
NOTAS DE AULA:

MÉTODOS MATEMÁTICOS PARA A FÍSICA

ETERNAMENTE EM CONSTRUÇÃO!

PAULO FREITAS GOMES

PAULOFREITASGOMES@UFJ.EDU.BR

Universidade Federal de Jataí.

Conteúdo

1 Cálculo Diferencial Vetorial	15
1.1 Trigonometria	15
1.1.1 Ciclo trigonométrico	15
1.1.2 Lei dos Senos e Cossenos	17
1.2 Vetores	19
1.2.1 Delta de Krönecker e de Levi-Civita	19
1.2.2 Produto escalar	20
1.2.3 Produto vetorial	20
1.2.4 Versores cartesianos	21
1.2.5 Como representar um vetor?	22
1.2.6 Produto Triplo	24
1.2.7 Vetores posição, deslocamento e separação	24
1.3 Coordenadas Curvilíneas	26
1.3.1 Coordenadas Cilíndricas	26
1.3.2 Coordenadas Esféricas	28
1.4 Cálculo Diferencial	29
1.4.1 Operador ∇ e suas aplicações	30
1.4.2 Regras de produto	33
1.4.3 Operador nabla em coordenadas curvilíneas	34

1.5 Teorema Fundamental do Cálculo	37
1.5.1 Integrais	37
1.5.2 Teorema Fundamental do Gradiente	39
1.5.3 Teorema do Divergente e do Rotacional	39
1.5.4 A função Delta de Dirac	40
1.6 Leitura Adicional	43
2 Séries Infinitas	45
2.1 Testes de convergência	46
2.1.1 Convergência absoluta	47
2.2 Séries de Funções	48
2.2.1 Teste Weierstrass M	49
2.3 Expansão de Taylor	50
2.4 Séries de potências	53
2.4.1 Obtenção para séries de potências	55
2.4.2 Série Binomial	56
2.5 Números de Bernoulli	56
2.5.1 Aplicações	57
3 Números Complexos	61
3.1 Álgebra Complexa	62
3.1.1 Forma polar	63
3.2 Funções complexas	64
3.3 Condições de Cauchy-Riemann	69
3.3.1 Derivadas de funções elementares	69
4 Equações Diferenciais Ordinárias	71
4.1 Classificações	71

4.1.1	Solução geral e particular	72
4.1.2	Princípio da superposição	73
4.1.3	Homogênea não homogênea	73
4.2	EDO de ordem 1	74
4.2.1	Separação de variáveis	74
4.2.2	EDO de ordem 1 homogênea	76
4.2.3	Exponencial como solução tentativa	77
4.2.4	EDO exata	78
4.2.5	Solução geral para EDO linear	79
4.3	EDO de ordem 2	81
4.3.1	EDO sem o termo y	82
4.3.2	Solução tentativa: exponencial	83
4.3.3	Oscilador Harmônico	85
4.3.4	Solução em série de potências	86
4.4	Métodos Numéricos	88
4.4.1	Método de Euler	89
4.4.2	Méto de Runge-Kutta de ordem 2	90
4.4.3	Méto de Runge-Kutta de ordem 4	91
4.5	Problema de 2 corpos	96
4.5.1	Problema de 3 corpos	96
4.5.2	Sistema planetário	97
4.6	Referências	101
5	Funções especiais	103
5.1	Funções de Bessel	103
5.1.1	Solução em série	105
5.1.2	Outras funções	106

5.1.3	Funções de Bessel esféricas	107
5.2	Polinômios de Legendre	112
5.2.1	Potencial eletrostático: expansão multipolar	113
5.2.2	Polinômios associados de Legendre	114
5.3	Conjunto completo	116
5.3.1	Funções de Bessel	116
5.3.2	Polinômios de Legendre	117
6	Teoria de Sturm-Liouville	119
6.1	EDO auto-adjunta	119
6.1.1	Autovetores e autovalores	120
6.1.2	Operadores Hermitianos	120
7	Análise de Fourier	123
7.1	Expansão em séries	123
7.1.1	Séries de Fourier Complexas	127
7.1.2	Mudança de intervalo	128
7.1.3	Propriedades	128
7.2	Transformada de Fourier	130
7.2.1	TF de seno e cosseno e δ de Dirac	132
7.2.2	Equações Diferenciais	133
7.2.3	Representação de momento	134
7.3	Transformada de Laplace	136
7.3.1	TL de funções elementares	137
7.3.2	Derivadas	138
7.3.3	Transformada da δ de Dirac	139
7.4	Transformada de Fourier Discreta (DFT)	141
7.4.1	DFT inversa	143

7.4.2	Interpretação física	144
7.4.3	Transformada de Fourier Rápida	146
8	Equações diferenciais parciais	151
8.1	Classificação e aplicações na Física	151
8.1.1	Condições de contorno	153
8.1.2	Operador linear	153
8.2	Separação de variáveis em coordenadas cartesianas	154
8.2.1	Difusão de calor	155
8.2.2	Método Numérico: Diferenças Finitas	159
8.2.3	Potencial elétrico	160
8.3	Separação de variáveis em coordenadas cilíndricas	163
8.3.1	Eq. de difusão térmica	165
8.3.2	Separação de variáveis em coordenadas polares	167
8.4	Separação de variáveis em coordenadas esféricas	168
8.4.1	Harmônicos esféricos $Y_l^m(\theta, \phi)$	169
8.4.2	Simetria azimutal	171
8.4.3	Eq. de Schrodinger	173
8.4.4	Resumo	176
9	Teoria de Probabilidades	179
9.1	Definições básicas	179
9.2	Variáveis aleatórias	180
9.2.1	Médias e desvio padrão	180
9.2.2	Distribuições com mais de uma variável	181
9.2.3	Soma, produto e razão de variáveis aleatórias	184
9.3	Exemplos de distribuições aleatórias	185
9.3.1	Distribuição Binomial	185

9.3.2 Distribuição de Poisson	185
9.3.3 Distribuição Gaussiana	185
9.3.4 Lei de potência	186
9.4 Distribuição acumulada de probabilidades	187
A Algumas tabelas importantes	189
A.1 Alfabeto grego	189
A.2 Constantes Fundamentais	189
B Resultados úteis	191
B.1 Trigonometria	191
B.2 Integrais úteis	192
B.3 Diversos	192
B.3.1 Expansão binomial	192
C Equações que mudaram o mundo	193

Listas de Figuras

1.1	Ciclo trigonométrico	17
1.2	Ciclo trigonométrico	18
1.3	(a) Representação da soma de vetores pelo método do polígono. (b) Produto escalar entre os vetores \mathbf{A} e \mathbf{B} , cujas direções fazem um ângulo menor θ .	19
1.4	(a) Sistema cartesiano xyz destrógiro. (b) Decomposição do vetor $\vec{A} = \mathbf{A}$ em suas componentes nos eixos x e y . Do produto escalar, ângulo entre o mesmo com o eixo x é tal que $\vec{A} \cdot \hat{x} = \cos \theta$.	22
1.5	(a) Vetor posição \mathbf{r} . (b) Vetor separação.	25
1.6	(a) Sistema de coordenadas cilíndricas s, φ, z . (b) Sistema de coordenadas esféricas com as direções dos versores unitários. Fonte: Wikipedia https://en.wikipedia.org/wiki/File:Kugelkoord-lokale-Basis-s.svg .	28
1.7	Campos vetoriais com divergente e rotacional.	32
2.1	Cálculo numérico do número π .	48
2.2	Séries.	53
3.1	(a) Plano complexo com alguns pontos representados. (b) Representação polar de um número complexo.	63
3.2	Circuito RLC.	65
3.3	Fractais como gráficos de funções complexas.	67
3.4	Gráfico de $\zeta(s)$.	68
4.1	Circuito RL.	77

4.2	Resultados numéricos para o sistema massa mola.	94
4.3	Solução numérica das equações diferenciais do atrator de Lorentz.	95
4.4	Sistema planetário.	100
5.1	(a) Funções de Bessel $J_n(x)$ e $Y_n(x)$ para $n = 1, 2$. (b) Funções de Bessel esférica $j_n(x)$ e $y_n(x)$ para $n = 1, 2$	105
5.2	Potencial de uma carga pontual calculada em uma posição arbitrária.	114
7.1	Figura referente ao exemplo 7.1. Gráfico de $f(x)$ da Eq. 7.6 e da expansão $g_q(x)$ da Eq. 7.7 com $q = 2$ e $q = 10$ termos.	125
7.2	Gráficos referente ao exemplo 7.???. (a) Função $f(t)$. (b) Função $F(\omega)$	131
7.3	Gráfico de um sinal sonoro y_k em vermelho e de sua transformada de Fourier discreta c_k em azul. O código está no Github: https://github.com/paulofreitasgomes/Math_Methods_for_Physics/tree/master/Fourier_Analysis	145
7.4	Ilustração da conexão entre frequência e tempo através da DFT.	145
7.5	Superior: gráfico de $y(t) = \sin(\omega t)$. Inferior: gráfico da Transformada Rápida de Fourier de $y(t)$	147
7.6	Transformada de Fourier do oboé e violino.	149
8.1	Problema 2.	156
8.2	Gráfico da temperatura no domínio.	160
8.3	Tubo metálico do exemplo 8.3.	161
8.4	Cubo metálico do Problema 8.6.	164
8.5	Cilindro mantido com uma temperatura constante na base e na lateral.	165
8.6	Gráfico do módulo $ Y_l^m $ dos harmônicos esféricos $Y_l^m(\theta, \varphi) = Y_l^m e^{i\alpha}$. A cor do volume é determinada pela fase α . (a) $l = m = 0$. (b) $l = 1$ e $m = 0$. (c) $l = 1$ e $m = -1$. (d) $l = 1$ e $m = 1$	171
9.1	(a) Distribuição de probabilidades gaussiana com média $\mu = 10.0$, $\sigma = 2.0$. Linha tracejada vermelha: PDF da gaussiana $p_g(x)$ (veja Eq. 9.3). Barras azuis: histograma com $N = 10^5$ pontos gerados aleatoriamente. Código da figura: 01 probabilidades. (b) teste.	186

Lista de Tabelas

1.1	Diferentes nomenclaturas para os versores	21
4.1	Tabela com os valores referentes ao exemplo 4.8.	91
4.2	UA significa Unidade astronômica, que é a unidade de distância definida como $1 \text{ UA} = \text{distância média entre Terra e Sol} = 150 \times 10^6 \text{ km}$	99
5.1	Funções de Bessel	104
8.1	EDPs em física	152
8.2	EDPs elípticas, parabólicas e hiperbólicas	152
8.3	Condições de contorno	153
A.1	Alfabeto grego.	189
A.2	Constantes fundamentais da Física.	190
C.1	Equações que mudaram o mundo.	194

Prefácio

The time will come when diligent research over long periods will bring to light things which now lie hidden. A single lifetime, even though entirely devoted to the sky, would not be enough for the investigation of so vast a subject... And so this knowledge will be unfolded only through long successive ages. There will come a time when our descendants will be amazed that we did not know things that are so plain to them... Many discoveries are reserved for ages still to come, when memory of us will have been effaced. Our universe is a sorry little affair unless it has in it something for every age to investigate... Nature does not reveal her mysteries once and for all. **Seneca, Natural Questions, livro 7, século I¹.**

Notação

Vetores são escritos em negrito: **A, B, v**, etc... Uma excessão é o símbolo do nabla, que terá uma flecha sobre quando representa um vetor: $\vec{\nabla}f$. Já vetores unitários (módulo 1) são identificaos pelo sinal do circunflexo: $|\hat{n}| = 1$, $|\hat{r}| = 1$. Vetores unitários são também chamados de versores.

Exercícios

Ao final de cada seção há uma lista de exercícios para treinamento do conteúdo apresentado. Todo o conteúdo necessário para resolver os exercícios estão na seção dos mesmos. Leia e releia quantas vezes for necessário a seção quando estiver com problema em algum exercício. A lista inicia com problemas simples e vai aumentando a dificuldade. Alguns exercícios são marcados por uma estrela \star , o que indica uma nível médio de dificuldade. Já os exercícios marcados por duas estrelas $\star\star$ são os mais difíceis da lista. Veja que essa dificuldade pode ser tanto em termos de conceito como em termos de trabalho. Um exercício diíícil em termos de conceito é aquele que tem alguma pegadinha, que busca um conceito distante ou que relaciona com conceitos de outra área. Já um exercício trabalhoso é aquele cujas solução demanda páginas e páginas de contas. Claro que eventualmente algum exercício $\star\star\star$ pode ser difícil tanto por conceito quanto por ser trabalhoso. Além disso, alguns problemas estão marcados por 3 estrelas: $\star\star\star$. Não apenas problemas difícieis, são muito

¹Retirado de "Cosmos", de Carl Sagan, Ballantine Books, New York, 2013.

difíceis e envolvendo questões abertas de pesquisa fundamental. Se você conseguir resolver algum desses, ficará muito famoso mundialmente, além de receber inúmeros convites para dar seminários em conferências internacionais!

Cálculo Diferencial Vetorial

[Mathematics] is an independent world created out of pure intelligence William Wordsworth



ESTE capítulo fazemos um resumo do cálculo vetorial diferencial apresentando os conceitos importantes como o operador nabla e os teoremas de Stokes e Gauss. É um resumo bem voltado aos conceitos mais usados em física, enfatizar o caráter didático, começamos com um resumo das principais funções trigonométricas, definições e resultados importantes. Em seguida apresentamos as definições básicas de vetores e produto escalar e vetorial e os sistemas de coordenadas cartesianas, cilíndricas e esféricas.

1.1 Trigonometria

Trigonometria é um ramo da matemática que descreve as relações entre lados e ângulos em triângulos. Os primeiros registros datam do século 3 AC dos estudos em astronomia. Ao longo da história da ciência trigonometria tem sido aplicado em praticamente todos os campos da matemática, física e química, tornando-se assunto essencial para qualquer área dentro das ciências exatas. As chamadas identidades trigonométricas são amplamente usadas como forma de simplificar expressões, encontrar formas mais úteis ou mesmo para se resolver equações. Nesta seção fazemos uma rápida introdução das funções principais e mostramos algumas dessas identidades, que serão úteis ao longo deste livro.

1.1.1 Ciclo trigonométrico

Um primeiro conceito fundamental é o ciclo trigonométrico, mostrado na figura 1.1(a), no qual se define as funções elementares seno, cosseno e tangente, respectivamente, escritas como sin, cos e tan. Essas funções sempre são avaliadas em ângulos, medidos em radianos ou graus, e aqui representado pelo símbolo α (a tabela A.1 apresenta todo o alfabeto grego). O ciclo trigonométrico é um círculo de raio 1.0 em um plano cartesiano xy . Seja o triângulo

retângulo onde a hipotenusa é o raio saindo da origem e fazendo um ângulo α com o eixo x . As definições das funções trigonométricas básicas são:

- O seno do ângulo α é definido como sendo o comprimento do lado oposto (vertical em vermelho).
- O cosseno do mesmo ângulo é o comprimento do lado adjacente (horizontal em azul).
- Já a tangente de α é definido como o comprimento da reta vertical (em marrom) em $x = 1$ limitada pelo mesmo raio. Além disso, tem-se que:

$$\tan \alpha = \frac{\sin \alpha}{\cos \alpha}.$$

Essas são as definições básicas de seno, cosseno e tangente. Já o ângulo α em si pode ser medido em graus ou em radianos. As definições são tais que um ciclo completo compreende um ângulo de 360 graus ou 2π radianos.

As funções elementares podem ser aplicadas para qualquer triângulo retângulo, como o ilustrado na figura 1.1(b). Usando as definições do ciclo trigonométrico, temos:

$$\sin \alpha = \frac{b}{c}, \quad \cos \alpha = \frac{a}{c}, \quad \tan \alpha = \frac{b}{a}. \quad (1.1)$$

A utilidade de senos e cossenos é exatamente calcular a projeção de um comprimento em uma dada direção. Além disso, o Teorema de Pitágoras¹ diz que:

$$c^2 = b^2 + a^2.$$

Na figura 1.2(a) está o ciclo trigonométrico com alguns valores de α em graus e radianos e os respectivos valores de cosseno e seno dentro do parêntesis, nessa ordem. Como o raio do ciclo trigonométrico é 1.0 por definição, o valor máximo de seno e cosseno para qualquer ângulo é 1.0, e o mínimo é -1.0. Já a tangente não é limitada, tendendo para o infinito quando o ângulo se aproxima de 90 graus.

A partir dessas 3 funções, outras definições também são bastante úteis. A cossecante (inverso do seno), secante (inverso do cosseno) e cotangente (inverso da tangente) são definidas respectivamente como:

$$\csc \alpha = \frac{1}{\sin \alpha}, \quad \sec \alpha = \frac{1}{\cos \alpha}, \quad \cot \alpha = \frac{1}{\tan \alpha}.$$

Aplicando o Teorema de Pitágoras no triângulo retângulo do ciclo trigonométrico, encontramos que:

$$\sin^2 \alpha + \cos^2 \alpha = 1.$$

Logo, podemos obter a partir desta:

$$1 + \cot^2 \alpha = \csc^2 \alpha, \quad 1 + \tan^2 \alpha = \sec^2 \alpha$$

¹Apesar de ter um nome definido há muita incerteza sobre quando este teorema foi proposto e provado pela primeira vez, e por quem. Pitágoras foi um pensador grego que nasceu por volta de 570 AC e que supostamente fez uma prova do teorema. Mas com certeza este teorema já era conhecido muito antes dele.

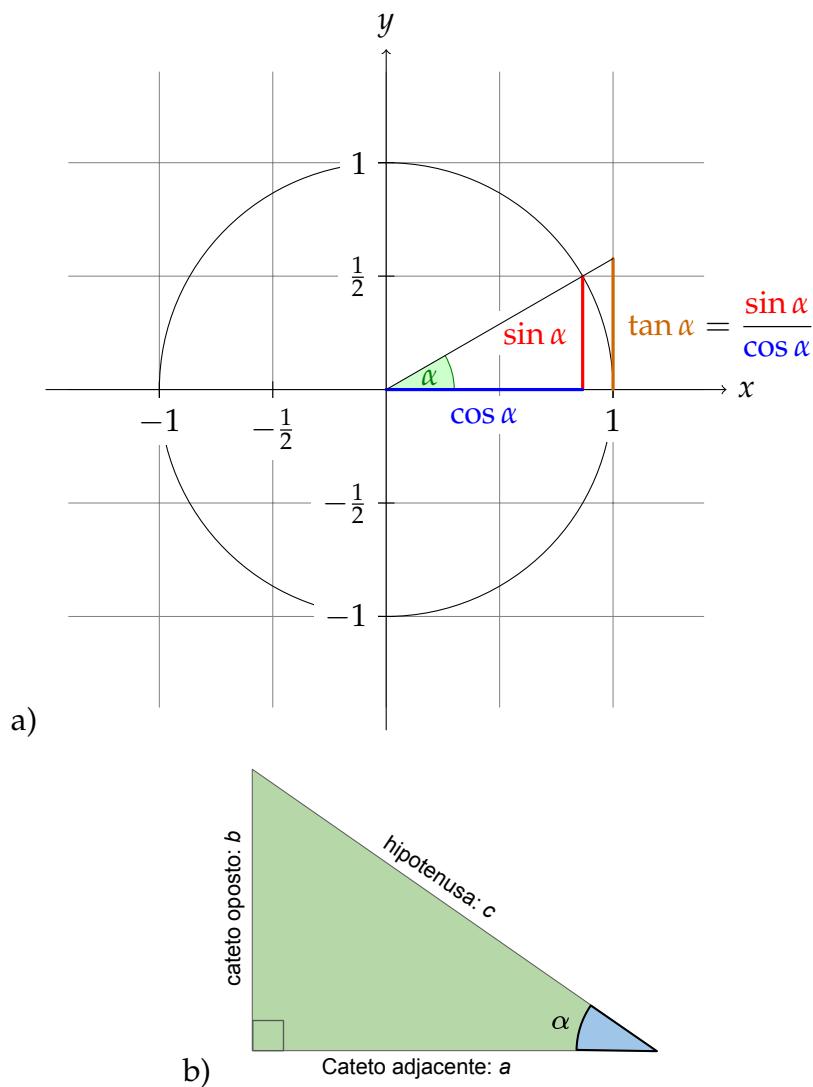


Figura 1.1: (a) Ciclo trigonométrico com as definições de seno e cosseno. Fonte: <https://texexample.net/tikz/examples/tutorial/>. (b) Triângulo retângulo indicando os catetos referente ao ângulo α e a hipotenusa.

1.1.2 Lei dos Senos e Cossenos

Dentre as várias utilidades das funções trigonométricas está a chamada Lei dos Cossenos, que pode ser interpretada como sendo um Teorema de Pitágoras generalizado. Para cada ângulo em um triângulo arbitrário (como ilustrado na figura 1.2(b)) podemos escrever:

$$\begin{aligned} a^2 &= b^2 + c^2 - 2bc \cos \alpha, \\ b^2 &= a^2 + c^2 - 2ac \cos \beta, \\ c^2 &= a^2 + b^2 - 2ab \cos \gamma. \end{aligned} \tag{1.2}$$

Repare que no caso do ângulo ser reto (90 graus) recuperamos o Teorema de Pitágoras. Já a Lei dos Senos² nos retorna:

$$\frac{a}{\sin \alpha} = \frac{b}{\sin \beta} = \frac{c}{\sin \gamma} = 2R = \frac{abc}{2\Delta},$$

²Apesar de não ser tão comum, há também a lei das tangentes: Eq. B.7.

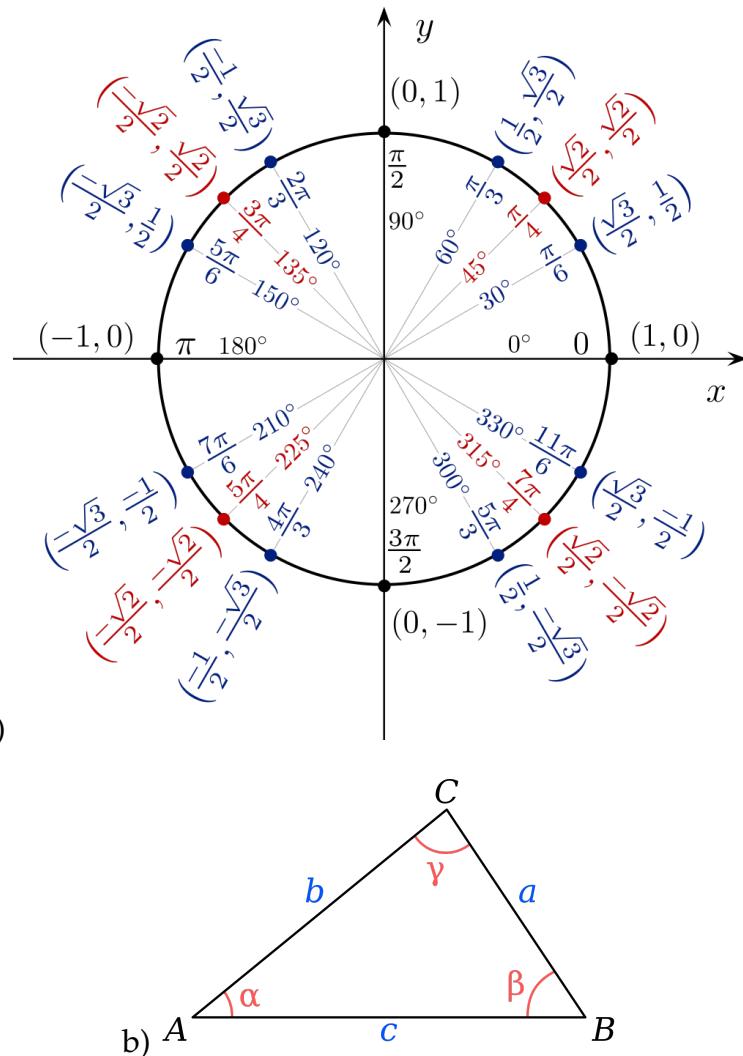


Figura 1.2: (a) Ilustração do ciclo trigonométrico com as indicações dos principais ângulos e os respectivos valores dos seno e cosseno. Fonte: Wikipedia https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Unit_circle_angles_color.svg. (b) Triângulo para a Lei dos cossenos. Fonte: Wikipedia https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Unit_circle_angles_color.svg.

onde $\Delta = abc/4R$ é a área do triângulo em questão e o raio do círculo R circunscrito no triângulo é:

$$R = \frac{abc}{\sqrt{(a+b+c)(a-b+c)(a+b-c)(b+c-a)}}.$$

Há uma infinidade de identidades e resultados úteis (e outros não tão úteis) em trigonometria. Alguns deles estão na seção B.1.

1.2 Vetores

Gradezas escalares precisam de apenas um número para sua definição: i) a temperatura de hoje é 25 graus. Já grandezas vetoriais precisam de mais de um número: a torre de controle do aeroporto informa a velocidade do vento de 50 km/h para o piloto que está pousando, que então pergunta qual direção. Em 3 dimensões cada vetor precisa de três números para ser definido: módulo, direção e sentido. De maneira geral, um tensor em um espaço com d dimensões e ordem n precisa de d^n componentes para ser definido. Um escalar é um tensor de ordem zero $n = 0$, logo precisa de $d^0 = 1$ componentes, independente do espaço onde está sendo representado. Já um vetor em 3 dimensões é um tensor de ordem 1: $d = 3$ e $n = 1$. Logo precisa de 3^1 componentes. Um tensor de ordem $n = 2$ (comumente chamado apenas de tensor) precisa de $3^2 = 9$ componentes.

Representamos um vetor por uma flecha ou por uma letra em negrito: $\mathbf{A} = \vec{A}$. O módulo do vetor será o comprimento da flecha e é representado pelo símbolo da função módulo $|\mathbf{A}|$. Ao longo deste texto usamos a notação usual de que o símbolo do vetor sem estar em negrito e sem flecha é o módulo do mesmo: $A = |\mathbf{A}| = |\vec{A}|$.

A soma de vetores pode ser feita pelo método do polígono (veja figura 1.3(a)) ou do paralelogramo. Os vetores seguem as mesmas regras de adição e subtração que os escalares:

$$\begin{aligned}\mathbf{A} + \mathbf{B} &= \mathbf{B} + \mathbf{C}, & (\mathbf{A} + \mathbf{B}) + \mathbf{C} &= \mathbf{A} + (\mathbf{B} + \mathbf{C}), \\ \mathbf{A} - \mathbf{B} &= \mathbf{A} + (-\mathbf{B}), & a(\mathbf{A} + \mathbf{B}) &= a\mathbf{A} + a\mathbf{B},\end{aligned}$$

onde $a \neq 0$ é um escalar. A última equação mostra também que a multiplicação de vetores por um escalar é uma operação linear.

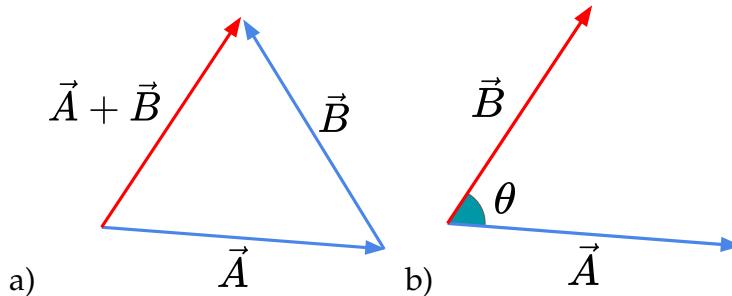


Figura 1.3: (a) Representação da soma de vetores pelo método do polígono. (b) Produto escalar entre os vetores \mathbf{A} e \mathbf{B} , cujas direções fazem um ângulo menor θ .

1.2.1 Delta de Krönecker e de Levi-Civita

O chamado delta de Krönecker³ em três dimensões com $i, j \in 1, 2, 3$ é definido como:

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 0 & \text{se } i \neq j \\ 1 & \text{se } i = j \end{cases} \quad (1.3)$$

³Leopold Krönecker (1823-1891).

Veja que $\delta_{ij} = \delta_{ji}$, ou seja, não se altera por troca dos índices. Já o tensor de Levi-Civita⁴ também em três dimensões com $i, j, k \in 1, 2, 3$ é definido como:

$$\varepsilon_{ijk} = \begin{cases} 1 & \text{se } (i, j, k) = (1, 2, 3), (2, 3, 1) \text{ ou } (3, 1, 2) \\ -1 & \text{se } (i, j, k) = (1, 3, 2), (3, 2, 1) \text{ ou } (2, 1, 3) \\ 0 & \text{de outra forma.} \end{cases} \quad (1.4)$$

Dessa definição podemos estabelecer as seguintes propriedades são:

- $\varepsilon_{ijk} = 0$ se pelo menos dois índices são iguais.
- Antissimetria: ε_{ijk} muda de sinal se quaisquer dois índices forem trocados entre si.
- Ciclicidade: ε_{ijk} não se altera se os índices forem permutados de maneira cíclica, ou seja: $\varepsilon_{ijk} = \varepsilon_{jki} = \varepsilon_{kij}$.

Essas duas grandezas são bastante utilizadas em física, especialmente na descrição de vetores e funções.

1.2.2 Produto escalar

Já a multiplicação entre vetores pode ser feita de duas maneiras. A primeira (mais simples) é a chamada de produto escalar (pois o resultado é um escalar) e é definida como:

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} \equiv AB \cos \theta,$$

onde θ é o ângulo entre os vetores (veja figura 1.3(b)). O símbolo \equiv significa definição. Como esperado o produto escalar segue as propriedades comutativa e distributiva:

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} = \mathbf{B} \cdot \mathbf{A}, \quad \mathbf{A} \cdot (\mathbf{B} + \mathbf{C}) = \mathbf{A} \cdot \mathbf{B} + \mathbf{A} \cdot \mathbf{C}.$$

Além disso, considerando o escalar real a temos a propriedade associativa:

$$(a\mathbf{A}) \cdot \mathbf{B} = \mathbf{A} \cdot (a\mathbf{B}) = a(\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}).$$

Um resultado imediato desta definição é: $A^2 = \mathbf{A} \cdot \mathbf{A}$. Outro resultado imediado é que o produto escalar entre dois vetores perpendiculares é zero: $\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} = AB \cos \pi/2 = 0$. Essas duas propriedades (e mais algumas outras) fazem com que o produto escalar seja extremamente útil e utilizado em todas as áreas da física.

1.2.3 Produto vetorial

A outra multiplicação possível entre vetores é o produto vetorial, que retorna um outro vetor:

$$\mathbf{A} \times \mathbf{B} \equiv \hat{n}AB \sin \theta, \quad \hat{n} \cdot \mathbf{A} = \hat{n} \cdot \mathbf{B} = 0, \quad |\hat{n}| = 1.$$

⁴Tullio Levi-Civita (1873-1941).

O vetor \hat{n} é perpendicular aos vetores \mathbf{A} e \mathbf{B} simultaneamente, o que define a direção. Porém, nesta direção ainda há dois sentidos possíveis para \hat{n} . O sentido então é definido pela regra da mão direita⁵, ou regra de Fleming: deixe seus dedos da mão direita no sentido de \mathbf{A} e curve sua mão no sentido de \mathbf{B} (via o menor ângulo), seu dedão irá apontar no sentido de \hat{n} . Lembre-se sempre que $\mathbf{A} \times \mathbf{B}$ é um vetor! Essa regra do sentido faz com que o produto vetorial mude o sentido quando se muda a ordem dos vetores:

$$\mathbf{A} \times \mathbf{B} = -\mathbf{B} \times \mathbf{A}.$$

Exemplos de produto vetorial em física são o momento angular e a relação entre velocidade linear e angular:

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}, \quad \mathbf{v} = \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}. \quad (1.5)$$

O produto vetorial segue a propriedade distributiva e associativa:

$$\mathbf{A} \times (\mathbf{B} + \mathbf{C}) = \mathbf{A} \times \mathbf{B} + \mathbf{A} \times \mathbf{C}, \quad (a\mathbf{A}) \times \mathbf{B} = \mathbf{A} \times (a\mathbf{B}) = a(\mathbf{A} \times \mathbf{B}).$$

Um resultado imediato da definição é que: $\mathbf{A} \times \mathbf{A} = 0$.

	Direção x	Direção y	Direção z
Versores	$\hat{\mathbf{i}} = \hat{\mathbf{x}} = \hat{\mathbf{x}}_1$	$\hat{\mathbf{j}} = \hat{\mathbf{y}} = \hat{\mathbf{x}}_2$	$\hat{\mathbf{k}} = \hat{\mathbf{z}} = \hat{\mathbf{x}}_3$

Tabela 1.1: Diferentes nomenclaturas para os versores cartesianos.

1.2.4 Versores cartesianos

Produto vetorial também é usado na definição dos versores cartesianos nas direções x , y e z . Cada vetor cartesiano é um vetor de módulo unitário em uma das 3 direções do sistema xyz . Destacamos 3 notações diferentes amplamente utilizadas mostradas na tabela 1.1. A notação $\hat{\mathbf{x}}_i$ é muito usada em somatórios, como na definição dos operadores vetoriais diferenciais da seção 1.4. Da mesma forma é também usadas as variáveis:

$$x_1 = x, \quad x_2 = y, \quad x_3 = z. \quad (1.6)$$

O sistema xyz amplamente aceito é o chamado destrógiro (sempre usando a mão direita) ilustrado na figura 1.4(a), definido da seguinte maneira:

- Primeiramente escolhe-se uma direção e um sentido para ser definida como o eixo x . O versor $\hat{\mathbf{x}} = \hat{\mathbf{i}}$ é então o vetor unitário nesta direção e apontando no sentido de x positivo.

⁵Isso é uma convenção usada pela comunidade científica. A outra convenção possível é a regra da mão esquerda.

- O eixo y é obtido pela rotação de 90 graus no sentido anti-horário. O versor $\hat{y} = \hat{j}$ é então o vetor unitário nesta direção, de forma que $\hat{y} \cdot \hat{x} = 0$.
- No sistema destrógiro, o versor na direção z é definida como $\hat{z} = \hat{k} = \hat{x} \times \hat{y}$, que também define o eixo z ⁶.

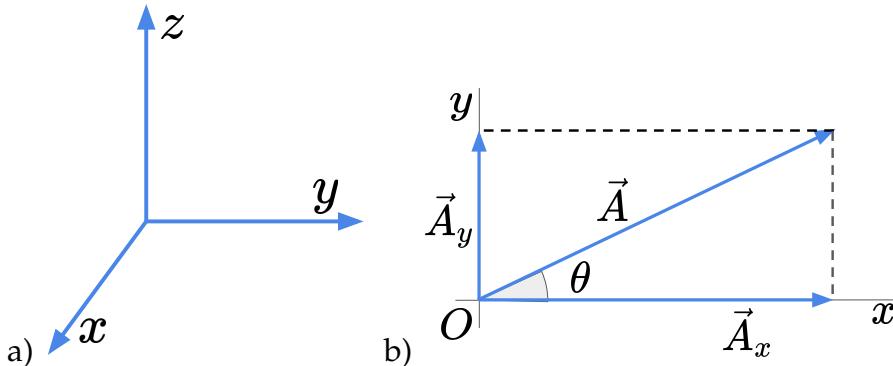


Figura 1.4: (a) Sistema cartesiano xyz destrógiro. (b) Decomposição do vetor $\vec{A} = \mathbf{A}$ em suas componentes nos eixos x e y . Do produto escalar, ângulo entre o mesmo com o eixo x é tal que $\vec{A} \cdot \hat{x} = \cos \theta$.

Dessa definição temos os versores são perpendiculares entre si, logo o produto escalar entre eles é zero:

$$\hat{x} \cdot \hat{y} = 0, \quad \hat{x} \cdot \hat{z} = 0, \quad \hat{z} \cdot \hat{y} = 0.$$

O produto vetorial dele com ele mesmo também é zero, já que o produto vetorial de dois vetores paralelos sempre é zero:

$$\hat{x} \times \hat{x} = \hat{y} \times \hat{y} = \hat{z} \times \hat{z} = 0.$$

Já usando a definição de \hat{z} usando o produto vetorial, temos que os 3 versores formam um conjunto cíclico:

$$\hat{x} \times \hat{y} = \hat{z}, \quad \hat{y} \times \hat{z} = \hat{x}, \quad \hat{z} \times \hat{x} = \hat{y}.$$

Veja que a segunda e terceira equações são obtidas movendo as letras da equação anterior para a esquerda.

1.2.5 Como representar um vetor?

Um vetor pode ser definido por seu módulo, direção e sentido. Intuitivamente podemos então dizer que um dado vetor \mathbf{A} em 3 dimensões tem módulo, direção e sentido. Porém, em física é necessário uma descrição precisa e formal, para isso usamos as componentes em relação a um sistema de coordenadas. Vamos começar pelo sistema Cartesiano com as coordenadas x , y e z . Sejam os versores (\equiv vetores unitários) nestas direções de \hat{x} , \hat{y} e \hat{z} . A

⁶No sistema levógiro, que não é utilizado, a definição é $\hat{z} = -\hat{x} \times \hat{y}$.

ideia é então escrever um vetor arbitrário como sendo uma soma sobre esses versores, como ilustrado na figura 1.4(b) no caso em duas dimensões. No caso geral de 3 dimensões, temos:

$$\mathbf{A} = \hat{\mathbf{x}}A_1 + \hat{\mathbf{y}}A_2 + \hat{\mathbf{z}}A_3,$$

onde os escalares A_1, A_2 e A_3 são as componentes \mathbf{A} . Geometricamente falando, as componentes são as projeções de \mathbf{A} nas 3 direções:

$$A_1 = \mathbf{A} \cdot \hat{\mathbf{x}}, \quad A_2 = \mathbf{A} \cdot \hat{\mathbf{y}}, \quad A_3 = \mathbf{A} \cdot \hat{\mathbf{z}}.$$

Assim um vetor em coordenadas cartesianas pode ser representado pela forma compacta $\mathbf{A} = (A_x, A_y, A_z)$, onde já fica compreendido que os números entre parênteses são as componentes do vetor. Dessa forma os versores também podem ser representados por:

$$\hat{\mathbf{x}} = (1, 0, 0), \quad \hat{\mathbf{y}} = (0, 1, 0), \quad \hat{\mathbf{z}} = (0, 0, 1).$$

Todas as propriedades definidas até agora podem ser escritas em função das componentes. A adição de vetores é feita pela adição das componentes, enquanto a multiplicação por um escalar é feita multiplicando as componentes por este escalar:

$$c(\mathbf{A} + \mathbf{B}) = c(A_1 + B_1)\hat{\mathbf{x}} + c(A_2 + B_2)\hat{\mathbf{y}} + c(A_3 + B_3)\hat{\mathbf{z}}.$$

O produto escalar é escrito em função das componentes da forma:

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} = A_1B_1 + A_2B_2 + A_3B_3 = \sum_{i=1}^3 A_iB_i = \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 A_iB_j\delta_{ij}.$$

Apesar de um pouco mais trabalhoso, o produto vetorial também pode ser escrito em termos de componentes:

$$\begin{aligned} \mathbf{A} \times \mathbf{B} &= (\hat{\mathbf{x}}A_x + \hat{\mathbf{y}}A_y + \hat{\mathbf{z}}A_z) \times (\hat{\mathbf{x}}B_x + \hat{\mathbf{y}}B_y + \hat{\mathbf{z}}B_z), \\ &= (A_yB_z - A_zB_y)\hat{\mathbf{x}} + (A_zB_x - A_xB_z)\hat{\mathbf{y}} + (A_xB_y - A_yB_x)\hat{\mathbf{z}}, \\ &= \begin{vmatrix} \hat{\mathbf{x}} & \hat{\mathbf{y}} & \hat{\mathbf{z}} \\ A_x & A_y & A_z \\ B_x & B_y & B_z \end{vmatrix}. \end{aligned} \tag{1.7}$$

Veja que na última expressão temos que o produto vetorial é exatamente o determinante de uma matriz onde a primeira linha são os versores, a segunda linha são as componentes de \mathbf{A} e a terceira linha são as componentes de \mathbf{B} . Em específico a i -ésima componente do produto vetorial é:

$$(\mathbf{A} \times \mathbf{B})_i = \mathbf{A} \times \mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{x}}_i \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \varepsilon_{ijk}A_jB_k.$$

O produto escalar escrito usando o delta de Krönecker não acrescenta muito mas o tensor de Levi-Civita ajuda muito no cálculo da componente de um produto vetorial.

1.2.6 Produto Triplo

Em física é comum aparecer os chamados produtos triplos, pois envolvem três vetores. Nesta seção apresentamos os mais comuns. O primeiro é $\alpha = \mathbf{A} \cdot (\mathbf{B} \times \mathbf{C})$, ou seja, o produto escalar entre dois vetores sendo que o segundo é o produto vetorial de outros dois. O resultado desta operação é um escalar α . Geometricamente $|\mathbf{A} \cdot (\mathbf{B} \times \mathbf{C})|$ é o volume do paralelepípedo gerado pelos 3 vetores já que $|\mathbf{B} \times \mathbf{C}|$ é a base e $A \cos \theta$ é a altura. Temos ainda que:

$$\begin{aligned}\mathbf{A} \cdot (\mathbf{B} \times \mathbf{C}) &= \mathbf{B} \cdot (\mathbf{C} \times \mathbf{A}) = \mathbf{C} \cdot (\mathbf{A} \times \mathbf{B}), \\ &= (\mathbf{A} \times \mathbf{B}) \cdot \mathbf{C}.\end{aligned}$$

Repare que na última equação a ordem se manteve mas os símbolos foram trocados. A posição do parêntese é essencial uma vez que $\mathbf{A} \times (\mathbf{B} \cdot \mathbf{C})$ é matematicamente errado: não se pode fazer o produto vetorial entre um vetor \mathbf{A} e um número $\mathbf{B} \cdot \mathbf{C}$.

O segundo produto triplo importante é⁷

$$\mathbf{A} \times (\mathbf{B} \times \mathbf{C}) = \mathbf{B}(\mathbf{A} \cdot \mathbf{C}) - \mathbf{C}(\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}). \quad (1.8)$$

Novamente a posição dos parênteses é importante pois $(\mathbf{A} \times \mathbf{B}) \times \mathbf{C}$ é outro vetor completamente diferente. Este produto triplo pode ser usado para diminuir o número de produtos vetoriais \times em uma expressão. Nunca é necessário haver mais que um. Por exemplo:

$$(\mathbf{A} \times \mathbf{B}) \cdot (\mathbf{C} \times \mathbf{D}) = (\mathbf{A} \cdot \mathbf{C})(\mathbf{B} \cdot \mathbf{D}), \quad (1.9)$$

$$\mathbf{A} \times [\mathbf{B} \times (\mathbf{C} \times \mathbf{D})] = \mathbf{B}[\mathbf{A} \cdot (\mathbf{C} \times \mathbf{D})] - (\mathbf{A} \cdot \mathbf{B})(\mathbf{C} \times \mathbf{D}). \quad (1.10)$$

1.2.7 Vetores posição, deslocamento e separação

Uma posição qualquer no sistema cartesiano xyz é definida pelo vetor posição⁸ (veja figura 1.5(a)):

$$\mathbf{r} = x\hat{\mathbf{x}} + y\hat{\mathbf{y}} + z\hat{\mathbf{z}}.$$

Seu módulo e o versor associado são:

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}, \quad \hat{\mathbf{r}} = \frac{\mathbf{r}}{r} = \frac{x\hat{\mathbf{x}} + y\hat{\mathbf{y}} + z\hat{\mathbf{z}}}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}.$$

Esse é um vetor central em qualquer teoria física. Já o vetor relativo ao deslocamento infinitesimal é a distância entre o ponto (x, y, z) e $(x + dx, y + dy, z + dz)$:

$$d\ell = \hat{\mathbf{x}}dx + \hat{\mathbf{y}}dy + \hat{\mathbf{z}}dz.$$

Em diversas áreas da física é necessário expressar uma grandeza em um ponto \mathbf{r} criado por uma fonte na posição \mathbf{r}' . Neste caso o vetor importante será aquele que sai de \mathbf{r}' e vai até \mathbf{r} :

$$\mathbf{r} = \mathbf{r} - \mathbf{r}' = (x - x')\hat{\mathbf{x}} + (y - y')\hat{\mathbf{y}} + (z - z')\hat{\mathbf{z}}. \quad (1.11)$$

⁷Uma forma de se lembrar é "baca menos cabala".

⁸Ao longo deste livro o vetor posição será sempre indicado por \mathbf{r} .

Este é o vetor separação (veja figura 1.5(b)). Seu módulo e o vedor associado são:

$$\begin{aligned}\nu &= \sqrt{(x - x')^2 + (y - y')^2 + (z - z')^2}, \\ \hat{\nu} &= \frac{\nu}{\nu} = \frac{(x - x')\hat{x} + (y - y')\hat{y} + (z - z')\hat{z}}{\sqrt{(x - x')^2 + (y - y')^2 + (z - z')^2}}.\end{aligned}$$

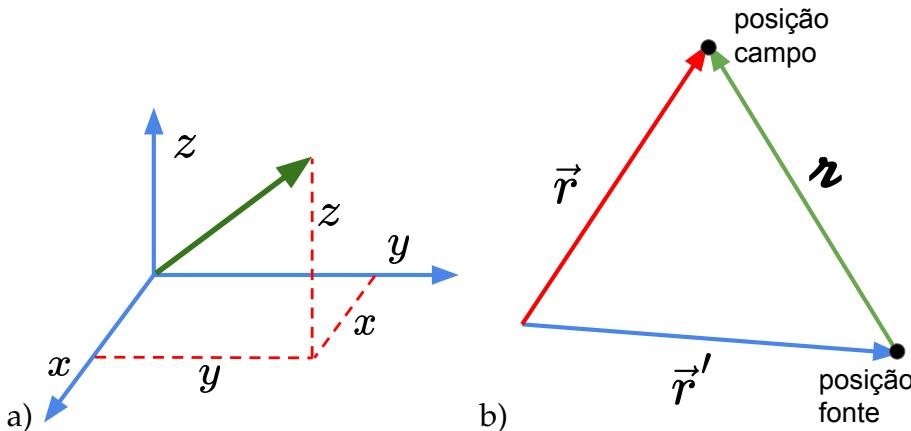


Figura 1.5: (a) Vetor posição \vec{r} . (b) Vetor separação.

Exemplo 1.1

Eletromagnetismo básico.

Sejam duas cargas elétricas q e Q nas posições \mathbf{r}' e \mathbf{r} . A força elétrica sentida pela carga Q devido a carga teste q será:

$$\mathbf{F} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{qQ}{\nu^2} \hat{\nu},$$

onde o vetor separação é dado pela Eq. 1.11. O módulo ν é exatamente a distância entre as duas cargas. Supondo agora que haja várias cargas q_i com distâncias ν_i da carga de teste Q , o campo elétrico total na posição da carga de teste Q será:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_i \frac{q_i}{\nu_i^2} \hat{\nu}_i.$$

No caso de uma distribuição contínua de carga $\rho(\mathbf{r}')$, o campo elétrico gerado em uma posição arbitrária \mathbf{r} será:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int_{\Omega} \frac{\rho(\mathbf{r}')}{\nu^2} \hat{\nu} d\tau,$$

onde $d\tau$ é o elemento de volume.

Problemas

1.1) a) Prove a Eq. 1.9. b) Prove a Eq. 1.10.

1.2) Em quais condições temos que $\mathbf{A} \times (\mathbf{B} \times \mathbf{C}) = (\mathbf{A} \times \mathbf{B}) \times \mathbf{C}$?

1.3) a) Calcule $\mathbf{A} \cdot \mathbf{C} = \mathbf{A} \cdot (\mathbf{A} \times \mathbf{B})$. b) Mostre que $\mathbf{B} \cdot \mathbf{C} = \mathbf{B} \cdot (\mathbf{A} \times \mathbf{B}) = 0$.

1.4) Expanda um vetor \mathbf{x} em componentes paralela a três vetores linearmente independentes $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$.

1.5) a) Usando o momento linear $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$ e as Eqs. 1.5 mostre que $\mathbf{L} = mr^2[\boldsymbol{\omega} - \hat{\mathbf{r}}(\hat{\mathbf{r}} \cdot \boldsymbol{\omega})]$. b) Já a energia cinética de um corpo em rotação é $T = (1/2)m|\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}|^2$. Mostre que:

$$T = \frac{1}{2}m[r^2\boldsymbol{\omega}^2 - (\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r})^2].$$

1.3 Coordenadas Curvilíneas

Dependendo da simetria do problema a ser resolvido, diferentes sistemas de coordenadas podem ser utilizados. Dentre os vários existentes dois são muito utilizados além do sistema cartesiano: coordenadas cilíndricas e esféricas. Apresentamos aqui os principais resultados nesses sistemas.

1.3.1 Coordenadas Cilíndricas

As coordenadas cilíndricas s, φ, z são definidas como: s é a distância em relação ao eixo z e φ é o ângulo no plano xy que o raio faz com o eixo x (veja figura 1.6(a)). Como a terceira variável z é a mesma do sistema cartesiano, iremos explicitar as novas expressões aqui apenas para s e φ . O objetivo deste sistema é explorar eventuais simetrias cilíndricas, mantendo a coordenada z a mesma do sistema cartesiano. A definição é⁹:

$$s = \sqrt{x^2 + y^2}, \quad \varphi = \arctan(y/x).$$

A transformação inversa é:

$$x = s \cos \varphi, \quad y = s \sin \varphi \tag{1.12}$$

De maneira análoga, os versores $\hat{\mathbf{s}}$ e $\hat{\varphi}$ são vetores unitários que apontam na direção de variação das respectivas variáveis (veja figura ??). Ao contrário dos versores cartesianos,

⁹A função arctan é a inversa da tangente, de forma que $\arctan a = b$ implica $\tan b = a$. É comum também utilizar a notação $\arctan = \tan^{-1}$.

os versores cilíndricos não são constantes, as direções mudam conforme o ponto em questão. Assim, em uma integral envolvendo \hat{s} e $\hat{\varphi}$ deve-se escrevê-los em função dos versores cartesianos para então fazer a integral. A relação entre ambas as bases é:

$$\begin{aligned}\hat{s} &= \hat{x} \cos \varphi + \hat{y} \sin \varphi, \\ \hat{\varphi} &= -\hat{x} \sin \varphi + \hat{y} \cos \varphi.\end{aligned}$$

A transformação inversa é:

$$\begin{aligned}\hat{x} &= \hat{s} \cos \varphi + \hat{\varphi} \sin \varphi, \\ \hat{y} &= \hat{s} \sin \varphi + \hat{\varphi} \cos \varphi.\end{aligned}$$

Assim podemos escrever qualquer vetor em função de suas componentes em coordenadas cilíndricas:

$$\mathbf{A} = A_s \hat{s} + A_\varphi \hat{\varphi} + A_z \hat{z}.$$

Porém, é importante sempre lembrar que os versores cilíndricos não são constantes, pois dependem de φ : $\hat{s}(\varphi)$ e $\hat{\varphi}(\varphi)$. No geral omite-se a dependência angular apenas para simplificar a notação.

O deslocamento infinitesimal para a variável s é direto (ds), já para a variável angular trata-se do o comprimento do arco compreendido pelo ângulo infinitesimal: $s d\varphi$. De forma que o (vetor) deslocamento resultante e o elemento de volume são¹⁰:

$$d\ell = \hat{s} ds + \hat{\varphi} s d\varphi + \hat{z} dz, \quad d\tau = s ds d\varphi dz.$$

O intervalo de validade de cada um é:

$$0 < s < +\infty, \quad 0 < \varphi < 2\pi, \quad -\infty < z < +\infty.$$

Exemplo 1.2

Mostre que $d\ell^2 = dx^2 + dy^2 + dz^2 = ds^2 + s^2 d\varphi^2 + dz^2$.

As derivadas parciais de x em relação a s , φ e z são:

$$\frac{\partial x}{\partial s} = \cos \varphi, \quad \frac{\partial x}{\partial \varphi} = -s \sin \varphi, \quad \frac{\partial x}{\partial z} = 0.$$

Logo $dx = \cos \varphi d\varphi - s \sin \varphi d\varphi$.

Repetimos o procedimento para y :

$$\frac{\partial y}{\partial s} = \sin \varphi, \quad \frac{\partial y}{\partial \varphi} = s \cos \varphi, \quad \frac{\partial y}{\partial z} = 0.$$

Obtemos $dy = \sin \varphi d\varphi + s \cos \varphi d\varphi$. Somando os resultados para dx , dy e dz obtemos o resultado desejado.

¹⁰Repare na dimensão de ambos: $d\ell$ tem dimensão de comprimento e $d\tau$ de volume.

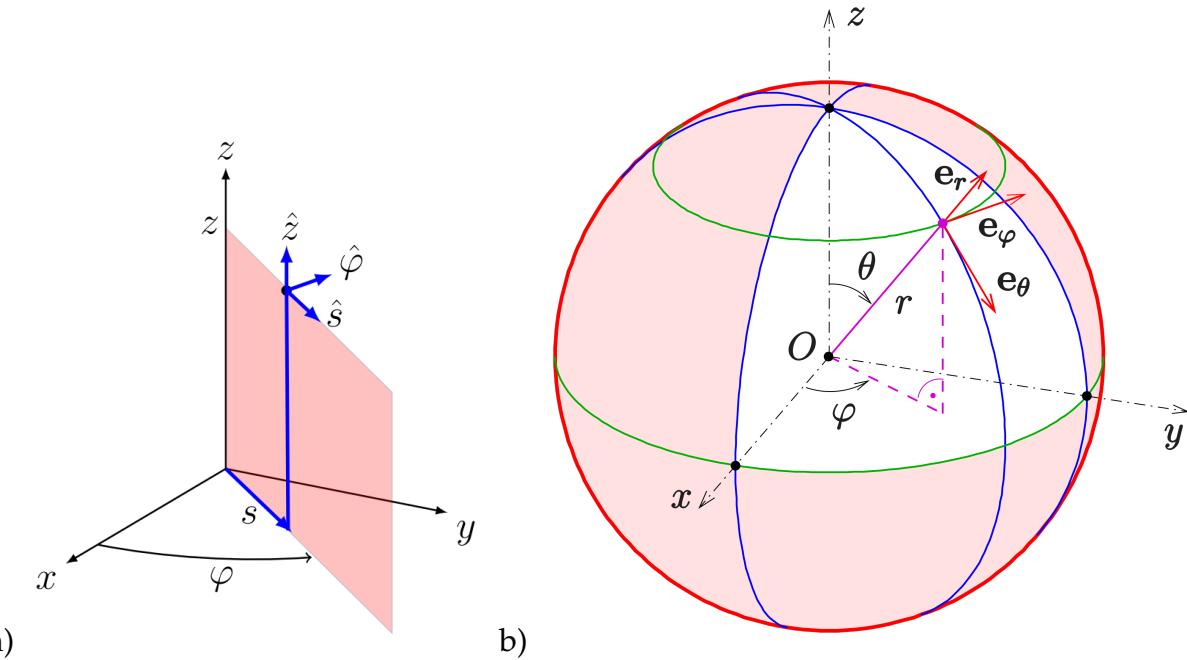


Figura 1.6: (a) Sistema de coordenadas cilíndricas s, φ, z . (b) Sistema de coordenadas esféricicas com as direções dos versores unitários. Fonte: Wikipedia <https://en.wikipedia.org/wiki/File:Kugelkoord-lokale-Basis-s.svg>.

1.3.2 Coordenadas Esféricicas

As coordenadas esféricicas estão definidas na figura: r é a distância em relação a origem, φ é a mesma da coordenada cilíndrica (veja Eq. 1.12) e θ é o ângulo que o vetor posição faz com o eixo z . A figura 1.6(b) mostra uma ilustração desse sistema com as direções dos vetores unitários de cada variável. A transformação de esférica para cartesiana é:

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}, \quad \theta = \arctan\left(\sqrt{x^2 + y^2}/z\right), \quad \varphi = \arctan(y/x). \quad (1.13)$$

A transformação inversa é:

$$x = r \sin \theta \cos \varphi, \quad y = r \sin \theta \sin \varphi, \quad z = r \cos \theta.$$

Da mesma forma que antes, qualquer vetor pode ser decomposto em coordenadas esféricas: $\mathbf{A} = \hat{\mathbf{r}}A_r + \hat{\theta}A_\theta + \hat{\varphi}A_\varphi$. Em uma integral, esses vetores devem ser escritos em função dos versores canônicos pois eles não são constantes. A transformação dos versores é:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{r}} &= \hat{\mathbf{x}} \sin \theta \cos \varphi + \hat{\mathbf{y}} \sin \theta \sin \varphi + \hat{\mathbf{z}} \cos \theta, \\ \hat{\theta} &= \hat{\mathbf{x}} \cos \theta \cos \varphi + \hat{\mathbf{y}} \cos \theta \sin \varphi + \hat{\mathbf{z}} \sin \theta, \\ \hat{\varphi} &= -\hat{\mathbf{x}} \sin \varphi + \hat{\mathbf{y}} \cos \varphi. \end{aligned}$$

A transformação inversa é:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{x}} &= \hat{\mathbf{r}} \sin \theta \cos \varphi + \hat{\theta} \cos \theta \cos \varphi - \hat{\varphi} \sin \varphi, \\ \hat{\mathbf{y}} &= \hat{\mathbf{r}} \sin \theta \sin \varphi + \hat{\theta} \cos \theta \sin \varphi + \hat{\varphi} \cos \varphi, \\ \hat{\mathbf{z}} &= \hat{\mathbf{r}} \cos \theta - \hat{\theta} \sin \theta. \end{aligned}$$

Vamos agora escrever o elemento de comprimento em coordenadas esféricas. No caso de r , o resultado é direto. Mas para as variáveis angulares, o elemento de comprimento correspondente é o comprimento do arco definido pelo ângulo:

$$d\ell_r = dr, \quad d\ell_\theta = rd\theta, \quad d\ell_\varphi = r \sin \theta d\varphi.$$

Em uma integral de linha o (vetor) elemento de comprimento resultante será:

$$d\ell = \hat{\mathbf{r}}dr + \hat{\theta}rd\theta + \hat{\varphi}r \sin \theta d\varphi.$$

O elemento de volume é direto:

$$d\tau = d\ell_r d\ell_\theta d\ell_\varphi = r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi.$$

Já o vetor elemento de área depende da orientação do plano da mesma (o mesmo vale para coordenadas cartesianas e cilíndricas). Por exemplo, para uma integração na superfície de uma esfera o vetor elemento de área é:

$$d\mathbf{a} = \hat{\mathbf{r}}d\ell_\theta d\ell_\varphi = \hat{\mathbf{r}}r^2 \sin \theta d\theta d\varphi.$$

Por fim, os intervalos de variação são:

$$0 < r < +\infty, \quad 0 < \theta < \pi, \quad 0 < \varphi < 2\pi.$$

Problemas

1.6 Dois prótons estão se movendo um contra o outro. Descreva suas órbitas nas seguintes situações: a) eles se aproximam ao longo de uma mesma reta, b) se aproximam em trajetórias retilíneas paralelas distantes b uma da outra. Dica: ignore a interação forte.

1.4 Cálculo Diferencial

Suponha que tenhamos uma função $f(x)$. O que significa sua derivada $df/dx = f'(x)$? A derivada nos diz o quanto f varia quando x varia: $df = f'(x)dx$. Já a interpretação geométrica é que $f'(x)$ é o coeficiente angular da reta tangente no gráfico de $f(x)$. Já a integral é o inverso da derivada. Em física também é muito utilizado derivada e integral de funções vetoriais em mais de uma dimensão. Uma função vetorial em 3 dimensões é uma maneira de agrupar 3 funções independentes, que podem ou não serem iguais. Além disso, cada uma dessas funções pode depender das variáveis x , y e z de qualquer maneira possível. Assim a derivada de um vetor nada mais é do que um outro vetor cuja componente é a derivada da componente do vetor original. Usando derivada temporal como exemplo:

$$\frac{d}{dt} \mathbf{A} = \frac{d}{dt} (A_x \hat{\mathbf{x}} + A_y \hat{\mathbf{y}} + A_z \hat{\mathbf{z}}) = \frac{dA_x}{dt} \hat{\mathbf{x}} + \frac{dA_y}{dt} \hat{\mathbf{y}} + \frac{dA_z}{dt} \hat{\mathbf{z}}.$$

Por exemplo no caso do vetor posição temos que sua derivada é a velocidade:

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \frac{d}{dt} (x\hat{\mathbf{x}} + y\hat{\mathbf{y}} + z\hat{\mathbf{z}}) = v_x\hat{\mathbf{x}} + v_y\hat{\mathbf{y}} + v_z\hat{\mathbf{z}} = \mathbf{v}.$$

De maneira compacta $\dot{\mathbf{r}} = d\mathbf{r}/dt = (dx/dt, dy/dt, dz/dt) = (\dot{x}, \dot{y}, \dot{z}) = \mathbf{v}$.

As derivadas e integrais de vetores são definidas em função de sua utilidade. Assim há mais de um tipo de derivada e vários teoremas envolvendo integrais. Nesta seção apresentamos os operadores diferenciais aplicados em vetores usados em física.

1.4.1 Operador ∇ e suas aplicações

O operador vetorial ∇ é chamado de nabla e é utilizado em diversas operações diferenciais aplicadas em vetores como veremos nas próximas seções. Apesar de não ser rigorosamente um vetor e sim um operador linear podemos tratá-lo como vetor por conveniência. Assim, uma "definição"¹¹ é:

$$\vec{\nabla} = \hat{\mathbf{x}} \frac{\partial}{\partial x} + \hat{\mathbf{y}} \frac{\partial}{\partial y} + \hat{\mathbf{z}} \frac{\partial}{\partial z} = \sum_{i=1}^3 \hat{\mathbf{x}}_i \frac{\partial}{\partial x_i}.$$

É importante escrever os versores antes das derivadas parciais para não haver equívocos em sua aplicação. Assim, o operador ∇ pode ser manipulado como um vetor na maioria dos casos. Seu uso é de suma importância na física, como veremos nas próximas seções. O significado da derivada parcial ∂ é que todas as outras variáveis são consideradas constantes para sua realização. Por exemplo quando se faz $\partial/\partial x$ as variáveis y e z são consideradas constantes. É a mesma derivada, por exemplo para uma função arbitrária $f(x, y, z)$, a derivada parcial em relação a x é:

$$\frac{df}{dx} \equiv \frac{\partial f}{\partial x} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x+h, y) - f(x, y)}{h}.$$

As derivadas parciais das outras variáveis são análogas.

Gradiente

Suponha que definimos uma função temperatura $T(x, y, z)$ em uma sala e queiramos avaliar como a temperatura varia neste espaço (suponha a origem do sistema xyz no canto da sala por exemplo). Se andarmos na direção $(1, 1, 1)$ (ao longo da diagonal da sala) a temperatura varia com uma taxa, se andarmos na direção $(0, 0, 1)$ (vertical para cima) a taxa será outra. Assim a temperatura irá variar se qualquer variável também variar. No caso de uma função de uma variável $f(x)$ temos que $df = (df/dx)dx = f'(x)dx$. Podemos então generalizar esta expressão de df para 3 variáveis como:

$$dT = \left(\frac{\partial T}{\partial x} \right) dx + \left(\frac{\partial T}{\partial y} \right) dy + \left(\frac{\partial T}{\partial z} \right) dz.$$

¹¹Repare que a flecha sobre o símbolo é para reforçar o caráter vetorial desta definição.

Se andarmos ao longo de x , $dy = dz = 0$, e só a derivada em x contribui (análogo para y e z). Se andar em uma direção oblíqua qualquer, as 3 derivadas contribuem. Assim, usando o vetor de deslocamento infinitesimal $d\ell$ podemos reescrever dT da forma:

$$dT = \left(\frac{\partial T}{\partial x} \hat{x} + \frac{\partial T}{\partial y} \hat{y} + \frac{\partial T}{\partial z} \hat{z} \right) \cdot (dx \hat{x} + dy \hat{y} + dz \hat{z}) = \vec{\nabla}T \cdot d\ell,$$

onde

$$\vec{\nabla}T = \frac{\partial T}{\partial x} \hat{x} + \frac{\partial T}{\partial y} \hat{y} + \frac{\partial T}{\partial z} \hat{z} = \sum_{i=1}^3 \hat{x}_i \frac{\partial T}{\partial x_i}$$

é chamado de gradiente de T , que nada mais é do que o operador nabla atuando na função T . Veja que esse gradiente $\vec{\nabla}T$ é um vetor que determina a derivada de T em qualquer direção $d\ell$ desejada.

A interpretação geométrica do gradiente de uma função é direta. Da definição do produto escalar temos que:

$$dT = |\vec{\nabla}T| |d\ell| \cos \theta, \quad (1.14)$$

onde θ é o ângulo entre os dois vetores. Fixemos o módulo $|d\ell|$ e variemos θ . Neste caso dT será máximo quando $\theta = 0$, o que implica que ambos os vetores são paralelos. Ou seja, a variação será máxima quando a direção $d\ell$ escolhida for paralela ao gradiente $\vec{\nabla}T$. O gradiente de uma função é um vetor que aponta na direção de máxima variação desta função. O módulo desse vetor dá a taxa de variação da função.

Suponha que você esteja em uma região montanhosa e seja $h(x, y)$ a função que descreve a superfície (relevo) deste terreno. O caminho no qual a subida (ou descida) é mais inclinada é a direção de $\vec{\nabla}h$, enquanto que a inclinação da superfície é o escalar $|\vec{\nabla}h|$.

Decorre imediatamente então que na direção perpendicular ao gradiente a variação da função é nula. De fato quando $\vec{\nabla}T = 0$ implica que $dT = 0$, ou seja, a função não variou. Trata-se de um ponto estacionário, podendo ser de mínimo, máximo ou ponto de sela. A analogia no caso de uma dimensão é direta: quando a derivada de uma função é zero, implica que a função tem um ponto de equilíbrio.

Divergente

O divergente de um vetor \mathbf{v} é o segundo tipo de derivada vetorial e retorna um escalar. Sua definição é:

$$\vec{\nabla} \cdot \mathbf{v} = \left(\hat{x} \frac{\partial}{\partial x} + \hat{y} \frac{\partial}{\partial y} + \hat{z} \frac{\partial}{\partial z} \right) \cdot (\hat{x} v_x + \hat{y} v_y + \hat{z} v_z) = \frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} + \frac{\partial v_z}{\partial z} = \sum_{i=1}^3 \frac{\partial v_i}{\partial x_i}.$$

A interpretação geométrica do divergente é exatamente o quanto o vetor diverge, ou espalha de um ponto em específico. Essa característica de divergir é facilmente observada graficando o vetor \mathbf{v} em pontos na região em questão. Quando os vetores estão saindo do ponto central,

o divergente é positivo, como se houvesse "criação" de \mathbf{v} , como na figura 1.7(a). Já quando os vetores estão todos direcionados ao ponto central o divergente é negativo, como se houvesse "destruição" de \mathbf{v} . Essa é a interpretação geométrica, se há uma fonte ou um sorvedouro para a grandeza associada ao vetor \mathbf{v} .

Em eletrostática uma carga elétrica positiva é uma fonte de campo elétrico enquanto uma carga negativa é um sorvedouro. Por isso o divergente do campo elétrico é proporcional a carga elétrica como expresso na Lei de Gauss (veja exemplo 1.3).

Rotacional

O rotacional de um vetor é o produto vetorial entre o operador $\vec{\nabla}$ e o vetor em questão:

$$\vec{\nabla} \times \mathbf{v} = \begin{vmatrix} \hat{\mathbf{x}} & \hat{\mathbf{y}} & \hat{\mathbf{z}} \\ \partial/\partial x & \partial/\partial y & \partial/\partial z \\ v_x & v_y & v_z \end{vmatrix}.$$

A i -ésima componente do rotacional de um vetor é:

$$(\vec{\nabla} \times \mathbf{v})_i = (\vec{\nabla} \times \mathbf{v}) \cdot \hat{\mathbf{x}}_i = \sum_{j=1}^3 \sum_{k=1}^3 \epsilon_{ijk} \frac{\partial v_k}{\partial x_j}.$$

Repare que o produto do rotacional também é um vetor. O significado geométrico de rotacional é exatamente o quanto o vetor rotaciona em torno de um ponto¹². Quando a água começa a escorrer pelo ralo de um tanque ou pia circular, ela gira como em um redemoinho, como na figura 1.7(b). O rotacional do vetor velocidade nesse caso é grande. Outro exemplo são os tornados e furacões.

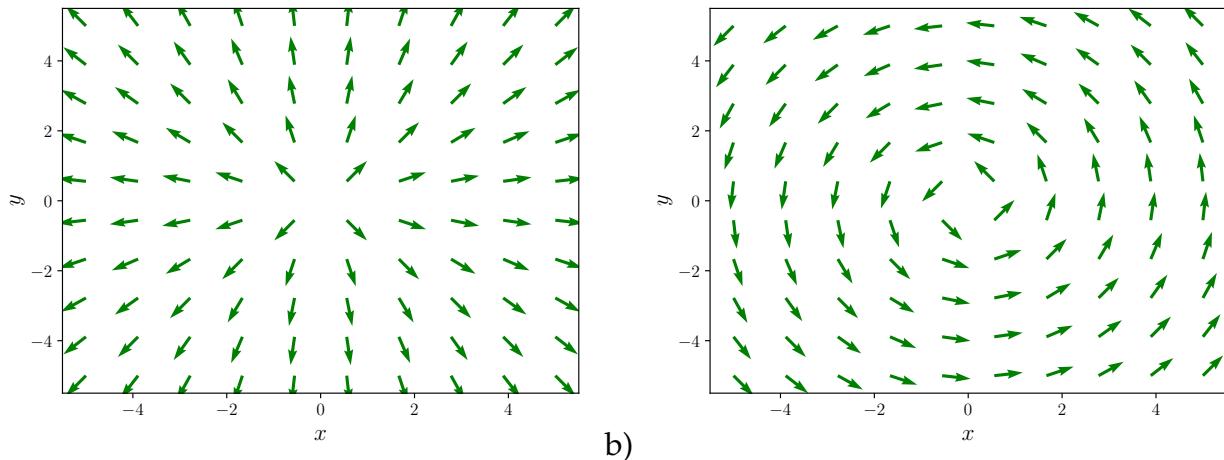


Figura 1.7: Campos vetoriais. (a) Vetor $\mathbf{v} = (x\hat{\mathbf{x}} + y\hat{\mathbf{y}}) / \sqrt{x^2 + y^2}$ que tem divergente mas não tem rotacional. (b) Vetor $\mathbf{v} = (x\hat{\mathbf{y}} - y\hat{\mathbf{x}}) / \sqrt{x^2 + y^2}$ que tem rotacional mas não tem divergente.

¹²Os nomes do divergente e rotacional são de fato bem intuitivos quanto aos respectivos significados, algo que nem sempre ocorre em física.

Exemplo 1.3

Eletromagnetismo Clássico. Como exemplo do uso do operador ∇ em física apresentamos as Eqs. de Maxwell para os campos elétrico \mathbf{E} e magnético \mathbf{B} :

$$\text{Lei de Gauss} \quad \vec{\nabla} \cdot \mathbf{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0}, \quad (1.15)$$

$$\text{Lei de Gauss do magnetismo} \quad \vec{\nabla} \cdot \mathbf{B} = 0, \quad (1.16)$$

$$\text{Lei de Faraday} \quad \vec{\nabla} \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad (1.17)$$

$$\text{Lei de Ampère-Maxwell} \quad \vec{\nabla} \times \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{J} + \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}, \quad (1.18)$$

onde ϵ_0 e \mathbf{J} são a permissividade elétrica do vácuo e a densidade de corrente. Juntamente com a força de Lorentz $\mathbf{F} = q\mathbf{E} + q\mathbf{v} \times \mathbf{B}$, estas 5 equações formam a base do Eletromagnetismo Clássico.

As equações de Maxwell são um conjunto de 4 equações diferenciais acopladas de ordem 1, lineares e não homogêneas. Elas podem ser reduzidas para 2 equações apenas (equação de onda) porém de segunda ordem (veja problema 1.16). Essa equação de onda prevê que a velocidade da onda eletromagnética é $c = 1/\sqrt{\mu_0 \epsilon_0}$, que é a velocidade da luz.

1.4.2 Regras de produto

Em física é comum algumas combinações mistas de produtos entre vetores envolvendo divergentes e rotacionais. Nesta seção apresentamos os mais comuns. Começamos relembrando as regras de derivadas envolvendo soma de funções e multiplicação por um escalar a :

$$\frac{d}{dx}(f + g) = \frac{df}{dx} + \frac{dg}{dx}, \quad \frac{d}{dx}(af) = a \frac{df}{dx}.$$

Vetores são formas de se agrupar funções. Assim algumas dessas propriedades são válidas também no caso vetorial. Considerando a e b como escalares, temos:

$$\begin{aligned} \vec{\nabla}(af + bg) &= a\vec{\nabla}f + b\vec{\nabla}g, & \vec{\nabla} \cdot (a\mathbf{A} + b\mathbf{B}) &= a\vec{\nabla} \cdot \mathbf{A} + b\vec{\nabla} \cdot \mathbf{B}, \\ \vec{\nabla} \times (a\mathbf{A} + b\mathbf{B}) &= a\vec{\nabla} \times \mathbf{A} + b\vec{\nabla} \times \mathbf{B}. \end{aligned}$$

Isso é uma consequência direta do fato de a derivada ser uma operação linear.

Essas são as relações mais simples, porém há uma série de outras relações mais complicadas chamadas de regras dos produtos. Vale reforçar que $\vec{\nabla} \cdot \mathbf{A}$ é um escalar enquanto que $\vec{\nabla} \times \mathbf{A}$ é um vetor. Relembrando a derivada de produto e quociente de funções:

$$\frac{d}{dx}(fg) = f \frac{dg}{dx} + g \frac{df}{dx}, \quad \frac{d}{dx}\left(\frac{f}{g}\right) = \frac{1}{g^2} \left(g \frac{df}{dx} - f \frac{dg}{dx}\right).$$

Analogamente para vetores temos, as combinações mais diretas são:

$$\vec{\nabla}(fg) = g\vec{\nabla}f + f\vec{\nabla}g, \quad \vec{\nabla} \cdot (f\mathbf{A}) = \mathbf{A} \cdot \vec{\nabla}f + f\vec{\nabla} \cdot \mathbf{A},$$

Além dessas 2, há outras 4 combinações mais complicadas e comuns em física:

$$\vec{\nabla}(\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}) = \mathbf{A} \times (\vec{\nabla} \times \mathbf{B}) + \mathbf{B} \times (\vec{\nabla} \times \mathbf{A}) + (\mathbf{A} \cdot \vec{\nabla})\mathbf{B} + (\mathbf{B} \cdot \vec{\nabla})\mathbf{A}, \quad (1.19)$$

$$\vec{\nabla} \cdot (\mathbf{A} \times \mathbf{B}) = \mathbf{B} \cdot (\vec{\nabla} \times \mathbf{A}) - \mathbf{A} \cdot (\vec{\nabla} \times \mathbf{B}),$$

$$\vec{\nabla} \times (f\mathbf{A}) = f\vec{\nabla} \times \mathbf{A} - \mathbf{A} \times (\vec{\nabla} f),$$

$$\vec{\nabla} \times (\mathbf{A} \times \mathbf{B}) = (\mathbf{B} \cdot \vec{\nabla})\mathbf{A} - (\mathbf{A} \cdot \vec{\nabla})\mathbf{B} + \mathbf{A}(\vec{\nabla} \cdot \mathbf{B}) - \mathbf{B}(\vec{\nabla} \cdot \mathbf{A}). \quad (1.20)$$

Obviamente não é necessário decorar estas fórmulas, e sim entender que elas funcionam.

Laplaciano

Em muitos problemas de física aparece nas equações a derivada segunda, ou o operador ∇ aplicado duas vezes. De fato, as propriedades vistas na seção anterior são derivadas primeiras. Vamos ver agora as derivadas segundas. Das várias combinações possíveis, nem todas são úteis. Dois resultados usados com alguma frequência são:

$$\vec{\nabla} \times \vec{\nabla} T = 0, \quad \vec{\nabla} \cdot (\vec{\nabla} \times \mathbf{A}) = 0.$$

Outro resultado usado com um pouco mais de frequência é o duplo rotacional (que pode ser deduzido da Eq. 1.8):

$$\vec{\nabla} \times (\vec{\nabla} \times \mathbf{A}) = \vec{\nabla}(\vec{\nabla} \cdot \mathbf{A}) - \nabla^2 \mathbf{A}.$$

Porém, a derivada dupla mais importante é o divergente do gradiente:

$$\begin{aligned} \vec{\nabla} \cdot (\vec{\nabla} T) &= \left(\hat{\mathbf{x}} \frac{\partial}{\partial x} + \hat{\mathbf{y}} \frac{\partial}{\partial y} + \hat{\mathbf{z}} \frac{\partial}{\partial z} \right) \cdot \frac{\partial T}{\partial x} \hat{\mathbf{x}} + \frac{\partial T}{\partial y} \hat{\mathbf{y}} + \frac{\partial T}{\partial z} \hat{\mathbf{z}}, \\ &= \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} = \nabla^2 T = \sum_{i=1}^3 \frac{\partial^2 T}{\partial x_i^2}. \end{aligned}$$

O símbolo ∇^2 é chamado de Laplaciano¹³ e é um operador diferencial escalar¹⁴. Neste caso como T é escalar temos que $\nabla^2 T$ é um escalar. Porém, quando aplicado em um vetor o resultado é um vetor:

$$\nabla^2 \mathbf{A} = \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \mathbf{A} = \hat{\mathbf{x}} \nabla^2 A_x + \hat{\mathbf{y}} \nabla^2 A_y + \hat{\mathbf{z}} \nabla^2 A_z.$$

$\nabla^2 \mathbf{A}$ consiste em 3 equações escalares: uma para cada componente de \mathbf{A} .

1.4.3 Operador nabla em coordenadas curvilíneas

Por último, falta expressar os operadores diferenciais envolvendo ∇ nas coordenadas curvilíneas. A dedução destas fórmulas é um procedimento trabalhoso, apesar de conceitualmente simples. Primeiro apresentamos as expressões em coordenadas cilíndricas. Nos limitamos aqui a apresentar os resultados, considerando o vetor $\mathbf{v} = \hat{\mathbf{s}} v_s + \hat{\varphi} v_\varphi + \hat{\mathbf{z}} v_z$.

¹³Pierre-Simon Laplace (1749-1827).

¹⁴Alguns autores usam $\nabla^2 = \Delta$.

Gradiente:

$$\vec{\nabla} T = \frac{\partial T}{\partial s} \hat{\mathbf{s}} + \frac{1}{s} \frac{\partial T}{\partial \varphi} \hat{\varphi} + \frac{\partial T}{\partial z} \hat{z}.$$

Divergente:

$$\vec{\nabla} \cdot \mathbf{v} = \frac{1}{s} \frac{\partial}{\partial s} (sv_s) + \frac{1}{s} \frac{\partial v_\varphi}{\partial \varphi} + \frac{\partial v_z}{\partial z}.$$

Rotacional:

$$\vec{\nabla} \times \mathbf{v} = \left(\frac{1}{s} \frac{\partial v_z}{\partial \varphi} - \frac{\partial v_\varphi}{\partial z} \right) \hat{\mathbf{s}} + \left(\frac{\partial v_s}{\partial z} - \frac{\partial v_z}{\partial s} \right) \hat{\varphi} + \frac{1}{s} \left[\frac{\partial}{\partial s} (sv_\varphi) - \frac{\partial v_s}{\partial \varphi} \right] \hat{z}.$$

Laplaciano:

$$\nabla^2 T = \frac{1}{s} \frac{\partial}{\partial s} \left(s \frac{\partial T}{\partial s} \right) + \frac{1}{s^2} \frac{\partial^2 T}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2}.$$

Já em coordenadas esféricas temos:

Gradiente:

$$\vec{\nabla} T = \frac{\partial T}{\partial r} \hat{\mathbf{r}} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial \theta} \hat{\theta} + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial T}{\partial \varphi} \hat{\varphi} + .$$

Divergente:

$$\vec{\nabla} \cdot \mathbf{v} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 v_r) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta v_\theta) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial v_\varphi}{\partial \varphi}. \quad (1.21)$$

Rotacional:

$$\vec{\nabla} \times \mathbf{v} = \frac{\hat{\mathbf{r}}}{r \sin \theta} \left[\frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta v_\varphi) - \frac{\partial v_\theta}{\partial \varphi} \right] + \frac{\hat{\theta}}{r} \left[\frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial v_r}{\partial \varphi} - \frac{\partial r v_\varphi}{\partial r} (r v_\theta) \right] + \frac{\hat{\varphi}}{r} \left[\frac{\partial}{\partial r} (r v_\theta) - \frac{\partial v_r}{\partial \theta} \right].$$

Laplaciano:

$$\nabla^2 T = \frac{1}{s} \frac{\partial}{\partial s} \left(s \frac{\partial T}{\partial s} \right) + \frac{1}{s^2} \frac{\partial^2 T}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2}.$$

Problemas

1.7) Calcule o divergente e rotacional dos seguintes vetores: a) $\mathbf{r} = x\hat{x} + y\hat{y} + z\hat{z} = (x, y, z)$, b) $\mathbf{V} = (x^2y, y^2x, xyz)$, c) $\mathbf{V} = (\sinh z, 2y, x \cosh z)$, d) $\mathbf{V} = (e^z \ln y, \cosh x \sqrt{z}, e^{\sin x})$.

1.8) É possível haver um vetor não nulo cujo divergente e rotacional são nulos em todo o

espaço? Se sim, dê um exemplo. Se não, prove que não.

1.9) a) Calcule detalhadamente o resultado de $(\mathbf{A} \cdot \vec{\nabla})\mathbf{B}$. b) Da mesma forma, calcule $(\hat{r} \cdot \vec{\nabla})\hat{r}$.

1.10) Mostre que $\vec{\nabla} \cdot \left(\frac{\hat{\mathbf{z}}}{r^2} \right) = 4\pi\delta^3(\mathbf{r})$.

1.11) Prove as seguintes relações:

$$\vec{\nabla} \left(\frac{f}{g} \right) = \frac{g\vec{\nabla} - f\vec{\nabla}g}{g^2}, \quad \vec{\nabla} \cdot \left(\frac{\mathbf{A}}{g} \right) = \frac{g(\vec{\nabla} \cdot \mathbf{A}) - \mathbf{A} \cdot (\vec{\nabla}g)}{g^2},$$

$$\vec{\nabla} \times \left(\frac{\mathbf{A}}{g} \right) = \frac{g(\vec{\nabla} \times \mathbf{A}) + \mathbf{A} \times (\vec{\nabla}g)}{g^2}.$$

1.12) ★★ Melhor não tentar fazer este problema. Mas caso você queira: a) prove a Eq. 1.19. b) Não se preocupe, provar a Eq. 1.20 é ainda mais difícil.

1.13) O campo elétrico de uma distribuição contínua de carga elétrica e a carga elétrica total são dados por:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int_{\Omega} \frac{\hat{\mathbf{z}}}{r^2} \rho(\mathbf{r}') d\tau', \quad Q = \int_{\Omega} \rho d\tau.$$

Prove que $\epsilon_0 \int_S \mathbf{E} \cdot d\mathbf{a} = Q$. Dica 1: use o divergente. Dica 2: veja o problema 1.10.

1.14) Diferencie as componentes para mostrar que:

$$\text{a)} \quad \frac{d}{dt}(\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}) = \frac{d\mathbf{A}}{dt} \cdot \mathbf{B} + \mathbf{A} \cdot \frac{d\mathbf{B}}{dt},$$

$$\text{b)} \quad \frac{d}{dt}(\mathbf{A} \times \mathbf{B}) = \frac{d\mathbf{A}}{dt} \times \mathbf{B} + \mathbf{A} \times \frac{d\mathbf{B}}{dt}.$$

1.15) Uma distribuição de corrente elétrica cria um momento magnético \mathbf{m} . A força que um campo magnético \mathbf{B} exerce em \mathbf{m} é:

$$\mathbf{F} = \vec{\nabla} \times (\mathbf{B} \times \mathbf{m}).$$

Mostre que $\mathbf{F} = \vec{\nabla}(\mathbf{m} \cdot \mathbf{B})$.

1.16) Equações de Onda. A partir das Eqs. de Maxwell, mostre que os campos elétrico \mathbf{E} e magnético \mathbf{B} satisfazem a equação de onda:

$$\nabla^2 \mathbf{E} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2}, \quad \nabla^2 \mathbf{B} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{B}}{\partial t^2},$$

onde $c = 1/\sqrt{\epsilon_0\mu_0}$ é a velocidade da luz. Dica: calcule o rotacional do rotacional dos campos.

1.17) ★★ Considere o campo elétrico como uma onda esférica:

$$\mathbf{E}(r, \theta, \varphi, t) = A \frac{\sin \theta}{r} \left[\cos(kr - \omega t) - \frac{\sin(kr - \omega t)}{kr} \right] \hat{\varphi},$$

com $\omega = ck$. Mostre que este campo elétrico \mathbf{E} satisfaz as 4 equações de Maxwell no vácuo.
 b) Encontre o campo magnético \mathbf{B} associado. Dica: use $u = kr - \omega t$.

1.5 Teorema Fundamental do Cálculo

Este teorema é exatamente a definição da integral (de linha) como sendo o inverso da derivada:

$$\int_a^b \left(\frac{df}{dx} \right) dx = f(b) - f(a).$$

Repare na forma geral deste teorema: a integral da derivada de uma função em um comprimento é igual a diferença da função nos limites deste comprimento. Em cálculo diferencial de vetores há três teoremas fundamentais para três tipos diferentes de derivada: gradiente, divergente e rotacional. Antes de enunciar estes outros teoremas precisamos definir as integrais vetoriais.

1.5.1 Integrais

Integrais são usadas extensivamente em todas as áreas da física. Elas podem ser simples, duplas ou triplas, ou n-uplas. Uma integral de linha, ou integral simples é do tipo $\int_{\mathbf{a}}^{\mathbf{b}} \mathbf{v}(x, y, z) \cdot d\ell$, onde \mathbf{v} é uma função vetorial, $d\ell$ é o elemento de comprimento ao longo do caminho \mathcal{C} delimitado pelos vetores \mathbf{a} e \mathbf{b} . Veja que esse é o caso mais geral, sendo que tanto o integrando quanto os limites podem ser escalares em casos mais simples: $\int_a^b v(x, y, z) d\ell$. Quando $\mathbf{a} = \mathbf{b}$ dizemos que a integral é fechada e escrevemos $\oint \mathbf{v} \cdot d\ell$. Em física a integral de linha mais comum é o trabalho exercido por uma força¹⁵: $W = \int \mathbf{F} \cdot d\mathbf{r}$.

As integrais de superfície são da forma $\iint_{\mathcal{S}} \mathbf{v} \cdot d\mathbf{a}$ onde $d\mathbf{a}$ é o elemento de área e \mathcal{S} define a superfície onde a integração será feita. Um vetor área é definido de forma tal que sua direção é perpendicular ao plano da superfície e seu módulo é o valor da área. Na integral, o sentido do vetor área é indefinido quando é uma superfície aberta. Quando a superfície é fechada, o vetor área é definido como apontando para fora da superfície. Um exemplo de integral dupla na física é a Lei de Gauss do Eletromagnetismo: $\epsilon_0 \iint \mathbf{E} \cdot d\mathbf{a} = Q$.

Por último a integral de volume é escrita como $\iiint_{\Omega} T d\tau$, onde $d\tau$ é o elemento de volume e Ω é o volume de integração. Ocionalmente pode-se encontrar integrais de vetores. Nesses casos deve-se escrever os vetores em questão em termos dos versores cartesianos ($\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$). Esses versores são constantes e podem ser tirados para fora da integral, quando então a integral poderá ser resolvida como um escalar. Por exemplo:

$$\iiint \mathbf{v} d\tau = \hat{x} \iiint v_x d\tau + \hat{y} \iiint v_y d\tau + \hat{z} \iiint v_z d\tau.$$

¹⁵É comum não indicar os limites quando se escreve uma integral genérica.

Os versores das coordenadas curvilíneas não são constantes nas integrais e por isso eles devem ser escritos em função dos versores cartesianos para se realizar as integrais.

Exemplo 1.4

Encontre o potencial elétrico criado pelo elétron estando no auto estado fundamental de um átomo com p prótons em seu núcleo.

Seja $\rho(\mathbf{r})$ a densidade de carga elétrica de uma dada distribuição eletrônica. O potencial eletrostático criado por essa distribuição é:

$$\begin{aligned} V(x, y, z) &= \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \iiint \frac{\rho(x_e, y_e, z_e)}{r} d\tau_e, \\ &= \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_e \int_{-\infty}^{+\infty} dy_e \int_{-\infty}^{+\infty} dz_e \frac{\rho(x_e, y_e, z_e)}{\sqrt{(x - x_e)^2 + (y - y_e)^2 + (z - z_e)^2}}, \end{aligned} \quad (1.22)$$

onde a distância entre a posição \mathbf{r} onde está sendo calculado o potencial e o elemento fonte da distribuição na posição \mathbf{r}_e é:

$$r = |\mathbf{r} - \mathbf{r}_e| = \sqrt{(x - x_e)^2 + (y - y_e)^2 + (z - z_e)^2}.$$

Seja $\psi_{nlm}(\mathbf{r})$ a função de onda do elétron no autoestado nlm do átomo com p prótons no núcleo. Nesse caso a densidade de carga será $\rho(\mathbf{r}_e) = -q|\psi_{nlm}(\mathbf{r}_e)|^2$, onde q é o módulo da carga fundamental do elétron. No auto estado fundamental temos $n = 1$ e no primeiro excitado $n = 2$, sendo $l = m = 0$ para ambos. As funções de onda são:

$$\begin{aligned} \psi_{100}(r, \theta, \varphi) &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{p}{a_0} \right)^{3/2} \exp \left(-\frac{pr}{a_0} \right), \\ \psi_{200}(r, \theta, \varphi) &= \frac{1}{4\sqrt{2}\pi} \left(\frac{p}{a_0} \right)^{3/2} \left(2 - \frac{pr}{a_0} \right) \exp \left(-\frac{pr}{2a_0} \right), \end{aligned}$$

onde a_0 é o raio de Bohr. Podemos converter essas expressões para coordenadas cartesianas usando a Eq. 1.13. Dessa forma, os respectivos potenciais ficam:

$$V_1(\mathbf{r}) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_e \int_{-\infty}^{+\infty} dy_e \int_{-\infty}^{+\infty} dz_e \frac{\frac{qp^3}{a_0^3\pi} \exp \left(-\frac{2p}{a_0} \sqrt{x_e^2 + y_e^2 + z_e^2} \right)}{\sqrt{(x - x_e)^2 + (y - y_e)^2 + (z - z_e)^2}}, \quad (1.23)$$

$$\begin{aligned} V_2(\mathbf{r}) &= -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{qp^3}{2^5 a_0^3 \pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_e \int_{-\infty}^{+\infty} dy_e \int_{-\infty}^{+\infty} dz_e \\ &\times \frac{\left(2 - \frac{p}{a_0} \sqrt{x_e^2 + y_e^2 + z_e^2} \right)^2 \exp \left(-\frac{p}{a_0} \sqrt{x_e^2 + y_e^2 + z_e^2} \right)}{\sqrt{(x - x_e)^2 + (y - y_e)^2 + (z - z_e)^2}}. \end{aligned}$$

Estes potenciais são mais simples pois não dependem das coordenadas angulares. Assim, é esperado que as funções V_1 e V_2 sejam também radialmente simétricas.

1.5.2 Teorema Fundamental do Gradiente

Suponha que tenhamos uma função $T(x, y, z)$ e que movamos de um ponto \mathbf{a} até um ponto \mathbf{b} . Para cada elemento de comprimento $d\ell$ a variação na função é de $dT = \vec{\nabla}T \cdot d\ell_1$ (veja Eq. 1.14). Movendo mais um passo o incremento será $dT = \vec{\nabla}T \cdot d\ell_2$, e assim por diante. Fazendo a soma até o ponto final teremos:

$$\int_{\mathbf{a}}^{\mathbf{b}} \vec{\nabla}T \cdot d\mathbf{l} = T(\mathbf{b}) - T(\mathbf{a}). \quad (1.24)$$

Este é o Teorema Fundamental do Gradiente. A interpretação geométrica é direta. Suponha que você quer medir a altura da Torre Eiffel. A forma trabalhosa é medir com uma régua a altura de cada degrau, e depois somar tudo. Essa forma é exatamente a expressão $\int_{\mathbf{a}}^{\mathbf{b}} \vec{\nabla}T \cdot d\ell$. A forma fácil é, com um altímetro, medir o ponto mais alto e o ponto mais baixo e subtrair um do outro: $T(\mathbf{b}) - T(\mathbf{a})$. Um questionamento é que no Teorema Fundamental do Gradiente não há definição do caminho pelo qual a integral é feita. De modo geral as integrais de linhas dependem do caminho, porém algumas funções tem a propriedade de que esta integral dependa apenas dos limites. O gradiente é uma função com tal propriedade.

Dois corolários são derivados Teorema do Gradiente:

- $\int_{\mathbf{a}}^{\mathbf{b}} \vec{\nabla}T \cdot d\ell$ independe do caminho.
- $\oint \vec{\nabla}T \cdot d\ell = 0$, já que $\oint = \int_{\mathbf{a}}$.

1.5.3 Teorema do Divergente e do Rotacional

Já o Teorema Fundamental do Divergente é:

$$\int_{\Omega} (\vec{\nabla} \cdot \mathbf{v}) d\tau = \oint_{\mathcal{S}} \mathbf{v} \cdot d\mathbf{a}.$$

Por algum motivo, talvez devido a sua grande importância, este teorema tem no mínimo três nomes: Teorema do Divergente, Teorema de Gauss e Teorema de Green. Este teorema segue o mesmo raciocínio dos anteriores: a integral da derivada de uma função em uma região é igual a função avaliada na borda desta região. Neste caso a derivada da função é o divergente do vetor ($\vec{\nabla} \cdot \mathbf{v}$), a região é o volume Ω e a borda é a superfície \mathcal{S} que delimita o volume.

A interpretação geométrica do Teorema do Divergente também é direta. Suponha que \mathbf{v} seja o campo de velocidades de um fluido, $\oint_{\mathcal{S}} \mathbf{v} \cdot d\mathbf{a}$ mede então o fluxo resultante pela superfície. Se a mesma quantidade de água que entra na superfície também sai, significa que há conservação da quantidade de matéria. Já o divergente mede exatamente se a quantidade de matéria muda. Se o divergente é positiva, é como se matéria fosse criada logo $\int_{\Omega} (\vec{\nabla} \cdot \mathbf{v}) d\tau$ é positivo. Porém, se isso ocorrer haverá mais matéria saindo da superfície do que entrando, de modo que $\oint_{\mathcal{S}} \mathbf{v} \cdot d\mathbf{a}$ também será positivo. O raciocínio é análogo quando há matéria sendo destruída.

Já o Teorema Fundamental do Rotacional, chamado de Teorema de Stokes, é escrito como:

$$\int_{\mathcal{S}} (\vec{\nabla} \times \mathbf{v}) \cdot d\mathbf{a} = \oint_{\mathcal{C}} \mathbf{v} \cdot d\ell.$$

Como sempre a integral de uma derivada (rotacional no caso) em uma região (superfície \mathcal{S}) é igual ao valor da função na borda (curva \mathcal{C}). A integral da direita é chamada de circulação e ela mede o quanto o vetor \mathbf{v} circula na curva \mathcal{C} . E só haverá circulação nessa curva se houver uma rotação na superfície definida por essa curva, que é exatamente o rotacional de \mathbf{v} .

Existem infinitas superfícies delimitadas pela curva \mathcal{C} . Qual devemos escolher? Supondo a curva como um arco circular, a superfície mais simples é exatamente o plano delimitado pela curva. Porém, nada impede que escolhemos outra superfície. Por exemplo, suponha um vento deformando esse plano. O Teorema de Stokes diz que não importa qual superfície escolher, o valor da integral dupla será definido uma vez escolhido a curva.

Dois corolários são derivados do Teorema de Stokes:

- $\int_{\mathcal{S}} (\vec{\nabla} \times \mathbf{v}) \cdot d\mathbf{a}$ não depende da superfície \mathcal{S} .
- $\oint_{\mathcal{S}} (\vec{\nabla} \times \mathbf{v}) \cdot d\mathbf{a} = 0$ quando a superfície é fechada.

Um pouco de história.

Johann Carl Friedrich Gauss Matemático alemão (1777 - 1855), considerado um dos maiores matemáticos da história, fez inúmeras e importantes contribuições em diversas áreas: teoria dos números, álgebra, estatística, geometria diferencial, geofísica, mecânica, eletrostática, magnetismo, astronomia, matrizes, cálculo numérico e óptica, dentre outros. Gauss era um perfeccionista e viciado em trabalho. Como ele se recusava a publicar trabalhos incompletos (na visão dele), vários resultados publicados de outros cientistas foram encontrados em suas notações bem antes das publicações. Assim, escreveu em torno de 14 trabalhos, todos em latim (idioma oficial da ciência na época). Especula-se que se Gauss tivesse publicado todas as suas descobertas quando as obteve, a matemática teria avançado cerca de 50 anos.

1.5.4 A função Delta de Dirac

Seja o vetor $\mathbf{v} = \hat{\mathbf{r}}/r^2$, que é radial para fora. É de se esperar que o seu divergente seja positivo. Porém, usando a Eq. 1.21, o divergente é:

$$\vec{\nabla} \cdot \mathbf{v} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{r^2}{r^2} \right) = 0.$$

Problemas

1.18) Seja $\mathbf{V} = x^2\hat{\mathbf{x}} + y^2\hat{\mathbf{y}} + z^2\hat{\mathbf{z}}$. a) Calcule a integral de $\mathbf{V} \cdot d\mathbf{a}$ sobre toda a superfície do cubo de lado 1 e vértices nos pontos $(0,0,0)$, $(0,0,1)$, $(0,1,0)$, $(1,0,0)$. b) Compare o resultado com o resultado da mesma integral utilizando o Teorema do Divergente.

1.19) Usando o Teorema do divergente, calcule as seguintes integrais:

- a) $\int \int (x\hat{\mathbf{x}} + y\hat{\mathbf{y}} + z\hat{\mathbf{z}}) \cdot d\mathbf{a}$ na superfície do cilindro limitado por $x^2 + y^2 = 1$, $z = 0$ e $z = 3$;
- b) $\int \int \mathbf{V} \cdot d\mathbf{a}$ com $\mathbf{V} = \hat{\mathbf{x}}x \cos^2 y + xz\hat{\mathbf{y}} + \hat{\mathbf{z}}z \sin^2 y$ na superfície de uma esfera centrada na origem com raio 3;
- c) $\iiint \vec{\nabla} \cdot \mathbf{V} d\tau$ com $\mathbf{V} = \hat{\mathbf{x}}(x^3 - x^2)y + \hat{\mathbf{y}}(y^3 - 2y^2 + y)x + \hat{\mathbf{z}}(z^2 - 1)$ no volume do cubo unitário no primeiro octante.

1.20) Sejam f e g duas funções diferenciáveis. Mostre que:

$$\int_a^b f \left(\frac{dg}{dx} \right) dx = fg \Big|_a^b - \int_a^b g \left(\frac{df}{dx} \right) dx.$$

Este resultado é chamado de integral por partes e sua utilidade reside no fato de se transferir a derivada para outra função.

1.21) Calcule a seguinte integral:

$$I = \int_0^\infty \frac{\ln(1+x)}{x\sqrt{x}} dx.$$

Dica 1: use integral por partes. Dica 2: veja [1].

1.22) ★ Mostre os seguintes resultados entre coordenadas esféricas e cartesianas:

$$r^4 \sin^2 \theta \cos^2 \theta = (x^2 + y^2)z^2, \quad r^4 \sin^4 \theta = (x^2 + y^2)^2.$$

1.23) ★ Seja os seguintes autoestados de um átomo:

$$\begin{aligned} \psi_{32\pm 1}(r, \theta, \varphi) &= \frac{1}{81\sqrt{\pi}} \left(\frac{p}{a_0} \right)^{3/2} \frac{p^2 r^2}{a_0^2} \exp \left(-\frac{pr}{3a_0} \right) \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\varphi}, \\ \psi_{32\pm 2}(r, \theta, \varphi) &= \frac{1}{162\sqrt{\pi}} \left(\frac{p}{a_0} \right)^{3/2} \frac{p^2 r^2}{a_0^2} \exp \left(-\frac{pr}{3a_0} \right) \sin^2 \theta e^{\pm 2i\varphi}, \end{aligned}$$

onde p é o número de prótons no núcleo e a_0 é o raio de Bohr. Mostre que as respectivas densidades eletrônicas $\rho = -q|\psi|^2$ são:

$$\begin{aligned} \rho_3(\mathbf{r}) &= -q|\psi_{32\pm 1}|^2 = -\frac{qp^7}{81^2 \pi a_0^7} (x^2 + y^2)z^2 \exp \left(-\frac{2p}{3a_0} \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \right), \\ \rho_4(\mathbf{r}) &= -q|\psi_{32\pm 2}|^2 = -\frac{qp^7}{162^2 \pi a_0^7} (x^2 + y^2)^2 \exp \left(-\frac{2p}{3a_0} \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \right). \end{aligned}$$

Dica: veja problema 1.22.

1.24) Usando as densidades eletrônicas do problema 1.23, mostre que os respectivos potenciais eletrostáticos (Eq. 1.22) são:

$$V_3(\mathbf{r}) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{qp^7}{81^2\pi a_0^7} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_e \int_{-\infty}^{+\infty} dy_e \int_{-\infty}^{+\infty} dz_e \frac{(x_e^2 + y_e^2)z_e^2 \exp\left(-\frac{2p}{3a_0}\sqrt{x_e^2 + y_e^2 + z_e^2}\right)}{\sqrt{(x-x_e)^2 + (y-y_e)^2 + (z-z_e)^2}}$$

$$V_4(\mathbf{r}) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{qp^7}{162^2\pi a_0^7} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_e \int_{-\infty}^{+\infty} dy_e \int_{-\infty}^{+\infty} dz_e \frac{(x_e^2 + y_e^2)^2 \exp\left(-\frac{2p}{3a_0}\sqrt{x_e^2 + y_e^2 + z_e^2}\right)}{\sqrt{(x-x_e)^2 + (y-y_e)^2 + (z-z_e)^2}}$$

1.25) ★ A Lei de Ampère-Maxwell é dado pela Eq. 1.18, onde o segundo termo do lado direito é a correção de Maxwell. Sem esse termo, a chamada Lei de Ampère é apenas $\vec{\nabla} \times \mathbf{B} = (4\pi/c)\mathbf{J}$ em unidades CGS. Porém, André-Marie Ampère deduziu um resultado teórico para a força entre dois circuitos elétricos após uma série de experimentos entre 1820 e 1825. Seu resultado apresentado a Académie Royale des Sciences para essa força é¹⁶:

$$\mathbf{F} = \frac{ii'}{c^2} \oint \oint \frac{d\mathbf{s} \times (d\mathbf{s}' \times \mathbf{r})}{r^3}.$$

Seja o campo magnético dado por:

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \frac{i'}{c} \oint \frac{d\mathbf{s}' \times \mathbf{r}}{r^3},$$

também em unidades cgs. Mostre que a força pode escrita como:

$$\mathbf{F} = \frac{i}{c} \oint d\mathbf{s} \times \mathbf{B}(\mathbf{r}).$$

1.26) ★★ Mostre que:

$$\int_0^{\pi/2} \cos^{-1} \left(\frac{\cos x}{1 + 2\cos x} \right) dx = \frac{5\pi^2}{24}.$$

Dica: veja [1]. Se algum problema neste livro merece 3 estrelas, é esse!

Um pouco de história.

Todas as variações do Teorema fundamental do cálculo apresentados neste capítulo usam o cálculo diferencial e integral criado por Isaac Newton, de forma que os teoremas datam de pelo menos fim do século XVII. O Teorema do Divergente foi formulado primeiramente por Lagrange em 1762, depois (de maneira independente) por Gauss

¹⁶Veja: V. H. A. Dias, P. M. C. Dias *Escrevendo o "Livro da Natureza" na linguagem da matemática: A lei de Ampère*, Revista Brasileira de Ensino de Física, 37, n. 4, 4601 (2015).

em 1813, que é a versão atualmente utilizada. Apenas em 1826, o matemático russo (sempre eles) Michael Ostrogradsky foi o primeiro a fornecer uma prova geral do teorema. Vários casos especiais do enunciado geral de Ostrogradsky foram desenvolvidos em seguida, sempre com o intuito de aplicar a algum tópico em específico da física: Gauss estava interessado em estudar atração magnética, Green em eletricidade e magnetismo, Ostrogradsky na condução de calor. Já o Teorema de Stokes apareceu pela primeira vez em 1854, como uma das questões do Smith's Prize Exam na universidade de Cambridge. Em seguida, o teorema foi citado em cartas entre Lord Kelvin (William Thomson) e George Stokes. Mas a primeira demonstração formal publicada apareceu apenas em 1861 na monografia de Hermann Hankel. Em 1871 J. Clerk Maxwell escreveu para Stokes questionando a origem do teorema. Stokes deve ter respondido, pois em 1873 Maxwell publica o Treatise on Electricity and Magnetism no qual apresenta e prova o Teorema de Stokes, além de fazer referência ao Smith's Prize Exam.

1.6 Leitura Adicional

- [3] D. J. Griffiths, *Introduction to Electrodynamics*, 4th Edition, Pearson Education (2013). Este livro (o capítulo 1) foi a principal referência para este capítulo de Cálculo Diferencial e Integral.
- [4] V. J. Katz, *The History of Stokes' Theorem*, Mathematics Magazine Vol. 52, No. 3 (May, 1979), pp. 146-156. Published by: Mathematical Association of America. Apresenta um histórico detalhado do desenvolvimento do Teorema do Divergente e de Stokes, mostrando as diversas deduções.

Capítulo 2

Séries Infinitas

Gentlemen, that is surely true, it is absolutely paradoxical; we cannot understand it, and we don't know what it means. But we have proved it, and therefore we know it must be the truth. Benjamin Peirce

 MA série é uma sequência de termos a_n , para $n = 0, 1, 2, 3, 4, \dots$ com o critério definido para o cálculo de cada termo. Uma série infinita envolve infinitos termos. Já uma soma parcial envolve apenas os N primeiros termos. Se a soma resultante de uma série infinita tende para o infinito, a série é dita divergente. Já se a soma é finita, a série é dita convergente:

$$S = \sum_{n=0}^{+\infty} a_n.$$

Em qualquer série a variável utilizada na somatória (n nesse caso) é dita muda pois ela não tem valor e pode ser trocada: $\sum_{n=0} a_n = \sum_{m=0} a_m = \sum_{q=0} a_q = \sum_{k=0} a_k = \dots$

Exemplo 2.1

Série Geométrica. O termo a_n desta série é definido como $a_n = r a_{n-1} = r^n a_0$, onde r é a razão e a_0 é o primeiro termo da série. A soma dos n primeiros termos desta série é:

$$S_n = \frac{1 - r^n}{1 - r}. \quad (2.1)$$

Se $r > 1$ teremos que $S_n \rightarrow \infty$ quando $n \rightarrow \infty$. Assim, esta série é convergente apenas para $r < 1$. Neste caso:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} S_n = \frac{1}{1 - r}.$$

Este exemplo mostra que $\lim_{n \rightarrow \infty} a_n = 0$ é necessário para que a série seja convergente. De fato, é uma condição necessária, mas não suficiente. A definição formal de limite é: uma série a_n é convergente tendo um limite S se para qualquer $\varepsilon > 0$ existe um N tal que:

$$|S - a_n| < \varepsilon, \text{ para } n > N. \quad (2.2)$$

Um exemplo da uma série que converge para o famoso número e :

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} = e = 2.718281\dots \quad (2.3)$$

Exemplo 2.2

Encontre o limite para $n \rightarrow \infty$ da sequência:

$$a_n = \frac{(2n-1)^4 + \sqrt{1+9n^8}}{1+n^3-7n^4}.$$

Para n muito grande podemos desprezar os 1 que aparecem: $a_n \approx \frac{(2n)^4 + 3n^4}{n^3 - 7n^4}$.

Agora dividimos o numerador e denominador por n^4 . Resta apenas os termos que não vão para zero:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{a_n}{n^4} = \frac{(2n)^4 + 3n^4}{n^4} \frac{n^4}{n^3 - 7n^4} = -\frac{2^4 + 3}{7} = -\frac{19}{7}.$$

2.1 Testes de convergência

Para saber se uma série é convergente ou não deve-se aplicar os chamados testes de convergência. Um primeiro teste simples é o de comparação. Seja a_n uma série convergente. Logo se outra série u_n é tal que $0 \leq u_n \leq a_n$ para todo n , então a série u_n também é convergente.

Exemplo 2.3

Série da função Zeta de Riemann. Seja a série $a_n = 1/n^2$. Ela converge?

A função zeta de Riemann é definida para $\text{Re}(z) > 1$ como:

$$\zeta(z) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^z} = 1 + \frac{1}{2^z} + \frac{1}{3^z} + \dots \quad (2.4)$$

Esta função tem grande importância na matemática no cálculo de números primos. Por exemplo, uma importante propriedade sua proposta por Euler é:

$$\zeta(k) = \prod_p \left(\frac{1}{1-p^{-k}} \right), \quad k > 1,$$

para todos os números primos p (veja problema 2.11 sobre esta propriedade).

Da definição de $\zeta(z)$ temos que $a_n = \zeta(2)$. Vamos então usar o teste de comparação com a série $b_n = 1/(n^2 + n)$ que é convergente. Se $n \geq 1$ temos que $n+1 > n$, o que

implica em $(n+1)^2 > n(n+1)$. Tirando a inversa temos que:

$$a_n = \frac{1}{n^2} < \frac{1}{(n+1)^2} < \frac{1}{n(n+1)} = b_n. \quad (2.5)$$

Logo a_n converge. O valor do limite é $\zeta(2) = \pi^2/6 \sim 1,6449$ e foi encontrado por Euler (sempre ele!)^a. Euler encontrou também $\zeta(4) = \pi^4/90$, $\zeta(6) = \pi^6/945$,

^aSão necessários cerca de 200 termos para se encontrar o número correto na segunda casa decimal, como obtido por Euler.

Outro teste importante é o de d'Alembert (ou razão de Cauchy). Se $0 \leq a_{n+1}/a_n \leq r < 1$ para um r suficientemente grande, então a_n é convergente. Por outro lado se $a_{n+1}/a_n = 1$ a convergência é indeterminada e se for maior que 1 a série é divergente. Este critério não é muito sensível e em vários casos outros testes são importantes.

2.1.1 Convergência absoluta

Seja uma série u_n . Se $\sum |u_n|$ converge a série é dita absolutamente convergente (ou tem convergência absoluta). Se $\sum u_n$ converge mas $\sum |u_n|$ não, a série é dita condicionalmente convergente.

A álgebra de séries com convergência absoluta é intuitiva. Séries com convergência absoluta podem ser somadas em qualquer ordem e a série resultante também será convergente. Já séries condicionalmente convergentes devem ser somadas em uma sequência específica para que o resultado também seja convergente. Da mesma forma, multiplicação de séries com convergência absoluta resulta em uma série cujo limite é o produto das séries iniciais. Em específico, o produto de duas séries pode ser escrito como:

$$\sum_n u_n \sum_n v_n = \sum_n \sum_{m=0}^n u_m v_{n-m}. \quad (2.6)$$

Código 2.1

O número π é um número irracional que pode ser calculado numericamente de diversas formas^a. Todos sabemos que a área de um círculo é dado por $A = \pi r^2$. Neste caso supomos conhecido o valor de π e raio r para então encontrar a área A . Podemos estimar numericamente o π se soubermos a área A do círculo, a qual podemos aproximar por um polígono regular de N lados. Dessa forma:

$$\pi_e(N) = \frac{A_N}{r^2}, \quad (2.7)$$

onde A_N é a área do polígono e π_e é a estimativa numérica para π . O valor verdadeiro será então o limite da série para N muito grande, quando o polígono se aproxima de um círculo:

$$\pi = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{A_N}{r^2}.$$

Na figura 2.1(a) está ilustrado o caso de um hexágono (polígono regular com $N = 6$ lados) inscrito em um círculo de raio $r = 1^b$. Fazendo o cálculo de um polígono regular de N lados em função de N , observa-se que para N maior que 50 já obtém-se uma boa aproximação, como mostra a figura 2.1(b).

^aPor exemplo, usando uma malha infinita cuja resistência equivalente também será o limite de uma série: veja E.V.C. Tadeu, L. M. Alves, M. I. A. Jardim, W. P. Queirós, A. M. B. Goncalves *Determinação do número pi (π) por meio de uma rede quadrada de resistores idênticos* Revista Brasileira de Ensino de Física, **40**, n. 2, e2304 (2018).

^bOs códigos de todas as figuras deste capítulo estão no Github: https://github.com/paulofreitasgomes/Math_Methods_for_Physics/tree/master/Series_Complexes.

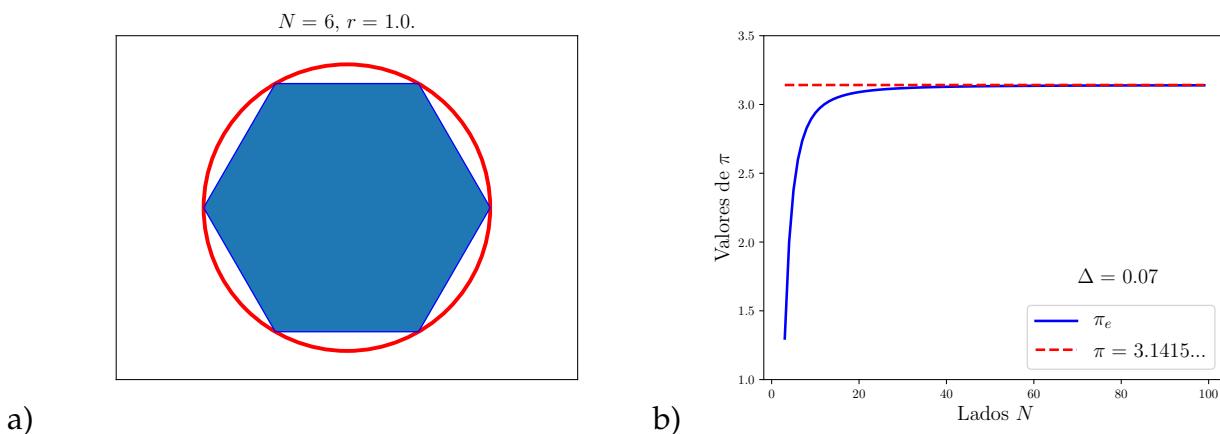


Figura 2.1: (a) Hexágono inscrito em um círculo. (b) Estimativa π_e em função do número de lados N . A linha tracejada vermelha é o valor real de π . O valor Δ indicado é o erro relativo em porcentagem.

2.2 Séries de Funções

Quando cada termo de uma série é uma função $u_n = u_n(x)$, trata-se de uma série de funções, o que é amplamente utilizado em física. Por exemplo em várias equações diferenciais não se encontra solução na forma de funções elementares, mas sim na forma de uma série de função:

$$f(x) = \sum_{i=1}^{\infty} u_n(x). \quad (2.8)$$

Dizemos que $f(x)$ está expandida em uma série de funções $u_n(x)$. A função $f(x)$ será comportada se a série também o for. Dessa forma, tanto a soma parcial $s_n(x)$ quanto o limite ficam também dependentes de x :

$$\sum_{i=1}^{\infty} u_n(x) = S(x) = \lim_{n \rightarrow \infty} s_n(x),$$

onde $s_n(x) = \sum_{i=1}^n u_1(x) + u_2(x) + u_3(x) + \dots + u_n(x)$ é a soma parcial até o n -ésimo termo.

Se para qualquer valor $\varepsilon > 0$ existir um N independente de x no intervalo $[a, b]$ tal que:

$$|S(x) - s_n(x)| < \varepsilon, \quad \text{para todo } n \geq N, \quad (2.9)$$

dizemos que a série é uniformemente convergente no intervalo $a \leq x \leq b$. Sendo uniformemente convergente uma série de funções converge para uma função contínua, sendo inclusive diferenciável. O intervalo deve ser fechado: incluso os pontos das bordas.

As séries uniformemente convergentes e com os termos $u_n(x)$ contínuos tem três propriedades importantes (muito utilizadas na física):

- A soma $f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} u_n(x)$ também é contínua.
- A série pode ser integrada termo a termo. A soma das integrais é igual a integral da soma:

$$\int_a^b f(x) dx = \sum_{n=1}^{\infty} \int_a^b u_n(x) dx.$$

- A derivada da soma é igual a soma das derivadas:

$$\frac{d}{dx} f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{d}{dx} u_n(x).$$

caso du_n/dx também seja contínuo em $[a, b]$.

2.2.1 Teste Weierstrass M

O teste de convergência uniforme mais comum é o chamado teste Weierstrass M . Se for possível construir uma série de números $\sum_1^{\infty} M_i$ tal que $M_i \geq |u_i(x)|$ para todo x no intervalo $[a, b]$ e se $\sum_1^{\infty} M_i$ for convergência então a série $\sum_1^{\infty} u_i(x)$ será uniformemente convergente no intervalo $[a, b]$.

A prova desse enunciado é direta. Se $\sum_1^{\infty} M_i$ converge então existe um número N tal que para $n + 1 \geq N$ temos da definição de convergência:

$$\sum_{i=n+1}^{\infty} M_i < \varepsilon.$$

Assim com $|u_i(x)| \leq M_i$ para todo x no intervalo $[a, b]$ temos:

$$\sum_{i=n+1}^{\infty} u_i(x) < \varepsilon.$$

Logo:

$$|S(x) - s_n| = \left| \sum_{i=n+1}^{\infty} u_i(x) \right| < \varepsilon,$$

e por definição $\sum_1^\infty u_i(x)$ é uniformemente convergente no intervalo $[a, b]$.

Neste caso $\sum_1^\infty u_i(x)$ também é absolutamente convergente já que no enunciado do teste de Weierstrass M foi especificado o valor absoluto. Porém, de forma geral convergência uniforme e absoluta são conceitos independentes, um não implica o outro. Pode haver séries que tem uma convergência e não a outra.

Da definição de convergência uniforme uma função expandida em uma série na forma da Eq. 2.8 não tem descontinuidade no intervalo de convergência. Na prática o teste Weierstrass M implica que a função é tanto uniforme quanto absolutamente convergente. Assim uma função uniforme mas condicionalmente convergente irá falhar no teste.

2.3 Expansão de Taylor

Expansão de Taylor¹ é uma série de funções envolvendo a derivada de uma função com o objetivo de obter uma expressão aproximada para a mesma, e é amplamente usada na física. Seja $f(x)$ uma função com sua derivada n -ésima $f^{(n)}(x)$ contínua no intervalo $a \leq x \leq b$. Integrando essa n -ésima derivada obtemos:

$$\int_a^x f^{(n)}(x) dx_1 = f^{(n-1)}(x_1) \Big|_a^x = f^{(n-1)}(x) - f^{(n-1)}(a).$$

Integrando novamente:

$$\begin{aligned} \int_a^x dx_2 \int_a^{x_2} dx_1 f^{(n)}(x_1) &= \int_a^x dx_2 \left[f^{(n-1)}(x_2) - f^{(n-1)}(a) \right], \\ &= f^{(n-2)}(x) - f^{(n-2)}(a) - (x-a)f^{(n-1)}(a). \end{aligned}$$

Mais uma vez:

$$\int_a^x dx_3 \int_a^{x_3} dx_2 \int_a^{x_2} dx_1 f^{(n)}(x_1) = f^{(n-3)}(x) - f^{(n-3)}(a) - (x-a)f^{(n-2)}(a) - \frac{(x-a)^2}{2!}f^{(n-1)}(a).$$

Finalmente, integrando pela n -ésima vez:

$$\begin{aligned} \int_a^x dx_n \cdots \int_a^{x_2} dx_1 f^{(n)}(x_1) &= f(x) - f(a) - (x-a)f'(a) - \frac{(x-a)^2}{2!}f''(a) \\ &\quad - \cdots - \frac{(x-a)^{n-1}}{(n-1)!}f^{(n-1)}(a). \end{aligned}$$

Estas expressões são exatas: não contém nenhuma aproximação. Agora vamos isolar $f(x)$ da última expressão:

$$f(x) = f(a) + (x-a)f'(a) + \frac{(x-a)^2}{2!}f''(a) + \cdots + \frac{(x-a)^{n-1}}{(n-1)!}f^{(n-1)}(a) + R_n,$$

onde o último termo R_n é chamado de resíduo e é igual a:

$$R_n = \int_a^x dx_n \cdots \int_a^{x_3} dx_1 f^{(n)}(x_1).$$

¹Matemático inglês Brook Taylor, (1685-1731).

O teorema do valor médio da integral é:

$$\int_a^x g(x)dx = (x-a)g(\xi),$$

com $a \leq \xi \leq x$. Com este teorema o resíduo então pode ser colocado na forma:

$$R_n = \frac{(x-a)^n}{n!} f^{(n)}(\xi).$$

Quando este resíduo tender a zero², temos a chamada Expansão de Taylor:

$$\begin{aligned} f(x) &= f(a) + (x-a)f'(a) + \frac{(x-a)^2}{2!}f''(a) + \frac{(x-a)^3}{3!}f'''(a) + \dots \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(x-a)^n}{n!} f^{(n)}(a). \end{aligned} \quad (2.10)$$

A Expansão de Taylor relaciona o valor da função em um ponto x com o valor de suas derivadas em um ponto de referência a . É uma função na potência da diferença $\Delta = x - a$. Esta expansão é útil quando se deseja encontrar o valor da função na vizinhança de um ponto conhecido, ou seja, a expansão é melhor quanto mais próximo x for de a . Outra forma de se escrever é:

$$f(x+h) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{h^n}{n!} f^{(n)}(a),$$

com h pequeno.

Quando a expansão é feita em torno de $a = 0$, ela é chamada de série de Maclaurin:

$$f(x) = f(0) + xf'(0) + \frac{x^2}{2!}f''(0) + \frac{x^3}{3!}f'''(0) + \dots = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!} f^{(n)}(0).$$

Exemplo 2.4

Seja $f(x) = e^x$. Encontre a expansão de Taylor.

Temos que $f^{(n)}(0) = 1$ para todo n inteiro. Logo:

$$e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \dots = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!}.$$

Aplicando o teste da razão temos que:

$$\frac{a_{n+1}}{a_n} = \frac{x^{n+1}n!}{x^n(n+1)!} = \frac{x}{n+1} \rightarrow 0$$

se $n \rightarrow \infty$. Logo de fato a série é convergente.

Por completeza, vamos calcular o restante R_n . Porém antes vamos reescrevê-lo de

² $\lim_{n \rightarrow \infty} R_n = 0$.

outra forma mais conveniente. O teorema do valor médio diz que:

$$\int_a^x g(x)dx = (x-a)g(\xi),$$

para algum ξ tal que $a \leq \xi \leq x$. Integrando n vezes encontramos a forma de Lagrange para o restante:

$$R_n = \frac{(x-a)^n}{n!} f^{(n)}(\xi).$$

Para o caso da exponencial o restante fica:

$$R_n = \frac{x^n}{n!} f^{(n)}(\xi) = \frac{x^n}{n!} e^\xi, \quad 0 \leq |\xi| \leq x.$$

Logo $|R_n| \leq x^n e^x / n!$, o que implica $\lim_{n \rightarrow \infty} R_n = 0$ para todos os valores finitos de x . Logo a série de Maclaurin de e^x converge absolutamente no intervalo $-\infty < x < \infty$.

Observando a expansão de Tayler do último exemplo percebemos como a Eq. 2.3 pode ser provada facilmente.

Código 2.2

A função erro aparece na solução de algumas equações diferenciais de difusão e também em estatística. Sua definição é:

$$\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt \quad (2.11)$$

Algumas de suas propriedades são:

$$\operatorname{erf}(-\infty) = -1, \quad \operatorname{erf}(+\infty) = 1 \quad (2.12)$$

$$\operatorname{erf}(-x) = -\operatorname{erf}(x), \quad \int_0^x e^{-\frac{t^2}{2\sigma^2}} dt = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \sigma \operatorname{erf}\left[\frac{x}{\sqrt{2}\sigma}\right]. \quad (2.13)$$

Apesar de sua definição não intuitiva, a função erro pode ser aproximada utilizando séries de Taylor:

$$g(x) = \sum_{q=0}^{\infty} g_q(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sum_{q=0}^{\infty} \frac{(-1)^q x^{2q+1}}{q!(2q+1)}. \quad (2.14)$$

onde $g_q(x)$ é a expansão contendo q termos. Quando a função é complicada, como a função erro, o cálculo da série de Taylor pode ser trabalhoso. Porém, isso pode ser facilmente feito utilizando a computação simbólica (por exemplo, utilizando o módulo Sympy (<http://www.sympy.org> em Python)). Na figura 2.2(a) está o gráfico contendo $\operatorname{erf}(x)$ e 4 séries $g_q(x)$ para $q = 1, 11, 21$ e 31 . O código efetua de forma analítica as derivadas para obter as expressões para $g_q(x)$ para qualquer função $f(x)$ que possa ser definida no Sympy.

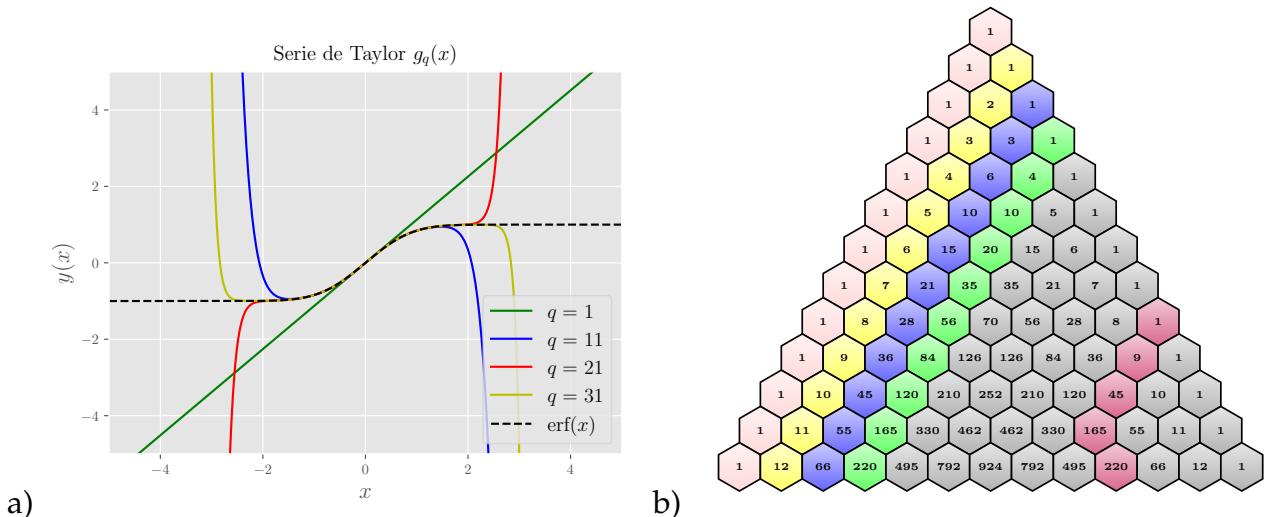


Figura 2.2: (a) Gráfico da função erro $\text{erf}(x)$ e suas expansões de Taylor $g_q(x)$ com $q = 1, 11, 21$ e 31 . Utilizamos a implementação da função erro do pacote SciPy: [\(b\)](https://docs.scipy.org/doc/scipy-0.14.0/reference/generated/scipy.special.erf.html) Triângulo de Pascal. Fonte: <https://texample.net/tikz/examples/pascal-triangle/>.

2.4 Séries de potências

Séries de potências aparecem muito em física e por isso merecem uma atenção em mais detalhes. Sua expressão geral é:

$$f(x) = a_0 + a_1(x - x_0) + a_2(x - x_0)^2 + a_3(x - x_0)^3 + \dots = \sum_{n=0}^{\infty} a_n(x - x_0)^n,$$

onde os coeficientes a_n são independente de x e x_0 é uma constante. Sua convergência depende também do valor de x e pode ser avaliada usando o teste da razão:

$$\rho = \lim_{n \rightarrow \infty} \left| \frac{a_{n+1}(x - x_0)^{n+1}}{a_n(x - x_0)^n} \right|.$$

Se $\rho < 1$ a série é convergente.

Um resultado que torna a série de potência muito útil³ é o fato de que se ela é convergente para algum $|x| < R$ então ela é absoluta e uniformemente convergente para algum intervalo $|x| < S$ sendo que $0 < S < R$. Neste caso, como os termos $a_n x^n$ são contínuos, a função $f(x)$ também será contínua. Logo $f(x)$ é diferenciável e integrável quantas vezes for desejado. Estas características tornam a série de potências muito usada em física.

Exemplo 2.5

Avalie se as seguintes séries são convergentes ou não:

$$\text{a)} \quad \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-x)^n}{2^n}, \quad \text{b)} \quad \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(x+2)^n}{\sqrt{n+1}}.$$

³E que pode ser provado pelo teste de Weierstrass.

a) Para a primeira série temos:

$$\rho_n = \left| \frac{a_{n+1}(x - x_0)^{n+1}}{a_n(x - x_0)^n} \right| = \left| \frac{(-x)^{n+1}}{2^{n+1}} \frac{2^n}{(-x)^n} \right| = \left| \frac{x}{2} \right|. \quad (2.15)$$

Fazendo o limite $n \rightarrow \infty$ obtemos $\rho = |x|/2$. Temos então que a série é convergente para $\rho < 1$, ou $|x| < 2$.

b) Para a segunda série:

$$\begin{aligned} \rho_n &= \left| \frac{(x+2)^{n+1}}{\sqrt{n+2}} \frac{\sqrt{n+1}}{(x+2)^n} \right| = (x+2) \frac{\sqrt{n+1}}{\sqrt{n+2}}, \\ \rho &= |x+2|. \end{aligned}$$

A série converge para $|x+2| < 1$, ou $-3 < x < -1$. Porém, se $x = -3$ temos a série:

$$1 - \frac{1}{\sqrt{2}} + \frac{1}{\sqrt{3}} - \frac{1}{\sqrt{4}} + \dots$$

que é convergente. Já para $x = -1$ a série não converge. Logo o intervalo de convergência é $-3 \leq x < -1$.

Exemplo 2.6

Mostre que a representação em série de potências de uma função é única.

Seja uma função representada por duas séries de potências:

$$f(x) = \begin{cases} \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n & -R_a < x < R_a \\ \sum_{n=0}^{\infty} b_n x^n & -R_b < x < R_b \end{cases}$$

com intervalos coincidentes de convergência, incluindo a origem. Queremos mostrar que $a_n = b_n$ para todo n . Dado a definição de $f(x)$ podemos escrever:

$$\sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n = \sum_{n=0}^{\infty} b_n x^n, \quad -R < x < R, \quad (2.16)$$

onde R é o menor entre R_a e R_b . Fazendo $x = 0$ na Eq. 2.16 obtemos $a_0 = b_0$. Como é uma série de potência convergente, vamos derivar a Eq. 2.16:

$$\sum_{n=0}^{\infty} n a_n x^{n-1} = \sum_{n=0}^{\infty} n b_n x^{n-1}. \quad (2.17)$$

Fazendo $x = 0$ nesta equação obtemos $a_1 = b_1$. Derivando a Eq. 2.17 e fazendo $x = 0$ obtemos $a_2 = b_2$. Repetindo esse processo n vezes obtemos $a_n = b_n$, o que mostra que as duas séries coincidem. Assim a representação em série de potências é única. Esta propriedade é essencial na busca de solução em séries de potências de equações diferenciais.

2.4.1 Obtenção para séries de potências

Como séries de potências são muito úteis em física, apresentamos aqui alguns dos resultados mais usados e técnicas para encontrar outros casos não tão comuns. Por exemplo, as seguintes de funções trigonométricas e exponenciais são predominante em física:

$$\sin x = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n x^{2n+1}}{(2n+1)!} = x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \frac{x^7}{7!} + \dots, \quad \forall x, \quad (2.18)$$

$$\cos x = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n x^{2n}}{(2n)!} = 1 - \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} - \frac{x^6}{6!} + \dots, \quad \forall x, \quad (2.19)$$

$$e^x = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!} = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \frac{x^4}{4!} + \dots, \quad \forall x, \quad (2.20)$$

$$\ln(1+x) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n+1} x^n}{n} = x - \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} - \frac{x^4}{4!} + \dots, \quad -1 < x \leq 1, \quad (2.21)$$

Várias técnicas de combinações de séries podem ser usadas para obtenção de séries de funções aparentemente difíceis.

Exemplo 2.7

Ache a série de potência das seguintes funções:

a) $f(x) = (x+1) \sin x$. Usando a Eq. 2.18 temos:

$$f(x) = (x+1) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n x^{2n+1}}{(2n+1)!} = x + x^2 - \frac{x^3}{3!} - \frac{x^4}{3!} + \dots$$

b) $f(x) = \frac{1}{x} \ln(1+x)$. Divida a Eq. 2.21 por x .

c) $f(x) = e^{-x^2}$. Troque x por $-x^2$ na Eq. 2.20:

$$e^{-x^2} = 1 - x^2 + \frac{x^4}{2!} - \frac{x^6}{3!} + \dots$$

d) $f(x) = \arctan x$. Para essa vamos usar a expressão integral do arctan, Eq. B.11, e também a expansão binomial do integrando. Temos que:

$$\frac{1}{1+t^2} = 1 - t^2 + t^4 - t^6 + \dots$$

Logo:

$$\begin{aligned} \arctan x &= \int_0^x \frac{dt}{1+t^2} = \int_0^x (1-t^2+t^4-t^6+\dots) dt = \left(t - \frac{t^3}{3} + \frac{t^5}{5} - \frac{t^7}{7} + \dots \right) \Big|_0^x, \\ &= x - \frac{x^3}{3} + \frac{x^5}{5} - \frac{x^7}{7} + \dots \end{aligned}$$

Veja que esses métodos são mais fáceis do que tirar várias derivadas de $f(x)$. E o teorema deduzido no exemplo 2.6 assegura que se encontrarmos uma solução, essa é a solução.

2.4.2 Série Binomial

Se fizermos a expansão em Taylor da função $f(x) = (1 + x)^a$, obtemos:

$$\begin{aligned}(1 + x)^a &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!} \frac{d^n}{dx^n} (1 + x)^a \Big|_{x=0} = 1 + ax + \frac{1}{2}a(a-1)x^2 + \dots \\ &= 1 + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a(a-1)(a-2)\cdots(a-n+1)}{n!} x^n.\end{aligned}$$

Se $a = N$ inteiro podemos reescrever a última expressão como:

$$(1 + x)^N = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{N!}{n!(N-n)!} x^n = \sum_{n=0}^{\infty} \binom{N}{n} x^n, \quad (2.22)$$

onde o coeficiente binomial é definido como:

$$\binom{n}{k} = \frac{n!}{k!(n-k)!}. \quad (2.23)$$

Já o fatorial de um número é $n! = n(n-1)(n-2)(n-3)\cdots 3 \cdot 2 \cdot 1$. A eq. 2.22 é a chamada série binomial, a qual permite calcular potências do tipo $(1 + x)^N$ utilizando o coeficiente binomial. Os diversos valores do coeficiente binomial podem ser encontrado de maneira fácil através do chamado triângulo de Pascal, mostrado na figura 2.2(b).

De maneira geral comparando as expressões acima para $(1 + x)^N$ e $(1 + x)^a$ (onde a é um número real), podemos obter:

$$\begin{aligned}(x + y)^a &= y^a + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a(a-1)(a-2)\cdots(a-n+1)}{n!} x^{a-n}, \\ (x + y)^N &= \sum_{n=0}^{\infty} \binom{N}{n} x^n y^{N-n}.\end{aligned} \quad (2.24)$$

Um exemplo simples da série binomial da Eq. 2.24 é no cálculo de certos tipos de números grandes:

$$999^3 = (10^3 - 1)^3 = 10^9 - 3 \times 10^6 + 3 \times 10^3 - 1 = 997002999.$$

2.5 Números de Bernoulli

A soma das potências inteiros é definida pela série:

$$\mathcal{S}_m(n) = \sum_{i=1}^n i^m = 1^m + 2^m + 3^m + \dots + n^m.$$

Uma resposta para esta soma foi encontrada de forma independente pelo japonês Seki Takakazu (1642-1708) e pelo suíço Jakob Bernoulli⁴ (1655-1705):

$$\mathcal{S}_m(n-1) = \frac{1}{m+1} \sum_{k=0}^m \binom{m+1}{k} \mathcal{B}_k n^{m-k+1}.$$

⁴O nome é familiar com razão: há alguns Bernoulli famosos na matemática.

A sequência de números \mathcal{B}_n foi encontrada por ambos durante o cálculo de $S_m(n - 1)$. Os primeiros termos são:

$$\begin{aligned}\mathcal{B}_0 &= 1, \quad \mathcal{B}_1 = -\frac{1}{2}, \quad \mathcal{B}_2 = \frac{1}{6}, \quad \mathcal{B}_3 = 0, \\ \mathcal{B}_4 &= -\frac{1}{30}, \quad \mathcal{B}_5 = 0, \quad \mathcal{B}_6 = \frac{1}{42}, \quad \mathcal{B}_7 = 0, \quad \dots\end{aligned}$$

Takakazu e Bernoulli chegaram nessa sequência analisando a série $S_m(n - 1)$ para os primeiros valores de $m = 1, 2, 3, 4, 5, \dots$. Eles não encontraram uma relação de recorrência ou uma definição geral para \mathcal{B}_n . Após Takakazu e Bernoulli, o primeiro que analisou com maior profundidade essa questão foi o grande matemático Leonard Euler (1707-1783). Dentre os diversos resultados que Euler obteve, ele apresentou também a seguinte definição:

$$\frac{x}{e^x - 1} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\mathcal{B}_n x^n}{n!}.$$

Essa definição coloca a série \mathcal{B}_n como função geradora do lado esquerdo da equação anterior. Essa definição permite a identificação das seguintes propriedades:

- \mathcal{B}_n é racional.
- $\mathcal{B}_{2n+1} = 0$ para $n \geq 1$. Ou seja, os termos ímpares a partir de \mathcal{B}_3 são zero.
- \mathcal{B}_{2n} alterna sinal: $\mathcal{B}_{4n} < 0$ e $\mathcal{B}_{4n+2} > 0$ para $n \geq 1$.
- A magnitude de \mathcal{B}_{2n} cresce de maneira muito rápida.

Comparando a definição de \mathcal{B}_n com a expansão de Taylor temos que:

$$\mathcal{B}_n = \left. \frac{d^n}{dx^n} \frac{x}{e^x - 1} \right|_{x=0}.$$

2.5.1 Aplicações

Os números de Bernoulli aparecem em diversas expressões, como por exemplo nas cotangente e cotangente hiperbólica:

$$\cot x = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{2}{\mathcal{B}_{2n} (2x)^{2n-1}} (2n)!, \quad \coth x = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2}{\mathcal{B}_{2n} (2x)^{2n-1}} (2n)!.$$

Expressões correlatas para $\tan x$ e $\tanh x$ podem ser obtidas diretamente. Até a função zeta de Riemann (definida na Eq. 2.4) pode ser escrita em função de \mathcal{B}_n :

$$\zeta(2k) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^{2k}} = \frac{|\mathcal{B}_{2k}| (2\pi)^{2k}}{(2k)!}, \tag{2.25}$$

para qualquer inteiro $k > 0$.

Problemas

2.1) Prove o resultado 2.1 por indução. a) Prove que vale para $n = 1$. b) Prove que se vale para n , vale também para $n + 1$. c) Usando este resultado, mostre que dízimas periódicas infinitas podem ser escritas como frações, por exemplo: $1,1111\dots = 10/9$ e $0.131313\dots = 13/99$.

2.2) Seja $f(x) = (1 + x)^m$. a) Mostre que:

$$f(x) = 1 + mx + \frac{m(m-1)}{2!}x^2 + \frac{m(m-1)(m-2)}{3!}x^3 + \dots$$

b) Os coeficientes binomiais B_{mn} são definidos como os coeficientes na expansão:

$$(1 + x)^m = \sum_{n=0}^{+\infty} B_{mn} x^n.$$

Calcule B_{mn} .

2.3) A razão de duas funções $g(x)$ e $f(x)$ é indeterminada quando ambas as funções tendem para zero quando $x \rightarrow x_0$. Prove a regra de l'Hopital:

$$\lim_{x \rightarrow x_0} \frac{g(x)}{f(x)} = \lim_{x \rightarrow x_0} \frac{g'(x)}{f'(x)}.$$

2.4) Encontre o limite para $n \rightarrow \infty$ das seguintes sequências:

$$\begin{aligned} \text{a)} \quad a_n &= \frac{n^2 + 5n^3}{2n^3 + 3\sqrt[3]{4 + n^6}}, & \text{b)} \quad b_n &= \frac{(n+1)^2}{\sqrt{3 + 5n^2 + 3n^3}}, \\ \text{c)} \quad c_n &= \frac{3^n}{n^2}, & \text{d)} \quad d_n &= n \cos(1/n). \end{aligned}$$

2.5) Deduza a Fórmula de Euler: $e^{ix} = \cos x + i \sin x$.

2.6) Usando os métodos da seção, calcule a expansão em série das funções:

$$\begin{aligned} \text{a)} \quad f(x) &= e^x \cos x, & \text{b)} \quad g(x) &= x \sqrt{a + bx}, \\ \text{c)} \quad h(x) &= \cos x^3, & \text{d)} \quad i(x) &= \frac{x}{\sqrt{a + bx}}. \end{aligned}$$

2.7) ★ Determine os maiores e os menores valores de x , ou seja, o intervalo de convergência da série hipergeométrica de Gauss:

$$F(\alpha, \beta, \gamma; x) = 1 + \frac{\alpha\beta}{1!\gamma}x + \frac{(\alpha+1)(\beta+1)\alpha\beta}{2!\gamma(\gamma+1)}x^2 + \dots \quad (2.26)$$

2.8) a) Encontre a série de Maclaurin de $f(x) = \ln(1 + x)$. b) Encontre a expansão de Taylor de $e^{\tan x}$. c) Encontre a expansão de $\arctan x$.

2.9) Em análise numérica é comum aproximar a derivada segunda por:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} \approx \frac{\psi(x+h) - 2\psi(x) + \psi(x-h)}{h^2}.$$

Encontre o erro nesta aproximação.

2.10) A teoria de Planck de osciladores quantizados leva a uma energia média da forma:

$$\langle \varepsilon \rangle = \frac{\sum_{n=1}^{\infty} n \varepsilon_0 \exp(-n \varepsilon_0 / kT)}{\sum_{n=1}^{\infty} \exp(-n \varepsilon_0 / kT)}.$$

Mostre que:

$$\langle \varepsilon \rangle = \frac{\varepsilon_0}{\exp(\varepsilon_0/kT) - 1}.$$

2.11) A teoria clássica de Langevin para o paramagnetismo fornece a a polarização magnética o seguinte resultado:

$$P(\alpha) = A \left(\frac{\cosh \alpha}{\sinh \alpha} - \frac{1}{\alpha} \right),$$

onde A é uma constante. Expanda $P(\alpha)$ em série de potências para $\alpha \ll 1$ (baixo campo e alta temperatura).

2.12) a) Mostre que a expansão de Taylor da função erro é a Eq. 2.14. b) Quantos termos são necessários para se obter $\text{erf}(0.1)$, $\text{erf}(1)$ e $\text{erf}(2)$? Use computação simbólica ou escreva um código computacional que resolva numericamente.

2.13) A área de um polígono regular de N lados pode ser calculado considerando o polígono como uma soma de triângulos. Dado um sistema de coordenadas, esta área pode ser encontrada em função das coordenadas x, y de cada vértice através da Fórmula do Cadarso⁵:

$$A(N) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N (x_i y_{i+1} - x_{i+1} y_i),$$

onde x_i, y_i são as coordenadas do i -ésimo ponto. É necessário que os pontos sejam ordenados: x_0, y_0 é o primeiro, x_1, y_1 o segundo, etc... a) Faça um pseudo-algoritmo que calcule numericamente a estimativa $\pi_e(N)$ para um polígono de N lados (veja Eq. 2.7), usando o método do código 2.1 e a Fórmula do Cadarso. b) A partir desse algoritmo, desenvolva uma

⁵Ou fórmula da área de Gauss, pois foi desenvolvida de maneira independente por Meister em 1769 e por Gauss (sempre ele) em 1795. Veja por exemplo https://en.wikipedia.org/wiki/Shoelace_formula.

implementação em Python que faça o cálculo e gere os gráficos como das figuras 2.1(a) e 2.1(b).

2.14) ★★ Mostre que:

$$\int_0^\infty \frac{\sinh(\pi x)}{\sinh(3\pi x)} e^{-3\pi x^2} dx = \frac{1}{\sqrt{3}e^{2\pi/3}} \sum_0^\infty \frac{\exp[-2n(n+1)\pi]}{(1+e^{-\pi})^2(1+e^{-3\pi})^2 \dots (1+e^{-(2n+1)\pi})^2}.$$

Dica: veja [1].

2.15) ★★ Mostre os seguintes resultados:

$$\begin{aligned} \text{a) } \int_0^1 x^x dx &= 1 - \frac{1}{2^2} + \frac{1}{3^3} - \frac{1}{4^4} + \frac{1}{5^5} - \dots = 0.78343\dots \\ \text{b) } \int_0^1 x^{x^2} dx &= 1 - \frac{1}{3^2} + \frac{1}{5^3} - \frac{1}{7^4} + \frac{1}{9^5} - \dots = 0.89648\dots \\ \text{c) } \int_0^1 x^{\sqrt{x}} dx &= 1 - \left(\frac{2}{3}\right)^2 + \left(\frac{2}{4}\right)^3 - \left(\frac{2}{5}\right)^4 + \left(\frac{2}{6}\right)^5 - \dots = 0.65858\dots \end{aligned} \quad (2.27)$$

A integral da Eq. 2.27 foi resolvida primeiramente pelo matemático suíço John Bernoulli em 1697. Ele ficou tão fascinado pelo resultado que o chamou de "series mirabili", ou série maravilhosa⁶.

2.16) Se você fizer um investimento com juros compostos de 5 % ao mês, você terá $(1.005)^n$ reais após n meses. Se você investir 30 reais no início de cada mês, quanto você terá ao final de 15 anos?

⁶Veja Ref. [1].

Números Complexos

Os números imaginários são uma viagem maravilhosa do espírito de Deus; eles são quase um anfíbio entre ser e não ser. Gottfried Wilhelm von Leibniz, 1702



ÚMEROS complexos são formados por um par de números reais de forma que o conjunto dos reais \mathbb{R} faz parte do conjunto dos complexos \mathbb{C} . Em geral, funções e séries reais podem ser generalizadas para complexas apenas trocando as variáveis reais por complexas. Números complexos são usados em física por exemplo na solução de equações diferenciais e também na descrição dos campos elétrico e magnético.

Números complexos é uma definição do mundo da matemática, sem nenhuma inspiração ou motivação do mundo real, como a matemática também o é. Porém números complexos encontraram grande aplicação na solução de diversos problemas físicos, como também o é a matemática como um todo. Sua definição é:

$$i = \sqrt{-1}.$$

Logo $i^2 = -1$. Esse conceito foi proposto pela primeira vez em 1545 pelo matemático italiano Gerolamo Cardano como tentativa de obter soluções de equações cúbicas¹.

Essa definição tem sentido? Existe algum número que a satisfaça? Os matemáticos não conhecem um número real tal que seu quadrado seja -1 . Mas isso não implica que esse número não exista. Talvez esse número não seja real, e por ele recebera uma classificação específica: número complexo. Assim, seja lá qual for esse número, o quadrado dele é -1 . E assim, mantendo a coerência e a lógica interna da matemática, esse número pode e é usado em vários campos da matemática e com grande aplicações na física na descrição de fenômenos da natureza. Isso quer dizer que a natureza é compatível com números complexos? Não sabemos.

¹Apesar de haver mencões já no século I pelo matemático grego Hero de Alexandria. De modo geral a teoria como um todo de números complexos utilizada hoje foi construída por contribuições de inúmeros grandes matemáticos ao longo de vários séculos.

3.1 Álgebra Complexa

A primeira e mais simples motivação para a definição dos números complexos é a solução de equações quadráticas.

Exemplo 3.1

Seja $y(x) = x^2 + x + 1$ para $x \in \mathbb{R}$ (x real). Encontre as soluções para $y(x) = 0$.

Usando a fórmula de Baskara e delta verifica-se que não há solução real. Porém, se usarmos a definição $i = \sqrt{-1}$ podemos encontrar soluções. De fato, verifica-se que $x_{\pm} = \frac{1}{2}(-1 \pm i\sqrt{3})$ é solução:

$$\left[\frac{1}{2} (-1 \pm i\sqrt{3}) \right]^2 + \frac{1}{2}(-1 \pm i\sqrt{3}) + 1 = \frac{1}{4}(1 - 3 \mp 2i\sqrt{3} - 2 \pm 2i\sqrt{3}) + 1 = 0.$$

Matematicamente o problema foi resolvido, porém ainda não temos um significado para o símbolo i .

Para formalizar mais a existência desses números complexos definimos o chamado plano complexo formado pelos eixos x e y (veja figura 3.1(a)). Assim cada número complexo será definido pelo par $z \equiv (x, y)$ onde x é chamado de parte real $\text{Re}(z)$ e y a parte imaginária $\text{Im}(z)$:

$$z \equiv (x, y) = x + iy, \quad x = \text{Re}(z), \quad y = \text{Im}(z).$$

Dessa forma, um número real é escrito como $(x, 0)$ a unidade imaginária é definida como $i \equiv (0, 1)$ ².

Um número complexo $z = (a, b)$ nada mais é então do que um ponto no plano complexo, tendo sua abscissa como a parte real e a ordenada como a parte imaginária. Toda a análise envolvendo números complexos é feita baseando nos pares ordenados. A soma por exemplo é:

$$z_1 + z_2 = (x_1, y_1) + (x_2, y_2) = (x_1 + x_2, y_1 + y_2) = z_1 + z_2.$$

Veja que x e y se comportam como coordenadas de um vetor z no plano complexo. A multiplicação fica:

$$z_1 z_2 = (x_1 + iy_1)(x_2 + iy_2) = x_1 x_2 - y_1 y_2 + i(x_1 y_2 + x_2 y_1),$$

lembrando que $i^2 = -1$.

Outra operação muito utilizada na física é o complexo conjugado z^* de um número complexo $z = (a + ib)$, definido como $z^* = a - ib$. Veja que tirar o complexo conjugado significa apenas trocar o sinal da parte imaginária. Dessa forma temos:

$$zz^* = (a + ib)(a - ib) = a^2 + b^2 = |z|^2, \tag{3.1}$$

²Em outras áreas, engenharia por exemplo, é comum usar j como sendo a unidade imaginária.

onde $|z|$ é chamado de módulo de z (em total analogia com vetores em duas dimensões).

Já a divisão de dois números complexos consiste em deixar o denominador real:

$$\frac{z_1}{z_2} = \frac{z_1 z_2^*}{z_2 z_2^*} = \frac{z_1 z_2^*}{|z_2|} \quad (3.2)$$

Por exemplo, se $z_1 = a_1 + ib_1$ e $z_2 = a_2 + ib_2$ a divisão de ambos será:

$$\frac{z_1}{z_2} = \frac{a_1 + ib_1}{a_2 + ib_2} = \frac{(a_1 + ib_1)(a_2 - ib_2)}{(a_2 + ib_2)(a_2 - ib_2)} = \frac{a_1 a_2 + b_1 b_2 + i(a_2 b_1 - a_1 b_2)}{a_2^2 + b_2^2}. \quad (3.3)$$

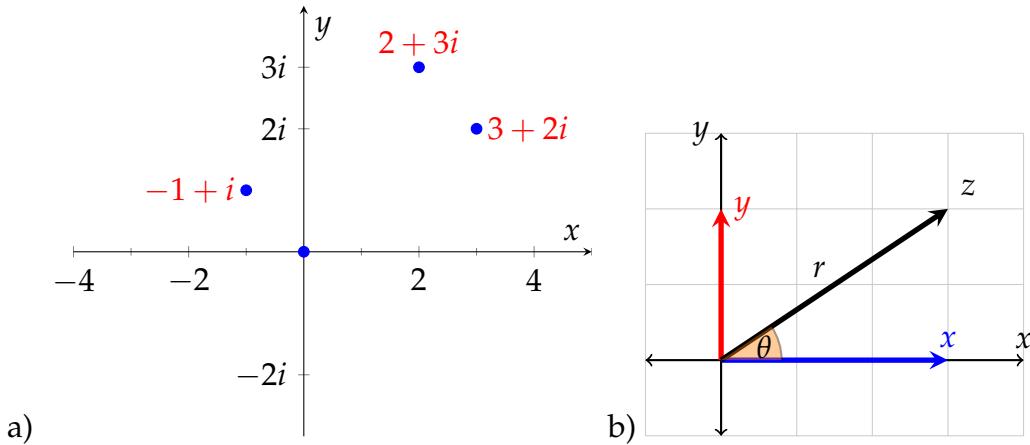


Figura 3.1: (a) Plano complexo com alguns pontos representados. (b) Representação polar de um número complexo.

3.1.1 Forma polar

Outra forma útil de escrever números complexos é usando coordenadas polares. Da figura 3.1(b) temos que:

$$x = r \cos \theta, \quad y = r \sin \theta, \quad z = r(\cos \theta + i \sin \theta). \quad (3.4)$$

Agora, r e θ são chamados de módulo e fase de z :

$$r = \sqrt{x^2 + y^2}, \quad \tan \theta = \frac{y}{x}.$$

Para obtermos uma relação útil, vamos expandir a exponencial complexa em uma série:

$$\begin{aligned} e^{i\theta} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(i\theta)^n}{n!} = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(i\theta)^{2m}}{(2m)!} + \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(i\theta)^{2m+1}}{(2m+1)!} = \sum_{m=0}^{\infty} (i)^m \frac{(\theta)^{2m}}{(2m)!} + i \sum_{m=0}^{\infty} (-1)^m \frac{(\theta)^{2m+1}}{(2m+1)!}, \\ &= \cos \theta + i \sin \theta. \end{aligned} \quad (3.5)$$

A Eq. 3.5 é a famosa relação de Euler, obtida pelo mesmo em 1748. A partir dela podemos representar um número complexo em coordenada polar (Eq. 3.4) como $z = re^{i\theta}$. A fórmula de Euler permite escrever as regras de adição de ângulos, por exemplo:

$$\cos(\theta_1 + \theta_2) + i \sin(\theta_1 + \theta_2) = \cos \theta_1 \cos \theta_2 - \sin \theta_1 \sin \theta_2 + i(\sin \theta_1 \cos \theta_2 + \sin \theta_2 \cos \theta_1). \quad (3.6)$$

Além disso se elevarmos a fórmula de Euler a potência n temos:

$$e^{in\theta} = (\cos \theta + i \sin \theta)^n = \cos n\theta + i \sin n\theta.$$

Essa é a chamada fórmula de De Moivre, obtida pelo mesmo em 1730 (antes da fórmula de Euler).

Rotação no plano complexo

Como os números complexos são vetores no plano complexo a multiplicação de um número complexo $z = a + ib$ por $i = e^{i\pi/2}$ corresponde a uma rotação anti-horária de 90 graus:

$$iz = i(a + ib) = -b + ia,$$

que representa um vetor com componentes $-b$ no eixo x e a no eixo y . No caso geral se z é multiplicado por $e^{i\alpha}$, z é rotacionado por um ângulo α no sentido anti-horário. Usando essa analogia com vetores, pode-se mostrar as seguintes propriedades:

$$|z_1| - |z_2| \leq |z_1 + z_2| \leq |z_1| + |z_2|, \quad |z_1 \cdot z_2| = |z_1| \cdot |z_2|. \quad (3.7)$$

3.2 Funções complexas

A escolha da representação cartesiana ou polar para os números complexos é uma questão de conveniência. Soma e subtração é mais simples usando cartesianas já multiplicação, divisão e radiciação são mais fáceis usando a representação polar. Por exemplo:

$$\sqrt[n]{z} = \sqrt[n]{re^{i\theta}} = \sqrt[n]{re^{i\theta+2im\pi}} = \sqrt[n]{r} \exp i\theta/n + 2im\pi/n, \quad m = 1, 2, 3, \dots, n-1,$$

já que, da fórmula de Euler (Eq. 3.5):

$$\exp(i\theta + 2im\pi) = e^{i\theta} \cos 2m\pi = e^{i\theta}. \quad (3.8)$$

Ou seja radiciação de um número complexo é uma função multivalorada (para cada z retorna mais de um resultado).

Outro exemplo de função complexa multivalorada é o logaritmo. Em princípio teríamos $\ln z = \ln re^{i\theta} = \ln r + i\theta$. Porém, usando novamente a Eq. 3.8 temos que:

$$\ln z = \ln r \exp i\theta + 2in\pi = \ln r + i(\theta + 2n\pi), \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (3.9)$$

Ou seja, $\ln z$ pode retornar infinitos valores para cada real r e θ . É comum usar como padrão $n = 0$ e θ em qualquer intervalo de comprimento 2π para que $\ln z$ retorne um valor apenas.

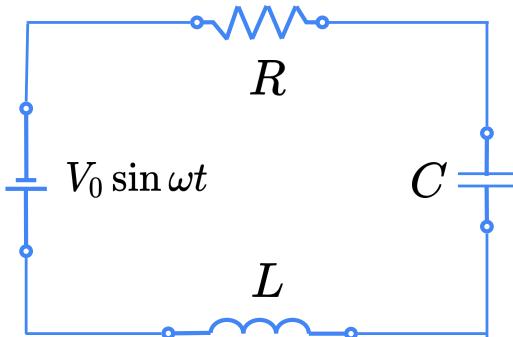


Figura 3.2: Circuito RLC.

Código 3.1

Série de números complexos tem diversas aplicações, como por exemplo em fractais. Por exemplo o conjunto de Mandelbrot que é o conjunto \mathbb{M} de números complexos $c \in \mathbb{C}$ tais que a série $z_{n+1} = z_n^2 + c$ não é divergente, usando $z_0 = 0$. Dizer que uma série não diverge não implica que ela converge, mas que o seu valor máximo é limitado. Assim, o conjunto \mathbb{M} de Mandelbrot é pode ser definido como:

$$c \in \mathbb{M} \iff \lim_{n \rightarrow +\infty} |z_{n+1}| \leq L. \quad (3.10)$$

É comum usar $L = 2$. Para $c = 1$ a série z_n diverge. Mas para $c = -1$ a série é convergente logo $-1 \in \mathbb{M}$.

Uma maneira de fazer uma figura mostrando o conjunto \mathbb{M} é definir um domínio no plano complexo e então calcular o n -ésimo termo z_n para todos os valores de c neste domínio. Quando $|z_n| < 2$, colore-se o ponto c de vermelho, caso contrário de branco, como está na figura 3.3(a). Veja que a função limite retorna 1 se $|z_{100}| < L = 2$ e 0 caso contrário. São calculados no total 10^6 valores de c (1000 valores para sua parte real guardadas no vetor x e 1000 para a parte imaginária no vetor y).

Exemplo 3.2

Um circuito RLC alternado é constituído por um resistor R , um capacitor C e um indutor L como indicado na figura 3.2. Além disso há um gerador de tensão alternada $V(t) = V_0 \sin \omega t$ com frequência angular ω . Qual a equação diferencial que representa o comportamento da corrente neste circuito?

Circuitos elétricos é uma das áreas onde uma descrição utilizando funções complexas são amplamente utilizadas. Para se chegar na equação diferencial deste circuito para a corrente elétrica $I(t)$ utilizamos a lei das malhas de Kirchoff e a Lei de Ohm. A queda de tensão em um resistor é $I(t)R$, em um indutor é $LdI(t)/dt$ e em um capacitor é $Q(t)/C$. Somando as tensões na malha teremos:

$$L \frac{dI}{dt} + \frac{Q}{C} + IR = V_0 \sin \omega t. \quad (3.11)$$

Para se resolver essa equações (e de circuitos relacionados) é mais conveniente considerar a tensão complexa $V(t) = V_0 e^{i\omega t}$ e uma corrente $I(t) = I_0 e^{i\omega t}$ da mesma forma, que é uma solução da Eq. 3.11. No final, as grandezas físicas observáveis serão a parte

real dessas soluções. Considerando a corrente complexa $I(t)$ temos que $dI/dt = i\omega I$ e $Q = I/i\omega$. Substituindo essas expressões na equação diferencial teremos:

$$i\omega LI + \frac{I}{i\omega C} + RI = ZI,$$

onde $Z = Ri(\omega L - 1/\omega C)$ é a impedância complexa tal que $V = ZI$. A equação 3.11 será resolvida em detalhes no exemplo 7.

Um pouco de história.

A matemática de fractais começou possivelmente no século XVII com o matemático e filósofo Gottfried Leibniz (o mesmo do cálculo), quando ele considerou o conceito de similaridade recursiva, usando o termo expoentes fractais. Apenas em 1872 Karl Weierstrass apresentou à Royal Prussian Academy of Sciences uma função que hoje é considerada como fractal tendo a propriedade não intuitiva de ser contínua em todo o espaço mas não diferenciável. Em 1883, Georg Cantor, que assistiu as palestras de Leibniz apresentou o fractal que hoje é conhecido como conjunto de Cantor. Todos os tratamentos até então eram analíticos e apenas em 1904 os primeiros desenhos (feitos a mão) foram apresentados, relativo ao fractal conhecido como floco de neve. Em 1915 foi apresentado o triângulo de Sierpinski, em 1918 o fractal de Julia (por Pierre Fatou e Gaston Julia de maneira independente, veja a figura 3.3(b)).

O estudo de fractais deu um grande salto com Benoit Mandelbrot, que criou o fractal que leva seu nome (veja figuras 3.3(a) e ??) após seus estudos tentando encontrar o comprimento da costa da Grã-Bretanha. Em 1975 apresentou os primeiros gráficos gerados em computador de um fractal, cunhando também o termo fractal. O fractal de Mandelbrot foi artigo de capa da Scientific American em agosto de 1985 e apresentou ao público geral um algoritmo para criá-lo.

Problemas

3.1) a) Deduza a expressão da Eq. 3.3. b) Deduza a equação 3.6. c) Deduza os resultados das equações 3.7. d) Mostre que $\arg(z_1 z_2) = \arg(z_1) + \arg(z_2)$, onde $\arg(z) =$ a fase de z .

3.2) Calcule $\operatorname{Re}\left(\frac{1}{x \pm iy}\right)$ e $\operatorname{Im}\left(\frac{1}{x \pm iy}\right)$.

3.3) a) Deduza a fórmula de De Moivre: $\cos n\theta + i \sin n\theta = (\cos \theta + i \sin \theta)^n$. b) Calcule $(1+i)^{20}$.

3.4) Para $z = x + iy$, prove que: a) $|\sin z| \geq |\sin x|$ e b) $|\cos z| \geq |\cos x|$.

3.5) Mostre que: a) $\sin^{-1} z = -i \ln(iz \pm \sqrt{1-z^2})$, b) $\cos^{-1} z = -i \ln(z \pm \sqrt{z^2-1})$ e c)

$$\tan^{-1} z = \frac{i}{2} \ln \left(\frac{i+z}{i-z} \right).$$

3.6) Mostre que: a) $\sinh^{-1} z = \ln \left(z + \sqrt{z^2 + 1} \right)$, b) $\cosh^{-1} z = \ln \left(z + \sqrt{z^2 - 1} \right)$ e c) $\tanh^{-1} z = \frac{1}{2} \ln \left(\frac{1+z}{1-z} \right)$.

3.7) Mostre que $\ln(-1) = i\pi$.

3.8) ■★ O fractal apresentado na figura 3.3(a) é do tipo Mandelbrot, definido pela Eq. 3.10. Existem vários outros tipos definidos por outros critérios, como por exemplo os fractais do tipo Julia. Considere uma sequência definida por $z_{n+1} = f(z_n) + c$ onde c é um número complexo e o primeiro elemento da série é $z_0 = x + iy$. Para cada x e y (ou seja, para cada z_0 dentro de uma certa região) calculamos quantas iterações κ na série são necessárias de modo que $|z_\kappa| > L$, para algum certo limite L . Dessa forma definimos a função:

$$\Gamma(x, y, c, f) = \kappa \quad \text{tal que} \quad |z_\kappa| > L.$$

Definindo um valor c e uma região de variação para z_0 construimos a função $\Gamma(x, y, c, f)$ na mesma região. O gráfico de tal função é um fractal³, como o da figura 3.3(b). Diferentes valores de c e expressões para $f(z)$ geram diferentes fractais⁴. Construa um código que cria uma imagem de fractal do tipo Julia. Use os parâmetros da figura 3.3(b).

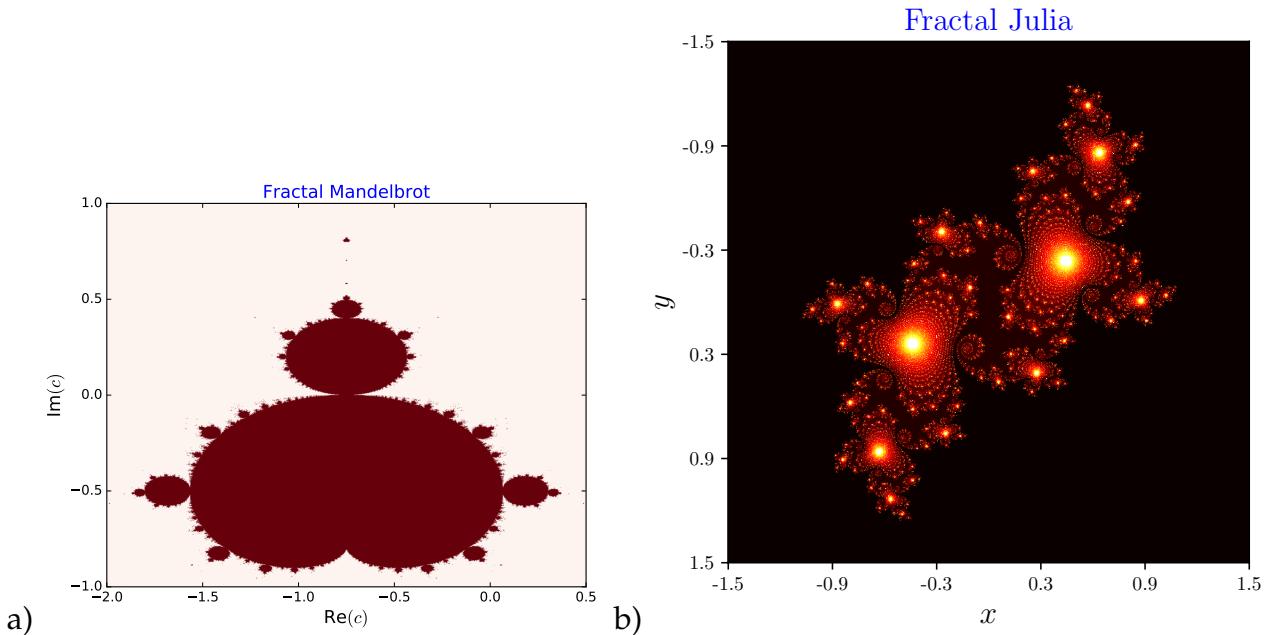


Figura 3.3: (a) Fractal de Mandelbrot. (b) Fractal do tipo Julia referente ao Problema 3.8. Parâmetros utilizados: $f(z) = z^2$, $c = -1 + 0,65i$, $\Xi = 2000$, $-1,5 < x, y < 1,5$ e $L = 10$.

3.9) ★★★ Mostre que a quantidade de números primos menores que um valor limite pode ser obtida através dos zeros da função zeta de Riemann $\zeta(s)$. Esse problema não dá um

³Para evitar loop infinito, coloca-se um critério de segurança impondo $\kappa < \Xi$ para um certo Ξ .

⁴Uma linda animação variando o valor de c está no Wikipedia: <https://en.wikipedia.org/wiki/File:JSr07885.gif>.

milhão de dólares como prêmio. Mas se você resolvê-lo, pode ter certeza de que ficará muito famoso e terá vários convites para apresentar seminários em conferências internacionais.

3.10) ★★★ Problema de 1 milhão de dólares. A função zeta de Riemann $\zeta(s)$ é definida pela Eq. 2.4 para $\operatorname{Re}(s) > 1$ no plano complexo. No resto do plano sua definição é por continuação analítica. Os chamados zeros triviais desta função são inteiros pares negativos: da forma $\zeta(-2n) = 0$ para n inteiro positivo⁵. Em seu artigo de 1859 Riemann introduz a função:

$$\xi(t) = \frac{1}{2} \frac{s(s-1)}{\sqrt[s]{\pi}} \Gamma(s/2) \zeta(s).$$

Há outros zeros de $\zeta(s)$ que não são inteiros pares negativos e são chamados de zeros não triviais: $\zeta(z_n) = 0$. Mostre que os zeros não triviais z_n podem ser escritos como:

$$z_n = \frac{1}{2} + i\alpha_n, \quad (3.12)$$

onde $\xi(\alpha_n) = 0$ (veja figuras 3.4(a) e 3.4(b)). Os primeiros 10^{13} termos da série z_n (ou seja, os primeiros $10^{13} \alpha_n$) já foram verificados numericamente e seguem a Eq. 3.12. Porém, uma prova rigorosa de que todos os zeros seguem essa relação ainda não foi feita. O Instituto Clay de Matemática dá o prêmio de um milhão de dólares para quem resolver esse problema⁶.

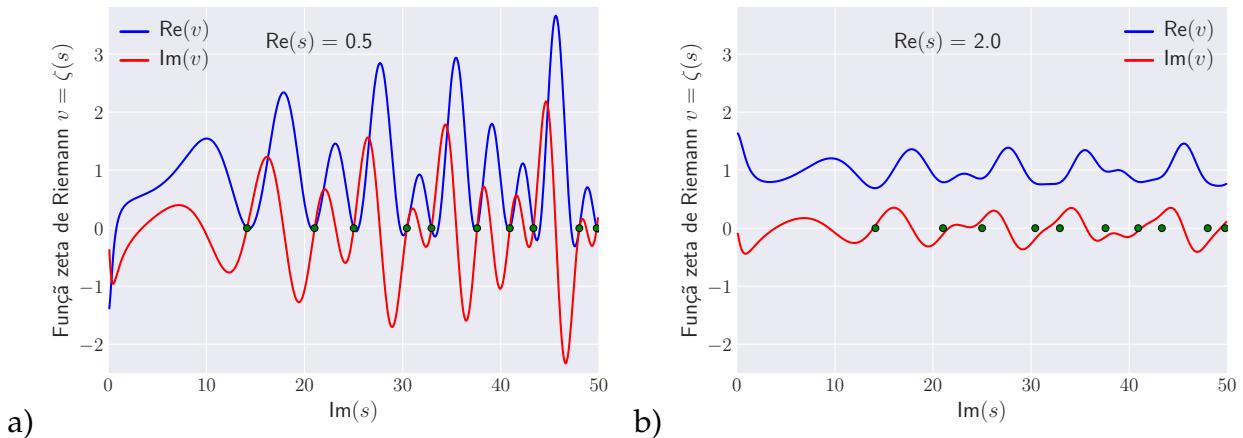


Figura 3.4: Gráfico das partes real e imaginária de $v = \zeta(s)$: quando $s = z_n$ tem-se que $v = \operatorname{Re}(v) = \operatorname{Im}(v) = 0$. (a) Gráfico com $\operatorname{Re}(s) = 1/2$ onde tem-se $v = 0$. Repare que as curvas de $\operatorname{Re}(v)$ (em azul) e $\operatorname{Im}(v)$ (em vermelho) se cruzam nos círculos verdes, que indicam os valores de α_n até $n = 10$. (b) Gráfico com $\operatorname{Re}(s) = 2.0$ (fora do zero) onde $\operatorname{Re}(v)$ e $\operatorname{Im}(v)$ são ambos diferentes de zero.

3.11) ★★★ Mostre que a quantidade de números primos menores que um valor limite pode ser obtida através dos zeros da função zeta de Riemann $\zeta(s)$. Esse problema não dá um milhão de dólares como prêmio. Mas se você resolvê-lo, pode ter certeza de que ficará muito famoso e terá vários convites para apresentar seminários em conferências internacionais.

⁵Um vídeo incrível recheado de animações sensacionais explicando o significado $\zeta(s)$ foi feito pelo matemático Grant Sanderson está no link: <https://www.youtube.com/watch?v=sDONjbwqlYw>.

⁶<http://www.claymath.org/millennium-problems/riemann-hypothesis>.

3.3 Condições de Cauchy-Riemann

A derivada e integral de funções complexas requerem alguns detalhes a mais do que nas funções reais. Por exemplo a definição de derivada de uma função real $g(x)$ é:

$$\frac{dg}{dx} = \lim_{\delta x \rightarrow 0} \frac{g(x + \delta x) - g(x)}{\delta x}.$$

Para a derivada ser definida em um ponto arbitrário x_0 é necessário que esse limite seja independente do caminho para o ponto x . Neste caso há dois caminhos diferentes: $x \rightarrow x_0$ por cima (ou seja, com valores $x > x_0$) e $x \rightarrow x_0$ por baixo ($x < x_0$). O mesmo raciocínio deve ser aplicado em funções complexas.

Dado uma função complexa $f(z) = u(x, y) + iv(x, y)$ sua derivada é definida por:

$$\frac{df}{dz} = f'(z) = \lim_{\delta z \rightarrow 0} \frac{f(z + \delta z) - f(z)}{\delta z} = \lim_{\delta z \rightarrow 0} \frac{\delta f(z)}{\delta z}.$$

Da mesma forma esse limite deve ser independente do caminho para o ponto z . O problema é que agora há vários caminhos possíveis. Sejam δx e δy os incrementos das variáveis x e y . Logo $\delta z = \delta x + i\delta y$. Da mesma forma $\delta f = \delta u + i\delta v$ tal que:

$$\frac{\delta f}{\delta z} = \frac{\delta u + i\delta v}{\delta x + i\delta y}. \quad (3.13)$$

De imediato, dois caminhos possíveis são quando $\delta x = 0$ ou $\delta y = 0$ alternadamente. Consideremos primeiro $\delta y = 0$. Logo da Eq. 3.13 a derivada fica:

$$\lim_{\delta z \rightarrow 0} \frac{\delta f}{\delta z} = \lim_{\delta x \rightarrow 0} \left(\frac{\delta u}{\delta x} + i \frac{\delta v}{\delta x} \right) = \frac{\partial u}{\partial x} + i \frac{\partial v}{\partial x}, \quad (3.14)$$

assumindo que as derivadas existam. Da mesma forma se assumirmos $\delta x = 0$ e fazendo $\delta y \rightarrow 0$ teremos:

$$\lim_{\delta z \rightarrow 0} \frac{\delta f}{\delta z} = \lim_{\delta y \rightarrow 0} \left(-i \frac{\delta u}{\delta y} + \frac{\delta v}{\delta y} \right) = \frac{\partial v}{\partial y} - i \frac{\partial u}{\partial y}. \quad (3.15)$$

Para que a derivada df/dz seja definida é necessário que as Eqs. ?? e 3.15 sejam zero, logo:

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial v}{\partial y}, \quad \frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{\partial v}{\partial x}.$$

Essas são as famosas condições de Cauchy-Riemann. Elas foram primeiramente propostas por Cauchy e usadas intensamente por Riemann em sua teoria de funções analíticas.

Se a derivada df/dz existe as condições de Cauchy-Riemann são válidas. E a volta também é verdadeira: se as condições são satisfeitas e as derivadas parciais de $u(x, y)$ e $v(x, y)$ são contínuas a derivada df/dz existe.

3.3.1 Derivadas de funções elementares

Equações Diferenciais Ordinárias



ODA grande área da física tem uma equação diferencial central. Por exemplo, as equações de 4.1 até 4.3 referem-se a Lei de Newton para a Mecânica, Lei de Ampere-Maxwell e equação de Schrodinger na Mecânica Quântica.

$$\vec{F}(t) = m \frac{d^2}{dt^2} \vec{r}(t) \quad (4.1)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{B}(\vec{r}, t) = \mu_0 \vec{J}(\vec{r}, t) + \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \vec{E}(\vec{r}, t) \quad (4.2)$$

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\vec{r}, t) \right] \Psi(\vec{r}, t) \quad (4.3)$$

Cada equação tem suas particularidades e admitem uma certa classe de funções. Várias estratégias já foram desenvolvidas para a solução analítica delas. Porém algumas delas não tem soluções analíticas em casos mais complicados, sendo impossíveis de serem resolvidas analiticamente. Em geral, apenas em casos simples e idealizados encontramos soluções analíticas.

4.1 Classificações

Vamos classificar as equações diferenciais (EDs) quanto a algumas características importantes, considerando y como sendo a variável dependente:

- A maior derivada define a ordem da ED.
- A existência de um termo independente de y caracteriza a equação como não homogênea.
- Se a função y depende de apenas uma variável x , a ED é ordinária.
- Se y depende de duas variáveis x e t , a ED é parcial.

Por exemplo:

- ED linear, primeira ordem, ordinária e homogênea: $\frac{dy}{dx} + y = 0$.
- ED não linear, segunda ordem, ordinária e inhomogêna: $\frac{d^2y}{dx^2} + y^2 = \sin x$.
- ED linear, segunda ordem, parcial e inhomogênea: $\frac{d^2y}{dt^2} + \frac{d^2y}{dx^2} = f(x, t)$.

Neste capítulo iremos tratar de equações diferenciais ordinárias (abreviadas por EDO), ou seja, que dependem apenas de uma variável independente (em geral x ou o tempo t). Problemas envolvendo equações diferenciais parciais serão resolvidas no capítulo 8. Tipicamente uma EDO de primeira ordem é escrita da forma:

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y). \quad (4.4)$$

Mesmo se $f(x, y)$ for uma função complicada, a equação anterior continua sendo de primeira ordem, mas podendo ser não linear. Já uma EDO de segunda ordem é do tipo:

$$\frac{d^2y}{dx^2} + \lambda \frac{dy}{dx} = f(x, y, \frac{dy}{dx}).$$

Utilizamos também a notação $y' = dy/dx$ e $y'' = dy'/dx = dy^2/dx^2$ para simbolizar as derivadas primeira e segunda. Quando a variável independente é o tempo t é comum utilizar um ponto para a derivada: $\dot{y} = dy/dt$ e $\ddot{y} = d\dot{y}/dt = dy^2/dt^2$.

4.1.1 Solução geral e particular

Cada EDO tem uma solução geral, ou seja, todas as soluções possíveis estão em um conjunto de funções que chamamos de solução geral. Qualquer elemento desse conjunto é uma solução particular. Como será mostrado a seguir uma EDO de ordem 1 possui como solução geral (conjunto de todas as funções possíveis) uma função e uma constante arbitrária. Já uma EDO de ordem dois possui como solução geral uma soma de duas funções LI e duas constantes arbitrárias. As constantes são fruto das integrações e devem ser encontradas no final utilizando as condições iniciais ou de contorno do problema.

Assim a solução física de uma equação diferencial envolve duas etapas: 1) encontrar a solução geral e 2) encontrar o valor das constantes arbitrárias utilizando as condições iniciais (ou de contorno)¹. Para uma EDO de ordem n é necessários n equações resultantes das condições iniciais para se encontrar as n constantes. Por exemplo para uma EDO de ordem 1 basta o valor da função em qualquer posição (ou instante). Já uma EDO de ordem 2 é necessário o valor da função e de sua derivada por exemplo.

¹Matematicamente, dependendo do problema, pode ser necessário encontrar apenas a solução geral.

4.1.2 Princípio da superposição

Seja uma equação diferencial ordinária linear e homogênea de ordem n :

$$y^{(n)}(t) + a_{n-1}y^{(n-1)}(t) + \dots + a_1(t)y'(t) + a_0(t)y(t) = 0.$$

Veja a notação para a n -ésima derivada: $y^{(n)} = d^n y / dt^n$. O princípio da superposição diz que se y_1 e y_2 são soluções dessa EDO então qualquer combinação linear $\alpha y_1 + \beta y_2$ também será uma solução, onde α e β são constantes complexas arbitrárias. A prova disso é facilmente obtida por substituição direta. Isso é uma consequência direta da EDO ser linear e homogênea, e vale mesmo em se tratando de uma equação diferencial parcial. Uma consequência disso é que o conjunto de soluções de uma EDO linear e homogênea forma um espaço vetorial, um conceito matemático que aparece bastante em mecânica quântica.

Este princípio da superposição ocorre muito frequente em física. Por exemplo as bases fundamentais da eletrostática são a Lei de Coulomb e o princípio da superposição. A primeira aplicação deste princípio em física foi feita pelo famoso físico alemão Hermann Ludwig Ferdinand von Helmholtz (1821-1894) que o utilizou na solução de equações diferenciais ordinárias e parciais sobre acústica.

E se a equação diferencial não for homogênea, continua valendo o princípio da superposição? Seja:

$$y^{(n)}(t) + a_{n-1}y^{(n-1)}(t) + \dots + a_1(t)y'(t) + a_0(t)y(t) = f(t), \quad (4.5)$$

com também soluções conhecidas y_1 e y_2 . Agora há um termo não homogêneo: $f(t)$. Também por substituição direta mostra-se que $\alpha y_1 + (1 - \alpha)y_2$ também é solução, ou seja, não há mais duas constantes arbitrárias. Assim as soluções dessa equação diferencial não homogênea não formam um espaço vetorial.

4.1.3 Homogênea não homogênea

A solução geral de uma EDO não homogênea é a solução geral da homogênea associada somada com uma solução particular da não homogênea. Isso vale para EDOs em geral de qualquer ordem. Por exemplo, consideremos a EDO não homogênea de ordem 1:

$$\frac{dy}{dx} + Py = Q, \quad (4.6)$$

onde P e Q são constantes e $Q \neq 0$. A solução geral é:

$$y(x) = y_h(x) + y_p(x), \quad (4.7)$$

onde $y_h(x)$ é a solução geral da homogênea e $y_p(x)$ é uma solução particular da não homogênea. Ou seja:

$$\frac{dy_h}{dx} + Py_h = 0, \quad \frac{dy_p}{dx} + Py_p = Q.$$

A solução mais simples da não homogênea é fazer as derivadas iguais a zero: $dy_p/dx = 0$, de forma que y_p é constante logo $y_p = Q/P$. Em um problema físico quando a variável independente x é o tempo, fazer a derivada igual a zero representa o comportamento do sistema em $t \rightarrow \infty$, ou seja, quando o sistema chegou no estado estacionário. Agora resta encontrar a solução geral da homogênea y_h e teremos a solução geral da não homogênea conforme a Eq. 4.7. Essa propriedade também pode ser provada por substituição direta no caso geral da Eq. 4.5.

4.2 EDO de ordem 1

4.2.1 Separação de variáveis

Toda vez que você faz uma integração $y = \int f(x)dx$, você está na verdade resolvendo uma equação diferencial: $y' = dy/dx = f(x)$. Isto é uma exemplo de equação diferencial na qual se pode colocar toda a dependência em y de um lado e toda em x do outro: $dy = f(x)dx$. Isso é a separação de variáveis e pode ser resolvida com uma integração.

De maneira geral após uma separação de variáveis teremos: $Q(y)dy = P(x)dx$. Neste caso basta integrar para encontrarmos a solução:

$$\int_{y_0}^y P(Y)dY = \int_{x_0}^x Q(X)dX.$$

Utilizamos como variável de integração a letra em maiúscula para diferenciar dos limites de integração. Esta técnica pode ser aplicada inclusive para equação não linear.

Exemplo 4.1

Decaimento radioativo. Trata-se da reação nuclear de um átomo instável no qual o núcleo se divide formando outros elementos químicos. Essa reação faz com que o número de átomos $N(t)$ do elemento químico inicial diminua com uma taxa que é proporcional ao número de átomos no momento:

$$\frac{dN}{dt} = -\lambda N.$$

Encontre a solução para $N(t)$ sabendo que no instante inicial ($t = 0$ por exemplo) havia 10^3 átomos.

Este é um exemplo de equação separável $dN/N = -\lambda dt$. Integrando dos dois lados temos $\ln N = -\lambda t + \ln N_0$, onde $N_0 = N(0)$ é uma constante arbitrária que será definida pela condição inicial. Usando a propriedade de logaritmos $e^{\ln a} = a$ temos que:

$$e^{\ln N} = N(t), \quad \exp(-\lambda t + \ln N_0) = e^{-\lambda t} e^{\ln N_0} = N_0 e^{-\lambda t}.$$

Logo:

$$N(t) = N_0 e^{-\lambda t}.$$

Essa é a solução geral. Vamos agora aplicar a condição inicial para encontrar a constante N_0 e definir a solução particular. Em $t = 0$ temos $N(0) = N_0 e^0 = 10^3$. Assim a solução particular é $N(t) = 10^3 e^{-\lambda t}$.

Exemplo 4.2

Paraquedista. Em agosto de 1957 David Simons foi o primeiro homem a subir mais alto que o azul do céu. Piloto da Força Aérea norte americana na época ele pilotou sozinho um balão até a altitude de 30 km onde viu o céu preto ao invés de azul pois a atmosfera nesta altitude já é muito rarefeita para espalhar o azul. Suponha quem um paraquedista salte desta altitude. Calcule sua velocidade limite. Considere a resistência do ar como sendo uma força proporcional a velocidade ao quadrado.

Escolhemos um eixo vertical direcionado para baixo. A condição inicial é $v(t = 0) = 0$ no instante em que o paraquedas é aberto. Aplicando a Lei de Newton ao paraquedista teremos:

$$m \frac{dv}{dt} = mg - bv^2. \quad (4.8)$$

A velocidade terminal é $v_t = v(t = \infty)$. Uma estimativa simples de v_t pode ser obtida com a solução particular dessa EDO não homogênea fazendo $dv/dt = 0$, logo: $v_t = \sqrt{mg/b}$. Já para resolver a equação diferencial veja que a Eq. 4.8 é não linear mas permite separação de variáveis:

$$\frac{dv}{g - \frac{b}{m}v^2} = dt.$$

Para fazermos a integral reescrevendo o lado esquerdo como:

$$\left(g - \frac{b}{m}v^2\right)^{-1} dv = \frac{m}{2v_t b} \left(\frac{1}{v + v_t} - \frac{1}{v - v_t}\right) dv.$$

Agora está mais fácil integrar:

$$\int^v \frac{dV}{g - \frac{b}{m}V^2} = \frac{1}{2} T \ln \frac{v_t + v}{v_t - v} = t,$$

onde $T = \sqrt{\frac{m}{gb}}$. Não especificamos um limite inferior na integração (que serviria para definir a constante arbitrária) pois a constante será adicionada posteriormente. Resolvendo para a velocidade teremos:

$$v(t) = v_t \frac{e^{2t/T} - 1}{e^{2t/T} + 1} = v_t \frac{\sinh t/T}{\cosh t/T} = v_t \tanh \frac{t}{T}.$$

De fato, se derivarmos essa expressão obteremos a Lei de Newton (Eq. 4.8):

$$\frac{dv}{dt} = \frac{v_t}{T} \frac{\cosh t/T}{\cosh^2 t/T} - \frac{v_t}{T} \frac{\sinh^2 t/T}{\cosh^2 t/T} = \frac{v_t}{T} - \frac{v^2}{Tv_t} = g - \frac{b}{m}v^2.$$

4.2.2 EDO de ordem 1 homogênea

Seja a seguinte EDO homogênea:

$$\frac{dy}{dx} + Q(x)y = 0. \quad (4.9)$$

Suponha que tenhamos duas soluções da mesma: y_1 e y_2 . Logo:

$$y'_1 + Q(x)y_1 = 0 = y'_2 + Q(x)y_2, \quad \therefore \quad y'_1 - y'_2 + Q(x)(y_1 - y_2) = 0.$$

Logo $y_1 - y_2$ também é solução.

Um segundo resultado importante é:

- **Teorema 1:** A solução geral de uma EDO de ordem 1 possui apenas uma função LI.

LI significa linearmente independente. Duas funções y_1 e y_2 são LI quando a única solução da equação:

$$ay_1 + by_2 = 0$$

é $a = b = 0$. O conceito de LI ou LD (linearmente dependente) é análogo ao conceito de paralelismo e perpendicularidade entre vetores. Dois vetores \mathbf{C}_1 e \mathbf{C}_2 são perpendiculares quando a única solução da equação:

$$a\mathbf{C}_1 + b\mathbf{C}_2 = 0 \quad (4.10)$$

é $a = b = 0$. Se os vetores são paralelos podemos fazer $\mathbf{C}_1 = \alpha\mathbf{C}_2$ na Eq. 4.10 para obtermos $\alpha = -b/a$. Ou seja, obtemos uma solução onde a e b não precisam ser zeros. Quando duas funções são LD é como se fossem dois vetores paralelos, ou seja, uma função pode ser múltipla da outra.

Vamos agora provar o teorema 1. Suponha que y_1 e y_2 são soluções da EDO homogênea de ordem 1 (Eq. 4.9 por exemplo). Logo:

$$\frac{y'_1}{y_1} = -p(x) = \frac{y'_2}{y_2}.$$

O que implica:

$$W(y_1, y_2) = y'_1 y_2 - y_1 y'_2 = 0. \quad (4.11)$$

A grandeza $W(y_1, y_2)$ é chamada de wronskiano e é definida pela própria Eq. 4.11. Assim, se o wronskiano de duas funções é zero é porque as duas funções são LD. Se for diferente de zero as duas funções são LI².

²Esse conceito é expansível para mais funções: 3 funções são LI se o wronskiano delas for zero. O mesmo vale para mais funções.

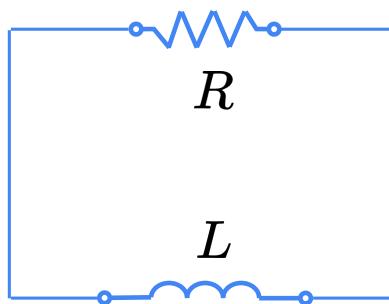


Figura 4.1: Ilustração de um circuito alterando contendo um resistor R e um indutor L. Figura referente ao exemplo 4.3.

4.2.3 Exponencial como solução tentativa

De modo geral não há regras determinadas para se encontrar a solução de uma equação diferencial. Em muitos casos o único método é o velho e bom "tentativa e erro". Para um tipo específico (e simples) de EDO uma forma de se encontrar a solução é supor uma solução do tipo exponencial: $y(t) = e^{pt}$ com p constante. Por exemplo suponha a seguinte EDO:

$$\frac{dy}{dt} + Qy = 0, \quad (4.12)$$

onde Q é uma constante. Supondo uma solução tentativa exponencial temos que a derivada é $y'(t) = pe^{pt} = py(t)$. Substituindo a solução e sua derivada na EDO anterior teremos:

$$py + Qy = 0, \quad \therefore \quad p = -Q,$$

já que buscamos uma solução não nula $y(t) \neq 0$. Assim a solução fica:

$$y(t) = Ae^{-Qt},$$

onde A é uma constante arbitrária.

Exemplo 4.3

Círcuito RL. Neste exemplo iremos resolver o circuito RL ilustrado na figura 4.1. Aplicando a Lei das Malhas teremos:

$$L\frac{dI}{dt} + RI = V_0 \quad (4.13)$$

Queremos encontrar a variação temporal da corrente $I(t)$. A indutância é L e a resistência R .

A solução geral é:

$$I_g(t) = I_h(t) + I_p(t).$$

onde I_h é a solução geral da homogênea e I_p é a solução particular da não homogênea. I_p é fácil achar pois basta qualquer solução particular. Podemos então considerar a solução particular que é constante no tempo, de modo que $dI_p/dt = 0$. Logo, da Eq. 4.13 temos: $I_p = V_0/R$. A eq. homogênea é:

$$L\frac{dI_h}{dt} + RI_h = 0,$$

que é da mesma forma da Eq. 4.12 com $Q = R/L$. Supondo também uma solução exponencial $y = e^{pt}$ como tentativa encontramos $p = -Q = R/L$. Logo a solução total fica:

$$I_g(t) = \frac{V_0}{R} + C \exp\left(-\frac{Rt}{L}\right).$$

A constante inicial é encontrada usando o valor inicial da corrente $I_g(0) = 0$, o que retorna $C = -V_0/R$. Logo:

$$I_g(t) = \frac{V_0}{R} \left[1 - \exp\left(-\frac{Rt}{L}\right) \right].$$

4.2.4 EDO exata

Começamos com uma EDO da forma da Eq. 4.4 que podemos reescrever como:

$$\frac{dy}{dx} = -\frac{P(x,y)}{Q(x,y)}. \quad (4.14)$$

Logo:

$$P(x,y)dx + Q(x,y)dt = 0. \quad (4.15)$$

Esta equação é exata se existir uma função ϕ tal que:

$$P(x,y)dx + Q(x,y)dt = \frac{\partial \phi}{\partial x}dx + \frac{\partial \phi}{\partial y}dy = d\phi. \quad (4.16)$$

Como o primeiro termo dessa equação é zero temos que $d\phi = 0$, ou seja, a solução desejada é $\phi(x,y) = \text{constante}$.

A vantagem de uma EDO exata é que ela é mais facilmente resolvível, especialmente se for linear. Por exemplo nos exemplos 4.1 e 4.2 resolvemos exemplos de EDO exata. Por isso há o interesse em 1) verificar se uma EDO é exata e 2) de tornar uma EDO inicialmente não exata em exata.

Igualando os coeficientes na Eq. 4.16:

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} = P(x,y), \quad \frac{\partial \phi}{\partial y} = Q(x,y).$$

A condição necessária e suficiente para que isso seja válido é que as derivadas parciais mistas em $\phi(x,y)$ sejam independente da ordem de diferenciação:

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial y \partial x} = \frac{\partial P}{\partial y} = \frac{\partial Q}{\partial x} = \frac{\partial^2 \phi}{\partial x \partial y}. \quad (4.17)$$

Se tal função $\phi(x,y)$ existe a solução de nossa EDO (Eq. 4.14) é $\phi(x,y) = C$, onde C é a constante arbitrária definida pela condição inicial. A construção dessa função ϕ é semelhante a obtenção do potencial vetor magnético a partir de seu rotacional.

Fator de integração

E o que acontece se a Eq. 4.14 não for exata? Ou seja, e se não existir uma função $\phi(x, y)$ tal que a Eq. 4.17 seja satisfeita? Logo a Eq. 4.15 não será válida também. Porém, sempre há uma ou mais de uma função $\alpha(x, y)$ que a torna exata, ou seja, tal que:

$$\alpha(x, y)P(x, y)dx + \alpha(x, y)Q(x, y)dt = 0. \quad (4.18)$$

Apesar de sempre haver tal função $\alpha(x, y)$ chamada de fator de integração, pode não ser fácil de encontrá-la.

4.2.5 Solução geral para EDO linear

No caso de EDO de ordem 1 linear, podemos encontrar $\alpha(x, y)$ de maneira geral e assim deixar a EDO exata, possibilitando obter sua solução geral. Supondo uma EDO linear, começamos reescrevendo a Eq. 4.14 como:

$$\frac{dy}{dx} + yp(x) = q(x). \quad (4.19)$$

Note que agora as funções p e q só dependem de x e é exatamente isso que nos permite afirmar que esta EDO é linear, já que podemos avaliar explicitamente os termos envolvendo y ³. Esta é a forma mais geral de uma EDO de ordem 1 linear. Veja que se o termo fonte $q(x)$ for zero teremos uma EDO homogênea. Esta EDO é linear pois é linear nos termos y e dy/dx ⁴. Já as funções $p(x)$ e $q(x)$ não precisam ser lineares.

O fator de integração para o nosso caso agora também irá depender apenas de x . Reescrevendo a Eq. 4.18 teremos:

$$\alpha(x)\frac{dy}{dx} + \alpha(x)yp(x) = \alpha(x)q(x). \quad (4.20)$$

A ideia é que essa função α nos permita escrever:

$$\frac{d}{dx} [\alpha(x)y] = \alpha(x)q(x), \quad (4.21)$$

de modo que a EDO da Eq. 4.19 seja exata. Sendo assim, poderemos encontrar $y(x)$ por integração direta, já que $\alpha(x)$ será conhecida. Vamos então encontrar $\alpha(x)$.

Abrindo a derivada do produto na Eq. 4.21:

$$\alpha(x)\frac{dy}{dx} + y\frac{d\alpha}{dx} = \alpha(x)q(x).$$

Comparando esse resultado com a Eq. 4.20:

$$\frac{d\alpha}{dx} = \alpha(x)p(x). \quad (4.22)$$

³No caso da Eq. 4.14 não podemos afirmar se é ou não linear já que $P(x, y)$ e $Q(x, y)$ não são especificados.

⁴Não há termos como y^2 ou ydy/dx .

Mas essa é exatamente uma EDO de ordem 1 separável para $\alpha(x)$, o tipo de equação que estamos tentando obter para o caso geral. Resolvendo a Eq. 4.22 obtemos o fator de integração:

$$\alpha(x) = \exp \left[\int^x p(X) dX \right].$$

O limite inferior de integração não foi definido pois ele apenas acrescenta uma constante arbitrária que agora é irrelevante, já que $\alpha(x)$ é parte da solução geral de $y(x)$ que estamos buscando.

Com $\alpha(x)$ conhecido podemos montar a EDO original na forma desejada (da Eq. 4.21):

$$\int^x \frac{d}{dX} [\alpha(X)y(X)] dX = \int^x \alpha(X)q(X)dX.$$

Integrando:

$$\alpha(x)y(x) = \int^x \alpha(X)q(X)dX + C.$$

Isolando y :

$$\begin{aligned} y(x) &= \frac{\int^x \alpha(X)q(X)dX + C}{\alpha(x)}, \\ &= \frac{\int^x q(X) \exp \left[\int^X p(Y)dY \right] dX + C}{\exp \left[\int^x p(X)dX \right]}, \\ &= y_h(x) + y_p(x), \end{aligned} \tag{4.23}$$

onde

$$\begin{aligned} y_h(x) &= C \exp \left[- \int^x p(X)dX \right], \\ y_p(x) &= \exp \left[- \int^x p(X)dX \right] \int^x q(X) \exp \left[\int^X p(Y)dY \right] dZ. \end{aligned}$$

Esta é solução geral de uma EDO linear de ordem 1. O termo $y_h(x)$ é a solução geral do caso homogêneo (equivalente a $q(x) = 0$). Já o termo $y_p(x)$ é a solução particular da não homogênea, correspondendo a um caso específico da fonte $q(x)$.

Exemplo 4.4

Equação de Bernoulli. Encontre a solução de:

$$\dot{y} + a(t)y + b(t)y^2 = 0,$$

chamada de Equação de Bernoulli^a.

^aMatemático suíço Jacob Bernoulli (1654-1705).

Trata-se de uma EDO de ordem 1 e não linear, o que em princípio complica sua solução. Porém se fizermos a substituição $y(t) = 1/v(t)$ obtemos:

$$\dot{v} - a(t)v = b(t),$$

que é linear. Usando o método geral desta seção a solução geral será da forma da Eq. 4.23:

$$\begin{aligned} v(t) &= v_h(t) + v_p(t), \\ &= C \exp \left[- \int^t a(x) dx \right] + \exp \left[- \int^t a(x) dx \right] \int^t b(x) \exp \left[\int^y a(y) dy \right] dx. \end{aligned}$$

Logo:

$$y(t) = \frac{\exp \left[- \int^t a(x) dx \right]}{C + \int^t b(x) \exp \left[\int^y a(y) dy \right] dx}.$$

Problemas

4.1) Encontre a solução de $y' = 1/(x + y)$ com a condição inicial $y(0) = 0$.

4.2) Encontre a solução de $xy' = y$ com a condição inicial $y(2) = 3$.

4.3) Encontre a solução de $y' \sin x = y \ln y$ com a condição inicial $y(\pi/3) = e$.

4.3 EDO de ordem 2

EDOs lineares e de segunda ordem são as mais comuns em física, veja por exemplo as equações as equações de 4.1 até 4.3. A primeira destas, referente a Lei de Newton, envolve uma segunda derivada da posição enquanto a força é o termo não homogêneo.

Nas EDOs de ordem 1 há uma constante arbitrária na solução geral devido a uma integração e uma função LI na solução. Agora para uma EDO de ordem 2 haverá duas integrações e logo encontraremos duas constantes arbitrárias que também devem ser definidas em função das condições de contorno. Além disso a solução geral deverá conter duas funções LI para uma EDO de ordem 2 (wronskiano diferente de zero).

Exemplo 4.5

As soluções da equação diferencial

$$y'' + \omega^2 y = 0 \quad (4.24)$$

são $y_1 = \sin \omega x$ e $y_2 = \cos \omega x$, como pode ser verificado por substituição direta. O wronskiano destas funções é:

$$W(y_1, y_2) = y'_1 y_2 - y_1 y'_2 = \begin{vmatrix} y_1 & y_2 \\ y'_1 & y'_2 \end{vmatrix} = -\omega,$$

que é diferente de zero. Logo y_1 e y_2 são linearmente independentes^a. Ou seja, dado que a eq. em questão é de ordem 2, a solução geral será $y = Ay_1 + By_2$, sendo A e B constantes arbitrárias definidas pelas condições de contorno.

^aPode-se escrever $\sin \omega x = \pm \sqrt{1 - \cos^2 \omega x}$. Porém, como essa relação não é linear, as funções continuam sendo LI.

4.3.1 EDO sem o termo y

Equações do tipo $y'' = f(y', x)$ são as mais fáceis de se resolver pois podem ser transformadas em uma EDO de ordem 1. Por exemplo seja $z = y'$, logo a EDO fica $z' = f(z, x)$ e pode ser resolvida pelos métodos da seção 4.2. Uma vez encontrado $z(x)$ a solução para $y(x)$ será:

$$y(x) = \int^x z(X, C_1) dX + C_2.$$

Note as duas constantes de integração.

Exemplo 4.6

Seja $y'' = y'$ com as condições de contorno $y(0) = 1$ e $y(-\infty) = 0$. Fazendo $z = y'$ obtemos $z' = z$ que resolvemos separando as variáveis $dz/z = dx$. Integrando:

$$\int^z \frac{dZ}{Z} = \int^x dX + C_1.$$

Logo $\ln z = x + \ln C_1$. Tirando a exponencial usando a propriedade $e^{\ln a} = a$ obtemos $z = C_1 e^x$. A solução para y fica então:

$$y(x) = \int z(X) dX + C_2 = C_1 \int^x e^X dX + C_2 = C_1 e^x + C_2.$$

Impondo a primeira condição de contorno obtemos $C_1 + C_2 = 1$. Já a segunda retorna $C_2 = 0$ já que $e^{-\infty} = 1/e^\infty = 0$. Logo $C_1 = 1$ e a solução final fica $y(x) = Ce^x$.

Algumas EDOs de ordem 2 não lineares também podem ser resolvidas por este método,

por exemplo $y'' = y^2$.

4.3.2 Solução tentativa: exponencial

A solução tentativa de exponencial também é útil em EDOs de ordem 2⁵. Por exemplo, a EDO

$$ay'' + by' + cy = 0$$

pode ser resolvida usando a solução tentativa $y = e^{px}$ (já que a derivada da exponencial é a exponencial). Fazendo as derivadas temos:

$$y' = pe^{px} = py, \quad \therefore \quad y'' = p^2e^{px} = p^2y.$$

A EDO fica então:

$$ap^2 + bp + c = 0, \quad \therefore \quad p_{1,2} = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}.$$

A solução geral fica:

$$y = C_1 e^{p_1 x} + C_2 e^{p_2 x}. \quad (4.25)$$

Repare nas duas funções LI e nas duas constantes de integração, que devem ser encontradas pelas condições iniciais. Dependendo do sinal das soluções, temos os seguintes casos:

- Se $p_1 > 0$ ou $p_2 > 0$ a solução é uma exponencial real crescente, e tendem ao infinito.
- Se $p_1 < 0$ e $p_2 < 0$ a solução é uma exponencial descrecente e tende a zero, sendo chamada de oscilação superamortecida.
- Outra possibilidade é as raízes $p_{1,2}$ serem complexas que ocorre quando $b^2 - 4ac < 0$. Neste caso escrevemos as raízes como $p_{1,2} = r \pm iq$ onde r é a parte real, q a parte imaginária e $i = \sqrt{-1}$. Da Eq. 4.25 a solução fica:

$$y(x) = e^{rx} \left(C_1 e^{iqx} + C_2 e^{-iqx} \right) = e^{rx} (C_1 \cos qx + C_2 \sin qx). \quad (4.26)$$

As exponenciais complexas se transformam em seno e cosseno usando a fórmula de Euler $e^{i\theta} = \cos \theta + i \sin \theta$. Repare então que a solução da Eq. 4.26 é uma oscilação porém de amplitude decrescente (devido a exponencial real).

Exemplo 4.7

Circuito elétrico. A figura 3.2 ilustra um circuito RLC em série com uma voltagem alternada $V(t) = V_0 \sin \omega t$. Encontre a solução para a corrente elétrica $i(t)$.

⁵Claro que este método é inviável na maioria dos casos. Porém, os poucos casos em que é sucedido já valem a pena.

A voltagem através do resistor é Ri , através do indutor é proporcional a taxa de variação instantânea da corrente Ldi/dt e através do capacitor é q/C onde $q(t)$ é sua carga. Logo, da Lei das Malhas temos:

$$L \frac{di}{dt} + Ri + \frac{q}{C} = V_0 \sin \omega t.$$

Usando $i(t) = dq/dt$ e derivando a equação anterior temos:

$$L \frac{d^2i}{dt^2} + R \frac{di}{dt} + \frac{i}{C} = \omega V_0 \sin \omega t. \quad (4.27)$$

Comparando esta EDO com a do oscilador harmônico vemos que a indutância L é o análogo elétrico da massa, a resistência R é o análogo do amortecimento e $1/C$ é o análogo da constante de mola. Já a corrente i é o análogo da posição $x(t)$. A solução geral da Eq. 4.27 é $i(t) = i_h(t) + i_p(t)$ onde o primeiro termo é a solução geral da homogênea (Eq. 4.27 com $\omega = 0$) e o segundo termo é uma solução particular. Usando uma solução tentativa exponencial:

$$i_h(t) = C_1 e^{p_+ t} + C_2 e^{p_- t},$$

onde p_+ e p_- são soluções da equação quadrática:

$$p^2 + \frac{R}{L} p + \frac{1}{LC} = 0, \quad p_{\pm} = -\frac{R}{2L} \pm \frac{1}{2L} \sqrt{R^2 - \frac{4L}{C}}. \quad (4.28)$$

Repare então que as exponenciais terão o fator $e^{-R/2L}$, que é decrescente com o tempo. Assim $i_h(t)$ decai exponencialmente com o tempo, sendo chamado de transiente (após um certo tempo, este comportamento desaparece).

A longo prazo então sobra apenas a solução particular chamada de estacionária. Fazemos a seguinte solução tentativa:

$$i_p(t) = A \cos \omega t + B \sin \omega t.$$

A motivação para esta solução é o termo não homogêneo $V_0 \sin \omega t$. Diferenciando i_p duas vezes e substituindo na Eq. 4.27 temos:

$$\begin{aligned} -\omega^2 L(A \cos \omega t + B \sin \omega t) + R\omega(-A \sin \omega t + B \cos \omega t) \\ + \frac{1}{C}(A \cos \omega t + B \sin \omega t) = \omega V_0 \cos \omega t. \end{aligned} \quad (4.29)$$

Para esta equação ser verdade, devemos igualar os coeficientes de cosseno em ambos os lados da igualdade e fazer o mesmo para os coeficientes do seno. Temos:

$$-\omega^2 LA + \omega RB + \frac{A}{C} = \omega V_0, \quad -\omega^2 LB - \omega RA + \frac{B}{C} = 0.$$

Da equação da direita temos:

$$A = -B \frac{S}{R}, \quad S = \omega L - \frac{1}{\omega C}.$$

Substituindo esta expressão de A na equação da esquerda, encontramos B e depois A novamente:

$$B = \frac{V_0 R}{R^2 + S^2}, \quad A = -\frac{V_0 S}{R^2 + S^2}.$$

Assim, encontramos a solução particular $i_p(t)$. Porém podemos reescrevê-la de uma forma mais intuitiva:

$$i_p(t) = I_0 \sin(\omega t - \phi), \quad I_0 = \sqrt{A^2 + B^2} = \frac{V_0}{\sqrt{R^2 + S^2}}, \quad \tan \phi = -\frac{A}{B} = \frac{S}{R}. \quad (4.30)$$

$\sqrt{R^2 + S^2}$ é chamado de impedância.

De maneira geral a solução tentativa $y = e^{px}$ também pode ser usada para encontrar a solução de uma EDO de ordem n linear e com coeficientes constantes:

$$a_0 y^{(n)} + a_1 y^{(n-1)} + \dots + a_{n-1} y' + a_n y = 0.$$

Substituindo a solução tentativa temos:

$$a_0 p^n + a_1 p^{n-1} + \dots + a_{n-1} p + a_n = 0.$$

Ou seja, os valores possíveis para p são as n raízes desse polinômio de ordem n . A solução geral será:

$$y(x) = \sum_{i=1}^n b_i e^{p_i x},$$

onde b_i são as constantes arbitrárias definidas pelas n condições iniciais.

4.3.3 Oscilador Harmônico

A tentativa de solução exponencial também serve para equação homogênea do tipo:

$$\frac{d^2 y}{dx^2} = \pm s^2 y, \quad (4.31)$$

Supondo $y = e^{px}$ teremos $p^2 y = \pm s^2 y$. Como queremos uma solução não nula $y \neq 0$ temos que $p^2 = s^2$. No caso do sinal ser $+$ na Eq. 4.31 temos que $p = \pm s$ e a solução fica composta de exponenciais reais:

$$y(x) = A e^{sx} + B e^{-sx}. \quad (4.32)$$

No caso do sinal ser negativo na Eq. 4.31 temos que $p = \pm \sqrt{-s^2} = \pm is$ e a solução será composta de exponenciais complexas:

$$y(x) = A e^{isx} + B e^{-isx} = A \cos sx + B \sin sx. \quad (4.33)$$

As exponenciais complexas equivalem a senos e cossenos via fórmula de Euler. Esta é a solução do oscilador harmônico. A Eq. 4.31 aparece muito em diversos problemas de física.

4.3.4 Solução em série de potências

Outra técnica utilizada para se resolver EDOs de ordem 2 consiste em procurar uma solução da forma de série infinita. Vamos ilustrar esse método para EDO de ordem 2 mas o método é válido para ordens superiores também. Seja a EDO homogênea de ordem 2:

$$y''a(x)y' + b(x)y = 0.$$

Se as funções $a(x)$ e $b(x)$ são contínuas e analíticas em torno de um ponto x_0 , as soluções dessa EDO também serão contínuas e analíticas em torno desse ponto. Isso permite escrever essa solução como uma série infinita:

$$y(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n(x - x_0)^n.$$

A ideia é usar essa série infinita como solução tentativa, substituindo-a na EDO desejada e então determinar recursivamente os coeficientes c_n .

Oscilador Harmônico Simples

Nada melhor do que ilustrar o método com um exemplo simples. Seja a EDO do oscilador harmônico (Eq. 4.31 com sinal positivo):

$$y'' + \omega^2y = 0. \quad (4.34)$$

Nesse caso $a(x) = 0$ e $b(x) = \omega^2$. Já resolvemos essa EDO mas é instrutivo resolvê-lo novamente aqui exatamente para vermos que o método funciona. Vamos procurar uma solução da forma:

$$y(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n x^n,$$

com $x_0 = 0$. Logo as derivadas ficam:

$$\begin{aligned} y'(x) &= \sum_{n=0}^{\infty} n c_n x^{n-1} = \sum_{n=1}^{\infty} n c_n x^{n-1}. \\ y''(x) &= \sum_{n=1}^{\infty} (n-1)n c_n x^{n-2} = \sum_{n=2}^{\infty} (n-1)n c_n x^{n-2}. \end{aligned}$$

Veja que desprezamos o termo $n = 0$ na primeira derivada e $n = 1$ na segunda, já que os respectivos termos seriam nulos. Iremos substituir y'' na EDO em seguida e a ideia é coletar os coeficientes das potências com mesmo expoente. Logo é importante deixarmos y'' com a mesma forma da potência para podermos igualar os coeficientes. Fazemos então a troca de variáveis $n = m + 2$ em y'' , ficando:

$$y''(x) = \sum_{m=2}^{\infty} (m+1)(m+2)c_{m+2}x^m. \quad (4.35)$$

Agora vamos inserir as expressões de y e y'' na EDO da Eq. 4.34:

$$\sum_{n=0}^{\infty} \left[(n+1)(n+2)c_{n+2} + \omega^2 c_n \right] x^n = 0.$$

Veja que simplesmente trocamos a variável m de y'' (Eq. 4.35) por n para comparação com y . Para que essa expressão seja válida em qualquer x é necessário que os coeficientes da potência x^n sejam iguais. Logo:

$$(n+1)(n+2)c_{n+2} + \omega^2 c_n = 0, \quad \therefore \quad c_{n+2} = -\frac{\omega^2}{(n+1)(n+2)} c_n, \quad (4.36)$$

para $n \geq 0$. Repare que o coeficiente $n+2$ é calculado em função do coeficiente n , sempre com duas unidades de diferença. Isso impede que os dois primeiros coeficientes c_0 e c_1 sejam calculados em função de outros, de modo que eles deverão ser constantes arbitrárias. Não por acaso serão determinados em função das condições iniciais (ou de contorno), uma vez que trata-se de uma EDO de ordem 2. Assim teremos que c_2 será calculado em função de c_0 , c_3 em função de c_1 , c_4 em função de c_2 , c_5 em função de c_3 , e assim sucessivamente. Temos então duas séries: uma definida por c_0 e outra por c_1 , a primeira para n par e a segunda para n ímpar. Da relação de recorrência 4.36 obtemos essas duas séries:

$$c_{2k} = \frac{(-1)^k \omega^{2k}}{(2k)!} c_0, \quad c_{2k+1} = \frac{(-1)^k \omega^{2k}}{(2k+1)!} c_1,$$

novamente com $k \geq 0$. Veja que o termo da esquerda c_{2k} refere-se à n par e o termo da direita c_{2k+1} refere-se à n ímpar. Cada uma dessas séries será uma solução.

Vamos construir a primeira solução dada pelos termos pares:

$$y_1(x) = \sum_{k=0}^{\infty} c_{2k} x^{2k} = c_0 \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k \omega^{2k}}{(2k)!} x^{2k} = c_0 \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{(2k)!} (\omega x)^{2k}.$$

Comparando essa expressão com a Eq. 2.19 vemos que se trata de um cosseno: $y_1(x) = c_0 \cos \omega x$. Já a solução para os termos ímpares:

$$y_2(x) = \sum_{k=0}^{\infty} c_{2k+1} x^{2k+1} = c_1 \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k \omega^{2k}}{(2k+1)!} x^{2k+1} = \frac{c_1}{\omega} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{(2k+1)!} (\omega x)^{2k+1}.$$

Da mesma forma, comparando esse resultado com a Eq. 2.18 vemos que se trata de um seno: $y_2(x) = \frac{c_1}{\omega} \sin \omega x$. Esse resultado está de acordo com o que já obtivemos por substituição de uma solução tentativa exponencial (veja Eq. 4.33).

Este exemplo simples retornou séries de funções conhecidas. Em problemas mais complicados a série resultante pode não ser conhecida de imediato, conduzindo a definições de novas funções. Além disso obtivemos as duas soluções LI para a EDO de ordem 2. Também para EDOs mais complicadas o método de Frobenius pode retornar apenas uma solução, sendo necessário buscar outro método para encontrar a segunda solução LI.

Problemas

4.4) Considere o exemplo 4.7. a) Deduza as equações 4.28. b) Deduza a Eq. 4.29. c) Mostre que a solução pode ser reescrita na forma das Eqs. 4.30.

4.5) Encontre as soluções das equações diferenciais: a) $y'' + 3y' - 4y = \sin \omega x$, b) $y'' + 3y' - 4y = \cos \omega x$.

4.6) Uma partícula de massa m e carga elétrica q se move numa região de campo elétrico constante na direção $+x$ e um campo magnético também constante na direção $+z$. No tempo $t = 0$ a partícula está localizada na origem com velocidade $v \neq 0$ na direção y . Determine a posição em função do tempo $\mathbf{r}(t)$ nos casos: a) $B = 0$ e $E \neq 0$, b) $B \neq 0$ e $E = 0$ e c) $B \neq 0$ e $E \neq 0$.

4.7) A equação diferencial de Laguerre é:

$$xL_n''(x) + (1-x)L_n'(x) + nL_n(x) = 0.$$

a) Encontre uma solução em série escolhendo n tal que a solução seja um polinômio. b) Escreva as soluções para os três menores valores possíveis de n .

4.8) A descrição quântica do efeito Stark utilizando coordenadas parabólicas leva a seguinte equação diferencial:

$$\frac{d}{d\xi} \left(\xi \frac{du}{d\xi} \right) + \left(\frac{1}{2}E\xi + \alpha - \frac{m^2}{4\xi} - \frac{1}{4}F\xi^2 \right) u = 0,$$

onde α é a constante de separação, E é a energia total e F é uma constante. A energia potencial do sistema devido ao campo elétrico é Fz . Usando a raíz maior da equação indicial $k^2 - m^2/4 = 0$, desenvolva uma solução em série de potência em torno de $\xi = 0$. Encontre os 3 primeiros coeficientes em termos de a_0 , que é o menor coeficiente na seguinte série de potência $u(\xi)$:

$$u(\xi) = a_0 \xi^{m/2} \left\{ 1 - \frac{\alpha}{m+1} \xi + \left[\frac{\alpha^2}{2(m+1)(m+2)} - \frac{E}{4(m+2)} \right] \xi^2 + \dots \right\}. \quad (4.37)$$

4.9) Utilizando o método de expansão em série, encontre a solução geral de $y''(x) - e^{-x^2}y'(x) + \sin(x)y(x) = 0$.

4.4 Métodos Numéricos

Os métodos analíticos são suficientes para resolver a maioria dos problemas tradicionais e simples. Porém, em alguns casos, queremos considerar algum potencial mais realístico, ou utilizar dados experimentais como entrada, e mesmo assim, queremos uma solução razoável. Neste caso, temos que nos voltar para métodos numéricos.

O conceito de diferenciação envolve variáveis contínuas. Métodos numéricos substituem essa continuidade por um grid discreto. Por exemplo, a variável independente x assume os valores discretos: $x_0 + nh$ com $n = 0, 1, 2, 3\dots$. Quanto menor h melhor será a aproximação. Porém, quanto menor h maior será o tempo também de cálculo. Um tempo muito grande inviabiliza o processo. Assim, um balanço deve ser encontrado para se determinar o valor de h . No resto do texto usaremos a notação $x_n = x_0 + nh$ e $y_n = y(x_n)$. Dados x_n e y_0 , o problema é achar y_n para $n = 1, 2, 3\dots$

4.4.1 Método de Euler

Seja a eq. diferencial $y' = f(x, y)$ com a condição inicial $y_0 = y(x_0)$. A série de Taylor

$$y_1 = y(x_0 + h) = y_0 + hy'(x_0) + \frac{h^2}{2!}y''(x_0) + \frac{h^3}{3!}y'''(x_0) + \dots = \sum_n \frac{h^n}{n!}y^{(n)}(x_0) \quad (4.38)$$

em princípio pode retornar o valor da função em $x_0 + h$ com a precisão desejada, basta calcular o número suficiente de termos na expansão. Porém, para isso é necessário que $y(x)$ seja conhecida em sua forma analítica⁶, o que nem sempre é o caso. A aproximação mais simples é considerar apenas dois termos na Eq. 4.38: $y_1 = y_0 + hf(x, y)$. De forma geral:

$$y_{n+1} = y_n + hf(x, y), \quad (4.39)$$

onde os termos envolvendo h^2 e superiores foram desprezados. Essa equação é a definição do Método de Euler, a qual claramente contém um erro muito grande. Apesar do Método de Euler ser uma aproximação muito ruim, ela mostra o princípio da aproximação. Para se melhorar essa aproximação, basta considerar termos envolvendo h^n de ordem superiores.

Um pouco de história.

Leonhard Paul Euler (1707 - 1783) foi um matemático e físico suíço de língua alemã. Viveu a maior parte da vida em São Petersburgo, na Rússia, e em Berlim. Fez inúmeras e importantes descobertas em várias áreas como matemática (análise, teoria dos números, dos grafos), mecânica, dinâmica de fluidos, óptica, astronomia, lógica e até teoria da música (tem duas das equações que mudaram o mundo, veja tabela C.1). Introduziu muitas das terminologias da matemática moderna. Por exemplo ele foi o primeiro que utilizou o conceito de função e a representou por $f(x)$. Euler também cunhou o número i como sendo $\sqrt{-1}$, o número e como a base de \ln e a nomenclatura para as funções trigonométricas. Euler é considerado um dos grandes matemáticos de todos os tempos, assim como Isaac Newton, Arquimedes e Carl Friedrich Gauss. Foi um dos mais prolíficos matemáticos, calcula-se que toda a sua obra reunida teria entre 60 e 80 volumes, além de ter trabalhado intensamente com outros grandes nomes como Fermat e d'Alembert. Uma declaração atribuída a Pierre-Simon Laplace manifestada sobre Euler na sua influência sobre a matemática: "Leiam Euler, leiam Euler, ele é o mestre de todos nós".

⁶Neste caso, pode ser trabalhoso efetuar várias derivadas, mas programas como Mathematica, Matlab e Python podem efetuá-las de forma simbólica.

4.4.2 Méto de Runge-Kutta de ordem 2

Método de Runge-Kutta (RK) é o nome dado a refinamentos do Método de Euler. A ideia é também usar uma expansão em série de Taylor, mas um pouco diferente do Método de Euler. A ideia é supor uma expansão em série de Taylor mas trocando as derivadas superiores por uma função a ser determinada. Comparando essa expressão com a série de Taylor se encontra a expressão final para a função desejada.

Por exemplo para o método de Runge-Kutta é o de ordem 2 supomos a forma:

$$y(x+h) = y(x) + c_0 h F(x, y) + c_1 h F[x + ph, y + qhF(x, y)]. \quad (4.40)$$

A ideia é encontrar as constantes c_0 , c_1 , p e q pela comparação dessa expressão com a expansão de Taylor para $y(x+h)$ com h pequeno. Após algumas manipulações encontra-se:

$$c_0 + c_1 = 1, \quad c_1 p = 1/2, \quad c_1 q = 1/2.$$

Como há 3 equações para 4 variáveis pode-se atribuir valor a uma delas e encontrar as outras 3. Uma solução possível é o chamado Método de Euler Modificado: $c_0 = 0$, $c_1 = 1$ e $p = q = 1/2$. Usando esses valores na Eq. 4.40 temos:

$$y(x+h) = y(x) + F[x + h/2, y + hF(x, y)/2],$$

que é resolvida calculando a sequência:

$$\begin{aligned} K_0 &= hF(x, y), \\ K_1 &= hF(x + h/2, y + K_0/2), \\ y(x+h) &= y(x) + K_1. \end{aligned}$$

Esse é o Método de Runge-Kutta de ordem 2 na versão Modificada do Método de Euler.

Exemplo 4.8

Resolva a equação diferencial:

$$y' = \sin y, \quad y(0) = 1,$$

no intervalo $0 < x < 0.5$ com um espaçamento $h = 0.1$. Mantenha 4 casas decimais de precisão nos cálculos.

Temos que $F(x, y) = \sin y$. Aplicando o Método de Euler Modificado (Runge-Kutta de ordem 2), temos:

$$\begin{aligned} K_0 &= hF(x, y) = 0.1 \sin y, \\ K_1 &= hF(x + h/2, y + K_0/2) = 0.1 \sin(y + K_0/2), \\ y(x+h) &= y(x) + K_1. \end{aligned}$$

Usando $y(0) = 1.0$, temos na primeira iteração:

$$\begin{aligned} K_0 &= 0.1 \sin 1.0 = 0.0841, \\ K_1 &= 0.1 \sin (1.0 + 0.0841/2.0) = 0.0863, \\ y(0.1) &= 1.0 + 0.0863 = 1.0863. \end{aligned}$$

Na segunda iteração temos:

$$\begin{aligned} K_0 &= 0.1 \sin 1.0863 = 0.0885, \\ K_1 &= 0.1 \sin (1.0863 + 0.0885/2.0) = 0.0905, \\ y(0.1) &= 1.0863 + 0.0905 = 1.1768. \end{aligned}$$

Os resultados até a sexta iteração estão na tabela 4.1. A solução exata é:

$$x(y) = \ln(\csc y - \cot y) + 0.604582.$$

Logo para $y = 1.4664$ encontramos $x = 0.5$, como desejado.

Se este método for aplicado para intervalos maiores em x a solução numérica não será boa pois o erro começa a se acumular. Intervalos maiores de solução exigem métodos melhores.

x	y	K_0	K_1
0.0	1.0	0.0841	0.0863
0.1	1.0863	0.0885	0.0905
0.2	1.1768	0.0923	0.0940
0.3	1.2708	0.0955	0.0968
0.4	1.3676	0.0979	0.0988
0.5	1.4664		

Tabela 4.1: Tabela com os valores referentes ao exemplo 4.8.

4.4.3 Méto de Runge-Kutta de ordem 4

Porém o Método de Runge-Kutta de ordem 2 não é muito eficiente, sendo o ordem 4 muito mais utilizado por ser muito mais eficiente. A derivação das expressões para a ordem 4 segue a mesma ideia do método descrito acima para a ordem 2. Porém é muito mais trabalhoso e por isso não será apresentado aqui. Da mesma forma q antes, não há uma solução única para a ordem 4, havendo uma flexibilidade na escolha das constantes. Considerando novamente um *grid* discretizado (x_n, y_n) , a versão mais usada é:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{6}(k_0 + 2k_1 + 2k_2 + k_3), \quad (4.41)$$

onde

$$\begin{aligned} k_0 &= hf(x_n, y_n), & k_1 &= hf\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{k_0}{2}\right), \\ k_2 &= hf\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{k_1}{2}\right), & k_3 &= hf(x_n + h, y_n + k_2). \end{aligned}$$

Assim, tendo o valor de y no ponto x_n podemos calcular y_{n+1} , que é o valor da função no ponto x_{n+1} . Uma derivação detalhada destas expressões pode ser encontrada em Ralston (1960)⁷ e Press (1992)⁸. Vários outros métodos de RK existem, para diferentes ordens e técnicas adicionais para melhorar a precisão. Porém, em geral, o caso de quarta ordem é suficiente. Nas linguagens de programação mais utilizadas para fins científicos já existem funções prontas que implementam o método de RK quarta ordem, como por exemplo C, Fortran, Matlab, Python, dentre outras.

EDO de ordem 2

Algumas vantagens do método RK é sua estabilidade e o fato de que apenas x_0 e y_0 são condições iniciais suficientes para iniciar o método. Além disso, equações acopladas de ordem 1 do tipo

$$\frac{du}{dx} = f_1(x, u, v), \quad \frac{dv}{dx} = f_2(x, u, v), \quad (4.42)$$

são possíveis de serem resolvidas com quantas variáveis dependentes existirem (u, v , etc...). Isso permite também resolver uma EDO de segunda ordem, uma vez convertendo-a em duas EDOs de primeira ordem acopladas. Por exemplo, suponha que queiramos resolver a equação $x'' = d^2x/dt^2 = f(t, x)$. Podemos convertê-la em duas EDOs de primeira ordem da forma $x' = v$ e $v' = f(x, t)$, as quais então são resolvidas simultaneamente usando RK:

$$x_{n+1} = x_n + v\Delta t, \quad v_{n+1} = v_n + f(t, x)\Delta t. \quad (4.43)$$

De maneira geral uma EDO arbitrária de ordem 2 da forma:

$$y''(x) + P(x)y'(x) + Q(x)y(x) = F(x),$$

pode ser separada em duas EDOs de primeira ordem:

$$y'(x) = z(x), \quad z'(x) + P(x)z(x) + Q(x)y(x) = F(x).$$

Essas duas EDOs acopladas podem ser resolvidas facilmente por Runge-Kutta.

⁷Ralston, A., and Wilf, H. S. (Eds.) (1960). Mathematical Methods for Digital Computers. Wiley, New York.

⁸Press, W. H., Flannery, B. P., Teukolsky, S. A., and Vetterling, W. T. (1992). Numerical Recipes, 2nd ed. Cambridge Univ. Press, Cambridge, UK.

Código 4.1

Pêndulo acoplado. Seja o sistema pêndulo-mola mostrado na figura 4.2(a), as duas variáveis L e θ são acopladas e variam com o tempo. O sistema de equações diferenciais para o movimento da massa é:

$$\begin{aligned}\ddot{L} &= (L_0 + L)\ddot{\theta}^2 - \frac{k}{m}L + g \cos \theta \\ \ddot{\theta} &= -\frac{1}{L_0 + L}(2\dot{L}\dot{\theta} + g \sin \theta)\end{aligned}$$

onde L é o comprimento da mola, θ é o ângulo entre a mola e vertical, k é a constante de mola, m a massa e L_0 o comprimento de equilíbrio da mola. Lembre-se que $\dot{a} = da/dt$ e $\ddot{a} = d^2a/dt^2$. Resolva numericamente esse sistema e encontre $L(t)$ e $\theta(t)$.

Utilizamos o método de Runge Kutta de quarta ordem implementado em Python para encontrarmos as variações temporais de L e θ [?]. Na figura 4.2(b) está o gráfico dessas duas variáveis. A trajetória da massa (contida em um plano) é um resultado interessante. As componentes x e y da posição em função do tempo são:

$$x(t) = [L_0 + L(t)] \sin \theta(t), \quad y(t) = -[L_0 + L(t)] \cos \theta(t)$$

```
def spring_pendulum(y,time): #definicao da funcao
    g0 = y[1]
    g1 = (L0+y[0])*y[3]**2 - k/m*y[0] + gravity * math.cos(y[2])
    g2 = y[3]
    g3 = -(gravity * math.sin(y[2]) + 2.0*y[1]*y[3])/(L0+y[0])
    return np.array([g0, g1, g2, g3])

#Definindo o estado inicial
y[0] = L
y[1] = v0
y[2] = theta0
y[3] = omega0

time = np.linspace(0,25,N) #cria o vetor do tempo

#Fazendo os calculos
answer = odeint(spring_pendulum, y, time)
```

O gráfico y em função de x está na figura 4.2(c). Veja que uma situação aparentemente complicada e não intuitiva produz uma trajetória suave, bonita e elegante^a. O código que resolve as equações diferenciais e gera essas figuras está no Github^b.

^aNote que trata-se de uma figura de Lissajous: https://en.wikipedia.org/wiki/Lissajous_curve.

^b<https://github.com/paulofreitasgomes/computationalphysics/tree/master/MecanicaClassica>.

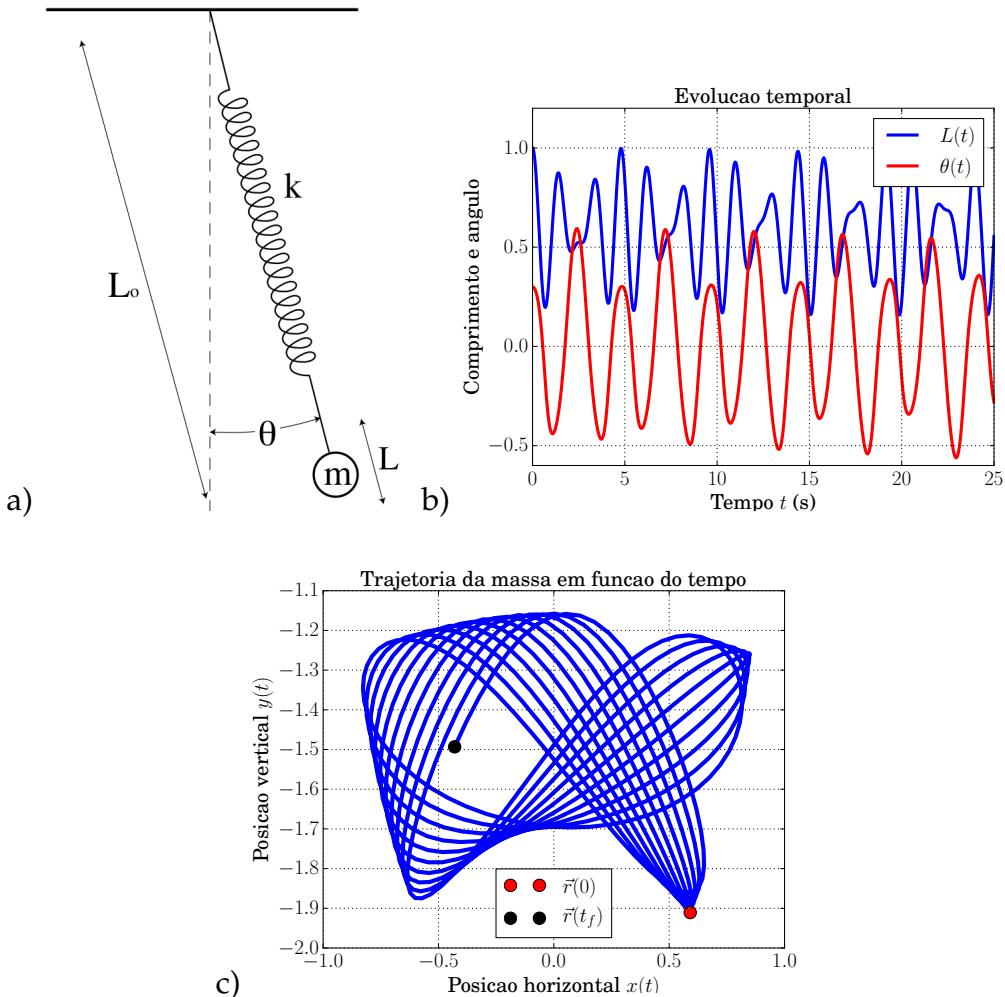


Figura 4.2: (a) Ilustração de uma massa presa a uma mola com uma de suas extremidades fixa em uma superfície, ficando sob ação da gravidade. Figura retirada da Ref. [?]. (b) Gráfico de $L(t)$ e $\theta(t)$. (c) Gráfico da posição $\vec{r}(t)$, ou seja, de $y(t)$ em função de $x(t)$. O ponto vermelho é o ponto inicial e o preto o final.

Código 4.2

Atrator de Lorentz. O atrator de Lorentz é definido pelas equações:

$$\frac{dx}{dt} = \sigma(y - x), \quad \frac{dy}{dt} = x(\rho - z) - y, \quad \frac{dz}{dt} = xy - \beta z.$$

```
def f(state, t):
    x, y, z = state # cria o vetor estado
    return sigma * (y - x), x * (rho - z) - y, x * y - beta * z # derivadas

state01 = [1.0, 1.0, 1.0] #posicao inicial da particula 1
state02 = [1.001, 1.0, 1.0] #posicao inicial da particula 2
t = np.arange(0.0, 20.0, 0.01) #intervalo de tempo

states1 = odeint(f, state01, t) #calcula a trajetoria da particula 1
states2 = odeint(f, state02, t) #calcula a trajetoria da particula 2
```

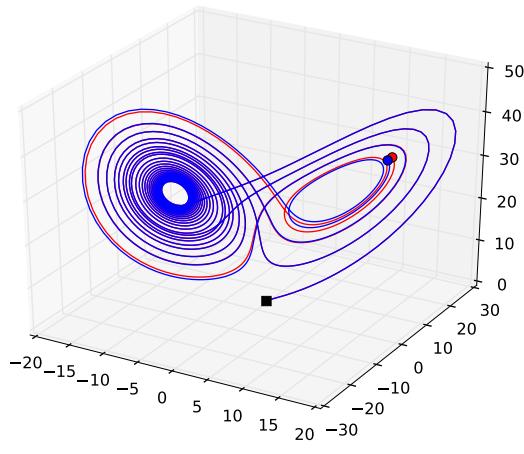


Figura 4.3: Trajetória de duas partículas (uma em vermelho outra em azul) determinadas pelas Eqs. de Lorentz. O círculo preto representa o ponto inicial e os quadrados os pontos finais. A posição inicial da partícula em vermelho é $(0.0; 0.0; 0.0)$ e da azul $(0.001; 0.0; 0.0)$.

Na figura 4.3 está a trajetória de duas partículas determinada pelas Eqs. de Lorentz. A única diferença entre as duas é a posição inicial: $y_0 = z_0 = 1.0$ para ambas mas $x_0 = 1.0$ para uma e $x_0 = 1.001$ para outra.

EDO de ordem n

Os métodos numéricos são adequados para se resolver EDOs de ordem n arbitrária do tipo:

$$y^{(n)} = f(x, y, y', y'', \dots, y^{(n-1)}).$$

Essa EDO pode sempre ser convertida em n EDOs de primeira ordem nas funções y_i da forma:

$$y_0 = y, \quad y_1 = y', \quad y_2 = y'', \quad y_3 = y''', \dots, \quad y_{n-1} = y^{(n-1)}.$$

As EDOs resultantes são:

$$y'_0 = y_1, \quad y'_1 = y_2, \quad y'_2 = y_3, \dots, \quad y'_n = f(x, y, y', y'', \dots, y^{(n-1)}).$$

Como a EDO original é de ordem n é necessário n condições auxiliares para se definir as n constantes arbitrárias. Se essas condições auxiliares são definidas no mesmo ponto $x = a$ temos:

$$y_0(a) = b_0, \quad y_1(a) = b_1, \quad y_2(a) = b_2, \dots, \quad y_{n-1}(a) = b_{n-1}.$$

Nesse caso as condições auxiliares são condições iniciais e o problema é dito ser um problema de valor inicial. Por outro lado se as funções y_i são especificadas em valores diferentes de x o problema é chamado de problema de valor de contorno.

4.5 Problema de 2 corpos

A Lei de Gravitação Universal de Newton⁹ diz que a força que de atração que um corpo de massa M_1 exerce em outro corpo de massa M_2 (ou seja, a força que o corpo 2 sente) é:

$$\mathbf{F}_{12} = G \frac{M_1 M_2}{r_{12}^2} \hat{\mathbf{r}}_{12}.$$

onde G é a constante gravitacional universal, $\mathbf{r}_{12} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ é o vetor que sai do corpo 2 e aponta na direção e sentido do corpo 1 (veja figura) e \mathbf{r}_1 e \mathbf{r}_2 são as posições dos corpos 1 e 2. A distância entre os dois corpos é: $r_{12} = \sqrt{(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2 + (z_1 - z_2)^2}$.

Esta Lei teve grande sucesso da descrição das órbitas dos planetas em torno do Sol, explicando a brilhante análise de dados que Johannes Kepler (1571-1630) fez utilizando os dados experimentais de observações astronômicas de Tycho Brahe (1546-1601)¹⁰. Continuando a ênfase astronômica, consideremos o Sol (massa M) fixo na origem do sistema de coordenadas e os planetas girando em torno dele. O movimento de um planeta (massa m) será obtido inserindo a força gravitacional na lei de Newton:

$$\frac{d^2\mathbf{r}}{dt^2} = G \frac{Mm}{r^2} \hat{\mathbf{r}},$$

que equivale a 3 equações diferenciais ordinárias, de ordem 2, acopladas e não lineares. No caso dos planetas a solução são elipses e o sol se localiza em um dos focos da mesma. No caso geral de duas partículas em posições e massas arbitrárias, o problema é resolvido usando as coordenadas do centro de massa e a massa reduzida.

4.5.1 Problema de 3 corpos

Vamos supor agora um problema de 3 corpos de massas m_i e posições \mathbf{r}_i com $i = 1, 2, 3$. Assim, cada corpo sente 2 forças e as três posições $\mathbf{r}_i(t)$ a serem encontradas consistem em 9 equações diferenciais, ordinárias, de ordem 2, acopladas e não lineares. Seja F_{ij} a força que o corpo i exerce no corpo j , as forças em questão são:

$$\mathbf{F}_{ij} = G \frac{m_i m_j}{r_{ij}^2} \hat{\mathbf{r}}_{ij},$$

onde:

$$\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j, \quad r_{ij} = \sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2}.$$

A Lei de Newton aplicada para cada corpo j retorna:

$$\begin{aligned} m_j \frac{d^2\mathbf{r}_j}{dt^2} &= \sum_{i,i \neq j}^2 \mathbf{F}_{ij} = G \sum_{i,i \neq j}^2 \frac{m_i m_j}{r_{ij}^2} \hat{\mathbf{r}}_{ij}, \\ &= G \sum_{i,i \neq j}^2 \frac{m_i m_j [(x_i - x_j)\hat{\mathbf{x}} + (y_i - y_j)\hat{\mathbf{y}} + (z_i - z_j)\hat{\mathbf{z}}]}{[(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2]^{3/2}}. \end{aligned}$$

⁹I. Newton, *Philosophiae naturalis principia mathematica* (London: Royal Society Press, 1687).

¹⁰Para uma ótima descrição histórica, veja H. Moysés Nussenzveig, *Curso de Física: vol.1 Mecânica*, Edição 4, Editora Edgard Blücher, 2002.

A somatória é em i tal que $i \neq j$. Esta equação vetorial corresponde a 3 equações escalares:

$$\begin{aligned}\frac{d^2x_j}{dt^2} &= G \sum_{i,i \neq j}^2 \frac{m_i(x_i - x_j)}{[(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2]^{3/2}}, \\ \frac{d^2y_j}{dt^2} &= G \sum_{i,i \neq j}^2 \frac{m_i(y_i - y_j)}{[(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2]^{3/2}}, \\ \frac{d^2z_j}{dt^2} &= G \sum_{i,i \neq j}^2 \frac{m_i(z_i - z_j)}{[(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2]^{3/2}}.\end{aligned}$$

4.5.2 Sistema planetário

O satélite Juno foi lançado da Terra em 2011 e após uma longa viagem entrou em órbita no planeta Jupiter. A trajetória do satélite, uma vez lançado da Terra, é determinado pela força gravitacional devido aos planetas e ao Sol. O movimento de Juno, e de qualquer astro no sistema solar (planetas, luas, asteróides, cometas, etc...) é determinado pelas forças gravitacionais exercida pelo Sol e outros planetas¹¹. Nesta seção vamos descrever como resolver numericamente o movimento de um astro considerando a força gravitacional devido ao Sol e os planetas.

Da Lei de Gravitação Universal de Newton, a força gravitacional¹² entre dois corpos é:

$$\mathbf{F} = G \frac{Mm}{r^2} \hat{\mathbf{r}}$$

onde G é a constante gravitacional universal, M e m são as massas dos astros, a posição do corpo de massa M é na origem do sistema de coordenadas e a posição do corpo m é a posição \mathbf{r} . A distância entre os dois corpos é r e $\hat{\mathbf{r}}$ é o versor (módulo 1) ao longo da reta que passa pelos objetos. Temos que $r^2 = x^2 + y^2$. A força que o astro exerce no sol é:

$$\mathbf{F} = \frac{GM_s m}{x^2 + y^2} \hat{\mathbf{r}} = GM_s m \frac{x\hat{\mathbf{x}} + y\hat{\mathbf{y}}}{(x^2 + y^2)^{3/2}},$$

onde M_s é a massa do Sol (veja tabela 4.2 para esse e outros valores astronômicos) localizado na origem e o astro na posição \mathbf{r} . Logo, pela terceira Lei de Newton, a força que o sol exerce no astro é:

$$\mathbf{F}_s = -\mathbf{F} = -GM_s m \frac{x\hat{\mathbf{x}} + y\hat{\mathbf{y}}}{(x^2 + y^2)^{3/2}}.$$

Já a força que os planetas exercem no astro é mais complicada pois temos de levar em conta a posição deles \mathbf{r}_p (para $p = 1, 2, 3, \dots, N_p$ onde N_p é o número de planetas):

$$\mathbf{F}_p = Gm_p m \frac{\hat{\mathbf{r}}_p}{r^2} = \frac{Gm_p m}{(x_p - x)^2 + (y_p - y)^2} \frac{(x_p - x)\hat{\mathbf{x}} + (y_p - y)\hat{\mathbf{y}}}{\sqrt{(x_p - x)^2 + (y_p - y)^2}},$$

¹¹A massa dos outros astros é consideravelmente menor, e por isso a força gravitacional é desprezada.

¹²I. Newton, *Philosophiae naturalis principia mathematica* (London: Royal Society Press, 1687).

onde p refere-se a planetas¹³ e $\mathbf{r}_p = \mathbf{r}_p - \mathbf{r}$ é o vetor separação (veja seção 1.2.7). O vetor \mathbf{r}_p sai da posição \mathbf{r} no sentido da posição \mathbf{r}_p , pois como a força é de atração o astro na posição \mathbf{r} sente uma força na direção e sentido para a posição \mathbf{r}_p (veja figura). Como o intuito é resolver o movimento apenas do astro consideramos que os planetas movem-se em órbitas pré-definidas.

Aplicando a Lei de Newton temos:

$$\mathbf{T} = m \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2},$$

onde a força total é $\mathbf{T} = \mathbf{F}_s + \sum_p \mathbf{F}_p$. Devido a conservação do momento angular $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{F}$, o movimento dos planetas é contido em um plano. Logo podemos considerar o movimento do astro contido nesse mesmo plano, de forma que o movimento resultante agora se torna bidimensional em $z = 0$. Assim Lei de Newton então consiste de duas equações:

$$T_x = m \frac{d^2 x}{dt^2}, \quad T_y = m \frac{d^2 y}{dt^2}. \quad (4.44)$$

As componentes da força são:

$$\begin{aligned} T_x(x, y, x_p, y_p, t) &= \hat{\mathbf{x}} \cdot \left(\mathbf{F}_s + \sum_p \mathbf{F}_p \right) \\ &= -GM_s m \frac{x}{(x^2 + y^2)^{3/2}} + Gm \sum_p^{N_p} m_p \frac{x_p - x}{[(x_p - x)^2 + (y_p - y)^2]^{3/2}}, \end{aligned} \quad (4.45)$$

$$\begin{aligned} T_y(x, y, x_p, y_p, t) &= \hat{\mathbf{y}} \cdot \left(\mathbf{F}_s + \sum_p \mathbf{F}_p \right) \\ &= -GM_s m \frac{y}{(x^2 + y^2)^{3/2}} + Gm \sum_p^{N_p} m_p \frac{y_p - y}{[(x_p - x)^2 + (y_p - y)^2]^{3/2}}. \end{aligned} \quad (4.46)$$

Todas as variáveis x , y , x_p e y_p dependem do tempo. As equações 4.44 constituem um sistema de duas equações diferenciais de ordem 2, acopladas, ordinárias e não lineares. Ainda não foi encontrada solução analítica para esse problema de $N_p + 2$ corpos¹⁴ (astro, sol e planetas).

Felizmente, as equações 4.44 são facilmente resolvidas de forma numérica. As duas equações de ordem 2 em T_x e T_y são convertidas em 4 equações de ordem 1:

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= v_x, & \frac{dv_x}{dt} &= \frac{T_x}{m}, \\ \frac{dy}{dt} &= v_y, & \frac{dv_y}{dt} &= \frac{T_y}{m}, \end{aligned}$$

¹³Veja que $\mathbf{F}_s = \mathbf{F}_p$ com $x_p = y_p = 0$.

¹⁴O problema de apenas 3 corpos já não tem solução analítica.

Essas equações podem ser condensadas na forma matricial:

$$z = \begin{bmatrix} x \\ y \\ v_x \\ v_y \end{bmatrix}, \quad \frac{dz}{dt} = \begin{bmatrix} v_x \\ v_y \\ T_x/m \\ T_y/m \end{bmatrix}. \quad (4.47)$$

Essa forma matricial deverá ser usada na solução numérica da equação diferencial.

Astro	Massa (kg)	Raio (m)	Raio da órbita (UA)	Período da órbita (dias)
Sol	$1,99 \times 10^{30}$	$6,96 \times 10^8$	—	—
Lua	$7,35 \times 10^{22}$	$1,74 \times 10^6$	$3,84 \times 10^8$	27,3
Mercúrio	$3,30 \times 10^{23}$	$2,44 \times 10^6$	$5,79 \times 10^{10}$	88
Vênus	$4,87 \times 10^{24}$	$6,05 \times 10^6$	$1,08 \times 10^{11}$	224,7
Terra	$5,97 \times 10^{24}$	$6,38 \times 10^6$	$1,50 \times 10^{11}$	365,3
Marte	$6,42 \times 10^{23}$	$3,40 \times 10^6$	$2,28 \times 10^{11}$	687,0

Tabela 4.2: UA significa Unidade astronômica, que é a unidade de distância definida como 1 UA = distância média entre Terra e Sol = 150×10^6 km.

Código 4.3

Sistema: astro + Sol. Neste exemplo de código vamos calcular a trajetória de uma partícula (astro) sujeita a força gravitacional de outra partícula (sol). Neste caso as componentes T_x e T_y (Eqs. 4.45 e 4.46) ficam:

$$\begin{aligned} T_x(x, y, x_p, y_p, t) &= -GM_s m \frac{x}{(x^2 + y^2)^{3/2}}, \\ T_y(x, y, x_p, y_p, t) &= -GM_s m \frac{y}{(x^2 + y^2)^{3/2}}. \end{aligned}$$

Como o cálculo será feito numericamente, adotamos $G = m = 1$. A condição de contorno é na verdade a condição inicial para a posição x_0, y_0 e velocidade v_{x0}, v_{y0} . Para mostrar que a trajetória resultante depende da condição inicial resolvemos as Eqs. 4.47 considerando $x_0 = 2$, $y_0 = v_{x0} = 0$ e v_{y0} variando de 0,50 a 3,16. Para o primeiro valor a trajetória é uma elipse bem alongada, como mostra a figura 4.4. Aumentando v_{y0} a trajetória elíptica começa a ficar menos alongada até que para $v_{y0} = 3,16$ a trajetória é praticamente uma circunferência. O código que gera as figuras é:

```
import math
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from scipy.integrate import odeint

Q, Nt = 80, 4
tempo = np.linspace(0, Nt, Q)
Ms, Lmax = 20, 2

def forca(state, tempo): #Expressao da forca gravitacional
    x, y, vx, vy = state
```

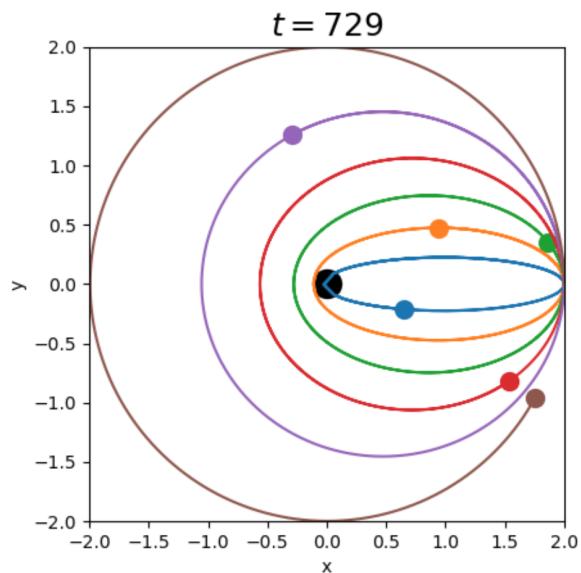


Figura 4.4: Trajetória para várias condições iniciais de uma partícula (astro) sob ação da força gravitacional de outra partícula (sol) situada na origem do sistema de coordenadas. Todas as distâncias estão em unidades astronômicas.

```

        return vx, vy, -Ms*x/(x**2+y**2)**(3.0/2.0),
               -Ms*y/(x**2+y**2)**(3.0/2.0)

pos0, post = [], []
v0 = np.linspace(0.50, 3.16, 6)
Nv0 = len(v0)

for i2 in range(Nv0):
    pos0.append([2.0, 0.0, 0.0, v0[i2]]) #Condicao inicial x0,y0,vx0,vy0
    post.append(odeint(forca, pos0[i2], tempo)) #Runge Kutta

for t2 in range(Q): # Graficos
    plt.scatter(0,0, s=250, marker= 'o',color='k') #sol parado na origem
    for i1 in range(Nv0):
        plt.plot(post[i1] [:,0][1:t2+1], post[i1] [:,1][1:t2+1], lw = 1.5)
            #trajetoria
        plt.scatter(post[i1] [:,0][t2],post[i1] [:,1][t2], s=100, marker=
            'o') #posicao
    plt.axis('scaled')
    plt.title('$t=$'+str(t2), fontsize = 18)
    plt.xlabel('x')
    plt.ylabel('y')
    axes = plt.gca()
    axes.set_xlim([-Lmax,Lmax])
    axes.set_ylim([-Lmax,Lmax])
    plt.savefig('figura'+str(t2)+'.png')
    plt.close()

```

4.6 Referências

- [5]: HJ Weber, GB Arken *Essential Mathematical Methods for Physicists*, foi o principal livro utilizado na escrita desse capítulo. Excelente texto, completo, uma ótima referência para a disciplina de Métodos Matemáticos.
- [6]: notas de aula do Professor João Carlos Alves Barata da Universidade de São Paulo. Excelente texto, extremamente completo com inúmeros detalhes não encontrados em livros em geral.

Funções especiais

5.1 Funções de Bessel



UNÇÕES de Bessel¹ aparecem em uma grande variedade de problemas físicos. Por exemplo a parte espacial da equação de Helmholtz e da equação de onda em coordenadas cilíndricas leva a funções de Bessel como soluções. Já as mesmas equações em coordenadas esféricas levam as chamadas funções de Bessel esféricas. Vibrações de uma superfície analisadas em coordenadas cilíndricas $R(r)e^{in\varphi}$ leva a funções de Bessel para $R(r)$ tendo o inteiro n como parâmetro. A aproximação WKB, muito utilizada em mecânica quântica, também envolve funções de Bessel.

Mais precisamente o problema de uma membrana circular foi resolvido primeiramente por Euler² em 1764, antes mesmo do próprio Bessel.

Funções de Bessel na verdade é um nome genérico para um conjunto de funções. Há várias convenções diferentes utilizadas tanto para a notação quanto para a definição de algumas dessas funções. Para fins didáticos vamos adotar aqui a notação definida na tabela 5.1.

Há várias formas de se encontrar as funções de Bessel. Uma delas é a partir da equação diferencial

$$x^2 \mathcal{Z}_v'' + x \mathcal{Z}_v' + (x^2 - v^2) \mathcal{Z}_v = 0, \quad (5.1)$$

onde v não precisa ser inteiro e x é uma variável adimensional³. Assim, qualquer função \mathcal{Z}_v que satisfaça esta equação diferencial é chamada de função de Bessel. Se o argumento é $x = kr$ (comum em vários problemas de física) a equação fica:

$$r^2 \frac{d^2}{dr^2} \mathcal{Z}_v(kr) + r \frac{d^2}{dr^2} \mathcal{Z}_v(kr) + (k^2 r^2 - v^2) \mathcal{Z}_v(kr) = 0. \quad (5.2)$$

¹Friedrich Wilhelm Bessel (1784-1846).

²Leonhard Euler (1707-1783).

³É comum usar v como índice não inteiro e reservar n para o índice inteiro.

Nome	Primeiro tipo	Segundo tipo
Função de Bessel	J_ν	Y_ν
Função de Hankel	$\mathcal{H}_\nu^{(1)} = J_\nu + iY_\nu$	$\mathcal{H}_\nu^{(2)} = J_\nu - iY_\nu$
Função de Bessel modificada	\mathcal{I}_ν	K_ν
Função de Bessel esférica	j_ν	y_ν
Função de Hankel esférica	$h_\nu^{(1)} = j_\nu + iy_\nu$	$h_\nu^{(2)} = j_\nu - iy_\nu$
Função de Bessel esférica modificada	i_ν	k_ν

Tabela 5.1: Nomes dos diversos tipos de funções de Bessel. As funções da coluna do meio são do primeiro tipo e da coluna da direita do segundo tipo. Também é muito utilizado a notação N_ν e n_ν no lugar de Y_ν e y_ν .

Um desses casos é equação de Helmholtz $\nabla^2\psi + k^2\psi = 0$ escrita em coordenadas cilíndricas, que também resulta na equação acima.

A equação diferencial de Bessel é de ordem 2, logo admite duas soluções LI. A primeira é a função de Bessel $J_n(x)$ e a segunda é chamada de função de Neumann, ou Bessel de segundo tipo:

$$Y_\nu = \frac{\cos(\nu\pi)J_\nu(x) - J_{-\nu}(x)}{\sin\nu\pi} \quad (5.3)$$

Assim, a solução geral da equação de Bessel é:

$$\mathcal{Z}_\nu(x) = AJ_\nu(x) + BY_\nu(x). \quad (5.4)$$

Na figura 5.1(a) está o gráfico com as primeiras funções J_n e Y_n .

Um pouco de história.

Friedrich Wilhelm Bessel. Astrônomo alemão (1784-1846). Apesar do nome, não foi Bessel o primeiro a utilizar tais funções. Os primeiros registros datam de 1703 na resolução da chamada equação de Riccati^a por Jacob Bernoulli^b. Já em 1732 as funções de Bessel também aparecem nos trabalhos de Daniel Bernoulli^c quando este tratou o problema da corda vibrante. Apenas em 1817 é que o astrônomo Bessel usa as funções que levam seu nome, e que foi publicado apenas em 1824^d. Com 20 anos de idade, ele refez o cálculo da órbita do cometa Halley, o que valeu para ele um posto de trabalho em um observatório. Nesta época, Bessel utilizou as suas funções em seu trabalho de refinar cálculos astronômicos. Ele fez também a primeira medida de paralaxe da estrela Cygni 61 (6 anos luz distante de nós) em 1838, provando de forma definitiva que a Terra está em movimento de translação em torno do Sol, de acordo com a teoria

de Nicolau Copérnico. Bessel também calculou as irregularidades da órbita de Urano, o que contribuiu para a descoberta de Netuno por Leverrier e J. C. Adams, de acordo com a Mecânica Clássica de Newton.

^aJacopo Francesco Riccati (1676-1754).

^bJacob Bernoulli (1654-1705).

^cDaniel Bernoulli (1700-1782), sobrinho do Jacob.

^dF. W. Bessel, Untersuchungen des Theils der planetarischen Störungen, welcher aus der Bewegung der Sonne entsteht. Berliner Abhandlungen, 1-52 (1824).

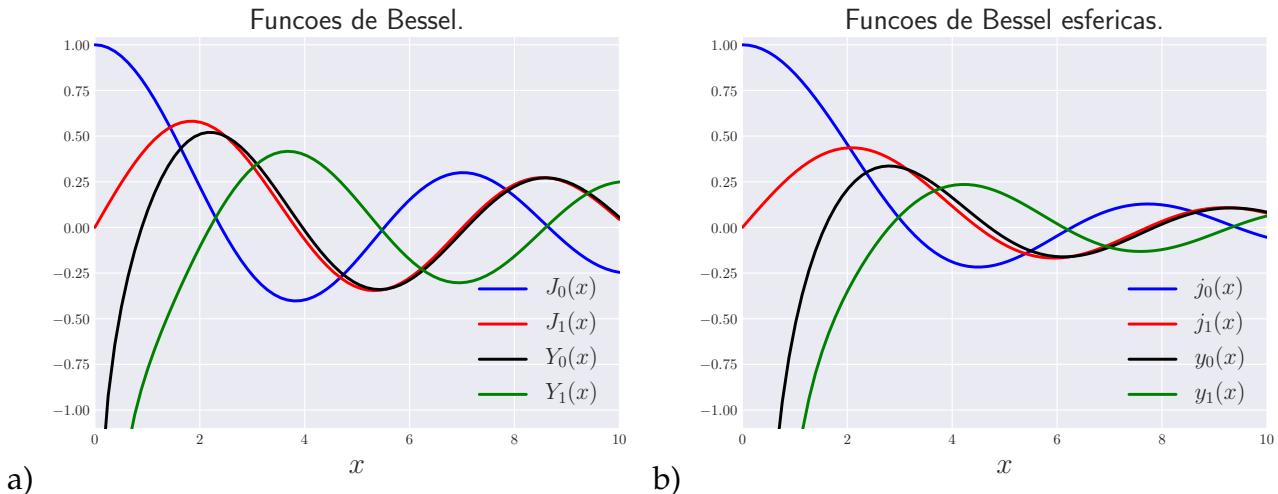


Figura 5.1: (a) Funções de Bessel $J_n(x)$ e $Y_n(x)$ para $n = 1, 2$. (b) Funções de Bessel esférica $j_n(x)$ e $y_n(x)$ para $n = 1, 2$.

5.1.1 Solução em série

Vamos resolver a Eq. 5.1 por séries usando supondo $y(x) = \sum_{\lambda=0}^{\infty} a_{\lambda} x^{k+\lambda}$. Diferenciando e inserindo $y(x)$ na Eq. 5.1 temos:

$$\sum_{\lambda=0}^{\infty} a_{\lambda} (k + \lambda)(k + \lambda - 1)x^{k+\lambda} + \sum_{\lambda=0}^{\infty} a_{\lambda} (k + \lambda)x^{k+\lambda} + \sum_{\lambda=0}^{\infty} a_{\lambda} x^{k+\lambda+2} - \sum_{\lambda=0}^{\infty} a_{\lambda} n^2 x^{k+\lambda} = 0. \quad (5.5)$$

Resolver uma equação diferencial por séries consiste em encontrar os coeficientes a_{λ} usando a Eq. 5.5. Quando um polinômio é igual a zero, todos os seus coeficientes tem que ser zeros. Temos então que analisar todos os termos. Começamos com o primeiro, que consiste em $\lambda = 0$ (coeficiente de x^0). Calculando esse termo e igualando a zero temos:

$$a_0 [k(k-1) + k - n^2] = 0.$$

Porém, assumimos que $a_0 \neq 0$ logo resulta que $k^2 - n^2 = 0$. As soluções são $k = \pm n$.

Agora consideraremos o termo x^{k+1} e igualando seu coeficiente a zero obtemos $a_1(k+1-n)(k+1+n) = 0$. Porém essa equação não é satisfeita por $k = \pm n$, e temos então de impor $a_1 = 0$. O próximo termo é $x^{k+\lambda}$ com $\lambda = 2$, depois com $\lambda = 3$, e assim sucessivamente.

Fazemos então $\lambda = j$ no primeiro, segundo e quarto termo da Eq. 5.5 e $\lambda = j - 2$ no terceiro termo. Fazendo o coeficiente de x^{k+j} igual a zero temos (veja problema 5.1):

$$a_j[(n+j)(n+j-1) + (n+j) - n^2] + a_{j-2} = 0. \quad (5.6)$$

A relação de recorrência fica então:

$$a_j = -\frac{a_j}{(j+2)(2n+j+2)}.$$

A relação de recorrência é mais útil em função de a_0 :

$$a_{2p} = (-1)^p \frac{a_0 n!}{2^{2p} p! (n+p)!}. \quad (5.7)$$

Agora podemos obter a solução, inserindo os coeficientes na solução tentativa:

$$\begin{aligned} y(x) &= a_0 x^n \left[1 - \frac{n! x^2}{2^2 1! (n+1)!} + \frac{n! x^4}{2^4 2! (n+2)!} + \dots \right], \\ &= a_0 2^n n! \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-1)^j}{j! (n+j)!} \left(\frac{x}{2}\right)^{n+2j}. \end{aligned} \quad (5.8)$$

A menos da constante, a série da função de Bessel é escrita como:

$$J_n(x) = \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(-1)^s}{s!(s+n)!} \left(\frac{x}{2}\right)^{n+2s}. \quad (5.9)$$

5.1.2 Outras funções

Várias outras funções de Bessel podem ser definidas também. Por exemplo as funções de Hankel estão definidas na tabela 5.1. A utilidade dessas funções reside em suas propriedades assintóticas, aplicadas por exemplo na propagação de ondas esféricas ou cilíndricas. Como J_ν e Y_ν formam um conjunto completo, as funções de Hankel não podem ser inteiramente novas, por isso elas são definidas em função de J_ν e Y_ν .

Dessas definições pode-se mostrar que:

$$\begin{aligned} J_\nu(z) &= \frac{1}{2} \left[\mathcal{H}_\nu^{(1)}(z) + \mathcal{H}_\nu^{(2)}(z) \right], \\ Y_\nu(z) &= \frac{1}{2i} \left[\mathcal{H}_\nu^{(1)}(z) - \mathcal{H}_\nu^{(2)}(z) \right]. \end{aligned}$$

Temos também as seguintes propriedades:

$$\mathcal{H}_\nu^{(1)}(z) = e^{-i\nu\pi} \mathcal{H}_{-\nu}^{(1)}(z), \quad \mathcal{H}_\nu^{(2)}(z) = e^{i\nu\pi} \mathcal{H}_{-\nu}^{(2)}(z).$$

Usando essas expressões pode-se mostrar que:

$$J_{-\nu}(z) = \frac{1}{2} \left[e^{i\nu\pi} \mathcal{H}_\nu^{(1)}(z) + e^{-i\nu\pi} \mathcal{H}_\nu^{(2)}(z) \right]. \quad (5.10)$$

Tem-se ainda as chamadas função de Bessel modificada. Comecemos com a equação de difusão:

$$\nabla^2 \psi - k^2 \psi = 0$$

que é muito parecida com a Eq. de Helmholtz. Fazendo o desenvolvimento análogo ao que levou a Eq. 5.2 teremos:

$$\rho^2 \frac{d^2}{d\rho^2} \Gamma_\nu(k\rho) + \rho \frac{d}{d\rho} \Gamma_\nu(k\rho) - (k^2 \rho^2 - \nu^2) \Gamma_\nu(k\rho) = 0 \quad (5.11)$$

A diferença é que o $+$ antes do parênteses virou $-$. Na prática, a Eq. de Helmholtz pode ser transformada na Eq. de difusão fazendo $k \rightarrow ik$, o que também leva a Eq. 5.2 para a Eq. 5.11 de forma que $\Gamma_\nu(k\rho) = Z_\nu(ik\rho)$ (veja Eq. 5.4). Ou seja, as soluções $\Gamma_\nu(k\rho)$ são funções de Bessel com argumento imaginário. Por convenção e conveniência, define-se então:

$$\Gamma_\nu(k\rho) = \mathcal{I}_\nu(x) \equiv i^{-\nu} J_\nu(ix) \quad (5.12)$$

onde fizemos $x = k\rho$. Dessa definição, podemos escrever as formas:

$$\mathcal{I}_\nu(x) = \exp\left(-\frac{1}{2}\nu\pi i\right) J_\nu(xe^{i\pi/2}), \quad \mathcal{I}_\nu(x) = \sum_{s=0}^{\infty} \frac{1}{s!(s+\nu)!} \left(\frac{x}{2}\right)^{2s+\nu}. \quad (5.13)$$

5.1.3 Funções de Bessel esféricas

Quando a equação de Helmholtz é separada em coordenadas esféricas a parte radial fica da forma:

$$r^2 \frac{d^2 \mathcal{R}}{dr^2} + 2r \frac{d\mathcal{R}}{dr} + \left[\kappa^2 r^2 - n(n+1)\right] \mathcal{R} = 0 \quad (5.14)$$

$n(n+1)$ é uma constante de separação. Esta equação é semelhante mas não é a equação de Bessel. Se fizermos a separação:

$$\mathcal{R}(kr) = \frac{Z(kr)}{\sqrt{kr}}$$

a Eq. (5.14) fica:

$$r^2 \frac{d^2 \mathcal{Z}}{dr^2} + 2r \frac{d\mathcal{Z}}{dr} + \left[\kappa^2 r^2 - \left(n + \frac{1}{2}\right)^2\right] \mathcal{Z} = 0 \quad (5.15)$$

que é a equação de Bessel para Z de ordem $n + \frac{1}{2}$ de forma que $\mathcal{Z}(kr) = J_{n+\frac{1}{2}}(kr)$. Assim, formalmente, $\mathcal{Z}(kr)$ será uma combinação linear entre $J_{n+\frac{1}{2}}$ e $Y_{n+\frac{1}{2}}$.

$$\mathcal{G}(r) = A j_n(kr) + B y_n(kr) \quad (5.16)$$

as quais são definidas da seguinte forma:

$$j_n(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} J_{n+1/2}(x), \quad y_n(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} Y_{n+1/2}(x) = (-1)^{n+1} \sqrt{\frac{\pi}{2x}} J_{-n-1/2}(x)$$

onde n é um inteiro. Na figura 5.1(b) está o gráfico com as primeiras funções j_n e y_n . Além disso, as função de Haenkel esféricas são definidas como:

$$\begin{aligned} h_n^{(1)} &= \sqrt{\frac{\pi}{2x}} \mathcal{H}_{n+1/2}^{(1)}(x) = j_n(x) + iy_n(x), \\ h_n^{(2)} &= \sqrt{\frac{\pi}{2x}} \mathcal{H}_{n+1/2}^{(2)}(x) = j_n(x) - iy_n(x). \end{aligned}$$

Trabalhando as relações de recorrências e expressão em série de J_n e Y_n , pode-se mostrar que as expressões em série de j_n e y_n são:

$$\begin{aligned} j_n(x) &= 2^n x^n \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(-1)^s (s+n)!}{s!(2s+2n+1)} x^{2s}, \\ y_n(x) &= \frac{(-1)^{n+1}}{2^n x^{n+1}} \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(-1)^s (s-n)!}{s!(2s-2n)} x^{2s}. \end{aligned}$$

Já as relações de recorrência são:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} [x^{n+1} f_n(x)] &= x^{n+1} f_{n-1}(x), \\ \frac{d}{dx} [x^{-n} f_n(x)] &= -x^{-n} f_{n+1}(x), \end{aligned}$$

onde f_n pode ser j_n , y_n , $h_n^{(1)}$ e $h_n^{(2)}$. Usando essas relações, pode-se provar por indução matemática que:

$$j_n(x) = (-1)^n x^n \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^n \left(\frac{\sin x}{x} \right), \quad (5.17)$$

$$y_n(x) = -(-1)^n x^n \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^n \left(\frac{\cos x}{x} \right), \quad (5.18)$$

$$h_n^{(1)}(x) = -i(-1)^n x^n \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^n \left(\frac{e^{ix}}{x} \right), \quad (5.19)$$

$$h_n^{(2)}(x) = i(-1)^n x^n \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^n \left(\frac{e^{-ix}}{x} \right). \quad (5.20)$$

Exemplo 5.1

Partícula em uma esfera. Vamos considerar a descrição quântica de uma partícula confinada em uma esfera de raio a . O potencial que a esfera sente é:

$$V(r) = \begin{cases} 0 & \text{se } r \leq a \\ \infty & \text{se } r > a \end{cases}$$

As condições de contorno são: (i) $\psi(r \leq a)$ deve ser finito e (ii) $\psi(a) = 0$. Encontre o valor mínimo da energia E para o qual há uma solução válida da Eq. de Schrodinger.

Como o potencial só depende da coordenada esférica r , podemos desprezar a dependência angular. Esta partícula deve obedecer a Eq. de Schrodinger^a independente do tempo. Para $r \leq a$ temos:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi = E\psi, \quad (5.21)$$

logo

$$\frac{d^2\mathcal{R}}{dr^2} + \frac{2}{3} \frac{d\mathcal{R}}{dr} + \left[k^2 - \frac{n(n+1)}{r^2} \right] \mathcal{R} = 0,$$

onde $k^2 = 2mE/\hbar^2$. Veja que essa equação é idêntica a Eq. 5.14 cujas soluções são da forma da Eq. 5.16. Porém, como queremos o valor mínimo de energia vamos usar $n = 0$ de forma que a solução para nosso problema é:

$$\mathcal{R}(r) = A j_0(kr) + B y_0(kr). \quad (5.22)$$

Porém, na origem a função y_n diverge, então ela deve ser descartada. Para satisfazer a condição de contorno (ii) temos que $j_0(ka) = 0$. Isto limita os valores possíveis de k , consequentemente, os valores de energia E também ficam limitados a valores discretos. Ou seja, a energia é quantizada. O menor valor para os zeros de j_0 é π , logo $k_1 a = \pi$ o que implica:

$$E_1 = \frac{\hbar^2}{8ma^2},$$

como sendo o menor valor possível para a energia. Veja que o resultado é semelhante a energia mínima de uma partícula confinada em uma caixa retangular de lados a, b e c : $E_1 = (\hbar^2/8m)(1/a^2 + 1/b^2 + 1/c^2)$.

^a $\hbar = h/(2\pi)$ e m é a massa da partícula.

Funções de Bessel esféricas modificadas

Da mesma forma que existem as funções de Bessel modificadas I_ν e K_ν (veja problema 5.7), existem também as funções de Bessel esféricas modificadas i_ν e k_ν . A equação diferencial que as definem é:

$$r^2 \frac{d^2 R}{dr^2} + 2r \frac{dR}{dr} - \left[\kappa^2 r^2 + n(n+1) \right] R = 0 \quad (5.23)$$

Repare que esta equação difere da Eq. 5.14 apenas pelo sinal de $\kappa^2 r^2$. Seguindo a analogia, as soluções desta equação são definidas como:

$$i_n(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} I_{n+1/2}(x), \quad k_n(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} K_{n+1/2}(x). \quad (5.24)$$

Problemas

5.1) a) Obtenha a Eq. 5.6. b) Obtenha a relação de recorrência 5.7. c) Obtenha a expressão final da série 5.8.

5.2) Mostre as seguintes relações de recorrência:

$$\frac{d}{dx} [x^{-n} J_n(x)] = -x^{-n} J_{n+1}(x), \quad \frac{n}{x} J_n(x) - J_{n+1}(x) = J'_n(x).$$

Dica: faça $s \rightarrow s - 1$ na Eq. 5.9 para $J_{n+1}(x)$.

5.3) Mostre que a) $Y_{-n}(x) = (-1)^n Y_n(x)$ e b) $Y'_0(x) = -Y_1(x)$.

5.4) Mostre que em coordenadas cilíndricas, a Eq. de Helmholtz $\nabla^2 \psi + k^2 \psi = 0$ se reduz a equação de Bessel. A Eq. de Helmholtz é a parte espacial da equação de onda.

5.5) a) Obtenha a Eq. 5.11 a partir da Eq. de difusão. b) Mostre que esta equação pode ser obtida fazendo $k \rightarrow ik$ na Eq. de Helmholtz.

5.6) a) Mostre que as expressões da Eq. 5.13 são compatíveis com a definição da Eq. 5.12. b) Mostre também que:

$$\mathcal{I}_{-\nu}(x) = \sum_{s=0}^{\infty} \frac{1}{s!(s-\nu)!} \left(\frac{x}{2}\right)^{2s-\nu} \quad (5.25)$$

5.7) A Eq. 5.11 é de segunda ordem e aceita uma segunda solução independente além de $I_\nu(x)$. A flexibilidade é grande e assim a definição dessa função é uma questão de conveniência. Uma forma de se definir é:

$$K_\nu(x) \equiv \frac{\pi}{2} i^{\nu+1} \mathcal{H}_\nu^{(1)}(ix) = \frac{\pi}{2} i^{\nu+1} [J_\nu(ix) + iN_\nu(ix)].$$

$I_\nu(x)$ e $K_\nu(x)$ são as funções de Bessel modificadas do primeiro e segundo tipo. a) Mostre que $K_\nu(x)$ é real se x for real. b) Mostre que pode-se escrever também:

$$K_\nu(x) = \frac{\pi}{2} \frac{I_{-\nu}(x) - I_\nu(x)}{\sin(\nu\pi)}.$$

5.8) Calcule as funções de Bessel esféricas j_n , y_n , $h^{(1)}$ e $h^{(2)}$ para $n = 0$ e 1 .

5.9) ★ Mostre que:

$$\begin{aligned} \cos x &= J_0(x) + 2 \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n J_{2n}(x), \\ \sin x &= 2 \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n+1} J_{2n+1}(x). \end{aligned}$$

5.10) ★ Deduza a Eq. 5.17. b) Deduza a Eq. 5.18.

5.11) ★ Deduza a Eq. 5.19. b) Deduza a Eq. 5.20.

5.12) ★ Deduza a Eq. 5.10.

5.13) ★ Deduza a relação de completeza da função de Bessel esférica:

$$\int_0^{+\infty} j_n(ar)j_n(br)r^2 dr = \frac{\pi}{2a^2} \delta(a - b).$$

Dica: P. Ugincius, *Am. J. Phys.* 40, 1690 (1972).

5.14) Funções de Bessel esféricas modificadas. Mostre que $i_n(x)$ e $k_n(x)$ satisfazem a Eq. 5.23.

5.15) Deduza as seguintes relações de recorrência:

$$\begin{aligned} i_{n-1}(x) - i_{n+1}(x) &= \frac{2n+1}{x} i_n(x) \quad \therefore \quad k_{n-1}(x) - k_{n+1}(x) = -\frac{2n+1}{x} k_n(x) \\ \frac{d}{dx} i_n(x) &= \frac{1}{2n+1} [ni_{n-1}(x) + (n+1)i_{n+1}(x)] \\ \frac{d}{dx} k_n(x) &= -\frac{1}{2n+1} [nk_{n-1}(x) + (n+1)k_{n+1}(x)] \end{aligned}$$

5.16) ★★ Uma função \mathcal{H} é chamada de cilíndrica quando ela satisfaz as seguintes propriedades:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\nu-1}(z) + \mathcal{H}_{\nu+1}(z) &= \frac{2\nu}{z} \mathcal{H}(z), \\ \mathcal{H}_{\nu-1}(z) - \mathcal{H}_{\nu+1}(z) &= 2 \frac{d\mathcal{H}}{dz}. \end{aligned}$$

onde ν e z são números complexos. Prove que as funções de Bessel J_n , Y_n , $H_n^{(1)}$, $H_n^{(2)}$ são funções cilíndricas⁴.

5.17) ★★ Seja:

$$\int z^{\nu+1} f(z) \mathcal{M}_\nu(z) dz = z^{\nu+1} [A(z) \mathcal{M}_\nu(z) + B(z) \mathcal{M}_{\nu+1}(z)],$$

onde $A(z)$ e $B(z)$ são coeficientes e $\mathcal{M}_\nu(z)$ é uma função cilíndrica, ou seja, pode ser J_n , Y_n , $\mathcal{H}_n^{(1)}$, $\mathcal{H}_n^{(2)}$ ou uma combinação linear dessas funções. Mostre que⁵

$$f(z) = B''(z) + \frac{2\nu+1}{z} B'(z) + B(z).$$

⁴Dica: G. N. Watson *A Treatise on the Theory of the Bessel Functions*, Cambridge University Press (1944), pág. 82.

⁵Dica: G. N. Watson *A Treatise on the Theory of the Bessel Functions*, Cambridge University Press (1944), pág. 132. Este resultado foi obtido primeiramente em 1868.

5.2 Polinômios de Legendre

Polinômios de Legendre são funções que aparecem em diversos problemas de física, por exemplo, nos harmônios esféricos e expansão do potencial elétrico e gravitacional e satisfazem a seguinte equação diferencial:

$$\frac{d}{dx} \left[(1 - x^2) \frac{d\mathcal{P}}{dx} \right] + n(n+1)\mathcal{P} = 0, \quad (5.26)$$

onde em geral $0 \leq x \leq 1.0$. Em física, é comum encontrar esta equação em termos de θ , sendo $x = \cos \theta$. Nesta forma temos:

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left[\sin \theta \frac{d\mathcal{P}}{d\theta} \right] + n(n+1)\mathcal{P} = 0.$$

As soluções dessa equação podem ser encontradas de diversas formas. Uma delas é através da fórmula de Rodrigues⁶:

$$\mathcal{P}_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \left(\frac{d}{dx} \right)^l (x^2 - 1)^l. \quad (5.27)$$

Veja que $P_l(x)$ é um polinômio de ordem l em x no qual l é um inteiro não negativo (inclui o zero). Os primeiros polinômios de Legendre são:

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_0 &= 1, & \mathcal{P}_1 &= x, & \mathcal{P}_2 &= \frac{1}{2}(3x^2 - 1), \\ \mathcal{P}_3 &= \frac{1}{2}(5x^3 - 3x), & \mathcal{P}_4 &= \frac{1}{8}(35x^4 - 30x + 3). \end{aligned} \quad (5.28)$$

Outra forma de encontrar esses polinômios é usar a função geradora:

$$\Phi(x, h) = \frac{1}{\sqrt{1 - 2xh + h^2}}, \quad |h| < 1. \quad (5.29)$$

A propriedade importante dessa função é que:

$$\Phi(x, h) = \mathcal{P}_0(x) + h\mathcal{P}_1(x) + h^2\mathcal{P}_2(x) + \dots = \sum_{l=0}^{\infty} h^l \mathcal{P}_l(x). \quad (5.30)$$

A prova de que os \mathcal{P}_l dessa equação são de fato os polinômios de Legendre envolve duas coisas: 1) mostrar que $\mathcal{P}_l(1) = 1$ e que esses \mathcal{P}_l satisfazem a equação de Legendre.

A função geradora é muito útil na obtenção de relações de recorrência. Alguns exemplos são:

$$\begin{aligned} l\mathcal{P}_l(x) &= (2l-1)x\mathcal{P}_{l-1}(x) - (l-1)\mathcal{P}_{l-2}(x), \\ l\mathcal{P}_l'(x) &= x\mathcal{P}'_l(x) - \mathcal{P}'_{l-1}(x), \\ l\mathcal{P}_{l-1}(x) &= \mathcal{P}'_l(x) - x\mathcal{P}'_{l-1}(x). \end{aligned} \quad (5.31)$$

⁶O fator $\frac{1}{2^l l!}$ foi escolhido para que $\mathcal{P}_l(1) = 1$.

5.2.1 Potencial eletrostático: expansão multipolar

Uma das aplicações de Polinômios de Legendre é na aproximação do potencial Coulombiano gerado por uma distribuição de cargas elétrica. Consideremos a figura que mostra uma distribuição arbitrária onde cada elemento de carga é indicado pelo vetor \mathbf{r}' . Queremos calcular o potencial na posição \mathbf{r} no caso em que $r \ll r'$, ou seja, quando queremos o potencial muito longe da distribuição de carga⁷. Esta aproximação é amplamente aplicada em situações onde a distribuição de carga ocupa um pequeno volume.

O potencial de uma distribuição de cargas ρ é:

$$V(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{1}{\mathbf{r}} \rho(\mathbf{r}') d\tau',$$

onde $\mathbf{r} = \mathbf{r} - \mathbf{r}'$ é vetor separação e r' é a variável de integração. Da lei dos cossenos (veja Eq. 1.2):

$$\mathbf{r}^2 = r^2 + (r')^2 - 2rr' \cos \theta = r^2 \left[1 + \left(\frac{r'}{r} \right)^2 - 2 \left(\frac{r'}{r} \right) \cos \theta \right],$$

onde θ é o ângulo entre \mathbf{r} e \mathbf{r}' . Dado a aproximação que estamos fazendo podemos escrever

$$\frac{1}{\mathbf{r}} = \frac{1}{r\sqrt{1+\varepsilon}} = \frac{1}{r} \left(1 - \frac{1}{2}\varepsilon + \frac{3}{8}\varepsilon^2 - \frac{5}{16}\varepsilon^3 + \dots \right).$$

Assim, quando $r \gg r'$ temos $\varepsilon \ll 1$. Usando a expansão binomial:

$$\frac{1}{\mathbf{r}} = \frac{1}{r\sqrt{1+\varepsilon}} = \frac{1}{r} \left(1 - \frac{1}{2}\varepsilon + \frac{3}{8}\varepsilon^2 - \frac{5}{16}\varepsilon^3 + \dots \right).$$

Substituindo de volta a expressão de ε :

$$\begin{aligned} \frac{1}{\mathbf{r}} &= \frac{1}{r} \left[1 - \frac{1}{2} \left(\frac{r'}{r} \right) \left(\frac{r'}{r} - 2 \cos \theta \right) + \frac{3}{8} \left(\frac{r'}{r} \right)^2 \left(\frac{r'}{r} - 2 \cos \theta \right)^2 - \frac{5}{16} \left(\frac{r'}{r} \right)^3 \left(\frac{r'}{r} - 2 \cos \theta \right)^3 \dots \right], \\ &= \frac{1}{r} \left[1 + \left(\frac{r'}{r} \right) \cos \theta + \left(\frac{r'}{r} \right)^2 \left(\frac{3 \cos^2 \theta - 1}{2} \right) + \left(\frac{r'}{r} \right)^3 \left(\frac{5 \cos^3 \theta - 3 \cos \theta}{2} \right) + \dots \right]. \end{aligned}$$

Analizando os coeficientes na última expressão vemos que eles são na verdade os Polinômios de Legendre:

$$\frac{1}{\mathbf{r}} = \frac{1}{r} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{r'}{r} \right)^n P_n(\cos \theta).$$

Agora podemos montar a expressão final para o potencial:

$$V(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{r^{n+1}} \int (r')^n P_n(\cos \theta) \rho(\mathbf{r}') d\tau'.$$

Veja que r sai da integral pois não depende de r' . Esta expressão para o potencial é conhecida como expansão multipolar. O primeiro termo $n = 0$ é a contribuição do monopolo (decai com $1/r$). O segundo termo $n = 1$ é o dipolo, o terceiro $n = 3$ é o quadrupolo, o quarto o octopolo, e assim sucessivamente. Esta expansão é exata (somatório até o infinito) porém sua utilidade prática está em considerar apenas alguns termos, suficiente para que o resultado seja dentro do desejado.

⁷Mas não muito longe onde o potencial é zero.

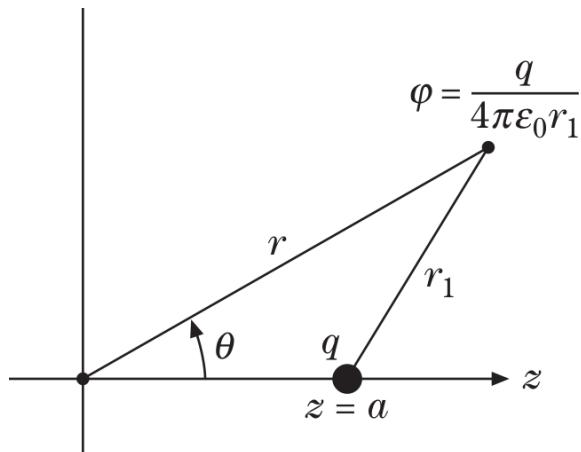


Figura 5.2: Potencial de uma carga pontual calculada em uma posição arbitrária.

5.2.2 Polinômios associados de Legendre

Uma outra função que também aparece em física é a solução da equação diferencial

$$(1 - x^2)y'' - 2xy' + \left[l(l+1) - \frac{m^2}{1-x^2} \right] y = 0 \quad (5.32)$$

O principal interesse na equação associada de Legendre é quando m é um número inteiro, nesse caso as soluções podem ser escritas como:

$$\mathcal{P}_l^m(x) = (1 - x^2)^{m/2} \frac{d^m}{dx^m} \mathcal{P}_l(x), \quad (5.33)$$

válida no intervalo $0 < x < 1.0$, $l = 0, 1, 2, 3, \dots$ e $0 \leq m \leq l$. Veja que para $m = 0$ recuperamos a equação de Legendre usual. Se $m > l$ teremos que $\mathcal{P}_l^m(x) = 0$ já que $\mathcal{P}_l(x)$ é um polinômio de grau l . As funções $\mathcal{P}_l^m(x)$ receberam o nome de polinômios associados de Legendre, mesmo que não sejam exatamente um polinômio quando m é ímpar (devido ao fator $(1 - x^2)^{m/2}$).

Os polinômios associados de Legendre tem um papel importante na resolução de equações diferenciais parciais em 3 dimensões em coordenadas eséricas, tais como a equação de Laplace e de Helmholtz. As funções chamadas de Harmônicos esféricos $Y_l^m(\theta, \phi)$ (veja Eq. 8.52) são definidas utilizando esses polinômios, com um papel importante na Mecânica Quântica e também no Eletromagnetismo. Neste caso os polinômios são escrito em termos de $x = \cos \theta$.

Problemas

5.18 a) Mostre que no caso geral 3D, considerando $r_1 > r_2$ e usando a Lei dos cossenos, podemos escrever:

$$\frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} = \frac{1}{r_1} \left[1 + \left(\frac{r_2}{r_1} \right)^2 - 2 \left(\frac{r_2}{r_1} \right) \cos \theta \right]^{-1/2}.$$

Dica: coloque em evidência $r_1 = |\mathbf{r}_1|$. b) Usando a função geradora $g(t, x)$, mostre que:

$$\frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} = \frac{1}{r_1} \sum_{n=0}^{+\infty} \mathcal{P}_n(\cos \theta) \left(\frac{r_2}{r_1} \right)^n.$$

5.19) A regra de Leibniz para a n -ésima derivada de um produto de duas funções u e v é:

$$(uv)^{(n)} = \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} u^{(n-k)} v^{(k)},$$

onde $u^{(n)}$ é a derivada de ordem n da função u . Usando a Regra de Leibniz e a fórmula de Rodrigues (Eq. 5.27) mostre que uma outra expressão para os polinômios de Legendre são:

$$\mathcal{P}_n(x) = \sum_{k=0}^n \binom{n}{k}^2 (x-1)^{n-k} (x+1)^k.$$

5.20) a) Seja uma função expandida em polinômios de Legendre: $f(x) = \sum a_n \mathcal{P}_n(x)$. Mostre que:

$$\int_{-1}^{+1} [f(x)]^2 dx = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{2a_n^2}{2n+1}.$$

b) Seja $f(x) = \arcsin x$. Calcule os coeficientes a_n da expansão.

5.21) Considerando $r > n$, mostre que:

$$\int_{-1}^{+1} x^{2r} \mathcal{P}_{2n}(x) dx = \frac{2^{2n+1} (2r)! (r+n)!}{(2r+2n+1)! (r-n)!}.$$

5.22) Considere $\alpha = 2xh - h^2$ na função geradora $\Phi(x, h)$ da Eq. 5.29. Expanda $(1 - \alpha)^{-1/2}$ em potências de α e depois substitua de volta $\alpha = 2xh - h^2$. Dessa forma, recupere os primeiros termos da expansão da Eq. 5.30.

5.23) Uma esfera de raio R centrada na origem possui uma densidade de carga elétrica dada por:

$$\rho(r, \theta) = k \frac{R}{r^2} (R - 3r) \cos \theta, \quad (5.34)$$

onde k é uma constante. Encontre o primeiro termo diferente de zero da expansão multipolar para o potencial ao longo do eixo z .

5.24) Usando $x = \cos \theta$ mostre que a Eq. 5.32 pode ser escrita como:

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{dy}{d\theta} \right) + \left[l(l+1) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right] y = 0.$$

5.25) Mostre que a Eq. 5.33 pode ser escrita como:

$$\mathcal{P}_l^m(x) = \frac{(1-x^2)^{m/2}}{2^l l!} \frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}} (x^2 - 1)^l,$$

onde $l = 0, 1, 2, 3, \dots$ e $0 \leq m \leq l$. Porém essa expressão vale também para m negativo: $-l \leq m \leq l$. Dica: use a fórmula de Rodrigues.

5.3 Conjunto completo

Dois vetores são ditos ortogonais se um é perpendicular ao outro: $\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} = 0$. Em um espaço de n dimensões essa equação fica⁸ $\sum_i^n A_i B_i = 0$. Esse mesmo conceito de ortogonalidade pode ser aplicado para funções onde o somatório é trocado por uma integral e o número de dimensões se converte em um intervalo. A definição é: duas funções $\mathcal{A}(x)$ e $\mathcal{B}(x)$ são ortogonais em um intervalo (a, b) se

$$\int_a^b \mathcal{A}^*(x) \mathcal{B}(x) dx = 0,$$

onde \mathcal{A}^* é o complexo conjugado de \mathcal{A} . No caso de funções reais o complexo conjugado é a própria função.

Suponha agora que tenhamos um conjunto de funções $\mathcal{A}_n(x)$ com $n = 1, 2, 3, \dots$. Esse conjunto será ortogonal se:

$$\int_a^b \mathcal{A}_n^*(x) \mathcal{A}_m(x) dx = \begin{cases} 0 & \text{se } n \neq m \\ C & \text{se } n = m \end{cases}$$

onde $C \neq 0$ é uma constante diferente de zero. No caso de $C = 1$ temos que o conjunto é normalizado, além de ser ortogonal. Nesse caso é chamado de conjunto ortogonal. Essa constante é exatamente a constante de normalização já que a função definida como $\mathcal{B}(x) = \mathcal{A}(x)/C$ terá módulo 1. Veja que essa definição segue a analogia com o caso de vetores onde o módulo é $A^2 = \mathbf{A} \cdot \mathbf{A}$.

Essas relações de ortonormalidade entre funções é de suma importância em física pois algumas soluções de equações diferenciais tem essa propriedade. Isso implica que funções arbitrárias (dentro dos limites de validade) podem ser expandidas em uma série dessas funções. No caso de soluções de equações diferenciais o interesse é expandir a solução particular do caso não homogêneo utilizando uma série das soluções do caso homogêneo.

5.3.1 Funções de Bessel

As funções de Bessel também formam um conjunto ortogonal, apesar de um pouco diferente do esperado. Por exemplo poderia se esperar que $\int J_p(x) J_q(x) dx$ fosse zero para $p \neq q$ e diferente de zero para $p = q$. Mas esse não é o caso.

Primeiramente, vamos reescrever a Eq. 5.1 como $x(xy')' + (x^2 - p^2)y = 0$, cuja solução é $y = J_p(x)$. Pode-se então mostrar que $J_p(ax)$ é solução de $x(xy')' + (a^2x^2 - p^2)y = 0$, onde a é um zero da função: $J_p(a) = 0$. Seja $u = J_p(ax)$ e $v = J_p(bx)$ por simplicidade, que são soluções do sistema:

$$x(xu')' + (a^2x^2 - p^2)u = 0, \quad x(xv')' + (b^2x^2 - p^2)v = 0,$$

⁸Usamos $x_1 = x, x_2 = y, x_3 = z, x_4 = w, \dots$

considerando também $J_p(b) = 0$. Multiplicando a equação em u por v e a equação em v por u e subtraindo uma da outra temos⁹:

$$v(xu')' - u(xv')' + (a^2 - b^2)xuv = 0. \quad (5.35)$$

Porém, repare que:

$$\frac{d}{dx}(vxu' - uxv') = v(xu')' - u(xv')'.$$

Usando isso e integrando a Eq. 5.35 temos:

$$(vxu' - uxv') \Big|_0^1 + (a^2 - b^2) \int_0^1 xuv dx = 0.$$

O primeiro termo avaliado em zero é zero (u e v são finitos) e em 1 também é zero já que $u(1) = J_p(a) = 0$ e $v(1) = J_p(b) = 0$. Resta então apenas o segundo termo:

$$(a^2 - b^2) \int_0^1 x J_p(ax) J_p(bx) dx = 0.$$

Se $a \neq b$, obrigatoriamente temos que a integral é zero! Isso mostra as funções de Bessel formam um conjunto ortogonal. A relação final de ortogonalidade é:

$$\int_0^1 x J_p(ax) J_p(bx) dx = \begin{cases} 0 & \text{se } a \neq b \\ \frac{1}{2} J_{p+1}^2(a) & \text{se } a = b \end{cases} \quad (5.36)$$

Veja que ainda pode ser usado $\frac{1}{2} J_{p+1}^2(a) = \frac{1}{2} J_{p-1}^2(a) = \frac{1}{2} J_p'^2(a)$. Esta condição pode ser generalizada para um intervalo $(0, a)$ qualquer fazendo $x = s/a$:

$$\int_0^a s J_p(as/\alpha) J_p(bs/\alpha) ds = \begin{cases} 0 & \text{se } a \neq b \\ \frac{\alpha^2}{2} J_{p+1}^2(a) & \text{se } a = b \end{cases} \quad (5.37)$$

5.3.2 Polinômios de Legendre

Os polinômios de Legendre formam um conjunto ortogonal. Para construir a relação de ortogonalidade vamos primeiro mostrar que a integral em diferentes polinômios é zero. Escrevemos a Eq. 5.26 para P_n e multiplicamos por P_m . Depois fazemos o contrário: escrevemos a mesma equação para P_m e multiplicamos por P_n . Por fim subtraímos uma da outra:

$$P_m \frac{d}{dx} \left[(1-x^2) P'_n \right] - P_n \frac{d}{dx} \left[(1-x^2) P'_m \right] + [n(n+1) - m(m+1)] P_n P_m = 0. \quad (5.38)$$

Os dois primeiros termos são na verdade a derivada de um termo só, logo:

$$\frac{d}{dx} \left[(1-x^2)(P_m P'_n - P_n P'_m) \right] + [n(n+1) - m(m+1)] P_n P_m = 0.$$

⁹Semelhante ao que fizemos para obter a Eq. 5.38.

Integrando de -1 a 1:

$$(1-x^2)(\mathcal{P}_m \mathcal{P}'_n - \mathcal{P}_n \mathcal{P}'_m) \Big|_{-1}^1 + [n(n+1) - m(m+1)] \int_{-1}^1 \mathcal{P}_n \mathcal{P}_m = 0.$$

Porém temos que $1-x^2=0$ para $x=\pm 1$, o que zera o termo da esquerda. Sobra só o termo da direita. Mas $n(n+1) - m(m+1) \neq 0$ se $n \neq m$. Logo neste caso a integral deve ser zero:

$$\int_{-1}^1 \mathcal{P}_n \mathcal{P}_m = 0, \quad n \neq m. \quad (5.39)$$

Este resultado mostra que \mathcal{P}_n forma um conjunto ortogonal.

Agora precisamos calcular o módulo de \mathcal{P}_l , que é o resultado da integral de superposição quando $n = m$. Multiplicando a relação de recorrência da Eq. 5.31 por $\mathcal{P}_l(x)$ e integrando temos:

$$l \int_{-1}^1 [\mathcal{P}_l(x)]^2 dx = \int_{-1}^1 x \mathcal{P}_l(x) \mathcal{P}'_l(x) dx - \int_{-1}^1 \mathcal{P}_l(x) \mathcal{P}'_{l-1}(x) dx. \quad (5.40)$$

A última integral é zero (dica: Eq. 5.39) e a integral do meio pode ser efetuada por partes:

$$\int_{-1}^1 x \mathcal{P}_l(x) \mathcal{P}'_l(x) dx = \frac{x}{2} [\mathcal{P}_l(x)]^2 \Big|_{-1}^1 - \frac{1}{2} \int_{-1}^1 [\mathcal{P}_l(x)]^2 dx = 1 - \frac{1}{2} \int_{-1}^1 [\mathcal{P}_l(x)]^2 dx.$$

Substituindo esse resultado de volta na Eq. 5.40 e isolando a integral temos que:

$$\int_{-1}^1 [\mathcal{P}_l(x)]^2 dx = \frac{2}{2l+1}.$$

Agora podemos montar a relação final de ortogonalidade dos polinômios de Legendre:

$$\int_{-1}^1 \mathcal{P}_n(x) \mathcal{P}_m(x) dx = \begin{cases} 0 & \text{se } n \neq m \\ \frac{2}{2n+1} & \text{se } n = m \end{cases}$$

É muito utilizado em física $\mathcal{P}_n(x)$ com $x = \cos \theta$. Neste caso:

$$\int_0^\pi \mathcal{P}_n(\cos \theta) \mathcal{P}_m(\cos \theta) \sin \theta d\theta = \begin{cases} 0 & \text{se } n \neq m \\ \frac{2}{2n+1} & \text{se } n = m \end{cases} \quad (5.41)$$

Da mesma forma os polinômios associados de Legendre também formam um conjunto ortogonal:

$$\int_{-1}^1 \mathcal{P}_l^m(x) \mathcal{P}_n^m(x) dx = \frac{2}{2l+1} \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \delta_{ln},$$

válida para l e n natural e m inteiro tal que $-l \leq m \leq l$. Usando novamente a coordenada $x = \cos \theta$ temos que:

$$\int_0^\pi \mathcal{P}_l^m(\cos \theta) \mathcal{P}_n^m(\cos \theta) \sin \theta d\theta = \frac{2}{2l+1} \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \delta_{ln},$$

Teoria de Sturm-Liouville

Equações diferenciais tem grandes semelhanças com vários conceitos da álgebra linear. Funções podem ser encaradas como vetores e operadores lineares atuando nessas funções são as matrizes da álgebra linear. Diagonalizar uma matriz corresponde a resolver uma EDO definida por um operador auto-adjunto \mathcal{L} . Os autovetores da matriz são as funções soluções da EDO, chamadas de auto-funções. Em Álgebra Linear um vetor é representado por \mathbf{a} , em Mecânica Quântica usa-se a notação (de Dirac) $|a\rangle$ e assim usaremos a notação $|\varphi\rangle$ para as autofunções.

6.1 EDO auto-adjunta

Uma EDO é definida pelo operador:

$$\mathcal{L} = p_0(x) \frac{d^2}{dx^2} + p_1(x) \frac{d}{dx} + p_2(x).$$

Sejam duas funções $u(x)$ e $v(x)$. O produto interno (análogo ao produto escalar de dois vetores) é definido como:

$$\langle v|u \rangle \equiv \int_a^b v^*(x)u(x)dx,$$

onde z^* é o complexo conjugado de z ¹. Continuando a analogia, u e v são ortogonais se $\langle v|u \rangle = 0$.

\mathcal{L} é chamado de operador pois ele atua nos vetores (ou funções) $|u\rangle$:

$$\mathcal{L}|u\rangle = p_0(x) \frac{d^2u}{dx^2} + p_1(x) \frac{du}{dx} + p_2(x)u.$$

O resultado dessa operação é outro vetor, que também pode ser feito produto interno com ainda outro vetor:

$$\langle v|\mathcal{L}|u\rangle = \langle v|\mathcal{L}u\rangle \int_a^b v^*(x)\mathcal{L}u(x)dx \tag{6.1}$$

¹Se $z = a + ib$ logo $z^* = a - ib$.

Um tipo específico de operadores muito útil em física é o chamado operador auto-adjunto definido pela propriedade:

$$\langle u | \mathcal{L}u \rangle = \langle \mathcal{L}_a u | u \rangle \quad (6.2)$$

\mathcal{L}_a é o operador adjunto definido como:

$$\mathcal{L}_a u(x) = \frac{d^2}{dx^2}(p_0 u) + \frac{d}{dx}(p_1 u) + p_2 u \quad (6.3)$$

A condição necessária e suficiente para que \mathcal{L} seja auto-adjunto (ou seja, $\mathcal{L} = \mathcal{L}_a$) é que $\frac{dp_0}{dx} = p_1$. De maneira geral um operador auto-adjunto pode ser escrito diretamente na forma:

$$\mathcal{L}u(x) = \mathcal{L}_a u(x) = \frac{d}{dx} \left[p(x) \frac{du(x)}{dx} \right] + q(x)u(x). \quad (6.4)$$

Além disso, um operador qualquer também pode se transformar em um operador auto-adjunto.

6.1.1 Autovetores e autovalores

Problemas de autovetores e autovalores são comuns em física. Por exemplo a Eq. de Schrödinger independente do tempo em uma dimensão é a equação secular $H\psi(x) = E\psi(x)$, onde $\psi(x)$ e E são respectivamente os autovetores e autovalores. O hamiltoniano define o operador $\mathcal{L} = H^2$. De maneira geral uma equação secular (que define os autovetores e autovalores de um operador) é escrita como:

$$\mathcal{L}|u\rangle + \lambda w|u\rangle = 0, \quad (6.5)$$

onde w é o peso ou função densidade, λ é o autovalor e $|u\rangle$ o autovetor. A análise da Eq. 6.5 para um operador auto-adjunto \mathcal{L} e de suas soluções é chamada de Teoria de Sturm-Liouville. Agora o produto interno de autovetores também depende do peso:

$$\langle v|u\rangle \equiv \int_a^b v^*(x)u(x)w(x)dx \quad (6.6)$$

Para cada λ há um $|u\rangle$ correspondente, sendo então escrito como $|u_\lambda\rangle$. Autovetores diferentes de um mesmo operador também podem ser ortogonais se $\langle u_{\lambda 1}|u_{\lambda 2}\rangle = 0$.

6.1.2 Operadores Hermitianos

As soluções da equação diferencial resultante da Eq. 6.5 também tem que satisfazer condições de contorno. Em geral o problema é resolvido em um domínio e então as condições

² ψ é chamada de função de onda e E é a energia total do sistema.

de contorno são as definições das soluções (e suas derivadas) na borda desse domínio. Suponha que em um caso 1D a solução seja no intervalo $a < x < b$, uma maneira usual para essa definição é:

$$p(x)v^*(x)\frac{du(x)}{dx}\Big|_a = p(x)v^*(x)\frac{du(x)}{dx}\Big|_b = 0. \quad (6.7)$$

No poço quadrado e esférico infinito são exemplos com esse tipo de condição de contorno. Porém, esses limites podem ser infinitos. No problema do átomo de hidrogênio por exemplo a função de onda vai a zero quando $r \rightarrow \infty$. Outra forma menos restritiva para as condições de contorno são:

$$p(x)v^*(x)\frac{du(x)}{dx}\Big|_a = p(x)v^*(x)\frac{du(x)}{dx}\Big|_b.$$

Veja que neste caso o valor especificado é o mesmo nos limites do intervalo. Esse tipo de condições de contorno é utilizado por exemplo em problemas com periodicidade.

Vamos agora definir uma importante propriedade, que tem grande aplicação na Mecânica Quântica. Comecemos calculando a integral:

De forma que:

$$\langle v|\mathcal{L}u\rangle = \int_a^b v^*\mathcal{L}udx = \int_a^b u\mathcal{L}v^*dx = \langle \mathcal{L}v|u\rangle \quad (6.8)$$

Um operador que satisfaz essa propriedade é dito operador Hermitiano.

Exemplo 6.1

Seja $\mathcal{L} = d^2/dx^2$ e a seguinte equação secular:

$$\frac{d^2y}{dx^2} + n^2y = 0. \quad (6.9)$$

Encontre as autofunções e auto valores.

Claramente as soluções são seno e cosseno (veja Eq. 4.31): $u_n = \cos nx$ e $v_n = \sin nx$ com autovalor n . O intervalo do domínio deve ser escolhido de forma que as condições de contorno (Eq. 6.7) sejam satisfeitas. Para estas soluções qualquer intervalo da forma $b = a + 2\pi$ é adequado. Temos então que:

$$m \cos mx \cos nx \Big|_0^{2\pi} = -n \sin mx \sin nx \Big|_0^{2\pi} = 0. \quad (6.10)$$

Análise de Fourier

 OURIER publicou seu trabalho "Theorei Analytique de la Chaleur" em 1822, no qual lançou as bases teórica da difusão de calor e de séries trigonométricas. O termo Análise de Fourier¹ é o termo genérico dado as diferentes aplicações envolvendo senos e cossenos: séries, transformada, solução de equações diferenciais, etc... Este conteúdo é o tema deste capítulo.

natureza há inúmeros fenômenos periódicos que assim requerem funções periódicas para sua descrição. Uma das grandes aplicações de séries de Fourier é na solução de equações diferenciais as quais não tem uma solução factível em termos de funções elementares. Neste caso obtemos as soluções em termos de séries de Fourier, as quais sob condições adequadas, podem ser tão próximas da solução verdadeira quanto se queira.

Neste capítulo utilizamos os conceitos básicos de séries de funções desenvolvidos no capítulo 2.

7.1 Expansão em séries

Uma função periódica definida no intervalo $0 < x < L$ pode ser escrita como uma série de Fourier:

$$f(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} a_n \cos nx + \sum_{n=1}^{\infty} b_n \sin nx \quad (7.1)$$

Os coeficientes são dados por:

$$a_n = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} f(x) \cos nx dx, \quad (7.2)$$

$$b_n = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} f(x) \sin nx dx, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (7.3)$$

¹Jean Baptiste Joseph Fourier (1768?1830).

O requisito para que essas definições sejam válidas é que $f(x)$ satisfaça as condições de Dirichlet (seja contínua por partes ou quadraticamente integrável)². Uma função qualquer $f(x)$ pode ser expandida em senos e cossenos pois estas funções trigonométricas formam um conjunto completo:

$$\begin{aligned} \int_{x_0}^{x_0+2\pi} \cos mx \cos nx dx &= \begin{cases} \pi\delta_{m,n} & \text{se } m \neq 0 \\ 2\pi & \text{se } n = m = 0 \end{cases} \\ \int_{x_0}^{x_0+2\pi} \sin mx \sin nx dx &= \begin{cases} \pi\delta_{m,n} & \text{se } m \neq 0 \\ 0 & \text{se } m = 0 \end{cases} \\ \int_{x_0}^{x_0+2\pi} \sin mx \cos nx dx &= 0 \end{aligned} \quad (7.4)$$

Essas equações valem para qualquer x_0 , mas em geral usa-se $x_0 = -\pi$ e $\delta_{m,n}$ é a delta de Kronecker:

$$\delta_{m,n} = \begin{cases} 0 & \text{se } m \neq n \\ 1 & \text{se } n = m \end{cases} \quad (7.5)$$

Exemplo 7.1

Seja a função de onda quadrada definida como:

$$f(x) = \begin{cases} 0 & \text{se } -\pi < x < 0 \\ h & \text{se } 0 < x < \pi \end{cases} \quad (7.6)$$

Encontre a expansão em séries de Fourier.

Os coeficientes serão:

$$\begin{aligned} a_0 &= \frac{1}{\pi} \int_0^\pi h dt = h, \\ a_n &= \frac{1}{\pi} \int_0^\pi h \cos nt dt = 0, \quad n = 1, 2, 3, \dots, \\ b_n &= \frac{1}{\pi} \int_0^\pi h \sin nt dt = \frac{h}{n\pi} (1 - \cos n\pi) = \begin{cases} \frac{2h}{n\pi} & \text{se } n \text{ ímpar} \\ 0 & \text{se } n \text{ par} \end{cases} \end{aligned}$$

A expansão resultante fica:

$$g(x) = \frac{h}{2} + \frac{2h}{\pi} \sum_{n \text{ ímpar}}^{\infty} \frac{\sin nx}{n} = \frac{h}{2} + \frac{2h}{\pi} \left(\sin x + \frac{\sin 3x}{3} + \frac{\sin 5x}{5} + \dots \right). \quad (7.7)$$

²Uma outra forma de entender essa descrição é dizer que $f(x)$ é um elemento do espaço de Hilbert de infinitas dimensões tendo as funções ortogonais cos e sin como base (pois eles formam um conjunto completo). As expansões dos coeficientes a_n e b_n são as projeções de $f(x)$ com os elementos da base, análogo ao produto escalar de dois vetores.

Onda quadrada.

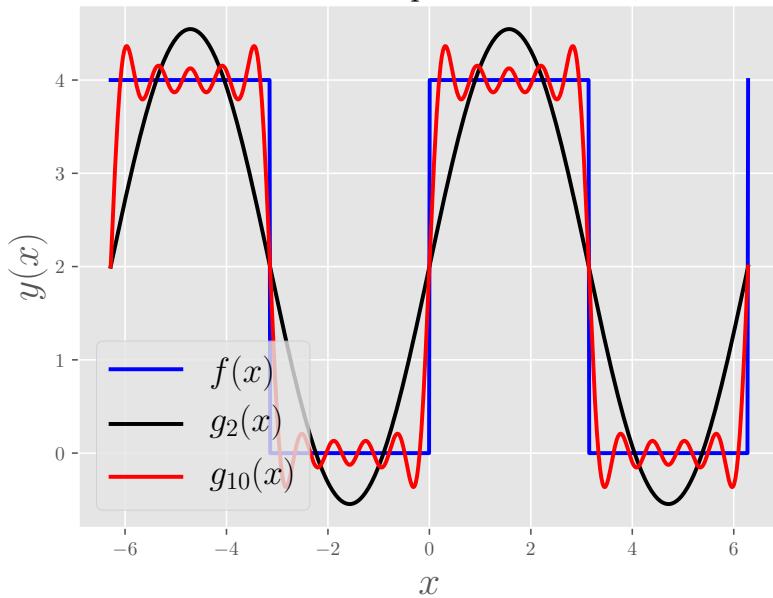


Figura 7.1: Figura referente ao exemplo 7.1. Gráfico de $f(x)$ da Eq. 7.6 e da expansão $g_q(x)$ da Eq. 7.7 com $q = 2$ e $q = 10$ termos.

Como todos os termos decaem com n^{-1} temos que a série é condicionalmente convergente. O gráfico de $f(x)$ juntamente com a expansão $g_q(x)$ para $q = 2$ e $q = 10$ termos está na figura 7.1.

Exemplo 7.2

Seja uma função definida como:

$$f(x) = \begin{cases} -\frac{1}{2}(\pi + x) & \text{se } -\pi < x < 0 \\ +\frac{1}{2}(\pi - x) & \text{se } 0 < x < \pi \end{cases}$$

Calcule a expansão em série de Fourier de $f(x)$.

A expansão em série é dada pela Eq. 7.1 e os coeficientes são dados pelas Eqs 7.2 e 7.3 onde o intervalo de integração é determinado pelo intervalo de validade de $f(x)$. Calculando primeiro os coeficientes do cosseno temos^a:

$$\begin{aligned} a_n &= \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x) \cos nx dx, \\ &= -\frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^0 \frac{1}{2}(\pi + x) \cos nx dx + \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} \frac{1}{2}(\pi - x) \cos nx dx, \\ &= -\frac{1}{2\pi} \left(\pi \int_{-\pi}^0 \cos nx dx + \int_{-\pi}^0 x \cos nx dx \right) + \frac{1}{2\pi} \left(\int_0^{\pi} \pi \cos nx dx - \int_0^{\pi} x \cos nx dx \right). \end{aligned}$$

Vamos resolver as integrais mais fáceis primeiro:

$$\int_{-\pi}^0 \cos nx dx = \frac{1}{n} \sin nx \Big|_{-\pi}^0 = 0, \quad \int_0^{\pi} \cos nx dx = \frac{1}{n} \sin nx \Big|_0^{\pi} = 0.$$

O coeficiente a_n fica então:

$$a_n = -\frac{1}{2\pi} \left(\int_{-\pi}^0 x \cos nx dx + \int_0^\pi x \cos nx dx \right) = -\frac{1}{2\pi} (I_1 + I_2).$$

Em ambas as integrais I_1 e I_2 precisamos calcular $\int x \cos nx dx$ e para isso vamos fazer integração por partes. Seja $u = x$ e $dv = \cos nx dx$, logo $v = (\sin nx)/n$ e $du = dx$. Usando essas definições na Eq. B.8 temos:

$$\int x \cos nx dx = x \frac{\sin nx}{n} - \int x \frac{\sin nx}{n} dx = \frac{x}{n} \sin nx + \frac{\cos nx}{n^2}.$$

Logo:

$$\begin{aligned} I_1 &= \int_{-\pi}^0 x \cos nx dx = \left(\frac{x}{n} \sin nx + \frac{\cos nx}{n^2} \right) \Big|_{-\pi}^0 = \frac{1}{n^2} \cos nx \Big|_{-\pi}^0 = \frac{1}{n^2} [1 - (-1)^n], \\ I_2 &= \int_0^{-\pi} x \cos nx dx = \left(\frac{x}{n} \sin nx + \frac{\cos nx}{n^2} \right) \Big|_0^{-\pi} = \frac{1}{n^2} \cos nx \Big|_0^{-\pi} = \frac{1}{n^2} [(-1)^n - 1]. \end{aligned}$$

uma vez que $\cos(-n\pi) = 1$ para n par e -1 para n ímpar. Agora o coeficiente a_n fica:

$$a_n = -\frac{1}{2\pi} \left\{ \frac{1}{n^2} [1 - (-1)^n] + \frac{1}{n^2} [(-1)^n - 1] \right\} = -\frac{1}{2\pi n^2} [1 - (-1)^n + (-1)^n - 1] = 0.$$

Ou seja, a função não tem termos em cosseno, sendo então uma função ímpar.

Vamos agora calcular o coeficiente b_n dos termos de cosseno, cujo procedimento é totalmente análogo ao cálculo de a_n :

$$\begin{aligned} b_n &= \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^\pi f(x) \sin nx dx, \\ &= -\frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^0 \frac{1}{2}(\pi + x) \sin nx dx + \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \frac{1}{2}(\pi - x) \sin nx dx = \frac{1}{2\pi} (-I_3 + I_4). \end{aligned}$$

A primeira integral é:

$$I_3 = \int_{-\pi}^0 (\pi + x) \sin nx dx = \pi \int_{-\pi}^0 \sin nx dx + \int_{-\pi}^0 x \sin nx dx = \pi I_5 + I_6, \quad (7.8)$$

onde

$$\begin{aligned} I_5 &= \int_{-\pi}^0 \sin nx dx = -\frac{\cos nx}{n} \Big|_{-\pi}^0 = \frac{\cos nx}{n} \Big|_0^{-\pi} = \frac{(-1)^n - 1}{n}, \\ I_6 &= \int_{-\pi}^0 x \sin nx dx = \left(-x \frac{\cos nx}{n} - \frac{1}{n^2} \sin nx \right) \Big|_{-\pi}^0 = \left(x \frac{\cos nx}{n} + \frac{1}{n^2} \sin nx \right) \Big|_0^{-\pi} \\ &= \pi \frac{(-1)^n}{n}. \end{aligned}$$

De forma que I_3 fica:

$$I_3 = \pi \frac{(-1)^n - 1}{n} - \pi \frac{(-1)^n}{n} = -\frac{\pi}{n}.$$

O cálculo de I_4 é análogo:

$$I_4 = \int_0^\pi (\pi - x) \sin nx dx = \pi I_7 - I_8.$$

As integrais I_7 e I_8 são do mesmo tipo que I_5 e I_6 , diferindo apenas os limites:

$$I_7 = \int_0^\pi \sin nx dx = \frac{1 - (-1)^n}{n}, \quad I_8 = \int_0^{-\pi} x \sin nx dx = -\pi \frac{(-1)^n}{n}. \quad (7.9)$$

Logo $I_4 = \frac{1}{2\pi} \left[\pi \frac{1 - (-1)^n}{n} + \pi \frac{(-1)^n}{n} \right] = \frac{1}{2n}$. Assim o coeficiente b_n fica:

$$b_n = \frac{1}{2\pi} (-I_3 + I_4) = \frac{1}{2n} + \frac{1}{2n} = \frac{1}{n}.$$

A expansão em série fica com termos apenas em seno:

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin nx}{n}.$$

^aA integração de uma função em um intervalo composto pode ser dividida em duas integrações nos intervalos intermediários, como está na Eq. B.9. Outras integrais trigonométricas também estão na seção B.2.

7.1.1 Séries de Fourier Complexas

Uma função complexa $f(z)$ também pode ser expressa em séries de Fourier:

$$f(z) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} d_n z^n \quad (7.10)$$

A relação com séries de senos e cossenos é direta quando consideramos $|z| = 1$ de forma que $z = e^{i\theta}$. Nesse caso:

$$\begin{aligned} f(z) &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n e^{in\theta} \\ &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n \cos n\theta + i \sin n\theta. \end{aligned} \quad (7.11)$$

Além disso pode-se também encontrar os coeficientes c_n da Eq. 7.11 multiplicando por $e^{-im\theta}$ em ambos os lados e integrando de 0 a 2π :

$$\int_0^{2\pi} f(z) e^{-im\theta} d\theta = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n \int_0^{2\pi} e^{-im\theta} e^{in\theta} d\theta.$$

Agora usamos a propriedade:

$$\int_0^{2\pi} e^{-im\theta} e^{in\theta} d\theta = 2\pi \delta_{m,n}. \quad (7.12)$$

onde $\delta_{m,n}$ é a delta de Cronle (Eq. 7.5). Logo só resta o termo $m = n$ da somatória que resulta em:

$$c_n = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} f(z) e^{-in\theta} d\theta.$$

7.1.2 Mudança de intervalo

Em todas as integrações até agora usamos um intervalo de comprimento 2π pois seno e cosseno são periódicas nesse intervalo. Porém, é possível expandir uma função periódica em outro intervalo também em séries de Fourier. Suponha que o intervalo em questão tenha comprimento $2L$. Fazendo a troca de x por $\pi x/L$, a expansão e os coeficientes ficam³:

$$\begin{aligned} f(x) &= \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \left[a_n \cos \frac{n\pi x}{L} + b_n \sin \frac{n\pi x}{L} \right], \\ a_n &= \frac{1}{L} \int_{-L}^L f(x) \cos \frac{n\pi x}{L} dx, \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots, \\ b_n &= \frac{1}{L} \int_{-L}^L f(x) \sin \frac{n\pi x}{L} dx, \quad n = 1, 2, 3, \dots \end{aligned} \tag{7.13}$$

Novamente, o intervalo de integração não é essencial, apenas o seu comprimento. Qualquer intervalo $(x_0, x_0 + 2L)$ serve.

7.1.3 Propriedades

Como visto acima, séries de Fourier são adequadas para expansão de funções periódicas, já que seno e cosseno são periódicos. Porém, além de serem periódicas, cosseno é uma função par e seno uma função ímpar⁴. Assim, o coeficiente a_n da Eq. 7.2 será zero se $f(x)$ for uma função ímpar. Da mesma forma b_n será zero se $f(x)$ for par. Ou seja, uma expansão de Fourier de uma função par só tem os termos de cosseno e de uma função ímpar só há os termos de seno.

Outra propriedade das séries de Fourier é que ela é a expansão da função periódica no intervalo de periodicidade. Já fora do intervalo a expansão não é válida.

Outra característica positiva das séries de Fourier é que ela pode lidar com funções contendo descontinuidades. Obviamente, quanto mais termos são considerados na expansão melhor é a aproximação. Porém, um fator merece atenção. Na figura está o gráfico da série de Fourier para a onda dente de serra com 4, 6 e 10 termos. Veja que em todas há um erro superestimado da função perto do limite $x = \pi$. Isso é chamado de fenômeno de Gibbs e é inerente a séries de Fourier. A adição de mais termos na expansão não diminui esse erro para cima, apenas o aproxima da borda do intervalo.

³Veja que para $-L < x < L$ o comprimento do intervalo de $\pi x/L$ também é 2π .

⁴Função par satisfaz $f(x) = f(-x)$ enquanto para função ímpar tem-se $f(x) = -f(-x)$.

Outra aplicação de séries de Fourier está na solução de equações diferenciais lineares não homogêneas. Por exemplo o termo fonte pode ser expandido em séries de Fourier. Assim a equação pode ser resolvida considerando cada termo da expansão em específico. A solução geral é então a soma de todas as soluções, usando o princípio da superposição⁵. É como se encontrássemos a resposta do sistema para o modo fundamental e os harmônicos⁶.

Um pouco de história.

Jean Baptiste Joseph Fourier. Foi um matemático francês nascido em 1768 em Auxerre e morreu em Paris em 1830. Depois de sua graduação em um colégio militar em Paris, Fourier se tornou professor em 1795. Em 1808, depois de suas descobertas em matemática em séries e integrais, ele foi nomeado Barão por Napoleão. Em 1822 seu livro *Teoria Analítica do Calor* foi publicado e inspirou Ohm e suas novas descobertas sobre eletricidade. Fourier atuou também na política e na administração pública e acabou envolvendo-se no estudo da transferência de calor devido a seus interesses em Metalurgia, pois estava envolvido no processo de produção de canhões apesar de ter também um interesse científico. Fourier também participou da aventura promovida por Napoleão Bonaparte no Egito, tendo contribuído para a confecção do livro *?Description de l?Egypte?*, completada em 1810, um dos livros que lançou as bases da Egiptologia.

Problemas

7.1) Um pêndulo simples consiste em uma massa m suspensa por uma haste sem massa de comprimento L . Mostre que para pequenas oscilações, θ e o deslocamento x são funções senoidais com o tempo, ou seja, movimento harmônico simples. Dica: escreva a equação diferencial referente a Lei de Newton $F = ma$ para a partícula. Use a aproximação $\sin \theta \approx \theta$, válida quando θ é pequeno e mostre que $\theta = A \sin \omega t$ é solução de sua equação. Quais os significados de A e ω ?

7.2) Calcule a série de Fourier para cada função $f(x)$:

a)

$$f(x) = \begin{cases} 0 & \text{se } -\pi < x < 0 \\ x & \text{se } 0 < x < \pi \end{cases}$$

b) $f(x) = 1 + x$ para $-\pi < x < \pi$.

⁵Uma das grandes dificuldades de se resolver equações diferenciais não lineares é que o princípio da superposição não vale.

⁶O modo fundamental e os harmônicos já existiam? Ou eles foram criados na expansão em séries de Fourier?

c)

$$f(x) = \begin{cases} -1 & \text{se } -L < x < 0 \\ 1 & \text{se } 0 < x < L \end{cases}$$

d) $f(x) = \cosh ax$.

7.3) a) Resolva o problema usando série para qualquer amplitude inicial θ_0 . b) Mostre que o período é:

$$T = T_0 \left(1 + \frac{1}{16}\theta_0^2 + \frac{11}{3072}\theta_0^4 + \dots \right),$$

onde T_0 é o período para pequenas oscilações⁷.

7.4) Expanda $f(x) = \sin kx$ onde $k \in \mathbb{R}$, ou seja, k é um número real.

7.5) Calcule a frequência aparente de uma onda sonora representada por:

$$p(t) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\cos 60n\pi t}{100(n-3)^2 + 1}. \quad (7.14)$$

Dica: cada termo de seno ou cosseno possui sua frequência angular característica. Em uma série haverá uma frequência dominante quando houver uma amplitude dominante.

7.6) Faça um gráfico análogo ao gráfico da figura 7.1 porém agora usando a função dente de serra.

7.7) ★ A função delta de Dirac $\delta(\phi_1 - \phi_2)$ é definida pela propriedade integral:

$$I = \int_{-\pi}^{\pi} f(\phi_2) \delta(\phi_1 - \phi_2) d\phi_2 = f(\phi_1). \quad (7.15)$$

Mostre que $\delta(\phi_1 - \phi_2)$ dado por $\delta(\phi_1 - \phi_2) = \frac{1}{2\pi} \sum_m^\infty e^{im(\phi_1 - \phi_2)}$ satisfaz a Eq. 7.15. Dica 1: escreva $f(\phi_2)$ como uma série de Fourier. Dica 2: veja Eq. 2.6.

7.2 Transformada de Fourier

Em física é comum encontrarmos pares de funções relacionadas por uma integral como:

$$F(\alpha) = \int_a^b f(t) K(\alpha, t) dt. \quad (7.16)$$

⁷Veja I. Singh, P. Arun, F. Lima *Fourier analysis of nonlinear pendulum oscillations*, Revista Brasileira de Ensino de Física **40**, n. 1, e1305 (2018).

A função $F(\alpha)$ é chamada de transformada integral de $f(t)$ e o *kernel* é a função $K(\alpha, t)$. Note que trata-se de uma transformação de espaço já que a função original f é em função de t e a função transformada F está no espaço α . A primeira propriedade importante desta transformada é sua linearidade:

$$\begin{aligned} \int_a^b [c_1 f_1(t) + c_2 f_2(t)] K(\alpha, t) dt &= c_1 \int_a^b f_1(t) K(\alpha, t) dt + c_2 \int_a^b f_2(t) K(\alpha, t) dt, \\ &= c_1 F_1(\alpha) + c_2 F_2(\alpha). \end{aligned}$$

A segunda propriedade importante é a existência de uma transformação inversa. Por exemplo, representemos a transformada integral pelo símbolo \mathcal{L} . Logo $F(\alpha) = \mathcal{L}f(t)$. A função inversa é tal que: $f = \mathcal{L}^{-1}F$. A existência de \mathcal{L}^{-1} muitas vezes é a chave para a utilidade de transformada integral. Por exemplo, uma das grandes aplicações é facilitar a resolução de um problema complicado. Aplicando a transformada o problema fica simples no espaço transformado. Depois de encontrada a solução neste espaço aplica-se a transformada inversa para se obter a solução no espaço original.

Dentre as transformadas integrais uma das mais utilizadas é a transformada de Fourier (FT, do inglês *Fourier Transform*) definida como⁸:

$$F(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(t) e^{i\omega t} dt. \quad (7.17)$$

Veja que o *kernel* é a exponencial complexa $e^{i\omega t}$. Outros dois *kernels* muito utilizados são as partes real e imaginária dessa exponencial. Todas essas integrais existem se f for uma função absolutamente integrável⁹.

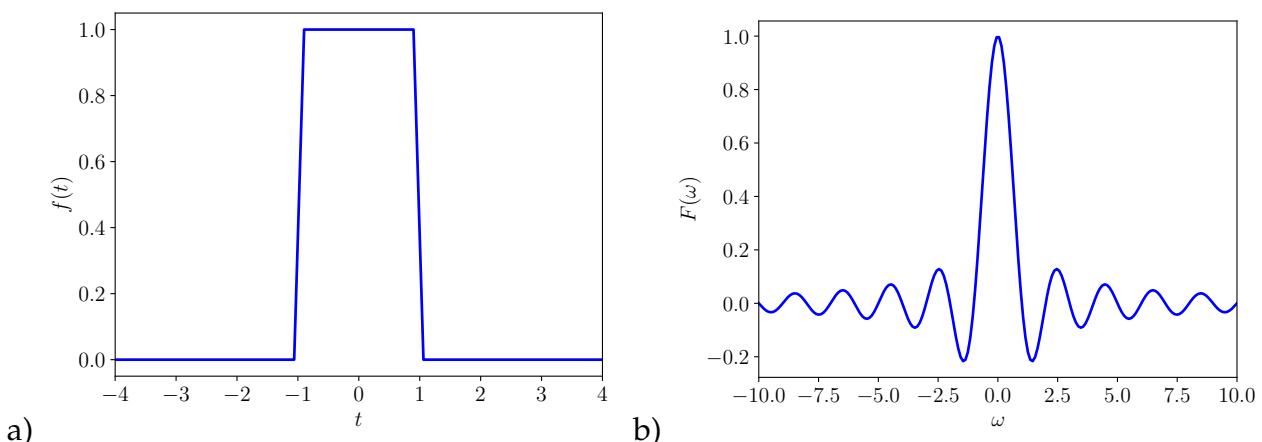


Figura 7.2: Gráficos referente ao exemplo 7.???. (a) Função $f(t)$. (b) Função $F(\omega)$.

⁸A constante $\sqrt{2\pi}$ é uma escolha. Outras formas são possíveis.

⁹Ou seja: $\int_{-\infty}^{\infty} |f(t)| < \infty$.

Exemplo 7.3

Encontre a FT da função:

$$f(t) = \begin{cases} 1, & \text{se } |t| < 1, \\ 0, & \text{se } |t| > 1. \end{cases}$$

Aplicando a definição (Eq. 7.17) temos:

$$F(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-1}^1 e^{i\omega t} dt = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{e^{i\omega t}}{i\omega} \Big|_{-1}^1 = \frac{e^{i\omega} - e^{-i\omega}}{i\omega\sqrt{2\pi}} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\sin \omega}{\omega}. \quad (7.18)$$

O gráfico de $f(t)$ e de sua transformada $F(\omega)$ estão nas figuras 7.2(a) e 7.2(b).

A TF inversa é muito semelhante a definição da própria TF:

$$f(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} F(\omega) e^{-i\omega t} dt.$$

7.2.1 TF de seno e cosseno e δ de Dirac

Transformada de Fourier tem grandes aplicações na física, por exemplo a distribuição espacial da carga eletrônica em um átomo pode ser obtida pela FT da amplitude dos raios-X espalhados. Além disso, como exemplo de aplicação na própria matemática, a função δ de Dirac pode ser expressa em função de TF:

$$\delta(x) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi} \int_{-n}^{+n} e^{-ikx} dk = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx} dk.$$

Dessa relação, o caso mais geral é:

$$\delta(x - x_0) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ik(x-x_0)} dk. \quad (7.19)$$

A TF no espaço tridimensional é direta:

$$\begin{aligned} F(\mathbf{k}) &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{-\infty}^{\infty} f(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} d^3 r \\ f(\mathbf{r}) &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{-\infty}^{\infty} F(\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} d^3 k \end{aligned}$$

Em física é muito utilizado a TF de $f(\mathbf{r})$ sendo \mathbf{r} a coordenada espacial. Neste caso \mathbf{k} é o número de onda no espaço recíproco.

A definição da transformada de Fourier induz a definição de outros dois tipos de transformadas chamadas de transformadas de Fourier cosseno e Fourier seno:

$$F_c(\omega) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f_c(t) \cos \omega t dt, \quad F_s(\omega) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f_s(t) \sin \omega t dt \quad (7.20)$$

As transformadas inversas são obtidas apenas trocando de lugar as funções:

$$f_c(t) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} F_c(\omega) \cos \omega t dt, \quad f_s(t) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} F_s(\omega) \sin \omega t dt$$

7.2.2 Equações Diferenciais

Uma das aplicações de TF é na solução de equações diferenciais e para isso precisamos de sua derivada. Da Eq. 7.17, a derivada da TF é:

$$\begin{aligned} \frac{dF_1(\omega)}{dt} &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{df}{dt} e^{i\omega t} dt = \frac{e^{i\omega t}}{\sqrt{2\pi}} f(t) \Big|_{-\infty}^{\infty} - \frac{i\omega}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(t) e^{i\omega t} dt \\ &= -i\omega F(\omega) \end{aligned} \quad (7.21)$$

Utilizamos a integral por partes (Eq. B.8) e também o fato de que $\lim_{t \rightarrow \infty} f(t) = 0$ ¹⁰. O resultado para a derivada de TF pode ser generalizada para n derivadas:

$$\frac{d^n F_1(\omega)}{dt^n} = (-i\omega)^n F(\omega)$$

Esse resultado mostra o poder da transformada de Fourier: a derivada no espaço t corresponde a uma multiplicação no espaço ω . Isso a torna muito útil na solução de equações diferenciais.

Exemplo 7.4

Seja o oscilador harmônico forçado definido pela equação:

$$\frac{d^2y}{dt^2} + \Omega^2 y = A \cos(\omega_0 t). \quad (7.22)$$

Encontre a solução $y(t)$ utilizando TF.

A expressão de y dada por uma TF e sua derivada são:

$$y(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} Y(\omega) e^{i\omega t} d\omega, \quad \frac{d^2y}{dt^2} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^2}{dt^2} [Y(\omega) e^{i\omega t}] d\omega = -\omega^2 y(t). \quad (7.23)$$

Porém, temos também de expressar o termo não homogêneo como uma transformada também:

$$\cos(\omega_0 t) = f(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} F(\omega) e^{i\omega t} d\omega. \quad (7.24)$$

Abrindo o cosseno em exponenciais complexas (Eq. B.2) e tirando a inversa teremos

¹⁰A parte alguns casos específicos, essa condição é um dos requisitos para que a TF de $f(t)$ exista.

que:

$$\begin{aligned} F(\omega) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \cos(\omega_0 t) e^{-i\omega t} dt = \frac{1}{2\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} (e^{i\omega_0 t} + e^{-i\omega_0 t}) e^{-i\omega t} dt \\ &= \frac{1}{2\sqrt{2\pi}} \left[\int_{-\infty}^{\infty} e^{-i(\omega - \omega_0)t} d\omega + \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i(\omega_0 + \omega)t} dt \right] = \frac{\pi}{\sqrt{2\pi}} [\delta(\omega - \omega_0) + \delta(\omega + \omega_0)] \end{aligned}$$

Na última passagem usamos a Eq. 7.19 para expressar $\delta(\omega \pm \omega_0)$. Logo, usando esse $F(\omega)$ na Eq. 7.24 teremos:

$$\cos(\omega_0 t) = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} [\delta(\omega - \omega_0) + \delta(\omega + \omega_0)] d\omega. \quad (7.25)$$

A equação diferencial fica então:

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} Y(\omega) (\Omega^2 - \omega^2) e^{i\omega t} dt = \frac{A}{2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} [\delta(\omega - \omega_0) + \delta(\omega + \omega_0)] d\omega.$$

Igualando os integrandos:

$$Y(\omega) = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{A}{\Omega^2 - \omega^2} [\delta(\omega - \omega_0) + \delta(\omega + \omega_0)]$$

Para obtermos a solução basta tirar a TF jogando $Y(\omega)$ na Eq. 7.23:

$$\begin{aligned} y(t) &= \frac{A}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{i\omega t}}{\Omega^2 - \omega^2} [\delta(\omega - \omega_0) + \delta(\omega + \omega_0)] d\omega = \frac{A}{2} \frac{e^{i\omega_0 t} + e^{-i\omega_0 t}}{\Omega^2 - \omega_0^2} \\ &= \frac{A}{\Omega^2 - \omega_0^2} \cos(\omega_0 t), \end{aligned}$$

onde usamos novamente o cosseno em exponenciais complexas (Eq. B.2) e o resultado

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\delta(\omega \pm \omega_0)}{\Omega^2 - \omega^2} e^{i\omega t} d\omega = \frac{e^{\mp i\omega_0 t}}{\Omega^2 - \omega_0^2}. \quad (7.26)$$

7.2.3 Representação de momento

Uma das aplicações de TF é a conexão entre a representação de posição e de momento em Mecânica Quântica. Nesta seção mostramos como ir de uma para outra. Tradicionalmente a Equação de Schrodinger 1D é resolvida em termos da função de onda $\psi(x)$ onde x é a posição. Neste caso temos as duas propriedades:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1, \quad \langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) x \psi(x) dx \quad (7.27)$$

A equação da esquerda diz que a partícula tem que estar em algum lugar! Já a equação da direita é a forma de se calcular o valor esperado para x , ou seja, a posição mais provável para a partícula. Já na representação de momento temos que $g(p)$ é a função de onda em

função do momento e as mesmas propriedades tem que ser satisfeitas:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |g(p)|^2 dp = 1, \quad \langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} g^*(p) p g(p) dp \quad (7.28)$$

A função $g(p)$ é então calculada como a transformada de Fourier de $\psi(x)$, tanto no caso 1D quanto em 3D:

$$g(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) e^{-ipx/\hbar} dx, \quad g(\mathbf{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \iiint_{-\infty}^{\infty} \psi(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} d^3 r \quad (7.29)$$

Exemplo 7.5

Átomo de Hidrogênio. A solução para a função de onda do átomo de hidrogênio no estado fundamental é:

$$\psi(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{1}{\pi a_0^3}} e^{r/a_0}, \quad (7.30)$$

onde a_0 é o raio de Bohr. Calcule essa função de onda na representação de momento.

Da definição (Eq. 7.29) temos:

$$g(\mathbf{p}) = \sqrt{\frac{1}{\pi a_0^3}} \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \iiint_{-\infty}^{\infty} \exp(r/a_0 - i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar) d^3 r = \frac{2^{3/2}}{\pi} \frac{\sqrt{a_0^3 \hbar^5}}{(a_0^2 p^2 + \hbar^2)^2}, \quad (7.31)$$

onde usamos a Eq. B.8 direita.

Problemas

7.8) Calcule a Transformada de Fourier de todas as funções do problema 7.2.

7.9) Mostre que as transformadas de Fourier seno e cosseno (Eqs. 7.20) de e^{-at} são:

$$g_s(\omega) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\omega}{\omega^2 + a^2}, \quad g_c(\omega) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{a}{\omega^2 + a^2}. \quad (7.32)$$

Dica: integre por partes duas vezes.

7.10) Deduza a Eq. 7.26.

7.11) Mostre que:

$$\int_0^\infty \frac{1 - \cos \omega\pi}{\omega} \sin \omega d\omega = \frac{\pi}{2}, \quad \int_0^\infty \frac{1 - \cos \omega\pi}{\omega} \sin \pi\omega d\omega = \frac{\pi}{4}.$$

7.12) a) Seja $f(x) = \sin x$ para $0 < x < \pi$ e $f(x) = 0$ fora desse intervalo. Encontre a expansão em série de $f(x)$. Dica: expanda $\sin x$ em uma série de Fourier. b) Mostre que o resultado pode ser escrito como:

$$f(x) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \frac{\cos \varphi x + \cos \varphi(x - \pi)}{1 - \varphi^2} d\varphi.$$

7.13) ★★ Uma partícula livre em mecânica quântica é descrita pela onda plana:

$$\psi_k(x, t) = \exp \left(ikx - i \frac{\hbar k^2}{2m} t \right).$$

A solução geral será a superposição de ondas com momentos diferentes balanceada por peso $\varphi(k)$:

$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(k) \psi_k(x, t) dk.$$

a) Encontre os pesos $\varphi(k)$ dado que $\Psi(x, 0) = e^{-x^2/2a^2}$. b) Usando o resultado do item a), encontre $\Psi(x, t)$ por integração direta.

7.3 Transformada de Laplace

A outra transformada também utilizada em física é a Transformada de Laplace (TL) definida como:

$$f(s) = \mathcal{L}\{F(t)\} = \lim_{a \rightarrow \infty} \int_0^a e^{-st} F(t) dt = \int_0^\infty e^{-st} F(t) dt, \quad t > 0. \quad (7.33)$$

A TL é mais instável do que a TF, já que vários detalhes podem fazer com que não exista a integral, como por exemplo $t < 0$. Por exemplo não existe a TL de $F(t) = e^{t^2}$ já que a integral correspondente diverge. Porém, para algumas funções pode ser que a integral $\int_0^\infty F(t) dt$ não exista mas que a TL exista. Neste caso $F(t)$ tem chamada ordem exponencial. Porém, como a TF, a TL é linear:

$$\mathcal{L}\{aF_1(t) + bF_2(t)\} = \int_0^\infty e^{-st} [aF_1(t) + bF_2(t)] dt = a\mathcal{L}\{F_1(t)\} + b\mathcal{L}\{F_2(t)\}.$$

Uma generalização da TL é substituir s por $s - a$. Nesse caso:

$$f(s - a) = \int_0^\infty e^{-(s-a)t} F(t) dt = \int_0^\infty e^{at} e^{-st} F(t) dt = \mathcal{L}\{e^{at} F(t)\}. \quad (7.34)$$

Outra modificação possível é a translação que consiste em multiplicar $f(s)$ por e^{-bs} :

$$e^{-bs} f(s) = \int_0^\infty e^{-s(b+t)} F(t) dt = \int_b^\infty e^{-s\tau} F(\tau - b) d\tau \quad (7.35)$$

onde $\tau = t + b$. Porém, assumindo $F(t) = 0$ para $t < 0$ implica que $F(\tau - b) = 0$ para $0 < \tau < b$. Assim podemos estender o limite inferior da última integral na Eq. 7.35 para 0. Logo:

$$e^{-bs} f(s) = \int_0^\infty e^{-s\tau} F(\tau - b) d\tau = \mathcal{L}\{F(t - b)\}.$$

7.3.1 TL de funções elementares

Quando existe a TL é uma operação direta. Por exemplo, da definição (Eq. 7.33), temos os casos:

$$\mathcal{L}\{1\} = \int_0^\infty e^{-st} dt = -\frac{e^{-st}}{s} \Big|_0^\infty = \frac{1}{s}, \quad (7.36)$$

$$\mathcal{L}\{e^{kt}\} = \int_0^\infty e^{-st} e^{kt} dt = \frac{e^{(k-s)t}}{k-s} \Big|_0^\infty = \frac{1}{s-k}, \quad s > k. \quad (7.37)$$

$$\mathcal{L}\{e^{-kt}\} = \int_0^\infty e^{-st} e^{-kt} dt = -\frac{e^{-(k+s)t}}{k+s} \Big|_0^\infty = \frac{1}{s+k}. \quad (7.38)$$

Lembrando que em ambos os casos o denominador deve ser positivo. Escrevendo seno e cosseno hiperbólico em função das exponenciais (Eqs. B.3) e usando os dois resultados acima obtemos facilmente suas transformadas de Laplace:

$$\mathcal{L}\{\cosh kt\} = \frac{1}{2} \mathcal{L}\{e^{kt} + e^{-kt}\} = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{s-k} + \frac{1}{s+k} \right) = \frac{s}{s^2 - k^2}, \quad (7.39)$$

$$\mathcal{L}\{\sinh kt\} = \frac{1}{2} \mathcal{L}\{e^{kt} - e^{-kt}\} = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{s-k} - \frac{1}{s+k} \right) = \frac{k}{s^2 - k^2}. \quad (7.40)$$

As expressões são válidas para $s > k$, de modo que as integrais sejam finitas.

As transformadas de seno e cosseno podem ser encontradas substituindo as Eqs. B.4 nas transformadas de sinh e cosh:

$$\mathcal{L}\{\cos kt\} = \int_0^\infty e^{-st} \cos kt dt = \frac{s}{s^2 + k^2}, \quad \mathcal{L}\{\sin kt\} = \frac{k}{s^2 + k^2}, \quad (7.41)$$

também válidas para $s > 0$. E se diferenciarmos $\mathcal{L}\{\cos kt\}$ em relação a k obtemos:

$$\mathcal{L}\{t \sin kt\} = \int_0^\infty e^{-st} t \sin kt dt = \frac{2sk}{(s^2 + k^2)^2}. \quad (7.42)$$

Outro resultado útil é¹¹

$$\mathcal{L}\{t^k a^{-at}\} = \int_0^\infty t^k a^{-at} e^{-st} dt = \frac{k!}{(s+a)^{k+1}}, \quad \Re(s+a) > 0. \quad (7.43)$$

Por último vale mencionar a convolução de TL ou Teorema da Convolução. Sejam duas TL:

$$f_1(s) = \mathcal{L}\{F_1(t)\}, \quad f_2(s) = \mathcal{L}\{F_2(t)\}. \quad (7.44)$$

¹¹ $\Re(z)$ é a parte real do número complexo z .

A convolução (ou Teorema de Faltung) diz que:

$$f_1(s)f_2(s) = \mathcal{L} \left\{ \int_0^t F_1(t-z)F_2(z)dz \right\} = \{F_1 * F_2\} \quad (7.45)$$

Tirando a inversa temos:

$$\mathcal{L}^{-1} \{f_1(s)f_2(s)\} = \int_0^t F_1(t-z)F_2(z)dz. \quad (7.46)$$

7.3.2 Derivadas

Como a TF, uma das grandes aplicações da TL é na solução de equações diferenciais. Por exemplo aplicando a TL transforma equações diferenciais acopladas com coeficientes constantes em um sistema de equações algébricas. A TL de $F'(t)$ (derivada de $F(t)$) é, integrando por partes:

$$\begin{aligned} \mathcal{L} \{F'(t)\} &= \int_0^\infty e^{-st} \frac{dF(t)}{dt} dt = e^{-st} F(t) \Big|_0^\infty - s \int_0^\infty e^{-st} F(t) dt \\ &= s\mathcal{L} \{F(t)\} - F(0) \end{aligned} \quad (7.47)$$

A TL da derivada de uma função nada mais é do que a TF da função vezes o parâmetro s subtraído da função avaliada em zero¹². Aplicando novamente esse resultado a TL das outras derivadas pode ser calculada diretamente:

$$\begin{aligned} \mathcal{L} \{F^{(2)}(t)\} &= s^2 \mathcal{L} \{F(t)\} - sF(0) - F'(0) \\ \mathcal{L} \{F^{(n)}(t)\} &= s^n \mathcal{L} \{F(t)\} - s^{n-1}F(0) - s^{n-2}F'(0) - \dots - F^{(n-1)}(0) \end{aligned}$$

A TL da derivada de uma função substitui a derivada por uma multiplicação, como a TF.

A transformação de Laplace das derivadas é aplicada na solução de equações diferenciais. Em geral, usando TL pode resultar em uma solução mais direta e simples da ED.

Exemplo 7.6

Resolva $y'' + 4y' + 4y = t^2e^{-2t}$ com as condições iniciais $y(0) = y_0 = 0$ e $y'(0) = y'_0 = 0$.

Usando as transformadas das derivadas, a TL da ED é $s^2Y - sy_0 - y'_0 + 4sY - 4y_0 + 4Y = \mathcal{L} \{t^2e^{-2t}\}$, onde $\mathcal{L} \{y(t)\} = Y(s)$. Usando a Eq. 7.43 temos que:

$$\mathcal{L} \{t^2e^{-2t}\} = \frac{2}{(s+2)^3}. \quad (7.48)$$

Usando esse resultado e as condições iniciais temos $(s^2 + 4s + 4)Y = 2/(s+2)^3$, ou $Y(s) = \frac{2}{(s+2)^5}$, já que $s^2 + 4s + 4 = (s+2)^2$. Precisamos agora achar a TL inversa.

¹²Lembrando que $F(0) = F(+0)$, ou seja, o zero deve ser calculado pelo lado positivo.

Novamente usando a Eq. 7.43 temos que:

$$y(t) = \frac{2t^4 e^{-2t}}{4!}.$$

A solução encontrada é apenas uma solução particular que satisfaz as condições iniciais.

7.3.3 Transformada da δ de Dirac

A TL da *delta* de Dirac é direta:

$$\mathcal{L}\{\delta(t-a)\} = \int_0^\infty \delta(t-a)e^{-st}dt = e^{-sa}, \quad a > 0. \quad (7.49)$$

Esta transformada é utilizada na solução de equações diferenciais envolvendo a função δ .

Exemplo 7.7

Resolva $y'' + \omega^2 y = \delta(t - t_0)$ para a seguinte condição inicial $y_0 = y'_0 = 0$.

Tirando a TL desta equação temos $(s^2 + \omega^2)Y = \mathcal{L}\{\delta(t - t_0)\} = e^{-st_0}$, onde $Y = \mathcal{L}\{y\}$. Logo temos $Y = \frac{e^{-st_0}}{s^2 + \omega^2}$.

Esta é a transformada da função seno deslocada (Eqs. 7.34 e 7.41), de forma que a solução é:

$$y(t) = \frac{1}{\omega} \sin \omega(t - t_0), \quad t > t_0. \quad (7.50)$$

Problemas

7.14) a) Usando a Eq. 7.37, prove as Eqs. 7.39 e 7.40. b) Deduza a Eq. 7.48.

7.15) a) Calcule a transformada de Laplace de $\sin kt$ e $\cos kt$ (veja Eqs. 7.41). b) Deduza a Eq. 7.42.

7.16) Usando a Eq. 7.37, deduza os seguintes resultados:

$$\mathcal{L}\left\{\frac{e^{-at} - e^{-bt}}{b-a}\right\} = \frac{1}{(s+a)(s+b)}, \quad \mathcal{L}\left\{\frac{ae^{-at} - be^{-bt}}{a-b}\right\} = \frac{s}{(s+a)(s+b)}, \quad (7.51)$$

ambos válidos para $\Re(s+a) > 0$ e $\Re(s+b) > 0$.

7.17) Deduza os seguintes resultados:

$$\mathcal{L}\{e^{-at} \sin bt\} = \frac{b}{(s+a)^2 + b^2}, \quad \mathcal{L}\{e^{-at} \cos bt\} = \frac{s+a}{(s+a)^2 + b^2}, \quad (7.52)$$

ambos válidos para $\Re(s+a) > \Im(b)$. **Dica:** substitua a por $a+ib$ na Eq. 7.37 e depois por $a-ib$. Some e subtraia os resultados.

7.18) Resolva as seguintes equações diferenciais usando Transformada de Laplace. a) $y'' + 4y' + 4y = e^{-2t}$ com $y_0 = 0$ e $y'_0 = 4$. b) $y'' + y = \sin t$ com $y_0 = 1$ e $y'_0 = 1$. c) $y'' - y = e^{-t} - 2te^{-t}$ com $y_0 = 1$ e $y'_0 = 2$. d) $y'' + 4y' + 5y = 2e^{-2t} \cos t$ com $y_0 = 0$ e $y'_0 = 3$.

7.19) Mostre que:

$$\int_0^\infty \frac{e^{-t\sqrt{3}}}{t} \sin 2t \cos t dt = \frac{\pi}{4}. \quad (7.53)$$

7.20) Resolva as seguintes equações diferenciais usando a TL da δ de Dirac: a) $y'' + 2y' + y = \delta(t-t_0)$. b) $y'' + 2y' + 10y = \delta(t-t_0)$. c) $y''' - y = \delta(t-t_0)$.

7.21) ★★ Transformada de Laplace pode ser utilizada na solução genérica do problema de uma partícula carregada sob ação de campos magnético e elétrico¹³. Seja uma partícula de massa m e carga q em uma região contendo um campo magnético $\mathbf{B} = B\hat{\mathbf{z}}$ e elétrico \mathbf{E} . No instante $t = 0$ a posição da partícula é a origem $\mathbf{r}(0) = (0, 0, 0)$. Considerando a força de Lorentz $\mathbf{F} = q\mathbf{E} + q\mathbf{v} \times \mathbf{B}$, mostre que a segunda Lei de Newton resulta nas seguintes equações de movimento:

$$\frac{d^2x}{dt^2} = \frac{q}{m} \left(\frac{dy}{dt} B + E_x \right), \quad \frac{d^2y}{dt^2} = -\frac{q}{m} \left(\frac{dx}{dt} B - E_y \right), \quad \frac{d^2z}{dt^2} = -\frac{q}{m} E_z.$$

b) Por integração direta mostre que $z(t) = v_3 t + (qE_3 t^2)/(2m)$. c) Mostre que:

$$\begin{aligned} s^2\chi_1(s) - v_1 &= \frac{q}{m} \left(Bs\chi_2(s) + \frac{E_1}{s} \right), \\ s^2\chi_2(s) - v_2 &= -\frac{q}{m} \left(Bs\chi_1(s) - \frac{qE_2}{s} \right), \end{aligned}$$

onde $\chi_1(s)$ e $\chi_2(s)$ são as transformadas de Laplace de $x(t)$ e $y(t)$. d) Considere $\omega_0 = qB/m$ e $\gamma_k = qE_k/m$, com $k = 1, 2$. Encontre $\chi_1(s)$ e $\chi_2(s)$ e após efetuar a transformada inversa mostre que:

$$\begin{aligned} x(t) &= \frac{1}{\omega_0^2} (A_1 - C_2 \cos \omega_0 t + C_1 \sin \omega_0 t), \\ y(t) &= \frac{1}{\omega_0^2} (A_2 - C_1 \cos \omega_0 t + C_2 \sin \omega_0 t), \end{aligned}$$

onde

$$A_1 = \gamma_2 + (\gamma_1 t + v_2)\omega_0, \quad A_2 = \gamma_1 - (\gamma_2 t + v_1)\omega_0, \quad C_k = (-1)^k \gamma_k v_k \omega_0.$$

¹³Dica: M. L. Medeiros, A. C. Santos *Sobre a Dinâmica de Partículas Carregadas em Campos Elétrico e Magnético*, Revista Brasileira de Ensino de Física 39, n. 1, 1302 (2017).

Um pouco de história.

Pierre-Simon, Marquês de Laplace (1749 - 1827) foi um matemático, astrônomo e físico francês que organizou a astronomia matemática, resumindo e ampliando o trabalho de seus predecessores nos cinco volumes do seu *Mécanique Céleste* (Mecânica Celeste) (1799-1825). Esta obra-prima traduziu o estudo geométrico da mecânica clássica usada por Isaac Newton para um estudo baseado em cálculo, conhecido como mecânica física. Ele também formulou a equação de Laplace. A transformada de Laplace aparece em todos os ramos da física matemática. O operador diferencial laplaciano (∇^2) é nomeado em sua homenagem. Laplace foi também quem primeiro formulou os chamados Harmônicos Esféricos em 1783 (antigamente chamado de coeficientes de Laplace). Em 1785 Laplace usou pela primeira vez a Transformada de Laplace para resolver uma equação diferencial a qual Euler e Lagrange tentaram antes. Quando questionado por Napoleão Bonaparte por que não mencionou Deus em seu livro sobre Astronomia, Laplace respondeu: "Não precisei dessa hipótese".

7.4 Transformada de Fourier Discreta (DFT)

Usando a relação de Euler $e^{i\theta} = \cos \theta + i \sin \theta$ podemos reescrever a Eq. 7.1 como:

$$f(x) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \gamma_k \exp\left(i \frac{2\pi kx}{L}\right) \quad (7.54)$$

Os coeficientes serão:

$$\gamma_k = \frac{1}{L} \int_0^L f(x) \exp\left(-i \frac{2\pi kx}{L}\right) dx \quad (7.55)$$

A série de Fourier vale para funções periódicas, ou seja, ela contém uma parte que se repete em toda sua extensão. Quando queremos analisar uma função que não é periódica, também podemos usar série de Fourier. Em geral, precisa-se analisar apenas uma parte da função. Criamos então uma outra função que é essa parte repetida, sendo então periódica. E ai podemos usar tranquilamente a série de Fourier.

Em alguns casos a função $f(x)$ não é contínua, por exemplo, quando vem de medidas experimentais. Neste caso devemos fazer o cálculo numérico da transformada. Usando a regra do trapézio para integração numérica, γ_k da Eq. 7.55 fica:

$$\gamma_k = \frac{1}{N} \left[\frac{1}{2}f(0) + \frac{1}{2}f(L) + \sum_{n=1}^{N-1} f(x_n) \exp\left(-i \frac{2k\pi x_n}{L}\right) \right], \quad (7.56)$$

onde as posições x_n da amostra são da forma:

$$x_n = \frac{n}{N} L \quad (7.57)$$

Mas $f(x)$ é periódica logo $f(0) = f(L)$. Assim:

$$\gamma_k = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} f(x_n) \exp\left(-i\frac{2k\pi x_n}{L}\right) \quad (7.58)$$

Essa fórmula pode ser usada para o cálculo de γ_k em um computador. $f(x)$ pode ser uma música (ou qualquer sinal sonoro) amostrado em intervalos regulares em uma taxa de alguns milhares de vezes por segundo. Fazendo $y_n = f(x_n)$ e usando a Eq. 7.57 podemos reescrever a Eq. 7.58 como:

$$\gamma_k = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} y_n \exp\left(-i\frac{2k\pi n}{N}\right) \quad (7.59)$$

Repare que essa fórmula é mais eficiente pois não é necessário as posições x_n nem o comprimento L .

Assim, a Transformada Discreta de Fourier (DFT, do inglês *Discrete Fourier Transform*¹⁴) é definida como:

$$c_k = \sum_{n=0}^{N-1} y_n \exp\left(-i\frac{2k\pi n}{N}\right) \quad (7.60)$$

Apesar desta equação ter sido deduzida usando a regra do Trapézio (uma aproximação simples de integração), a expressão de c_k é exata. O inverso é obtido apenas trocando de lugar c_k e y_k . Desta forma, uma vez obtido experimentalmente y_k pode-se calcular c_k e voltar para y_k livremente. É necessário calcular c_k apenas até $k = N - 1$ para recuperar as amostras.

Veja que na Eq. 7.60 o somatório vai até $N - 1$ com valores positivos apenas de n , ao contrário da Eq. 7.54, onde o somatório tem valores negativos e vai até infinito, adequado para o cálculo numérico. Essas expressões servem para $f(x)$ real ou complexo.

Suponha que y_n seja real e calculemos c_k para $\frac{1}{2}N < k < N$. Por exemplo escrevamos $k = N - r$ com $1 < r < \frac{1}{2}N$. Logo:

$$\begin{aligned} c_{N-r} &= \sum_{n=0}^{N-1} y_n \exp\left[-i\frac{2(N-r)\pi n}{N}\right] = \sum_{n=0}^{N-1} y_n \exp(-2i\pi n) \exp\left(-i\frac{2\pi rn}{N}\right) \\ &= \sum_{n=0}^{N-1} y_n \exp\left(-i\frac{2\pi rn}{N}\right) = c_r^* \end{aligned} \quad (7.61)$$

já que $\exp(-2i\pi n) = 1$ para qualquer n inteiro. Ou seja, $c_{N-1} = c_1^*$, $c_{N-2} = c_2^*$, e assim sucessivamente. Isto significa que quando calculamos a DFT de uma função y_n real precisamos calcular c_k apenas até $k = \frac{1}{2}N$. A outra metade é apenas o complexo conjugado da primeira. Se N é par, precisamos calcular apenas os $\frac{1}{2}N + 1$ primeiros coeficientes. Se N é ímpar, precisamos calcular apenas os $\frac{1}{2}(N + 1)$ primeiros coeficientes.

¹⁴Iremos utilizar os acrônimos resultados da expressão em inglês por serem os mais populares em todo os países, incluso o Brasil.

7.4.1 DFT inversa

Se a definição de DFT for uma função, será possível obter uma função inversa: dado os coeficientes c_k calcular as amostras y_n ? Vamos fazer um somatório de c_k e usar sua DFT da Eq. 7.60:

$$\begin{aligned} \sum_{k=0}^{N-1} c_k \exp\left(i \frac{2k\pi n}{N}\right) &= \sum_{k=0}^{N-1} \sum_{p=0}^{N-1} y_p c_k \exp\left(-i \frac{2k\pi p}{N}\right) \exp\left(i \frac{2k\pi n}{N}\right), \\ &= \sum_{p=0}^{N-1} y_p \sum_{k=0}^{N-1} \exp\left[i \frac{2k\pi(n-p)}{N}\right]. \end{aligned} \quad (7.62)$$

Agora precisamos calcular a exponencial na Eq. 7.62. Para isso, temos que usar algumas propriedades da função exponencial. A soma finita de uma série geométrica é:

$$s_k = \sum_{k=0}^{N-1} a^k = \frac{1 - a^N}{1 - a},$$

onde a é a razão. Seja $a = \exp(2i\pi m/N)$, sendo m inteiro e obteremos:

$$\sum_{k=0}^{N-1} \exp(2i\pi km/N) = \frac{1 - \exp(2i\pi m)}{1 - \exp(2i\pi m/N)} = 0,$$

já que $e^{2i\pi m} = 1$ para qualquer m inteiro. O problema é quando $m = 0$ que também anula o denominador¹⁵. Mas se $m = 0$ a soma original fica $\sum_{k=0}^{N-1} 1 = N$. Logo:

$$\sum_{k=0}^{N-1} \exp(2i\pi km/N) = \begin{cases} N & \text{se } m = 0 \quad \text{ou múltiplo de } N \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (7.63)$$

Agora podemos usar a Eq. 7.63 para calcular a exponencial da Eq. 7.62. Vamos assumir que $0 < n < N$. Comparando as duas exponenciais temos que $m = n - p$. Como n e p são menores que N , m não poderá ser múltiplo de N , mas poderemos ter $m = 0$ se $n = p$. Assim a exponencial na Eq. 7.62 será N quando $n = p$ e zero caso contrário, o que implica que a soma em p resulta em apenas um termo diferente de zero, aquele que $p = n$, logo:

$$\sum_{k=0}^{N-1} c_k \exp\left(i \frac{2k\pi n}{N}\right) = Ny_n. \quad (7.64)$$

Invertendo essa equação temos:

$$y_n = \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} c_k \exp\left(i \frac{2k\pi n}{N}\right). \quad (7.65)$$

Esta é a DFT inversa, é a volta da Eq. 7.60: se tivermos os coeficientes c_k podemos calcular as amostras y_n . E não é uma aproximação, a Eq. 7.65 é exata. Repare que precisamos apenas até o coeficiente c_k com $k = N - 1$ para recuperar as amostras.

¹⁵E nunca podemos dividir por zero.

A DFT foi definida usando um método numérico simples (Regra do Trapézio) para fazer a integração (veja Eq. 7.56). Porém, calculando a inversa mostramos que as amostras originais podem ser obtidas de forma exata. Isso implica que apesar da regra do Trapézio ser uma aproximação grosseira, a definição da DFT é exata, independente do método numérico escolhido.

Código 7.1

Uma implementação simples da Eq. 7.60 de N amostras reais y_n para todo k no intervalo $0 \leq k \leq \frac{1}{2}N$ é:

```
#Bibliotecas
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
import cmath #operacoes com numeros complexos

#a//b retorna um inteiro arredondando para baixo
#a e b devem ser inteiros

def dft(y): #definicao da funcao
    N = len(y)
    c = np.zeros(N//2+1,complex)
    for k in range(N//2+1):
        for n in range(N):
            c[k] += y[n]*cmath.exp(-2j*cmath.pi*k*n/N)
    return c

#Inicio do programa
y = np.loadtxt("pitch.txt",float) #importando o sinal
c = dft(y)
```

Veja que uma função `dft` é definida para o cálculo da transformada. Em seguida um arquivo contendo o sinal sonoro é importado e depois a função é chamada. Repare que a exponencial utilizada no código é definida dentro do módulo `cmath` o qual é adequado para operações com números complexos. O vetor c também é gerado com formato complexo. Como os coeficientes c_k são complexos é necessário graficar o módulo deles. Na figura 7.3 estão representados os gráficos do sinal sonoro em vermelho e da amplitude (módulo) de sua TFD ($|c_k|$) em azul.

7.4.2 Interpretação física

Matematicamente, a Transformada de Fourier está definida pelas equações da seção anterior. Por exemplo, não foi necessário definir a unidade do eixo x no gráfico da figura 7.3. Porém, em termos de física, qual é a utilidade desse tratamento? Em física, séries e transformada de Fourier tem uma grande aplicação. Quando uma função qualquer é escrita como uma série de Fourier significa que essa função pode ser escrita como um conjunto de senos

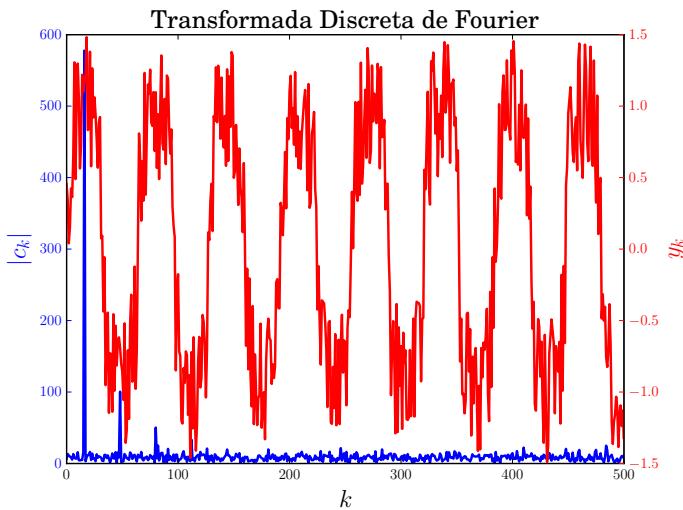


Figura 7.3: Gráfico de um sinal sonoro y_k em vermelho e de sua transformada de Fourier discreta c_k em azul. O código está no Github: https://github.com/paulofreitasgomes/Math_Methods_for_Physics/tree/master/Fourier_Analysis.

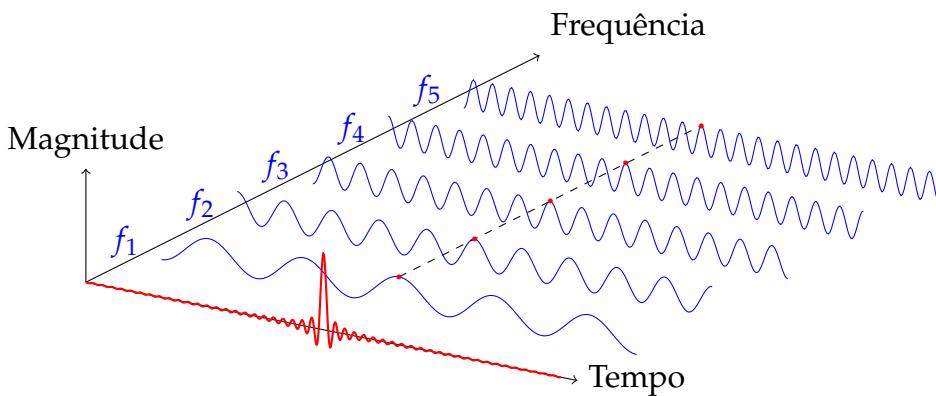


Figura 7.4: Ilustração da conexão entre frequência e tempo através da DFT.

ou cossenos, que são funções oscilatórias. Ou seja, a função tem componentes oscilatórias. O termo da expansão que tiver o maior coeficiente é a frequência dominante da função em questão. A transformada dá direto esses coeficientes permitindo identificar quais frequências estão presentes. É comum um gráfico presente em aparelhos de som como sendo um analisador de sinal mostrando diferentes barras oscilando conforme a música. Cada barra é uma frequência e a altura da barra mostra a intensidade de cada frequência presente na música. Essa intensidade é exatamente os coeficientes c_k obtidos a partir da TFD.

A curva em vermelho no gráfico da figura 7.3 representa o sinal sonoro. Já a curva em azul é TFD a qual representa as frequências presentes no sinal. O eixo horizontal é o k e é proporcional a frequência de oscilação. Repare que há uma frequência dominante próximo de $k = 0$ e outras duas frequências menos intensas próximas de $k = 50$ e $k = 100$. Esses dois últimos são múltiplos (harmônicos) do primeiro. Assim, se ouvíssemos esse sinal sonoro seria apenas uma frequência constante. A oscilação aleatória em volta do sinal (curva em vermelho) é o ruído do sinal sonoro. Vemos então que a TF é nada mais que um analisador de espectros que retorna as frequências dominantes do sinal original.

7.4.3 Transformada de Fourier Rápida

A FFT é mais simples quando o número de amostras é uma potência de 2: $N = 2^m$ com m inteiro. Seja a DFT definida pela Eq. 7.60, vamos dividi-la em dois grupos¹⁶ o primeiro com os termos n pares e o segundo com os termos n ímpares. Se n é par temos que $n = 2r$ com $r = 0, \dots, \frac{1}{2}N - 1$ e o grupo dos pares fica:

$$E_k = \sum_{r=0}^{\frac{1}{2}N-1} y_{2r} \exp\left(-i\frac{2k\pi 2r}{N}\right) = \sum_{r=0}^{\frac{1}{2}N-1} y_{2r} \exp\left(-i\frac{2k\pi r}{\frac{1}{2}N}\right). \quad (7.66)$$

Isto é outra DFT com $N/2$ amostras ao invés de N . Da mesma forma para o grupo de n ímpar temos $n = 2r + 1$:

$$\begin{aligned} \sum_{r=0}^{\frac{1}{2}N-1} y_{2r+1} \exp\left(-i\frac{2k\pi(2r+1)}{N}\right) &= e^{-2ik\pi/N} \sum_{r=0}^{\frac{1}{2}N-1} y_{2r+1} \exp\left(-i\frac{2k\pi r}{\frac{1}{2}N}\right) \\ &= e^{-2ik\pi/N} O_k, \end{aligned} \quad (7.67)$$

onde O_k é outra DFT com $N/2$ amostras. Logo, a DFT total é:

$$c_k = E_k + e^{-2ik\pi/N} O_k, \quad (7.68)$$

que nada mais é a soma de duas DFT E_k e O_k da mesma função da qual c_k é DFT. A diferença é que E_k e O_k são DFTs com metade das amostras porém duplamente mais espaçadas do que c_k . A constante $e^{-2ik\pi/N}$ é chamada de fator *twiddle*. Ou seja, a Eq. 7.68 nos diz que podemos obter a DFT de c_k fazendo duas DFTs com metade dos pontos. Em seguida, aplica-se novamente a Eq. 7.68 para calcular a DFT tanto de E_k quanto de O_k , dividindo cada uma em dois blocos, resultando em 4 DFTs com um quarto das amostras originais. Aplica-se novamente a Eq. 7.68 para essas 4 DFTs, resultando em 8, que aplicando novamente resulta em 16. E assim sucessivamente, até que se chegue em DFT de apenas um ponto, que da Eq. 7.60 é:

$$c_0 = \sum_{n=0}^0 y_n e^0 = y_0 \quad (7.69)$$

Ou seja, a DTF de uma amostra apenas é a própria amostra. Fazendo o processo reverso, começando pela amostra, multiplicando pelo fator de twiddle em cada junção de blocos, etapa por etapa, chega-se a c_k da Eq. 7.68. Esse é o modo de se fazer a FFT.

Conceitualmente a FFT é equivalente com a DFT, como deveria ser. O objetivo da FFT é ser mais rápido, e de fato o é. Na primeira etapa do processo temos N amostras, cada uma sendo a DFT dela mesma. Na segunda etapa as amostras são agrupadas em pares e $N/2$ DFTs são realizadas com dois coeficientes cada, ou seja N coeficientes são calculados (como na primeira etapa). Na terceira etapa haverá $N/4$ DFTs de 4 coeficientes cada, de modo que N coeficientes são calculados novamente. Em todas as etapas sempre haverá N coeficientes calculados. Após m etapas será calculado a DFT de 2^m amostras cada, fazendo no total $N = 2^m$ amostras. Ou seja: $m = \log_2 N$. O número total de coeficientes a serem calculados

¹⁶Sempre podemos fazer essa divisão se $N = 2^m$.

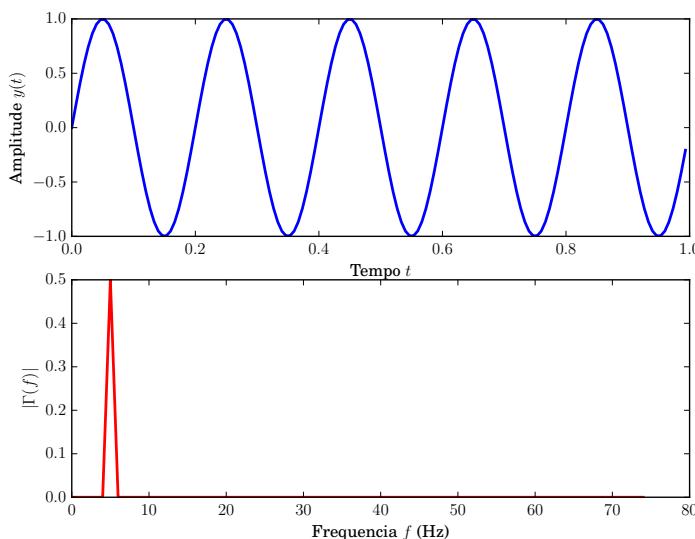


Figura 7.5: Superior: gráfico de $y(t) = \sin(\omega t)$. Inferior: gráfico da Transformada Rápida de Fourier de $y(t)$.

é N em m etapas: $Nm = N \log_2 N$, o que é muito melhor do que os $N^2/2$ coeficientes da definição original. Por exemplo para um milhão de amostras a definição original resulta em $N^2/2 = 5 \times 10^{11}$ operações, o que não é prático em um computador comum. Já a FFT resulta em $N \log_2 N = 2 \times 10^7$ operações, um número factível.

Como bônus, a FFT também pode ser aplicada para a DFT inversa (Eq. 7.65) que tem a mesma forma que a DFT, a menos de um sinal.

Exemplo 7.8

Calcule e grafique a transformada de Fourier de $y(x) = \sin \omega t$.

Neste exemplo vamos implementar computacionalmente o cálculo da transformada rápida $\Gamma(\omega)$ da função seno utilizando o módulo Numpy na plataforma Python. O resultado está na figura 7.5. O módulo Numpy contém as definições de vetores e inúmeras funções matemáticas adequadas para aplicação nesses vetores. Dentre elas há o pacote `numpy.fft`^a que contém as funções de Transformada Rápida de Fourier prontas para serem aplicadas.

^a<https://docs.scipy.org/doc/numpy-1.13.0/reference/routines.fft.html>.

Processamento de imagens

Transformada Rápida de Fourier é amplamente utilizada no processamento digital de imagens, por exemplo para diminuir a resolução de uma imagem, formando um borrão. Da mesma forma pode ser usada para fazer o processo inverso: do borrão recuperar a imagem nítida¹⁷. Vamos ilustrar esse processo.

Suponha que tenhamos uma figura em preto e branco em uma dimensão. O caso real de uma figura colorida em duas dimensões segue o mesmo raciocínio, apenas a matemática

¹⁷Esse recurso é muito explorado em filmes

fica mais carregada. Por simplicidade, vamos começar com um exemplo simples. A figura então pode ser representada por uma função simples $a(x)$ que determina o brilho no ponto x . Para se criar um borrão é necessário definir uma função que o determina: $f(x)$. Se $f(x)$ é uma função espalhada, a figura ficará borrada. Podemos definir então a figura transformada como:

$$b(x) = \int_0^L a(x')f(x - x')dx',$$

onde L é o tamanho da figura. Vamos expandir essa função em uma série de Fourier:

$$b(x) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \tilde{b}_k \exp\left(\frac{2\pi i k x}{L}\right).$$

Os coeficientes são encontrados pela integral:

$$\begin{aligned} \tilde{b}_k &= \frac{1}{L} \int_0^L b(x) \exp\left(-\frac{2\pi i k x}{L}\right) dx = \frac{1}{L} \int_0^L \int_0^L a(x')f(x - x') \exp\left(-\frac{2\pi i k x}{L}\right) dx' dx, \\ &= \frac{1}{L} \int_0^L \int_0^L a(x')f(x - x') \exp\left(-\frac{2\pi i k (x - x')}{L}\right) \exp\left(-\frac{2\pi i k x'}{L}\right) dx' dx, \\ &= \frac{1}{L} \int_0^L a(x') \exp\left(-\frac{2\pi i k x'}{L}\right) \int_{-x'}^{L-x'} f(X) \exp\left(-\frac{2\pi i k X}{L}\right) dX dx. \end{aligned}$$

Repare que usamos a definição de $b(x)$ e também $X = x - x'$. Vamos considerar $f(x)$ como sendo uma repetição do trecho $0 < x < L$ tanto para $-x$ quanto para $+x$, infinitas vezes.

Processamento de música

Transformada de Fourier é muito aplicada no processamento e análise de música e sinais sonoros em geral. Apresentamos aqui uma pequena introdução desta área. Começamos definindo a notação a ser utilizada. Como esperado, vamos utilizar funções senoidais definidas como:

$$x(n) = A \cos(\omega n T + \phi),$$

onde A é a amplitude, $\omega = 2\pi f_0$ é a frequência angular em rads/segundo, f é a frequência em Hz, ϕ é a fase inicial em radianos, n é o índice do tempo (como o tempo é discreto o tempo é t_n), $T = 1/f_s$ é o período de amostragem (do inglês *sampling*) e f_s é a frequência de amostragem¹⁸. Por exemplo, uma forma de definir um seno usando essa notação em Python é:

```
A, f0 = 0.5, 100
phi, fs = math.pi/2, 44100
t = np.arange(-.003, .003, 1.0/fs)
x = A * np.cos(2*math.pi*f0*t+phi)
```

¹⁸Repare que há duas frequências: f_0 determina a duração total do sinal e f_s é o número de pontos contidos no sinal sonoro.

Já um sinal complexo é escrito da forma:

$$\bar{x}(n) = A \exp(\omega nT + \phi) = Ae^{\phi} e^{\omega nT}.$$

Como esperado: $x(n) = \operatorname{Re}[\bar{x}(n)]$. A transformada de Fourier Discreta (Eq. 7.60) é então: $X(k) = \sum_{n=0}^{N-1} x(n) \exp(-2\pi i kn/N)$ onde $k = 0, 1, 2, \dots, N - 1$ é exatamente o índice da frequência. O resultado da transformada é um número complexo $X(k) = re^{i\theta}$ e o módulo r (também chamado de magnitude) retorna o gráfico da intensidade em função da frequência, mostrando qual frequência está contida no sinal $x(n)$. Já a fase tem uma interpretação física mais complicada. Dessa forma pode-se analisar sinais de áudio de instrumentos musicais por exemplo. Para ilustrar com exemplos aqui utilizamos o pacote desenvolvido pelo professor Xavier Serra (e colaboradores) da Universitat Pompeu Fabra em Barcelona (<https://www.upf.edu/web/mtg/sms-tools>) o qual mantém um curso *on line* sobre processamento digital de áudio: <https://www.coursera.org/learn/audio-signal-processing> disponível na plataforma Coursera. Trata-se de um curso completo com aulas, exemplos, exercícios além de todos os códigos estarem disponíveis. Todos os arquivos relacionados estão no Github do autor: <https://github.com/MTG/sms-tools>. Na figura 7.6(a) a análise do som de um oboé. Na parte de cima está o som original, no meio está a amplitude $r = |X(k)|$ da transformada e na parte de baixo está a fase θ . Veja que na figura da amplitude pode-se ver quais frequências estão presentes no som. A mesma análise é feita para o som de um violino, apresentado na figura 7.6(b). Veja que as frequências são diferentes.

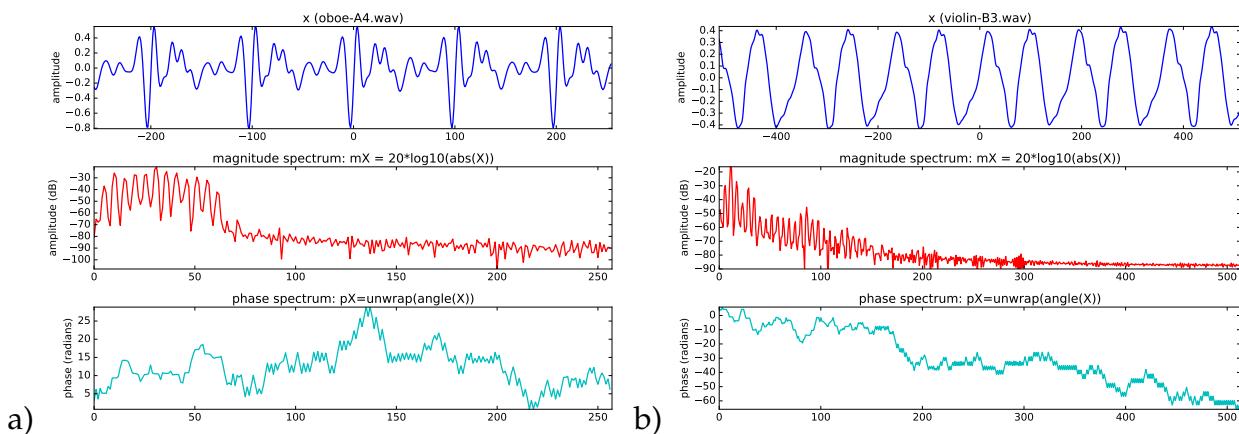


Figura 7.6: Análise do som de um instrumento musical. No gráfico de cima está o som original. No gráfico do meio está a amplitude da transformada de Fourier, mostrando as frequências. No gráfico de baixo está a fase. (a) Oboé. (b) Violino. Fonte: <https://github.com/MTG/sms-tools>.

Problemas

7.22) Calcule a transformada rápida de Fourier da função $y(t) = \cos \omega t$ e faça o gráfico, como na figura 7.5.

7.23) Refaça o gráfico da figura 7.6(a) com o som de outros dois instrumentos. Use alguns dos sons disponíveis no curso do Prof. Xavier Serra: <https://github.com/MTG/sms-tools/tree/master/sounds>.

Equações diferenciais parciais

8.1 Classificação e aplicações na Física



dinâmica de muitos sistemas físicos envolve derivadas segundas tais como aceleração em mecânica clássica e energia cinética em mecânica quântica. Além disso as equações diferenciais (EDs) resultantes são função tanto do tempo quanto das coordenadas espaciais. Essas equações cujas derivadas são em relação a mais de uma variável são chamadas de Equações Diferenciais Parciais (EDP). Vários dos resultados para EDO são válidos para EDP: princípio da superposição.

Vários exemplos desses tipos tem aplicação na física, como mostra a tabela 8.1¹. A Eq. de Laplace é muito comum em física e aparece em eletrostática, magnetostática, hidrodinâmica, difusão de calor e também em gravitação. Já a equação de Poisson é a versão não homogênea da Eq. de Laplace e ocorre novamente em eletrostática e gravitação quando há presença de cargas e massas. Já a Eq. de Helmholtz aparece no estudo de ondas mecânicas, vibrações, acústica, ondas eletromagnéticas e até no estudo de reatores nucleares. Já a Eq. de difusão envolve também o tempo e descreve a difusão de calor. A Eq. de Schrödinger é a Lei de Newton para a Mecânica Quântica, com um papel central na teoria quântica.

As EDPs são classificadas em 3 grandes tipos, como mostra a tabela 8.2. Já quanto aos métodos de solução temos:

- Separação de Variáveis: uma ED parcial é convertida em um conjunto de EDs ordinária, sendo então mais fácil de resolver. Algumas constantes relacionam as diferentes EDOs sendo os autovalores dos operadores. Este método é relacionado com as simetrias da EDP e seu grupo de transformações.
- Função de Green: neste método uma EDP não homogênea é convertida em uma equação integral.

¹Equações de ordem maior que 2 também pode aparecer como $(\nabla^2)^2 \psi = 0$, porém são bem raras e não serão discutidos aqui.

Nome	Equação	Aplicações
Eq. de Laplace	$\nabla^2\psi = 0$	eletrostática e magnetostática
Eq. de Poisson	$\nabla^2\psi = -\rho/\epsilon_0$	eletrostática e gravitação
Eq. de Helmholtz	$\nabla^2\psi \pm k^2\psi = 0$	elasticidade, acústica e ondas
Eq. de Difusão	$\nabla^2\psi(t, \mathbf{r}) = \frac{1}{a^2} \frac{\partial\psi}{\partial t}$	difusão de calor
Eq. de Onda	$\nabla^2\psi = \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2\psi}{\partial t^2}$	propagação de ondas
Eqs. de Maxwell	$\vec{\nabla} \cdot \mathbf{E} \quad \vec{\nabla} \times \mathbf{B}$	eletromagnetismo
Eq. de Schrodinger	$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2\psi + V(x)\psi = i\hbar \frac{\partial\psi}{\partial t}$	mecânica quântica
Eq. de Schrod. it	$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2\psi + V(x)\psi = E\psi$	mecânica quântica
Eq. de Onda Generalizada	$\partial^\mu \partial_\mu \psi(x) = \left[\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} - \nabla^2 \right] \phi = 0$	eltdinâmica
Klein-Gordon	$\partial^\mu \partial_\mu \psi(x) = -\mu^2\psi(x)$	eq. de onda relativística

Tabela 8.1: EDPs importantes em física. Schrod. it significa Schrodinger independente do tempo.

- Métodos numéricos: através da aproximação das derivadas (diferenças finitas por exemplo) é possível converter uma EDP e uma equação algébrica. Porém, métodos numéricos se tornaram essenciais apenas com o advento dos computadores, os quais permitem efetuar quantos cálculos forem necessários para se chegar na precisão desejada.
- Outros: vários outros métodos analíticos de menor importância também são utilizados, como transformada integral.

Nome	Elíptica	Parabólica	Hiperbólica
Termos	∇^2 ou $\nabla^2 + \frac{1}{c} \frac{\partial^2}{\partial t^2}$	$\nabla^2 + a \frac{\partial}{\partial t}$	$\nabla^2 - \frac{1}{c} \frac{\partial^2}{\partial t^2}$
Exemplos	Eq. de Laplace e Poisson	Eq. de Difusão	Eq. de Onda

Tabela 8.2: Definições de EDPs elípticas, parabólicas e hiperbólicas.

8.1.1 Condições de contorno

Um problema físico que consiste em uma EDP é resolvido completamente quando a solução encontrada satisfaz as condições de contorno (CC). Em geral essas condições são valores das funções em questão em algum tempo ou posição. Três tipos principais de condições de contorno (CC) são utilizados em física:

- CC de Cauchy: o valor da função e sua derivada normal são especificados em alguma borda do sistema. Por exemplo em eletrostática o potencial φ e a componente normal do campo elétrico normal \mathbf{E}_n .
- CC de Dirichlet: Apenas o valor da função é especificado no contorno.
- CC de Neumann: a derivada normal (gradiente normal) da função é especificado. No caso eletrostático isso seria novamente \mathbf{E}_n , e assim, a densidade de carga superficial.

Cond. de Contorno	elíptica	Tipos de EDP hiperbólica	parabólica
Cauchy superfície aberta sup. fechada	sem solução física muito restritiva	solução única e estável muito restritiva	muito restritiva muito restritiva
Dirichlet sup. aberta	insuficiente	insuficiente	solução única e estável
Dirichlet sup. fechada	solução única e estável	várias soluções	muito restritiva
Neumann sup. aberta	insuficiente	insuficiente	solução única e estável
Neumann sup. fechada	solução única e estável	várias soluções	muito restritiva

Tabela 8.3: sup. significa superfície.

Um pouco de história.

A letra d para indicar a derivada como em d/dt foi introduzida em 1675 pelo matemático alemão Gottfried Leibniz. Já o símbolo curvado ∂ para indicar a derivada parcial foi introduzido em 1770 pelo matemático francês Marquis de Condorcet. Depois de também usado por Adrien-Marie Legendre e Carl Jacobi o símbolo se tornou padrão. Já o símbolo da diferencial inexata \bar{d} só foi introduzido em 1875 por Carl Neumann.

8.1.2 Operador linear

A derivada parcial é um operador linear, da mesma forma que a derivada normal é:

$$\frac{\partial}{\partial x} [a\phi(x, y) + b\psi(x, y)] = a \frac{\partial\phi(x, y)}{\partial x} + b \frac{\partial\psi(x, y)}{\partial x}.$$

Isso permite escrever uma equação diferencial como sendo um operador \mathcal{L} também linear:

$$\mathcal{L}(a\phi_1 + b\phi_2) = a\mathcal{L}\phi_1 + b\mathcal{L}\phi_2.$$

Assim uma EDP arbitrária pode ser escrita na forma $\mathcal{L}\phi(\mathbf{r}, t) = F(\mathbf{r}, t)$, onde a função F é o termo não homogêneo. Para EDPs homogêneas ($F = 0$) vale o princípio da superposição, como vale no caso das EDOs. Por exemplo para a Eq. de Laplace (veja tabela 8.1) temos que $\mathcal{L} = \nabla^2$, já para a Eq. de Helmholtz $\mathcal{L} = \nabla^2 + \pm k^2$.

8.2 Separação de variáveis em coordenadas cartesianas

Começamos por resolver a Eq. de Laplace $\nabla^2\psi(\mathbf{r}) = 0$, a qual pode ser resultado de diversas possibilidades, uma vez que ∇^2 aparece em diversos tipos de EDP. Em coordenadas cartesianas temos:

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} = 0. \quad (8.1)$$

A forma simples e tradicional de se resolver essa EDP é convertê-la em 3 EDOs supondo separação de variáveis:

$$\psi(x, y, z) = \mathcal{X}(x)\mathcal{Y}(y)\mathcal{Z}(z). \quad (8.2)$$

Essa suposição é válida? Apenas a tentativa pode dizer: se encontrarmos uma solução, a tentativa é válida. Substituindo a Eq. 8.2 na Eq. 8.1 temos:

$$\mathcal{Y}\mathcal{Z}\frac{d^2\mathcal{X}}{dx^2} + \mathcal{X}\mathcal{Z}\frac{d^2\mathcal{Y}}{dy^2} + \mathcal{X}\mathcal{Y}\frac{d^2\mathcal{Z}}{dz^2} = 0.$$

Repare que como agora as derivadas são de funções de uma variável apenas, as derivadas são totais. Dividindo tudo por $\psi = XYZ$ e rearranjando:

$$\frac{1}{\mathcal{X}}\frac{d^2\mathcal{X}}{dx^2} = -\frac{1}{\mathcal{Y}}\frac{d^2\mathcal{Y}}{dy^2} - \frac{1}{\mathcal{Z}}\frac{d^2\mathcal{Z}}{dz^2}. \quad (8.3)$$

A parte esquerda desta equação só depende de x enquanto a parte direita depende de y e z . Duas funções diferentes de variáveis diferentes só podem ser iguais se ambas forem iguais a uma constante. A escolha desta constante é completamente arbitrária e em princípio há uma infinidade delas que permitem encontrar uma solução. Porém, temos também de procurar uma constante que seja adequada em termos do problema físico que estamos resolvendo. Escolhemos a constante tal que:

$$\frac{1}{\mathcal{X}}\frac{d^2\mathcal{X}}{dx^2} = -l^2, \quad -\frac{1}{\mathcal{Y}}\frac{d^2\mathcal{Y}}{dy^2} - \frac{1}{\mathcal{Z}}\frac{d^2\mathcal{Z}}{dz^2} = -l^2 \quad (8.4)$$

Regorganizando a Eq. da direita:

$$\frac{1}{\mathcal{Y}}\frac{d^2\mathcal{Y}}{dy^2} = l^2 - \frac{1}{\mathcal{Z}}\frac{d^2\mathcal{Z}}{dz^2}.$$

Veja que agora temos apenas duas variáveis diferentes. Temos novamente que usar o argumento de que duas funções diferentes de variáveis diferentes só podem ser iguais se ambas forem constantes:

$$\frac{1}{\mathcal{Y}}\frac{d^2\mathcal{Y}}{dy^2} = -m^2, \quad \frac{1}{\mathcal{Z}}\frac{d^2\mathcal{Z}}{dz^2} = n^2, \quad (8.5)$$

onde $n^2 = l^2 + m^2$. Veja que agora temos 3 EDOs (Eqs. 8.4 e 8.5) utilizando três constantes diferentes.

No caso da variável z a solução será uma exponencial real $e^{\pm nz}$. A exponencial positiva poderá ser descartada para condições de contorno para z grande. A solução será identificada de acordo com as constantes utilizadas:

$$\psi_{lmn}(x, y, z) = \mathcal{X}_l(x)\mathcal{Y}_m(y)\mathcal{Z}_n(z),$$

no qual as condições de contorno tem que ser satisfeitas além do requisito $n^2 = l^2 + m^2$. Essa é apenas uma solução possível, e dado o princípio da superposição qualquer soma envolvendo soluções desse tipo também é solução. Logo a solução geral é:

$$\Psi(x, y, z) = \sum_{lm} a_{lm} \mathcal{X}_l(x)\mathcal{Y}_m(y)\mathcal{Z}_n(z).$$

Os coeficientes a_{lm} serão definidos em função das condições de contorno do problema em $z = 0$ por exemplo: $\Psi(x, y, 0) = \psi_0(x, y)$. Lembrando que a função em z deve ser normalizada tal que $Z_n(0) = 1$. Dessa condição de contorno, tem-se:

$$\psi_0(x, y) = \sum_{lm} a_{lm} \mathcal{X}_l(x)\mathcal{Y}_m(y).$$

As relações de ortonormalidade das funções \mathcal{X} e \mathcal{Y} são necessárias para se encontrar os coeficientes a_{lm} a partir dessa condição.

8.2.1 Difusão de calor

Em um sólido com uma distribuição de temperatura independente do tempo $T(\mathbf{r})$, o calor flui da região com maior temperatura para a região de menor temperatura. O fluxo de calor é da forma $\mathbf{j} = -\kappa \vec{\nabla} T(\mathbf{r})$, onde κ é a condutividade do meio. Se há uma fonte de calor o fluxo terá uma variação dada por $\vec{\nabla} \cdot \mathbf{j} = -\kappa \nabla^2 T(\mathbf{r})$. Já quando há uma variação da temperatura com o tempo é porque energia está sendo cedida ou tirada do sistema. A equação de difusão térmica então nesse caso fica:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\kappa}{\sigma\rho} \nabla^2 T. \quad (8.6)$$

Sem dependência temporal

No caso independente do tempo $\partial T / \partial t = 0$, a equação de difusão se torna a Eq. de Laplace, a qual vamos resolver agora. Seja um sólido paralelepípedo cujas arestas estejam paralelas aos eixos coordenados com um dos seus vértices na origem do sistema. Suponhamos que o sólido é finito nas direções x e y mas infinito na direção $z > 0$ ². Na parte de baixo do sólido a condição de contorno para a temperatura é $T(x, y, z = 0) = T_0(x, y)$. Para

²Pode não parecer, mas essa aproximação é muito comum. Ela é válida quando o comprimento ao longo de z é grande e estamos interessados na temperatura apenas em uma das extremidades.

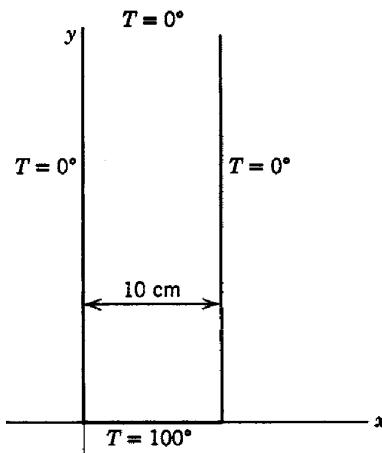


Figura 8.1: Retângulo no plano xy . Exemplo 8.1.

encontrar a distribuição de temperatura $T(\mathbf{r})$ devemos resolver a Eq. de Laplace supondo separação de variáveis como descrito na seção anterior. As soluções para $\mathcal{X}(x)$ e $\mathcal{Y}(y)$ (veja Eqs. 8.4 e 8.5) são funções periódicas (seno e cosseno):

$$\mathcal{X}_l(x) = A_l \cos lx + B_l \sin lx, \quad \mathcal{Y}_m(y) = C_m \cos my + D_m \sin my. \quad (8.7)$$

Já a constante n^2 na equação de $Z(z)$ (Eq. 8.5) é positiva, logo a solução será composta de exponenciais reais: $Z(z) = E_n e^{nz} + F_n e^{-nz}$. Como estamos assumindo o sólido infinito para $z > 0$, temos que $\lim_{z \rightarrow \infty} T(z) = 0$, logo descartamos a exponencial positiva e^{nz} fazendo $E_n = 0$. A solução fica então uma superposição de todas as soluções possíveis:

$$T(x, y, z) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \alpha_{lm} \mathcal{X}_l(x) \mathcal{Y}_m(y) e^{-nz}.$$

Resta impor a condição de contorno $T(x, y, z = 0) = T_0(x, y)$:

$$T_0(x, y) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \alpha_{lm} \mathcal{X}_l(x) \mathcal{Y}_m(y). \quad (8.8)$$

Como $\mathcal{X}(x)$ e $\mathcal{Y}(y)$ são senos e cossenos, a Eq. 8.8 é satisfeita e os coeficientes α_{lm} são encontrados em função de $T_0(x, y)$.

Exemplo 8.1

Suponha um retângulo infinito no plano xy e as condições de contorno como indicado na figura 8.1. Encontre a solução $T(x, y)$.

A Eq. de Laplace neste caso fica $\nabla^2 = \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} = 0$. Para resolver usamos a mesma estratégia para o caso 3D (veja Eq. 8.1): $T(x, y) = \mathcal{X}(x)\mathcal{Y}(y)$. Seguindo o mesmo procedimento até a Eq. 8.4 obtemos:

$$\frac{1}{\mathcal{X}} \frac{d^2 \mathcal{X}}{dx^2} = -k^2, \quad \frac{1}{\mathcal{Y}} \frac{d^2 \mathcal{Y}}{dy^2} = k^2.$$

As soluções são da forma:

$$\mathcal{X}_k(x) = A_k \cos kx + B_k \sin kx, \quad \mathcal{Y}_k(y) = C_k e^{ky} + D_k e^{-ky}. \quad (8.9)$$

Agora devemos impor as condições de contorno. Da figura 8.1 temos $T(x = 0) = 0$. Logo $X_k(0) = A_k$, o que implica que $A_k = 0$. Além disso $T(x = a) = 0$, logo $\mathcal{X}(a) = B_k \sin ka = 0$, o que implica:

$$k = \frac{n\pi x}{a}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (8.10)$$

Da mesma forma $T(y = +\infty) = 0$. Como $\lim_{y \rightarrow +\infty} e^{-ky} = 0$ temos que impor $C_k = 0$. A solução geral é a soma para todos os valores de n :

$$T(x, y) = \sum_{n=1}^{\infty} b_n e^{-n\pi y/a} \sin \frac{n\pi x}{a}. \quad (8.11)$$

Por último falta a condição de contorno $T(x, y = 0) = T_0 = 100$ graus. Da solução geral temos:

$$T_0 = \sum_{n=1}^{\infty} b_n \sin \frac{n\pi x}{a}, \quad (8.12)$$

que é uma expansão em série de Fourier (veja Eq. 7.1). Da Eq. 7.3 os coeficientes são:

$$b_n = \frac{2}{a} \int_0^a T_0 \sin \frac{n\pi x}{a} dx = \frac{2T_0}{a} \quad (8.13)$$

Com dependência temporal

Vamos agora resolver a equação de difusão térmica incluindo a dependência temporal. Considerando um meio anisotrópico a Eq. de difusão térmica mais geral é:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = a^2 \frac{\partial^2 T}{\partial x_1^2} + b^2 \frac{\partial^2 T}{\partial y_1^2} + c^2 \frac{\partial^2 T}{\partial z_1^2}, \quad (8.14)$$

onde a, b e c são as taxas de difusão ao longo dos eixos principais. Quando essas constantes são diferentes, podemos redefinir cada coordenada da forma $x_1 = ax$, $y_1 = by$ e $z_1 = cz$ de forma que a Eq. de difusão térmica fica:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} = 0. \quad (8.15)$$

Começamos com o caso unidimensional:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = a^2 \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}, \quad (8.16)$$

onde agora a é a condutividade do meio. Usamos novamente a separação de variáveis, fazemos a seguinte solução tentativa: $T(x, t) = e^{\alpha x} e^{\beta t}$, o que retorna $\beta = a^2 \alpha^2$. Fisicamente esperamos que a solução no tempo decaia para zero em tempos longos e então fazemos $\alpha = i\omega$ para ω real. A solução fica

$$T = e^{i\omega x} e^{-\omega^2 a^2 t} = (A \cos \omega x + B \sin \omega x) e^{-\omega^2 a^2 t}. \quad (8.17)$$

As constantes A , B (derivada dupla em x) e ω (derivada temporal) devem satisfazer as condições de contorno. Porém, outra possibilidade é fazer um somatório também em ω , que se torna uma intergral:

$$T(x, t) = \int [A(\omega) \cos \omega x + B(\omega) \sin \omega x] e^{-\omega^2 a^2 t} d\omega.$$

Esta expressão é geral o suficiente para satisfazer as condições de contorno em $t = 0$.

Exemplo 8.2

Seja uma barra unidimensional cuja temperatura inicial em $t = 0$ é $T(x, t = 0) = T_0 = 1$ no intervalo $|x| < 1$ e 0 fora dele. Encontre a temperatura em função do tempo em toda a barra.

Em $t = 0$ a equação de difusão térmica se reduz a equação de Laplace cuja solução espacial é formada por senos e cossenos (veja Eq. 8.7). Como precisamos que $T(x = \pm 1, 0) = 0$ eliminamos o termo em seno de modo que $\cos lx = \cos \pm l = 0$. Isso implica em $l = n\pi/2$ para n ímpar. A solução fica $T_n(x, 0) = \cos n\pi x/2$. Porém, como precisamo que $T = 1$ no intervalo $|x| < 1$, a solução fica descrita pela Série de Fourier:

$$T(x, 0) = \sum_{n=1}^{\infty} T_n(x, 0) = \sum_{n=1}^{\infty} a_l \cos n\pi x/2 = 1.$$

Os coeficientes são:

$$a_n = \int_{-1}^1 1 \cos \frac{n\pi x}{2} dx = \frac{4}{n\pi} \sin \frac{n\pi}{2} = \begin{cases} \frac{4(-1)^m}{(2m+1)\pi} & \text{se } n = 2m+1 \\ 0 & \text{se } n = 2m \end{cases} \quad (8.18)$$

Para $t > 0$ a Eq. a ser resolvida é a Eq. 8.16 cuja solução é da forma da Eq. 8.17. Basta então multiplicar a série encontrada pela exponencial temporal:

$$T(x, t) = \frac{4}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^m}{2m+1} \cos \left[(2m+1) \frac{\pi x}{2} \right] \exp \left\{ -t \left[(2m+1) \frac{\pi a}{2} \right]^2 \right\}.$$

3 dimensões

Em 3 dimensões a solução tentava é $T = \exp \left(\frac{i}{a} \mathbf{k} \cdot \mathbf{r} + \beta t \right)$, o que leva a $-\beta = -|\mathbf{k}|^2 = -k^2$ quando substituída na Eq. 8.14. O que leva a seguinte equação:

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} + k^2 T = 0,$$

a qual é chamada de Eq. de Helmholtz. Esta equação pode ser resolvida também por separação de variáveis.

8.2.2 Método Numérico: Diferenças Finitas

A solução numérica consiste em aproximar as derivadas por diferenças. Por exemplo, a primeira derivada pode ser escrita como:

$$\frac{\partial T}{\partial x} \approx \frac{T(x_{i+1}) - T(x_i)}{\Delta x}.$$

Para simplificar a notação usamos: $T(x_i) = T_i$. Essa é a derivada no ponto intermediário entre x_i e x_{i+1} . Da mesma forma podemos aproximar a derivada no ponto $x_{i-1/2}$:

$$\frac{\partial T}{\partial x} \approx \frac{T_i - T_{i-1}}{\Delta x}.$$

Porém, para resolver a Eq. de Laplace precisamos de uma aproximação para a segunda derivada. Usaremos então a primeira derivada nas posições $i \pm 1/2$:

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \approx \frac{T_{i+1/2} - T_{i-1/2}}{\Delta x^2} = \frac{T_{i+1} - 2T_i + T_{i-1}}{(\Delta x)^2} \quad (8.19)$$

Como essa expressão envolve Δx^2 , dizemos que ela é boa até terceira ordem em Δx . Agora, para resolver a equação geral ??, aproximamos cada derivada segunda pela expressão na Eq. 8.19. O que nos dá:

$$T_{i,j,k} = \frac{1}{6} (T_{i+1,j,k} + T_{i-1,j,k} + T_{i,j+1,k} + T_{i,j-1,k} + T_{i,j,k+1} + T_{i,j,k-1}).$$

A eq. de Laplace é útil tanto para descrever a distribuição de temperatura pela difusão térmica como a distribuição de potencial elétrico em uma região sem carga elétrica.

Código 8.1

Como exemplo, vamos calcular a distribuição de temperatura em um quadrado bidimensional. A eq. de Laplace fica:

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} = 0.$$

Aproximando as derivadas por diferenças finitas teremos:

$$\frac{T_{i+1,j} - 2T_{i,j} + T_{i-1,j}}{(\Delta x)^2} + \frac{T_{i,j+1} - 2T_{i,j} + T_{i,j-1}}{(\Delta y)^2} = 0.$$

de forma que:

$$T_{i,j} = \frac{1}{4} (T_{i+1,j} + T_{i-1,j} + T_{i,j+1} + T_{i,j-1}).$$

O cálculo em si da temperatura consiste em calcular individualmente em cada ponto da rede, utilizando os valores dos pontos vizinhos. Um trecho do código é:

```
for iteration in range(0, Niter):
    for i in range(1, lenX-1, delta):
        for j in range(1, lenY-1, delta):
```

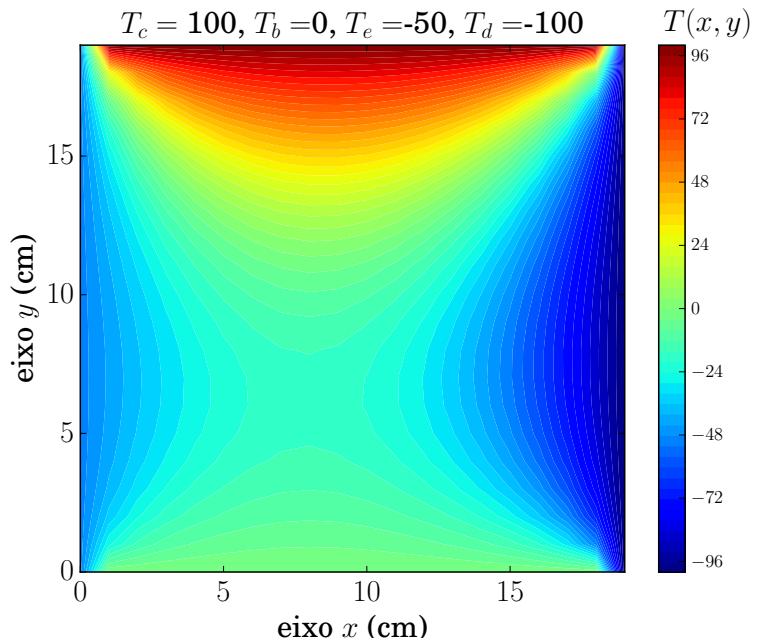


Figura 8.2: Gráfico da temperatura no domínio.

$$T[i, j] = 0.25 * (T[i+1][j] + T[i-1][j] + T[i][j+1] + T[i][j-1])$$

Veja que os dois `for` internos em i e j são suficientes para calcular a função $T[i, j]$ em todo o espaço. Porém, cada vez que é calculado em todo o espaço, a solução converge. Assim, são necessário vários cálculos até confirmar a convergência. Essa é a função do primeiro `for` na variável `iteration` que não aparece na conta em si: apenas repetir o cálculo de $T[i, j]$ N_{iter} vezes. Repare que o número de iterações N_{iter} tem que ser suficiente para que a convergência seja obtida. Assim, nos primeiros cálculo é necessário ir aumentando o seu valor até ser verificado que a solução de fato convergiu.

Na figura 8.2 está o resultado do cálculo. O código que faz o cálculo e gera a figura está [Github](#)^a.

^ahttps://github.com/paulofreitasmomes/computationalphysics/blob/master/Termodinamica/laplace_temperatura.py.

8.2.3 Potencial elétrico

O potencial elétrico $V(\mathbf{r})$ em uma região que não contém cargas elétricas também segue a Eq. de Laplace: $\nabla^2 V = 0$ ³. Vamos ilustrar este tema com exemplos.

³Obviamente, se não há carga em todo o espaço o potencial é zero. Porém, estamos interessados em uma região onde não há carga mas que esteja próximo a alguma distribuição de carga de forma que $V \neq 0$.

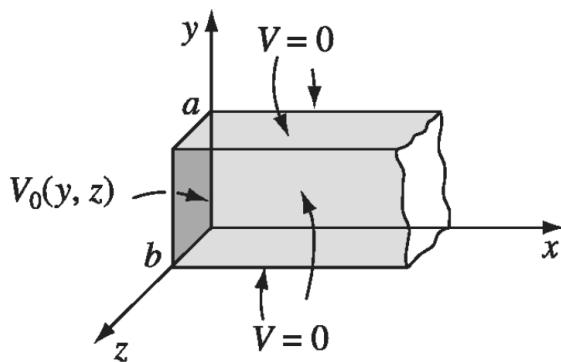


Figura 8.3: Ilustração do tubo metálico ao longo de x do Exemplo 8.3.

Exemplo 8.3

Um longo tubo metálico (figura 8.3) de seção transversal retangular (lados a e b) é aterrado ($V = 0$) com exceção da face $x = 0$. Encontre o potencial dentro do tubo.

Trata-se de um problema 3D e a Eq. a ser resolvida é a Eq. 8.1. As condições de contorno são:

1. $V = 0$ para $y = 0$ e se $y = a$.
2. $V = 0$ para $z = 0$ e se $z = b$.
3. $V \rightarrow 0$ se $x \rightarrow \infty$.
4. $V = V_0(y, z)$ se $x = 0$.

Supondo separação de variáveis chegamos na Eq. 8.3. Igualamos então a função de cada variável a uma constante:

$$\frac{1}{\mathcal{X}} \frac{d^2 \mathcal{X}}{dx^2} = C_1, \quad \frac{1}{\mathcal{Y}} \frac{d^2 \mathcal{Y}}{dy^2} = C_2, \quad \frac{1}{Z} \frac{d^2 Z}{dz^2} = C_3, \quad C_1 + C_2 + C_3 = 0.$$

Agora devemos fazer a escolha adequada das constantes. Como o potencial vai para zero em $x \rightarrow \infty$ fazemos C_1 positivo de modo que as soluções sejam exponenciais reais (veja Eq. 4.31). Por outro lado fazemos C_2 e C_3 negativos para que as soluções sejam oscilatórias e satisfazer as condições de contorno:

$$C_2 = -k^2, \quad C_3 = -l^2, \quad C_1 = k^2 + l^2. \quad (8.20)$$

Assim a Eq. de Laplace fica

$$\frac{1}{\mathcal{X}} \frac{d^2 \mathcal{X}}{dx^2} = k^2 + l^2, \quad \frac{1}{\mathcal{Y}} \frac{d^2 \mathcal{Y}}{dy^2} = -k^2, \quad \frac{1}{Z} \frac{d^2 Z}{dz^2} = -l^2, \quad C_1 + C_2 + C_3 = 0,$$

com as seguintes soluções

$$\mathcal{X}(x) = A \exp(x\sqrt{k^2 + l^2}) + B \exp(-x\sqrt{k^2 + l^2}), \quad (8.21)$$

$$\mathcal{Y}(y) = C \sin ky + D \cos ky, \quad Z(z) = E \sin lz + F \cos lz. \quad (8.22)$$

Da condição de contorno 1, temos:

$$\mathcal{Y}(0) = D = 0, \quad \mathcal{Y}(a) = C \sin ka = 0.$$

A segunda equação exige que ka seja um múltiplo inteiro de π : $ka = n\pi$ com $n = 1, 2, 3, \dots$. O raciocínio para a condição de contorno 2 é a mesma, de forma que:

1 implica em $D = 0$ e $k = n\pi/a$ com n sendo inteiro positivo.

2 implica em $F = 0$ e $l = m\pi/b$ com m sendo inteiro positivo.

3 implica em $A = 0$.

A solução então toma a forma:

$$\begin{aligned} V_{n,m}(\mathbf{r}) &= \mathcal{X}(x)Y(y)Z(z), \\ &= C \sin(n\pi y/a) \sin(m\pi z/b) \exp\left(-\pi x \sqrt{(n/a)^2 + (m/b)^2}\right). \end{aligned}$$

Como a Eq. de Laplace é linear, a solução geral é uma soma destas soluções:

$$V(\mathbf{r}) = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} C_{n,m} \sin(n\pi y/a) \sin(m\pi z/b) \exp\left(-\pi x \sqrt{(n/a)^2 + (m/b)^2}\right). \quad (8.23)$$

Agora falta apenas uma condição de contorno [4]:

$$V(x = 0, y, z) = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} C_{n,m} \sin(n\pi y/a) \sin(m\pi z/b) = V_0(y, z).$$

Esta equação pode ser satisfeita pois a função seno forma um conjunto completo. Multiplicando por $\sin(p\pi y/a) \sin(q\pi z/b)$ e integrando temos:

$$\begin{aligned} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} C_{n,m} \int_0^a \sin(n\pi y/a) \sin(p\pi y/a) dy \int_0^b \sin(m\pi z/b) \sin(q\pi z/b) dz \\ = \int_0^a \int_0^b V_0(y, z) \sin(p\pi y/a) \sin(q\pi z/b) dy dz. \end{aligned}$$

Usando a Eq. 7.4, sobra apenas os termos $n = p$ e $m = q$ de forma que:

$$C_{p,q} = \frac{4}{ab} \int_0^a \int_0^b V_0(y, z) \sin(p\pi y/a) \sin(q\pi z/b) dy dz. \quad (8.24)$$

As Eqs. 8.23 e 8.24 são a solução do problema.

Problemas

8.1) Resolva as eqs. diferenciais para $X(x)$ e $Y(y)$ (contida nas Eqs. 8.4 e 8.5).

8.2) a) Deduza as Eqs. 8.9. b) Deduza a Eq. 8.10.

8.3) Vamos agora considerar uma variação do problema descrito no exemplo ???.1. Seja o retângulo finito de lado a na direção x e b na direção y . A condição de contorno agora deixa de ser $T(y = +\infty) = 0$ para ser $T(y = b) = 0$ °C. a) Mostre que a solução em y agora fica

$Y(y) = B \sinh k(b - y)$ ⁴. b) Mostre que a solução geral é:

$$T(x, y) = \sum_{n=1}^{\infty} B_n \sinh \frac{n\pi(b-y)}{a} \sin \frac{n\pi x}{a}. \quad (8.25)$$

c) Considere agora a última condição de contorno: $T(x, y = 0) = T_0 = 100$ graus. Mostre que a solução final é:

$$T(x, y) = \sum_{\text{ímpar}}^{\infty} \frac{400}{n\pi \sinh 3n\pi} \sinh \frac{n\pi(b-y)}{a} \sin \frac{n\pi x}{a}. \quad (8.26)$$

8.4) Mostre que existe apenas uma solução u da Eq. de Laplace e que satisfaz as condições de contorno nas bordas. Dica: suponha que haja duas soluções u_1 e u_2 e mostre que $u = u_1 - u_2 = 0$ é zero nas bordas.

8.5) Considere o exemplo ??3. Seja $V_0(y, z) = V_0$ uma constante. Encontre os coeficientes $C_{n,m}$.

8.6) Um paralelepípedo oco metálico de lados L_1 , L_2 e L_3 nas direções x , y e z (veja figura 8.4) tem 5 de suas faces aterradas (o que implica em potencial igual a zero). A face $z = L_3$ é isolada das outras e mantida a um potencial V_0 . Encontre o potencial dentro da caixa.

8.7) Mostre que o operador $\nabla^2 + k^2$ é linear, ou seja: $(\nabla^2 + k^2)(a_1\psi_1 + a_2\psi_2) = a_1(\nabla^2 + k^2)\psi_1 + a_2(\nabla^2 + k^2)\psi_2$.

8.8) Uma partícula de massa m é confinada em uma caixa de lados a , b e c . Na teoria da Mecânica Quântica, a partícula é descrita pela função de onda $\Psi(\mathbf{r})$ que satisfaz a equação de Schrödinger:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi = E\Psi.$$

As condições de contorno exigem que Ψ seja zero nas superfícies da caixa. Estas condições impõe restrições nas constantes de separação e consequentemente na energia. a) Calcule a solução para as funções de onda $\Psi(\mathbf{r})$ e as energias E . b) Calcule a energia do estado fundamental. c) Calcule a energia do primeiro estado excitado. Este estado é degenerado?

8.3 Separação de variáveis em coordenadas cilíndricas

A equação de Laplace $\nabla^2 \psi(\mathbf{r}) = 0$ em coordenadas cilíndricas é:

$$\nabla^2 \psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{s} \frac{\partial}{\partial s} \left(s \frac{\partial \psi}{\partial s} \right) + \frac{1}{s^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = 0.$$

⁴ \sinh é a função seno hiperbólico definida na Eq. B.3.

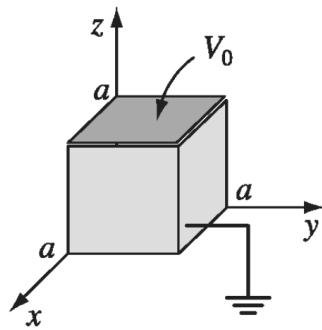


Figura 8.4: Paralelepípedo metálico oco de lados L_1 , L_2 , e L_3 referente ao Problema 8.6.

Como antes assumimos $\psi(\mathbf{r}) = \mathcal{S}(s)\Phi(\varphi)\mathcal{Z}(z)$, de modo que a eq. de Laplace fica:

$$\frac{\Phi\mathcal{Z}}{s} \frac{d}{ds} \left(s \frac{d\mathcal{S}}{ds} \right) + \frac{\mathcal{S}\mathcal{Z}}{s^2} \frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} + P\Phi \frac{d^2\mathcal{Z}}{dz^2} = 0. \quad (8.27)$$

Repare que novamente todas as derivadas parciais agora se tornam derivadas totais, já que cada função depende de apenas uma variável. Agora dividimos a Eq. 8.27 por $P(s)\Phi(\varphi)\mathcal{Z}(z)$ e passamos o último termo para o lado direito da equação:

$$\frac{1}{\mathcal{S}s} \frac{d}{ds} \left(s \frac{d\mathcal{S}}{ds} \right) + \frac{1}{\Phi s^2} \frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} = -\frac{1}{\mathcal{Z}} \frac{d^2\mathcal{Z}}{dz^2}. \quad (8.28)$$

Novamente, se duas funções diferentes de variáveis diferentes são iguais, ambas tem que ser iguais a uma constante. Escolhemos uma constante tal que:

$$\frac{1}{\mathcal{Z}} \frac{d^2\mathcal{Z}}{dz^2} = k^2. \quad (8.29)$$

Esta equação é exatamente a Eq. 4.31 com sinal positivo de modo que a solução é formada por exponenciais reais (Eq. 4.32):

$$\mathcal{Z}(z) = Ae^{kz} + Be^{-kz}. \quad (8.30)$$

Uma vez encontrado a solução da parte em z , substituimos a Eq. 8.29 na Eq. 8.28 e obtemos:

$$\frac{s}{\mathcal{S}} \frac{d}{ds} \left(s \frac{d\mathcal{S}}{ds} \right) + k^2 s^2 = -\frac{1}{\Phi} \frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} = n^2, \quad (8.31)$$

onde já igualamos os dois lados a uma constante na forma de n^2 para que essa equação seja válida. A parte angular fica:

$$\frac{1}{\Phi} \frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} = -n^2. \quad (8.32)$$

Esta equação é exatamente a Eq. 4.31 com sinal negativo de modo que a solução é oscilatória (Eq. 4.33). Porém, fisicamente φ é um ângulo azimutal (o mesmo em coordenadas esféricas) de modo que os ângulos φ e $\varphi + 2\pi$ correspondem a mesma posição angular. Assim, a função Φ deve ter um único valor em cada: $\Phi(\varphi) = \Phi(\varphi + 2\pi)$, o que está de acordo com a solução oscilatória.

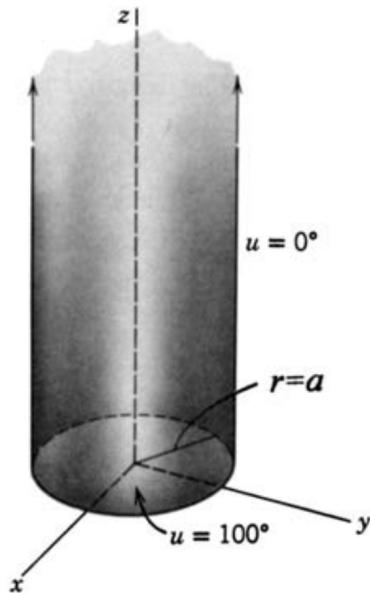


Figura 8.5: Cilindro mantido com uma temperatura constante na base e na lateral.

Uma vez encontrada a solução para Φ falta agora apenas \mathcal{S} . Substituindo a Eq. 8.32 na Eq. 8.31 temos:

$$s \frac{d}{ds} \left(s \frac{d\mathcal{S}}{ds} \right) + (k^2 s^2 - n^2) \mathcal{S} = 0. \quad (8.33)$$

Essa é a chamada equação de Bessel, idêntica a Eq. 5.2, a qual tem como solução:

$$\mathcal{S}(s) = CJ_n(ks) + DY_n(ks). \quad (8.34)$$

J_n e Y_n são as funções de Bessel e de Neumann, ambas soluções da Eq. de Bessel⁵. Veja que na Eq. 8.34 as funções de Bessel são avaliadas em ks , não apenas em s , além de depender de n .

Uma vez encontrada as 3 funções através de 3 EDOs independentes, a solução final é $\psi_{kn}(s, \varphi, z) = \mathcal{S}_n(ks)\Phi_n(\varphi)\mathcal{Z}_k(z)$. Dado a linearidade do laplaciano, a solução geral é uma soma dessas soluções:

$$\Psi(s, \varphi, z) = \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} a_{kn} \mathcal{S}_n(ks) \Phi_n(\varphi) \mathcal{Z}_k(z). \quad (8.35)$$

Se a condição de contorno for tal que $\Psi_{kn}(s, \varphi, 0) = \psi_0(x, y)$ temos que:

$$\psi_0(s, \varphi) = \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} a_{kn} \mathcal{S}_n(ks) \Phi_n(\varphi), \quad (8.36)$$

onde usamos já a normalização $\mathcal{Z}_k(0) = 0$.

8.3.1 Eq. de difusão térmica

Seja um cilindro de altura infinita raio a com a base inferior (em $z = 0$) mantida a uma temperatura constante $u = u_0(s, \varphi)$ e zero graus na lateral (veja figura 8.5). Na condição

⁵A separação de variáveis da equação de Laplace em coordenadas parabólicas também resulta em funções de Bessel para a coordenada radial.

estacionária a distribuição de temperatura $u(\mathbf{r})$ satisfaz a equação de Laplace. Em coordenadas cilíndricas a solução é dada pela Eq. 8.36. Porém, Y_n na Eq. 8.34 diverge na origem $s = 0$, de forma que devemos descartá-la da solução. Logo $\mathcal{S}(s) = J_n(ks)$.

A primeira condição de contorno é a temperatura na lateral: $u(a) = 0$, o que implica $\mathcal{S}(a) = J_n(ka) = J_n(\chi_{mn}) = 0$, onde χ_{mn} é o m -ésimo zero de J_n . A segunda condição de contorno é na variável z . Como o cilindro é infinito para $z > 0$, a temperatura não pode ir para infinito quando z é muito grande. Da solução da eq. 8.30, devemos então descartar a exponencial positiva. A solução fica $u(T) = AJ_n(\chi_{mn}s/a)(\cos \varphi + \sin \varphi)e^{-\chi_{mn}z/a}$. A solução geral é a combinação linear:

$$u(\mathbf{r}) = \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} J_n(\chi_{mn}s/a)(A_{mn} \cos n\varphi + B_{mn} \sin n\varphi)e^{-\chi_{mn}z/a}.$$

Agora podemos aplicar a última condição de contorno $u(z = 0) = u_0(s, \varphi)$:

$$\sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} J_n(\chi_{mn}s/a)(A_{mn} \cos n\varphi + B_{mn} \sin n\varphi) = u_0(s, \varphi).$$

Esta equação pode ser satisfeita pois as funções de Bessel J_n formam uma base completa (veja Eq. 5.37), e os senos e cossenos também. A estratégia é multiplicar ambos os lados por $J_\nu(\chi_{\mu\nu}s/a) \cos \nu\varphi$ e integrar em todo o cilindro. Como a integral dos termos cruzados de seno e cosseno zeram, todos os termos B_{mn} somem e apenas os termos A_{mn} com $n = \nu$ sobrevivem. Já devido a ortogonalidade de J_n apenas o termo $m = \mu$ sobrevive:

$$\begin{aligned} \int_0^a \int_0^{2\pi} u_0(s, \varphi) J_\nu(\chi_{\mu\nu}s/a) (\cos \nu\varphi) sdsd\varphi &= A_{\mu\nu} \int_0^a \int_0^{2\pi} J_\nu^2(\chi_{\mu\nu}s/a) (\cos^2 \nu\varphi) sdsd\varphi, \\ &= \frac{\pi}{2} A_{\mu\nu} a^2 J_{\nu+1}^2(\chi_{\mu\nu}). \end{aligned}$$

Logo:

$$A_{\mu\nu} = \frac{2}{\pi a^2 J_{\nu+1}^2(\chi_{\mu\nu})} \int_0^a \int_0^{2\pi} u_0(s, \varphi) J_\nu(\chi_{\mu\nu}s/a) (\cos \nu\varphi) sdsd\varphi. \quad (8.37)$$

Para encontrar B_{mn} , multiplicamos por $J_\nu(\chi_{\mu\nu}s/a) \sin \nu\varphi$. Após alguma álgebra de forma análoga:

$$B_{\mu\nu} = \frac{2}{\pi a^2 J_{\nu+1}^2(\chi_{\mu\nu})} \int_0^a \int_0^{2\pi} u_0(s, \varphi) J_\nu(\chi_{\mu\nu}s/a) (\sin \nu\varphi) sdsd\varphi \quad (8.38)$$

Exemplo 8.4

Seja um cilindro de altura infinita, raio a e com a base inferior (em $z = 0$) mantida a uma temperatura constante $u = u_0$ e zero graus na lateral (veja figura 8.5). Calcule a distribuição de temperatura $u(\mathbf{r})$ em todo o cilindro.

A penúltima condição de contorno é sobre a parte angular. Fisicamente a solução deve ser independente de φ , logo devemos fazer $n = 0$ de forma que $\Phi(\varphi) = 1$. Voltando

a parte radial, $n = 0$ implica que o $ka = \chi_m$ onde $J_0(\chi_m) = 0$ (χ_m é o m-ésimo zero de J_0). Logo a solução fica: $u(T) = A J_0(\chi_m s/a) e^{-\chi_m z/a}$, onde fizemos $\chi_0 = \chi$. Como a Eq. de Laplace é linear, a solução geral fica:

$$u(T) = \sum_{m=1}^{\infty} A_m J_0(\chi_m s/a) e^{-\chi_m z/a}. \quad (8.39)$$

8.3.2 Separação de variáveis em coordenadas polares

Coordenadas polares são as coordenadas s, φ das coordenadas cilíndricas ignorando a coordenada z . Problemas com simetria ao longo de um cilindro, por sua vez independente de z e com seção transversal circular, podem ser resolvidos mais facilmente nas coordenadas s, φ . Assim procuramos soluções do tipo $\psi(s, \varphi) = \mathcal{S}(s)\Phi(\varphi)$. Desprezando a dependência em z na Eq. 8.28 e multiplicando por s^2 , temos:

$$\frac{s}{\mathcal{S}} \frac{d}{ds} \left(s \frac{d\mathcal{S}}{ds} \right) = -\frac{1}{\Phi} \frac{d^2\Phi}{d\varphi^2}.$$

Para que essa equação seja válida fazemos ambos os lados iguais a uma constante C :

$$\begin{aligned} \frac{s}{\mathcal{S}} \frac{d}{ds} \left(s \frac{d\mathcal{S}}{ds} \right) &= -C, \\ \frac{1}{\Phi} \frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} &= C. \end{aligned}$$

Consideremos a equação em φ primeiro, que é da forma da Eq. 4.31. Se $C > 0$ teremos como soluções exponenciais reais como na Eq. 4.32: $\Phi(\varphi) = Ae^{\varphi\sqrt{C}} + Be^{-\varphi\sqrt{C}}$. Porém é necessário que a parte angular seja periódica:

$$\Phi(\varphi) = \Phi(\varphi + 2\pi). \quad (8.40)$$

A solução em exponenciais reais não tem essa propriedade, de forma que temos então de impor que $C < 0$. Assim, fazemos $C = -k^2$ com k real. Agora a solução será composta de seno e cosseno (veja Eq. 4.33):

$$\Phi(\varphi) = A \cos k\varphi + B \sin k\varphi.$$

Logo, a Eq. 8.40 resulta que $k = 0, 1, 2, 3, \dots$. Repare que $k = 0$ é incluído na solução pois isso resulta que $\Phi(\varphi) = A$ seja uma constante, que é uma solução necessária para o problema.

A equação em s agora fica:

$$s \frac{d}{ds} \left(s \frac{d\mathcal{S}}{ds} \right) = k^2 \mathcal{S}. \quad (8.41)$$

Vamos tentar uma solução em série de potências: $\mathcal{S}(s) = s^p$. Substituindo essa potência na equação anterior temos $p = \pm k$. A solução é então da forma:

$$\mathcal{S}(s) = Ds^k + Es^{-k}, \quad k = 1, 2, 3, \dots$$

$k = 0$ não foi incluído na solução pois neste caso a solução fica com apenas uma constante: $\mathcal{S}(s) = D + E$, mas como a equação diferencial é de ordem 2, é necessário mais uma constante. Para $k = 0$, a Eq. 8.41 fica:

$$s \frac{d}{ds} \left(s \frac{d\mathcal{S}}{ds} \right) = 0.$$

Logo:

$$s \frac{d\mathcal{S}}{ds} = C_1, \quad \Rightarrow \quad \mathcal{S}(s) = C_2 + C_1 \ln s,$$

onde C_1 e C_2 são constantes.

A solução geral fica:

$$\psi(s, \varphi) = A_0 + B_0 \ln s + \sum_{n=1}^{\infty} \left(A_n s^n + \frac{B_n}{s^n} \right) (C_n \cos n\varphi + D_n \sin n\varphi).$$

8.4 Separação de variáveis em coordenadas esféricas

Vamos resolver a equação de Laplace em coordenadas esféricas:

$$\frac{1}{r^2 \sin \theta} \left[\sin \theta \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} \right] = 0. \quad (8.42)$$

Analogamente tentamos a solução $\psi(r, \theta, \varphi) = \mathcal{R}(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi)$, e dividindo tudo por $R\Theta\Phi$ a equação anterior fica:

$$\frac{1}{\mathcal{R}r^2 \sin \theta} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\mathcal{R}}{dr} \right) + \frac{1}{\Theta r^2 \sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \frac{1}{\Phi r^2 \sin^2 \theta} \frac{d^2 \Phi}{d\varphi^2} = 0. \quad (8.43)$$

Repare que as derivadas são totais agora. Isolando a derivada em φ e multiplicando por $r^2 \sin \theta$:

$$\frac{1}{\Phi} \frac{d^2 \Phi}{d\varphi^2} = -r^2 \sin \theta \left[\frac{1}{r^2 \mathcal{R}} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\mathcal{R}}{dr} \right) + \frac{1}{\Theta r^2 \sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) \right].$$

O lado esquerdo só depende de φ e o direito depende de r e θ . Para que essa equação seja válida igualamos os dois lados a uma constante. Escolhemos:

$$\frac{1}{\Phi} \frac{d^2 \Phi}{d\varphi^2} = m^2, \quad (8.44)$$

o que implica em:

$$\frac{1}{r^2 \mathcal{R}} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\mathcal{R}}{dr} \right) + \frac{1}{\Theta r^2 \sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) - \frac{m^2}{r^2 \sin \theta} = 0.$$

Multiplicando por r^2 e rearranjando:

$$\frac{1}{\mathcal{R}} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\mathcal{R}}{dr} \right) = \frac{m^2}{\sin \theta} - \frac{1}{\Theta \sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right).$$

Igualando cada lado a uma constante $l(l+1)$ obtemos:

$$\frac{1}{\mathcal{R}} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\mathcal{R}}{dr} \right) = l(l+1), \quad (8.45)$$

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \left[\frac{m^2}{\sin^2 \theta} - l(l+1) \right] \Theta = 0, \quad (8.46)$$

onde l é um inteiro. Novamente, a equação diferencial parcial foi convertida em três equações diferenciais ordinárias. A equação em θ (Eq. 8.46) é identificada como sendo a equação dos polinômios de Legendre associado. Já a equação radial (Eq. 8.45) tem solução em séries de potência

$$\mathcal{R}(r) = Ar^l + \frac{B}{r^{l+1}}. \quad (8.47)$$

Por exemplo, esta solução em série de potências são usadas na expansão multipolar dos potenciais gravitacional e eletrostático. As potências r^l são chamadas polinômios harmônicos enquanto as potências r^{l+1} são necessárias para tornar a solução completa. As condições de contorno definem quais potências serão solução do problema.

A solução geral fica então sendo a soma das soluções encontradas:

$$\psi(r, \theta, \varphi) = \sum_{l,m} a_{lm} \mathcal{R}_l(r) \Theta_{lm}(\theta) \Phi_{lm}(\varphi). \quad (8.48)$$

Essa separação de variáveis em coordenadas esféricas é de grande importância pois uma série de problemas em física são resolvidos dessa forma (gravitação, eletrostática, física de partículas) na qual a dependência angular recai sobre exatamente as Eqs. 8.44 e 8.46, as quais podem ser resolvidas exatamente. Já em outros casos, como na descrição quântica do átomo de hidrogênio, a parte radial recai em uma equação do tipo:

$$x \frac{d^2y}{dx^2} + (1 + k - x) \frac{dy}{dx} + \alpha y = 0,$$

identificada como sendo a equação do polinômio associado de Laguerre⁶. Já na solução da Eq. de Schrodinger para o oscilador harmônico encontra-se a equação de Hermite:

$$\frac{d^2y}{dx^2} - 2x \frac{dy}{dx} + 2\alpha y = 0.$$

8.4.1 Harmônicos esféricos $Y_l^m(\theta, \varphi)$

Vamos resolver a parte angular da Eq. de Laplace. Resolvendo a Eq. 8.44 encontramos:

$$\Phi(\varphi) = \exp(im\varphi)$$

O ângulo φ é no plano xy logo $\varphi = 0$ e $\varphi = 2\pi$ correspondem a mesma posição angular. Impondo isto na solução encontramos os valores discretos:

$$|m| = 0, 1, 2, 3\dots$$

⁶A eq. do polinômio de Laguerre (que também aparece na solução) é a mesma com $k = 0$.

Já a solução da Eq. 8.46 para Θ é

$$\Theta(\theta) = A \mathcal{P}_l^m(\cos \theta),$$

onde $P_l^m(x)$ são os polinômios associados de Legendre

$$\mathcal{P}_l^m(x) = (1 - x^2)^{|m|/2} \left(\frac{d}{dx} \right)^{|m|} \mathcal{P}_l(x), \quad (8.49)$$

calculados em função do polinômio de Legendre definidos pela Eq. 5.27.

Também há restrições para o valor de l usando a exigência de que a função seja finita:

$$l = |m|, |m| + 1, |m| + 2, |m| + 3, \dots$$

A parte angular da solução fica:

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = \Theta(\theta)\Phi(\varphi) = A \mathcal{P}_l^m(\cos \theta) \exp(im\varphi) \quad (8.50)$$

A solução deve ser normalizada na forma:

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \theta d\theta \left[Y_{l_1}^{m_1}(\theta, \varphi) \right]^* \left[Y_{l_2}^{m_2}(\theta, \varphi) \right] = \delta_{l_1 l_2} \delta_{m_1 m_2} \quad (8.51)$$

A solução normalizada para a parte angular são os chamados harmônicos esféricos⁷:

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = \epsilon \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!} e^{im\varphi} \mathcal{P}_l^m(\cos \theta) \quad (8.52)$$

onde $\epsilon = (-1)^m$ se $m \geq 0$ e $\epsilon = 1$ se $m \leq 0$. Os primeiros termos da série são:

$$\begin{aligned} Y_0^0 &= \sqrt{\frac{1}{4\pi}} & \therefore Y_2^{\pm 2} &= \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta \exp(\pm 2i\varphi) \\ Y_1^0 &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta & \therefore Y_3^0 &= \sqrt{\frac{7}{16\pi}} (5 \cos^3 \theta - 3 \cos \theta) \\ Y_1^{\pm 1} &= \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\varphi} & \therefore Y_3^{\pm 1} &= \mp \sqrt{\frac{21}{64\pi}} \sin \theta (5 \cos^2 \theta - 1) e^{\pm i\varphi} \\ Y_2^0 &= \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1) & \therefore Y_3^{\pm 2} &= \sqrt{\frac{105}{32\pi}} \sin^2 \theta \cos \theta e^{\pm 2i\varphi} \\ Y_2^{\pm 1} &= \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\varphi} & \therefore Y_3^{\pm 3} &= \mp \sqrt{\frac{35}{64\pi}} \sin^3 \theta e^{\pm 3i\varphi} \end{aligned} \quad (8.53)$$

Por último vale mencionar o Teorema da Soma⁸ dos Harmônicos Esféricos. Sejam duas posições (r, θ, φ) e (r', θ', φ') cujos vetores posições tem um ângulo γ entre eles. O Teorema da Soma diz que:

$$\mathcal{P}_l(\cos \gamma) = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^l Y_l^{m*}(\theta', \varphi') Y_l^m(\theta, \varphi), \quad (8.54)$$

onde $\mathcal{P}_l(\cos \gamma)$ é o polinômio de Legendre (não o associado!) dado pela Eq. 5.27.

⁷Introduzidas pela primeira vez por Gustav Ferdinand Mehler (1835-1895).

⁸Para a prova deste, veja [2]

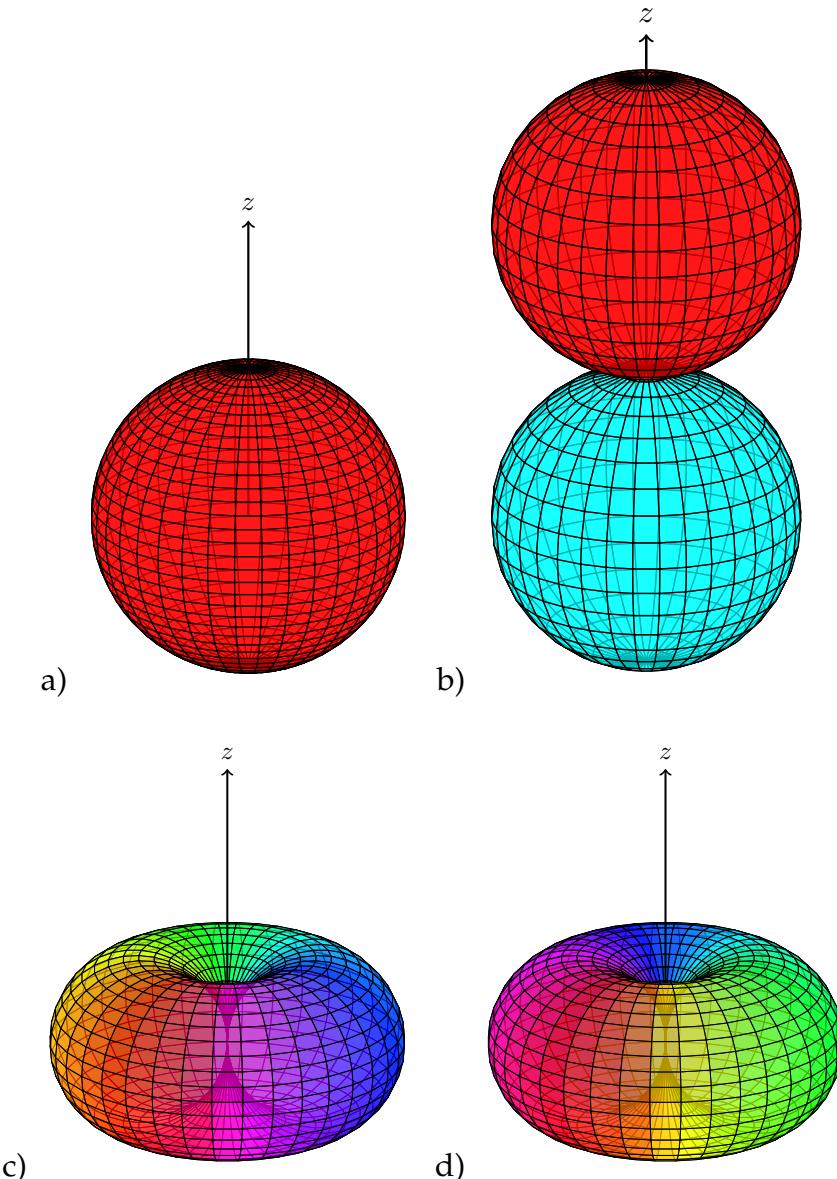


Figura 8.6: Gráfico do módulo $|Y_l^m|$ dos harmônicos esféricos $Y_l^m(\theta, \varphi) = |Y_l^m|e^{i\alpha}$. A cor do volume é determinada pela fase α . (a) $l = m = 0$. (b) $l = 1$ e $m = 0$. (c) $l = 1$ e $m = -1$. (d) $l = 1$ e $m = 1$.

8.4.2 Simetria azimutal

Vamos considerar um caso mais específico no qual a função ψ tem simetria azimutal (não depende do ângulo φ). Temos $V(r, \theta, \varphi) = V(r, \theta)$. Neste caso a Eq. 8.42 se torna:

$$\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial V}{\partial r} \right) + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial V}{\partial \theta} \right) = 0. \quad (8.55)$$

Supondo $V(r, \theta) = \mathcal{R}(r)\Theta(\theta)$ e dividindo tudo por V temos que:

$$\frac{1}{\mathcal{R}} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\mathcal{R}}{dr} \right) + \frac{1}{\Theta \sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) = 0.$$

Igualando o primeiro termo a uma constante teremos:

$$\frac{1}{\mathcal{R}} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\mathcal{R}}{dr} \right) = l(l+1), \quad \frac{1}{\Theta \sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) = -l(l+1). \quad (8.56)$$

As solução para R continuam sendo dada pela Eq. 8.47. Já para Θ as soluções são diretamente os polinômios de Legendre $P_l(x)$ dados pela Eq. 5.27:

$$\Theta(\theta) = P_l(\cos \theta). \quad (8.57)$$

Como a Eq. 8.56 em θ é de segunda ordem é necessário uma segunda solução. Porém essa segunda solução explode em $\theta = 0$ e π , sendo então inadequadas para o problema físico⁹. Como vale o princípio da superposição a solução geral é:

$$\begin{aligned} V(r, \theta) &= \sum_{l=0}^{\infty} \left(A_l r^l + \frac{B_l}{r^{l+1}} \right) P_l(\cos \theta), \\ &= A_0 + \frac{B_0}{r} + \left(A_1 r + \frac{B_1}{r^2} \right) \cos \theta + \left(A_2 r^2 + \frac{B_2}{r^3} \right) (3 \cos^2 \theta - 1) + \dots \end{aligned} \quad (8.58)$$

Exemplo 8.5

O potencial eletrostático $V_0(\theta)$ é especificado na superfície de uma esfera oca de raio a . Encontre o potencial dentro da esfera considerando que não há carga livre no sistema.

O potencial eletrostático $V(\mathbf{r})$ é dado pela Eq. de Poisson:

$$\nabla^2 V(\mathbf{r}) = -\frac{\rho}{\epsilon_0}, \quad (8.59)$$

onde ρ é a densidade de carga. Como não há carga livre temos que $\rho = 0$ e a 8.59 se torna a equação de Laplace $\nabla^2 V(\mathbf{r}) = 0$. Dado a simetria do problema iremos utilizar coordenadas esféricas e o potencial irá depender apenas de r e θ (devido ao potencial na casca). Vale então aqui a descrição da seção 8.4.2 e a solução geral para o potencial é dado pela Eq. 8.58. Porém, como estamos resolvendo para dentro da esfera ($r < a$) o termo B/r^{l+1} não é aceitável pois vai para o infinito quando $r = 0$. A solução fica então:

$$V(r, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} A_l r^l P_l(\cos \theta). \quad (8.60)$$

Uma vez tendo a solução geral precisamos impor as condições de contorno. O potencial na casca é dado $V(a, \theta) = V_0(\theta)$, logo:

$$V_0(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} A_l a^l P_l(\cos \theta). \quad (8.61)$$

Repare que a Eq. 8.61 é a expansão de $V_0(\theta)$ em série de $P_l(\cos \theta)$. Esta equação pode ser satisfeita? A resposta é sim se houver uma forma adequada de se obter

⁹Por exemplo para $l = 0$ a segunda solução é $\Theta(\theta) = \ln \left(\tan \frac{\theta}{2} \right)$.

os coeficientes A_l dessa equação. Para isso usamos o fato de que os Polinômios de Legendre formam um conjunto completo, expresso pela Eq. 5.41. Multiplicando a Eq. 8.61 por $\mathcal{P}_n(\cos \theta) \sin \theta$ e integrando de 0 a π temos:

$$\int_0^\pi V_0(\theta) \mathcal{P}_n(\cos \theta) \sin \theta d\theta = \sum_{l=0}^{\infty} A_l a^l \int_0^\pi \mathcal{P}_l(\cos \theta) \mathcal{P}_n(\cos \theta) \sin \theta d\theta.$$

Porém, da Eq. 5.41 a integral de termos diferentes $\mathcal{P}_l \mathcal{P}_n$ é zero. Assim, na somatória resta então apenas o termo $l = n$:

$$\int_0^\pi V_0(\theta) \mathcal{P}_n(\cos \theta) \sin \theta d\theta = A_n a^n \frac{2}{2n+1}.$$

Logo o coeficiente é dado por:

$$A_n = \frac{2n+1}{2a^n} \int_0^\pi V_0(\theta) \mathcal{P}_n(\cos \theta) \sin \theta d\theta. \quad (8.62)$$

Ou seja, a hipótese expressa na Eq. 8.61 é válida e Eq. 8.60 é a solução do problema com os coeficientes dados pela Eq. 8.62.

A Eq. 5.41 mostra que os polinômios de Legendre formam um conjunto completo e ortogonal (ortonormal) e assim qualquer função pode ser expressa em termos de uma série de \mathcal{P}_n . Senos, cossenos e exponenciais complexas também são outras funções que formam um conjunto ortonormal.

8.4.3 Eq. de Schrodinger

A Eq. de Schrodinger independente do tempo é:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}) = E \Psi(\mathbf{r}) \quad (8.63)$$

onde m é a massa da partícula e $V(\mathbf{r})$ é o potencial aplicado. Os problemas mais frequentes envolvem o potencial dependendo apenas da coordenada radial $V(r)$ o que permite simplificações no cálculo de $\Psi(\mathbf{r})$. Neste caso, em coordenadas esféricas, a Eq. de Schrodinger fica:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \Psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \varphi^2} \right] + V \Psi = E \Psi. \quad (8.64)$$

Procuramos uma solução do tipo $\Psi(\mathbf{r}) = \mathcal{R}(r)\mathcal{Y}(\theta, \varphi)$. Substituindo essa hipótese na Eq. 8.64, dividindo por Ψ e multiplicando por $-2mr^2/\hbar^2$ temos:

$$\left\{ \frac{1}{\mathcal{R}} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\mathcal{R}}{dr} \right) - \frac{2mr^2}{\hbar^2} [V(r) - E] \right\} + \frac{1}{\mathcal{Y}} \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\mathcal{Y}}{d\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{d^2 \mathcal{Y}}{d\varphi^2} \right\} = 0. \quad (8.65)$$

Cada termo em chaves depende de variáveis diferentes. Igualando ambos à constante $l(l+1)$:

$$\left\{ \frac{1}{\mathcal{R}} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\mathcal{R}}{dr} \right) - \frac{2mr^2}{\hbar^2} [V(r) - E] \right\} = l(l+1), \quad (8.66)$$

$$\frac{1}{\mathcal{Y}} \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\mathcal{Y}}{d\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{d^2\mathcal{Y}}{d\varphi^2} \right\} = -l(l+1). \quad (8.67)$$

Como o potencial depende apenas de r não haverá termos angulares, sugerindo que a solução angular continue a ser os harmônicos esféricos (Eq. 8.52). De fato, $\mathcal{Y} = Y_l^m(\theta, \varphi)$ são solução da Eq. 8.67.

Apenas a parte radial é afetada pelo potencial $V(r)$. Reorganizando a Eq. 8.66:

$$\frac{d^2\mathcal{R}}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d\mathcal{R}}{dr} + \left\{ \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(r)] - \frac{l(l+1)}{r^2} \right\} \mathcal{R} = 0 \quad (8.68)$$

Fazendo $R(r) = u(r)/r$ temos:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2u}{dr^2} + \left[V(r) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \right] u = Eu. \quad (8.69)$$

Esta é a equação radial, idêntica a eq. radial de Schrodinger em uma dimensão. A Eq. 8.69 é o máximo que se pode fazer sem especificar $V(r)$. A solução geral fica:

$$\Psi_{lm}(\mathbf{r}) = \frac{u_l(r)}{r} Y_l^m(\theta, \varphi).$$

Exemplo 8.6

Seja uma partícula quântica confinada no poço esférico infinito, cujo potencial é:

$$V(r) = \begin{cases} 0 & \text{se } 0 \leq r < a \\ \infty & \text{se } r > a \end{cases} \quad (8.70)$$

Encontre a energia e a função de onda do estado fundamental.

Fora do poço o potencial é infinito logo a partícula não pode estar ai, então sua função de onda é zero. Dentro do poço a Eq. 8.69 fica:

$$\frac{d^2u}{dr^2} = \left[\frac{l(l+1)}{r^2} - k^2 \right] u, \quad (8.71)$$

onde

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}. \quad (8.72)$$

A condição de contorno é $u(a) = 0$.

O caso mais simples é para $l = 0$ que recai no oscilador harmônico (Eq. 4.33), logo:

$$\frac{d^2u_0}{dr^2} = -k^2 u_0, \quad \Rightarrow u_0(r) = A \sin kr + B \cos kr. \quad (8.73)$$

Porém, a solução é $\mathcal{R}(r) = r(r)/r$, o que explode em $r = 0$. Então fazemos $B = 0$ de forma que $\mathcal{R}(0) = A \sin 0 = 0$. Já a condição de contorno impõe que:

$$\mathcal{R}(r) = A \frac{\sin ka}{a} = 0, \quad (8.74)$$

logo $ka = n\pi$ ou $k = n\pi/a$ para n inteiro. Invertendo a Eq. 8.72 obtemos as energias:

$$E_{n0} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}, \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad (8.75)$$

Usando a Eq. 8.53, a função de onda completa do estado fundamental será:

$$\Psi_{n00}(\mathbf{r}) = \frac{u_0(r)}{r} Y_0^0(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi a}} \frac{\sin(n\pi r/a)}{r},$$

o que está de acordo com a Eq. 5.22. Note que mais um número quântico apareceu, n , que define a energia.

Exemplo 8.7

Vamos generalizar o problema do exemplo 5.1 considerando um poço de potencial finito V_0 para $r > a$. O potencial que a esfera sente agora é:

$$V(r) = \begin{cases} 0 & \text{se } r \leq a \\ V_0 & \text{se } r > a \end{cases}$$

Encontre os autovalores.

Comecemos pela Eq. de Schrodinger: Eq. 8.68. O sinal de $[E - V(r)]$ define se esta equação é a equação de Bessel esférica (Eq. 5.14) ou a sua versão modificada (Eq. 5.23). No caso positivo, que ocorre em $r < a$, a equação é a versão não modificada (exemplos 5.1 e 8.6). Já no caso negativo, que ocorre em $r > a$, teremos a versão modificada, com solução geral:

$$\mathcal{R}(kr) = Ai_l(kr) + Bk_l(kr), \quad \kappa_l = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)},$$

onde $i_l(x)$ e $k_l(x)$ são as soluções dadas pelas Eqs. 5.24. Porém a solução deve ser finita para r muito grande. De fato $\lim_{r \rightarrow \infty} k_l(r) = 0$ enquanto i_l explode. Fazemos então $A = 0$, de forma que a solução geral é:

$$\mathcal{R}_{nl}(r) = \begin{cases} Aj_l(\kappa_{1nl}r) & \text{se } r < a \\ Ck_l(\kappa_{2nl}r) & \text{se } r > a \end{cases} \quad (8.76)$$

onde

$$\kappa_{1nl} = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE_{nl}}, \quad \therefore \quad \kappa_{2nl} = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E_{nl})}. \quad (8.77)$$

Os números quânticos são n e l .

As condições de contorno exigem que $\mathcal{R}_{nl}(r)$ e sua derivada devem ser contínuas em $r = a$:

$$Aj_l(\kappa_{1nl}a) = Ck_l(\kappa_{2nl}a) \quad \therefore \quad A \frac{dj_l}{dr}(\kappa_{1nl}a) = C \frac{dk_l}{dr}(\kappa_{2nl}a) \quad (8.78)$$

Dessa forma, será obtida uma relação entre κ_{1nl} e κ_{2nl} e a energia E_n do auto-estado será a solução dessa equação.

8.4.4 Resumo

A solução geral do Laplaciano em coordenadas esféricas é a Eq. 8.48. Porém veja que encontramos apenas uma das soluções para θ e como a equação de Legendre (Eq. ??Eq. 8.46) é de ordem 2 é necessário encontrar a outra solução LI. De fato temos que:

$$\Theta(\theta) = A\mathcal{P}_l^m(\cos\theta) + B\mathcal{Q}_l^m(\cos\theta),$$

onde A e B são constantes arbitrárias e $\mathcal{Q}_l^m(\cos\theta)$ é o polinômio irregular de Legendre (a segunda solução LI). Da mesma forma

$$\Phi(\varphi) = A \cos m\varphi + B \sin m\varphi.$$

Já para a parte radial temos como solução a Eq. 8.47.

A equação de Helmholtz também é muito comum na física e tem como solução a mesma Eq. 8.48 com as mesmas partes angulares $\Theta(\theta)$ e $\Phi(\varphi)$ definidas acima. Mas a parte radial depende de qual sinal é utilizado:

- $\nabla^2\psi + k^2\psi = 0$: $R(r) = Aj_l(kr) + By_l(kr)$, onde temos a versão esférica (daí o nome) das funções de Bessel do primeiro e segundo tipos (veja tabela 5.1).
- $\nabla^2\psi - k^2\psi = 0$: $R(r) = Ai_l(kr) + Bk_l(kr)$, onde temos a versão esférica das funções de Bessel modificadas do primeiro e segundo tipos.

Problemas

8.9) O potencial eletrostático $V_0(\theta) = k \sin^2(\theta/2)$ é especificado na superfície de uma esfera oca de raio a . Encontre o potencial dentro da esfera considerando que não há carga livre no sistema.

8.10) O potencial $V_0(\theta)$ é definido novamente na superfície da esfera oca de raio a . a) Determine o potencial fora da esfera. b) Suponha que $V_0(\theta) = k \cos^2(\theta/2)$. Encontre o potencial fora da esfera considerando que não há carga livre no sistema.

8.11) Mostre a seguinte relação de recorrência para os polinômios de Legendre P_l :

$$\frac{d\mathcal{P}_{l+1}}{dx} - \frac{d\mathcal{P}_{l-1}}{dx} - (2l+1)\mathcal{P}_l = 0.$$

8.12) Mostre que para $m = 0$ os harmônicos esféricos podem ser escritos como:

$$Y_l^0 = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \mathcal{P}_l(\cos \theta).$$

8.13) Seja

$$g(\theta, \varphi) = \sum_{l=0}^{+\infty} \sum_{m=-l}^l A_{lm} Y_{lm}(\theta, \varphi).$$

Mostre que os coeficientes são¹⁰:

$$A_{lm} = \int d\Omega [Y_l^m(\theta, \varphi)]^* g(\theta, \varphi).$$

8.14) Momento angular tem um papel central na mecânica quântica, especialmente na descrição do átomo de hidrogênio. Os operadores:

$$L_{\pm} = L_x \pm iL_y = \pm e^{\pm i\varphi} \left[\frac{\partial}{\partial \theta} \pm i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right]$$

são chamados de levantamento (L_+) e abaixamento (L_-). Mostre que: a)

$$\begin{aligned} L_+ Y_l^m(\theta, \varphi) &= \sqrt{(l-m)(l+m+1)} Y_l^{m+1}(\theta, \varphi), \\ L_- Y_l^m(\theta, \varphi) &= \sqrt{(l-m)(l-m+1)} Y_l^{m-1}(\theta, \varphi). \end{aligned}$$

b) Usando também o resultado do item a), mostre que

$$Y_l^m = \sqrt{\frac{(l+m)!}{(2l)!(l-m)!}} (L_-)^{l-m} Y_l^l, \quad Y_l^{-m} = \sqrt{\frac{(l-m)!}{(2l)!(l+m)!}} (L_+)^{l+m} Y_l^{-l}.$$

8.15) Átomo de Hidrogênio. Vamos considerar a descrição da Mecânica Quântica do átomo de hidrogênio, no qual o elétron é atraído pelo próton (considerado em repouso) pela interação coulombiana:

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r},$$

onde e é a carga do elétron, ϵ é a permissividade elétrica do vácuo e r é a distância entre os dois. A equação de Schrödinger independente do tempo é:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}) + V\Psi(\mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{r}).$$

Suponha separação de variáveis em coordenadas esféricas $\Psi(\mathbf{r}) = R(r)Y(\theta, \varphi)$. Mostre que a solução da parte angular são os harmônicos esféricos (Eq. 8.52). b) Mostre que a equação radial é:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dr^2} + \left[\frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right] u = Eu.$$

¹⁰Neste caso $d\Omega$ é o elemento de ângulo sólido e $\int d\Omega = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \theta d\theta$.

c) A solução geral é:

$$\Psi_{nlm} = e^{-r/na} \left(\frac{2r}{na} \right)^l \sqrt{\left(\frac{2}{na} \right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3} \left[L_{n-l-1}^{2l+1}(2r/na) \right]} Y_l^m(\theta, \phi).$$

onde:

$$L_q^p(x) = (-1)^p \left(\frac{d}{dx} \right)^p L_q(x), \quad L_q(x) = e^x \left(\frac{d}{dx} \right)^q (e^{-x} x^q),$$

são o polinômio de Laguerre associado e o polinômio de Laguerre. Calcule a função de onda do estado fundamental e do primeiro estado excitado.

8.16) Considere o exemplo 8.7. A energia E_{nl} da partícula é obtida das equações 8.78. Mostre que a energia pode ser obtida pela solução numérica de:

$$k_l(\gamma_{2nl}) \frac{dj_l}{dr}(\gamma_{1nl}) = j_l(\gamma_{1nl}) \frac{dk_l}{dr}(\gamma_{2nl}), \quad (8.79)$$

onde

$$\begin{aligned} \gamma_{1nl} &= \kappa_{1nl} R = \frac{R}{\hbar} \sqrt{2mE_{nl}}, \\ \gamma_{2nl} &= \kappa_{2nl} R = \frac{R}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E_{nl})}. \end{aligned}$$

8.17) Mostre que a condição de normalização da função de onda do exemplo 8.7 é:

$$A_{nl} = \sqrt{\frac{1 - C_l^2 \Gamma_{nl}}{\Lambda_{nl}}}. \quad (8.80)$$

As integrais são:

$$\Gamma_{nl} = \int_0^1 |j_l(\gamma_{1nl} u)|^2 u^2 du \quad \therefore \quad \Lambda_{nl} = \int_1^L |k_l(\gamma_{2nl} u)|^2 u^2 du$$

onde $L > a$ deve ser escolhido convenientemente.

Teoria de Probabilidades

 UITOS problemas em física lidam com eventos impossíveis de serem previstos, por diversas razões. Tais eventos são chamados de aleatórios, como por exemplo o lançamento de um dado no qual é impossível prever qual face irá ficar para cima. O estudo das chamadas variáveis aleatórias faz parte da Teoria das Probabilidades e é essencial no estudo de sistemas físicos aleatórios. Assim, nesses casos, as médias e os erros associados são as grandezas importantes.

Matematicamente falando estatística é baseado em axiomas, mas aqui descrevemos maneiras práticas de calcular probabilidades de eventos aleatórios.

9.1 Definições básicas

Suponha que um evento tenha os resultados possíveis $A_1, A_2, A_3, \dots, A_k$ e que o mesmo seja executado $N \gg 1$ vezes. O resultado A_k ocorre N_k vezes, logo a probabilidade desse resultado é:

$$P(k) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{N_k}{N}, \quad \sum_k P(k) = 1.$$

Logo $0 < P(k) < 1.0$, e $P(k) = 0$ se o resultado A_k nunca ocorrer. Os seguintes axiomas são usados:

- Qualquer probabilidade sempre está entre 0 e 1.0. 0 indica que não há chances do evento ocorrer e 1.0 que o evento irá ocorrer com certeza.
- A soma de todos os eventos possível sempre tem chance máxima 1.0.
- A probabilidade de eventos mutualmente excludentes se somam. Por exemplo a chance de se obter uma cara em dois lançamentos de uma moeda é $1/2 = 1/4 + 1/4$.

Os diferentes valores x_i que uma variável aleatória X pode assumir determinam os possíveis resultados de tal medida. Cada evento ocorre com probabilidade $P(X = x_i) = p_i > 0$, o qual é uma função de X .

9.2 Variáveis aleatórias

Quando jogamos um dado o resultado não é conhecido, apenas sua probabilidade: 1/6 para cada face, já que há 6 faces no total. Seja x_i a i -ésima jogada do dado, logo temos que $P(x_i) = 1/6$. Ou seja x_i é uma variável aleatória discreta com probabilidade uniforme.

Uma variável aleatória que assume os valores discretos $x_1, x_2, x_3, \dots, x_n$ com probabilidades $p_1, p_2, p_3, \dots, p_n$, é tal que $\sum_i^n p_i = 1$. Ou seja, se um experimento é realizado algum resultado possível tem que ser obtido.

As variáveis aleatórias podem ser discretas, como no exemplo do dado acima, ou contínuas. Neste último caso a densidade de probabilidade $f(x)dx$ de uma variável aleatória contínua X é definida como:

$$P(x \leq X \leq x + dx) = f(x)dx,$$

com os seguintes requisitos:

$$f(x) \geq 0, \quad \int f(x) = 1.0.$$

A localização do elétron em um átomo de hidrogênio não é conhecido de forma determinística, a mecânica quântica fornece apenas a probabilidade do elétron estar localizado em uma dada posição. Essa probabilidade é dada pela integral do quadrado da função de onda, e funciona como sendo uma variável aleatória contínua.

9.2.1 Médias e desvio padrão

Quando uma quantidade x_i é observada n vezes o valor médio é definido como:

$$\bar{x} = \langle x \rangle = \sum_i^n x_i/n = \sum_i^n x_i p_i, \tag{9.1}$$

já que $p_i = 1/n$, assumindo que os valores x_i são igualmente prováveis, como por exemplo no lançamento de dados. No caso de uma variável contínua o valor esperado é:

$$\bar{x} = \int xf(x)dx.$$

Já o desvio padrão nos retorna o quanto próximo essa média está do conjunto de pontos, ou seja, se esse conjunto de pontos tem um grande ou pequeno espalhamento em torno da média. A definição de desvio padrão é:

$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_i^n (x_i - \bar{x})^2},$$

onde a raíz quadrada serve para corrigir a unidade. Há outra forma útil de escrever o desvio padrão:

$$\begin{aligned}\sigma^2 &= \frac{1}{n} \sum_i^n (x_i - \langle x \rangle)^2 = \frac{1}{n} \sum_i^n x_i^2 - \frac{2\langle x \rangle}{n} \sum_i^n x_i + \langle x \rangle^2 = \frac{1}{n} \sum_i^n x_i^2 - \langle x \rangle^2, \\ &= \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2.\end{aligned}$$

Essa fórmula é comumente utilizada para se encontrar σ^2 , que por sua vez é chamada de variância.

Assim, para uma variável discreta temos que a variância é:

$$\sigma^2 = \sum_i^n (x_i - \langle x \rangle)^2 p_i.$$

Equanto que para uma variável contínua:

$$\sigma^2 = \int_{-\infty}^{\infty} (x - \langle x \rangle)^2 f(x) dx.$$

De maneira geral se uma variável aleatória $Y = aX + b$ é linearmente relacionada com outra variável aleatória X , temos que o valor médio e a variância são $\langle Y \rangle = a \langle X \rangle + b$ e $\sigma^2(Y) = a^2 \sigma^2(X)$. A generalização da média para ordens superiores é imediata nos casos discreto e contínuo:

$$\begin{aligned}\langle (X - \langle X \rangle)^k \rangle &= \sum_j^n (x_j - \langle X \rangle)^k p_j, \\ \langle (X - \langle X \rangle)^k \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} (x - \langle X \rangle)^k f(x) dx.\end{aligned}$$

9.2.2 Distribuições com mais de uma variável

Em muitos casos a distribuição de probabilidades envolve mais de uma variável aleatória: $f(x, y)$. As grandezas de interesse podem ser definidas de maneira similar ao caso de uma variável. As médias e as variâncias são:

$$\begin{aligned}\langle X \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} x f(x, y) dx dy, & \sigma_X^2 &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} (x - \langle X \rangle)^2 f(x, y) dx dy, \\ \langle Y \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} y f(x, y) dx dy, & \sigma_Y^2 &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} (y - \langle Y \rangle)^2 f(x, y) dx dy.\end{aligned}$$

As duas variáveis aleatórias x e y são independentes se a densidade de probabilidade conjunta puder ser escrita como o produto das densidades: $f(x, y) = f(x)g(y)$. A covariância $c(X, Y)$ mede exatamente a dependência entre as variáveis x e y . A sua versão normalizada $c_n(X, Y) / (\sigma_X \sigma_Y)$ varia entre -1 e $+1$ e é chamada de correlação. A covariância então no caso $f(x, y) = f(x)g(y)$ é definida como:

$$\begin{aligned}c(X, Y) &= \int (x - \langle X \rangle)(y - \langle Y \rangle) f(x, y) dx dy, \\ &= \int (x - \langle X \rangle) f(x) dx \int (y - \langle Y \rangle) g(y) dy, \\ &= (\langle X \rangle - \langle X \rangle)(\langle Y \rangle - \langle Y \rangle) = 0.\end{aligned}$$

Se uma é independente da outra a covariância será zero.

Além disso, se uma das variáveis é integrada resta a distribuição da outra variável:

$$F(x) = \int f(x, y) dy, \quad G(y) = \int f(x, y) dx.$$

Repare que isso é diferente de por exemplo definirmos o valor de uma variável, por exemplo $y = y_0$. Nesse caso teremos a distribuição de probabilidade condicional: $P(X = x | Y = y_0)$ enquanto que a densidade de probabilidade é $f(x, y_0)$.

Exemplo: cartas em um baralho

Em um jogo de cartas um dos jogadores sempre tem que embaralhar as cartas inicialmente para garantir que as chances de tirar cartas em sequência sejam independentes. Vamos usar um jogo de baralho para ilustrar uma distribuição de duas variáveis aleatórias independentes. Suponha que uma primeira carta seja tirada do monte e depois devolvida para ele. Em seguida uma segunda carta é retirada e devolvida também. Definimos as variáveis aleatórias como:

- X = quantidade de carta tirada dentre 10s, valetes, damas, reis e ás.
- Y = quantidade de 2s ou 3s.

Encontre a função distribuição $f(x, y)$, as médias $\langle X \rangle$ e $\langle Y \rangle$, as variâncias σ_X^2 e σ_Y^2 , a covariância normalizada $c_n(X, Y)$ e a distribuição marginal quando a variável y é integrada.

$X = 0$ significa que nenhum 10, valete, dama, rei ou ás foi retirado na primeira carta. Da mesma forma $Y = 0$ significa que nenhum 2 ou 3 foi retirado na segunda carta. Há 4 quartas 10 (4 naipes diferentes), 4 valetes, 4 damas, 4 reis e 4 ás, totalizando $5 \cdot 4 = 20$ cartas no total. A chance de uma dessas sair na primeira carta retirada (variável X) é então $a = 20/52 = 5/13$, já que há no total 52 cartas em um jogo de baralho. Mas essa é a chance na primeira retirada. Já a chance de $X = 1$ nas duas retiradas é $a \cdot a = a^2$.

Da mesma forma para a variável Y há 4 cartas 2 e 4 cartas 3, logo a chance de Y é $b = 2 \cdot 4/52 = 2/13$. Para ocorrer $Y = 1$ nas duas retiradas a chance é b^2 .

Se $X = Y = 0$ significa as cartas possíveis de serem retiradas são 4, 5, 6, 7, 8 e 9. Como cada número aparece 4 vezes (4 naipes diferentes) há no total $6 \cdot 4 = 24$ cartas possíveis quando $X = Y = 0$. Logo a chance dessa terceira possibilidade é $c = 24/52 = 6/13$. Porém isso é a chance em uma retirada. A chance para que isso ocorra duas vezes (na primeira e segunda carta retirada) é $c \cdot c = c^2$.

Assim a função probabilidade desse evento é $f(x, y) = a^x b^y c^{2-x-y} D$, com a restrição $0 < x + y < 2$. Já que se $x = 2$ implica que nas duas retiradas foi obtido algo entre 10 e ás, então não saiu nem 2 nem 3. E vice versa: se $y = 2$ implica que $x = 0$. Já se $x = 1$ pode haver $y = 0$ ou $y = 1$ também. Análogo se $y = 1$. Mas ainda falta a constante D . Essa é o número de

distribuições (ou permutações) de duas cartas em relação as 3 possibilidades com chances a , b e c : $D = 2! / [x!y!(2-x-y)!]$. Logo a distribuição de probabilidade é:

$$\begin{aligned} f(x,y) &= \frac{2!a^xb^yc^{2-x-y}}{x!y!(2-x-y)!}, \\ x,y &= 0,1,2; \quad 0 \leq x+y \leq 2. \end{aligned}$$

Os valores possíveis para essa distribuição são:

$$\begin{aligned} f(0,0) &= \left(\frac{6}{13}\right)^2, & f(1,0) &= 2 \cdot \frac{5}{13} \cdot \frac{6}{13} = \frac{60}{13^2}, \\ f(2,0) &= \left(\frac{5}{13}\right)^2, & f(0,1) &= 2 \cdot \frac{2}{13} \cdot \frac{6}{13} = \frac{24}{13^2}, \\ f(0,2) &= \left(\frac{2}{13}\right)^2, & f(1,1) &= 2 \cdot \frac{5}{13} \cdot \frac{2}{13} = \frac{20}{13^2}. \end{aligned}$$

Repare que a distribuição está normalizada.

Os valores médios são:

$$\begin{aligned} \langle X \rangle &= \sum_{0 \leq x+y \leq 2} xf(x,y) = f(1,0) + f(1,1) + 2f(2,0), \\ &= \frac{60}{13^2} + \frac{20}{13^2} + 2 \left(\frac{5}{13}\right)^2 = \frac{10}{13} = 2a, \\ \langle Y \rangle &= \sum_{0 \leq x+y \leq 2} yf(x,y) = f(0,1) + f(1,1) + 2f(0,2), \\ &= \frac{24}{13^2} + \frac{20}{13^2} + 2 \left(\frac{2}{13}\right)^2 = \frac{4}{13} = 2b. \end{aligned}$$

Veja que ambos os valores esperados são o dobro da chance da carta certa ser retirada, já que são dois eventos de retirada de carta. Agora vamos calcular as variâncias:

$$\begin{aligned} \sigma_X^2 &= \sum_{0 \leq x+y \leq 2} \left(x - \frac{10}{13}\right)^2 f(x,y), \\ &= \left(\frac{10}{13}\right)^2 [f(0,0) + f(0,1) + f(0,2)] + \left(\frac{3}{13}\right)^2 [f(1,0) + f(1,1)] + \left(\frac{16}{13}\right)^2 f(2,0), \\ &= \frac{10^2 \cdot 64 + 3^2 \cdot 80 + 16^2 \cdot 5^2}{13^4} = \frac{80}{13^2}. \end{aligned}$$

Analogamente:

$$\begin{aligned} \sigma_Y^2 &= \sum_{0 \leq x+y \leq 2} \left(y - \frac{4}{13}\right)^2 f(x,y), \\ &= \left(\frac{4}{13}\right)^2 [f(0,0) + f(1,0) + f(2,0)] + \left(\frac{9}{13}\right)^2 [f(0,1) + f(1,1)] + \left(\frac{22}{13}\right)^2 f(0,2), \\ &= \frac{4^2 \cdot 11^2 + 9^2 \cdot 44 + 22^2 \cdot 2^2}{13^4} = \frac{44}{13^2}. \end{aligned}$$

Repare que $\sigma_y^2 < \sigma_x^2$, o que é razoável já que Y envolve dois valores para a carta retirada (2 e 3) enquanto X envolve 5 (dez, valete, dama, rei e ás).

Vamos calcular agora a covariância:

$$\begin{aligned} c(X, Y) &= \sum_{0 \leq x+y \leq 2} \left(x - \frac{10}{13} \right) \left(y - \frac{4}{13} \right) f(x, y), \\ &= \frac{10 \cdot 4}{13^2} \cdot \frac{6^2}{13^2} - \frac{10 \cdot 9}{13^2} \cdot \frac{24}{13^2} - \frac{10 \cdot 22}{13^2} \cdot \frac{4^2}{13^2} - \frac{3 \cdot 4}{13^2} \cdot \frac{60}{13^2} + \frac{3 \cdot 9}{13^2} \cdot \frac{20}{13^2} - \frac{16 \cdot 4}{13^2} \cdot \frac{5^2}{13^2}, \\ &= -\frac{20}{13^2}. \end{aligned}$$

E a correlação c_r entre as variáveis é:

$$c_r = \frac{c(X, Y)}{\sigma_X \sigma_Y} = -\frac{20}{8\sqrt{5 \cdot 11}} = -\frac{1}{2} \sqrt{\frac{5}{11}} = -0.3371.$$

O fato da correlação ser negativa significa que a ausência de uma favorece a observação da outra. De fato, se $X = 0$ há uma chance maior que zero de $Y > 0$. Porém, como há várias cartas que não estão nos dois grupos é razoável que a correlação tenha um módulo pequeno.

Para finalizar a descrição para uma distribuição com duas variáveis vamos calcular a distribuição marginal fazendo a integração (soma) na variável y :

$$F(X = x) = \sum_{y=0}^2 f(x, y).$$

Temos que:

$$\begin{aligned} F(0) &= f(0, 0) + f(0, 1) + f(0, 2) = \left(\frac{6}{13}\right)^2 + \frac{24}{13^2} + \left(\frac{2}{13}\right)^2 = \left(\frac{8}{13}\right)^2, \\ F(1) &= f(1, 0) + f(1, 1) = \frac{60}{13^2} + \frac{20}{13^2} = \frac{80}{13^2}, \\ F(2) &= f(2, 0) = \left(\frac{5}{13}\right)^2. \end{aligned}$$

E esta distribuição está normalizada: $F(0) + F(1) + F(2) = 1.0$. A média é:

$$\langle X \rangle_F = \sum_{x=0} x F(x) = F(1) + 2F(2) = \frac{80 + 2 \cdot 25}{13^2} = \frac{10}{13} = \langle X \rangle.$$

O fato da soma em Y não influiu no valor esperado de X . Já a variância fica:

$$\begin{aligned} \sigma_F^2 &= \sum_{x=0} \left(x - \frac{10}{13} \right)^2 F(x) = \left(\frac{10}{13} \right)^2 \cdot \left(\frac{8}{13} \right)^2 + \left(\frac{3}{13} \right)^2 \cdot \frac{80}{13^2} + \left(\frac{16}{13} \right)^2 \cdot \left(\frac{5}{13} \right)^2, \\ &= \frac{80}{13^2} = \sigma_X^2. \end{aligned}$$

9.2.3 Soma, produto e razão de variáveis aleatórias

9.3 Exemplos de distribuições aleatórias

9.3.1 Distribuição Binomial

Suponha que um evento tenha duas possibilidades distintas: $x = 1$ com chance p e $x = 0$ com chance $1 - p$. Suponha que esse evento seja executado N vezes e a soma desses resultados será $X = \sum_r x_r$. $X = n$ significa que apenas n desses eventos resultaram em 1, enquanto $N - n$ resultaram em 0. Esta é a chamada distribuição binomial:

$$P(X = n) = P(n) = \binom{N}{n} p^n (1 - p)^{N-n} \quad (9.2)$$

onde o coeficiente binomial está definido na Eq. B.13. Desta definição, obtém-se:

$$\langle X \rangle = Np, \quad \langle (X - \langle X \rangle)^2 \rangle = N(1 - p)p.$$

9.3.2 Distribuição de Poisson

Suponha agora q tenhamos ainda apenas os resultados 1 e 0, mas agora queiramos calcular a chance de de ocorrer 1 depois de n zeros. Logo:

$$P(n) = (1 - p)^{n-1} p, \quad n = 1, 2, 3, 4, \dots$$

Esta é a distribuição geométrica. Se a chance de sucesso λ é muito pequena, teremos a distribuição de Poisson:

$$P(n) = \frac{\lambda^n}{n!} e^{-\lambda}, \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots$$

Esta é uma aproximação da distribuição binomial.

9.3.3 Distribuição Gaussiana

A distribuição mais importante da estatística é a Gaussiana:

$$p_g(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{(x - \mu)^2}{2\sigma^2}\right], \quad (9.3)$$

onde μ é o valor médio. Esta distribuição também é uma aproximação da distribuição binomial para o caso de vários resultados possíveis e várias amostras. Se um conjunto de resultados aleatórios x_i para $i = 1, 2, 3, 4, \dots$ for independente, o seu valor médio $\bar{X}_N = \sum_i^N x_i / N$ no limite $N \rightarrow \infty$ sempre irá seguir a distribuição gaussiana. Este é o significado do Teorema Central do Limite e é fundamental no processo de amostragem em um sistema em estudo. Além disso, pode-se mostrar também que σ na Eq. 9.3 é exatamente a variância da média \bar{X}_N , e que além disso $\sigma \propto 1/N$. Ou seja, quanto mais medidas forem realizadas (maior N) menor será o erro associado na média.

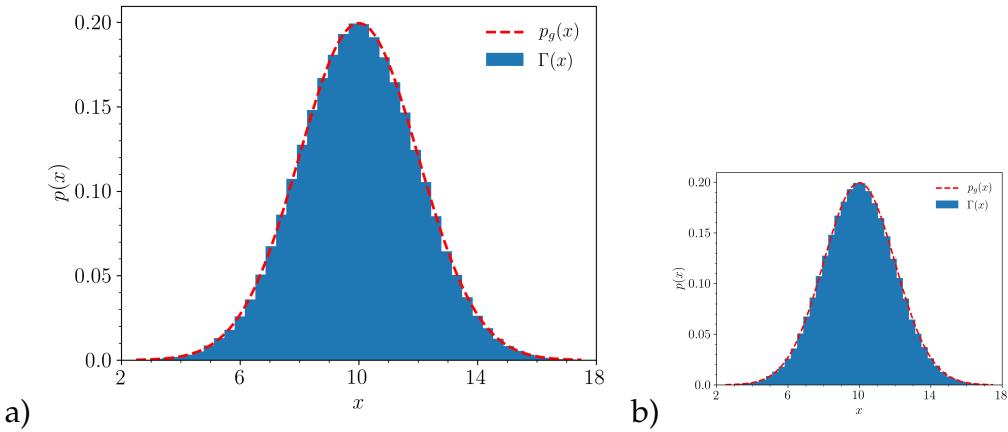


Figura 9.1: (a) Distribuição de probabilidades gaussiana com média $\mu = 10.0, \sigma = 2.0$. Linha tracejada vermelha: PDF da gaussiana $p_g(x)$ (veja Eq. 9.3). Barras azuis: histograma com $N = 10^5$ pontos gerados aleatoriamente. Código da figura: 01 probabilidades. (b) teste.

9.3.4 Lei de potência

A função de distribuição de probabilidades de uma lei de potência é $p(x) = Cx^{-\alpha}$. Suponha que tenhamos um conjunto $\Gamma = (x_1, x_2, x_3 \dots x_N)$ do qual as quantidades $x_i > x_m$ são retiradas de uma distribuição de lei de potência $p(x)$ com um expoente α . No caso contínuo para a lei de potência, a distribuição normalizada é:

$$p_c(x) = \frac{\alpha - 1}{x_m} \left(\frac{x}{x_m} \right)^{-\alpha},$$

tal que $x > x_m$. Já no caso discreto:

$$p_d(x) = \frac{x^{-\alpha}}{\zeta(\alpha, x_m)},$$

onde $\zeta(a, b)$ é a função zeta generalizada ou de Hurwitz:

$$\zeta(a, b) = \sum_{n=0}^{\infty} (n + b)^{-a}.$$

Para o caso discreto considerando um conjunto Γ com N ocorrências, os passos para o cálculo de $F_a(x_i)$ são:

- Ordenar o conjunto Γ de forma crescente tal que $x_i > x_{i-1}$.
- Calcular a distribuição acumulada para cada ocorrência do conjunto ordenado: $F_a(x_i) = i/(N - 1)$.

Assim, a distribuição complementar é $F_c(x_i) = 1 - F_a(x_i)$.

9.4 Distribuição acumulada de probabilidades

Distribuição acumulada é uma forma de visualizar as propriedades da função de distribuição de probabilidades $p(x)$ que contém algumas vantagens. As distribuições acumuladas são definidas a seguir:

- Distribuição acumulada $F_a(x) = p(X \leq x)$: é a chance de alguma ocorrência x_i ser menor que um certo valor x .
- Distribuição acumulada complementar (ou simplesmente complementar) $F_c(x) = p(\Gamma \geq x)$: é a chance de alguma ocorrência x_i ser maior que um certo valor x .

Temos que $F_c(x) = 1 - F_a(x)$.

A forma de se calcular $F_a(x_i)$ é somar as probabilidades x de todos os resultados menores que x_i . Por exemplo $F_a(2)$ para o caso de lançamento de um dado é $P(1) + P(2) = 1/3$. De maneira geral:

$$F_a(x_i) = \sum_{j < i} f(x_j).$$

Algumas tabelas importantes

A.1 Alfabeto grego

Nome	Símbolo	Nome	Símbolo
Alpha	α, A	Beta	β, B
Gamma	γ, Γ	Delta	δ, Δ
Epsilon	ϵ, ε, E	Zeta	ζ, Z
Eta	η, H	Theta	$\theta, \vartheta, \Theta$
Iota	ι, I	Kappa	κ, K
Lambda	λ, Λ	Mu	μ, M
Nu	ν, N	Omega	ω, Ω
Pi	π, Π	Rho	ρ, ϱ, R
Sigma	σ, Σ	Tau	τ, T
Upsilon	υ, Y	Phi	ϕ, Φ
Chi	χ, X	Psi	ψ, Ψ

Tabela A.1: Alfabeto grego: minúsculas e maiúsculas. As letras Nu e Mu são pronunciadas como "ni" e "mi".

A.2 Constantes Fundamentais

Símbolo	Valor	Descrição
c	$3,00 \times 10^8$ m/s	velocidade da luz no vácuo
q	$1,60 \times 10^{-19}$ C	carga fundamental do elétron
m_0	$9,11 \times 10^{-31}$ kg	massa do elétron em repouso
\hbar	$6,58 \times 10^{-16}$ eVs	constante de Planck
k_B	$1,38 \times 10^{-23}$ J/K	constante de Boltzmann
ϵ_0	$8,85 \times 10^{-12}$ C ² /(Nm ²)	permissividade elétrica do vácuo
μ_0	$4\pi \times 10^{-7}$ N/A ²	permeabilidade magnética do vácuo
G	6.674×10^{-11} Nm ² /kg ²	constante gravitacional universal ¹

Tabela A.2: Constantes fundamentais da Física utilizadas neste trabalho.

Resultados úteis

B.1 Trigonometria

$$e^{\pm i\theta} = \cos \theta \pm i \sin \theta, \quad (\text{B.1})$$

$$\cos \theta = \frac{e^{i\theta} + e^{-i\theta}}{2}, \quad \sin \theta = \frac{e^{i\theta} - e^{-i\theta}}{2i} \quad (\text{B.2})$$

$$\cosh \theta = \frac{e^\theta + e^{-\theta}}{2}, \quad \sinh \theta = \frac{e^\theta - e^{-\theta}}{2} \quad (\text{B.3})$$

$$\cos \theta = \cosh i\theta, \quad \sin \theta = -i \sinh i\theta \quad (\text{B.4})$$

$$\cos^2(\theta/2) = (1 + \cos \theta)/2, \quad \sin^2(\theta/2) = (1 - \cos \theta)/2 \quad (\text{B.5})$$

$$\sin(\alpha \pm \beta) = \sin \alpha \cos \beta \pm \cos \alpha \sin \beta, \quad \cos(\alpha \pm \beta) = \cos \alpha \cos \beta \mp \sin \alpha \sin \beta$$

$$\sin \theta \pm \sin \phi = 2 \sin \left(\frac{\theta \pm \phi}{2} \right) \cos \left(\frac{\theta \mp \phi}{2} \right)$$

$$\tanh x = \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}} = \frac{e^{2x} - 1}{e^{2x} + 1}, \quad \frac{d}{dx} \tanh(ax) = a - a \tanh^2 x \quad (\text{B.6})$$

Considerando o triângulo da figura 1.2(b), a Lei das Tangentes é dada por:

$$\frac{a - b}{a + b} = \frac{\tan(\alpha - \beta)/2}{\tan(\alpha + \beta)/2}. \quad (\text{B.7})$$

B.2 Integrais úteis

$$\int u dv = uv - \int v du, \quad \int e^{i\mathbf{b} \cdot \mathbf{r} - ar} d^3 r = \frac{8\pi a}{(a^2 + b^2)^2} \quad (\text{B.8})$$

$$\int_a^c f(x) dx = \int_a^b f(x) dx + \int_b^c f(x) dx, \quad c > b > a \quad (\text{B.9})$$

$$\int \cos ax dx = \frac{\sin ax}{a}, \quad \int \sin ax dx = -\frac{\cos ax}{a}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-t^2} dt = \sqrt{\pi}, \quad \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-a^2 t^2} e^{i\omega t} dt = \frac{\sqrt{\pi}}{a} \exp\left(-\frac{\omega^2}{4a^2}\right). \quad (\text{B.10})$$

$$\int_0^x \frac{dt}{1+t^2} = \arctan x \quad (\text{B.11})$$

B.3 Diversos

B.3.1 Expansão binomial

A expansão binomial é a série de Taylor para a função $f(x) = (1+x)^\alpha$ onde α é um número complexo arbitrário. A definição é:

$$\begin{aligned} (1+x)^\alpha &= \sum_{k=0}^{\infty} \binom{\alpha}{k} x^k, \\ &= 1 + \alpha x + \frac{\alpha(\alpha-1)}{2!} x + \dots, \end{aligned} \quad (\text{B.12})$$

onde o coeficiente binomial é definido como:

$$\binom{\alpha}{k} = \frac{\alpha(\alpha-1)(\alpha-2)(\alpha-3)\cdots(\alpha-k+1)}{k!}. \quad (\text{B.13})$$

Para qualquer número α complexo, temos:

$$\begin{aligned} \binom{\alpha}{0} &= 1, \\ \binom{\alpha}{k+1} &= \binom{\alpha}{k} \frac{\alpha-k}{k+1}, \\ \binom{\alpha}{k-1} + \binom{\alpha}{k} &= \binom{\alpha+1}{k}. \end{aligned}$$

Equações que mudaram o mundo

Nome	Expressão	Origem
Teorema de Pitágoras	$a^2 + b^2 = c^2$	Pythagoras, 530 aC
Logaritmo	$\log xy = \log x + \log y$	John Napier, 1610
Derivada	$\frac{df}{dt} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(t+h) - f(t)}{h}$	Newton, 1668
Gravidade	$F = \frac{GmM}{r^2}$	Newton, 1687.
Fórmula de Euler	$e^{\pm i\theta} = \cos \theta \pm i \sin \theta$	Euler, 1740.
Fórmula do poliedro	$V - E + F = 2$	Euler, 1751
Eq. de Onda	$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = c^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$	d'Alembert, 1746.
Distribuição Normal	$\Phi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(\frac{x-\mu}{2\sigma}\right)$	Gauss, 1810.
Transformada de Fourier	$F(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \exp(-2\pi i x \omega) dx$	J. Fourier, 1822
Eq. de Navier Stokes	$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \vec{\nabla} \mathbf{v} \right) = \vec{\nabla} \cdot \mathbf{T} - \nabla p + \mathbf{f}$	C. Navier, G. Stokes, 1845
Eqs. de Maxwell	$\vec{\nabla} \cdot \mathbf{E} = \rho/\epsilon_0$	J. C. Maxwell, 1865
Segunda Lei da Termodinâmica	$dS \geq 0$	L. Boltzmann, 1874.
Relatividade Restrita	$E = mc^2$	A. Einstein, 1905.
Eq. de Schrodinger	$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + U\Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}$	E. Schrodinger, 1927.

Tabela C.1: Equações que mudaram o mundo.

Bibliografia

- [1] PJ Nahin, *Inside Interesting Integrals*, Springer (2015).
- [2] John David Jackson *Classical Electrodynamics*, John Wiley & Sons, Inc, 13. Edição,
- [3] DJ Griffiths, *Introduction to Electrodynamics*, 4th Edition, Pearson Education (2013).
- [4] VJ Katz, *The History of Stokes' Theorem*, Mathematics Magazine Vol. 52, No. 3 (May, 1979), pp. 146-156. Published by: Mathematical Association of America.
- [5] HJ Weber, GB Arken *Essential Mathematical Methods for Physicists*, Academic Press (2003).
- [6] JCA Barata *Curso de Física-Matemática* http://denebola.if.usp.br/~jbarata/Notas_de_aula/capitulos.html. Versão: 12 de Julho de 2006, Universidade de São Paulo.