

AULAS 19 E 20: FIS271 - Física Computacional I

Exercício 1. 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

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

onde n é o número de subintervalos.

a) Considerando a expansão $f(x) = f_i + (x - x_i)(f_{i+1} - f_i)/h$, mostre analiticamente 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* [1].

b) Utilize a regra do trapézio para estimar a integral I_{ab} da função $f(x) = \sin(x)$ 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 $n = 1000$ subintervalos.

c) Refaça a estimativa de I_{ab} e o cálculo de ε do item (a) agora utilizando a *regra de Simpson* [1], isto é,

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

com $I_k = h(f_{2k-2} + 4f_{2k-1} + f_{2k})/3$, sendo n par. Compare o erro ε com o valor obtido no item (b).

Exercício 2. 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,

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

com $C(T_1) = 3 \cdot 10^{-13}/(\sqrt{\pi}(k_B T_1)^{3/2})$, sendo $k_B T_1 > 0$ (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. [2], 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 $g(\varepsilon, T_2)$ 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 $T_1 = 10$ 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 manter $f(\varepsilon, T_1) = C_0 g(\varepsilon, T_1)$ dentro da precisão numérica do seu programa.

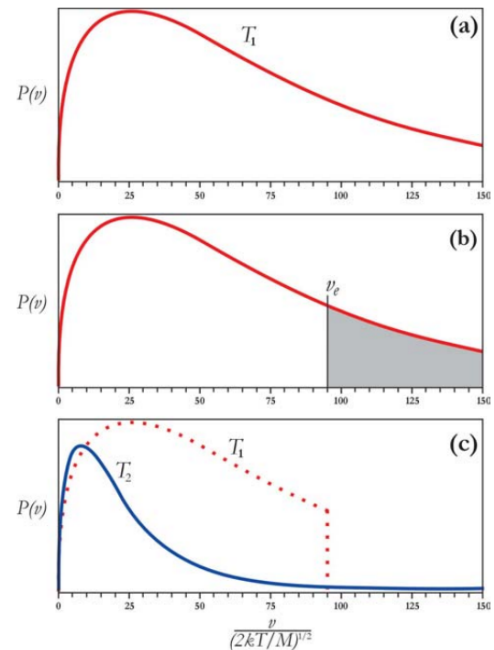
b) Calcule numericamente o número de átomos $N_s = N - N_e$ que sobraram no sistema notando que integrais impróprias podem ser realizadas fazendo a seguinte mudança de variáveis, $x = 1/y$ e $dx = -dy/y^2$, e dividindo o limite de integração em duas partes [3], isto é,

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

Assuma o limite analítico de $f(1/y)/y^2$ quando $y \rightarrow 0$. Compare a estimativa de N_s feita utilizando a *regra de Simpson* considerando diferentes valores de a (por exemplo: 1, 2, 3 e 4), com o resultado analítico exato esperado.

Referências:

- [1] J. D. Faires e R. L. Burden. Numerical Methods (3rd ed.)
- [2] A. H. Iavaranni *et al.*. Rev. Bras. Ens. Fís. 29 (2007) 209.
- [3] C. Scherer. Métodos Computacionais da Física (2nd ed., 2010).



Distribuição de velocidades antes e depois da retirada de N_e átomos. Figura extraída de [2].