x) = f(x_0) + (x - x_0)f'(x_0) + \frac{(x - x_0)^2}{2} f''(x_0) + \frac{(x - x_0)^3}{6} f'''(x_0) + o(x - x_0)^4$$

$$f(x_0 \pm h) = f(x_0) \pm hf'(x_0) + \frac{h^2}{2} f''(x_0) \pm \frac{h^3}{6} f'''(x_0) + o(h^4)$$

$$\Downarrow$$

$$f(x_0 + h) + f(x_0 - h) = 2f(x_0) + h^2 f''(x_0) + o(h^4)$$

$$\Downarrow$$

$$\boxed{f''(x_0) \approx \frac{f(x_0 - h) - 2f(x_0) + f(x_0 + h)}{h^2} + o(h^2)}$$

Exata para polinômios de ordem 3

FÍSICA COMPUTACIONAL

Ver Pasta

Exemplo: $f(x) = xe^{-x} - \ln x$ $\quad f'(1) = ?$

$$f'(x) = (e^{-x} - xe^{-x} - \frac{1}{x}) \Rightarrow f'(1) = (e^{-1} - e^{-1} - 1) = -1$$

Calcular a derivada até h < 000001:

float: até 7 casas decimais

double: até 15 casas decimais

Fórmulas de 3 pontos

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0 + h) - f(x_0 - h)}{2h} + o(h^2)$$

h = 000001 $\Rightarrow$ $f\,(x_0 + h) = f\,(1.000001)$

$$\ln(1.000001) = 0.0000009999995000$$

FÍSICA COMPUTACIONAL

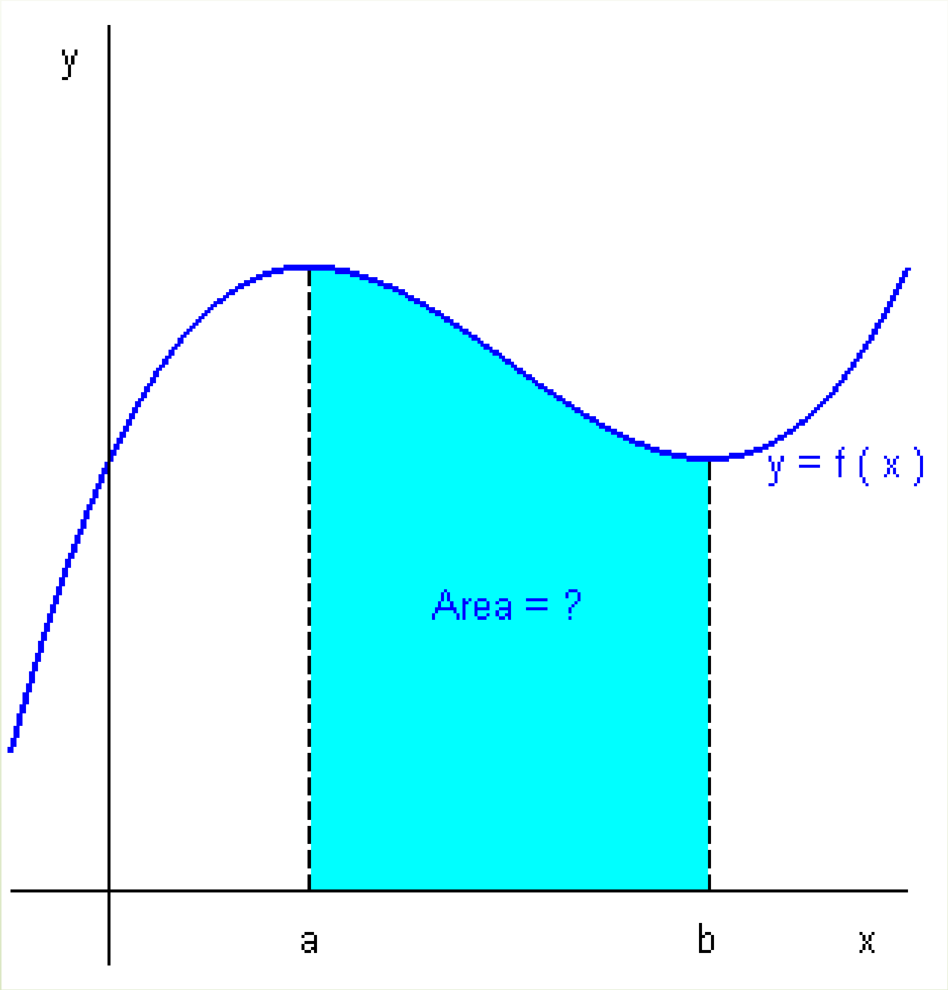
Exemplo: $f(x) = xe^{-x} - \ln x$

$$f'(x) = (e^{-x} - xe^{-x} - \frac{1}{x}) \Rightarrow f'(1) = (e^{-1} - e^{-1} - 1) = -1$$

Calcular a derivada até $|\text{deriv}-\text{deriv}_{ant}| < 10^{-10}$

FÍSICA COMPUTACIONAL

QUADRATURAS



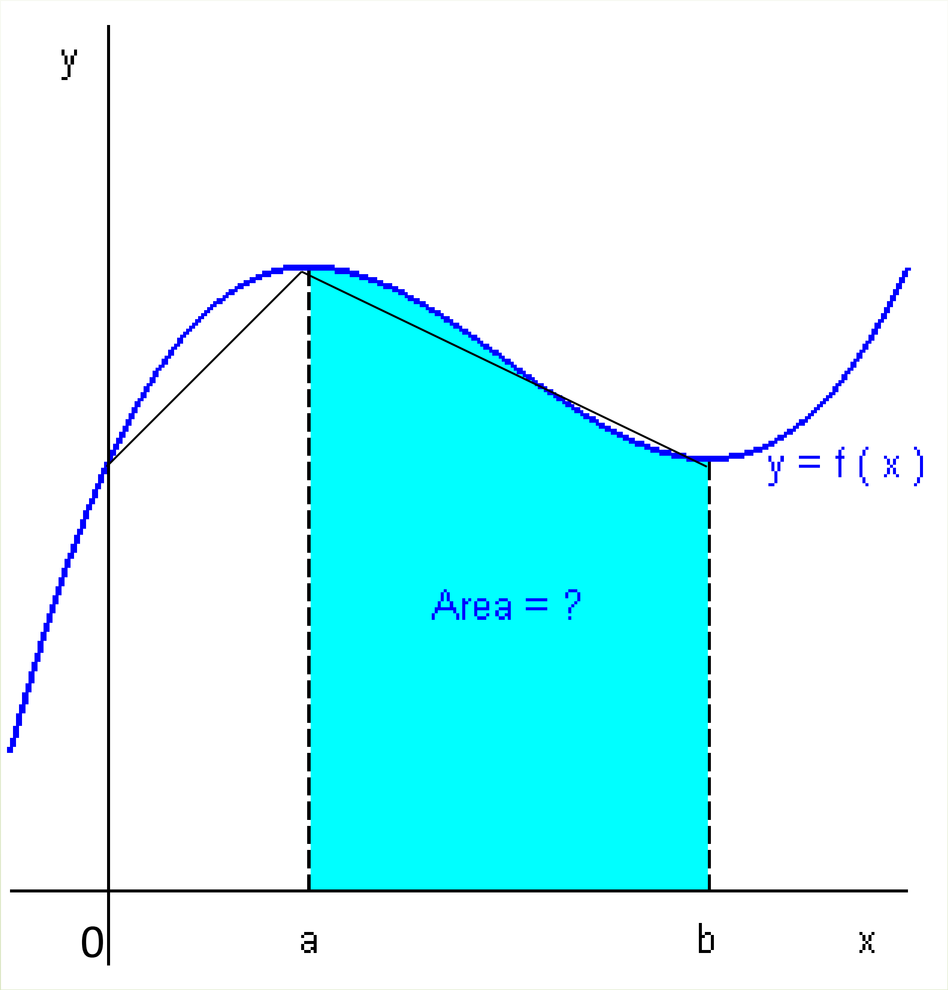
$$\int_a^b f(x)\,dx$$

Todos os Métodos

Aproximar a função f(x) no intervalo a-b por uma função cuja área seja conhecida

FÍSICA COMPUTACIONAL

Por exemplo: Uma função linear



$$\int_a^b f(x)\,dx = (b-a)\,\frac{f(a)+f(b)}{2}$$

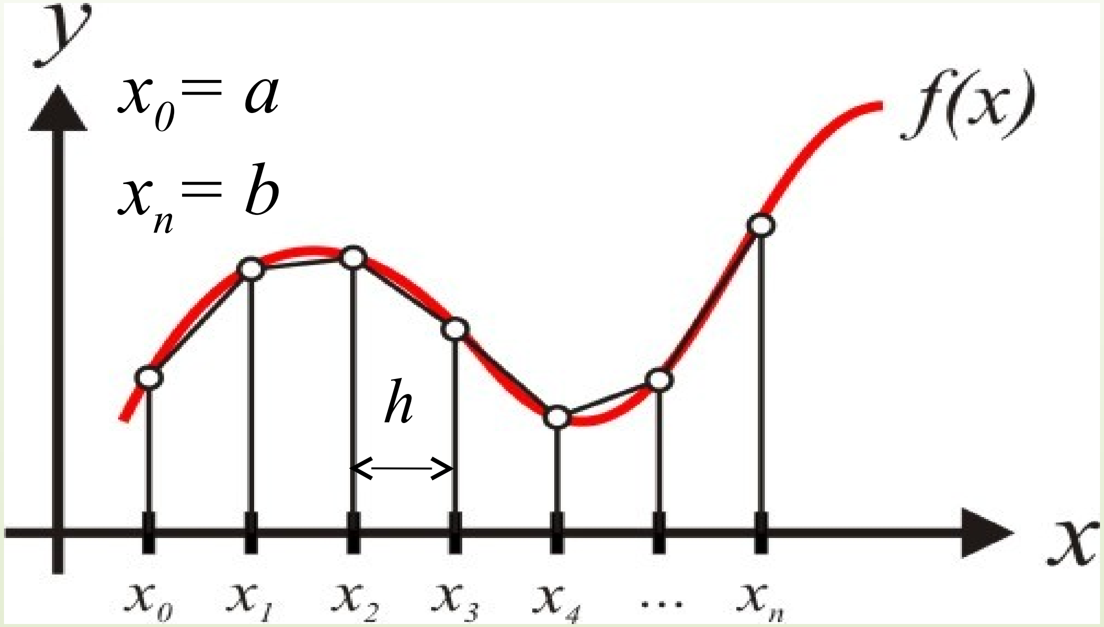
O erro pode ser muito grande dependendo do tipo de função

Veja, por exemplo, o intervalo 0 - a

FÍSICA COMPUTACIONAL

Método dos trapézios (Aproximação linear)

Solução: Dividir o intervalo de integração a-b em n intervalos iguais de largura h

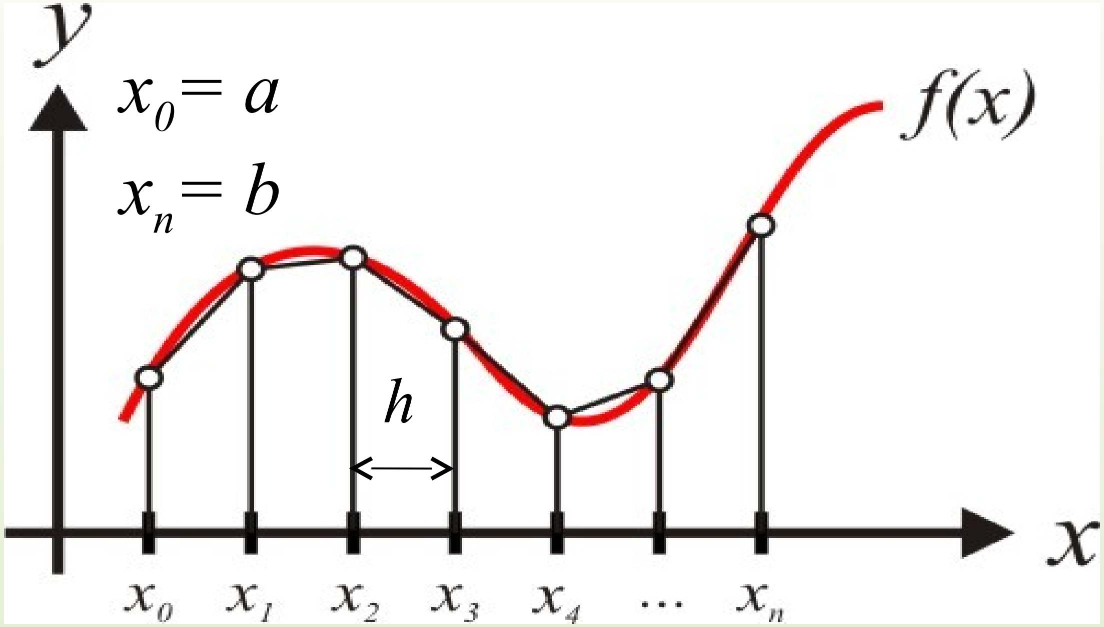


$$\int_a^b f(x)\,dx = \frac{h}{2}\sum_{i=0}^{n-1} f(x_i) + f(x_{i+1})$$

$$\int_a^b f(x)\,dx = \frac{h}{2}(f(x_0) + 2f(x_1) + 2f(x_2) + \ldots\ldots + 2f(x_{n-1}) + f(x_n))$$

FÍSICA COMPUTACIONAL

Método dos trapézios (Aproximação linear)



$$\int_a^b f(x)\,dx = \frac{h}{2}\left(f(x_0) + 2f(x_1) + 2f(x_2) + \ldots\ldots + 2f(x_{n-1}) + f(x_n)\right)$$

Exata para polinômios de 1ª ordem

$$\boxed{\int_a^b f(x)\,dx = h\frac{f(a)+f(b)}{2}\sum_{i=1}^{n-1} f(a+ih)}$$

Método dos trapézios (Erro da aproximação)

$$E = \int_a^b f(x)\,dx - h\frac{f(a)+f(b)}{2}\sum_{i=1}^{n-1} f(a+ih)$$

Existe um número “c”, entre a e b, tal que:

$$E = -\frac{h^2}{12}(b-a)\,f''(c)$$

Como não conhecemos a priori “c”, pode-se escolher o número que maximize $f''(c)$

$$E \leq \left| -\frac{h^2}{12}(b-a)\,f''(c) \right|$$

FÍSICA COMPUTACIONAL

Ver Pasta

Método dos trapézios (Exemplo)

Calcular a integral entre 0 e 1 da função f(x) = x^4 com diferentes quantidades de passos.

$$f(x) = x^4$$

$$\int_0^1 x^4 dx = \left.\frac{x^5}{5}\right|_0^1 = \frac{1}{5} = 0.2$$

$$E \leq \left| -\frac{h^2}{12}(b-a) f''(c) \right|$$

$$\left.\begin{aligned} f'(x) &= 4x^3 \\ f''(x) &= 12x^2 \\ c &= 1 \\ f''(c) &= 12 \end{aligned}\right\} E \leq h^2$$

Método dos trapézios (Exemplo)

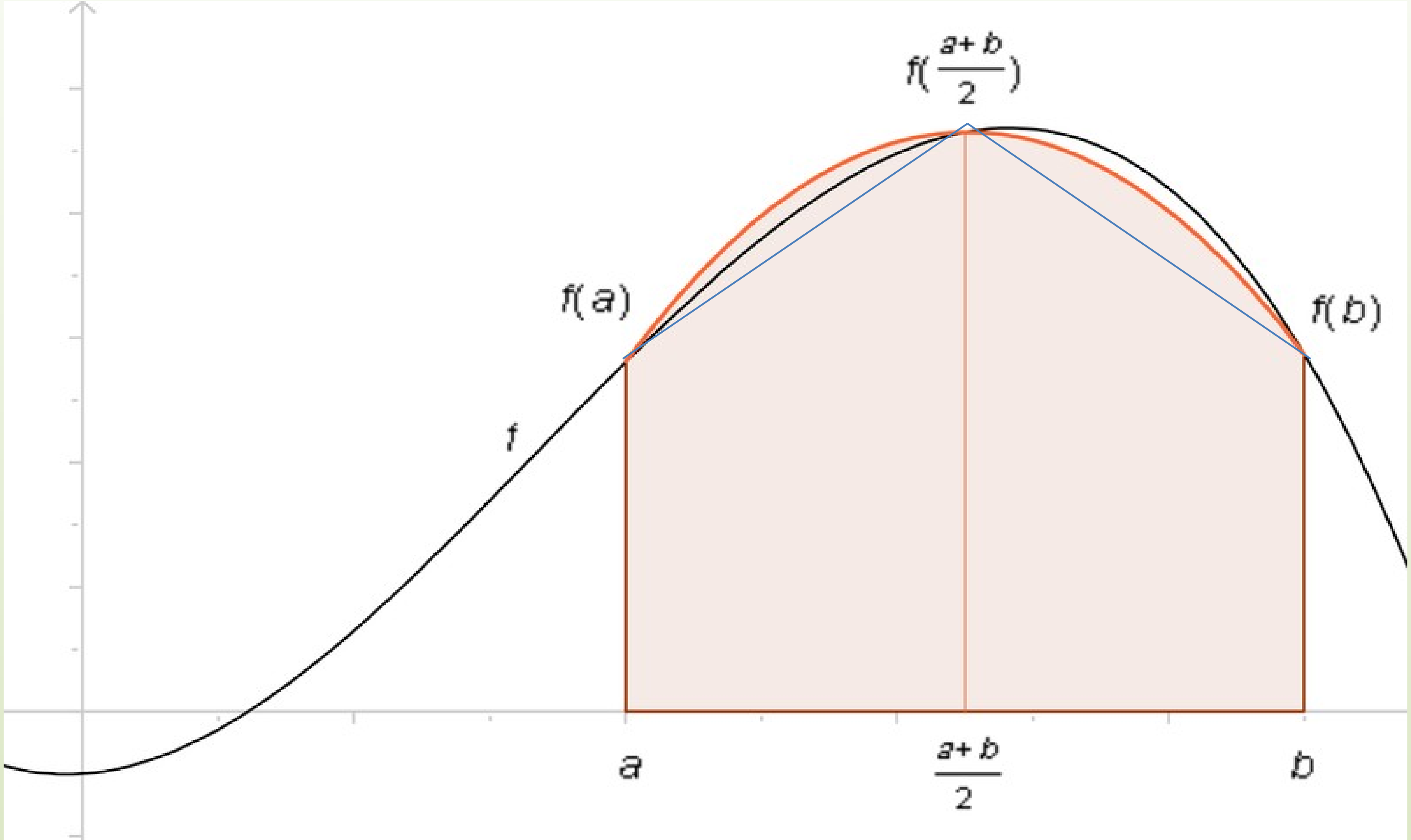
Calcular a integral entre 0 e 1 da função $f(x) = x^4$ com diferentes quantidades de passos (o valor exato deve ser 0,2)

Passos	Integral	E_{real}	E_{max}
1	0.500000000000000	-3.000000000000000e-001	1.000000000000000e+000
2	0.281250000000000	-8.124999999999999e-002	2.500000000000000e-001
4	0.220703125000000	-2.070312499999999e-002	6.250000000000000e-002
8	0.205200195312500	-5.200195312499989e-003	1.562500000000000e-002
16	0.201301574707031	-1.301574707031239e-003	3.906250000000000e-003
32	0.200325489044189	-3.254890441894420e-004	9.765625000000000e-004
64	0.200081378221512	-8.137822151182972e-005	2.441406250000000e-004
128	0.200020344927907	-2.034492790697895e-005	6.103515625000000e-005
256	0.200005086255260	-5.086255259800776e-006	1.525878906250000e-005
512	0.200001271565270	-1.271565270133390e-006	3.814697265625000e-006
1024	0.200000317891408	-3.178914084744910e-007	9.536743164062500e-007

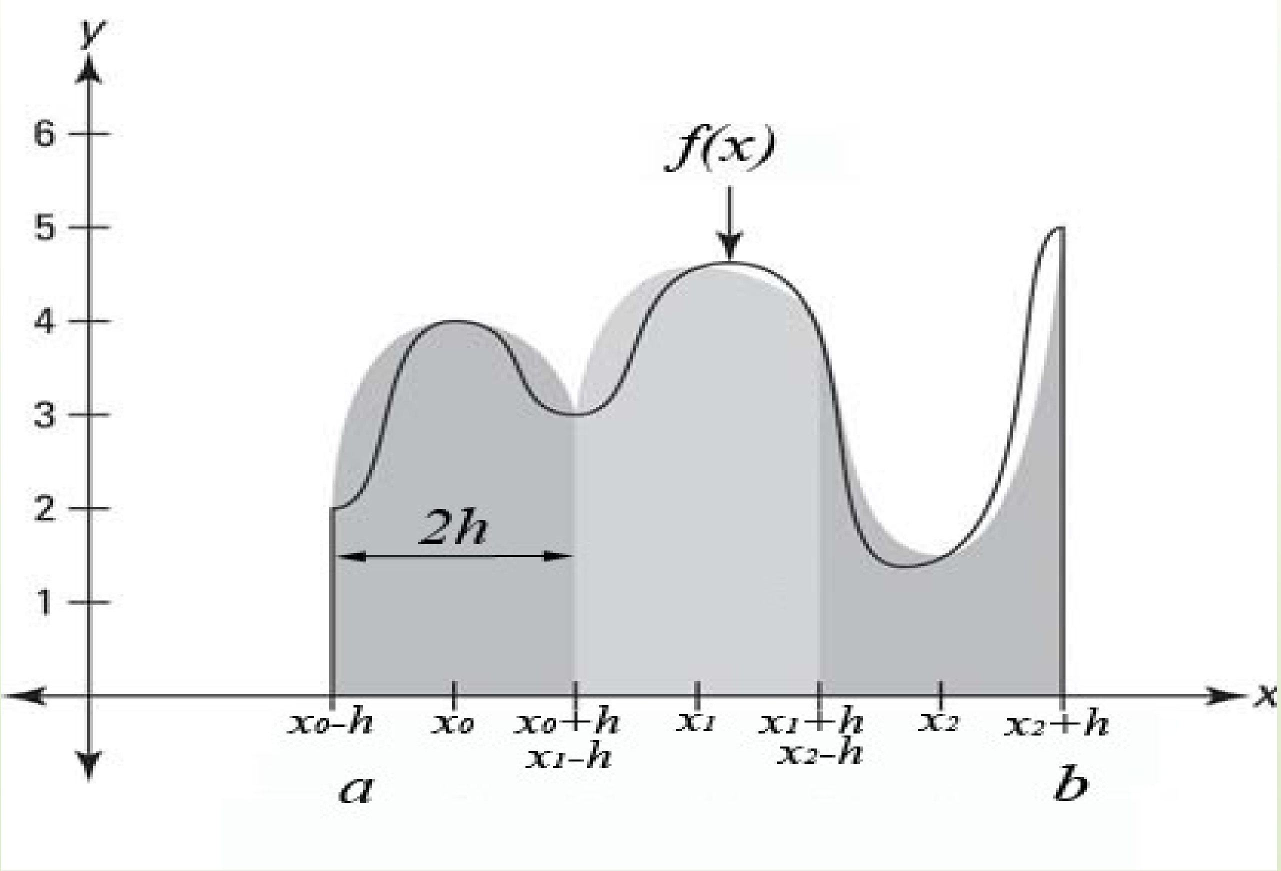
Voltar Simpson

FÍSICA COMPUTACIONAL

Método de Simpson (Aproximação parabólica)



Método de Simpson (Aproximação parabólica)



$$\int_a^b f(x)\,dx = \sum_{i=0}^{n-1} \int_{x_i-h}^{x_i+h} f(x)dx$$

Interessa o valor de cada uma dessas integrais em função do valor da função nos pontos x_i, x_i-h e x_i+h

FÍSICA COMPUTACIONAL

Método de Simpson (Aproximação parabólica)

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!}(x-x_0)^n$$

Expandindo em série de Taylor

$$f(x) = f(x_0) + (x-x_0) f'(x_0) + \frac{(x-x_0)^2}{2} f''(x_0) + \frac{(x-x_0)^3}{6} f'''(x_0) \boxed{+\ldots}$$

Exata para polinômios de ordem 3

$$\int_{x_0-h}^{x_0+h} f(x)\,dx = f(x_0)\, x\Big|_{x_0-h}^{x_0+h} + \cancel{f'(x_0)\frac{(x-x_0)^2}{2}\Big|_{x_0-h}^{x_0+h}} + f''(x_0)\frac{(x-x_0)^3}{6}\Big|_{x_0-h}^{x_0+h} +$$

$$+\cancel{f'''(x_0)\frac{(x-x_0)^4}{24}\Big|_{x_0-h}^{x_0+h}}$$

$$x\Big|_{x_0-h}^{x_0+h} = x_0 + h - x_0 + h = 2h$$

$$(x-x_0)^2\Big|_{x_0-h}^{x_0+h} = (x_0+h-x_0)^2 - (x_0-h-x_0)^2 = h^2 - (-h)^2 = 0$$

$$(x-x_0)^3\Big|_{x_0-h}^{x_0+h} = (x_0+h-x_0)^3 - (x_0-h-x_0)^3 = h^3 - (-h)^3 = 2h^3$$

$$(x-x_0)^4\Big|_{x_0-h}^{x_0+h} = (x_0+h-x_0)^4 - (x_0-h-x_0)^4 = h^4 - (-h)^4 = 0$$

Método de Simpson (Aproximação parabólica)

$$\int_{x_0-h}^{x_0+h} f(x)\,dx = 2hf(x_0) + \frac{h^3}{3} f''(x_0)$$

Da expressão para a 2ª derivada temos:

$$f''(x_0) \approx \frac{f(x_0-h) - 2f(x_0) + f(x_0+h)}{h^2}$$

Exata para polinômios de ordem 3

$$\int_{x_0-h}^{x_0+h} f(x)\,dx = 2hf(x_0) + \frac{h}{3}\left(f(x_0-h) - 2f(x_0) + f(x_0+h)\right)$$

$$\int_{x_0-h}^{x_0+h} f(x)\,dx = \frac{h}{3}\left(f(x_0-h) + 6f(x_0) - 2f(x_0) + f(x_0+h)\right)$$

FÍSICA COMPUTACIONAL

Regra de Simpson

$$\int_{x_0-h}^{x_0+h} f(x)\,dx = \frac{h}{3}\left(f(x_0-h) + 4f(x_0) + f(x_0+h)\right)$$

Exata para polinômios de 3ª ordem

Mudando de variável $x_0 = a+h$

$$\int_{a}^{a+2h} f(x)\,dx = \frac{h}{3}\left(f(a) + 4f(a+h) + f(a+2h)\right)$$

$$\int_{a+2h}^{a+4h} f(x)\,dx = \frac{h}{3}\left(f(a+2h) + 4f(a+3h) + f(a+4h)\right)$$

$$\int_{a+4h}^{a+6h} f(x)\,dx = \frac{h}{3}\left(f(a+4h) + 4f(a+5h) + f(a+6h)\right)$$

Regra de Simpson

Se $b = a + nh$ n par

$$\int_a^b f(x)\,dx = \frac{h}{3}\sum_{i=0}^{n-2}\left(f(a+ih) + 4f(a+ih+h) + f(a+ih+2h)\right) \qquad i = 0, 2, 4 \ldots$$

Método de Simpson (Erro da aproximação)

$$E = \int_a^b f(x)\,dx - \frac{h}{3}\sum_{i=0}^{n-2}\left(f(a+ih) + 4f(a+ih+h) + f(a+ih+2h)\right)$$

$$i = 0, 2, 4 \ldots$$

Existe um número "c", entre a e b, tal que:

$$E = -\frac{h^4}{180}(b-a)\,f^{(4)}(c)$$

Como não conhecemos a priori "c", pode-se escolher o número que maximize $f^{(4)}(c)$

$$E \leq \left| -\frac{h^4}{180}(b-a)\,f^{(4)}(c) \right|$$

Ver Pasta

Método de Simpson (Exemplo)

Calcular a integral entre 0 e 1 da função f(x) = x^4 com diferentes quantidades de passos.

$$f(x) = x^4 \qquad \int_0^1 x^4 dx = \frac{x^5}{5}\Big|_0^1 = \frac{1}{5} = 0.2$$

$$E \le \left| -\frac{h^4}{180}(b-a) f^{(4)}(c) \right|$$

$$\left.\begin{aligned} f'(x) &= 4x^3 \\ f''(x) &= 12x^2 \\ f'''(x) &= 24x \\ f^{(4)}(x) &= 24 \end{aligned}\right\} E \le \frac{2}{15} h^4$$

FÍSICA COMPUTACIONAL

Método de Simpson (Exemplo)

Calcular a integral entre 0 e 1 da função $f(x) = x^4$ com diferentes quantidades de passos (o valor exato deve ser 0,2)

Passos	Integral	E_{real}	E_{max}
1	0.208333333333333	8.333333333333304e-03	8.333333333333333e-03
2	0.200520833333333	5.208333333333037e-04	5.208333333333333e-04
4	0.200032552083333	3.255208333330373e-05	3.255208333333333e-05
8	0.200002034505208	2.034505208303727e-06	2.034505208333333e-06
16	0.200000127156576	1.271565754912274e-07	1.271565755208333e-07
32	0.200000007947286	7.947285912690560e-09	7.947285970052083e-09
64	0.200000000496705	4.967053712778835e-10	4.967053731282552e-10
128	0.200000000031044	3.104402845899301e-11	3.104408582051595e-11

Ver Trapézios

FÍSICA COMPUTACIONAL

Quadratura Gaussiana → Gauss-Legendre

Consideremos o problema de avaliar: $\int_{-1}^{1} f(x)\, dx$

As fórmulas discutidas anteriormente são da forma: $I \approx \sum_{n=1}^{N} w_n f(x_n)$

Método dos Trapézios:

$$\int_{a}^{b} f(x)\, dx \approx \frac{h}{2} \sum_{i=0}^{n-1} f(x_i) + f(x_{i+1})$$

Integração em um intervalo só (-1, 1) com h=1:

$$\int_{-1}^{1} f(x)\, dx \approx \frac{1}{2} f(-1) + f(0) + \frac{1}{2} f(1)$$

$w_1 = ½;\ x_1 = -1$

$w_2 = 1;\ x_2 = 0$

$w_3 = ½;\ x_3 = 1$

FÍSICA COMPUTACIONAL

Quadratura Gaussiana → Gauss-Legendre

Método de Simpson:

$$\int_{x_0-h}^{x_0+h} f(x)\,dx \approx \frac{h}{3}\left(f(x_0-h)+4f(x_0)+f(x_0+h)\right)$$

Integração em um intervalo só (-1, 1) $\rightarrow$ h = 1 e $x_0 = 0$

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,dx \approx \frac{1}{3}f(-1)+\frac{4}{3}f(0)+\frac{1}{3}f(1)$$

$w_1 = 1/3$; $x_1 = -1$

$w_2 = 4/3$; $x_2 = 0$

$w_3 = 1/3$; $x_3 = 1$

Notar que x_n são pontos igualmente espaçados

FÍSICA COMPUTACIONAL

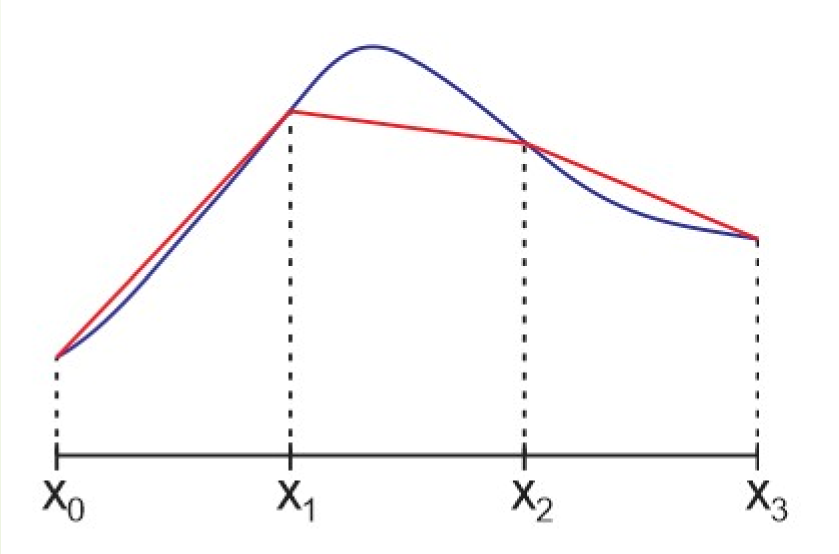
Quadratura Gaussiana → Gauss-Legendre

Todas as fórmulas de quadratura baseadas em séries de Taylor que utilizam n pontos integrarão exatamente um polinômio de grau:

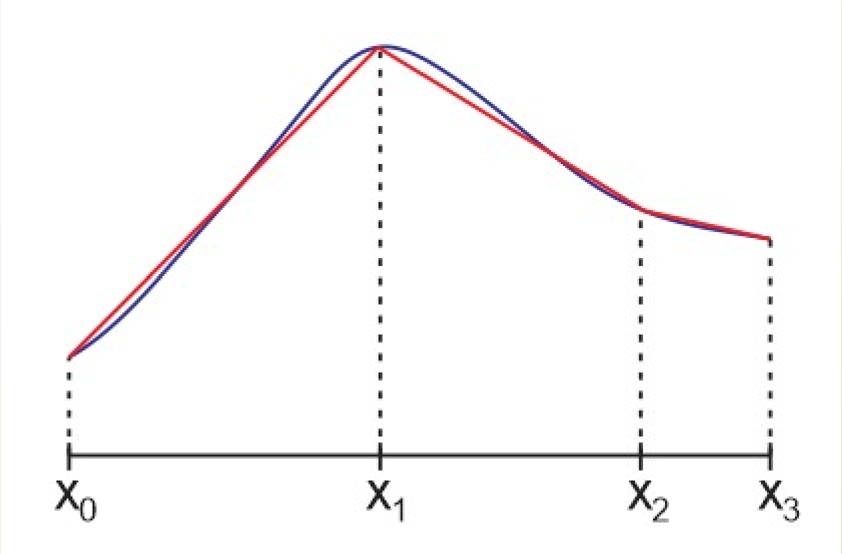
n-1 → n par ⟶ Trapézios → 2 pontos → exata para polinômios de grau 1

n → n ímpar ⟶ Simpson → 3 pontos → exata para polinômios de grau 3

Pontos equidistantes



Pontos não equidistantes



Quadratura Gaussiana → Gauss-Legendre

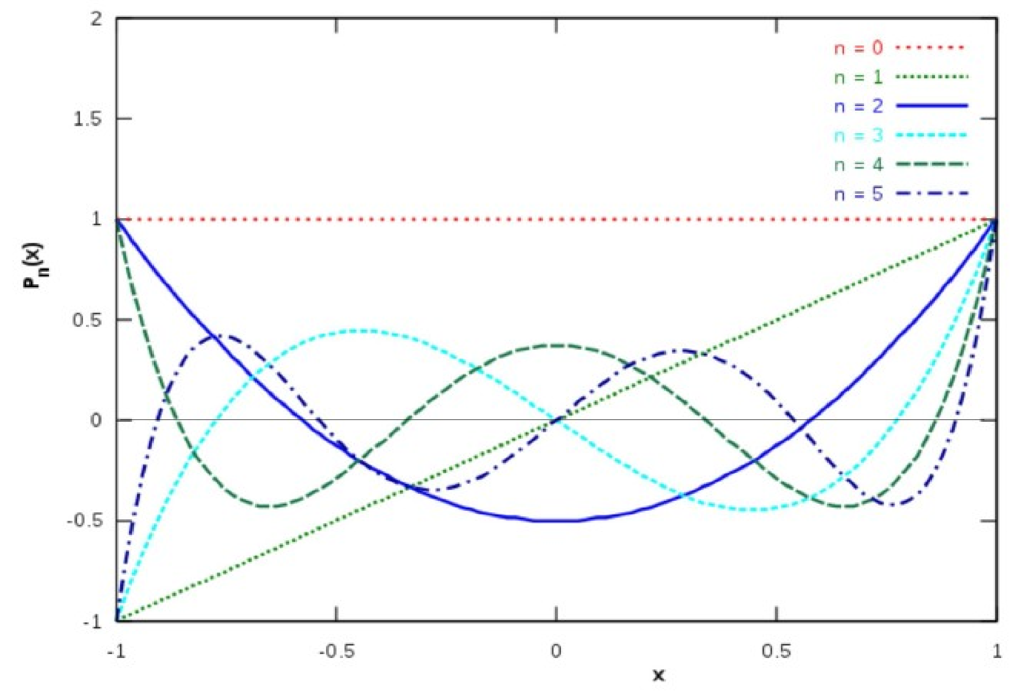
Deixando atrás o paradigma de escolher intervalos de x igualmente espaçados vejamos como escolhendo n pontos x_n adequados, dentro do intervalo [-1, 1], podemos integrar exatamente polinômios de grau 2n – 1

Consideremos os polinômios de Legendre: $P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} [(x^2 - 1)^n]$

n	$P_n(x)$
0	1
1	x
2	$\frac{1}{2}(3x^2 - 1)$
3	$\frac{1}{2}(5x^3 - 3x)$
4	$\frac{1}{8}(35x^4 - 30x^2 + 3)$
5	$\frac{1}{8}(63x^5 - 70x^3 + 15x)$
6	$\frac{1}{16}(231x^6 - 315x^4 + 105x^2 - 5)$
7	$\frac{1}{16}(429x^7 - 693x^5 + 315x^3 - 35x)$
8	$\frac{1}{128}(6435x^8 - 12012x^6 + 6930x^4 - 1260x^2 + 35)$
9	$\frac{1}{128}(12155x^9 - 25740x^7 + 18018x^5 - 4620x^3 + 315x)$
10	$\frac{1}{256}(46189x^{10} - 109395x^8 + 90090x^6 - 30030x^4 + 3465x^2 - 63)$

FÍSICA COMPUTACIONAL

Quadratura Gaussiana → Gauss-Legendre



n zeros em [-1, 1]

Ortogonalidade em [-1, 1]

$$\int_{-1}^{1} P_i(x)\, P_j(x) dx = \frac{2}{2i+1}\delta_{ij}$$

São linermente indendentes no espaço vetorial dos polinômios de grau menor que n.

$$\int_{-1}^{1} p_s(x)\, P_n(x)\, dx = 0 \qquad s < n$$

Quadratura Gaussiana → Gauss-Legendre

Consideremos uma função f polinomial de grau *m = 2n-1* e a vamos dividir pelo polinômio de Legendre de grau n (P_n).

$$2n-1-n=n-1 \Rightarrow \frac{f_m}{P_n}=p_{n-1}$$

resto da divisão (R)

Polinômio de grau n-1 ou menor

$$f_m = p_{n-1}P_n + R_{\leqslant n-1}$$

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,dx = \cancelto{0}{\int_{-1}^{1} p(x)\,P_n(x)\,dx} + \int_{-1}^{1} R(x)$$

FÍSICA COMPUTACIONAL

Quadratura Gaussiana → Gauss-Legendre

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,dx = \overbrace{\int_{-1}^{1} p(x)\,P_n(x)\,dx}^{0} + \int_{-1}^{1} R(x)$$

$$I \cong \sum_{i=1}^{n} w_i f(x_i)$$

$$\sum_{i=1}^{n} w_i f(x_i) = \sum_{i=1}^{n} w_i p(x_i)\,P_n(x_i) + \sum_{i=1}^{n} w_i R(x_i)$$

Se x_i, são os zeros do P_n ⇒ $P_n(x_i) = 0$

⇓

Escolhendo adequadamente w_i, é possível com n pontos, integrar um polinomio de grau 2n-1 (f) da mesma forma que é possível integrar um de grau n-1 (R)

FÍSICA COMPUTACIONAL

Quadratura Gaussiana → Gauss-Legendre

w_i ???

$$I \cong \sum_{i=1}^{n} w_i f\left(x_i\right)$$

Vamos considerar n=3

$$P_3\left(x\right) = \frac{1}{2}\left(5x^3 - 3x\right) = \frac{1}{2}x\left(5x^2 - 3\right)$$

$P_3\left(x\right) = 0$ em $x = 0$ $x = \pm\sqrt{\frac{3}{5}}$

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx = \sum_{i=1}^{n} w_i f\left(x_i\right)$$

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx = w_1 f\left(-\sqrt{\tfrac{3}{5}}\right) + w_2 f(0) + w_3 f\left(\sqrt{\tfrac{3}{5}}\right)$$

Exata até polinômios de grau 5

FÍSICA COMPUTACIONAL

Quadratura Gaussiana → Gauss-Legendre

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx = w_1 f\left(-\sqrt{\tfrac{3}{5}}\right) + w_2 f(0) + w_3 f\left(\sqrt{\tfrac{3}{5}}\right)$$

$f(x) = 1$ ➡ $\displaystyle\int_{-1}^{1} dx = 2$ ➡ $w_1 + w_2 + w_3 = 2$ **1**

$f(x) = x$ ➡ $\displaystyle\int_{-1}^{1} x dx = \frac{x^2}{2}\Big|_{-1}^{1} = 0$ ➡ $-\sqrt{\frac{3}{5}}w_1 + \sqrt{\frac{3}{5}}w_3 = 0$ **2**

$f(x) = x^2$ ➡ $\displaystyle\int_{-1}^{1} x^2 dx = \frac{x^3}{3}\Big|_{-1}^{1} = \frac{2}{3}$ ➡ $\frac{3}{5}w_1 + \frac{3}{5}w_3 = \frac{2}{3}$ **3**

De **2** $w_1 = w_3$ ➡ De **3** $\frac{3}{5}w_1 = \frac{1}{3}$ ➡ $w_1 = w_3 = \frac{5}{9}$

De **1** $w_2 = 2 - \frac{10}{9}$ ➡ $w_2 = \frac{8}{9}$

FÍSICA COMPUTACIONAL

Quadratura Gaussiana → Gauss-Legendre

Seja f(x) um polinômio de grau 2n-1

$$\boxed{\int_{-1}^{1} f(x)dx = \sum_{i=1}^{n} w_i f(x_i)}$$

Onde x_i são os n zeros do polinômio de Legendre de grau n e w_i :

$$w_i = \frac{2}{(1 - {x_i}^2)({P'}_n(x_i))^2}$$

Quadratura Gaussiana → Gauss-Legendre

	z	w
n = 2	±0,57735 02692	1,00000 00000
n = 3	±0,77459 66692	0,55555 55556
	0,00000 00000	0,88888 88889
n = 4	±0,86113 63116	0,34785 48451
	±0,33998 10436	0,65214 51549
n = 6	±0,93246 95142	0,17132 44924
	±0,66120 93865	0,36076 15730
	±0,23861 91861	0,46791 39346

FÍSICA COMPUTACIONAL

Quadratura Gaussiana → Gauss-Legendre

$$\int_a^b f(x)dx$$

Mudando de variável

$$z(x) = \frac{2x - (a+b)}{b-a}$$

Se x=a → z=-1

Se x=b → z=1

$$x = \frac{z(b-a) + (b+a)}{2}$$

$$dx = \frac{b-a}{2}dz$$

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{2}\int_{-1}^{1} f\left(\frac{z(b-a)+(b+a)}{2}\right)dz$$

$$\boxed{\int_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{2}\sum_{i=1}^{n} w_i f\left(\frac{z_i(b-a)+(b+a)}{2}\right)}$$

Onde z_i são os n zeros do polinômio de Legendre de ordem n e w_i, os pesos associados

Ver Pasta

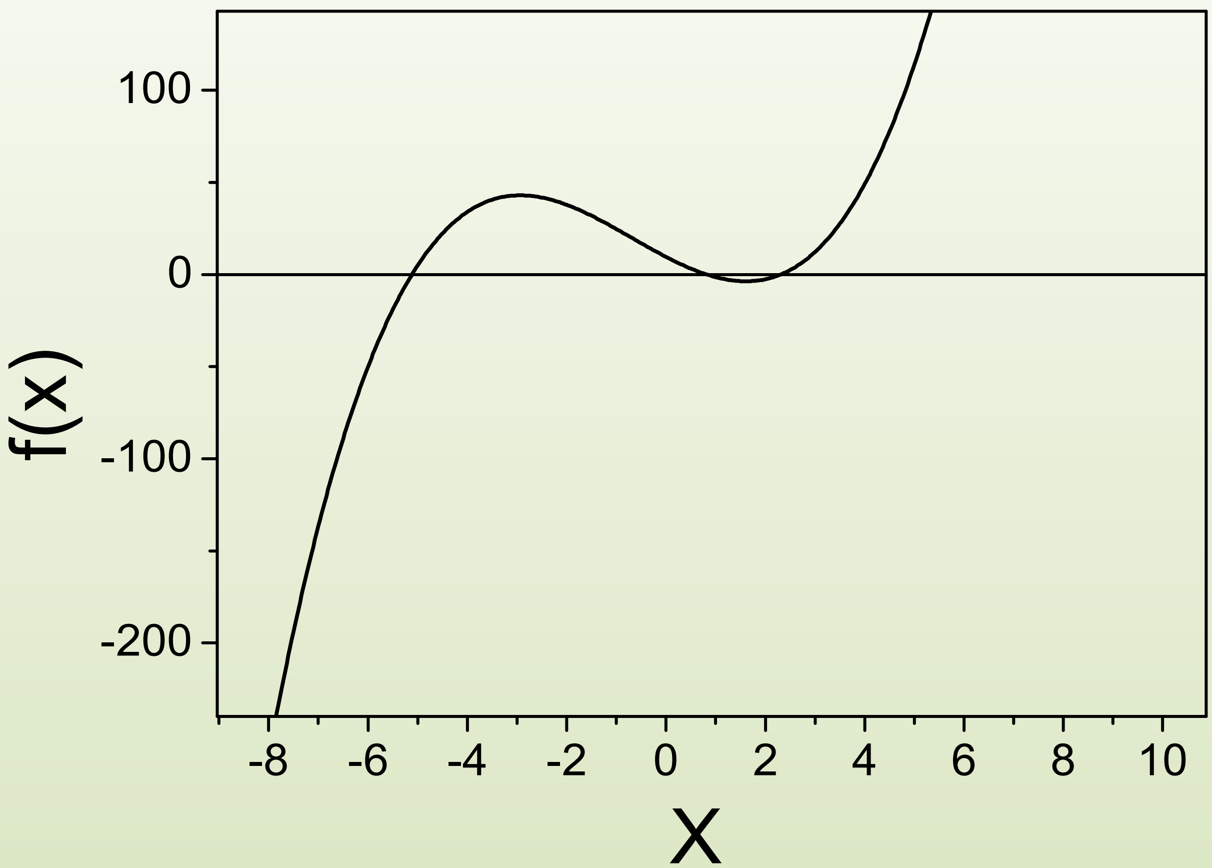
Gauss Legendre (Exemplo)

Calcular a integral entre 0 e 1 da função $f(x) = x^4$ com n=3 (3pontos)

(o valor exato deve ser 0,2)

FÍSICA COMPUTACIONAL

DETERMINAÇÃO DE RAÍZES DE FUNÇÕES



FÍSICA COMPUTACIONAL

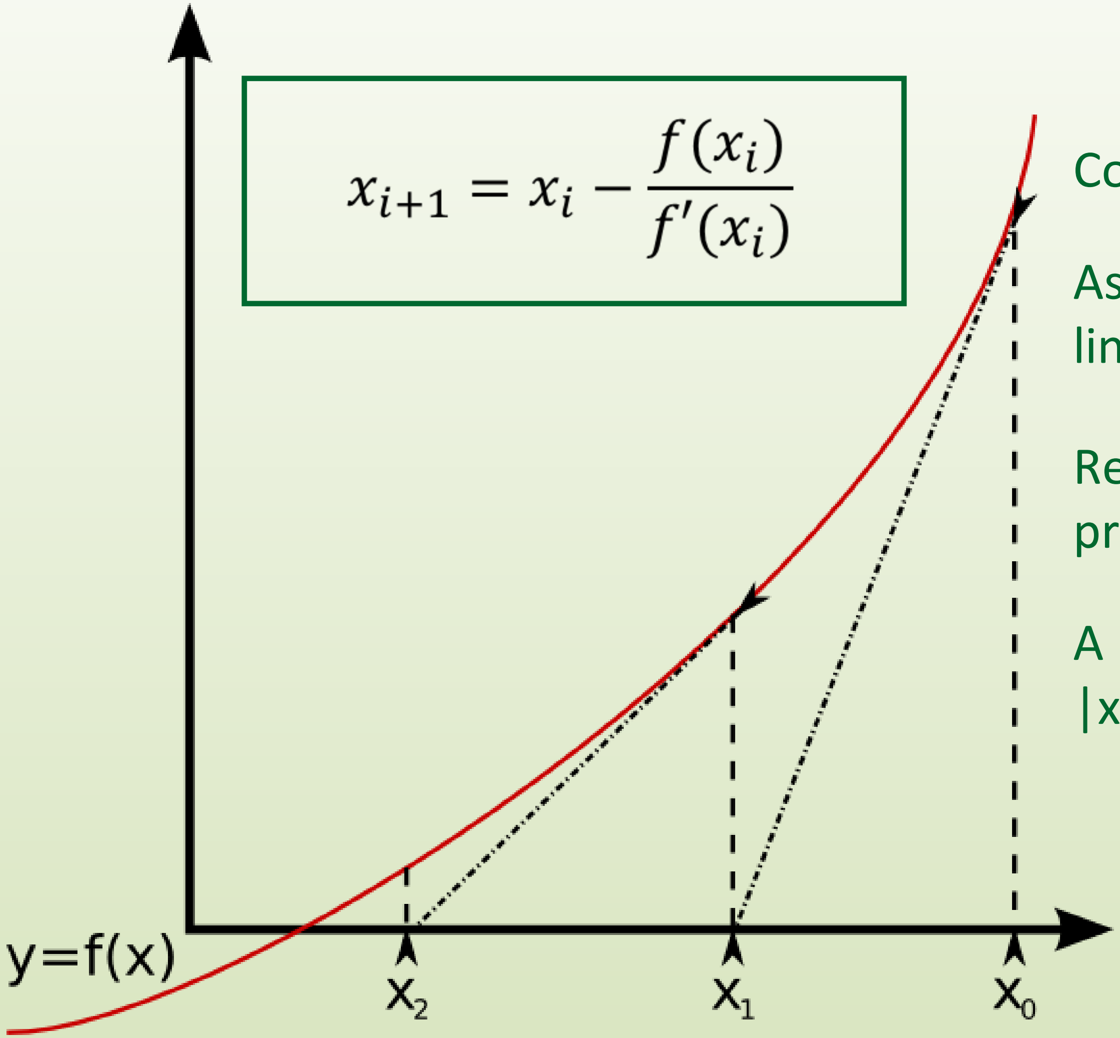
MÉTODO DE BUSCA DIRETA

- Em todos os métodos de cálculo numérico de raízes de funções é importante conhecer analiticamente a função.
- Estabelecer o intervalo de valores de x onde as raízes podem ser encontradas ou o intervalo onde desejamos achar as raízes.
- Estabelecer um valor inicial do incremento h (ser cuidadoso com o valor inicial para não pular uma possível raiz.
- Comprovar o produto f(x)*f(x+h) < 0 ou f(x)*f(x+h) > 0

  $f(x) \times f(x+h) > 0 \Rightarrow$ Não passou pelo zero, continuar incrementando $x+h \rightarrow x$

  $f(x) \times f(x+h) < 0 \Rightarrow$ Passou pelo zero $\Rightarrow x = x-h$ e $h = h/2$ (por exemplo)
- A sequência termina quando $h \leq$ tolerância

MÉTODO DE NEWTON-RAPHSON OU DA TANGENTE



$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)}$$

Convergência muito rápida

Assume que f seja localmente linear ao redor de x_0

Requer maior conhecimento prévio da função.

A seqüência termina quando $|x_{i+1} - x_i| \leq$ tolerância

FÍSICA COMPUTACIONAL

MÉTODO DA SECANTE

Newton-Raphson

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)}$$

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0) - f(x_0 - h)}{h} + o(h)$$

$$x_0 = x_i$$

$$h = x_i - x_{i-1}$$

$$\boxed{x_{i+1} = x_i - f(x_i)\frac{x_i - x_{i-1}}{f(x_i) - f(x_{i-1})}}$$

Convergência quase tão rápida quanto o método de Newton-Raphson

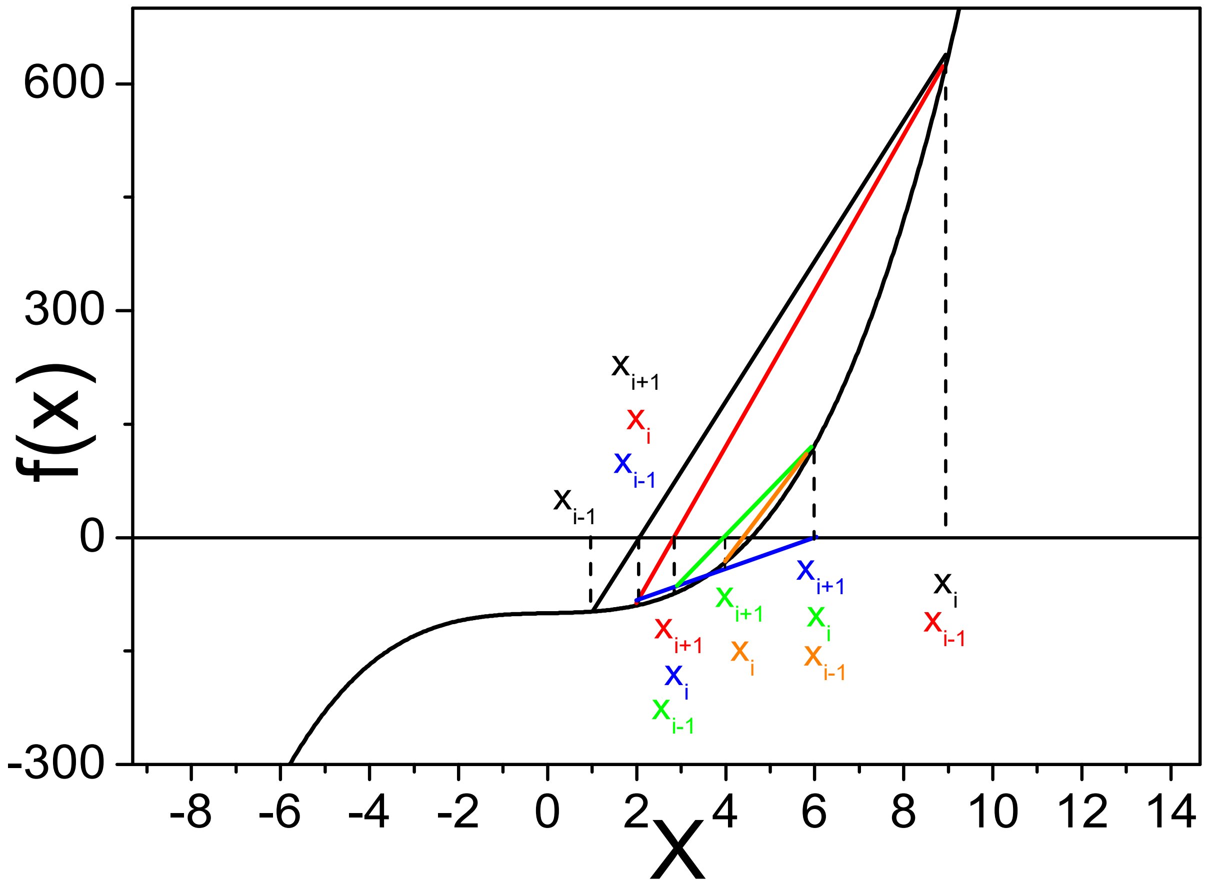
Não se requer do conhecimento da derivada da função

Se precisam dois pontos iniciais para começar o cálculo

A seqüência termina quando $|x_{i+1} - x_i| \leq$ tolerância

FÍSICA COMPUTACIONAL

MÉTODO DA SECANTE



FÍSICA COMPUTACIONAL

Ver Pasta

Determinar raízes de funções (Exemplo)

Determina as raízes da função: $f(x) = x^3 + 2x^2 - 15x + 10 - e^{\frac{x}{10}}$

$$f'(x) = 3x^2 + 4x - 15 - \frac{1}{10}e^{\frac{x}{10}}$$

Análise Prévia:

$$\left.\begin{array}{ll} x \to -\infty & f(x) \to -\infty \\ x = 0 & f(x) = 9 \to (f(x) > 0) \\ x \to \infty & f(x) \to -\infty \end{array}\right\}$$

Mínimo de 2 raízes

$x = -10 \Rightarrow f(x) = -1000 + 200 - 150 + 10 - \dfrac{1}{2{,}718} \approx -940{,}37$ x < -10 x^3 prevalece

$x = 160 \Rightarrow f(x) = 4096000 + 51200 - 2400 + 10 - 8871381 \approx -4726571$ x > 160 $e^{x/10}$ prevalece

FÍSICA COMPUTACIONAL

PROJETO 1 – QUANTIZAÇÃO SEMI-CLÁSSICA DAS VIBRAÇÕES DE MOLÉCULAS

Problema: Moléculas diatómicas $\rightarrow$ $H_{2,}$ HD, O_2

2 núcleos enlaçados pelos elétrons que orbitam ao redor deles

$m_{núcleos} >> m_{elétrons} \Rightarrow$ Assume-se que os elétrons mudam sua posição quase instantaneamente para seguir o movimento dos núcleos (Aproximação de Born-Oppenheimer)

O problema se reduz a um no qual o movimento dos núcleos é governado por um potencial V(r), onde r é a (distância entre os núcleos)

V(r) $\rightarrow$ Atrativo em longas distâncias (interação de van der Waals) Repulsivo para distâncias curtas (Interação coulombiana dos núcleos e repulsão de Pauli para os elétrons.

FÍSICA COMPUTACIONAL

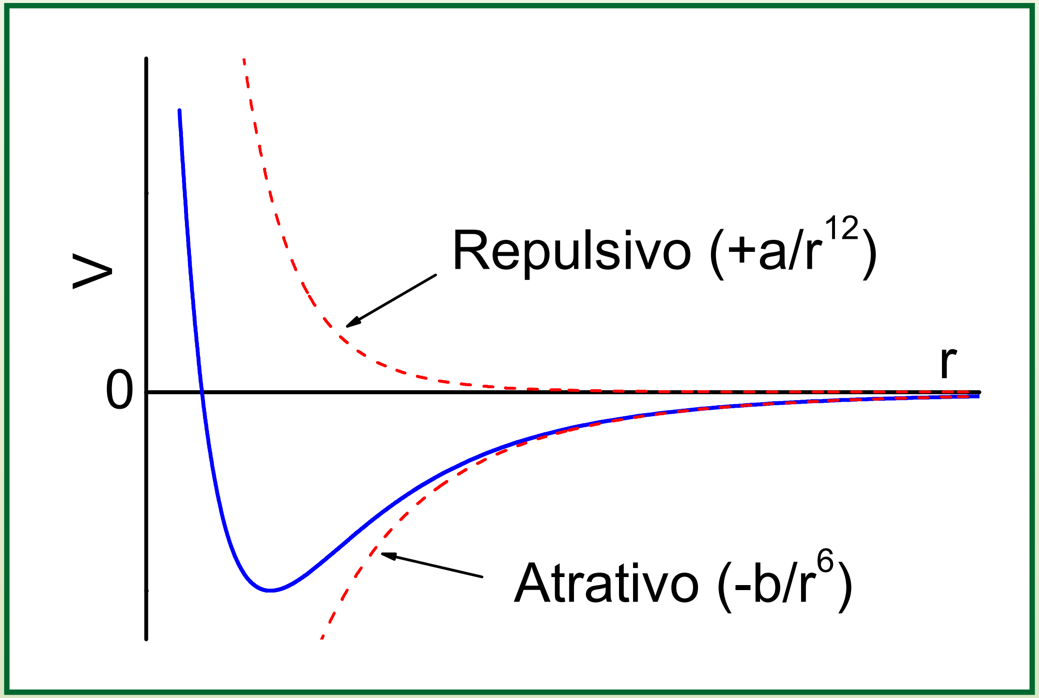
Um potencial comumente utilizado que apresenta estas características é o potencial de Lennard-Jones.

$$V(r) = 4V_0\left[\left(\frac{\alpha}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\alpha}{r}\right)^{6}\right]$$

$-V_0$ – Profundidade do poço

α- Cte. Unidade de distância

$r_{Vmin} = 2^{1/6}\ \alpha$



FÍSICA COMPUTACIONAL

Os estados vibracionais com energias E_n podem ser descritos pela solução da equação de Schroedinger:

$$\left[-\frac{\hbar}{2m}\frac{d^2}{dr^2}+V(r)\right]\psi_n = E_n\psi_n$$

m – massa reduzida dos 2 núcleos

$$\frac{1}{m}=\frac{1}{m_1}+\frac{1}{m_2}$$

O objetivo do projeto é encontrar E_n para um potencial dado.

Resolver diretamente a equação $\rightarrow$ Somente após o estudo de EDO

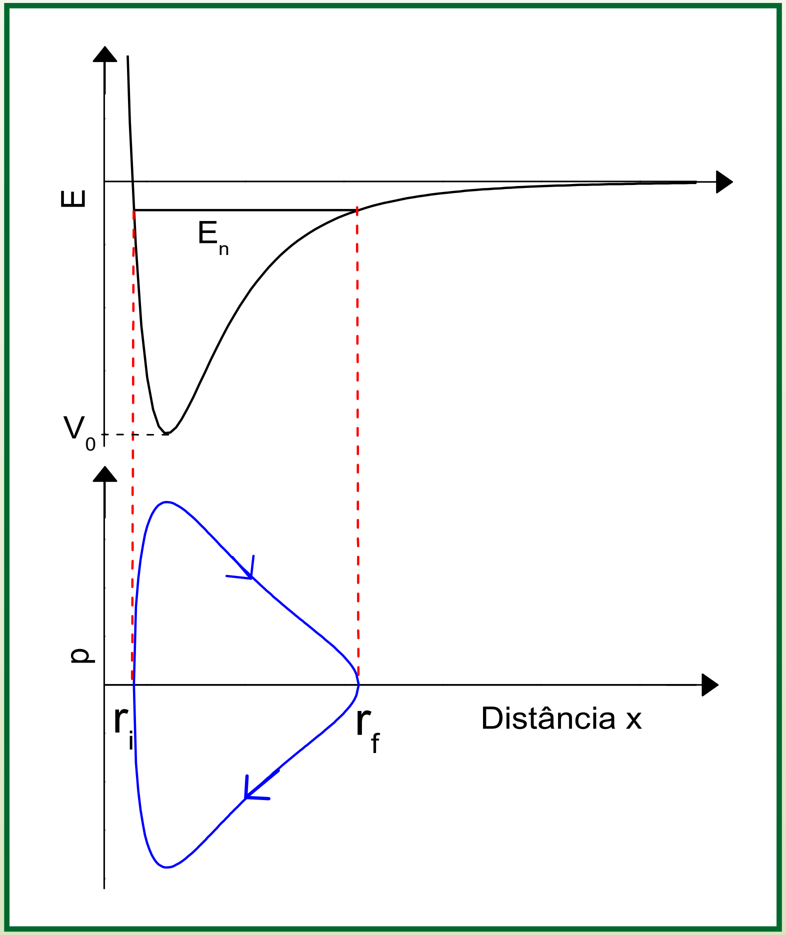
Algumas aproximações

A grande massa dos núcleos implica que seu movimento é semi-clássico $\Rightarrow$

E_n $\rightarrow$ Considerando um movimento clássico em V e aplicando "regras de quantização"

FÍSICA COMPUTACIONAL

O movimento clássico da separação entre os núcleos confinados no potencial V(r) pode ocorrer para energias $-V_0 < E_n < 0$. Assim a distância entre os núcleos oscila periodicamente entre os pontos r_i e r_f e a energia muda de cinética a potencial mantendo seu valor constante



$$E = \frac{p^2}{2m} + V(r)$$

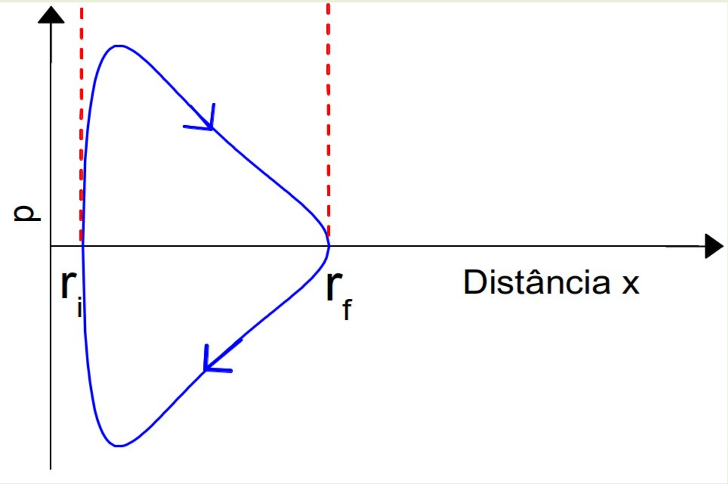
FÍSICA COMPUTACIONAL

Esse movimento clássico ocorre em alguma energia entre $-V_0$ e 0.

Tentar quantizar o movimento para obter aproximações dos autovalores E_n

Regra de Quantização de Bohr-Sommerfeld: A área no espaço de fases (ação em uma energia dada) é quantizada

$$S(n) = \left(n + \frac{1}{2}\right) 2\pi\hbar$$ n → inteiro ≥ 0



$$\oint p dr = 2 \int_{r_i}^{r_f} p dr = \left(n + \frac{1}{2}\right) 2\pi\hbar$$

$$E = \frac{p^2}{2m} + v(r)$$

$$p = (2m)^{\frac{1}{2}} (E - v(r))^{\frac{1}{2}}$$

FÍSICA COMPUTACIONAL

$$2\int_{r_i}^{r_f} p dr = \left(n+\frac{1}{2}\right)2\pi\hbar$$

$$2\int_{r_i}^{r_f} (2m)^{\frac{1}{2}}(E_n - v(r))^{\frac{1}{2}} dr = \left(n+\frac{1}{2}\right)2\pi\hbar$$

$$\boxed{2\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}}\int_{r_i}^{r_f}(E_n - v(r))^{\frac{1}{2}} dr = \left(n+\frac{1}{2}\right)2\pi}$$

n → inteiro ≥ 0

$$v(r) = 4V_0\left(\left(\frac{\alpha}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\alpha}{r}\right)^{6}\right)$$

FÍSICA COMPUTACIONAL

Para simplificar o trabalho podem ser definidas as seguintes quantidades:

$$x = \frac{r}{\alpha} \rightarrow dr = \alpha dx \qquad \varepsilon_n = \frac{E_n}{V_0} \quad \begin{array}{c} -V_0 < E_n < 0 \\ -1 < \varepsilon_n < 0 \end{array} \qquad \gamma = \left(\frac{2m\alpha^2 V_0}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}}$$

Dessa forma:

$$2\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}} \int_{r_i}^{r_f} (E_n - v(r))^{\frac{1}{2}} dr = \left(n + \frac{1}{2}\right) 2\pi \qquad v(r) = 4V_0 \left(\left(\frac{\alpha}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\alpha}{r}\right)^{6}\right)$$

$$\downarrow$$

$$\boxed{\begin{array}{l} \gamma \displaystyle\int_{x_i}^{x_f} (\varepsilon_n - v(x))^{\frac{1}{2}} dx = \left(n + \frac{1}{2}\right)\pi \\[2ex] v(x) = 4\left(\dfrac{1}{x^{12}} - \dfrac{1}{x^{6}}\right) \end{array}}$$

FÍSICA COMPUTACIONAL

Projeto: Calcular os níveis de energia e a dependência de p vs x para diferentes moléculas diatômicas

$$p_n(x) = \pm(\varepsilon_n - v(x))^{\frac{1}{2}}$$

$H_2 \rightarrow \gamma = 21.7$

$HD \rightarrow \gamma = 24.8$

$O_2 \rightarrow \gamma = 150$

O valor de γ deve ser entrado pelo usuário

Verificar se o programa está correto, substituindo o potencial de Lennard Jones por um potencial parabólico do tipo:

$$v(x) = 4\,(x - 1.12246)^2 - 1$$

Que se esperaria com um potencial parabólico?

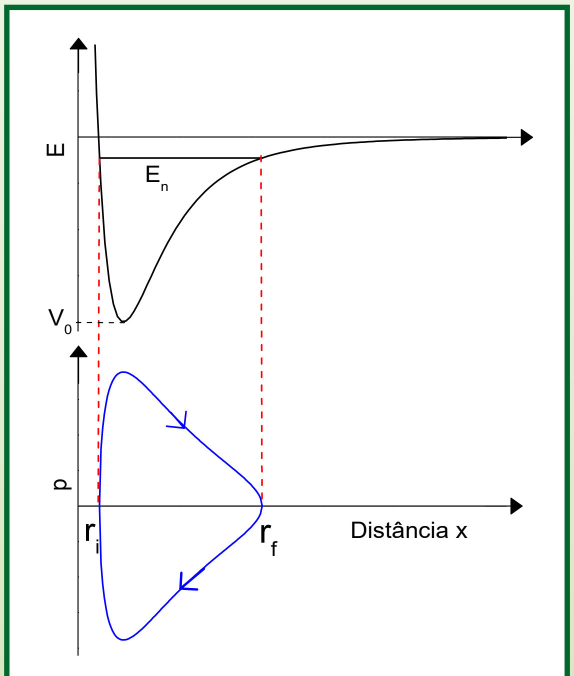
FÍSICA COMPUTACIONAL

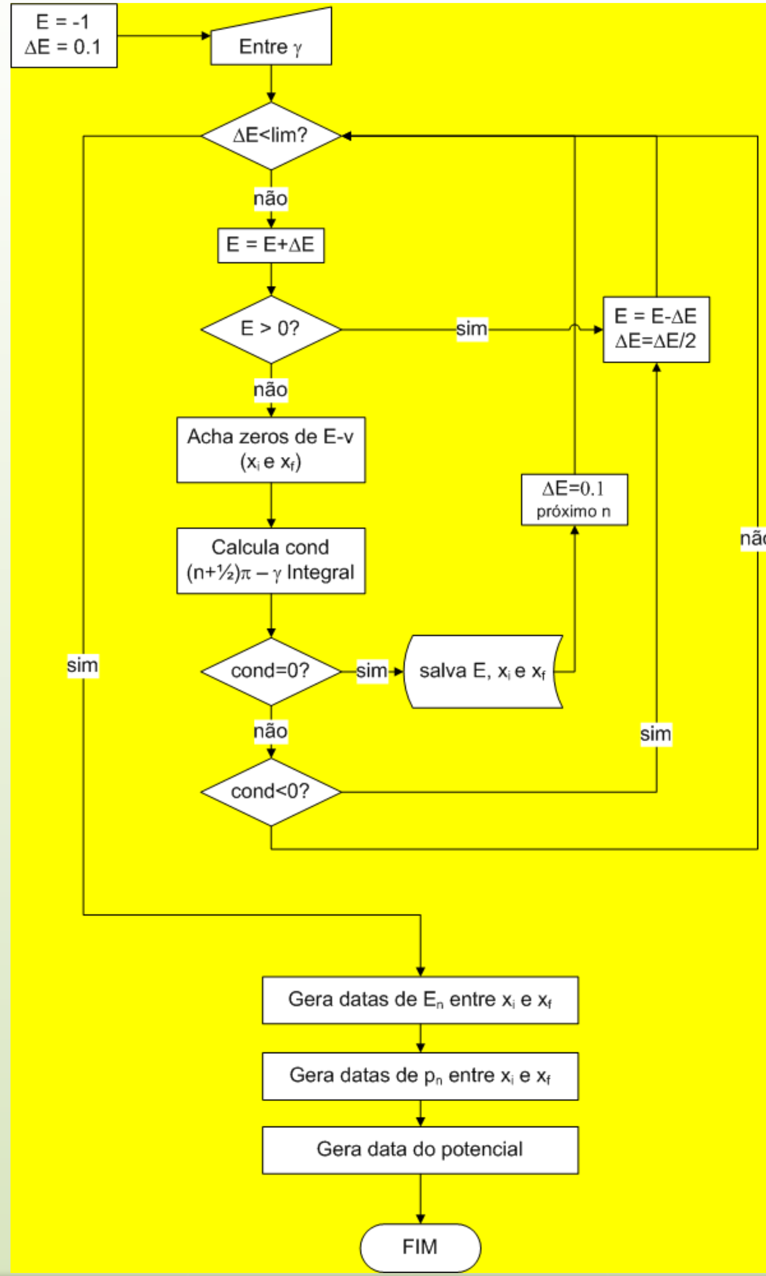
Exemplo de Fluxograma

$$\gamma \int_{x_i}^{x_f} \left(\varepsilon_n - v(x)\right)^{\frac{1}{2}} dx = \left(n + \frac{1}{2}\right)\pi$$

$$v(x) = 4\left(\frac{1}{x^{12}} - \frac{1}{x^6}\right)$$

$$p_n\left(x\right) = \pm\left(\varepsilon_n - v(x)\right)^{\frac{1}{2}}$$





FÍSICA COMPUTACIONAL

Exemplo de Resultados Esperados