Universidade Federal do Rio Grande do Sul
Instituto de Física
Departamento de Física
Professor: ***Rudi Gaelzer***
Disciplina: ***Métodos Computacionais da Física A***
Cursos: ***Física & Engenharia Física***

Lista de Exercícios — *Quadratura Numérica*

1) ***(Regra Trapezoidal Estendida)*** Escreva uma função que implemente o algoritmo 4.1,[1] destinado a calcular uma aproximação numérica à integral

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

através da regra trapezoidal estendida. A função pode ser implementada em qualquer uma das linguagens aceitas e deve ter o seguinte cabeçalho:

```
trapez(f,a,b,n)
```

onde `f` é o nome da função $f(x)$ a ser integrada, `a` e `b` são, respectivamente, os limites inferior e superior e `n` é o número de pontos a ser usado na fórmula de quadratura.

---

2) ***(Função de Bessel)***

(a) Escreva um programa que invoca a função `trapez`, desenvolvida no problema **1**, para o cálculo da função de Bessel $J_0(x)$ através da fórmula

$$J_0(x) = \frac{1}{\pi}\int_0^\pi \cos(x \operatorname{sen} y)\, dy.$$

(b) Trace o gráfico da função $J_0(x)$.

---

3) ***(Função erro)*** Uma função especial frequentemente empregada em análise estatística é a *função erro*, definida por

$$\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_0^x e^{-y^2} dy.$$

(a) Escreva uma função que implemente o cálculo de $\operatorname{erf}(x)$ a partir da função `trapez` desenvolvida no problema **1**.

(b) Trace o gráfico de $\operatorname{erf}(x)$ no intervalo $0 \leqslant x \leqslant 5$.

---

4) ***(Fórmula de Gauss-Chebyshev)***

(a) Escreva uma rotina que calcula a quadratura de Gauss-Chebyshev para um intervalo arbitrário:

$$I_{GS} = \int_{x_1}^{x_2} \frac{f(y)dy}{\sqrt{(y-x_1)(x_2-y)}} \qquad (1)$$

A rotina deve possuir os seguintes parâmetros mudos:

$$\text{Entrada:} \begin{cases} x_1; & \text{Limite inferior.} \\ x_2; & \text{Limite superior.} \\ \texttt{F}; & \text{Função } f(y) \text{ a ser integrada.} \\ N; & \text{Número de pontos na quadratura.} \end{cases}$$

Saída: I; Valor da quadratura.

(b) ***(Período de um pêndulo não linear)*** O período $T(\theta_0)$ de um pêndulo plano é dado pela fórmula

$$\frac{1}{4}\sqrt{\frac{2g}{\ell}}T(\theta_0) = \tau(\theta_0) = \int_0^{\theta_0} \frac{d\theta}{\sqrt{\cos\theta - \cos\theta_0}}, \qquad (2)$$

sendo ℓ o comprimento do pêndulo, g a aceleração gravitacional e θ_0 ($< \pi$) o deslocamento angular máximo do pêndulo em relação à linha vertical.[2] Escreva um programa que calcule $\tau(\theta_0)$ (ou seja, somente a integral) para diversos valores de θ_0 no intervalo $0 < \theta_0 \leqslant \pi$ (no mínimo 10). Para tanto, execute os seguintes passos:

(i) Defina uma nova variável de integração

$$y = \cos\theta$$

e mostre que (2) pode ser escrito como

$$\tau(\theta_0) = \int_{\cos\theta_0}^1 \frac{dy}{\sqrt{1+y}\sqrt{(1-y)(y-\cos\theta_0)}}.$$

(ii) Mostre como a integração acima pode ser escrita na forma de uma integral de Gauss-Chebyshev do tipo (1).

(c) Trace o gráfico de $\tau(\theta_0)$ para $0 \leqslant \theta_0 < \pi$ utilizando o programa desenvolvido no item *(b)*.

---

5) ***(Difração de canto)*** O fenômeno da difração, que indica a natureza ondulatória da luz, não ocorre somente quando uma onda plana incide sobre uma fenda cuja largura é da mesma ordem de grandeza do comprimento de onda da radiação incidente. Difração ocorre também quando uma onda plana incide sobre um canto agudo, como o fio de uma navalha. Se a luz incidente é monocromática e coerente, um padrão característico de difração irá surgir em um anteparo posicionado após o obstáculo. Esta é a chamada difração de canto, a qual está ilustrada na figura 1.

[1] Apostila: Introdução à Física Computacional, disponível em `http://professor.ufrgs.br/rgaelzer/pages/comp-phys`.
[2] A obtenção desta fórmula pode ser vista em: Jerry B. Marion. *Classical Dynamics of Particles and Systems*, seção 5.4.

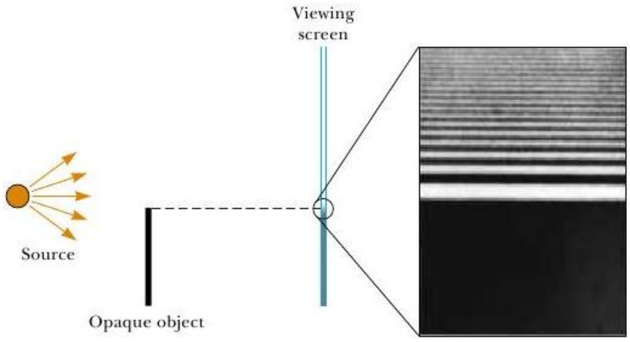

Figura 1: *Luz monocromática de uma fonte incide sobre o canto de um objeto e se projeta sobre um anteparo. O padrão de difração resultante consiste em uma série de franjas claras e escuras que se caracterizam por largura e distância variáveis e que se projetam acima da sombra do obstáculo.*

A intensidade da luz difratada varia com a posição ao longo do anteparo, partindo da linha perpendicular que liga o mesmo ao canto do obstáculo representado na figura 1, de acordo com a expressão

$$I(y) = \frac{I_0}{2}\left\{\left[C(y)+\frac{1}{2}\right]^2+\left[S(y)+\frac{1}{2}\right]^2\right\},$$

onde I_0 é a intensidade da luz incidente no obstáculo e y é a distância ao longo do anteparo a partir da linha de referência. As funções $C(y)$ e $S(y)$ são as *integrais de Fresnel*

$$C(y) = \int_0^y \cos\left(\frac{\pi}{2}w^2\right)dw$$
$$S(y) = \int_0^y \operatorname{sen}\left(\frac{\pi}{2}w^2\right)dw.$$

Utilize a sub-rotina `quad_rom`[3] para traçar o gráfico de $I(y)/I_0$ para y no intervalo $[-5,5]$. A subrotina deve ser invocada com um erro relativo máximo de 10^{-3}. Entregue o programa e o gráfico.

---

6) ***(Integral exponencial)*** Uma função especial que aparece com frequência em problemas de física matemática é a *Integral Exponencial* $E_n(x)$, definida como

$$E_n(x) = \int_x^\infty \frac{e^{-t}}{t^n}dt, \qquad (3)$$

sendo $x>0$ e $n=0,1,2,\ldots$. Como esta integral não possui primitiva, o cálculo da função $E_n(x)$ deve ser realizado por meio de algum método numérico.

(a) Mostre, por meio de uma mudança de variável de integração, que a integral (3) pode ser escrita de uma forma adequada para a aplicação do método de Gauss-Laguerre como

$$E_n(x) = e^{-x}\int_0^\infty \frac{e^{-y}dy}{(x+y)^n}. \qquad (4)$$

(b) Escreva a função `en`, a qual implementa o cálculo de (4) usando o método de Gauss-Laguerre. A função deve conter os seguintes argumentos mudos:

- `n`: variável inteira que indica a ordem da função $E_n(x)$.
- `x`: variável real de precisão dupla (abcissa).
- `errrel`: variável real de precisão dupla que determina o erro relativo máximo entre dois cálculos consecutivos da integral em (4).

O erro deve ser estimado da seguinte forma: sendo $I(n,x;m)$ uma aproximação da integral em (4) para a função $E_n(x)$ de argumentos n e x, calculada através do método de Gauss-Laguerre com m pontos, a função deverá calcular inicialmente $I(n,x;2)$ e $I(n,x;3)$ e então verificar a diferença relativa entre estes dois resultados. A função deverá então calcular a diferença relativa entre dois resultados consecutivos para m e $m+1$ pontos ($m \geqslant 2$), interrompendo o processamento somente quando o seguinte critério for satisfeito:

$$\left|\frac{I(n,x;m+1)-I(n,x;m)}{I(n,x;m+1)}\right| \leqslant \texttt{errrel}.$$

Neste caso, o valor assumido para $E_n(x)$ será aquele fornecido a partir de $I(n,x;m+1)$.

(c) Escreva um programa que chame `en` para gerar arquivos de dados destinados a traçar gráficos de $E_n(x)$. Com este programa, trace of gráfico de $E_n(x)$ para $0.01 \leqslant x \leqslant 2$ e para $n=\{0,1,2,\ldots,5\}$, chamando a função com um erro relativo de, no mínimo, $\texttt{errrel} = 10^{-3}$. Apresente todas as curvas em um único gráfico.

Obs: As abcissas e os pesos para a fórmula de Gauss-Laguerre podem ser obtidos a partir da sub-rotina `xw_Laguerre`, a qual é uma rotina do módulo `Modelos_Computacionais_Fisica`. Este módulo e demais rotinas necessárias para a resolução deste trabalho podem ser encontrados em `http://professor.ufrgs.br/rgaelzer/pages/comp-phys`.

---

7) ***(Propagação de um Pulso Eletromagnético em um Meio Dispersivo Unidimensional)*** Certos meios contínuos, como fluidos ou gases ionizados, são opticamente ativos, possuindo, entre outras, a propriedade de serem *dispersivos*, isto é, a sua constante dielétrica é uma função da frequência das ondas eletromagnéticas que por ele se propagam. Como consequência, ondas de diferentes frequências se deslocam pelo meio com diferentes velocidades de fase. Se a radiação eletromagnética incide sobre o meio como um pacote de ondas de extensão finita, este pacote tende a se dispersar pela interação das ondas com o meio.

Uma onda eletromagnética de frequência ν e comprimento de onda λ somente pode se propagar em um meio dispersivo se ν e λ satisfizerem uma *relação de dispersão* $\omega=\omega(\boldsymbol{k})$, onde $\omega=2\pi\nu$ é a frequência angular da

[3] Programa 4.3 em: Introdução à Física Computacional.

onda e $\boldsymbol{k}$ é o vetor de onda, cujo módulo é $k = 2\pi/\lambda$.

Neste problema, considera-se um pacote de ondas propagando-se em um meio dispersivo unidimensional, cujas propriedades eletromagnéticas são caracterizadas pela relação de dispersão

$$\omega = \omega_0 \left(1 + \frac{a^2}{2} k^2\right);$$

isto é, somente podem se propagar pelo meio ondas com frequência $\omega \geqslant \omega_0$. Este tipo de comportamento é apresentado por gases ionizados (plasmas), por exemplo.

Supõe-se que um pulso de radiação eletromagnética de comprimento finito é emitido no instante $t = 0$ em algum ponto deste meio, em ambos os sentidos de propagação. Este pulso de extensão finita consiste em um pacote de ondas com diversos valores de λ, centrados em $\lambda_0 = 2\pi/k_0$ e com suas amplitudes moduladas por uma função gaussiana. A descrição deste pacote de ondas é:

$$u(x, 0) = e^{-x^2/2L^2} \cos k_0 x,$$

sendo $u(x, t)$ a amplitude do campo elétrico da onda no posição x e no instante t, escrita de forma adimensional. O parâmetro L mede a extensão deste pacote de ondas.

Para instantes posteriores ($t > 0$), a amplitude do campo elétrico $u(x, t)$ será dada pela integral [1, seção 7.9]

$$\boxed{u(\chi, \tau) = U_0 \int_0^\infty \left[e^{-\beta(\kappa-1)^2} + e^{-\beta(\kappa+1)^2}\right] \cos(\kappa\chi) \cos\left[\tau\left(1 + \alpha\kappa^2\right)\right] d\kappa,}$$

sendo $U_0 = k_0 L/\sqrt{2\pi}$, $\chi = k_0 x$, $\tau = \omega_0 t$, $\alpha = k_0^2 a^2/2$ e $\beta = k_0^2 L^2/2$.

Use a rotina `qpmi_rom` para calcular a integral imprópria na expressão acima e trace gráficos de $u(\chi, \tau)/U_0$ em função de χ para diferentes instantes τ. Use sempre $\alpha = 1$, mas considere 2 regimes para β. Para cada regime, trace os gráficos para 3 instantes de tempo e com uma variação de χ grande o suficiente para mostrar completamente os pacotes de onda. Os regimes são os seguintes:

1. $\boldsymbol{\beta \gg 1}$ (baixa dispersão). Corresponde a um feixe largo ($k_0 L \gg 1$), com vários comprimentos de onda contidos dentro da envoltória. Use $\beta = 50$. Os instantes de tempo sugeridos são: $\tau = 0$, 50 e 100.

2. $\boldsymbol{\beta \ll 1}$ (alta dispersão). Corresponde a um feixe estreito ($k_0 L \ll 1$), com poucos comprimentos de onda contidos dentro da envoltória. Use $\beta = 0.5$. Os instantes de tempo sugeridos são: $\tau = 0$, 5 e 15.

Entregue o programa que gerou os dados, os gráficos e comentários a respeito dos resultados obtidos. O que se pode concluir a respeito do comportamento dos pacotes de ondas em cada regime?

Referências

[1] J. D. Jackson. *Classical Electrodynamics*. John Wiley & Sons, New York, third edition, 1999. 808 + xxi pp.