

# FÍSICA COMPUTACIONAL I

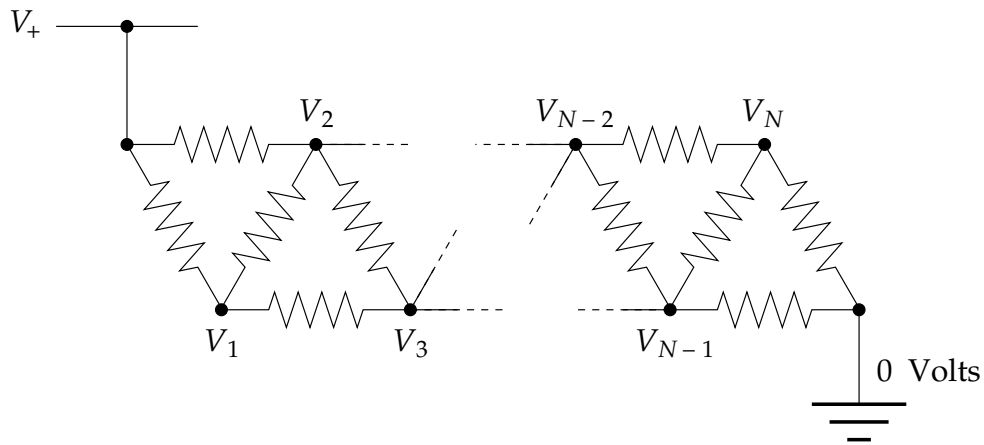
LISTA DE EXERCÍCIOS VIII - DATA PARA ENTREGA: 13/05/2019

---

**Problema 1:** (0.1pt) Começando com o programa `springsb.py` disponível no SIGAA, remova a parte do código que gera um gráfico dos resultados e coloque em seu lugar um código que cria uma animação das massas a medida que elas vibram para frente e para trás, com seus deslocamentos relativos das posições de equilíbrio sendo dadas pela parte real da equação  $u_i(t) = x_i e^{i\omega t}$ . Por clareza, assuma que a posição de repouso das massas estão separadas por duas unidades em um eixo horizontal. Sua animação deve ao menos mostrar cada uma das massas individuais, talvez como esferas. (Esferas de raio de cerca de 0.2 ou 0.3 funcionam bem).

## Problema 2: Uma cadeia de resistores (0.25 pt)

Considere uma cadeia longa de resistores conectados conforme a figura abaixo:



Todos os resistores têm a mesma resistência  $R$ . Considerando que  $V_+ = 5V$ , o problema é determinar as voltagens  $V_1 \dots V_N$  nos pontos internos do circuito.

- a) (Opcional) Usando a lei de Kirchhoff, que diz que a fluxo de corrente líquido em qualquer nó deve ser nulo, mostre que as voltagens  $V_1 \dots V_N$  satisfazem as equações

$$\begin{aligned} 3V_1 - V_2 - V_3 &= V_+, \\ -V_1 + 4V_2 - V_3 - V_4 &= V_+, \\ &\vdots \\ -V_{i-2} - V_{i-1} + 4V_i - V_{i+1} - V_{i+2} &= 0, \\ &\vdots \\ -V_{N-3} - V_{N-2} + 4V_{N-1} - V_N &= 0, \\ -V_{N-2} - V_{N-1} + 3V_N &= 0. \end{aligned}$$

Expresse essas equações na forma vetorial  $\mathbf{A}\mathbf{v} = \mathbf{w}$  e encontre os valores da matriz  $\mathbf{A}$  e do vetor  $\mathbf{w}$ .

- b) Escreva um programa que determina os valores de  $V_i$  quando existem  $N = 6$  junções internas com voltagens desconhecidas. (Dica: Todos os valores  $V_i$  devem estar entre zero e 5V. Se não estiverem, alguma coisa está errada.)
- c) Agora repita seus cálculos para o caso quando  $N = 10000$ . Nessa parte não é possível usar funções como `solve` do `numpy`. Você deve precisar usar o fato que a matriz  $\mathbf{A}$  é semelhante a uma matriz triangular mas tem muitos zeros fora da diagonal principal. Ou seja, sua matriz é da forma

$$\begin{pmatrix} a_{00} & a_{01} & a_{02} & & & \\ a_{10} & a_{11} & a_{12} & a_{13} & & \\ a_{20} & a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} & \\ & a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} & a_{35} \\ & & a_{42} & a_{43} & a_{44} & a_{45} & a_{46} \\ & & & a_{53} & a_{54} & a_{55} & a_{56} \\ & & & & a_{64} & a_{65} & a_{66} \end{pmatrix}$$

Você pode usar a função `banded` do livro do Mark Newman (disponível no SIGAA).

(Dica: Cuidado ao usar a função `banded`: a matriz  $\mathbf{A}$  que deve ser dada possui um formato específico, que não é o de uma matriz quadrada  $N \times N$ . Consulte a documentação da função, ou abrindo o `banded.py` ou consultando o apêndice E, que está disponível no SIGAA).

### Problema 3: O algoritmo QR (0.3 pt)

Nesse exercício você irá escrever um programa para calcular os autovalores e autovetores de uma matriz simétrica e real usando o algoritmo QR. O primeiro desafio é escrever um programa que calcula a decomposição QR de uma matriz. Iremos então usar essa decomposição para determinar os autovalores.

A decomposição QR expressa uma matriz quadrada real  $\mathbf{A}$  na forma  $\mathbf{A} = \mathbf{Q}\mathbf{R}$ , onde  $\mathbf{Q}$  é uma matriz ortogonal e  $\mathbf{R}$  é uma matriz triangular superior. Dada uma matriz  $\mathbf{A}$   $N \times N$ , podemos calcular a decomposição QR da seguinte maneira.

Vamos imaginar a matriz como um conjunto de  $N$  vetores colunas  $\mathbf{a}_0 \dots \mathbf{a}_{N-1}$  assim:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} | & | & | & \dots \\ \mathbf{a}_0 & \mathbf{a}_1 & \mathbf{a}_2 & \dots \\ | & | & | & \dots \end{pmatrix},$$

onde numeramos os vetores da maneira Python, iniciando em zero, que será conveniente para quando formos escrever o programa. Definimos agora dois novos conjuntos de vetores  $\mathbf{u}_0 \dots \mathbf{u}_{N-1}$  e  $\mathbf{q}_0 \dots \mathbf{q}_{N-1}$  como segue:

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_0 &= \mathbf{a}_0, & \mathbf{q}_0 &= \frac{\mathbf{u}_0}{|\mathbf{u}_0|}, \\ \mathbf{u}_1 &= \mathbf{a}_1 - (\mathbf{q}_0 \cdot \mathbf{a}_1)\mathbf{q}_0, & \mathbf{q}_1 &= \frac{\mathbf{u}_1}{|\mathbf{u}_1|}, \\ \mathbf{u}_2 &= \mathbf{a}_2 - (\mathbf{q}_0 \cdot \mathbf{a}_2)\mathbf{q}_0 - (\mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{a}_2)\mathbf{q}_1, & \mathbf{q}_2 &= \frac{\mathbf{u}_2}{|\mathbf{u}_2|}, \end{aligned}$$

e assim sucessivamente. A fórmula geral para calcular  $\mathbf{u}_i$  e  $\mathbf{q}_i$  é

$$\mathbf{u}_i = \mathbf{a}_i - \sum_{j=0}^{i-1} (\mathbf{q}_j \cdot \mathbf{a}_i) \mathbf{q}_j, \quad \mathbf{q}_i = \frac{\mathbf{u}_i}{|\mathbf{u}_i|}.$$

a) Mostre, por indução, que os vetores  $\mathbf{q}_i$  são ortonormais, i.e., satisfazem

$$\mathbf{q}_i \cdot \mathbf{q}_j = \begin{cases} 1 & \text{if } i = j, \\ 0 & \text{if } i \neq j. \end{cases}$$

(A parte acima do item (a) é opcional). Rearranjando as definições dos vetores, temos

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_0 &= |\mathbf{u}_0| \mathbf{q}_0, \\ \mathbf{a}_1 &= |\mathbf{u}_1| \mathbf{q}_1 + (\mathbf{q}_0 \cdot \mathbf{a}_1) \mathbf{q}_0, \\ \mathbf{a}_2 &= |\mathbf{u}_2| \mathbf{q}_2 + (\mathbf{q}_0 \cdot \mathbf{a}_2) \mathbf{q}_0 + (\mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{a}_2) \mathbf{q}_1, \end{aligned}$$

e assim sucessivamente. Ou, podemos agrupar os vetores  $\mathbf{q}_i$  como as colunas de uma matriz e escrever todas as equações como uma equação matricial simples

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} | & | & | & \cdots \\ \mathbf{a}_0 & \mathbf{a}_1 & \mathbf{a}_2 & \cdots \\ | & | & | & \cdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} | & | & | & \cdots \\ \mathbf{q}_0 & \mathbf{q}_1 & \mathbf{q}_2 & \cdots \\ | & | & | & \cdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |\mathbf{u}_0| & \mathbf{q}_0 \cdot \mathbf{a}_1 & \mathbf{q}_0 \cdot \mathbf{a}_2 & \cdots \\ 0 & |\mathbf{u}_1| & \mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{a}_2 & \cdots \\ 0 & 0 & |\mathbf{u}_2| & \cdots \end{pmatrix}.$$

(Se parecer complicado, vale a pena fazer a multiplicação das matrizes no lado direito para verificar você mesmo que irá obter as equações corretas para os vetores  $\mathbf{a}_i$ .)

Observe agora que a primeira matriz no lado direito da equação acima, a matriz com colunas  $\mathbf{q}_i$ , é ortogonal, devido o fato que os vetores  $\mathbf{q}_i$  são ortonormais. A segunda matriz é triangular superior. Em outras palavras, nós encontramos a decomposição QR:  $\mathbf{A} = \mathbf{Q}\mathbf{R}$ . As matrizes  $\mathbf{Q}$  e  $\mathbf{R}$  são

$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} | & | & | & \cdots \\ \mathbf{q}_0 & \mathbf{q}_1 & \mathbf{q}_2 & \cdots \\ | & | & | & \cdots \end{pmatrix}, \quad \mathbf{R} = \begin{pmatrix} |\mathbf{u}_0| & \mathbf{q}_0 \cdot \mathbf{a}_1 & \mathbf{q}_0 \cdot \mathbf{a}_2 & \cdots \\ 0 & |\mathbf{u}_1| & \mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{a}_2 & \cdots \\ 0 & 0 & |\mathbf{u}_2| & \cdots \end{pmatrix}.$$

b) Escreva uma função que recebe como argumento uma matriz quadrada real  $\mathbf{A}$  e retorna duas matrizes  $\mathbf{Q}$  e  $\mathbf{R}$  que forma a decomposição QR. Como um caso de teste, tente usar sua função na matriz

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 4 & 8 & 4 \\ 4 & 2 & 3 & 7 \\ 8 & 3 & 6 & 9 \\ 4 & 7 & 9 & 2 \end{pmatrix}.$$

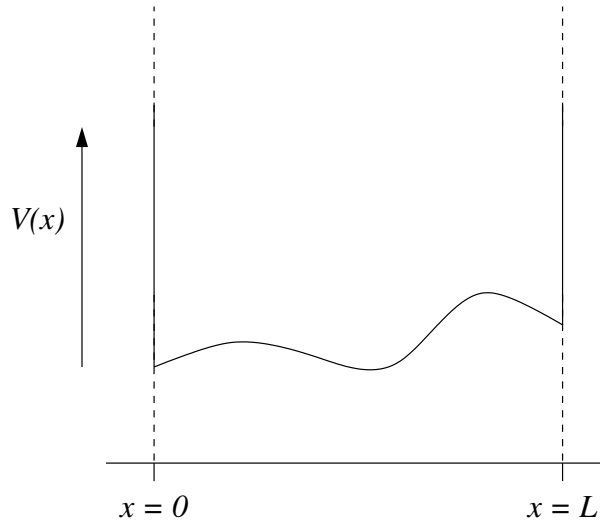
Verifique o resultado multiplicando as matrizes  $\mathbf{Q}$  e  $\mathbf{R}$  e obtenha a matriz original  $\mathbf{A}$  novamente.

c) Usando sua função, escreva um programa completo para calcular os autovalores e autovetores de uma matriz simétrica real, usando a decomposição QR. Continue o cálculo até que todos os elementos fora da diagonal da matriz tenham valores em módulo menores que  $10^{-6}$ . Teste seu programa na matriz acima. Você deve encontrar que os autovalores são 1, 21, -3 e -8.

(Dicas: Lembre que a função dot pode ser usada para calcular o produto escalar, se vetores forem usados como argumentos. Se matrizes forem usadas como argumento, a função dot pode ser usada para multiplicar matrizes. A função norm do numpy.linalg também pode ser útil.)

#### Problema 4: O poço quântico assimétrico (0.35 pt)

Problemas de Mecânica Quântica podem ser formulados como um problema envolvendo matrizes, que podem ser resolvidos no computador usando métodos de álgebra linear. Suponha, por exemplo, que temos uma partícula de massa  $M$  em um poço de potencial quântico unidimensional de largura  $L$ , mas não um poço quadrado, como o do exemplo visto na lista 5. Suponha, ao invés disso, que o potencial  $V(x)$  varia de alguma maneira dentro do poço:



Não podemos resolver esse problema analiticamente de uma forma geral, mas podemos resolvê-lo numericamente, com o auxílio do computador.

Em um estado puro de energia  $E$ , a parte espacial da função de onda obedece a equação de Schrödinger independente do tempo  $\hat{H}\psi(x) = E\psi(x)$ , onde o operador Hamiltoniano  $\hat{H}$  é dado por

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dx^2} + V(x).$$

Por simplicidade, considere que as paredes do poço de potencial têm altura infinita, de maneira que a função de onda é nula fora do poço, ou seja a função de onda *vai a* zero em  $x = 0$  e  $x = L$ . Nesse caso, a função de onda pode ser expressa como uma série:

$$\psi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \psi_n \sin \frac{\pi n x}{L},$$

onde  $\psi_1, \psi_2, \dots$  são coeficientes.

a) Observando que, para  $m, n$  inteiro positivos

$$\int_0^L \sin \frac{\pi m x}{L} \sin \frac{\pi n x}{L} dx = \begin{cases} L/2 & \text{se } m = n, \\ 0 & \text{caso contrário,} \end{cases}$$

mostre que a equação de Schrödinger  $\hat{H}\psi = E\psi$  implica que

$$\sum_{n=1}^{\infty} \psi_n \int_0^L \sin \frac{\pi m x}{L} \hat{H} \sin \frac{\pi n x}{L} dx = \frac{1}{2} L E \psi_m.$$

Então, definindo uma matriz  $\mathbf{H}$  com elementos

$$\begin{aligned} H_{mn} &= \frac{2}{L} \int_0^L \sin \frac{\pi m x}{L} \hat{H} \sin \frac{\pi n x}{L} dx \\ &= \frac{2}{L} \int_0^L \sin \frac{\pi m x}{L} \left[ -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \sin \frac{\pi n x}{L} dx, \end{aligned}$$

mostre que a equação de Schrödinger pode ser escrita na forma matricial  $\mathbf{H}\boldsymbol{\psi} = E\boldsymbol{\psi}$ , onde  $\boldsymbol{\psi}$  é um vetor  $(\psi_1, \psi_2, \dots)$ . Assim  $\boldsymbol{\psi}$  é um autovetor da matriz Hamiltoniana  $\mathbf{H}$  com autovalores  $E$ . Se pudermos calcular os autovalores dessa matriz, então conheceremos os valores de energia permitidos da partícula no poço.

- b) Para o caso  $V(x) = ax/L$ , calcule a integral em  $H_{mn}$  analiticamente e então determine uma expressão geral para os elementos de matriz  $H_{mn}$ . Mostre que a matriz é real e simétrica. Você provavelmente irá precisar da seguinte relação

$$\int_0^L x \sin \frac{\pi m x}{L} \sin \frac{\pi n x}{L} dx = \begin{cases} 0 & \text{se } m \neq n \text{ e ambos são pares ou ímpares,} \\ -\left(\frac{2L}{\pi}\right)^2 \frac{mn}{(m^2 - n^2)^2} & \text{se } m \neq n \text{ e um deles é par e o outro ímpar,} \\ L^2/4 & \text{if } m = n. \end{cases}$$

Escreva um programa que calcula a expressão  $H_{mn}$  para valores arbitrários  $m$  e  $n$  quando a partícula no poço é um elétron, o poço tem largura  $5 \text{ \AA}$  e  $a = 10 \text{ eV}$ . (A massa e carga do elétron são  $9.1094 \times 10^{-31} \text{ kg}$  e  $1.6022 \times 10^{-19} \text{ C}$ , respectivamente.)

- c) A matriz  $\mathbf{H}$  é, em teoria, infinita (tem dimensão infinita), de maneira que não podemos calcular todos os seus autovalores. Mas podemos obter uma solução bastante acurada para os primeiros autovalores truncando a matriz nos primeiros elementos. Modifique seu programa na parte (b) acima para criar uma matriz  $10 \times 10$  de elementos de  $\mathbf{H}$  até  $m, n = 10$ . Calcule os autovalores dessa matriz usando uma função apropriada da biblioteca `numpy.linalg` e imprima os primeiros dez níveis de energia, em unidades de elétrons volts. Você deve encontrar, por exemplo, que o nível do estado fundamental é da ordem de  $5.84 \text{ eV}$ . (Dica: Tenha em mente que os índices de matrizes em Python e C iniciam em zero, enquanto os índices na notação padrão, como acima, iniciam em 1)
- d) Modifique seu programa para usar uma matriz  $100 \times 100$  ao invés da matriz acima e então calcule os dez primeiros níveis de energia. Compare com os valores da parte (c), o que você conclui a respeito de precisão do cálculo?
- e) (Extra:+0.2) Modifique seu programa novamente para calcular a função de onda  $\psi(x)$  para o estado fundamental e os dois primeiros estados excitados de energia. Use seus resultados para fazer um gráfico com três curvas, mostrando a densidade de probabilidades  $|\psi(x)|^2$  como uma função de  $x$ . Preste atenção na normalização da função de onda, ela deve satisfazer a condição  $\int_0^L |\psi(x)|^2 dx = 1$ . Isso é verdadeiro para sua função de onda? (+0.1 pt: caso não seja, modifique para que passe a ser)