
MÉTODOS MATEMÁTICOS E COMPUTACIONAIS PARA A FÍSICA

UM CURSO CLÁSSICO DE MÉTODOS MATEMÁTICOS PARA A FÍSICA MAS COM INÚMEROS
EXEMPLOS DE IMPLEMENTAÇÃO COMPUTACIONAL APLICADOS EM PROBLEMAS DE FÍSICA.

PAULO FREITAS GOMES

*Universidade Federal de Goiás
Jataí, Brazil.*

Conteúdo

1	Cálculo Diferencial Vetorial	13
1.1	Vetores	13
1.1.1	Produto escalar e vetorial	13
1.1.2	Como representar um vetor?	14
1.1.3	Produto Triplo	15
1.1.4	Vetores posição, deslocamento e separação	16
1.2	Coordenadas Curvilíneas	17
1.2.1	Coordenadas Cilíndricas	17
1.2.2	Coordenadas Esféricas	19
1.3	Cálculo Diferencial	20
1.3.1	Operador ∇ e suas aplicações	20
1.3.2	Regras de produto	23
1.3.3	Operador nabla em coordenadas curvilíneas	24
1.4	Teorema Fundamental do Cálculo	27
1.4.1	Integrais	27
1.4.2	Teorema Fundamental do Gradiente	28
1.4.3	Teorema do Divergente e do Rotacional	29
1.4.4	A função Delta de Dirac	30
1.5	Leitura Adicional	33

2	Séries e Números Complexos	35
2.1	Séries	35
2.1.1	Testes de convergência	36
2.1.2	Séries de Funções	38
2.1.3	Expansão de Taylor	39
2.1.4	Séries de potências	41
2.2	Números Complexos	47
2.2.1	Álgebra Complexa	47
2.2.2	Forma polar	49
3	Equações Diferenciais Ordinárias	53
3.1	EDO de ordem 1	54
3.1.1	Separação de variáveis	54
3.1.2	EDO de ordem 1 homogênea	56
3.1.3	EDO de ordem 1 não homogênea	57
3.2	EDO de ordem 2	58
3.2.1	EDO sem o termo y	58
3.2.2	Solução tentativa: exponencial	59
3.2.3	Oscilador Harmônico	61
3.3	Solução em série	62
3.4	Métodos Numéricos	62
3.4.1	Método de Euler	63
3.4.2	Método de Runge-Kutta	63
3.4.3	EDO de ordem 2	64
3.4.4	Sistema planetário	64
4	Funções especiais	71
4.1	Funções de Bessel	71

4.1.1	Solução em série	73
4.1.2	Outras funções	74
4.1.3	Funções de Bessel esféricas	75
4.2	Polinômios de Legendre	80
4.2.1	Potencial eletrostático	81
4.2.2	Polinômios associados de Legendre	82
4.3	Conjunto completo	83
4.3.1	Polinômios de Legendre	84
4.3.2	Funções de Bessel	85
5	Teoria de Sturm-Liouville	87
5.1	EDO auto-adjunta	87
5.1.1	Autovetores e autovalores	88
5.1.2	Operadores Hermitianos	88
6	Análise de Fourier	91
6.1	Expansão em séries	91
6.1.1	Séries de Fourier Complexas	95
6.1.2	Mudança de intervalo	96
6.1.3	Propriedades	96
6.2	Transformada de Fourier	98
6.2.1	TF de seno e cosseno e δ de Dirac	99
6.2.2	Equações Diferenciais	100
6.2.3	Representação de momento	102
6.3	Transformada de Laplace	103
6.3.1	TL de funções elementares	104
6.3.2	Derivadas	105
6.3.3	Transformada da δ de Dirac	106

6.4	Transformada de Fourier Discreta (DFT)	108
6.4.1	DFT inversa	110
6.4.2	Interpretação física	112
6.4.3	Transformada de Fourier Rápida	113
7	Equações diferenciais parciais	119
7.1	Classificação e aplicações na Física	119
7.1.1	Condições de contorno	120
7.2	Separação de variáveis em coordenadas cartesianas	121
7.2.1	Difusão de calor	122
7.2.2	Método das Diferenças Finitas	126
7.2.3	Potencial elétrico	127
7.3	Separação de variáveis em coordenadas cilíndricas	131
7.3.1	Eq. de difusão térmica	132
7.4	Separação de variáveis em coordenadas esféricas	133
7.4.1	Harmônicos esféricos $Y_l^m(\theta, \phi)$	135
7.4.2	Simetria azimutal	136
7.4.3	Eq. de Schrodinger	138
A	Constantes fundamentais da Física	145
A.1	Constantes Fundamentais	145
B	Resultados úteis	147
B.1	Trigonometria	147
B.2	Integrais úteis	147
C	Equações que mudaram o mundo	149
D	Soluções de problemas	151

Lista de Figuras

1.1	(a) Vetor posição \mathbf{r} . (b) Vetor separação.	17
1.2	Circuitos elétricos referente ao problema 1.25. Figura retirada de V. H. A. Dias, P. M. C. Dias <i>Escrevendo o "Livro da Natureza" na linguagem da matemática: A lei de Ampère</i> , Revista Brasileira de Ensino de Física, 37 , n. 4, 4601 (2015).	32
2.1	Cálculo numérico do número π	38
2.2	Séries.	44
2.3	(a) Plano complexo com alguns pontos representados. (b) Representação polar de um número complexo.	49
2.4	Fractal de Mandelbrot.	51
2.5	Fractal Julia.	52
3.1	Sistema planetário.	68
3.2	Resultados numéricos para o sistema massa mola.	69
3.3	Solução numérica das equações diferenciais do atrator de Lorentz.	70
4.1	(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 $n = 1, 2$	73
4.2	Potencial de uma carga pontual calculada em uma posição arbitrária.	82
6.1	Figura referente ao exemplo 6.1. Gráfico de $f(x)$ da Eq. 6.6 e da expansão $g_q(x)$ da Eq. 6.7 com $q = 2$ e $q = 10$ termos.	93

6.2	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	112
6.3	Ilustração da conexão entre frequência e tempo através da DFT.	113
6.4	Superior: gráfico de $y(t) = \sin(\omega t)$. Inferior: gráfico da Transformada Rápida de Fourier de $y(t)$	114
6.5	Transformada de Fourier do oboé e violino.	117
7.1	Problema 2.	123
7.2	Gráfico da temperatura no domínio.	127
7.3	Tubo metálico do exemplo 7.3.	128
7.4	Cubo metálico do Problema 7.6.	130
7.5	Cilindro mantido com uma temperatura constante na base e na lateral.	132
7.6	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 $m = 1$	137
B.1	Ciclo trigonométrico	148

Lista de Tabelas

3.1	UA significa Unidade astronômica, que é a unidade de distância definida como $1 \text{ UA} = \text{distância média entre Terra e Sol} = 150 \times 10^6 \text{ km}$	66
4.1	Funções de Bessel	72
7.1	EDPs elípticas, parabólicas e hiperbólicas	119
7.2	EDPs em física	120
7.3	Condições de contorno	121
A.1	Constantes fundamentais da Física.	145
C.1	Equações que mudaram o mundo.	150

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.

Como em muitos livros, utilizo numeração nas equações de forma a tornar ágil a leitura, usando resultados de outros capítulos e evitar reescrever várias equações várias vezes. Porém, essa técnica pode também incentivar o aluno a não procurar o resultado necessário esperando sempre que o texto indique o número da equação para ser utilizada. Assim, em vários momentos a equação necessária para o desenvolvimento não foi indicada exatamente para forçar o aluno a voltar no texto e procurar onde está a equação desejada.

Leitura Adicional

Ao final de cada capítulo tem a indicação de diversas opções para leitura adicional. Os primeiros itens sempre são os livros que usei como referência para escrever cada capítulo. Além disso, tento incluir opções básicas até as mais avançadas para os interessados. No final incluo também algumas referências históricas.

Notação


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

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

Códigos e comandos em Python (ou em outras linguagens) são escritos em fonte do tipo typewriter.

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 ★, o que indica uma nível médio de dificuldade. Já os exercícios marcados por duas estrelas ★★ são os mais difíceis da lista. Veja que essa dificuldade pode ser tanto em termos de conceito como em termos de trabalho. Um exercício difícil 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 ★★ pode ser difícil tanto por conceito quanto por ser trabalhoso.

Adicionalmente, alguns exercícios exploram a implementação computacional de algum conceito e estão indicados pelo símbolo . Neste caso, estes exercícios tem como objetivo ilustrar os resultados discutidos e podem ser ignorados sem prejuízo de aprendizado. O código utilizado para gerar todas as figuras referentes a esses exercícios também estão no github.

Muitos dos exercícios são do tipo *mostre que*, o que já é uma ajuda ao aluno. Além disso, a resposta de alguns exercícios estão nos apêndices. Também nos apêndices estão a solução de outros exercícios. Porém, estas soluções tem que ser usadas com cuidado. Se o aluno ao ler o enunciado do exercício já buscar sua solução no fim do livro, irá perder a oportunidade de aprender. O aluno deve primeiro tentar fazer o exercício e além de tentar, fazer o exercício, mesmo que de forma errada². Uma vez tendo sua solução feita (certa ou errada) o aluno pode consultar a solução no fim do livro de forma a avaliar a sua solução, o que errou, o que acertou. Assim, é responsabilidade do aluno usar de forma correta as soluções no fim do livro.

²Não adianta tentar e não escrever nada!

Cálculo Diferencial Vetorial

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

1.1 Vetores

Gradezas escalares precisam de apenas um número para sua definição: i) a temperatura de hoje é 25 graus. Já grandezas vetoriais¹ 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 para que direção. Em 3 dimensões cada vetor precisa de três números para ser definido: módulo, direção e sentido. Representando cada vetor por uma flecha, módulo 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 é o módulo do mesmo: $A = |\mathbf{A}|$.

Os vetores seguem as mesmas regras de adição e subtração que os escalares:

$$\begin{aligned} \mathbf{A} + \mathbf{B} &= \mathbf{B} + \mathbf{A}, & (\mathbf{A} + \mathbf{B}) + \mathbf{C} &= \mathbf{A} + (\mathbf{B} + \mathbf{C}), \\ \mathbf{A} - \mathbf{B} &= \mathbf{A} + (-\mathbf{B}), & a(\mathbf{A} + \mathbf{B}) &= a\mathbf{A} + a\mathbf{B}. \end{aligned} \quad (1.1)$$

A última equação mostra também que a multiplicação de vetores por um escalar é uma operação linear.

1.1.1 Produto escalar e vetorial

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:

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

¹Escalar é um tensor de ordem zero. Vetor é um tensor de ordem 1. Já o tensor de ordem 2 é comumente chamado de apenas tensor.

onde θ é o ângulo entre os vetores. Como esperado o produto escalar segue as propriedades comutativa e distributiva:

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

Um resultado imediato desta definição é: $A^2 = \mathbf{A} \cdot \mathbf{A}$. Outro resultado imediato 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.

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

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

onde $|\hat{n}| = 1$ (é um vetor unitário, de módulo 1). Ou seja, 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 que é definida pela regra da mão direita²: deixe seus dedos 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} . Veja que $\mathbf{A} \times \mathbf{B}$ é um vetor! Exemplos de produto vetorial em física são o momento angular e a relação entre velocidade linear e angular:

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}, \quad \mathbf{v} = \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}. \quad (1.2)$$

O produto vetorial segue a propriedade distributiva mas não a comutativa:

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

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

Produto vetorial também é usado na definição dos versores cartesianos. O sistema amplamente aceito é o chamado destrógiro, definido da seguinte maneira:

- Primeiramente escolhe-se uma direção para ser definida como o eixo x . O versor \hat{x} é então o vetor unitário nesta direção.
- O eixo y é obtido pela rotação de 90 graus no sentido anti-horário. O versor \hat{y} é então o vetor unitário nesta direção, de forma que $\hat{y} \cdot \hat{y} = 0$.
- No sistema destrógiro, o versor na direção z é definida como $\hat{z} = \hat{x} \times \hat{y}$, que também define o eixo z ³.

1.1.2 Como representar um vetor?

Um vetor pode ser definido por seu módulo, direção e sentido. Intuitivamente podemos então dizer que o vetor \mathbf{A} tem módulo 3, direção vertical e sentido para cima. Porém, em

²Isso é uma convenção, poderia usar por exemplo a regra da mão esquerda. Porém, é a convenção que todo mundo usa.

³No sistema levógiro, que não é utilizado, a definição é $\hat{z} = -\hat{x} \times \hat{y}$.

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 . Chamamos os versores (\equiv vetores unitários) nestas direções de \hat{x} , \hat{y} e \hat{z} . A ideia é então escrever um vetor arbitrário como sendo uma soma sobre esses versores:

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

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:

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

Usando as componentes, 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:

$$\begin{aligned} c(\mathbf{A} + \mathbf{B}) &= c(A_1 + B_1)\hat{x} + c(A_2 + B_2)\hat{y} + c(A_3 + B_3)\hat{z}, \\ \mathbf{A} \cdot \mathbf{B} &= A_1B_1 + A_2B_2 + A_3B_3. \end{aligned}$$

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

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

Essa expressão é mais facilmente lembrada quando se escreve na forma de um determinante matricial:

$$\mathbf{A} \times \mathbf{B} = \begin{vmatrix} \hat{x} & \hat{y} & \hat{z} \\ A_x & A_y & A_z \\ B_x & B_y & B_z \end{vmatrix}. \quad (1.3)$$

1.1.3 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 para 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 e um número $(\mathbf{B} \cdot \mathbf{C})$.

O segundo produto triplo importante é⁴

$$\mathbf{A} \times (\mathbf{B} \times \mathbf{C}) = \mathbf{B}(\mathbf{A} \cdot \mathbf{C}) - \mathbf{C}(\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}). \quad (1.4)$$

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:

$$(\mathbf{A} \times \mathbf{B}) \cdot (\mathbf{C} \times \mathbf{D}) = (\mathbf{A} \cdot \mathbf{C})(\mathbf{B} \cdot \mathbf{D}), \quad (1.5)$$

$$\mathbf{A} \times [\mathbf{B} \times (\mathbf{C} \times \mathbf{D})] = \mathbf{B}[\mathbf{A} \cdot (\mathbf{C} \times \mathbf{D})] - (\mathbf{A} \cdot \mathbf{B})(\mathbf{C} \times \mathbf{D}). \quad (1.6)$$

1.1.4 Vetores posição, deslocamento e separação

Uma posição qualquer no sistema cartesiano xyz é definida pelo vetor posição⁵ (veja figura 1.1(a)):

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

Seu módulo e o versor associado são:

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

Já o vetor relativo ao deslocamento infinitesimal é a distância entre o ponto (x, y, z) e $(x + dx, y + dy, z + dz)$:

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

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} :

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

Este é o vetor separação (veja figura 1.1(b)). Seu módulo e o vetor associado são:

$$r = \sqrt{(x - x')^2 + (y - y')^2 + (z - z')^2},$$

$$\hat{\mathbf{r}} = \frac{\mathbf{r}}{r} = \frac{(x - x')\hat{\mathbf{x}} + (y - y')\hat{\mathbf{y}} + (z - z')\hat{\mathbf{z}}}{\sqrt{(x - x')^2 + (y - y')^2 + (z - z')^2}}.$$

Problemas

⁴Uma forma de se lembrar é "baca menos cabala".

⁵Ao longo deste livro o vetor posição será sempre indicado por \mathbf{r} .

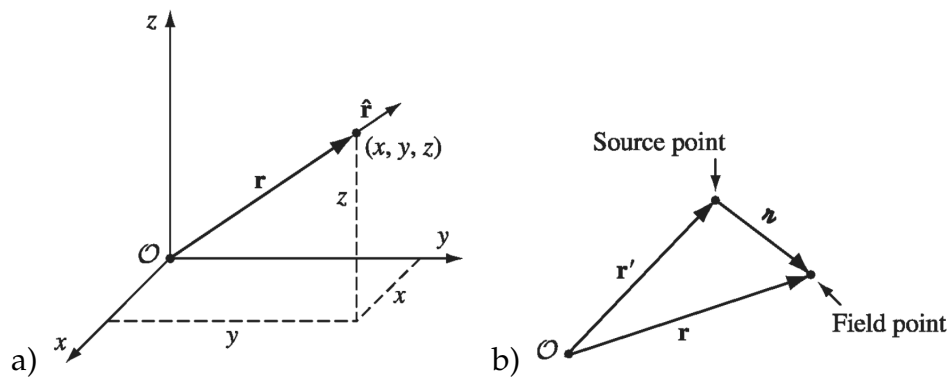


Figura 1.1: (a) Vetor posição \mathbf{r} . (b) Vetor separação.

1.1) a) Prove a Eq. 1.5. b) Prove a Eq. 1.6.

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. 1.2 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:

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

1.2 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.

1.2.1 Coordenadas Cilíndricas

As coordenadas cilíndricas s, φ, z são definidas na figura: 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 . 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 é:

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

A transformação inversa é⁶:

$$x = s \cos \varphi, \quad y = s \sin \varphi \quad (1.7)$$

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

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

O deslocamento infinitesimal para a variável s é direto (ds), já para a variável angular trata-se do comprimento do arco compreendido pelo ângulo infinitesimal: $s d\varphi$. De forma que o deslocamento resultante e o elemento de volume são⁷:

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

O intervalo de validade de cada um é:

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

Exemplo 1.1

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

⁶A função \arctan é a inversa da tangente, de forma que $\arctan a = b$ implica $\tan b = a$. É comum também utilizar a notação $\arctan = \tan^{-1}$.

⁷Repare na dimensão de ambos: $d\ell$ tem dimensão de comprimento e $d\tau$ de volume.

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 a Eq. desejada.

1.2.2 Coordenadas Esféricas

As coordenadas esféricas estão definidas na figura: r é a distância em relação a origem, φ é a mesma da coordenada cilíndrica (veja Eq. 1.7) e θ é o ângulo que o vetor posição faz com o eixo z . A transformação de esférica para cartesiana é:

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}, \quad \theta = \arctan(\sqrt{x^2 + y^2}/z), \quad \varphi = \arctan(y/x). \quad (1.8)$$

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: $\mathbf{A} = \hat{\mathbf{r}}A_r + \hat{\boldsymbol{\theta}}A_\theta + \hat{\boldsymbol{\phi}}A_\varphi$. Em uma integral, esses vetores devem ser escritos em função dos versores canônicos pois eles não são constantes. A transformação dos versores é:

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

A transformação inversa é:

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

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:

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

Em uma integral de linha o elemento de comprimento resultante será:

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

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:

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

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.

1.3 Cálculo Diferencial

Suponha que tenhamos uma função $f(x)$. O que significa sua derivada $df/dx = f'(x)$? A derivada nos diz o quando 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 $f(x)$.

1.3.1 Operador ∇ e suas aplicações

O operador vetorial ∇ , chamado de *del*, 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 (operador linear por exemplo, atuando em algum espaço vetorial), podemos tratá-lo como vetor por conveniência. Assim, uma "definição"⁸ é:

$$\vec{\nabla} = \hat{\mathbf{x}} \frac{\partial}{\partial x} + \hat{\mathbf{y}} \frac{\partial}{\partial y} + \hat{\mathbf{z}} \frac{\partial}{\partial z}.$$

É importante escrever os versores antes das derivadas 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.

⁸Obviamente, não é uma definição formal, apenas uma regra prática para facilitar seu uso. Repare que a flecha sobre o símbolo é para reforçar o caráter vetorial desta definição.

Gradiente

Suponha agora que definimos uma função temperatura $T(x, y, z)$ em uma sala por exemplo e queiramos avaliar como a temperatura varia neste espaço (suponha a origem do sistema xyz no canto da sala por exemplo). Agora a situação é mais complicada pois a variação da temperatura depende agora da direção. Podemos representar a direção de movimento com um vetor. Se andarmos na direção $(1, 1, 1)$ (ao longo da diagonal da sala) varia com uma taxa, se andarmos na direção $(0, 0, 1)$ (vertical para cima) a taxa será outra. Podemos então generalizar a expressão $df = f'(x)dx$ para 3 dimensões como:

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

Se variarmos ao longo de x , $dy = dz = 0$, e só a derivada em x contribui (análogo para y e z). Se variar em uma direção oblíqua qualquer, as 3 derivadas contribuem. Assim, podemos reescrever dT da forma:

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

onde

$$\vec{\nabla} T = \frac{\partial T}{\partial x} \hat{\mathbf{x}} + \frac{\partial T}{\partial y} \hat{\mathbf{y}} + \frac{\partial T}{\partial z} \hat{\mathbf{z}}$$

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

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

$$dT = \vec{\nabla} T \cdot d\mathbf{l} = |\vec{\nabla} T| |d\mathbf{l}| \cos \theta, \quad (1.9)$$

onde θ é o ângulo entre os dois vetores. Fixemos o módulo $|d\mathbf{l}|$ 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 $d\mathbf{l}$ escolhida for paralela ao gradiente $\vec{\nabla} T$. Ou seja, 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 uma operação que retorna um escalar e é definido como:

$$\vec{\nabla} \cdot \mathbf{v} = \left(\hat{\mathbf{x}} \frac{\partial}{\partial x} + \hat{\mathbf{y}} \frac{\partial}{\partial y} + \hat{\mathbf{z}} \frac{\partial}{\partial z} \right) \cdot (\hat{\mathbf{x}} v_x + \hat{\mathbf{y}} v_y + \hat{\mathbf{z}} v_z) = \frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} + \frac{\partial v_z}{\partial z}.$$

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} . 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} .

Rotacional

O rotacional de um vetor é o produto vetorial entre o operador $\vec{\nabla}$ e o vetor em questão (Eq. 1.3):

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

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 ponto⁹. Quando a água começa a escorrer pelo ralo de um tanque ou pia circular, ela gira como em um redemoinho. O rotacional do vetor velocidade nesse caso é grande. Outro exemplo são os tornados e furacões.

Exemplo 1.2

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} :

$$\text{Lei de Gauss} \quad \vec{\nabla} \cdot \mathbf{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0}, \quad (1.10)$$

$$\text{Lei de Gauss do magnetismo} \quad \vec{\nabla} \cdot \mathbf{B} = 0, \quad (1.11)$$

$$\text{Lei de Faraday} \quad \vec{\nabla} \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad (1.12)$$

$$\text{Lei de Ampère-Maxwell} \quad \vec{\nabla} \times \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{J} + \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}, \quad (1.13)$$

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.

⁹Os nomes do divergente e rotacional são de fato bem intuitivos quanto aos respectivos significados, algo que nem sempre ocorre em física.

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.

1.3.2 Regras de produto

As regras de derivadas envolvendo mais de uma função são diretas:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dx}(f+g) &= \frac{df}{dx} + \frac{dg}{dx}, & \frac{d}{dx}(kf) &= k\frac{df}{dx}, \\ \frac{d}{dx}(fg) &= f\frac{dg}{dx} + g\frac{df}{dx}, & \frac{d}{dx}\frac{f}{g} &= \frac{1}{g^2}\left(g\frac{df}{dx} - f\frac{dg}{dx}\right).\end{aligned}$$

Algumas dessas propriedades são válidas no caso vetorial. Considerando a e b como escalares, temos:

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

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. Tendo isso em mente, as regras mais usadas são 6, duas ligadas ao gradiente, duas ligadas ao divergente e duas do rotacional:

$$\begin{aligned}\vec{\nabla}(fg) &= g\vec{\nabla}f + f\vec{\nabla}g, \\ \vec{\nabla}(\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}) &= \mathbf{A} \times (\vec{\nabla} \times \mathbf{B}) + \mathbf{B} \times (\vec{\nabla} \times \mathbf{A}) + (\mathbf{A} \cdot \vec{\nabla})\mathbf{B} + (\mathbf{B} \cdot \vec{\nabla})\mathbf{A}, & (1.14) \\ \vec{\nabla} \cdot (f\mathbf{A}) &= \mathbf{A} \cdot \vec{\nabla}f + f\vec{\nabla} \cdot \mathbf{A}, \\ \vec{\nabla} \cdot (\mathbf{A} \times \mathbf{B}) &= \mathbf{B} \cdot (\vec{\nabla} \times \mathbf{A}) - \mathbf{A} \cdot (\vec{\nabla} \times \mathbf{B}), \\ \vec{\nabla} \times (f\mathbf{A}) &= f\vec{\nabla} \times \mathbf{A} - \mathbf{A} \times (\vec{\nabla}f), \\ \vec{\nabla} \times (\mathbf{A} \times \mathbf{B}) &= (\mathbf{B} \cdot \vec{\nabla})\mathbf{A} - (\mathbf{A} \cdot \vec{\nabla})\mathbf{B} + \mathbf{A}(\vec{\nabla} \cdot \mathbf{B}) - \mathbf{B}(\vec{\nabla} \cdot \mathbf{A}). & (1.15)\end{aligned}$$

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 usado 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. 1.4):

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

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

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

O símbolo ∇^2 é chamado de Laplaciano¹⁰ e é um operador diferencial escalar. 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:

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

Tenha em mente porém que $\nabla^2 \mathbf{A}$ na verdade consiste em 3 equações escalares, uma para cada componente de \mathbf{A}

1.3.3 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 $\mathbf{v} = \hat{s}v_s + \hat{\phi}v_\phi + \hat{z}v_z$.

Gradiente:

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

Divergente:

$$\vec{\nabla} \cdot \mathbf{v} = \frac{1}{s} \frac{\partial v_s}{\partial s} + \frac{1}{s} \frac{\partial v_\phi}{\partial \phi} + \frac{\partial v_z}{\partial z}.$$

Rotacional:

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

Laplaciano:

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

Já em coordenadas esféricas temos:

Gradiente:

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

¹⁰ Alguns autores usam $\nabla^2 = \Delta$.

Divergente:

$$\vec{\nabla} \cdot \mathbf{v} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r}(r^2 v_r) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta}(\sin \theta v_\theta) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial v_\varphi}{\partial \varphi}. \quad (1.16)$$

Rotacional:

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

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) $\mathbf{r} = x\hat{\mathbf{x}} + y\hat{\mathbf{y}} + z\hat{\mathbf{z}} = (x, y, z)$, b) $\mathbf{V} = (x^2 y, y^2 x, xyz)$, 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 $(\hat{\mathbf{r}} \cdot \vec{\nabla})\hat{\mathbf{r}}$.

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

1.11) Prove as seguintes relações:

$$\begin{aligned} \vec{\nabla} \cdot \left(\frac{\mathbf{f}}{g} \right) &= \frac{g \vec{\nabla} \cdot \mathbf{f} - \mathbf{f} \cdot \vec{\nabla} g}{g^2}, & \vec{\nabla} \cdot \left(\frac{\mathbf{A}}{g} \right) &= \frac{g(\vec{\nabla} \cdot \mathbf{A}) - \mathbf{A} \cdot (\vec{\nabla} g)}{g^2}, \\ \vec{\nabla} \times \left(\frac{\mathbf{A}}{g} \right) &= \frac{g(\vec{\nabla} \times \mathbf{A}) + \mathbf{A} \times (\vec{\nabla} g)}{g^2}. \end{aligned}$$

1.12) ★★ Não é uma boa ideia fazer este problema. Mas, caso você queira: a) prove a Eq. 1.14. Achou difícil? Não se preocupe, provar a Eq. 1.15 é ainda mais difícil. b) Prove a Eq. 1.15.

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

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

Prove que $\varepsilon_0 \int_S \mathbf{E} \cdot d\mathbf{a} = Q$. Dica 1: use o divergente. Dica 2: veja o problema 1.10.

1.14) Diferencie as componentes para mostrar que:

$$\begin{aligned} \text{a)} \quad \frac{d}{dt}(\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}) &= \frac{d\mathbf{A}}{dt} \cdot \mathbf{B} + \mathbf{A} \cdot \frac{d\mathbf{B}}{dt}, \\ \text{b)} \quad \frac{d}{dt}(\mathbf{A} \times \mathbf{B}) &= \frac{d\mathbf{A}}{dt} \times \mathbf{B} + \mathbf{A} \times \frac{d\mathbf{B}}{dt}. \end{aligned}$$

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 $c = 1/\sqrt{\varepsilon_0 \mu_0}$ é a velocidade da luz.

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

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

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 $u = kr - \omega t$.

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.

1.4 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.

1.4.1 Integrais

Integrais são usadas extensivamente em todas as áreas da física. Elas podem ser simples, duplas ou triplas. Uma integral de linha, ou integral simples é do tipo $\int_a^b \mathbf{v} \cdot d\ell$, 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. 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 força¹¹: $W = \int \mathbf{F} \cdot d\mathbf{r}$.

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. Ocasionalmente 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}) se necessário. Esses versores são constantes e podem ser tirados para fora da integral, quando então a integral poderá ser resolvida como um escalar. Por exemplo:

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

Exemplo 1.3

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

¹¹É comum não indicar os limites quando se escreve uma integral genérica.

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

$$\begin{aligned} V(x, y, z) &= \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \iiint \frac{\rho(x_e, y_e, z_e)}{z} dx_e dy_e dz_e, \\ &= \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_e \int_{-\infty}^{+\infty} dy_e \int_{-\infty}^{+\infty} dz_e \frac{\rho(x_e, y_e, z_e)}{\sqrt{(x - x_e)^2 + (y - y_e)^2 + (z - z_e)^2}}, \end{aligned} \quad (1.17)$$

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:

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

Seja $\psi_{nlm}(\mathbf{r})$ a função de onda do elétron no autoestado nlm do átomo de 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. 1.8 dos apêndices. Dessa forma, os respectivos potenciais ficam:

$$\begin{aligned} V_1(\mathbf{r}) &= -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_e \int_{-\infty}^{+\infty} dy_e \int_{-\infty}^{+\infty} dz_e \frac{\frac{qp^3}{a_0^3\pi} \exp\left(-\frac{2p}{a_0}\sqrt{x_e^2 + y_e^2 + z_e^2}\right)}{\sqrt{(x - x_e)^2 + (y - y_e)^2 + (z - z_e)^2}}, \\ V_2(\mathbf{r}) &= -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{qp^3}{2^5 a_0^3 \pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_e \int_{-\infty}^{+\infty} dy_e \int_{-\infty}^{+\infty} dz_e \\ &\quad \times \frac{\left(2 - \frac{p}{a_0}\sqrt{x_e^2 + y_e^2 + z_e^2}\right)^2 \exp\left(-\frac{p}{a_0}\sqrt{x_e^2 + y_e^2 + z_e^2}\right)}{\sqrt{(x - x_e)^2 + (y - y_e)^2 + (z - z_e)^2}}. \end{aligned} \quad (1.18)$$

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.

1.4.2 Teorema Fundamental do Gradiente

Suponha que tenhamos uma função $T(x, y, z)$ e que movamos de um ponto **a** até um ponto **b**. Para cada elemento de comprimento $d\ell$ a variação na função é de $dT = \vec{\nabla}T \cdot d\ell_1$ (veja

Eq. 1.9). 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:

$$\int_a^b \vec{\nabla}T \cdot d\mathbf{l} = T(\mathbf{b}) - T(\mathbf{a}). \quad (1.19)$$

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 $\int_a^b \vec{\nabla}T \cdot d\ell$. 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:

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

1.4.3 Teorema do Divergente e do Rotacional

Já o Teorema Fundamental do Divergente é:

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

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{A} 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, $\oint_{\mathcal{A}} \mathbf{v} \cdot d\mathbf{a}$ 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 $\oint_{\mathcal{A}} \mathbf{v} \cdot d\mathbf{a}$ 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:

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

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 escolhamos 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:

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

1.4.4 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. 1.16, 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) $\int \int \int \vec{\nabla} \cdot \mathbf{V} d\tau$ 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:

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

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:

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

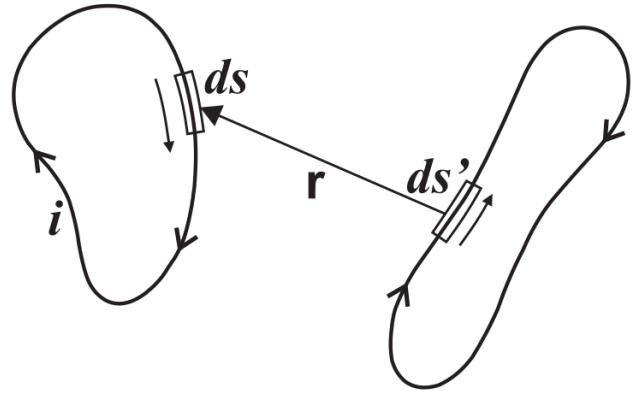
Dica: veja problema 1.22.

1.24) Usando as densidades eletrônicas do problema 1.23, mostre que os respectivos potenciais eletrostáticos (Eq. 1.17) são:

$$\begin{aligned} V_3(\mathbf{r}) &= -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{qp^7}{81^2\pi a_0^7} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_e \int_{-\infty}^{+\infty} dy_e \int_{-\infty}^{+\infty} dz_e \frac{(x_e^2 + y_e^2)z_e^2 \exp \left(-\frac{2p}{3a_0} \sqrt{x_e^2 + y_e^2 + z_e^2} \right)}{\sqrt{(x-x_e)^2 + (y-y_e)^2 + (z-z_e)^2}} \\ &\quad (1.20) \\ V_4(\mathbf{r}) &= -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{qp^7}{162^2\pi a_0^7} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_e \int_{-\infty}^{+\infty} dy_e \int_{-\infty}^{+\infty} dz_e \frac{(x_e^2 + y_e^2)^2 \exp \left(-\frac{2p}{3a_0} \sqrt{x_e^2 + y_e^2 + z_e^2} \right)}{\sqrt{(x-x_e)^2 + (y-y_e)^2 + (z-z_e)^2}} \end{aligned}$$

1.25) ★ A Lei de Ampère-Maxwell é dado pela Eq. 1.13, onde o segundo termo do lado direito é a correção de Maxwell. Sem esse termo, a chamada Lei de Ampère é apenas $\vec{\nabla} \times$

Figura 1.2: Circuitos elétricos referente ao problema 1.25. Figura retirada de 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).



$\mathbf{B} = (4\pi/c)\mathbf{J}$ em unidades CGS. Porém, André-Marie Ampère deduziu um resultado teórico para a força entre dois circuitos elétricos (veja figura 1.2) após uma série de experimentos entre 1820 e 1825. Seu resultado apresentado a Académie Royale des Sciences para essa força é¹²:

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

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 que¹³:

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

Dica: veja [1].

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 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 desenvolvi-

¹²Veja: 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).

¹³Se algum problema neste livro merece 3 estrelas, é esse!

dos 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.

1.5 Leitura Adicional

- 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.
- 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.

Séries e Números Complexos

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**

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**

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

2.1 Séries

Uma 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:

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

Exemplo 2.1

Série Geométrica. O termo a_n desta série é definido como $a_n = ra_{n-1} = r^n a$, onde r é a razão e a 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:

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

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:

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

2.1.1 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 como:

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

Logo 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:

$$a_n = \frac{1}{n^2} < \frac{1}{(n+1)^2} < \frac{1}{n(n+1)} = b_n. \quad (2.3)$$

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 $\zeta(4), \zeta(6), \dots$, em termos de π .

^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.

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:

$$\sum_n u_n \sum_n v_n = \sum_n \sum_{m=0}^n u_m v_{n-m}. \quad (2.4)$$

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 , a qual podemos representar por um polígono regular de N lados. Dessa forma:

$$\pi_e(N) = \frac{A_N}{r^2}, \quad (2.5)$$

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 $r = 1$. 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).

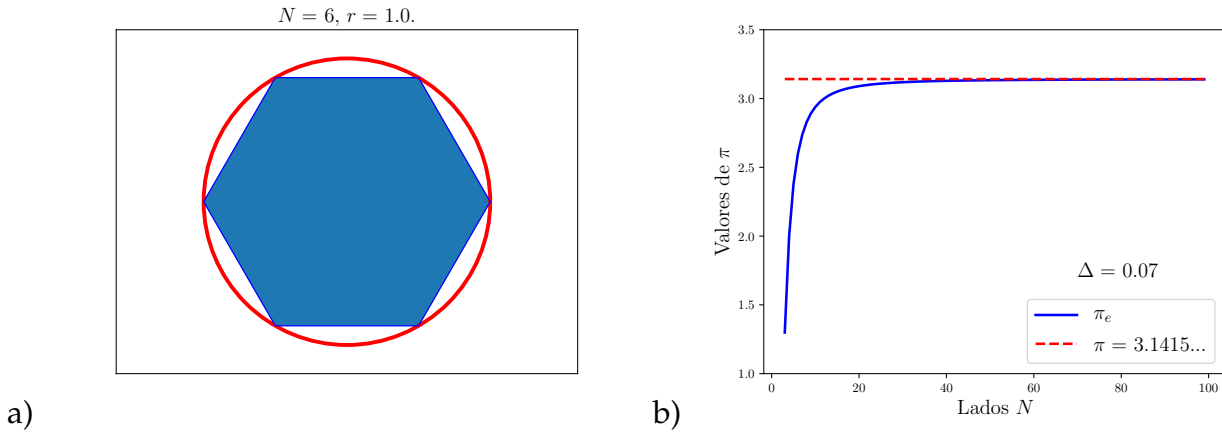


Figura 2.1: (a) Hexágono inscrito em um círculo. (b) Estimativa π_e em função do número de lados N . A linha tracejada vermelha é o valor real de π . O valor Δ indicado é o erro relativo em porcentagem.

2.1.2 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. Dessa forma, tanto a soma parcial quanto o limite ficam também dependentes de x . Se para qualquer valor $\varepsilon > 0$ existir um N independente de x no intervalo $[a, b]$ tal que:

$$|S(x) - s_n(x)| < \varepsilon, \quad \text{para todo } n \geq N, \quad (2.6)$$

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 borda.

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 $[a, b]$.

2.1.3 Expansão de Taylor

Expansão de Taylor é uma série de funções envolvendo a derivada de uma função com o objetivo de obter uma expressão aproximada para a mesma. 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 restante e é igual a

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

Quando este restante tende a zero¹, temos a chamada Expansão de Taylor:

$$\begin{aligned} f(x) &= f(a) + (x-a)f'(a) + \frac{(x-a)^2}{2!}f''(a) + \frac{(x-a)^3}{3!}f'''(a) + \dots \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(x-a)^n}{n!}f^{(n)}(a). \end{aligned} \quad (2.7)$$

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. 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 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:

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

¹ $\lim_{n \rightarrow \infty} R_n = 0$.

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 $-\infty < x < \infty$.

Código 2.2

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

$$\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt \quad (2.8)$$

Algumas de suas propriedades são:

$$\operatorname{erf}(-\infty) = -1, \quad \operatorname{erf}(+\infty) = 1 \quad (2.9)$$

$$\operatorname{erf}(-x) = -\operatorname{erf}(x), \quad \int_0^x e^{-\frac{t^2}{2\sigma^2}} dt = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \sigma \operatorname{erf} \left[\frac{x}{\sqrt{2}\sigma} \right] \quad (2.10)$$

onde o asterisco significa complexo conjugado. Apesar de sua definição não intuitiva, a função erro pode ser aproximada utilizando séries de Taylor:

$$g(x) = \sum_{q=0}^{\infty} g_q(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sum_{q=0}^{\infty} \frac{(-1)^q x^{2q+1}}{q!(2q+1)}. \quad (2.11)$$

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. Em Python o módulo Sympy (<http://www.sympy.org>) implementa computação simbólica de maneira simples permitindo a definição literal de funções diversas e suas operações como derivadas (necessário para o cálculo da série de Taylor). Na figura 2.2(a) está o gráfico contendo $\operatorname{erf}(x)^a$ 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.

^aO módulo SciPy contém uma implementação da função erro: <https://docs.scipy.org/doc/scipy-0.14.0/reference/generated/scipy.special.erf.html>.

2.1.4 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 útil² é o fato de que se ela é convergente para algum $|x| < R$ então ela é absoluta e uniformemente convergente para 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:

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

a) Para a primeira série temos:

$$\rho_n = \left| \frac{a_{n+1}(x - x_0)^{n+1}}{a_n(x - x_0)^n} \right| = \left| \frac{(-x)^{n+1}}{2^{n+1}} \frac{2^n}{(-x)^n} \right| = \left| \frac{x}{2} \right|. \quad (2.12)$$

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 $-3 < x < -1$.

Exemplo 2.6

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

²E que pode ser provado pelo teste de Weierstrass.

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:

$$\sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n = \sum_{n=0}^{\infty} b_n x^n, \quad -R < x < R, \quad (2.13)$$

onde R é o menor entre R_a e R_b . Fazendo $x = 0$ na Eq. 2.13 obtemos $a_0 = b_0$. Como é uma série de potência convergente, vamos derivar a Eq. 2.13:

$$\sum_{n=0}^{\infty} n a_n x^{n-1} = \sum_{n=0}^{\infty} n b_n x^{n-1}, \quad (2.14)$$

Fazendo $x = 0$ nesta equação obtemos $a_1 = b_1$. Derivando a Eq. 2.14 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.

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:

$$\sin x = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n x^{2n+1}}{(2n+1)!} = x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \frac{x^7}{7!} + \dots, \quad \forall x, \quad (2.15)$$

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

$$e^x = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!} = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \frac{x^4}{4!} + \dots, \quad \forall x, \quad (2.16)$$

$$\ln(1+x) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n+1} x^n}{n} = x - \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} - \frac{x^4}{4!} + \dots, \quad -1 < x \leq 1, \quad (2.17)$$

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. 2.15 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. 2.17 por x .

c) $f(x) = e^{-x^2}$. Troque x por $-x^2$ na Eq. 2.16:

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

d) $f(x) = \arctan x$. Para essa vamos usar a expressão integral do arctan, Eq. B.10, 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.

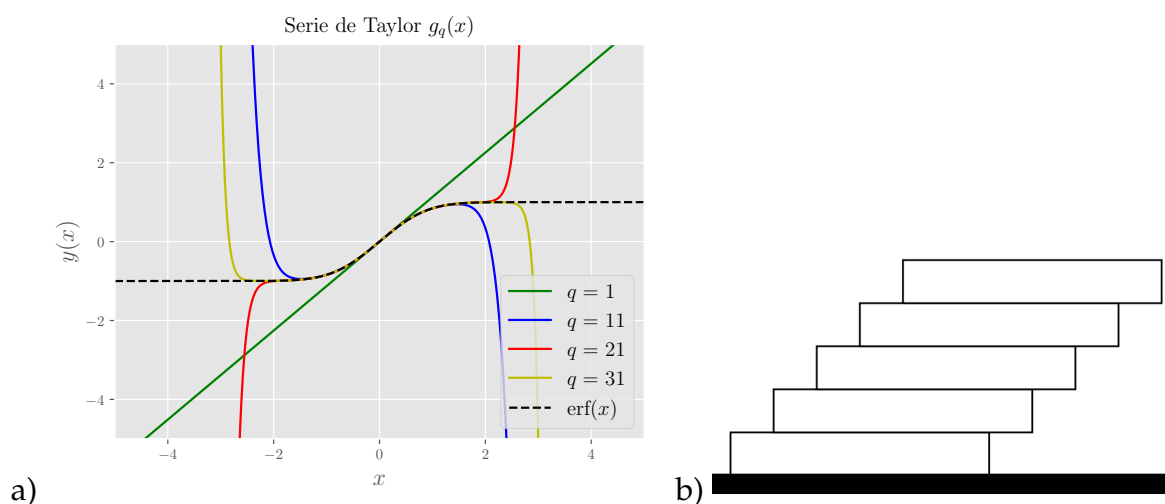


Figura 2.2: (a) Gráfico da função erro $\text{erf}(x)$ e suas expansões de Taylor $g_q(x)$ com $q = 1, 11, 21$ e 31 . (b) Pilha de tijolos. Geometria referente ao problema 2.13.

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: $1,1111... = 10/9$ e $0,131313... = 13/99$.

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:

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

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:

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

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

$$F(\alpha, \beta, \gamma; x) = 1 + \frac{\alpha\beta}{1!\gamma}x + \frac{(\alpha+1)(\beta+1)\alpha\beta}{2!\gamma(\gamma+1)}x^2 + \dots \quad (2.18)$$

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. 2.11. 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) Mostre que é possível empilhar tijolos (ou livros) de forma que o tijolo mais alto esteja tão longe a direita do primeiro quanto você queira. Veja figura 2.2(b). b) Encontre a distância entre a borda da direita do tijolo mais alto para a mesma borda do tijolo abaixo dele. c) Encontre a fórmula geral para essa distância para qualquer tijolo da pilha. Dica: Calcule o torque na borda considerando as três forças atuando no tijolo. d) Mostre que a soma dessas distâncias é uma série divergente³.

2.14  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 Cadorso⁴:

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

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. 2.5), usando o

³Veja John F. Hall *Fun with stacking blocks*, Am. J. Phys. **73**, 1107 (2005). Para uma pilha invertida veja M. Paterson, Y. Peres, M. Thorup, P. Winkler and U. Zwick *Maximum Overhang*, The American Mathematical Monthly, **116**, No. 9, pp. 763-787 (2009).

⁴Ou 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.

método do código 2.1 e a Fórmula do Cadarsó. b) A partir desse algoritmo, desenvolva uma implementação em Python que faça o cálculo e gere os gráficos como das figuras 2.1(a) e 2.1(b).

2.15) ★★ Mostre que:

$$\int_0^{\infty} \frac{\sinh(\pi x)}{\sinh(3\pi x)} e^{-3\pi x^2} dx = \frac{1}{\sqrt{3}e^{2\pi/3}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\exp[-2n(n+1)\pi]}{(1+e^{-\pi})^2(1+e^{-3\pi})^2 \dots (1+e^{-(2n+1)\pi})^2}.$$

Dica: veja [1].

2.16) ★★ Mostre os seguintes resultados:

$$\begin{aligned} \text{a)} \quad \int_0^1 x^x dx &= 1 - \frac{1}{2^2} + \frac{1}{3^3} - \frac{1}{4^4} + \frac{1}{5^5} - \dots = 0.78343\dots \\ \text{b)} \quad \int_0^1 x^{x^2} dx &= 1 - \frac{1}{3^2} + \frac{1}{5^3} - \frac{1}{7^4} + \frac{1}{9^5} - \dots = 0.89648\dots \\ \text{c)} \quad \int_0^1 x^{\sqrt{x}} dx &= 1 - \left(\frac{2}{3}\right)^2 + \left(\frac{2}{4}\right)^3 - \left(\frac{2}{5}\right)^4 + \left(\frac{2}{6}\right)^5 - \dots = 0.65858\dots \end{aligned} \quad (2.19)$$

A integral da Eq. 2.19 foi resolvida primeiramente pelo matemático suíço John Bernoulli em 1697. Ele ficou tão fascinado pelo resultado que o chamou de "series mirabili", ou série maravilhosa⁵.

2.17) 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?

2.2 Números Complexos

Números 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.

2.2.1 Álgebra Complexa

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

⁵Veja Ref. [1].

Exemplo 2.8

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 o símbolo $i = \sqrt{-1}$ 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 2.3(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 $i \equiv (0, 1)$ ⁶.

Um número complexo $z = (a, b)$ nada mais é então do que um ponto no plano complexo, tendo sua abcissa 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:

$$zz^* = (a + ib)(a - ib) = a^2 + b^2 = |z|, \quad (2.20)$$

onde $|z|$ é chamado de módulo de z .

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

$$\frac{z_1}{z_2} = \frac{z_1 z_2^*}{z_2 z_2^*} = \frac{z_1 z_2^*}{|z_2|} \quad (2.21)$$

⁶Em outras áreas, engenharia por exemplo, é comum usar j como sendo a unidade imaginária.

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

$$\frac{z_1}{z_2} = \frac{a_1 a_2 + b_1 b_2 + i(a_2 b_1 - a_1 b_2)}{a_2^2 + b_2^2}. \quad (2.22)$$

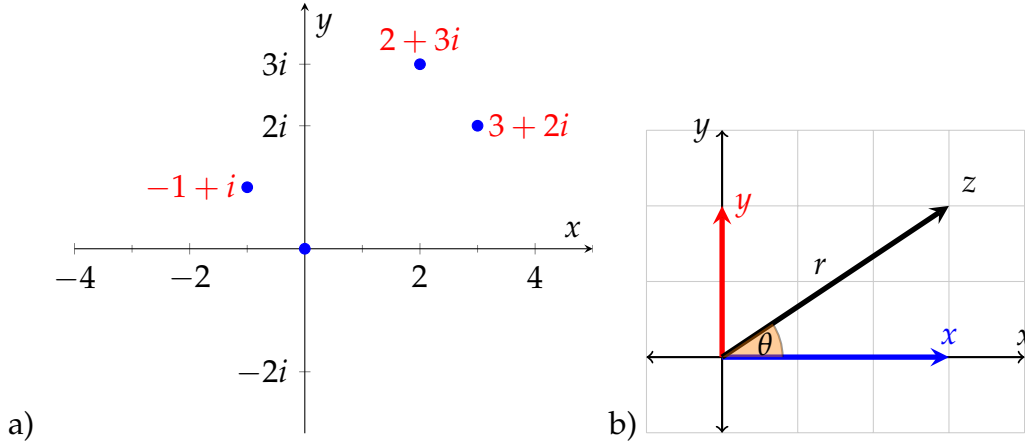


Figura 2.3: (a) Plano complexo com alguns pontos representados. (b) Representação polar de um número complexo.

2.2.2 Forma polar

Outra forma útil de escrever números complexos é usando coordenadas polares. Da figura 2.3(b) temos que:

$$x = r \cos \theta, \quad y = r \sin \theta, \quad z = r(\cos \theta + i \sin \theta). \quad (2.23)$$

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:

$$\begin{aligned} e^{i\theta} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(i\theta)^n}{n!} = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(i\theta)^{2m}}{(2m)!} + \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(i\theta)^{2m+1}}{(2m+1)!} = \sum_{m=0}^{\infty} (i)^m \frac{(\theta)^{2m}}{(2m)!} + i \sum_{m=0}^{\infty} (-1)^m \frac{(\theta)^{2m+1}}{(2m+1)!} \\ &= \cos \theta + i \sin \theta. \end{aligned} \quad (2.24)$$

A Eq. 2.24 é a famosa relação de Euler. A partir dela podemos representar um número complexo em coordenada polar (Eq. 2.23) como $z = re^{i\theta}$. A fórmula de Euler permite escrever as regras de adição de ângulos, por exemplo:

$$\cos(\theta_1 + \theta_2) + i \sin(\theta_1 + \theta_2) = \cos \theta_1 \cos \theta_2 - \sin \theta_1 \sin \theta_2 + i(\sin \theta_1 \cos \theta_2 + \sin \theta_2 \cos \theta_1). \quad (2.25)$$

Outras propriedades interessante são:

$$|z_1| - |z_2| \leq |z_1 + z_2| \leq |z_1| + |z_2|, \quad |z_1 \cdot z_2| = |z_1| \cdot |z_2|. \quad (2.26)$$

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. 2.24), $\exp i\theta + 2im\pi = e^{i\theta} \cos 2m\pi = e^{i\theta}$. 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 $\exp i\theta + 2in\pi = e^{i\theta}$ temos que:

$$\ln z = \ln r \exp i\theta + 2in\pi = \ln r + i(\theta + 2n\pi), \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (2.27)$$

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.

Código 2.3

Série de números complexos tem diversas aplicações, como por exemplo em fractais. Por exemplo o conjunto de Mandelbrot que é o conjunto 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 M de Maldelbrot é pode ser definido como:

$$c \in \mathbb{M} \iff \lim_{n \rightarrow +\infty} |z_{n+1}| \leq L. \quad (2.28)$$

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 2.4. 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). Os valores calculados da função são armazenados na matriz `fm`. O gráfico é feito usando o comando `plt.imshow`.

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

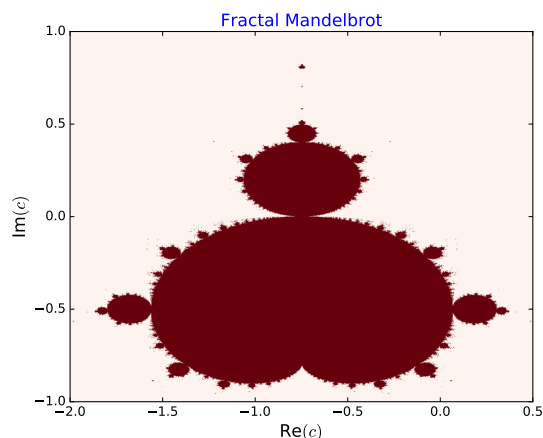


Figura 2.4: Fractal de Mandelbrot.

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 2.5).

O estudo de fractais deu um grande salto com Benoit Mandelbrot, que criou o fractal q leva seu nome (veja figuras 2.4 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

2.18) a) Deduza a expressão da Eq. 2.22. b) Deduza a equação 2.25. c) Deduza os resultados das equações 2.26. d) Mostre que $\arg(z_1 z_2) = \arg(z_1) + \arg(z_2)$, onde $\arg(z)$ = a fase de z .

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

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

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

2.22) Mostre que: a) $\sin^{-1} z = -i \ln\left(iz \pm \sqrt{1 - z^2}\right)$, b) $\cos^{-1} z = -i \ln\left(z \pm \sqrt{z^2 - 1}\right)$ e c) $\tan^{-1} z = \frac{i}{2} \ln\left(\frac{i + z}{i - z}\right)$.

2.23) 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)

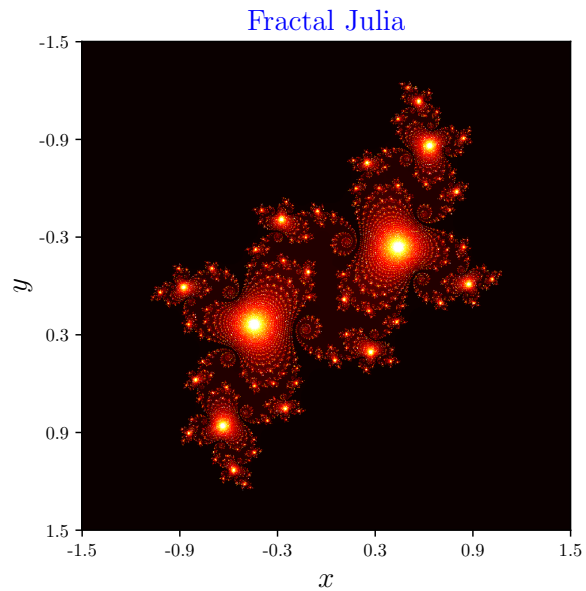


Figura 2.5: Fractal do tipo Julia referente ao Problema 2.25. Parâmetros utilizados: $f(z) = z^2$, $c = -1 + 0,65i$, $\Xi = 2000$, $-1,5 < x, y < 1,5$ e $L = 10$.

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

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

2.25) ★ Os fractais apresentados nas figuras 2.4 e ?? são do tipo Mandelbrot, definidos pela Eq. 2.28. 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 construímos a função $\Gamma(x, y, c, f)$ na mesma região. O gráfico de tal função é um fractal⁷, como o da figura 2.5. Diferentes valores de c e expressões para $f(z)$ geram diferentes fractais⁸. Construa um código que cria uma imagem de fractal do tipo Julia. Use os parâmetros da figura 2.5.

⁷Para evitar loop infinito, coloca-se um critério de segurança impondo $\kappa < \Xi$ para um certo Ξ .

⁸Uma linda animação variando o valor de c está no Wikipedia: <https://en.wikipedia.org/wiki/File:JSr07885.gif>.

Equações Diferenciais Ordinárias

Toda grande área da física tem uma equação diferencial central. Por exemplo, as equações de 3.1 até 3.3 referem-se a Lei de Newton para a Mecânica, Lei de Ampere-Maxwell e equação de Schrodinger na Mecânica Quântica.

$$\vec{F}(t) = m \frac{d^2}{dt^2} \vec{r}(t) \quad (3.1)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{B}(\vec{r}, t) = \mu_0 \vec{J}(\vec{r}, t) + \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \vec{E}(\vec{r}, t) \quad (3.2)$$

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\vec{r}, t) \right] \Psi(\vec{r}, t) \quad (3.3)$$

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.

Antes de apresentar as técnicas de soluções numéricas, vamos classificar as equações diferenciais (EDs) quanto a algumas características importantes. Consideremos 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 inhomogênea: $\frac{d^2 y}{dx^2} + y^2 = \sin x$.
- ED linear, segunda ordem, parcial e inhomogênea: $\frac{d^2 y}{dt^2} + \frac{d^2 y}{dx^2} = f(x, t)$.

Uma equação diferencial ordinária de primeira ordem é escrita da forma:

$$\frac{dy}{dt} = f(t, y).$$

O que define ela ser de primeira ordem é a derivada primeira no lado esquerdo da equação. Mesmo se $f(t, y)$ for uma função complicada, a equação anterior continua sendo de primeira ordem. Já uma EDO de segunda ordem é do tipo:

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

3.1 EDO de ordem 1

3.1.1 Separação de variáveis

A forma geral de EDO linear de ordem 1 que iremos tratar neste capítulo é:

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

O tipo mais simples de se resolver é quando a equação pode ter suas variáveis separadas podendo ser escrita na forma $Q(y)dy = P(x)dx$. 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 3.1

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:

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

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 $e^{\ln a} = a$ teremos:

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

Neste capítulo vamos resolver problemas físicos resolvendo numericamente as equações diferenciais ordinárias (EDO) associadas. Primeiro, apresentamos as técnicas a serem utilizadas. Problemas envolvendo equações diferenciais parciais serão resolvidas no capítulo ??.

Exemplo 3.2

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 aposentado, 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:

$$m \frac{dv}{dt} = mg - bv^2. \quad (3.4)$$

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: $v_t = \sqrt{mg/b}$. A outra forma de encontrar v_t é resolvendo a equação diferencial. Veja que a Eq. 3.4 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:

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

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. 3.4):

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

3.1.2 EDO de ordem 1 homogênea

Seja a seguinte equação diferencial:

$$\frac{dy}{dt} + p(x)y = 0. \quad (3.5)$$

Esta equação é homogênea. Nesta seção provaremos os seguintes resultados:

- **Teorema 1:** A solução geral de uma EDO de ordem 1 possui uma solução LI, definida a menos de uma constante.

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:

$$a\mathbf{C}_1 + b\mathbf{C}_2 = 0 \quad (3.6)$$

é $a = b = 0$. Se os vetores são paralelos podemos fazer $\mathbf{C}_1 = \alpha\mathbf{C}_2$ na Eq. 3.6 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. 3.5 por exemplo). Logo:

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

O que implica:

$$W(y_1, y_2) = y_1'y_2 - y_1y_2' = 0. \quad (3.7)$$

A grandeza $W(y_1, y_2)$ é chamada de wronskiano e é definida pela própria Eq. 3.7. Assim, se o wronskiano de duas funções é zero é por que as duas funções são LD. Se for diferente de zero as duas funções são LI¹. Assim, a solução geral da Eq. 3.5 contém apenas uma função.

Exemplo 3.3

As soluções da equação diferencial

$$y'' + \omega^2 y = 0 \quad (3.8)$$

¹Esse conceito é expansível para mais funções: 3 funções são LI se o wronskiano delas for zero. O mesmo vale para mais funções.

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

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

o 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.

3.1.3 EDO de ordem 1 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. Por exemplo, consideremos a EDO não homogênea

$$\frac{dy}{dt} + p(x)y = q(x), \quad (3.9)$$

com $q(x) \neq 0$. Podemos escrever a solução geral como $y = y_h + y_p$ onde y_h é a solução geral da homogênea e y_p é uma solução particular da não homogênea. A equação homogênea associada da Eq. 3.9 é a Eq. 3.5, a qual contém apenas um termo por ser de ordem 1. A solução particular y_p pode ser qualquer função que satisfaça a Eq. 3.9. Por exemplo podemos assumir que y_p seja constante no tempo, logo: $y_p' = 0$ de forma que obtemos $y_p(x) = q(x)/p(x)$.

Exemplo 3.4

Circuito RL. Neste exemplo iremos resolver o circuito RL. Aplicando a Lei das Malhas teremos:

$$L \frac{dI}{dt} + RI = V_0 \quad (3.10)$$

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.

3.10 temos: $I_p = \frac{V_0}{R}$. A eq. homogênea é:

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

que é da mesma forma da Eq. 3.8. 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 $I(0) = 0$, o que retorna $C = -V_0/R$. Logo:

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

3.2 EDO de ordem 2

EDOs lineares e de segunda ordem são as mais comuns em física: Lei de Newton envolve uma segunda derivada da posição assim como a energia cinética na mecânica quântica. Já a força torna a EDO não homogênea. Nesta seção apresentamos métodos para encontrar a solução geral da não homogênea $y = y_h + y_p$ (veja seção 3.1.3).

Nas EDOs de ordem 1 há uma constante arbitrária na solução devido a uma integração. Agora, como haverá duas integrações encontraremos duas constantes arbitrárias que também devem ser definidas em função das condições de contorno.

3.2.1 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 3.1. 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 3.5

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^a obtemos $z = C_1 e^x$. A solução para y fica então:

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

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 $y(x) = Ce^x$.

^aE novamente usando a propriedade $e^{\ln a} = a$.

Algumas EDOs de ordem 2 não lineares também podem ser resolvidas por este método, por exemplo $y'' = y'^2$.

3.2.2 Solução tentativa: exponencial

Uma forma simples de se obter a solução de uma EDO é usar uma solução tentativa, que consiste em testar se um dado tipo de função é solução². 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: $y' = pe^{px} = py$ e $y'' = p^2 e^{px} = p^2 y$. A EDO fica então:

$$ap^2 + bp + c = 0,$$

cujas raízes são:

$$p_{1,2} = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}.$$

A solução fica:

$$y = C_1 e^{p_1 x} + C_2 e^{p_2 x}. \quad (3.11)$$

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 decrescente e tende a zero, sendo chamada de oscilação superamortecida, como mostra a figura. 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. 3.11 a solução fica:

$$y(x) = e^{rx} (C_1 e^{iqx} + C_2 e^{-iqx}) = e^{rx} (C_1 \cos qx + C_2 \sin qx). \quad (3.12)$$

As exponenciais complexas se transformam em seno e cosseno usando a fórmula de Euler:

$$e^{i\theta} = \cos \theta + i \sin \theta. \quad (3.13)$$

Repare então que a solução da Eq. 3.12 é uma oscilação porém de amplitude decrescente (devido a exponencial real), como mostra a figura.

²Claro que este método é inviável na maioria dos casos. Porém, os poucos casos em que é sucedido já valem a pena.

Exemplo 3.6

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

A voltagem através do resistor é Ri , através do indutor é proporcional a taxa de variação instantânea da corrente $L di/dt$ 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:

$$L \frac{d^2 i}{dt^2} + R \frac{di}{dt} + \frac{i}{C} = \omega V_0 \sin \omega t. \quad (3.14)$$

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. 3.14 é $i(t) = i_h(t) + i_p(t)$ onde o primeiro termo é a solução geral da homogênea (Eq. 3.14 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:

$$p^2 + \frac{R}{L}p + \frac{1}{LC} = 0, \quad p_{\pm} = -\frac{R}{2L} \pm \frac{1}{2L} \sqrt{R^2 - \frac{4L}{C}}. \quad (3.15)$$

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. Façamos 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. 3.14 temos:

$$\begin{aligned} -\omega^2 L(A \cos \omega t + B \sin \omega t) + R\omega(-A \sin \omega t + B \cos \omega t) \\ + \frac{1}{C}(A \cos \omega t + B \sin \omega t) = \omega V_0 \cos \omega t. \end{aligned} \quad (3.16)$$

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:

$$i_p(t) = I_0 \sin(\omega t - \phi), \quad I_0 = \sqrt{A^2 + B^2} = \frac{V_0}{\sqrt{R^2 + S^2}}, \quad \tan \phi = -\frac{A}{B} = \frac{S}{R}. \quad (3.17)$$

$\sqrt{R^2 + S^2}$ é chamado de impedância.

3.2.3 Oscilador Harmônico

A tentativa de solução exponencial também serve para equação homogênea do tipo:

$$\frac{d^2 y}{dx^2} = \pm s^2 y, \quad (3.18)$$

Supondo $y = e^{px}$ teremos $p^2 y = \pm s^2 y$. Como queremos uma solução não nula $y \neq 0$ temos que $p^2 = \pm s^2$. No caso do sinal ser $+$ na Eq. 3.18 temos que $p = \pm s$ e a solução fica composta de exponenciais reais:

$$y(x) = A e^{sx} + B e^{-sx}. \quad (3.19)$$

No caso do sinal ser negativo na Eq. 3.18 temos que $p = \pm \sqrt{-s^2} = \pm is$ e a solução será composta de exponenciais complexas:

$$y(x) = A e^{isx} + B e^{-isx} = A \cos sx + B \sin sx. \quad (3.20)$$

As exponenciais complexas equivalem a senos e cossenos via fórmula de Euler (Eq. 3.13). Esta é a solução do oscilador harmônico. A Eq. 3.18 aparece muito em diversos problemas de física.

Problemas

3.1) Considere o exemplo 3.6. a) Deduza as equações 3.15. b) Deduza a Eq. 3.16. c) Mostre que a solução pode ser reescrita na forma das Eqs. 3.17.

3.2) Encontre as soluções das equações diferenciais: a) $y'' + 3y' - 4y = \sin \omega x$, b) $y'' + 3y' - 4y = \cos \omega x$.

3.3) Uma partícula de massa m e carga elétrica q se move uma 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 $E \neq 0$.

3.3 Solução em série

Problemas

3.4) 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 .

3.5) A descrição quântica do efeito Stark utilizando coordenadas parabólicas leva a seguinte equação diferencial:

$$\frac{d}{d\zeta} \left(\zeta \frac{du}{d\zeta} \right) + \left(\frac{1}{2}E\zeta + \alpha - \frac{m^2}{4\zeta} - \frac{1}{4}F\zeta^2 \right) u = 0,$$

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 raiz maior da equação indicial $k^2 - m^2/4 = 0$, desenvolva uma solução em série de potência em torno de $\zeta = 0$. Encontre os 3 primeiros coeficientes em termos de a_0 , que é o menor coeficiente na seguinte série de potência $u(\zeta)$:

$$u(\zeta) = a_0 \zeta^{m/2} \left\{ 1 - \frac{\alpha}{m+1} \zeta + \left[\frac{\alpha^2}{2(m+1)(m+2)} - \frac{E}{4(m+2)} \right] \zeta^2 + \dots \right\}. \quad (3.21)$$

3.6)

3.7)

3.4 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 realísticos, ou

utilizar dados experimentais como entrada, e mesmo assim, queremos uma solução razoável. As vezes 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 $n = 1, 2, 3, \dots$

3.4.1 Método de Euler

Seja a eq. diferencial $y' = f(x, y)$ com a condição inicial $y_0 = y(x_0)$. A série de Taylor

$$y_1 = y(x_0 + h) = y_0 + hy'(x_0) + \frac{h^2}{2!}y''(x_0) + \frac{h^3}{3!}y'''(x_0) + \dots = \sum_n \frac{h^n}{n!}y^{(n)}(x_0) \quad (3.22)$$

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 analítica³, o que nem sempre é o caso. A aproximação mais simples é considerar apenas dois termos na Eq. 3.22: $y_1 = y_0 + hf(x, y)$. De forma geral:

$$y_{n+1} = y_n + hf(x, y), \quad (3.23)$$

onde os termos envolvendo h^2 e superiores foram desprezados. A Eq. 3.23 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.

3.4.2 Méto de Runge-Kutta

Método de Runge-Kutta (RK) é o nome dado a refinamentos do Método de Euler: RK de ordem n considera termos até h^n . Novamente deve ser feito um balanço entre precisão e tempo de cálculo. Uma ordem bastante utilizada é RK de quarta ordem, que contém erro da ordem de h^5 , definido por

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{6}(k_0 + 2k_1 + 2k_2 + k_3), \quad (3.24)$$

onde

$$\begin{aligned} k_0 &= hf(x_n, y_n), & k_1 &= hf\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{k_0}{2}\right), \\ k_2 &= hf\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{k_1}{2}\right), & k_3 &= hf(x_n + h, y_n + k_2). \end{aligned}$$

³Neste caso, pode ser trabalhoso efetuar várias derivadas, mas programas como Mathematica, Matlab e Python podem efetuá-las de forma simbólica.

A ideia central do método RK é eliminar o erro ordem por ordem. Uma derivação detalhada destas expressões pode ser encontrada em Ralston (1960)⁴ e Press (1992)⁵. 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.

3.4.3 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

$$\frac{du}{dx} = f_1(x, u, v), \quad \frac{dv}{dx} = f_2(x, u, v), \quad (3.25)$$

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:

$$x_{n+1} = x_n + v\Delta t, \quad v_{n+1} = v_n + f(t, x)\Delta t. \quad (3.26)$$

Podemos então definir um vetor que representa o estado do sistema:

$$y_{n+1} = y_n + y'\Delta t, \quad y = \begin{bmatrix} x \\ v \end{bmatrix}, \quad y' = \frac{dy}{dt} = \begin{bmatrix} v \\ f(x, t) \end{bmatrix}. \quad (3.27)$$

3.4.4 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 planetas⁶. 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 gravitacional⁷ entre dois corpos é:

$$\mathbf{F} = G \frac{Mm}{r^2} \hat{\mathbf{r}}.$$

⁴Ralston, A., and Wilf, H. S. (Eds.) (1960). Mathematical Methods for Digital Computers. Wiley, New York.

⁵Press, W. H., Flannery, B. P., Teukolsky, S. A., and Vetterling, W. T. (1992). Numerical Recipes, 2nd ed. Cambridge Univ. Press, Cambridge, UK.

⁶A massa dos outros astros é consideravelmente menor, e por isso a força gravitacional é desprezada.

⁷Publicado por Isaac Newton em 1687.

onde G é a constante gravitacional universal, M e m são as massas dos astros, r é a distância entre ambos 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 3.1 para esse e outros valores astronômicos) e o astro é considerado 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 :

$$\mathbf{F}_p = -Gm_p m \frac{\hat{\mathbf{z}}}{z} = -\frac{Gm_p m}{(x - x_p)^2 + (y - y_p)^2} \frac{(x - x_p)\hat{\mathbf{x}} + (y - y_p)\hat{\mathbf{y}}}{\sqrt{(x - x_p)^2 + (y - y_p)^2}},$$

onde p refere-se a planetas⁸ e $\mathbf{z} = \mathbf{r} - \mathbf{r}_p$ é o vetor separação (veja seção 1.1.4). 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 resultado agora se torna bidimensional. Assim Lei de Newton então consiste de duas equações:

$$T_x = m_j \frac{d^2 x}{dt^2}, \quad T_y = m_j \frac{d^2 y}{dt^2}.$$

As componentes da força são:

$$\begin{aligned} T_x(x, y, x_p, y_p, t) &= \hat{\mathbf{x}} \cdot \left(\mathbf{F}_s - \sum_p \mathbf{F}_p \right) \\ &= -GM_s m \frac{x}{(x^2 + y^2)^{3/2}} - Gm \sum_p m_p \frac{x - x_p}{[(x - x_p)^2 + (y - y_p)^2]^{3/2}} \end{aligned} \quad (3.28)$$

$$\begin{aligned} T_y(x, y, x_p, y_p, t) &= \hat{\mathbf{y}} \cdot \left(\mathbf{F}_s - \sum_p \mathbf{F}_p \right) \\ &= -GM_s m \frac{y}{(x^2 + y^2)^{3/2}} - Gm \sum_p m_p \frac{y - y_p}{[(x - x_p)^2 + (y - y_p)^2]^{3/2}} \end{aligned} \quad (3.29)$$

⁸Veja que $\mathbf{F}_s = \mathbf{F}_p$ com $x_p = y_p = 0$. Além disso, o sinal negativo indica que \mathbf{F}_p sai do astro em direção ao planeta.

Todas as variáveis x , y , x_p e y_p dependem do tempo.

As duas equações de ordem 2 em T_x e T_y são convertida em 4 equações de ordem 1:

$$\begin{aligned}\frac{dx}{dt} &= v_x, & \frac{dv_x}{dt} &= \frac{T_x}{m}, \\ \frac{dy}{dt} &= v_y, & \frac{dv_y}{dt} &= \frac{T_y}{m},\end{aligned}$$

Essas equações podem ser condensadas na forma matricial:

$$z = \begin{bmatrix} x \\ y \\ v_x \\ v_y \end{bmatrix}, \quad \frac{dz}{dt} = \begin{bmatrix} v_x \\ v_y \\ T_x/m \\ T_y/m \end{bmatrix}. \quad (3.30)$$

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 3.1: 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 3.1

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. 3.28 e 3.29) 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. 3.30 considerando $x_0 = 2, y_0 = 0$ 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 3.1. 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
    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()

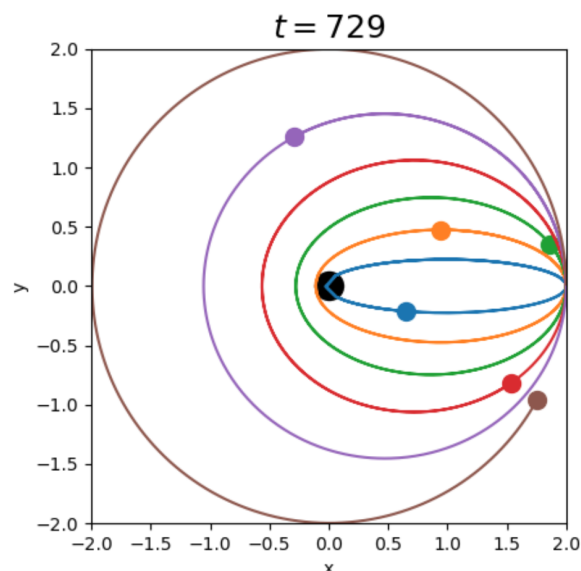
```

Código 3.2

Pêndulo acoplado. Seja o sistema pêndulo-mola mostrado na figura 3.2(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:

$$\begin{aligned}
 \ddot{L} &= (L_0 + L)\ddot{\theta}^2 - \frac{k}{m}L + g \cos \theta \\
 \ddot{\theta} &= -\frac{1}{L_0 + L} (2\dot{L}\dot{\theta} + g \sin \theta)
 \end{aligned}$$

Figura 3.1: 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.



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 3.2(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 funcao de x está na figura 3.2(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>.

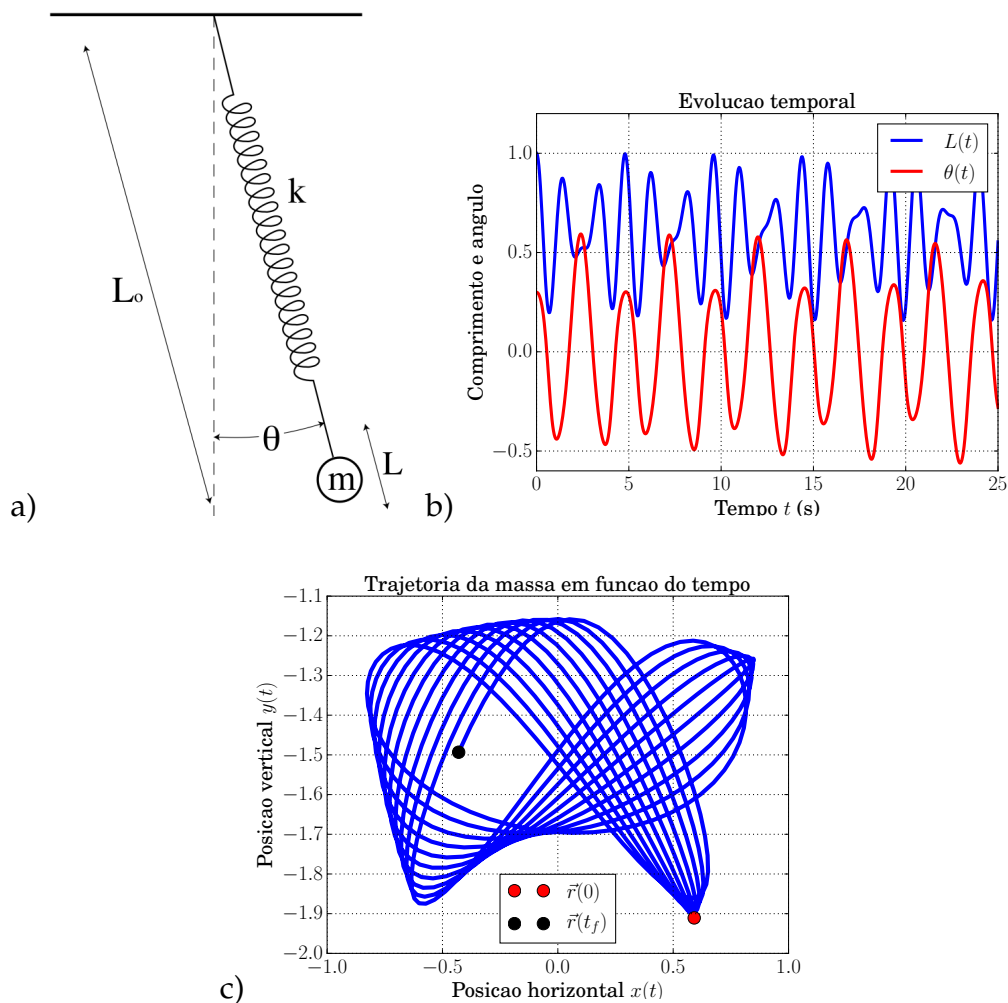


Figura 3.2: (a) Ilustração de uma massa presa a uma mola com uma de suas extremidades fixa em uma superfície, ficando sob ação da gravidade. Figura retirada da Ref. [?]. (b) Gráfico de $L(t)$ e $\theta(t)$. (c) Gráfico da posição $\vec{r}(t)$, ou seja, de $y(t)$ em função de $x(t)$. O ponto vermelho é o ponto inicial e o preto o final.

Código 3.3

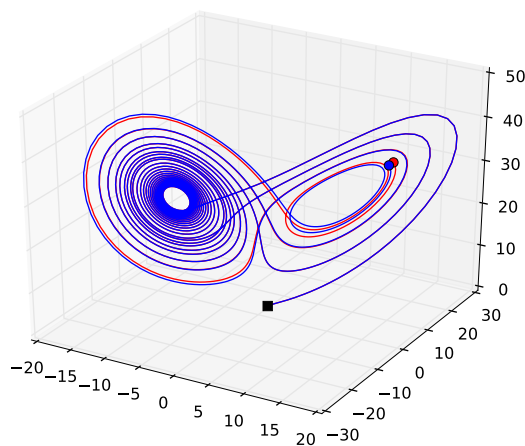
Atrator de Lorentz. O atrator de Lorentz é definido pelas equações:

$$\frac{dx}{dt} = \sigma(y - x), \quad \frac{dy}{dt} = x(\rho - z) - y, \quad \frac{dz}{dt} = xy - \beta z.$$

```
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 partícula 1
state02 = [1.001, 1.0, 1.0] #posicao inicial da partícula 2
```

Figura 3.3: 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 $(0.001; 0.0; 0.0)$.



```
t = np.arange(0.0, 20.0, 0.01) #intervalo de tempo

states1 = odeint(f, state01, t) #calcula a trajetoria da partícula 1
states2 = odeint(f, state02, t) #calcula a trajetoria da partícula 2
```

Na figura 3.3 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.

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".

Funções especiais

Inspiração: *RG: There was a time that everything in the universe was once crunched into something smaller than an atom ... SC: But you dont know that. You're just believing Stephen Hawking and that's a matter of faith in his abilities. You dont know it yourself, you're accepting that because someone told you. RG: Well, yeah... But science is constantly proved all the time. If we take any fiction book and destroy it, in a thousand years' time that wouldn't come back just as it was. Whereas if we took every science book, every fact, and destroy them all, in a thousand years they'd all be back. Because all the same tests would give the same results. SC: That's good. That's really good.*

Stephen Colbert show.

4.1 Funções de Bessel

Funções de Bessel 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.

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 4.1.

Há várias formas de se encontrar as funções de Bessel. Uma delas é a partir da equação diferencial

$$x^2Z''_{\nu} + xZ'_{\nu} + (x^2 - \nu^2)Z_{\nu} = 0, \tag{4.1}$$

onde ν não precisa ser inteiro e x é uma variável adimensional¹. Assim, qualquer função

¹É comum usar ν 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	$H_\nu^{(1)} = J_\nu + iY_\nu$	$H_\nu^{(2)} = J_\nu - iY_\nu$
Função de Bessel modificada	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 4.1: 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 .

Z_ν 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:

$$r^2 \frac{d^2}{dr^2} Z_\nu(kr) + r \frac{d}{dr} Z_\nu(kr) + (k^2 r^2 - \nu^2) Z_\nu(kr) = 0. \quad (4.2)$$

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:

$$Y_\nu = \frac{\cos(\nu\pi) J_\nu(x) - J_{-\nu}(x)}{\sin \nu\pi} \quad (4.3)$$

Assim, a solução geral da equação de Bessel é:

$$Z_\nu(x) = A J_\nu(x) + B Y_\nu(x). \quad (4.4)$$

Na figura 4.1(a) está o gráfico com as primeiras funções J_n e Y_n .

Um pouco de história.

Friedrich Wilhelm Bessel. Astrônomo alemão (1784-1846). 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 desenvolveu as funções que leva seu nome em seu trabalho de refinar cálculos astronômicos. Bessel 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.

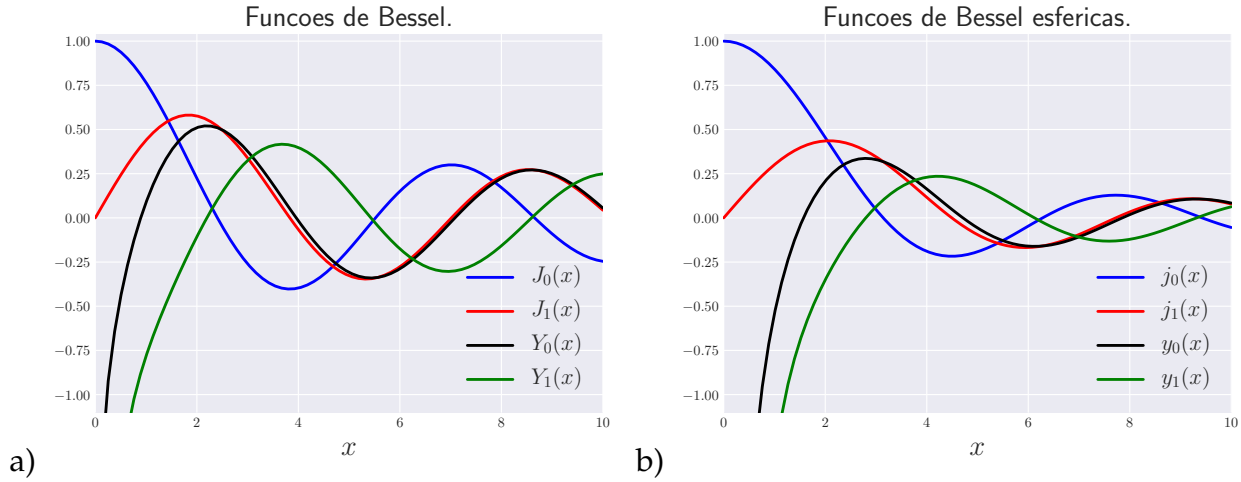


Figura 4.1: (a) Funções de Bessel $J_n(x)$ e $Y_n(x)$ para $n = 1, 2$. (b) Funções de Bessel esférica $j_n(x)$ e $y_n(x)$ para $n = 1, 2$.

4.1.1 Solução em série

Vamos resolver a Eq. 4.1 por séries usando supondo $y(x) = \sum_{\lambda=0}^{\infty} a_{\lambda} x^{k+\lambda}$. Diferenciando e inserindo $y(x)$ na Eq. 4.1 temos:

$$\sum_{\lambda=0}^{\infty} a_{\lambda} (k+\lambda)(k+\lambda-1) x^{k+\lambda} + \sum_{\lambda=0}^{\infty} a_{\lambda} (k+\lambda) x^{k+\lambda} + \sum_{\lambda=0}^{\infty} a_{\lambda} x^{k+\lambda+2} - \sum_{\lambda=0}^{\infty} a_{\lambda} n^2 x^{k+\lambda} = 0. \quad (4.5)$$

Resolver uma equação diferencial por séries consiste em encontrar os coeficientes a_{λ} usando a Eq. 4.5. 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 consideramos 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. 4.5 e $\lambda = j-2$ no terceiro termo. Fazendo o coeficiente de x^{k+j} igual a zero temos (veja problema 4.1):

$$a_j[(n+j)(n+j-1) + (n+j) - n^2] + a_{j-2} = 0. \quad (4.6)$$

A relação de recorrência fica então:

$$a_j = -\frac{a_{j-2}}{(j+2)(2n+j+2)}.$$

A relação de recorrência é mais útil em função de a_0 :

$$a_{2p} = (-1)^p \frac{a_0 n!}{2^{2p} p! (n+p)!}. \quad (4.7)$$

Agora podemos obter a solução, inserindo os coeficientes na solução tentativa:

$$\begin{aligned} y(x) &= a_0 x^n \left[1 - \frac{n! x^2}{2^2 1! (n+1)!} + \frac{n! x^4}{2^4 2! (n+2)!} + \dots \right], \\ &= a_0 2^n n! \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-1)^j}{j! (n+j)!} \left(\frac{x}{2} \right)^{n+2j}. \end{aligned} \quad (4.8)$$

A menos da constante, a série da função de Bessel é escrita como:

$$J_n(x) = \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(-1)^s}{s! (s+n)!} \left(\frac{x}{2} \right)^{n+2s}. \quad (4.9)$$

4.1.2 Outras funções

Várias outras funções de Bessel podem ser definidas também. Por exemplo as funções de Hankel estão definidas na tabela 4.1. 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:

$$\begin{aligned} J_\nu(z) &= \frac{1}{2} \left[H_\nu^{(1)}(z) + H_\nu^{(2)}(z) \right], \\ Y_\nu(z) &= \frac{1}{2i} \left[H_\nu^{(1)}(z) - H_\nu^{(2)}(z) \right]. \end{aligned}$$

Temos também as seguintes propriedades:

$$H_\nu^{(1)}(z) = e^{-i\nu\pi} H_{-\nu}^{(1)}(z), \quad H_\nu^{(2)}(z) = e^{i\nu\pi} H_{-\nu}^{(2)}(z).$$

Usando essas expressões pode-se mostrar que:

$$J_{-\nu}(z) = \frac{1}{2} \left[e^{i\nu\pi} H_\nu^{(1)}(z) + e^{-i\nu\pi} H_\nu^{(2)}(z) \right]. \quad (4.10)$$

Tem-se ainda as chamadas função de Bessel modificada. Começemos 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. 4.2 teremos:

$$\rho^2 \frac{d^2}{d\rho^2} \Gamma_\nu(k\rho) + \rho \frac{d}{d\rho} \Gamma_\nu(k\rho) - (k^2 \rho^2 - \nu^2) \Gamma_\nu(k\rho) = 0 \quad (4.11)$$

A diferença é que o $+$ antes dos 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. 4.2 para a Eq. 4.11 de forma que $\Gamma_\nu(k\rho) = Z_\nu(ik\rho)$ (veja Eq. 4.4). Ou seja, as soluções $\Gamma_\nu(k\rho)$ são funções de Bessel com argumento imaginário. Por convenção e conveniência, define-se então:

$$\Gamma_\nu(k\rho) = I_\nu(x) \equiv i^{-\nu} J_\nu(ix) \quad (4.12)$$

onde fizemos $x = k\rho$. Dessa definição, podemos escrever as formas:

$$I_\nu(x) = \exp\left(-\frac{1}{2}\nu\pi i\right) J_\nu(xe^{i\pi/2}), \quad I_\nu(x) = \sum_{s=0}^{\infty} \frac{1}{s!(s+\nu)!} \left(\frac{x}{2}\right)^{2s+\nu}. \quad (4.13)$$

4.1.3 Funções de Bessel esféricas

Quando a equação de Helmholtz é separada em coordenadas esféricas a parte radial fica da forma:

$$r^2 \frac{d^2 R}{dr^2} + 2r \frac{dR}{dr} + [\kappa^2 r^2 - n(n+1)] R = 0 \quad (4.14)$$

$n(n+1)$ é uma constante de separação. Esta equação é semelhante mas não é a equação de Bessel. Se fizermos a separação:

$$R(\kappa r) = \frac{Z(\kappa r)}{\sqrt{\kappa r}}$$

a Eq. (4.14) fica:

$$r^2 \frac{d^2 Z}{dr^2} + 2r \frac{dZ}{dr} + \left[\kappa^2 r^2 - \left(n + \frac{1}{2}\right)^2\right] Z = 0 \quad (4.15)$$

que é a equação de Bessel para Z de ordem $n + \frac{1}{2}$ de forma que $Z(\kappa r) = J_{n+\frac{1}{2}}(\kappa r)$. Assim, formalmente, $Z(\kappa r)$ será uma combinação linear entre $J_{n+\frac{1}{2}}$ e $Y_{n+\frac{1}{2}}$.

$$G(r) = A j_n(\kappa r) + B y_n(\kappa r) \quad (4.16)$$

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 4.1(b) está o gráfico com as primeiras funções j_n e y_n . Além disso, as função de Haenkel esféricas são definidas como:

$$\begin{aligned} h_n^{(1)} &= \sqrt{\frac{\pi}{2x}} H_{n+1/2}^{(1)}(x) = j_n(x) + i y_n(x), \\ h_n^{(2)} &= \sqrt{\frac{\pi}{2x}} H_{n+1/2}^{(2)}(x) = j_n(x) - i y_n(x). \end{aligned}$$

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:

$$j_n(x) = (-1)^n x^n \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^n \left(\frac{\sin x}{x} \right), \quad (4.17)$$

$$y_n(x) = -(-1)^n x^n \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^n \left(\frac{\cos x}{x} \right), \quad (4.18)$$

$$h_n^{(1)}(x) = -i(-1)^n x^n \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^n \left(\frac{e^{ix}}{x} \right), \quad (4.19)$$

$$h_n^{(2)}(x) = i(-1)^n x^n \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^n \left(\frac{e^{-ix}}{x} \right). \quad (4.20)$$

Exemplo 4.1

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:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi = E \psi, \quad (4.21)$$

logo

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{3} \frac{dR}{dr} + \left[k^2 - \frac{n(n+1)}{r^2} \right] R = 0,$$

onde $k^2 = 2mE/\hbar^2$. Veja que essa equação é idêntica a Eq. 4.14 cujas soluções são da forma da Eq. 4.16. Porém, como queremos o valor mínimo de energia vamos usar $n = 0$ de forma que a solução para nosso problema é:

$$R(r) = A j_0(kr) + B y_0(kr). \quad (4.22)$$

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 , conseqüentemente, 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 4.7), existem também as funções de Bessel esféricas modificadas i_ν e k_ν . A equação diferencial que as definem é:

$$r^2 \frac{d^2 R}{dr^2} + 2r \frac{dR}{dr} - \left[\kappa^2 r^2 + n(n+1) \right] R = 0 \quad (4.23)$$

Repare que esta equação difere da Eq. 4.14 apenas pelo sinal de $\kappa^2 r^2$. Seguindo a analogia, as soluções desta equação são definidas como:

$$i_n(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} I_{n+1/2}(x), \quad k_n(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} K_{n+1/2}(x)$$

Problemas

4.1) a) Obtenha a Eq. 4.6. b) Obtenha a relação de recorrência 4.7. c) Obtenha a expressão

final da série 4.8.

4.2) 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. 4.9 para $J_{n+1}(x)$.

4.3) Mostre que a) $Y_{-n}(x) = (-1)^n Y_n(x)$ e b) $Y'_0(x) = -Y_1(x)$.

4.4) 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.

4.5) a) Obtenha a Eq. 4.11 a partir da Eq. de difusão. b) Mostre que esta equação pode ser obtida fazendo $k \rightarrow ik$ na Eq. de Helmholtz.

4.6) a) Mostre que as expressões da Eq. 4.13 são compatíveis com a definição da Eq. 4.12. b) Mostre também que:

$$I_{-\nu}(x) = \sum_{s=0}^{\infty} \frac{1}{s!(s-\nu)!} \left(\frac{x}{2}\right)^{2s-\nu} \quad (4.24)$$

4.7) A Eq. 4.11 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:

$$K_\nu(x) \equiv \frac{\pi}{2} i^{\nu+1} H_\nu^{(1)}(ix) = \frac{\pi}{2} i^{\nu+1} [J_\nu(ix) + iN_\nu(ix)].$$

$I_\nu(x)$ 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:

$$K_\nu(x) = \frac{\pi}{2} \frac{I_{-\nu}(x) - I_\nu(x)}{\sin(\nu\pi)}.$$

4.8) Calcule as funções de Bess esféricas j_n , y_n , $h^{(1)}$ e $h^{(2)}$ para $n = 0$ e 1 .

4.9) ★ Mostre que:

$$\begin{aligned} \cos x &= J_0(x) + 2 \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n J_{2n}(x), \\ \sin x &= 2 \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n+1} J_{2n+1}(x). \end{aligned}$$

4.10) ★ Deduza a Eq. 4.17. b) Deduza a Eq. 4.18.

4.11) ★ Deduza a Eq. 4.19. b) Deduza a Eq. 4.20.

4.12) ★ Deduza a Eq. 4.10.

4.13) ★ Deduza a relação de completeza da função de Bessel esférica:

$$\int_0^{+\infty} j_n(ar)j_n(br)r^2dr = \frac{\pi}{2a^2}\delta(a-b).$$

Dica: P. Uginčius, *Am. J. Phys.* 40, 1690 (1972).

4.14) Funções de Bessel esféricas modificadas. Mostre que $i_n(x)$ e $k_n(x)$ satisfazem a Eq. 4.23.

4.15) Deduza as seguintes relações de recorrência:

$$\begin{aligned} i_{n-1}(x) - i_{n+1}(x) &= \frac{2n+1}{x}i_n(x) & \therefore & \quad k_{n-1}(x) - k_{n+1}(x) = -\frac{2n+1}{x}k_n(x) \\ \frac{d}{dx}i_n(x) &= \frac{1}{2n+1} [ni_{n-1}(x) + (n+1)i_{n+1}(x)] \\ \frac{d}{dx}k_n(x) &= -\frac{1}{2n+1} [nk_{n-1}(x) + (n+1)k_{n+1}(x)] \end{aligned}$$

4.16) ★★ 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 cilíndricas².

4.17) ★★ 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 , $H_n^{(1)}$, $H_n^{(2)}$ ou uma combinação linear dessas funções. Mostre que³

$$f(z) = B''(z) + \frac{2\nu+1}{z}B'(z) + B(z).$$

²Dica: G. N. Watson *A Treatise on the Theory of the Bessel Functions*, Cambridge University Press (1944), pág. 82.

³Dica: 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.

4.2 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:

$$\frac{d}{dx} \left[(1-x^2) \frac{dP}{dx} \right] + n(n+1)P = 0. \quad (4.25)$$

Em física, é comum encontrar esta equação em termos de θ , sendo $x = \cos \theta$. Nesta forma temos:

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left[\sin \theta \frac{dP}{d\theta} \right] + n(n+1)P = 0.$$

As soluções dessa equação podem ser encontradas de diversas formas. Uma delas é através da fórmula de Rodrigues⁴:

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \left(\frac{d}{dx} \right)^l (x^2 - 1)^l. \quad (4.26)$$

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:

$$\begin{aligned} P_0 &= 1, & P_1 &= x, & P_2 &= \frac{1}{2}(3x^2 - 1), \\ P_3 &= \frac{1}{2}(5x^3 - 3x), & P_4 &= \frac{1}{8}(35x^4 - 30x^2 + 3). \end{aligned} \quad (4.27)$$

Outra forma de encontrar esses polinômios é usar a função geradora:

$$\Phi(x, h) = \frac{1}{\sqrt{1 - 2xh + h^2}}, \quad |h| < 1. \quad (4.28)$$

A propriedade importante dessa função é que:

$$\Phi(x, h) = P_0(x) + hP_1(x) + h^2P_2(x) + \cdots = \sum_{l=0}^{\infty} h^l P_l(x). \quad (4.29)$$

A prova de que os P_l dessa equação são de fato os polinômios de Legendre envolve duas coisas: 1) mostrar que $P_l(1) = 1$ e que esses P_l satisfazem a equação de Legendre.

A função geradora é muito útil na obtenção de relações de recorrência. Alguns exemplos são:

$$\begin{aligned} lP_l(x) &= (2l-1)xP_{l-1}(x) - (l-1)P_{l-2}(x), \\ lP_l(x) &= xP'_l(x) - P'_{l-1}(x), \\ lP_{l-1}(x) &= P'_l(x) - xP'_{l-1}(x). \end{aligned} \quad (4.30)$$

⁴O fator $\frac{1}{2^l l!}$ foi escolhido para que $P_l(1) = 1$.

4.2.1 Potencial eletrostático

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 carga⁵. 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:

$$V(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{1}{z} \rho(\mathbf{r}') d\tau',$$

onde $z = r - r'$ é vetor separação e r' é a variável de integração. Da lei dos cossenos:

$$z = r^2 + (r')^2 - 2rr' \cos \theta = r^2 \left[1 + \left(\frac{r'}{r} \right)^2 - 2 \left(\frac{r'}{r} \right) \cos \theta \right],$$

onde θ é o ângulo entre \mathbf{r} e \mathbf{r}' . Dado a aproximação que estamos fazendo podemos escrever

$$z = r\sqrt{1 + \varepsilon}, \quad \varepsilon = \left(\frac{r'}{r} \right) \left(\frac{r'}{r} - 2 \cos \theta \right).$$

Assim, quando $r \gg r'$ temos $\varepsilon \ll 1$. Usando a expansão binomial:

$$\frac{1}{z} = \frac{1}{r\sqrt{1 + \varepsilon}} = \frac{1}{r} \left(1 - \frac{1}{2}\varepsilon + \frac{3}{8}\varepsilon^2 - \frac{5}{16}\varepsilon^3 + \dots \right).$$

Substituindo de volta a expressão de ε :

$$\begin{aligned} \frac{1}{z} &= \frac{1}{r} \left[1 - \frac{1}{2} \left(\frac{r'}{r} \right) \left(\frac{r'}{r} - 2 \cos \theta \right) + \frac{3}{8} \left(\frac{r'}{r} \right)^2 \left(\frac{r'}{r} - 2 \cos \theta \right)^2 - \frac{5}{16} \left(\frac{r'}{r} \right)^3 \left(\frac{r'}{r} - 2 \cos \theta \right)^3 \dots \right], \\ &= \frac{1}{r} \left[1 + \left(\frac{r'}{r} \right) \cos \theta + \left(\frac{r'}{r} \right)^2 \left(\frac{3 \cos^2 \theta - 1}{2} \right) + \left(\frac{r'}{r} \right)^3 \left(\frac{5 \cos^3 \theta - 3 \cos \theta}{2} \right) + \dots \right]. \end{aligned}$$

Analisando os coeficientes na última expressão vemos que eles são na verdade os Polinômios de Legendre:

$$\frac{1}{z} = \frac{1}{r} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{r'}{r} \right)^n P_n(\cos \theta).$$

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 $n = 2$ 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.

⁵Mas não muito longe onde o potencial é zero.

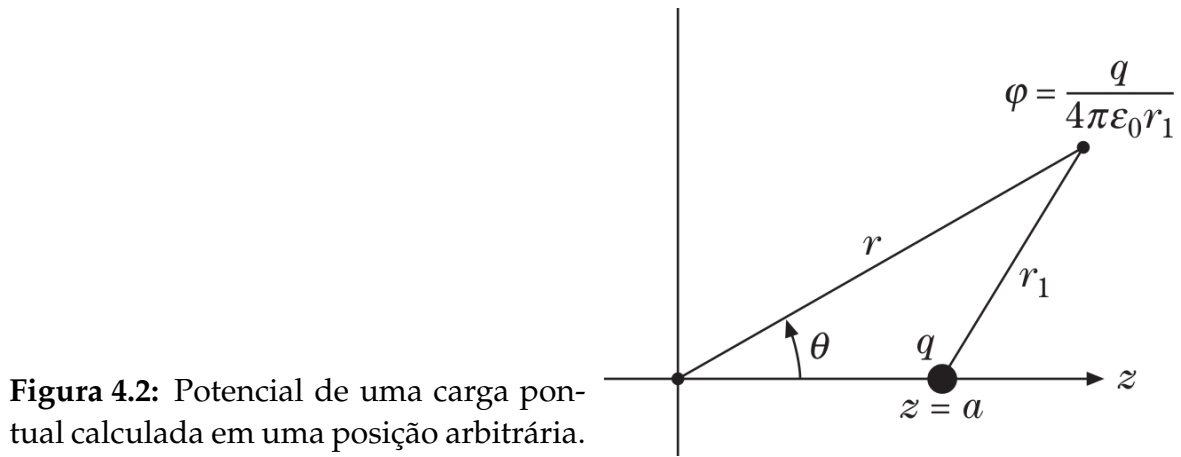


Figura 4.2: Potencial de uma carga pontual calculada em uma posição arbitrária.

4.2.2 Polinômios associados de Legendre

Uma outra função que também aparece em física é a solução da equação diferencial

$$(1 - x^2)y'' - 2xy' + \left[l(l+1) - \frac{m^2}{1-x^2}\right]y = 0 \quad (4.31)$$

que pode ser escrita como:

$$P_l^m(x) = (1 - x^2)^{m/2} \frac{d^m}{dx^m} P_l(x). \quad (4.32)$$

Assim, as funções $P_l^m(x)$ receberam o nome de polinômios associados de Legendre.

Problemas

4.18) 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:

$$\frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} = \frac{1}{r_1} \sum_{n=0}^{+\infty} P_n(\cos\theta) \left(\frac{r_2}{r_1}\right)^n.$$

4.19) a) Seja uma função expandida em polinômios de Legendre: $f(x) = \sum a_n P_n(x)$. 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.

4.20) Considerando $r > n$, mostre que:

$$\int_{-1}^{+1} x^{2r} P_{2n}(x) dx = \frac{2^{2n+1} (2r)! (r+n!)}{(2r+2n+1)! (r-n)!}.$$

4.21) Considere $\alpha = 2xh - h^2$ na função geradora $\Phi(x, h)$ da Eq. 4.28. 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. 4.29.

4.22) Uma esfera de raio R centrada na origem possui uma densidade de carga elétrica dada por:

$$\rho(r, \theta) = k \frac{R}{r^2} (R - 3r) \cos \theta, \quad (4.33)$$

onde k é uma constante. Encontre o primeiro termo diferente de zero da expansão multipolar para o potencial ao longo do eixo z .

4.23) Usando $x = \cos \theta$ mostre que a Eq. 4.31 pode ser escrita como:

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{dy}{d\theta} \right) + \left[l(l+1) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right] y = 0.$$

4.24) Mostre que a Eq. 4.32 pode ser escrita como:

$$P_l^m(x) = \frac{(1-x^2)^{m/2}}{2^l l!} \frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}} (x^2 - 1)^l. \quad (4.34)$$

Dica: use a fórmula de Rodrigues.

4.3 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 fica⁶ $\sum_i^n A_i B_i = 0$. 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 $A(x)$ e $B(x)$ são ortogonais em um intervalo (a, b) se

$$\int_a^b A^*(x) B(x) dx = 0,$$

onde A^* é o complexo conjugado de A . No caso de funções reais o complexo conjugado é a própria função.

Suponha agora que tenhamos um conjunto de funções $A_n(x)$ com $n = 1, 2, 3, \dots$. Esse conjunto será ortogonal se:

$$\int_a^b A_n^*(x) A_m(x) dx = \begin{cases} 0 & \text{se } n \neq m \\ C & \text{se } n = m \end{cases}$$

⁶Usamos $x_1 = x, x_2 = y, x_3 = z, x_4 = w, \dots$

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 $B(x) = A(x)/C$ terá módulo 1. Veja que essa definição segue a analogia com o caso de vetores onde o módulo é $A^2 = \mathbf{A} \cdot \mathbf{A}$.

4.3.1 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. 4.25 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:

$$P_m \frac{d}{dx} \left[(1-x^2) P_n' \right] - P_n \frac{d}{dx} \left[(1-x^2) P_m' \right] + [n(n+1) - m(m+1)] P_n P_m = 0. \quad (4.35)$$

Os dois primeiros termos são na verdade a derivada de um termo só, logo:

$$\frac{d}{dx} \left[(1-x^2) (P_m P_n' - P_n P_m') \right] + [n(n+1) - m(m+1)] P_n P_m = 0.$$

Integrando de -1 a 1:

$$(1-x^2) (P_m P_n' - P_n P_m') \Big|_{-1}^1 + [n(n+1) - m(m+1)] \int_{-1}^1 P_n P_m = 0.$$

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:

$$\int_{-1}^1 P_n P_m = 0, \quad n \neq m. \quad (4.36)$$

Este resultado mostra que P_n forma um conjunto ortogonal.

Agora precisamos calcular o módulo de P_l , que é o resultado da integral de superposição quando $n = m$. Multiplicando a relação de recorrência da Eq. 4.30 por $P_l(x)$ e integrando temos:

$$l \int_{-1}^1 [P_l(x)]^2 dx = \int_{-1}^1 x P_l(x) P_l'(x) dx - \int_{-1}^1 P_l(x) P_{l-1}'(x) dx. \quad (4.37)$$

A última integral é zero (dica: Eq. 4.36) e a integral do meio pode ser efetuada por partes:

$$\int_{-1}^1 x P_l(x) P_l'(x) dx = \frac{x}{2} [P_l(x)]^2 \Big|_{-1}^1 - \frac{1}{2} \int_{-1}^1 [P_l(x)]^2 dx = 1 - \frac{1}{2} \int_{-1}^1 [P_l(x)]^2 dx.$$

Substituindo esse resultado de volta na Eq. 4.37 e isolando a integral temos que:

$$\int_{-1}^1 [P_l(x)]^2 dx = \frac{2}{2l+1}.$$

Agora podemos montar a relação final de ortogonalidade dos polinômios de Legendre:

$$\int_{-1}^1 P_n(x)P_m(x)dx = \begin{cases} 0 & \text{se } n \neq m \\ \frac{2}{2n+1} & \text{se } n = m \end{cases}$$

É muito utilizado em física $P_n(x)$ com $x = \cos \theta$. Neste caso:

$$\int_0^\pi P_n(\cos \theta)P_m(\cos \theta) \sin \theta d\theta = \begin{cases} 0 & \text{se } n \neq m \\ \frac{2}{2n+1} & \text{se } n = m \end{cases} \quad (4.38)$$

Da mesma forma os polinômios associados de Legendre também formam um conjunto ortogonal:

$$\int_{-1}^1 P_l^m(x)P_n^m(x) = 0, \quad l \neq n.$$

4.3.2 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. 4.1 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:

$$x(xu')' + (a^2x^2 - p^2)u = 0, \quad x(xv')' + (b^2x^2 - p^2)v = 0,$$

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 temos⁷:

$$v(xu')' - u(xv')' + (a^2 - b^2)xuv = 0. \quad (4.39)$$

Porém, repare que:

$$\frac{d}{dx}(vxu' - uxv') = v(xu')' - u(xv')'.$$

Usando isso e integrando a Eq. 4.39 temos:

$$(vxu' - uxv') \Big|_0^1 + (a^2 - b^2) \int_0^1 xuv dx = 0.$$

⁷Semelhante ao que fizemos para obter a Eq. 4.35.

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 $a \neq b$ implica que a integral é zero! Isso mostra as funções de Bessel formam um conjunto ortogonal. A relação final de ortogonalidade é:

$$\int_0^1 x J_p(ax) J_p(bx) dx = \begin{cases} 0 & \text{se } a \neq b \\ \frac{1}{2} J_{p+1}^2(a) & \text{se } a = b \end{cases} \quad (4.40)$$

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 $x = s/a$:

$$\int_0^a s J_p(\alpha s/a) J_p(\beta s/a) ds = \begin{cases} 0 & \text{se } \alpha \neq \beta \\ \frac{a^2}{2} J_{p+1}^2(\alpha) & \text{se } \alpha = \beta \end{cases} \quad (4.41)$$

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 representador por \mathbf{a} , em Mecânica Quântica usa-se a notação (de Dirac) $|a\rangle$ e assim usaremos a notação $|\varphi\rangle$ para as autofunções.

5.1 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) $|u\rangle$:

$$\mathcal{L}|u\rangle = p_0(x) \frac{d^2 u}{dx^2} + p_1(x) \frac{du}{dx} + p_2(x)u.$$

O resultado dessa operação é outro vetor, que também pode ser feito produto interno com ainda outro vetor:

$$\langle v|\mathcal{L}|u \rangle = \langle v|\mathcal{L}u \rangle \int_a^b v^*(x)\mathcal{L}u(x) \quad (5.1)$$

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:

$$\langle u | \mathcal{L}u \rangle = \langle \mathcal{L}_a u | u \rangle \quad (5.2)$$

\mathcal{L}_a é o operador adjunto definido como:

$$\mathcal{L}_a u(x) = \frac{d^2}{dx^2}(p_0 u) + \frac{d}{dx}(p_1 u) + p_2 u \quad (5.3)$$

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:

$$\mathcal{L}u(x) = \mathcal{L}_a u(x) = \frac{d}{dx} \left[p(x) \frac{du(x)}{dx} \right] + q(x)u(x). \quad (5.4)$$

Além disso, um operador qualquer também pode se transformado em um operador auto-adjunto.

5.1.1 Autovetores e autovalores

Problemas de autovetores e autovalores são comuns em física. Por exemplo a Eq. de Schrodinger 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:

$$\mathcal{L}|u\rangle + \lambda w|u\rangle = 0, \quad (5.5)$$

onde w é o peso ou função densidade, λ é o autovalor e $|u\rangle$ o autovetor. A análise da Eq. 5.5 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:

$$\langle v | u \rangle \equiv \int_a^b v^*(x)u(x)w(x)dx \quad (5.6)$$

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 $\langle u_{\lambda 1} | u_{\lambda 2} \rangle = 0$.

5.1.2 Operadores Hermitianos

As soluções da equação diferencial resultante da Eq. 5.5 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:

$$p(x)v^*(x)\frac{du(x)}{dx}\Big|_a = p(x)v^*(x)\frac{du(x)}{dx}\Big|_b = 0. \quad (5.7)$$

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. Começemos calculando a integral:

De forma que:

$$\langle v | \mathcal{L} u \rangle = \int_a^b v^* \mathcal{L} u dx = \int_a^b u \mathcal{L} v^* dx = \langle \mathcal{L} v | u \rangle \quad (5.8)$$

Um operador que satisfaz essa propriedade é dito operador Hermitiano.

Exemplo 5.1

Seja $\mathcal{L} = d^2/dx^2$ e a seguinte equação secular:

$$\frac{d^2 y}{dx^2} + n^2 y = 0. \quad (5.9)$$

Encontre as autofunções e auto valores.

Claramente as soluções são seno e cosseno (veja Eq. 3.18): $u_n = \cos nx$ e $v_n = \sin nx$ com autovalor n . O intervalo do domínio deve ser escolhido de forma que as condições de contorno (Eq. 5.7) sejam satisfeitas. Para estas soluções qualquer intervalo da forma $b = a + 2\pi$ é adequado. Temos então que:

$$m \cos mx \cos nx \Big|_0^{2\pi} = -n \sin mx \sin nx \Big|_0^{2\pi} = 0. \quad (5.10)$$

Análise de Fourier

Na natureza há inúmeros fenômenos periódicos que assim requerem funções periódicas para sua descrição. O termo Análise de Fourier é o termo genérico dado as diferentes aplicações envolvendo senos e cossenos: séries, transformada, solução de equações diferenciais, etc... Todos os códigos de todas as figuras apresentadas neste capítulo estão disponíveis no Github: https://github.com/paulofreitasgomes/Math_Methods_for_Physics/tree/master/Fourier_Analysis.

6.1 Expansão em séries

Uma função periódica definida no intervalo $0 < x < L$ pode ser escrita como uma série de Fourier:

$$f(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} a_n \cos nx + \sum_{n=1}^{\infty} b_n \sin nx \quad (6.1)$$

Os coeficientes são dados por:

$$a_n = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} f(x) \cos nxdx, \quad (6.2)$$

$$b_n = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} f(x) \sin nxdx, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (6.3)$$

O requisito para que essas definições sejam válidas é que $f(x)$ satisfaça as condições de Dirichlet (seja contínua por partes ou quadraticamente integrável)¹. Uma função qualquer $f(x)$ pode ser expandida em senos e cossenos pois estas funções trigonométricas formam

¹Uma 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 α_n e β_n são as projeções de $f(x)$ com os elementos da base, análogo ao produto escalar de dois vetores.

um conjunto completo:

$$\begin{aligned} \int_{x_0}^{x_0+2\pi} \cos mx \cos nx dx &= \begin{cases} \pi \delta_{m,n} & \text{se } m \neq 0 \\ 2\pi & \text{se } n = m = 0 \end{cases} \\ \int_{x_0}^{x_0+2\pi} \sin mx \sin nx dx &= \begin{cases} \pi \delta_{m,n} & \text{se } m \neq 0 \\ 0 & \text{se } m = 0 \end{cases} \\ \int_{x_0}^{x_0+2\pi} \sin mx \cos nx dx &= 0 \end{aligned} \quad (6.4)$$

Essas equações valem para qualquer x_0 , mas em geral usa-se $x_0 = -\pi$. A função $\delta_{m,n}$ é a chamada delta de Kronecle definida como:

$$\delta_{m,n} = \begin{cases} 0 & \text{se } m \neq n \\ 1 & \text{se } n = m \end{cases} \quad (6.5)$$

Exemplo 6.1

Seja a função de onda quadrada definida como:

$$f(x) = \begin{cases} 0 & \text{se } -\pi < x < 0 \\ h & \text{se } 0 < x < \pi \end{cases} \quad (6.6)$$

Encontre a expansão em séries de Fourier.

Os coeficientes serão:

$$\begin{aligned} a_0 &= \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} h dt = h, \\ a_n &= \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} h \cos ntdt = 0, \quad n = 1, 2, 3, \dots, \\ b_n &= \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} h \sin ntdt = \frac{h}{n\pi} (1 - \cos n\pi) = \begin{cases} \frac{2h}{n\pi} & \text{se } n \text{ ímpar} \\ 0 & \text{se } n \text{ par} \end{cases} \end{aligned}$$

A expansão resultante fica:

$$g(x) = \frac{h}{2} + \frac{2h}{\pi} \sum_{n \text{ ímpar}}^{\infty} \frac{\sin nx}{n} = \frac{h}{2} + \frac{2h}{\pi} \left(\sin x + \frac{\sin 3x}{3} + \frac{\sin 5x}{5} + \dots \right). \quad (6.7)$$

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 6.1.

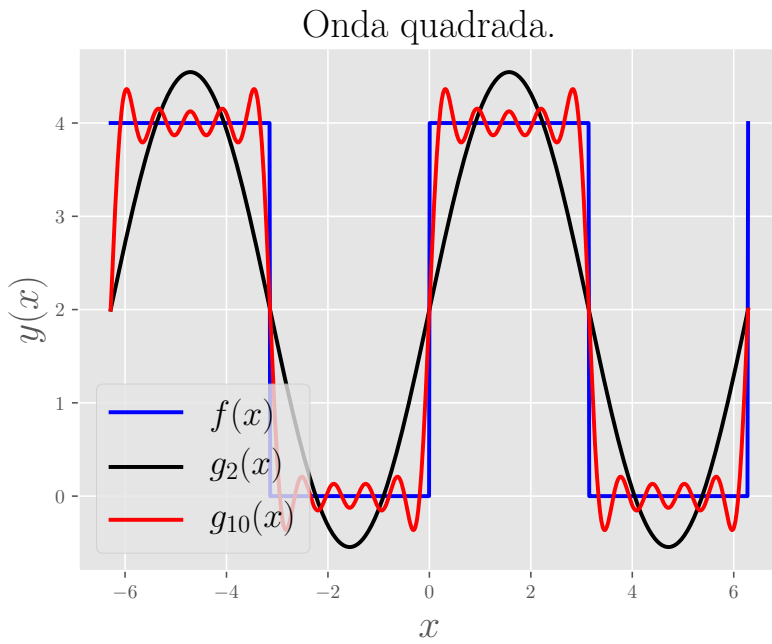


Figura 6.1: Figura referente ao exemplo 6.1. Gráfico de $f(x)$ da Eq. 6.6 e da expansão $g_q(x)$ da Eq. 6.7 com $q = 2$ e $q = 10$ termos.

Exemplo 6.2

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. 6.1 e os coeficientes são dados pelas Eqs 6.2 e 6.3 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.7 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:

$$I_1 = \int_{-\pi}^0 x \cos nx dx = \left(\frac{x}{n} \sin nx + \frac{\cos nx}{n^2} \right) \Big|_{-\pi}^0 = \frac{1}{n^2} \cos nx \Big|_{-\pi}^0 = \frac{1}{n^2} [1 - (-1)^n],$$

$$I_2 = \int_0^{-\pi} x \cos nx dx = \left(\frac{x}{n} \sin nx + \frac{\cos nx}{n^2} \right) \Big|_0^{-\pi} = \frac{1}{n^2} \cos nx \Big|_0^{-\pi} = \frac{1}{n^2} [(-1)^n - 1].$$

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 :

$$b_n = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x) \sin nx dx,$$

$$= -\frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^0 \frac{1}{2}(\pi + x) \sin nx dx + \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} \frac{1}{2}(\pi - x) \sin nx dx = \frac{1}{2\pi}(-I_3 + I_4).$$

A primeira integral é:

$$I_3 = \int_{-\pi}^0 (\pi + x) \sin nx dx = \pi \int_{-\pi}^0 \sin nx dx + \int_{-\pi}^0 x \sin nx dx = \pi I_5 + I_6, \quad (6.8)$$

onde

$$I_5 = \int_{-\pi}^0 \sin nx dx = -\frac{\cos nx}{n} \Big|_{-\pi}^0 = \frac{\cos nx}{n} \Big|_0^{-\pi} = \frac{(-1)^n - 1}{n},$$

$$I_6 = \int_{-\pi}^0 x \sin nx dx = \left(-x \frac{\cos nx}{n} - \frac{1}{n^2} \sin nx \right) \Big|_{-\pi}^0 = \left(x \frac{\cos nx}{n} + \frac{1}{n^2} \sin nx \right) \Big|_0^{-\pi}$$

$$= \pi \frac{(-1)^n}{n}.$$

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:

$$I_7 = \int_0^{\pi} \sin nx dx = \frac{1 - (-1)^n}{n}, \quad I_8 = \int_0^{\pi} x \sin nx dx = -\pi \frac{(-1)^n}{n}. \quad (6.9)$$

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.8. Outras integrais trigonométricas também estão na seção B.2.

6.1.1 Séries de Fourier Complexas

Uma função complexa $f(z)$ também pode ser expressa em séries de Fourier:

$$f(z) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} d_n z^n \quad (6.10)$$

A relação com séries de senos e cossenos é direta quando consideramos $|z| = 1$ de forma que $z = e^{i\theta}$. Nesse caso:

$$\begin{aligned} f(z) &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n e^{in\theta} \\ &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n \cos n\theta + i \sin n\theta. \end{aligned} \quad (6.11)$$

Além disso pode-se também encontrar os coeficientes c_n da Eq. 6.11 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:

$$\int_0^{2\pi} e^{-im\theta} e^{in\theta} d\theta = 2\pi \delta_{m,n}. \quad (6.12)$$

onde $\delta_{m,n}$ é a delta de Croncle (Eq. 6.5). Logo só resta o termo $m = n$ da somatória que resulta em:

$$c_n = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} f(z) e^{-in\theta} d\theta.$$

6.1.2 Mudança de intervalo

Em todas as integrações até agora usamos um intervalo de comprimento 2π pois seno e cosseno são periódicos 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 ficam²:

$$\begin{aligned} f(x) &= \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \left[a_n \cos \frac{n\pi x}{L} + b_n \sin \frac{n\pi x}{L} \right], \\ a_n &= \frac{1}{L} \int_{-L}^L f(x) \cos \frac{n\pi x}{L} dx, \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots, \\ b_n &= \frac{1}{L} \int_{-L}^L f(x) \sin \frac{n\pi x}{L} dx, \quad n = 1, 2, 3, \dots \end{aligned} \quad (6.13)$$

Novamente, o intervalo de integração não é essencial, apenas o seu comprimento. Qualquer intervalo $(x_0, x_0 + 2L)$ serve.

6.1.3 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 periódicos, cosseno é uma função par e seno uma função ímpar³. Assim, o coeficiente a_n da Eq. 6.2 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.

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 superposição⁴. É como se

²Veja que para $-L < x < L$ o comprimento do intervalo de $\pi x/L$ também é 2π .

³Função par satisfaz $f(x) = f(-x)$ enquanto para função ímpar tem-se $f(x) = -f(-x)$.

⁴Uma das grandes dificuldades de se resolver equações diferenciais não lineares é que o princípio da superposição não vale.

encontrássemos a resposta do sistema para o modo fundamental e os harmônicos⁵.

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.

Problemas

6.1) 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 $\mathbf{F} = m\mathbf{a}$ 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 ?

6.2) 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 $-\pi < x < \pi$.

c)

$$f(x) = \begin{cases} -1 & \text{se } -L < x < 0 \\ 1 & \text{se } 0 < x < L \end{cases}$$

d) $f(x) = \cosh ax$.

6.3) a) Resolva o problema usando série para qualquer amplitude inicial θ_0 . b) Mostre que o período é:

$$T = T_0 \left(1 + \frac{1}{16} \theta_0^2 + \frac{11}{3072} \theta_0^4 + \dots \right),$$

⁵O modo fundamental e os harmônicos já existiam? Ou eles foram criados na expansão em séries de Fourier?


onde T_0 é o período para pequenas oscilações⁶.

6.4) Expanda $f(x) = \sin kx$ onde $k \in \mathbb{R}$, ou seja, k é um número real.

6.5) Calcule a frequência aparente de uma onda sonora representada por:

$$p(t) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\cos 60n\pi t}{100(n-3)^2 + 1}. \quad (6.14)$$

Dica: cada termo de seno ou cosseno possui sua frequência angular característica. Em uma série haverá uma frequência dominante quando houver uma amplitude dominante.

6.6)  Faça um gráfico análogo ao gráfico da figura 6.1 porém agora usando a função dente de serra⁷.

6.7) ★ A função delta de Dirac $\delta(\phi_1 - \phi_2)$ é definida pela propriedade integral:

$$I = \int_{-\pi}^{\pi} f(\phi_2) \delta(\phi_1 - \phi_2) d\phi_2 = f(\phi_1). \quad (6.15)$$

Mostre que $\delta(\phi_1 - \phi_2)$ dado por $\delta(\phi_1 - \phi_2) = \frac{1}{2\pi} \sum_m e^{im(\phi_1 - \phi_2)}$ satisfaz a Eq. 6.15. Dica 1: escreva $f(\phi_2)$ como uma série de Fourier. Dica 2: veja Eq. 2.4.

6.2 Transformada de Fourier

Em física é comum encontrarmos pares de funções relacionadas por uma integral como:

$$F(\alpha) = \int_a^b f(t) K(\alpha, t) dt. \quad (6.16)$$

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

⁶Veja I. Singh, P. Arun, F. Lima *Fourier analysis of nonlinear pendulum oscillations*, Revista Brasileira de Ensino de Física **40**, n. 1, e1305 (2018).

⁷Veja por exemplo: https://en.wikipedia.org/wiki/Sawtooth_wave e <https://docs.scipy.org/doc/scipy-0.14.0/reference/generated/scipy.signal.sawtooth.html>.

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 encontrado 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:

$$F(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(t)e^{i\omega t} dt. \quad (6.17)$$

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.

Exemplo 6.3

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. 6.17) temos:

$$F(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-1}^1 e^{i\omega t} dt = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{e^{i\omega t}}{i\omega} \Big|_{-1}^1 = \frac{e^{i\omega} - e^{-i\omega}}{i\omega\sqrt{2\pi}} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\sin \omega}{\omega} \quad (6.18)$$

A TF inversa é muito semelhante a definição da própria TF:

$$f(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} F(\omega)e^{-i\omega t} d\omega.$$

6.2.1 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:

$$\delta(x - x_0) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ik(x-x_0)} dk. \quad (6.19)$$

⁸A constante $\sqrt{2\pi}$ é uma escolha. Outras formas são possíveis.

⁹Ou seja: $\int_{-\infty}^{\infty} |f(t)| dt < \infty$.

A TF no espaço tridimensional é direta:

$$\begin{aligned} F(\mathbf{k}) &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{-\infty}^{\infty} f(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} d^3r \\ f(\mathbf{r}) &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{-\infty}^{\infty} F(\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} d^3k \end{aligned}$$

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:

$$F_c(\omega) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f_c(t) \cos \omega t dt, \quad F_s(\omega) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f_s(t) \sin \omega t dt \quad (6.20)$$

As transformadas inversas são obtidas apenas trocando de lugar as funções:

$$f_c(t) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} F_c(\omega) \cos \omega t dt, \quad f_s(t) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} F_s(\omega) \sin \omega t dt$$

6.2.2 Equações Diferenciais

Uma das aplicações de TF é na solução de equações diferenciais e para isso precisamos de sua derivada. Da Eq. 6.17, a derivada da TF é:

$$\begin{aligned} \frac{dF_1(\omega)}{d\omega} &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{df}{dt} e^{i\omega t} dt = \frac{e^{i\omega t}}{\sqrt{2\pi}} f(t) \Big|_{-\infty}^{\infty} - \frac{i\omega}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(t) e^{i\omega t} dt \\ &= -i\omega F(\omega) \end{aligned} \quad (6.21)$$

Utilizamos a integral por partes (Eq. B.7) 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:

$$\frac{d^n F_1(\omega)}{d\omega^n} = (-i\omega)^n F(\omega)$$

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 6.4

Seja o oscilador harmônico forçado definido pela equação:

$$\frac{d^2 y}{dt^2} + \Omega^2 y = A \cos(\omega_0 t). \quad (6.22)$$

Encontre a solução $y(t)$ utilizando TF.

¹⁰ A parte alguns casos específicos, essa condição é um dos requisitos para que a TF de $f(t)$ exista.

A expressão de y dada por uma TF e sua derivada são:

$$y(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} Y(\omega) e^{i\omega t} d\omega, \quad \frac{d^2 y}{dt^2} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^2}{d\omega^2} [Y(\omega) e^{i\omega t}] d\omega = -\omega^2 y(t). \quad (6.23)$$

Porém, temos também de expressar o termo não homogêneo como uma transformada também:

$$\cos(\omega_0 t) = f(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} F(\omega) e^{i\omega t} d\omega. \quad (6.24)$$

Abrindo o cosseno em exponenciais complexas (Eq. B.2) e tirando a inversa teremos que:

$$\begin{aligned} F(\omega) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \cos(\omega_0 t) e^{-i\omega t} dt = \frac{1}{2\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} (e^{i\omega_0 t} + e^{-i\omega_0 t}) e^{-i\omega t} dt \\ &= \frac{1}{2\sqrt{2\pi}} \left[\int_{-\infty}^{\infty} e^{-i(\omega - \omega_0)t} dt + \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i(\omega_0 + \omega)t} dt \right] = \frac{\pi}{\sqrt{2\pi}} [\delta(\omega - \omega_0) + \delta(\omega + \omega_0)] \end{aligned}$$

Na última passagem usamos a Eq. 6.19 para expressar $\delta(\omega \pm \omega_0)$. Logo, usando esse $F(\omega)$ na Eq. 6.24 teremos:

$$\cos(\omega_0 t) = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} [\delta(\omega - \omega_0) + \delta(\omega + \omega_0)] d\omega. \quad (6.25)$$

A equação diferencial fica então:

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} Y(\omega) (\Omega^2 - \omega^2) e^{i\omega t} d\omega = \frac{A}{2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} [\delta(\omega - \omega_0) + \delta(\omega + \omega_0)] d\omega.$$

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. 6.23:

$$\begin{aligned} y(t) &= \frac{A}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{i\omega t}}{\Omega^2 - \omega^2} [\delta(\omega - \omega_0) + \delta(\omega + \omega_0)] d\omega = \frac{A}{2} \frac{e^{i\omega_0 t} + e^{-i\omega_0 t}}{\Omega^2 - \omega_0^2} \\ &= \frac{A}{\Omega^2 - \omega_0^2} \cos(\omega_0 t), \end{aligned}$$

onde usamos novamente o cosseno em exponenciais complexas (Eq. B.2) e o resultado

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\delta(\omega \pm \omega_0)}{\Omega^2 - \omega^2} e^{i\omega t} d\omega = \frac{e^{\mp i\omega_0 t}}{\Omega^2 - \omega_0^2}. \quad (6.26)$$

6.2.3 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:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1, \quad \langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) x \psi(x) dx \quad (6.27)$$

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:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |g(p)|^2 dp = 1, \quad \langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} g^*(p) p g(p) dp \quad (6.28)$$

A função $g(p)$ é então calculada como a transformada de Fourier de $\psi(x)$, tanto no caso 1D quanto em 3D:

$$g(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) e^{-ipx/\hbar} dx, \quad g(\mathbf{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \iiint_{-\infty}^{\infty} \psi(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} d^3r \quad (6.29)$$

Exemplo 6.5

Átomo de Hidrogênio. A solução para a função de onda do átomo de hidrogênio no estado fundamental é:

$$\psi(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{1}{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0}, \quad (6.30)$$

onde a_0 é o raio de Bohr. Calcule essa função de onda na representação de momento.

Da definição (Eq. 6.29) temos:

$$g(\mathbf{p}) = \sqrt{\frac{1}{\pi a_0^3}} \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \iiint_{-\infty}^{\infty} \exp(r/a_0 - i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar) d^3r = \frac{2^{3/2}}{\pi} \frac{\sqrt{a_0^3 \hbar^5}}{(a_0^2 p^2 + \hbar^2)^2}, \quad (6.31)$$

onde usamos a Eq. B.7 direita.

Problemas

6.8) Calcule a Transformada de Fourier de todas as funções do problema 6.2.

6.9) Mostre que as transformadas de Fourier seno e cosseno (Eqs. 6.20) de e^{-at} são:

$$g_s(\omega) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\omega}{\omega^2 + a^2}, \quad g_c(\omega) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{a}{\omega^2 + a^2}. \quad (6.32)$$

Dica: integre por partes duas vezes.

6.10) Deduza a Eq. 6.26.

6.11) Mostre que:

$$\int_0^\infty \frac{1 - \cos \omega \pi}{\omega} \sin \omega d\omega = \frac{\pi}{2}, \quad \int_0^\infty \frac{1 - \cos \omega \pi}{\omega} \sin \pi \omega d\omega = \frac{\pi}{4}.$$

6.12) 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:

$$f(x) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \frac{\cos \varphi x + \cos \varphi(x - \pi)}{1 - \varphi^2} d\varphi.$$

6.13) ★★ 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.

6.3 Transformada de Laplace

A outra transformada também utilizada em física é a Transformada de Laplace (TL) definida como:

$$f(s) = \mathcal{L} \{F(t)\} = \lim_{a \rightarrow \infty} \int_0^a e^{-st} F(t) dt = \int_0^\infty e^{-st} F(t) dt, \quad t > 0. \quad (6.33)$$

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:

$$f(s - a) = \int_0^{\infty} e^{-(s-a)t} F(t) dt = \int_0^{\infty} e^{at} e^{-st} F(t) dt = \mathcal{L} \{ e^{at} F(t) \}. \quad (6.34)$$

Outra modificação possível é a translação que consiste em multiplicar $f(s)$ por e^{-bs} :

$$e^{-bs} f(s) = \int_0^{\infty} e^{-s(b+t)} F(t) dt = \int_b^{\infty} e^{-s\tau} F(\tau - b) d\tau \quad (6.35)$$

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. 6.35 para 0. Logo:

$$e^{-bs} f(s) = \int_0^{\infty} e^{-s\tau} F(\tau - b) d\tau = \mathcal{L} \{ F(t - b) \}.$$

6.3.1 TL de funções elementares

Quando existe a TL é uma operação direta. Por exemplo, da definição (Eq. 6.33), temos os casos:

$$\mathcal{L} \{ 1 \} = \int_0^{\infty} e^{-st} dt = -\frac{e^{-st}}{s} \Big|_0^{\infty} = \frac{1}{s}, \quad (6.36)$$

$$\mathcal{L} \{ e^{+kt} \} = \int_0^{\infty} e^{-st} e^{kt} dt = \frac{e^{(k-s)t}}{k-s} \Big|_0^{\infty} = \frac{1}{s-k}, \quad s > k. \quad (6.37)$$

$$\mathcal{L} \{ e^{-kt} \} = \int_0^{\infty} e^{-st} e^{-kt} dt = -\frac{e^{-(k+s)t}}{k+s} \Big|_0^{\infty} = \frac{1}{s+k}. \quad (6.38)$$

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:

$$\mathcal{L} \{ \cosh kt \} = \frac{1}{2} \mathcal{L} \{ e^{kt} + e^{-kt} \} = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{s-k} + \frac{1}{s+k} \right) = \frac{s}{s^2 - k^2}, \quad (6.39)$$

$$\mathcal{L} \{ \sinh kt \} = \frac{1}{2} \mathcal{L} \{ e^{kt} - e^{-kt} \} = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{s-k} - \frac{1}{s+k} \right) = \frac{k}{s^2 - k^2}. \quad (6.40)$$

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:

$$\mathcal{L} \{ \cos kt \} = \int_0^{\infty} e^{-st} \cos kt dt = \frac{s}{s^2 + k^2}, \quad \mathcal{L} \{ \sin kt \} = \frac{k}{s^2 + k^2}, \quad (6.41)$$

também válidas para $s > 0$. E se diferenciarmos $\mathcal{L} \{ \cos kt \}$ em relação a k obtemos:

$$\mathcal{L} \{ t \sin kt \} = \int_0^{\infty} e^{-st} t \sin kt dt = \frac{2sk}{(s^2 + k^2)^2}. \quad (6.42)$$

Outro resultado útil é¹¹

$$\mathcal{L} \left\{ t^k a^{-at} \right\} = \int_0^\infty t^k a^{-at} e^{-st} dt = \frac{k!}{(s+a)^{k+1}}, \quad \Re(s+a) > 0. \quad (6.43)$$

Por último vale mencionar a convolução de TL ou Teorema da Convolução. Sejam duas TL:

$$f_1(s) = \mathcal{L} \{F_1(t)\}, \quad f_2(s) = \mathcal{L} \{F_2(t)\}. \quad (6.44)$$

A convolução (ou Teorema de Faltung) diz que:

$$f_1(s)f_2(s) = \mathcal{L} \left\{ \int_0^t F_1(t-z)F_2(z)dz \right\} = \{F_1 * F_2\} \quad (6.45)$$

Tirando a inversa temos:

$$\mathcal{L}^{-1} \{f_1(s)f_2(s)\} = \int_0^t F_1(t-z)F_2(z)dz. \quad (6.46)$$

6.3.2 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:

$$\begin{aligned} \mathcal{L} \{F'(t)\} &= \int_0^\infty e^{-st} \frac{dF(t)}{dt} dt = e^{-st} F(t) \Big|_0^\infty - s \int_0^\infty e^{-st} F(t) dt \\ &= s\mathcal{L} \{F(t)\} - F(0) \end{aligned} \quad (6.47)$$

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.

¹¹ $\Re(z)$ é a parte real do número complexo z .

¹²Lembrando que $F(0) = F(+0)$, ou seja, o zero deve ser calculado pelo lado positivo.

Exemplo 6.6

Resolva $y'' + 4y' + 4y = t^2 e^{-2t}$ 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 $s^2 Y - sy_0 - y'_0 + 4sY - 4y_0 + 4Y = \mathcal{L}\{t^2 e^{-2t}\}$, onde $\mathcal{L}\{y(t)\} = Y(s)$. Usando a Eq. 6.43 temos que:

$$\mathcal{L}\{t^2 e^{-2t}\} = \frac{2}{(s+2)^3}. \quad (6.48)$$

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. Novamente usando a Eq. 6.43 temos que:

$$y(t) = \frac{2t^4 e^{-2t}}{4!}.$$

A solução encontrada é apenas uma solução particular que satisfaz as condições iniciais.

6.3.3 Transformada da δ de Dirac

A TL da *delta* de Dirac é direta:

$$\mathcal{L}\{\delta(t-a)\} = \int_0^\infty \delta(t-a)e^{-st} dt = e^{-sa}, \quad a > 0. \quad (6.49)$$

Esta transformada é utilizada na solução de equações diferenciais envolvendo a função δ .

Exemplo 6.7

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. 6.34 e 6.41), de forma que a solução é:

$$y(t) = \frac{1}{\omega} \sin \omega(t - t_0), \quad t > t_0. \quad (6.50)$$

Problemas

6.14) a) Usando a Eq. 6.37, prove as Eqs. 6.39 e 6.40. b) Deduza a Eq. 6.48.

6.15) a) Calcule a transformada de Laplace de $\sin kt$ e $\cos kt$ (veja Eqs. 6.41). b) Deduza a Eq.

6.42.

6.16) Usando a Eq. 6.37, deduza os seguintes resultados:

$$\mathcal{L} \left\{ \frac{e^{-at} - e^{-bt}}{b - a} \right\} = \frac{1}{(s + a)(s + b)}, \quad \mathcal{L} \left\{ \frac{ae^{-at} - be^{-bt}}{a - b} \right\} = \frac{s}{(s + a)(s + b)}, \quad (6.51)$$

ambos válidos para $\Re(s + a) > 0$ e $\Re(s + b) > 0$.**6.17)** Deduza os seguintes resultados:

$$\mathcal{L} \{ e^{-at} \sin bt \} = \frac{b}{(s + a)^2 + b^2}, \quad \mathcal{L} \{ e^{-at} \cos bt \} = \frac{s + a}{(s + a)^2 + b^2}, \quad (6.52)$$

ambos válidos para $\Re(s + a) > \Im(b)$. **Dica:** substitua a por $a + ib$ na Eq. 6.37 e depois por $a - ib$. Some e subtraia os resultados.**6.18)** 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 $y'_0 = 3$.**6.19)** Mostre que:

$$\int_0^\infty \frac{e^{-t\sqrt{3}}}{t} \sin 2t \cos t dt = \frac{\pi}{4}. \quad (6.53)$$

6.20) 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) $y'''' - y = \delta(t - t_0)$.**6.21) ★★** 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:

$$s^2 \chi_1(s) - v_1 = \frac{q}{m} \left(Bs \chi_2(s) + \frac{E_1}{s} \right),$$

$$s^2 \chi_2(s) - v_2 = -\frac{q}{m} \left(Bs \chi_1(s) - \frac{qE_2}{s} \right),$$

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).

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

$$A_1 = \gamma_2 + (\gamma_1 t + v_2)\omega_0, \quad A_2 = \gamma_1 - (\gamma_2 t + v_1)\omega_0, \quad C_k = (-1)^k \gamma_k v_k \omega_0.$$

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".

6.4 Transformada de Fourier Discreta (DFT)

Usando a relação de Euler $e^{i\theta} = \cos \theta + i \sin \theta$ podemos reescrever a Eq. 6.1 como:

$$f(x) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \gamma_k \exp\left(i \frac{2\pi kx}{L}\right) \quad (6.54)$$

Os coeficientes serão:

$$\gamma_k = \frac{1}{L} \int_0^L f(x) \exp\left(-i \frac{2\pi kx}{L}\right) dx \quad (6.55)$$

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 aí 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. 6.55 fica:

$$\gamma_k = \frac{1}{N} \left[\frac{1}{2}f(0) + \frac{1}{2}f(L) + \sum_{n=1}^{N-1} f(x_n) \exp \left(-i \frac{2k\pi x_n}{L} \right) \right], \quad (6.56)$$

onde as posições x_n da amostra são da forma:

$$x_n = \frac{n}{N}L \quad (6.57)$$

Mas $f(x)$ é periódica logo $f(0) = f(L)$. Assim:

$$\gamma_k = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} f(x_n) \exp \left(-i \frac{2k\pi x_n}{L} \right) \quad (6.58)$$

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. 6.57 podemos reescrever a Eq. 6.58 como:

$$\gamma_k = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} y_n \exp \left(-i \frac{2k\pi n}{N} \right) \quad (6.59)$$

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:

$$c_k = \sum_{n=0}^{N-1} y_n \exp \left(-i \frac{2k\pi n}{N} \right) \quad (6.60)$$

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. E é necessário calcular c_k apenas até $k = N - 1$ para recuperar as amostras.

Veja que na Eq. 6.60 o somatório vai até $N - 1$ com valores positivos apenas de n , ao contrário da Eq. 6.54, onde o somatório tem valores negativos e vai até infinito, adequado para o cálculo numérico. Essas expressões servem para $f(x)$ real ou complexo.

¹⁴Iremos utilizar os acrônimos resultados da expressão em inglês por serem os mais populares em todo os países, incluso o Brasil.

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:

$$\begin{aligned} c_{N-r} &= \sum_{n=0}^{N-1} y_n \exp \left[-i \frac{2(N-r)\pi n}{N} \right] = \sum_{n=0}^{N-1} y_n \exp(-2i\pi n) \exp \left(-i \frac{2\pi r n}{N} \right) \\ &= \sum_{n=0}^{N-1} y_n \exp \left(-i \frac{2\pi r n}{N} \right) = c_r^* \end{aligned} \quad (6.61)$$

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.

6.4.1 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. 6.60: Seja o somatório:

$$\begin{aligned} \sum_{k=0}^{N-1} c_k \exp \left(i \frac{2k\pi n}{N} \right) &= \sum_{k=0}^{N-1} \sum_{p=0}^{N-1} y_p c_k \exp \left(-i \frac{2k\pi p}{N} \right) \exp \left(i \frac{2k\pi n}{N} \right), \\ &= \sum_{p=0}^{N-1} y_p \sum_{k=0}^{N-1} \exp \left[i \frac{2k\pi(n-p)}{N} \right]. \end{aligned} \quad (6.62)$$

Agora precisamos calcular a exponencial na Eq. 6.62. 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 $a = e^{2i\pi m/N}$, sendo m inteiro e obteremos:

$$\sum_{k=0}^{N-1} e^{2i\pi k m/N} = \frac{1 - e^{2i\pi m}}{1 - e^{2i\pi m/N}} = 0,$$

já que $e^{2i\pi m} = 1$ para qualquer m inteiro e então o numerador se anula. O problema é quando $m = 0$ o que também anula o denominador¹⁵. Mas se $m = 0$ a soma original fica $\sum_{k=0}^{N-1} 1 = N$. Logo:

$$\sum_{k=0}^{N-1} e^{2i\pi k m/N} = \begin{cases} N & \text{se } m = 0 \text{ ou múltiplo de } N \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (6.63)$$

Agora podemos usar a Eq. 6.63 para calcular a exponencial da Eq. 6.62. Vamos assumir que $0 < n < N$. Comparando as duas exponenciais temos que $m = n - p$. Como n e p são

¹⁵E nunca podemos dividir por zero.

menores que N , m não poderá ser múltiplo de N , mas poderemos ter $m = 0$ se $n = p$. Assim a exponencial na Eq. 6.62 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:

$$\sum_{k=0}^{N-1} c_k \exp\left(i \frac{2k\pi n}{N}\right) = N y_n. \quad (6.64)$$

Invertendo essa equação temos:

$$y_n = \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} c_k \exp\left(i \frac{2k\pi n}{N}\right). \quad (6.65)$$

Esta é a DFT inversa, é a volta da Eq. 6.60: se tivermos os coeficientes c_k podemos calcular as amostras y_n . E não é uma aproximação, a Eq. 6.65 é exata. Repare que precisamos apenas até o coeficiente c_k com $k = N - 1$ para recuperar as amostras.

A DFT foi definida usando um método numérico simples (Regra do Trapézio) para fazer a integração (veja Eq. 6.56). 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 6.1

Uma implementação simples da Eq. 6.60 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

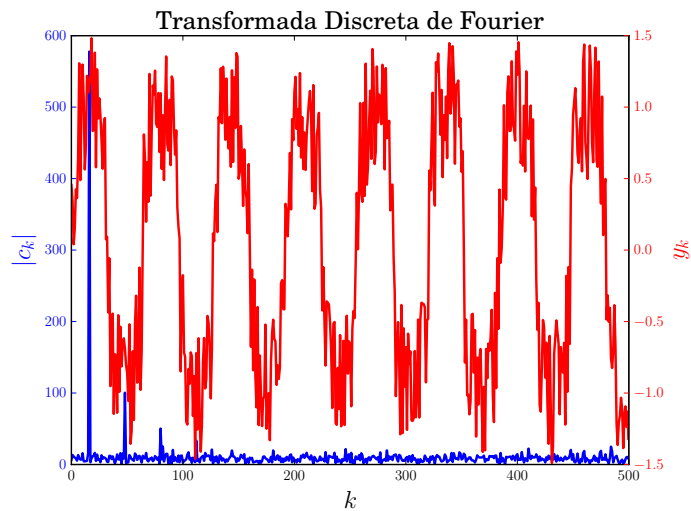
#a//b retorna um inteiro arredondando para baixo
#a e b devem ser inteiros

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

Figura 6.2: 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.



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 6.2 estão representados os gráficos do sinal sonoro em vermelho e da amplitude (módulo) de sua TFD (c_k) em azul.

6.4.2 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 6.2. 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 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 6.2 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 próximos 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.

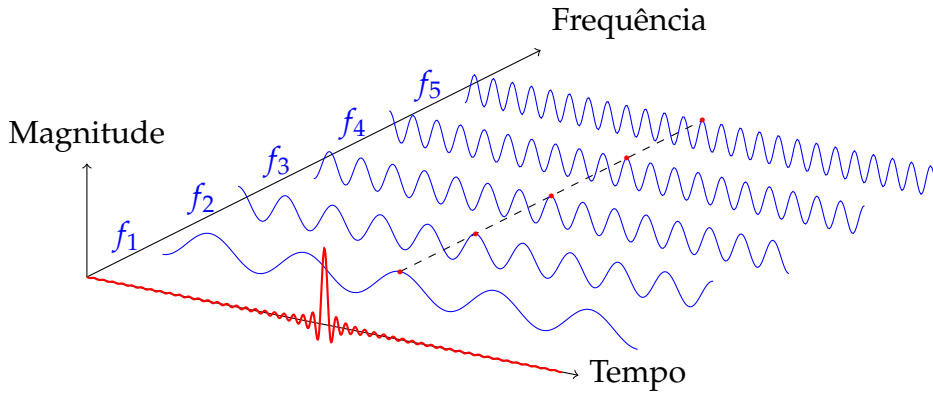


Figura 6.3: Ilustração da conexão entre frequência e tempo através da DFT.

6.4.3 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. 6.60, 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:

$$E_k = \sum_{r=0}^{\frac{1}{2}N-1} y_{2r} \exp\left(-i\frac{2k\pi 2r}{N}\right) = \sum_{r=0}^{\frac{1}{2}N-1} y_{2r} \exp\left(-i\frac{2k\pi r}{\frac{1}{2}N}\right). \quad (6.66)$$

Isto é outra DFT com $N/2$ amostras ao invés de N . Da mesma forma para o grupo de n ímpar temos $n = 2r + 1$:

$$\begin{aligned} \sum_{r=0}^{\frac{1}{2}N-1} y_{2r+1} \exp\left(-i\frac{2k\pi(2r+1)}{N}\right) &= e^{-2ik\pi/N} \sum_{r=0}^{\frac{1}{2}N-1} y_{2r+1} \exp\left(-i\frac{2k\pi r}{\frac{1}{2}N}\right) \\ &= e^{-2ik\pi/N} O_k, \end{aligned} \quad (6.67)$$

onde O_k é outra DFT com $N/2$ amostras. Logo, a DFT total é:

$$c_k = E_k + e^{-2ik\pi/N} O_k, \quad (6.68)$$

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. 6.68 nos diz que podemos obter a DFT de c_k fazendo duas DFTs com metade dos pontos. Em seguida, aplica-se novamente a Eq. 6.68 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. 6.68 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. 6.60 é:

$$c_0 = \sum_{n=0}^0 y_n e^0 = y_0 \quad (6.69)$$

Ou seja, a DFT 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. 6.68. Esse é o modo de se fazer a FFT.

¹⁶Sempre podemos fazer essa divisão se $N = 2^m$.

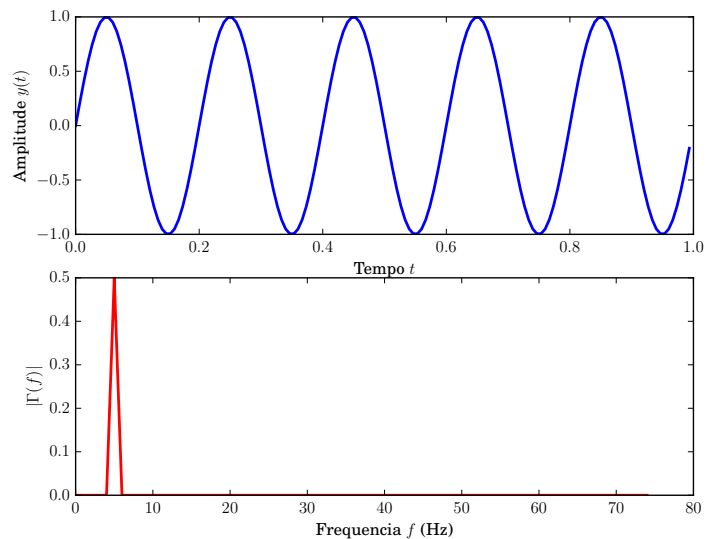


Figura 6.4: Superior: gráfico de $y(t) = \sin(\omega t)$. Inferior: gráfico da Transformada Rápida de Fourier de $y(t)$.

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 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. 6.65) que tem a mesma forma que a DFT, a menos de um sinal.

Exemplo 6.8

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 6.4. 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.

Transformada de Fourier pode ser usada 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 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

¹⁷Esse recurso é muito explorado em filmes

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)
```


Já um sinal complexo é escrito da forma:

$$\bar{x}(n) = A \exp(\omega n T + \phi) = A e^{\phi} e^{\omega n T}.$$

Como esperado: $x(n) = \text{Re}[\bar{x}(n)]$. A transformada de Fourier Discreta (Eq. 6.60) é então: $X(k) = \sum_{n=0}^{N-1} x(n) \exp(-2\pi i k n / N)$ onde $k = 0, 1, 2, \dots, N-1$ é exatamente o índice da frequência. O resultado da transformada é um número complexo $X(k) = r e^{i\theta}$ 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 6.5(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 6.5(b). Veja que as frequências são diferentes.

Problemas

6.22  Calcule a transformada rápida de Fourier da função $y(t) = \cos \omega t$ e faça o gráfico, como na figura 6.4.

6.23  Refaça o gráfico da figura 6.5(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>.

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.

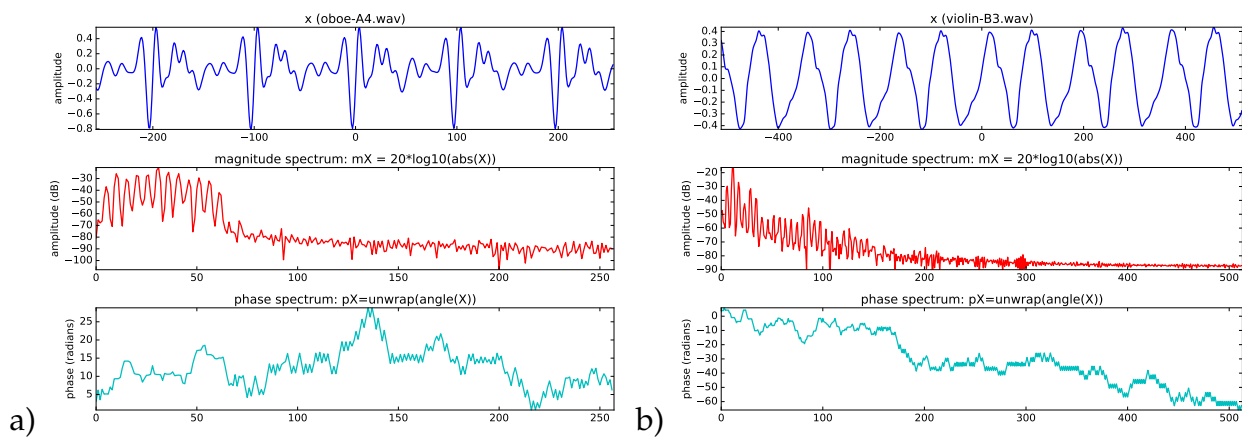


Figura 6.5: Análise do som de um instrumento musical. No gráfico de cima está o som original. No gráfico do meio está a amplitude da transformada de Fourier, mostrando as frequências. No gráfico de baixo está a fase. (a) Oboé. (b) Violino. Fonte: <https://github.com/MTG/sms-tools>.

Equações diferenciais parciais

7.1 Classificação e aplicações na Física

A 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. As EDPs são classificadas em 3 grandes tipos, como mostra a tabela 7.1. Vários exemplos desses tipos tem aplicação na física, como mostra a tabela 7.2¹.

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 7.1: Definições de EDPs elípticas, parabólicas e hiperbólicas.

De maneira geral os métodos de solução podem ser classificados como:

- **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	$\nabla^2\psi = -\rho/\varepsilon_0$	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
Eqs. de Maxwell	$\vec{\nabla} \cdot \mathbf{e} \text{ e } \vec{\nabla} \times$	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	$\partial^\mu \partial_\mu \psi(x) = \left[\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} - \nabla^2 \right] \psi = 0$	eletrodinâmica
Klein-Gordon	$\partial^\mu \partial_\mu \psi(x) = -\mu^2 \psi(x)$	eq. de onda relativística

Tabela 7.2: 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 tornam 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.

7.1.1 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	Tipos de EDP		
	elíptica	hiperbólica	parabólica
Cauchy			
superfície aberta	sem solução física	solução única e estável	muito restritiva
sup. fechada	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 7.3: 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 \vec{d} só foi introduzido em 1875 por Carl Neumann.

7.2 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:

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} = 0. \quad (7.1)$$

A forma simples e tradicional de se resolver essa EDP é convertê-la em 3 EDOs supondo separação de variáveis:

$$\psi(x, y, z) = X(x)Y(y)Z(z). \quad (7.2)$$

Essa suposição é válida? Apenas a tentativa pode dizer: se encontrarmos uma solução, a tentativa é válida. Substituindo a Eq. 7.2 na Eq. 7.1 temos:

$$YZ\frac{d^2X}{dx^2} + XZ\frac{d^2Y}{dy^2} + XY\frac{d^2Z}{dz^2} = 0.$$

Repare que como agora as derivadas são de funções de uma variável apenas, as derivadas são totais. Dividindo tudo por $\psi = XYZ$ e rearranjando:

$$\frac{1}{X} \frac{d^2 X}{dx^2} = -\frac{1}{Y} \frac{d^2 Y}{dy^2} - \frac{1}{Z} \frac{d^2 Z}{dz^2}. \quad (7.3)$$

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:

$$\frac{1}{X} \frac{d^2 X}{dx^2} = -l^2, \quad -\frac{1}{Y} \frac{d^2 Y}{dy^2} - \frac{1}{Z} \frac{d^2 Z}{dz^2} = -l^2 \quad (7.4)$$

Regorganizando a Eq. da direita:

$$\frac{1}{Y} \frac{d^2 Y}{dy^2} = l^2 - \frac{1}{Z} \frac{d^2 Z}{dz^2}.$$

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:

$$\frac{1}{Y} \frac{d^2 Y}{dy^2} = -m^2, \quad \frac{1}{Z} \frac{d^2 Z}{dz^2} = n^2, \quad (7.5)$$

onde $n^2 = l^2 + m^2$. Veja que agora temos 3 EDOs (Eqs. 7.4 e 7.5) utilizando três constantes diferentes.

7.2.1 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 por que energia está sendo cedida ou tirada do sistema. A equação de difusão térmica então nesse caso fica:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\kappa}{\sigma \rho} \nabla^2 T. \quad (7.6)$$

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 as 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 ². Na parte de

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.

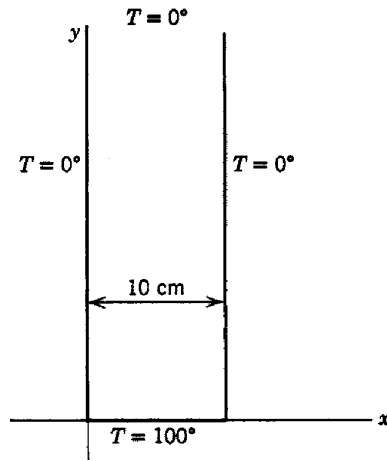


Figura 7.1: Retângulo no plano xy . Exemplo 7.1.

baixo do sólido a condição de contorno para a temperatura é $T(x, y, z = 0) = T_0(x, y)$. Para 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 $X(x)$ e $Y(y)$ (veja Eqs. 7.4 e 7.5) são funções periódicas (seno e cosseno):

$$X_l(x) = A_l \cos lx + B_l \sin lx, \quad Y_m(y) = C_m \cos my + D_m \sin my. \quad (7.7)$$

Já a constante n^2 na equação de $Z(z)$ (Eq. 7.5) 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:

$$T(x, y, z) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \alpha_{lm} X_l(x) Y_m(y) e^{-nz}.$$

Resta impor a condição de contorno $T(x, y, z = 0) = T_0(x, y)$:

$$T_0(x, y) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \alpha_{lm} X_l(x) Y_m(y). \quad (7.8)$$

Como $X(x)$ e $Y(y)$ são senos e cossenos, a Eq. 7.8 é satisfeita e os coeficientes α_{lm} são encontrados em função de $T_0(x, y)$.

Exemplo 7.1

Suponha um retângulo infinito no plano xy e as condições de contorno como indicado na figura 7.1. 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. 7.1): $T(x, y) = X(x)Y(y)$. Seguindo o mesmo procedimento até a Eq. 7.4 obtemos:

$$\frac{1}{X} \frac{d^2 X}{dx^2} = -k^2, \quad \frac{1}{Y} \frac{d^2 Y}{dy^2} = k^2.$$

As soluções são da forma:

$$X_k(x) = A_k \cos kx + B_k \sin kx, \quad Y_k(y) = C_k e^{ky} + D_k e^{-ky}. \quad (7.9)$$

Agora devemos impor as condições de contorno. Da figura 7.1 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 $X(a) = B_k \sin ka = 0$, o que implica:

$$k = \frac{n\pi x}{a}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (7.10)$$

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 :

$$T(x, y) = \sum_{n=1}^{\infty} b_n e^{-n\pi y/a} \sin \frac{n\pi x}{a}. \quad (7.11)$$

Por último falta a condição de contorno $T(x, y = 0) = T_0 = 100$ graus. Da solução geral temos:

$$T_0 = \sum_{n=1}^{\infty} b_n \sin \frac{n\pi x}{a}, \quad (7.12)$$

que é uma expansão em série de Fourier (veja Eq. 6.1). Da Eq. 6.3 os coeficientes são:

$$b_n = \frac{2}{a} \int_0^a T_0 \sin \frac{n\pi x}{a} dx = \frac{2T_0}{a} \quad (7.13)$$

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:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = a^2 \frac{\partial^2 T}{\partial x_1^2} + b^2 \frac{\partial^2 T}{\partial y_1^2} + c^2 \frac{\partial^2 T}{\partial z_1^2}, \quad (7.14)$$

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:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} = 0. \quad (7.15)$$

Começamos com o caso unidimensional:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = a^2 \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}, \quad (7.16)$$

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

$$T = e^{i\omega x} e^{-\omega^2 a^2 t} = (A \cos \omega x + B \sin \omega x) e^{-\omega^2 a^2 t}. \quad (7.17)$$

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 integral:

$$T(x, t) = \int [A(\omega) \cos \omega x + B(\omega) \sin \omega x] e^{-\omega^2 a^2 t} d\omega.$$

Esta expressão é geral o suficiente para satisfazer as condições de contorno em $t = 0$.

Exemplo 7.2

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. 7.7). 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 precisamos 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:

$$a_n = \int_{-1}^1 1 \cos \frac{n\pi x}{2} dx = \frac{4}{n\pi} \sin \frac{n\pi}{2} = \begin{cases} \frac{4(-1)^m}{(2m+1)\pi} & \text{se } n = 2m+1 \\ 0 & \text{se } n = 2m \end{cases} \quad (7.18)$$

Para $t > 0$ a Eq. a ser resolvida é a Eq. 7.16 cuja solução é da forma da Eq. 7.17. 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 tentativa 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. 7.14. 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.

7.2.2 Método das 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 $i \pm 1/2$:

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \approx \frac{T_{i+1/2} - T_{i-1/2}}{\Delta x^2} = \frac{T_{i+1} - 2T_i + T_{i-1}}{(\Delta x)^2} \quad (7.19)$$

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. 7.19. 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 7.1

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:

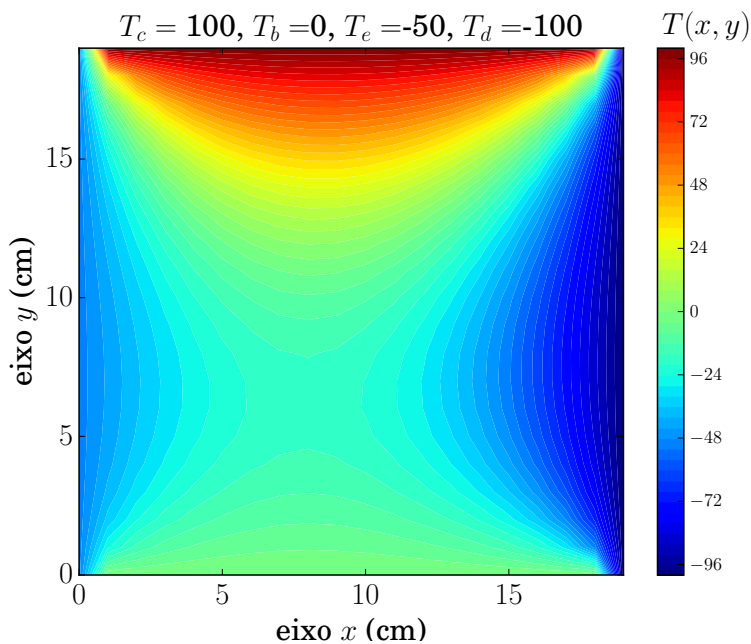


Figura 7.2: Gráfico da temperatura no domínio.

```
for iteration in range(0, Niter):
    for i in range(1, lenX-1, delta):
        for j in range(1, lenY-1, delta):
            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 $T[i, j]$ $Niter$ vezes. Repare que o número de iterações $Niter$ tem que ser suficiente para que a convergência seja obtida. Assim, nos primeiros cálculos é necessário ir aumentando o seu valor até ser verificado que a solução de fato convergiu.

Na figura 7.2 está o resultado do cálculo. O código que faz o cálculo e gera a figura está Github^a.

^ahttps://github.com/paulofreitasgomes/computationalphysics/blob/master/Termodinamica/laplace_temperatura.py.

7.2.3 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 $V \neq 0$.

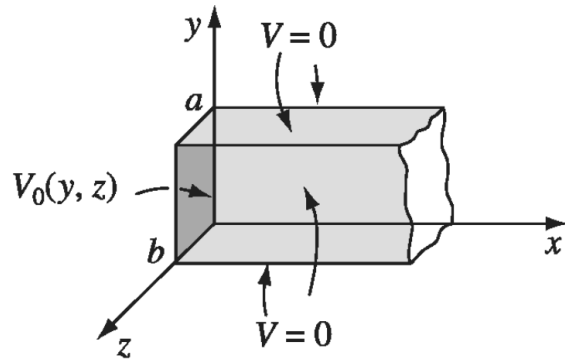


Figura 7.3: Ilustração do tubo metálico ao longo de x do Exemplo 7.3.

Exemplo 7.3

Um longo tubo metálico (figura 7.3) 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. 7.1. As condições de contorno são:

1. $V = 0$ se $y = 0$ e se $y = a$.
2. $V = 0$ se $z = 0$ 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. 7.3. Igualamos então a função de cada variável a uma constante:

$$\frac{1}{X} \frac{d^2 X}{dx^2} = C_1, \quad \frac{1}{Y} \frac{d^2 Y}{dy^2} = C_2, \quad \frac{1}{Z} \frac{d^2 Z}{dz^2} = C_3, \quad C_1 + C_2 + C_3 = 0.$$

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. 3.18). Por outro lado fazemos C_2 e C_3 negativos para que as soluções sejam oscilatórias e satisfazer as condições de contorno:

$$C_2 = -k^2, \quad C_3 = -l^2, \quad C_1 = k^2 + l^2. \quad (7.20)$$

Assim a Eq. de Laplace fica

$$\frac{1}{X} \frac{d^2 X}{dx^2} = k^2 + l^2, \quad \frac{1}{Y} \frac{d^2 Y}{dy^2} = -k^2, \quad \frac{1}{Z} \frac{d^2 Z}{dz^2} = -l^2, \quad C_1 + C_2 + C_3 = 0,$$

com as seguintes soluções

$$X(x) = A \exp\left(x\sqrt{k^2 + l^2}\right) + B \exp\left(-x\sqrt{k^2 + l^2}\right), \quad (7.21)$$

$$Y(y) = C \sin ky + D \cos ky, \quad Z(z) = E \sin lz + F \cos lz. \quad (7.22)$$

Aplicando as condições de contorno temos:

- 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:

$$V_{n,m}(\mathbf{r}) = X(x)Y(y)Z(z) = C \sin(n\pi y/a) \sin(m\pi z/b) \exp\left(-\pi x \sqrt{(n/a)^2 + (m/b)^2}\right).$$

Como a Eq. de Laplace é linear, a solução geral é uma soma destas soluções:

$$V(\mathbf{r}) = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} C_{n,m} \sin(n\pi y/a) \sin(m\pi z/b) \exp\left(-\pi x \sqrt{(n/a)^2 + (m/b)^2}\right). \quad (7.23)$$

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:

$$\begin{aligned} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} C_{n,m} \int_0^a \sin(n\pi y/a) \sin(p\pi y/a) dy \int_0^b \sin(m\pi z/b) \sin(q\pi z/b) \\ = \int_0^a \int_0^b V_0(y, z) \sin(p\pi y/a) dy \sin(q\pi z/b). \end{aligned}$$

Usando a Eq. 6.4, sobra apenas os termos $n = p$ e $m = q$ de forma que:

$$C_{p,q} = \frac{4}{ab} \int_0^a \int_0^b V_0(y, z) \sin(p\pi y/a) dy \sin(q\pi z/b). \quad (7.24)$$

As Eqs. 7.23 e 7.24 são a solução do problema.

Problemas

7.1) Resolva as eqs. diferenciais para $X(x)$ e $Y(y)$ (contida nas Eqs. 7.4 e 7.5).

7.2) a) Deduza as Eqs. 7.9. b) Deduza a Eq. 7.10.

7.3) 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:

$$T(x, y) = \sum_{n=1}^{\infty} B_n \sinh \frac{n\pi(b - y)}{a} \sin \frac{n\pi x}{a}. \quad (7.25)$$

⁴sinh é a função seno hiperbólico definida na Eq. B.3.

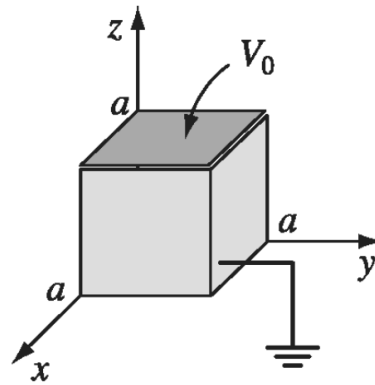


Figura 7.4: Paralelepípedo metálico oco de lados L_1 , L_2 , e L_3 referente ao Problema 7.6.

c) Considere agora a última condição de contorno: $T(x, y = 0) = T_0 = 100$ graus. Mostre que a solução final é:

$$T(x, y) = \sum_n \frac{400}{\sinh 3n\pi} \sinh \frac{n\pi(b-y)}{a} \sin \frac{n\pi x}{a}. \quad (7.26)$$

7.4) 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.

7.5) Considere o exemplo ??3. Seja $V_0(y, z) = V_0$ uma constante. Encontre os coeficientes $C_{n,m}$.

7.6) Um paralelepípedo oco metálico de lados L_1 , L_2 e L_3 nas direções x , y e z (veja figura 7.4) 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.

7.7) Mostre que o operador $\nabla^2 + k^2$ é linear, ou seja: $(\nabla^2 + k^2)(a_1\psi_1 + a_2\psi_2) = a_1(\nabla^2 + k^2)\psi_1 + a_2(\nabla^2 + k^2)\psi_2$.

7.8) 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?

7.3 Separação de variáveis em coordenadas cilíndricas

A equação de Laplace $\nabla^2\psi(\mathbf{r}) = 0$ em coordenadas cilíndricas é:

$$\nabla^2\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{s} \frac{\partial}{\partial s} \left(s \frac{\partial \psi}{\partial s} \right) + \frac{1}{s^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = 0.$$

Como antes assumimos $\psi(\mathbf{r}) = P(s)\Phi(\varphi)Z(z)$, de modo que a eq. de Laplace fica:

$$\frac{\Phi Z}{s} \frac{d}{ds} \left(s \frac{dP}{ds} \right) + \frac{PZ}{s^2} \frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} + P\Phi \frac{d^2Z}{dz^2} = 0. \quad (7.27)$$

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. 7.27 por $P(s)\Phi(\varphi)Z(z)$ e passamos o último termo para o lado direito da equação:

$$\frac{1}{Ps} \frac{d}{ds} \left(s \frac{dP}{ds} \right) + \frac{1}{\Phi s^2} \frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} = -\frac{1}{Z} \frac{d^2Z}{dz^2}. \quad (7.28)$$

Novamente, se duas funções diferentes de variáveis diferentes são iguais, ambas tem que ser iguais a uma constante. Escolhemos uma constante tal que:

$$\frac{1}{Z} \frac{d^2Z}{dz^2} = k^2 Z. \quad (7.29)$$

Esta equação é exatamente a Eq. 3.18 com sinal positivo de modo que a solução é formada por exponenciais reais (Eq. 3.19):

$$Z(z) = Ae^{kz} + Be^{-kz}. \quad (7.30)$$

Uma vez encontrado a solução da parte em z , substituímos a Eq. 7.29 na Eq. 7.28 e obtemos (após multiplicar por s^2 e passar o termo em φ para o lado direito):

$$\frac{s}{P} \frac{d}{ds} \left(s \frac{dP}{ds} \right) + k^2 s^2 = -\frac{1}{\Phi} \frac{d^2\Phi}{d\varphi^2}. \quad (7.31)$$

Para que essa equação seja válida é necessário igualar cada lado a uma constante. Escolhemos:

$$\frac{1}{\Phi} \frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} = n^2. \quad (7.32)$$

Esta equação é exatamente a Eq. 3.18 com sinal negativo de modo que a solução é oscilatória (Eq. 3.20). 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.

Uma vez encontrada a solução para Φ falta agora apenas $P(s)$. Substituindo a Eq. 7.32 na Eq. 7.31 temos:

$$s \frac{d}{ds} \left(s \frac{dP}{ds} \right) + (k^2 s^2 - n^2) P = 0. \quad (7.33)$$

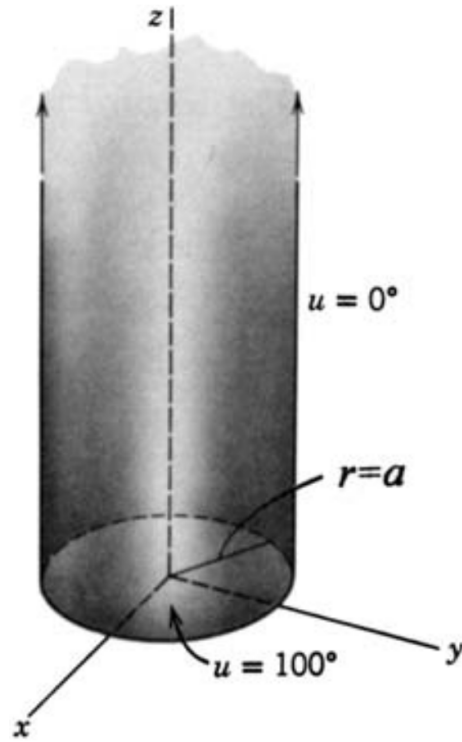


Figura 7.5: Cilindro mantido com uma temperatura constante na base e na lateral.

Essa é a chamada equação de Bessel, a qual tem como solução as funções de Bessel:

$$P(s) = CJ_n(ks) + DY_n(ks). \quad (7.34)$$

J_n e Y_n são as funções de Bessel e de Neumann, ambas soluções da Eq. de Bessel⁵.

Uma vez encontrada as 3 funções através de 3 EDOs independentes, a solução final é $\psi_{k,n}(s, \varphi, z) = P_n(ks)\Phi_n(\varphi)Z_k(z)$. Dado a linearidade do laplaciano, a solução geral é uma soma dessas soluções:

$$\Psi(s, \varphi, z) = \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} a_{k,n} P_n(ks) \Phi_n(\varphi) Z_k(z). \quad (7.35)$$

7.3.1 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 7.5). Na condição estacionária a distribuição de temperatura $u(\mathbf{r})$ satisfaz a equação de Laplace. Em coordenadas cilíndricas a solução é dada pela Eq. 7.35. Porém, Y_n na Eq. 7.34 diverge na origem $s = 0$, de forma que devemos descartá-la da solução. Logo $P(s) = J_n(ks)$.

A primeira condição de contorno é a temperatura na lateral: $u(a) = 0$, o que implica $P(a) = J_n(ka) = J_n(\chi_{mn}) = 0$, 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

⁵A separação de variáveis da equação de Laplace em coordenadas parabólicas também resulta em funções de Bessel para a coordenada radial.

para infinito quando z é muito grande. Da solução da eq. 7.30, 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. 4.41), 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:

$$\begin{aligned} \int_0^a \int_0^{2\pi} u_0(s, \varphi) J_\nu(\chi_{\mu\nu}s/a) \cos \nu\varphi s ds d\varphi &= A_{\mu\nu} \int_0^a \int_0^{2\pi} J_\nu^2(\chi_{\mu\nu}s/a) \cos^2 \nu\varphi s ds d\varphi, \\ &= \frac{\pi}{2} A_{\mu\nu} a^2 J_{\nu+1}^2(\chi_{\mu\nu}). \end{aligned}$$

Para encontrar B_{mn} , multiplicamos por $J_\nu(\chi_{\mu\nu}s/a) \sin \nu\varphi$. Após alguma algebra:

$$B_{\mu\nu} = \frac{2}{\pi a^2 J_{\nu+1}^2(\chi_{\mu\nu})} \int_0^a \int_0^{2\pi} u_0(s, \varphi) J_\nu(\chi_{\mu\nu}s/a) \sin \nu\varphi s ds d\varphi \quad (7.36)$$

Exemplo 7.4

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 7.5). 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: $u(T) = AJ_0(\chi s/a)e^{-\chi_m z/a}$, onde fizemos $\chi_0 = \chi$. Como a Eq. de Laplace é linear, a solução geral fica:

$$u(T) = \sum_{m=1}^{\infty} A_m J_0(\chi_m s/a) e^{-\chi_m z/a}. \quad (7.37)$$

7.4 Separação de variáveis em coordenadas esféricas

Vamos resolver a equação de Laplace em coordenadas esféricas:

$$\frac{1}{r^2 \sin \theta} \left[\sin \theta \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} \right] = 0. \quad (7.38)$$

Analogamente tentamos a solução $\psi(r, \theta, \varphi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi)$, e dividindo tudo por $R\Theta\Phi$ a equação anterior fica:

$$\frac{1}{Rr^2 \sin \theta} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{1}{\Theta r^2 \sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \frac{1}{\Phi r^2 \sin^2 \theta} \frac{d^2 \Phi}{d\varphi^2} = 0. \quad (7.39)$$

Repare que as derivadas são totais agora. Isolando a derivada em φ e multiplicando por $r^2 \sin \theta$:

$$\frac{1}{\Phi} \frac{d^2 \Phi}{d\varphi^2} = -r^2 \sin \theta \left[\frac{1}{r^2 R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{1}{\Theta r^2 \sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) \right].$$

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:

$$\frac{1}{\Phi} \frac{d^2 \Phi}{d\varphi^2} = m^2, \quad (7.40)$$

o que implica em:

$$\frac{1}{r^2 R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{1}{\Theta r^2 \sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) - \frac{m^2}{r^2 \sin \theta} = 0.$$

Multiplicando por r^2 e rearranjando:

$$\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) = \frac{m^2}{\sin \theta} - \frac{1}{\Theta \sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right).$$

Igualando cada lado a uma constante $l(l+1)$ obtemos:

$$\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \frac{l(l+1)R}{r^2} = 0, \quad (7.41)$$

$$\frac{1}{\Theta \sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \left[l(l+1) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right] \Theta = 0, \quad (7.42)$$

onde l é um inteiro. Novamente, a equação diferencial parcial foi convertida em três equações diferenciais ordinárias. A equação em θ (Eq. 7.42) é identificada como sendo a equação dos polinômios de Legendre associado. Já a equação radial (Eq. 7.41) tem solução em séries de potência

$$R(r) = Ar^l + \frac{B}{r^{-l-1}}. \quad (7.43)$$

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:

$$\psi(r, \theta, \varphi) = \sum_{l,m} a_{lm} R_l(r) \Theta_{lm}(\theta) \Phi_{lm}(\varphi).$$

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. 7.40 e 7.42, 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:

$$x \frac{d^2 y}{dx^2} + (1 + k - x) \frac{dy}{dx} + \alpha y = 0,$$

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:

$$\frac{d^2 y}{dx^2} - 2x \frac{dy}{dx} + 2\alpha y = 0.$$

7.4.1 Harmônicos esféricos $Y_l^m(\theta, \phi)$

Vamos resolver a parte angular da Eq. de Laplace. Resolvendo a Eq. 7.40 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:

$$|m| = 0, 1, 2, 3, \dots$$

Já a solução da Eq. 7.42 para Θ é

$$\Theta(\theta) = AP_l^m(\cos \theta),$$

onde $P_l^m(x)$ são os polinômios associados de Legendre

$$P_l^m(x) = (1 - x^2)^{|m|/2} \left(\frac{d}{dx} \right)^{|m|} P_l(x), \quad (7.44)$$

calculados em função do polinômio de Legendre definidos pela Eq. 4.26.

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:

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = \Theta(\theta)\Phi(\varphi) = AP_l^m(\cos \theta) \exp(im\varphi) \quad (7.45)$$

A solução deve ser normalizada na forma:

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \theta d\theta \left[Y_{l_1}^{m_1}(\theta, \varphi) \right]^* \left[Y_{l_2}^{m_2}(\theta, \varphi) \right] = \delta_{l_1 l_2} \delta_{m_1 m_2} \quad (7.46)$$

⁶A eq. do polinômio de Laguerre (que também aparece na solução) é a mesma com $k = 0$.

A solução normalizada para a parte angular são os chamados harmônicos esféricos:

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = \epsilon \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} e^{im\varphi} P_l^m(\cos \theta) \quad (7.47)$$

onde $\epsilon = (-1)^m$ se $m \geq 0$ e $\epsilon = 1$ se $m \leq 0$. Os primeiros termos da série são:

$$\begin{aligned} Y_0^0 &= \sqrt{\frac{1}{4\pi}} & \therefore & Y_2^{\pm 2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta \exp(\pm 2i\varphi) \\ Y_1^0 &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta & \therefore & Y_3^0 = \sqrt{\frac{7}{16\pi}} (5 \cos^3 \theta - 3 \cos \theta) \\ Y_1^{\pm 1} &= \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\varphi} & \therefore & Y_3^{\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{21}{64\pi}} \sin \theta (5 \cos^2 \theta - 1) e^{\pm i\varphi} \\ Y_2^0 &= \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1) & \therefore & Y_3^{\pm 2} = \sqrt{\frac{105}{32\pi}} \sin^2 \theta \cos \theta e^{\pm 2i\varphi} \\ Y_2^{\pm 1} &= \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\varphi} & \therefore & Y_3^{\pm 3} = \mp \sqrt{\frac{35}{64\pi}} \sin^3 \theta e^{\pm 3i\varphi} \end{aligned} \quad (7.48)$$

7.4.2 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. 7.38 se torna:

$$\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) = 0. \quad (7.49)$$

Supondo $V(r, \theta) = R(r)\Theta_a(\theta)$ e dividindo tudo por V temos que:

$$\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{1}{\Theta_a \sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta_a}{d\theta} \right) = 0.$$

Igualando o primeiro termo a uma constante teremos:

$$\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) = l(l+1), \quad \frac{1}{\Theta_a \sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta_a}{d\theta} \right) = -l(l+1). \quad (7.50)$$

As solução para R continuam sendo dada pela Eq. 7.43. Já para Θ as soluções são diretamente os polinômios de Legendre $P_l(x)$ dados pela Eq. 4.26:

$$\Theta_a(\theta) = P_l(\cos \theta). \quad (7.51)$$

Como a Eq. 7.50 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 físico⁷. Como vale o princípio da superposição a solução geral é:

$$V(r, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} \left(A_l r^l + \frac{B_l}{r^{l+1}} \right) P_l(\cos \theta). \quad (7.52)$$

⁷Por exemplo para $l = 0$ a segunda solução é $\Theta(\theta) = \ln \left(\tan \frac{\theta}{2} \right)$.

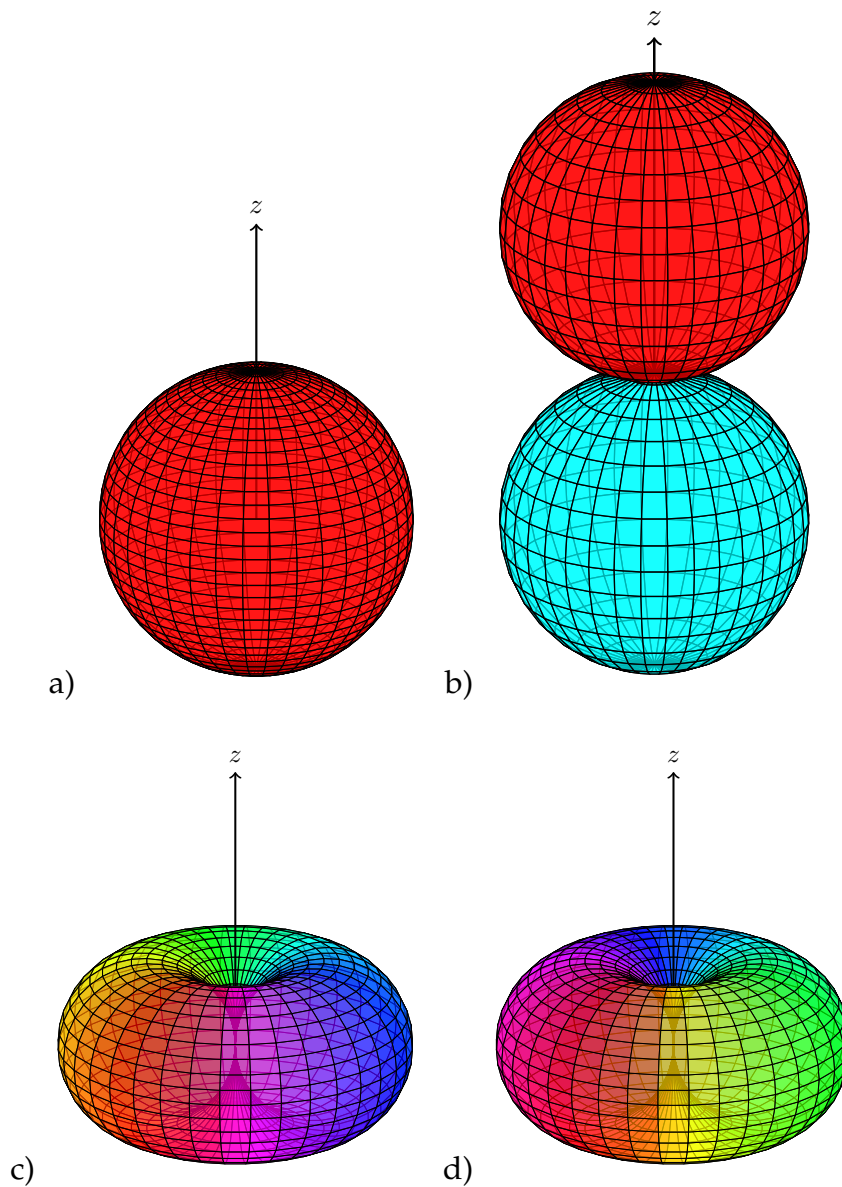


Figura 7.6: Gráfico do módulo $|Y_l^m|$ dos harmônicos esféricos $Y_l^m(\theta, \varphi) = |Y_l^m|e^{i\alpha}$. A cor do volume é determinada pela fase α . (a) $l = m = 0$. (b) $l = 1$ e $m = 0$. (c) $l = 1$ e $m = -1$. (d) $l = 1$ e $m = 1$.

Exemplo 7.5

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:

$$\nabla^2 V(\mathbf{r}) = \frac{\rho}{\epsilon_0}, \quad (7.53)$$

onde ρ é a densidade de carga. Como não há carga livre temos que $\rho = 0$ e a 7.53 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 7.4.2 e a solução geral para o potencial

é dado pela Eq. 7.52. 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:

$$V(r, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} A_l r^l P_l(\cos \theta).$$

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:

$$V_0(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} A_l a^l P_l(\cos \theta). \quad (7.54)$$

Repare que a Eq. 7.54 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 os coeficientes A_l dessa equação. Para isso usamos o fato de que os Polinômios de Legendre formam um conjunto completo, expresso pela Eq. 4.38. Multiplicando a Eq. 7.54 por $P_n(\cos \theta) \sin \theta$ e integrando de 0 a π temos:

$$\int_0^{\pi} V_0(\theta) P_n(\cos \theta) \sin \theta d\theta = \sum_{l=0}^{\infty} A_l a^l \int_0^{\pi} P_l(\cos \theta) P_n(\cos \theta) \sin \theta d\theta.$$

Porém, da Eq. 4.38 a integral de termos diferentes $P_l P_n$ é zero. Assim, na somatória resta então apenas o termo $l = n$:

$$\int_0^{\pi} V_0(\theta) P_n(\cos \theta) \sin \theta d\theta = A_n a^n \frac{2}{2n+1}.$$

Logo o coeficiente é dado por:

$$A_n = \frac{2n+1}{2a^n} \int_0^{\pi} V_0(\theta) P_n(\cos \theta) \sin \theta d\theta. \quad (7.55)$$

Ou seja, a hipótese expressa na Eq. 7.54 é válida e é a solução do problema com os coeficientes dados pela Eq. 7.55.

A Eq. 4.38 mostra que os polinômios de Legendre formam um conjunto completo e ortonormal (ortonormal) e assim qualquer função pode ser expressa em termos de uma série de P_n . Senos, cossenos e exponenciais complexas também são outras funções que formam um conjunto ortonormal.

7.4.3 Eq. de Schrodinger

A Eq. de Schrodinger independente do tempo é:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}) = E \Psi(\mathbf{r}) \quad (7.56)$$

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:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \Psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \varphi^2} \right] + V\Psi = E\Psi. \quad (7.57)$$

Procuramos uma solução do tipo $\Psi(\mathbf{r}) = R(r)Y(\theta, \varphi)$. Substituindo essa hipótese na Eq. 7.57, dividindo por Ψ e multiplicando por $-2mr^2/\hbar^2$ temos:

$$\left\{ \frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \frac{2mr^2}{\hbar^2} [V(r) - E] \right\} + \frac{1}{Y} \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{dY}{d\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{d^2 Y}{d\varphi^2} \right\} = 0. \quad (7.58)$$

Cada termo em chaves depende de variáveis diferentes. Igualando ambos à constante $l(l+1)$:

$$\left\{ \frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \frac{2mr^2}{\hbar^2} [V(r) - E] \right\} = l(l+1), \quad (7.59)$$

$$\frac{1}{Y} \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{dY}{d\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{d^2 Y}{d\varphi^2} \right\} = -l(l+1). \quad (7.60)$$

Como o potencial depende apenas de r não haverá termos angulares, sugerindo que a solução angular continue a ser os harmônicos esféricos (Eq. 7.47). De fato, $Y_l^m(\theta, \varphi)$ são solução da Eq. 7.60.

Apenas a parte radial é afetada pelo potencial $V(r)$. Reorganizando a Eq. 7.59:

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} + \left\{ \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(r)] - \frac{l(l+1)}{r^2} \right\} R = 0 \quad (7.61)$$

Fazendo $R(r) = u(r)/r$ temos:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dr^2} + \left[V(r) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \right] u = Eu. \quad (7.62)$$

Esta é a equação radial, idêntica a eq. radial de Schrodinger em uma dimensão. A Eq. 7.62 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 7.6

Seja uma partícula quântica confinada no poço esférico infinito, cujo potencial é:

$$V(r) = \begin{cases} 0 & \text{se } 0 \leq r < a \\ \infty & \text{se } r > a \end{cases} \quad (7.63)$$

Encontre a energia e a função de onda do estado fundamental.

Fora do poço o potencial é infinito logo a partícula não pode estar aí, então sua função de onda é zero. Dentro do poço a Eq. 7.62 fica:

$$\frac{d^2 u}{dr^2} = \left[\frac{l(l+1)}{r^2} - k^2 \right] u, \quad (7.64)$$

onde

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}. \quad (7.65)$$

A condição de contorno é $u(a) = 0$.

O caso mais simples é para $l = 0$ que recai no oscilador harmônico (Eq. 3.20), logo:

$$\frac{d^2 u_0}{dr^2} = -k^2 u_0, \quad \implies u_0(r) = A \sin kr + B \cos kr. \quad (7.66)$$

Porém, a solução é $R(r) = r(r)/r$, o que explode em $r = 0$. Então fazemos $B = 0$ de forma que $R(0) = A \sin 0 = 0$. Já a condição de contorno impõe que:

$$R(r) = A \frac{\sin ka}{a} = 0, \quad (7.67)$$

logo $ka = n\pi$ ou $k = n\pi/a$ para n inteiro. Invertendo a Eq. 7.65 obtemos as energias:

$$E_{n0} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}, \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad (7.68)$$

Usando a Eq. 7.48, 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. 4.22. Note que mais um número quântico apareceu, n , que define a energia.

Exemplo 7.7

Vamos generalizar o problema do exemplo 4.1 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.

Começamos pela Eq. de Schrodinger 7.61. O sinal de $[E - V(r)]$ define se esta equação é a equação de Bessel esférica (Eq. 4.14) ou a mesma modificada (Eq. 4.23). No caso positivo, que ocorre em $r < a$, a equação é a versão não modificada (exemplos 4.1 e 7.6). Já no caso negativo, que ocorre em $r > a$, teremos a versão modificada, com

solução geral

$$R(kr) = Ai_l(kr) + Bk_l(kr), \quad \kappa_l = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)}.$$

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:

$$R_{nl}(r) = \begin{cases} Aj_l(\kappa_{1nl}r) & \text{se } r < a \\ Ck_l(\kappa_{2nl}r) & \text{se } r > a \end{cases} \quad (7.69)$$

onde

$$\kappa_{1nl} = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE_{nl}}, \quad \therefore \quad \kappa_{2nl} = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E_{nl})}. \quad (7.70)$$

Os números quânticos são n e l .

As condições de contorno exigem que $R_{nl}(r)$ e sua derivada devem ser contínuas em $r = R$:

$$Aj_l(\kappa_{1nl}R) = Ck_l(\kappa_{2nl}R) \quad \therefore \quad A \frac{dj_l}{dr}(\kappa_{1nl}R) = C \frac{dk_l}{dr}(\kappa_{2nl}R) \quad (7.71)$$

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.

Problemas

7.9) 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.

7.10) 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.

7.11) Mostre a seguinte relação de recorrência para os polinômios de Legendre P_l :

$$\frac{dP_{l+1}}{dx} - \frac{dP_{l-1}}{dx} - (2l+1)P_l = 0.$$

7.12) Mostre que para $m = 0$ os harmônicos esféricos podem ser escritos como:

$$Y_l^0 = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos \theta).$$

7.13) Seja

$$g(\theta, \varphi) = \sum_{l=0}^{+\infty} \sum_{m=-l}^l A_{lm} Y_{lm}(\theta, \varphi).$$

Mostre que os coeficientes são⁸:

$$A_{lm} = \int d\Omega [Y_l^m(\theta, \varphi)]^* g(\theta, \varphi).$$

7.14) 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

$$Y_l^m = \sqrt{\frac{(l+m)!}{(2l)!(l-m)!}} (L_-)^{l-m} Y_l^l, \quad Y_l^m = \sqrt{\frac{(l-m)!}{(2l)!(l+m)!}} (L_+)^{l+m} Y_l^{-l}.$$

7.15) 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 $\Psi(\mathbf{r}) = R(r)Y(\theta, \phi)$. Mostre que a solução da parte angular são os harmônicos esféricos (Eq. 7.47). b) Mostre que a equação radial é:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dr^2} + \left[\frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right] u = Eu.$$

c) A solução geral é:

$$\Psi_{nlm} = e^{-r/na} \left(\frac{2r}{na} \right)^l \sqrt{\left(\frac{2}{na} \right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}} \left[L_{n-l-1}^{2l+1}(2r/na) \right] Y_l^m(\theta, \phi).$$

⁸Neste caso $d\Omega$ é o elemento de ângulo sólido e $\int d\Omega = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \theta d\theta$.

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.

7.16) Considere o exemplo 7.7. A energia E_{nl} da partícula é obtida das equações 7.71. Mostre que a energia pode ser obtida pela solução numérica de:

$$k_l(\gamma_{2nl}) \frac{dj_l}{dr}(\gamma_{1nl}) = j_l(\gamma_{1nl}) \frac{dk_l}{dr}(\gamma_{2nl}), \quad (7.72)$$

onde

$$\begin{aligned} \gamma_{1nl} &= \kappa_{1nl} R = \frac{R}{\hbar} \sqrt{2mE_{nl}}, \\ \gamma_{2nl} &= \kappa_{2nl} R = \frac{R}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E_{nl})}. \end{aligned}$$

7.17) Mostre que a condição de normalização da função de onda do exemplo 7.7 é:

$$A_{nl} = \sqrt{\frac{1 - C_l^2 \Gamma_{nl}}{\Lambda_{nl}}}. \quad (7.73)$$

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.

Constantes fundamentais da Física

A.1 Constantes Fundamentais

Símbolo	Valor	Descrição
c	$3,00 \times 10^8 \text{ m/s}$	velocidade da luz no vácuo
q	$1,60 \times 10^{-19} \text{ C}$	carga fundamental do elétron
m_0	$9,11 \times 10^{-31} \text{ kg}$	massa do elétron em repouso
\hbar	$6,58 \times 10^{-16} \text{ eVs}$	constante de Planck
k_B	$1,38 \times 10^{-23} \text{ J/K}$	constante de Boltzmann
ϵ_0	$8,85 \times 10^{-12} \text{ C}^2/(\text{Nm}^2)$	permissividade elétrica do vácuo
μ_0	$4\pi \times 10^{-7} \text{ N/A}^2$	permeabilidade magnética do vácuo
G	$6.674 \times 10^{-11} \text{ Nm}^2/\text{kg}^2$	constante gravitacional universal ¹

Tabela A.1: Constantes fundamentais da Física utilizadas neste trabalho.

Resultados úteis

B.1 Trigonometria

$$e^{\pm i\theta} = \cos \theta \pm i \sin \theta, \quad (B.1)$$

$$\cos \theta = \frac{e^{i\theta} + e^{-i\theta}}{2}, \quad \sin \theta = \frac{e^{i\theta} - e^{-i\theta}}{2i} \quad (B.2)$$

$$\cosh \theta = \frac{e^{\theta} + e^{-\theta}}{2}, \quad \sinh \theta = \frac{e^{\theta} - e^{-\theta}}{2} \quad (B.3)$$

$$\cos \theta = \cosh i\theta, \quad \sin \theta = -i \sinh i\theta \quad (B.4)$$

$$\cos^2(\theta/2) = (1 + \cos \theta)/2, \quad \sin^2(\theta/2) = (1 - \cos \theta)/2 \quad (B.5)$$

$$\sin(\alpha \pm \beta) = \sin \alpha \cos \beta \pm \cos \alpha \sin \beta, \quad \cos(\alpha \pm \beta) = \cos \alpha \cos \beta \mp \sin \alpha \sin \beta$$

$$\sin \theta \pm \sin \phi = 2 \sin \left(\frac{\theta \pm \phi}{2} \right) \cos \left(\frac{\theta \mp \phi}{2} \right)$$

$$\tanh x = \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}} = \frac{e^{2x} - 1}{e^{2x} + 1}, \quad \frac{d}{dx} \tanh(ax) = a - a \tanh^2 x \quad (B.6)$$

B.2 Integrais úteis

$$\int u dv = uv - \int v du, \quad \int e^{i\mathbf{b} \cdot \mathbf{r} - ar} d^3r = \frac{8\pi a}{(a^2 + b^2)^2} \quad (B.7)$$

$$\int_a^c f(x) dx = \int_a^b f(x) dx + \int_b^c f(x) dx, \quad c > b > a \quad (B.8)$$

$$\int \cos ax dx = \frac{\sin ax}{a}, \quad \int \sin ax dx = -\frac{\cos ax}{a}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-t^2} dt = \sqrt{\pi}, \quad \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-a^2 t^2} e^{i\omega t} dt = \frac{\sqrt{\pi}}{a} \exp \left(-\frac{\omega^2}{4a^2} \right). \quad (B.9)$$

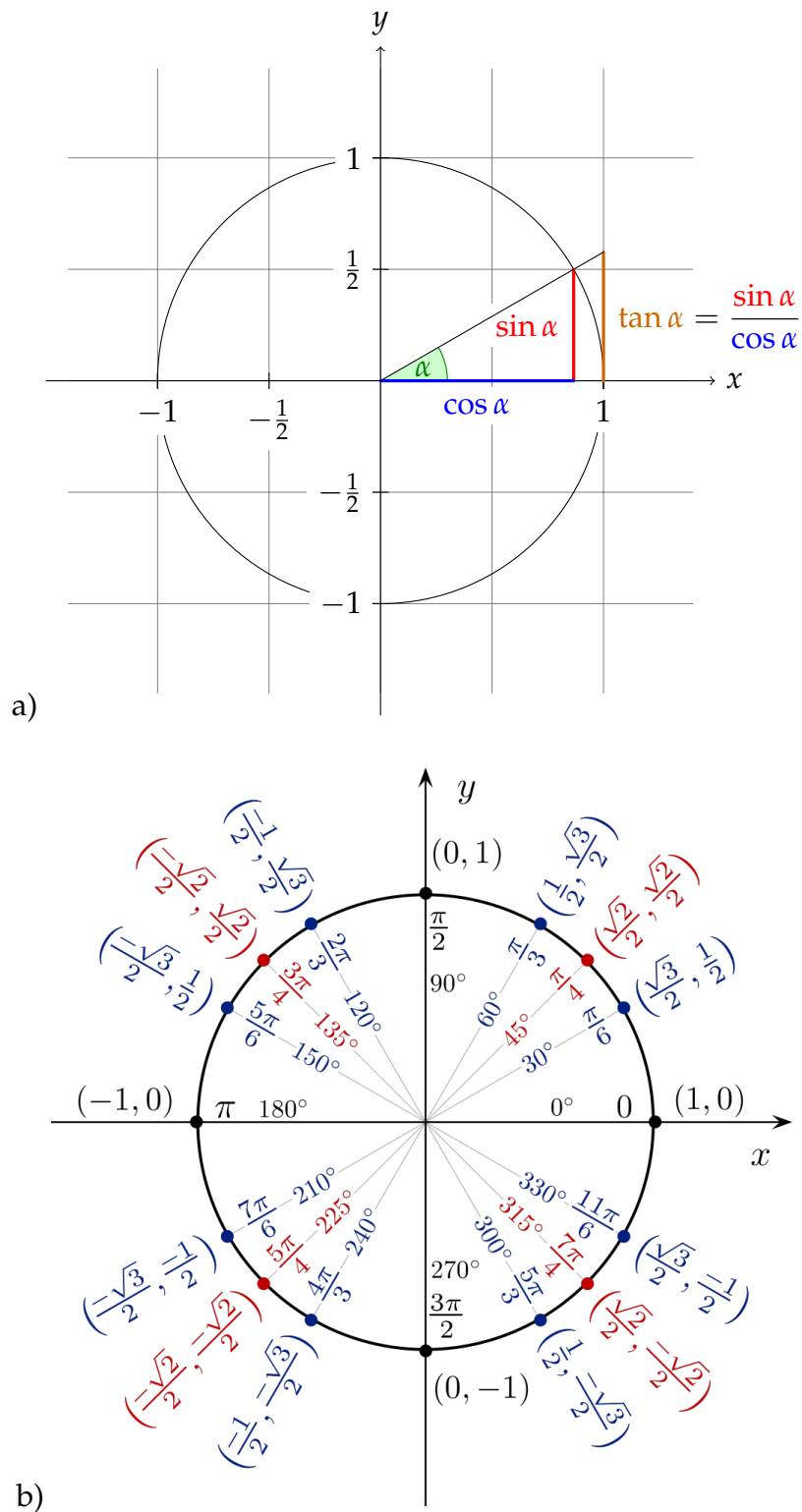


Figura B.1: (a) Definição de seno e cosseno. (b) Ilustração do ciclo trigonométrico com as indicações dos principais ângulos e os respectivos valores dos seno e cosseno. Fonte: Wikipedia¹.

$$\int_0^x \frac{dt}{1+t^2} = \arctan x \quad (\text{B.10})$$

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	$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} \right) = \nabla \cdot \mathbf{T} - \nabla p + \mathbf{f}$	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.

Soluções de problemas

Neste apêndice apresentamos as soluções de alguns problemas solucionados.

Capítulo 1

$$1.4) (\mathbf{a} \times \mathbf{b} \cdot \mathbf{c})\mathbf{x} = (\mathbf{x} \times \mathbf{b} \cdot \mathbf{c})\mathbf{a} + (\mathbf{a} \times \mathbf{x} \cdot \mathbf{c})\mathbf{b} + (\mathbf{a} \times \mathbf{b} \cdot \mathbf{x})\mathbf{c}.$$

1.16) Assumimos que o sistema encontra-se no vácuo, $\rho = 0$, temos que $\vec{\nabla} \cdot \mathbf{E} = 0$ da Lei de Gauss (Eq. 1.10). Calculemos o rotacional do rotacional de \mathbf{E} usando a Eq. 1.4:

$$\vec{\nabla} \times (\vec{\nabla} \times \mathbf{E}) = \vec{\nabla}(\vec{\nabla} \cdot \mathbf{E}) - \nabla^2 \mathbf{E} = -\nabla^2 \mathbf{E}. \quad (\text{D.1})$$

Agora vamos calcular o rotacional da Lei de Faraday (Eq. 1.12):

$$\vec{\nabla} \times (\vec{\nabla} \times \mathbf{E}) = -\frac{\partial}{\partial t} \vec{\nabla} \times \mathbf{B} = -\frac{\partial}{\partial t} \left(\mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{E} \right) = -\mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2}, \quad (\text{D.2})$$

onde usamos a lei de Ampere-Maxwell (Eq. 1.13) com $\mathbf{J} = 0$ (vácuo). Igualando as eqs D.1 e eq D.2 temos:

$$\nabla^2 \mathbf{E} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2}.$$

Esta é a equação de onda para o campo elétrico. Analogamente encontra-se uma equação idêntica para o campo magnético.

$$1.21) 2\pi.$$

1.17a) O campo magnético associado pode ser encontrado usando a Lei de Faraday:

$$\begin{aligned} -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} &= \vec{\nabla} \times \mathbf{E} = \frac{\hat{\mathbf{r}}}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta E_\varphi) - \frac{\hat{\boldsymbol{\theta}}}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r E_\varphi), \\ &= \frac{\hat{\mathbf{r}}}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left[E_0 \frac{\sin^2 \theta}{r} \left(\cos u - \frac{1}{kr} \sin u \right) \right] - \frac{\hat{\boldsymbol{\theta}}}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[E_0 \sin \theta \left(\cos u - \frac{1}{kr} \sin u \right) \right], \\ &= 2 \frac{\hat{\mathbf{r}}}{r \sin \theta} \frac{E_0}{r} \sin \theta \cos \theta \left(\cos u - \frac{1}{kr} \sin u \right) - \frac{\hat{\boldsymbol{\theta}}}{r} E_0 \sin \theta \left(\frac{1}{kr^2} \sin u - \frac{1}{r} \cos u - k \sin u \right). \end{aligned}$$

Porém sabemos que $\int \cos u dt = -\frac{\sin u}{\omega}$ e $\int \sin u dt = \frac{\cos u}{\omega}$. Assim, integrando no tempo temos:

$$B = 2 \frac{E_0 \cos \theta}{\omega r^2} \left(\sin u + \frac{\cos u}{kr} \right) \hat{\mathbf{r}} + \frac{E_0 \sin \theta}{\omega r} \left(\frac{1}{kr^2} \sin u - \frac{1}{r} \cos u - k \sin u \right) \hat{\boldsymbol{\theta}}.$$

b) Da Lei de Gauss temos: $\vec{\nabla} \cdot \mathbf{E} = \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial E_\varphi}{\partial \varphi} = 0$. Já a divergência do campo magnético \mathbf{B} é:

$$\begin{aligned} \vec{\nabla} \cdot \mathbf{B} &= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 B_r) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta B_\theta), \\ &= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left[\frac{2E_0 \cos \theta}{\omega} \left(\sin u + \frac{\cos u}{kr} \right) \right] + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left[\frac{E_0 \sin^2 \theta}{\omega r} \left(\frac{1}{kr^2} \sin u - \frac{1}{r} \cos u - k \sin u \right) \right], \\ &= \frac{2}{r^2} \frac{E_0 \cos \theta}{\omega} \left(k \cos u - \frac{\cos u}{kr^2} - \frac{\sin u}{r} \right) + \frac{2E_0 \sin \theta \cos \theta}{r \omega r \sin \theta} \left(\frac{\cos u}{kr^2} - k \cos u + \frac{\sin u}{r} \right), \\ &= \frac{2E_0 \cos \theta}{r \omega r} \left(k \cos u - \frac{\cos u}{kr^2} - \frac{\sin u}{r} - k \cos u + \frac{\cos u}{kr^2} + \frac{\sin u}{r} \right) = 0. \end{aligned}$$

Por último, vamos calcular ambos os lados da Lei de Ampère/Maxwell e mostrar que ambos são iguais.

Capítulo 2

2.2c) $B_{mn} = m! / [n!(m-n)!]$.

2.7) A série é convergente para $-1 < x < 1$ e $x = \pm 1$ se $\gamma > \alpha + \beta$.

2.8a) $\ln(1+x) = \sum_{p=1}^{\infty} (-1)^{p-1} x^p / p$. c) Vamos usar a Eq. B.10. Assim, fazendo uma série binomial temos que $(1+t^2)^{-1} = 1 - t^2 + t^4 - t^6 + \dots$. Integrando termo a termo:

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

2.9 $(h^2/12)\psi^{(4)}(x)$.

2.14b) O código que gera as figuras 2.1(a) e 2.1(b) é:

```
import math
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
plt.rc('text', usetex=True)
plt.rc('font', family='serif')
def calc_pi(Nlados, raio):
    pontos = int(Nlados)+1 #n de lados
```



```
nx, ny = [], [] #coordenadas dos vertices
for theta in np.linspace(0,2*np.pi,pontos):
    nx.append(raio*np.cos(theta))
    ny.append(raio*np.sin(theta))
N = len(nx)
area_p = 0.0
for i in range(N-1):
    area_p += nx[i]*ny[i+1] - nx[i+1]*ny[i]
area_p = 0.5*abs(area_p) #area do poligono
pi_est = area_p / raio **2
return pi_est

def grafico(Nlados, raio):
    pontos = int(Nlados)+1 #n de lados
    nx, ny = [], [] #coordenadas dos vertices
    for theta in np.linspace(0,2*np.pi,pontos):
        nx.append(raio*np.cos(theta))
        ny.append(raio*np.sin(theta))
    circulo = plt.Circle((0,0), raio, lw = 3, edgecolor = 'r', facecolor = 'none')
    fig = plt.gcf()
    ax = fig.gca()
    ax.add_artist(circulo)
    plt.plot(nx,ny,c='b', lw=1)
    plt.fill_between(nx,ny) #cor do poligono
    plt.title('$N=${Nlados}', '$r=${raio}', fontsize = 16)
    plt.axis('equal')
    plt.xticks([])
    plt.yticks([])
    axes = plt.gca()
    axes.set_ylim([-1.2,1.2])
    axes.set_xlim([-1.2,1.2])
    plt.savefig("figura.pdf", dpi = 300)
    plt.close()

def grafico2(raio, L):
    lados = np.arange(3,L,1)
    ele = len(lados)
    pi_est = np.zeros(ele)
    ind = 0
    func_pi = math.pi*np.ones(ele)
    for nl in lados:
        pi_est[ind] = calc_pi(nl,raio)
        ind += 1
    erro = (math.pi - pi_est[ele-1])*(100/math.pi)
    axes = plt.gca()
    plt.plot(lados,pi_est,'-b', lw = 2, label = '$\pi_e(N)$')
    plt.plot(lados,func_pi,'--r', lw = 2, label = r'$\pi=3.1415...$')
    plt.legend(loc='lower_right',fontsize = 16)
    plt.xlabel(r'Lados $N$', fontsize = 16) #k indica cor preta
```

```
plt.ylabel(r'Valores de $\pi$', fontsize = 16)
axes.set_ylim([1.0,3.5])
plt.text(70,1.7,r'$\Delta_\pi$'+str(round(erro,2))+'%',fontsize = 16, color =
'k')
plt.savefig("figura2.pdf", dpi = 300)
plt.close()
```

```
L, raio = 100, 1.0
grafico(6, raio)
grafico2(raio, L)
```

$$2.20b) (1+i)^{20} = (\sqrt{2})^{20} = (\cos 20\pi/4 + i \sin 20\pi/4) = 2^{10}(-1) = -1024.$$

Capítulo 4

4.8

$$\begin{aligned} j_0(x) &= \frac{\sin x}{x}, & y_0(x) &= -\frac{\cos x}{x}, \\ j_1(x) &= \frac{\sin x}{x^2} - \frac{\cos x}{x}, & y_1(x) &= j_{-2}(x) = -\frac{\cos x}{x^2} - \frac{\sin x}{x}, \\ h_0^{(1)}(x) &= -\frac{i}{x}e^{ix}, & h_0^{(2)}(x) &= \frac{i}{x}e^{-ix}. \end{aligned}$$

Capítulo 6

6.2) a)

$$f(x) = \frac{\pi}{4} - \frac{2}{\pi} \left(\cos x + \frac{\cos 3x}{3^2} + \frac{\cos 5x}{5^2} + \dots \right) + \left(\sin x - \frac{\sin 2x}{2^2} + \frac{\sin 3x}{3^2} + \dots \right).$$

b) $f(x) = 1 + 2 \left(\sin x - \frac{1}{2} \sin 2x + \frac{1}{3} \sin 3x - \frac{1}{4} \sin 4x + \dots \right).$

c) $f(x) = \frac{4}{\pi} \left(\sin \frac{\pi x}{L} + \frac{1}{3} \sin \frac{3\pi x}{L} + \frac{1}{5} \sin \frac{5\pi x}{L} + \dots \right).$

d) $\cosh ax = \frac{\sinh a\pi}{a\pi} + \frac{2a \sinh a\pi}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n^2 + a^2} \cos nx, \quad -\pi < x < \pi.$

6.7) Seguindo a dica do enunciado, seja $f(\phi_2)$ escrito como uma série de Fourier complexa $f(\phi_2) = \sum c_n e^{in\phi_2}$. Usando a Eq. 2.4 temos:

$$\begin{aligned} f(\phi_2)\delta(\phi_1 - \phi_2) &= \frac{1}{2\pi} \sum_n \sum_{m=0}^n c_m e^{im\phi_2} \exp[i(n-m)(\phi_1 - \phi_2)], \\ &= \frac{1}{2\pi} \sum_n \sum_{m=0}^n c_m \exp(2mi\phi_2 - ni\phi_2) e^{i\phi_1(n-m)}. \end{aligned}$$

A integral da Eq. 6.15 fica:

$$I = \sum_n \sum_{m=0}^n c_m e^{i\phi_1(n-m)} \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{2mi\phi_2} e^{-ni\phi_2} d\phi_2.$$

Como as exponenciais também formam um conjunto completo (Eq. 6.12)¹ temos que:

$$\int_{-\pi}^{\pi} e^{2mi\phi_2} e^{-ni\phi_2} d\phi_2 = 2\pi \delta_{2m,n}.$$

Essa integral só é diferente de zero quando os dois expoentes em ϕ_2 são iguais, ou seja, $2m = n$. Nesse caso, só resta o termo $2m = n$ na somatória em m :

$$I = \frac{1}{2\pi} \sum_n c_{n/2} e^{in\phi_1/2} 2\pi = \sum_n c_n e^{in\phi_1} = f(\phi_1).$$

6.13a) Temos que $\Psi(x, 0) = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(k) \psi_k(x, 0) dk = e^{-x^2/2a^2}$. Seja $g(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{x^2}{2a^2}\right)$.

Logo:

$$g(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(k) e^{ikx} dk.$$

$g(x)$ é a transformada de Fourier de $\varphi(k)$. A transformada inversa nos dá:

$$\varphi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} g(x) e^{-ikx} dx = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-ikx - \frac{x^2}{2a^2}\right) dx.$$

A integral de uma exponencial com esse expoente não é fácil. A estratégia é convertê-la em uma integral do tipo da Eq. B.9 lado esquerdo. Para isso precisamos completar os quadrados no expoente. Seja:

$$-ikx - \frac{x^2}{2a^2} = -\left(\frac{x}{a\sqrt{2}} + \alpha_1\right)^2 + \alpha_2.$$

Abrindo o quadrado e igualando as potências temos $\alpha_1 = \frac{1}{2}aik\sqrt{2}$ e $\alpha_2 = \alpha_1^2 = -\frac{1}{2}a^2k^2$.

Veja que dimensionalmente α_1 e α_2 fazem sentido já que a tem unidade de distância e k de inverso de distância. Voltando a $\varphi(k)$ temos:

$$\varphi(k) = \frac{1}{2\pi} \exp\left(-\frac{1}{2}a^2k^2\right) \int_{-\infty}^{+\infty} \exp - \left(\frac{x}{a\sqrt{2}} + \frac{1}{2}aik\sqrt{2}\right)^2 dx.$$

¹Repare que essa integral serve para qualquer intervalo de comprimento 2π .

Agora podemos converter a integral fazendo $u = \frac{x}{a\sqrt{2}} + \frac{1}{2}aik\sqrt{2}$ e $du = \frac{dx}{a\sqrt{2}}$. Assim:

$$\varphi(k) = \frac{a\sqrt{2}}{2\pi} \exp\left(-\frac{1}{2}a^2k^2\right) \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-u^2} du = \frac{a}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2}a^2k^2\right), \quad (\text{D.3})$$

onde usamos a eq. esquerda da Eq. B.9.

b) Usando o item a) (Eq. D.3) no caso geral ($t \neq 0$), temos que:

$$\Psi(x, t) = \frac{a}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(ikx - ik^2 \frac{\hbar t}{2m} - \frac{1}{2}a^2k^2\right) dk = \frac{a}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} e^{-\gamma k^2} dk,$$

$$\text{onde } \gamma = \frac{a^2}{2} \left(1 + \frac{\hbar t i}{ma^2}\right).$$

A estratégia agora é usar a equação da direita de B.9, fazendo $t = k$, $x = \omega$ e $a^2 = \gamma$. O resultado fica:

$$\Psi(x, t) = \frac{a}{\sqrt{2\gamma}} \exp\left(-\frac{x^2}{4\gamma}\right) = \frac{\exp\left[-\frac{x^2}{2a^2 + 2\frac{\hbar t}{m}i}\right]}{\sqrt{1 + i\frac{\hbar t}{ma^2}}}.$$

6.18) a) $y(t) = e^{2t}(4t + \frac{1}{2}t^2)$. b) $y(t) = \cos t + \frac{1}{2}(\sin t - t \cos t)$. c) $y(t) = \frac{1}{2}(t^2 e^{-t} + 3e^t - e^{-t})$. d) $y(t) = (3 + t)e^{-2t} \sin t$.

6.20) a) $y = (t - t_0)e^{t_0 - t}$. b) $y = \frac{1}{3}e^{t_0 - t} \sin 3(t - t_0)$. c) $y = \frac{1}{2}[\sinh(t - t_0) - \sin(t - t_0)]$.

Capítulo 7

7.5) $C_{n,m} = 0$ se n ou m são pares e $(16V_0)/(\pi^2 nm)$ se n e m são ímpares.

7.6) Problema semelhante ao exemplo ??3. As condições de contorno são: (i) $V = 0$ se $x = 0$, (ii) $V = 0$ se $x = L_1$, (iii) $V = 0$ se $y = 0$, (iv) $V = 0$ se $y = L_2$, (v) $V = 0$ se $z = 0$, $V = V_0$ se $z = L_3$. Agora impomos soluções oscilatórias em x e y e solução exponencial em z :

$$\begin{aligned} X(x) &= A \sin(kx) + B \cos(kx), & Y(y) &= C \sin(ly) + D \cos(ly), \\ Z(z) &= E \exp\left(z\sqrt{k^2 + l^2}\right) + G \exp\left(-z\sqrt{k^2 + l^2}\right). \end{aligned}$$

As condições de contorno implicam que: (i) em $B = 0$, (ii) em $k = n\pi/L_1$, (iii) $D = 0$, (iv) em $l = m\pi/L_2$, (v) em $E + G = 0$. Logo: $Z(z) = 2E \sinh\left(\frac{\pi z}{L_3} \sqrt{k^2 + l^2}\right)$. Juntando tudo a

solução geral fica:

$$V(\mathbf{r}) = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} C_{n,m} \sin(n\pi x/L_1) \sin(m\pi y/L_2) \sinh\left(\frac{\pi z}{L_3} \sqrt{n^2 + m^2}\right).$$

A última condição de contorno (vi) implica que:

$$V(x, y, z = L_3) = V_0 = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} C_{n,m} \sinh\left(\pi \sqrt{n^2 + m^2}\right) \sin(n\pi x/L_1) \sin(m\pi y/L_2).$$

Usando a Eq. 6.4 temos que:

$$C_{n,m} \sinh\left(\pi \sqrt{n^2 + m^2}\right) = \frac{4V_0}{L_1 L_2} \int_0^{L_1} \int_0^{L_2} \sin(n\pi x/L_1) \sin(m\pi y/L_2) dx dy = \begin{cases} 0 & m, n \text{ pares} \\ \frac{16V_0}{\pi^2 nm} & m, n \text{ ímpares} \end{cases}$$

A solução final fica:

$$V(\mathbf{r}) = \frac{16V_0}{\pi^2} \sum_{n=1,3,5,\dots} \sum_{m=1,3,5,\dots} \sin(n\pi x/L_1) \sin(m\pi y/L_2) \frac{\sinh\left(\frac{\pi z}{L_3} \sqrt{n^2 + m^2}\right)}{nm \sinh\left(\pi \sqrt{n^2 + m^2}\right)}.$$

7.8a) Seja o vértice da caixa na origem e a caixa em si no primeiro octante. As condições de contorno são:

$$\begin{aligned} \Psi(x=0) &= \Psi(y=0) = \Psi(z=0) = 0, \\ \Psi(x=a) &= \Psi(y=b) = \Psi(z=c) = 0. \end{aligned}$$

Fazendo separação de variáveis: $\Psi(\mathbf{r}) = \varphi_1(x)\varphi_2(y)\varphi_3(z)$, escrevendo a energia como $E = E_x + E_y + E_z$ e dividindo tudo por $\Psi = \varphi_1\varphi_2\varphi_3$, a eq. de Schrodinger fica:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{\varphi_1} \frac{d^2\varphi_1}{dx^2} + \frac{1}{\varphi_2} \frac{d^2\varphi_2}{dy^2} + \frac{1}{\varphi_3} \frac{d^2\varphi_3}{dz^2} \right] = E_x + E_y + E_z.$$

Esta equação diferencial parcial corresponde a 3 equações ordinárias:

$$\frac{d^2\varphi_1}{dx^2} = -\varphi_1 k_x^2, \quad \frac{d^2\varphi_2}{dy^2} = -\varphi_2 k_y^2, \quad \frac{d^2\varphi_3}{dz^2} = -\varphi_3 k_z^2.$$

onde:

$$k_x^2 = \frac{2mE_x}{\hbar^2}, \quad k_y^2 = \frac{2mE_y}{\hbar^2}, \quad k_z^2 = \frac{2mE_z}{\hbar^2}. \quad (\text{D.4})$$

As soluções são:

$$\begin{aligned} \varphi_1(x) &= A_1 \cos k_x x + B_1 \sin k_x x, & \varphi_2(y) &= A_2 \cos k_y y + B_2 \sin k_y y, \\ \varphi_3(z) &= A_3 \cos k_z z + B_3 \sin k_z z. \end{aligned}$$

Agora devemos impor as condições de contorno. A condição $\Psi(x=0) = 0$ implica em $\varphi_1(0) = 0 = A_1$. Da mesma forma $\Psi(y=0) = \Psi(z=0) = 0$ implica em $A_2 = A_3 = 0$. Já a

condição $\Psi(x = a) = 0$ implica em $\varphi_1(a) = B_1 \sin k_x a = 0$. Logo $k_x = (n\pi)/a$ com n inteiro. Da mesma forma $\Psi(y = b) = \Psi(z = c) = 0$ implica em $k_y = (m\pi)/b$ e $k_z = (p\pi)/c$. A solução geral fica:

$$\Psi_{n,m,p} = \sum_{n,m,p}^{\infty} B_{n,m,p} \sin \frac{n\pi x}{a} \sin \frac{m\pi y}{b} \sin \frac{p\pi z}{c}. \quad (\text{D.5})$$

Obtemos as energias usando a Eq. D.4:

$$E_x = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m}, \quad E_y = \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m}, \quad E_z = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}.$$

A energia total fica:

$$E_{n,m,p} = E_x + E_y + E_z = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{n^2}{a^2} + \frac{m^2}{b^2} + \frac{p^2}{c^2} \right). \quad (\text{D.6})$$

As soluções são definidas na Eq. D.5 e as energias na Eq. D.6. b) A energia do estado fundamental é a energia mínima do sistema, que corresponde a $n = m = p = 1$:

$$E_{1,1,1} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{1}{a^2} + \frac{1}{b^2} + \frac{1}{c^2} \right).$$

c) A energia do primeiro estado excitado é a segunda menor energia. Porém, esta depende dos valores de a , b e c . Se $a = b = c$ o primeiro estado excitado é triplamente degenerado:

$$E_{2,1,1} = E_{1,2,1} = E_{1,1,2} = \frac{3\hbar^2 \pi^2}{ma^2}.$$

7.9) Usando a fórmula de meio ângulo para seno (Eq. B.5) e as expressões de P_0 e P_1 (Eqs. 4.27) temos que:

$$V_0(\theta) = \frac{k}{2}(1 - \cos \theta) = \frac{k}{2} [P_0(\cos \theta) + P_1(\cos \theta)].$$

Colocando esta expressão na Eq. 7.55 encontramos que $A_0 = k/2$ e $A_1 = -k/(2a)$ e todos os outros A_n são zero. A solução fica então:

$$V(r, \theta) = \frac{k}{2} \left[r^0 P_0(\cos \theta) - \frac{r^1}{a} P_1(\cos \theta) \right] = \frac{k}{2} \left(1 - \frac{r}{a} \cos \theta \right).$$

7.10) O problema segue o mesmo contexto do exemplo 7. 5, tendo novamente como solução geral a Eq. 7.52. Porém agora queremos a solução fora da esfera então devemos eliminar o termo $A_l r^l$ pois este tendo ao infinito para r muito grande. A solução fica então:

$$V(r, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{B_l}{r^{l+1}} P_l(\cos \theta).$$

Na superfície da esfera exigimos que:

$$V(a, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{B_l}{a^{l+1}} P_l(\cos \theta) = V_0(\theta).$$

Para encontrar os coeficientes B_l usamos o mesmo truque novamente: multiplicar por $P_n(\cos \theta)$ e integrar usando as Eqs. 4.38, como feito no exemplo exemplo ??5. O resultado é:

$$B_l = \frac{2l+1}{2} a^{l+1} \int_0^\pi V_0(\theta) P_l(\cos \theta) \sin \theta d\theta.$$

7.15a) A eq. de Schrodinger fica:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \Psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \varphi^2} \right] + V\Psi = E\Psi.$$

Fazendo separação de variáveis $\Psi(\mathbf{r}) = R(r)Y(\theta, \varphi)$, dividindo por Ψ e multiplicando por $-2mr^2/\hbar^2$ temos:

$$\left\{ \frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \frac{2mr^2}{\hbar^2} [V(r) - E] \right\} + \frac{1}{Y} \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{dY}{d\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{d^2 Y}{d\varphi^2} \right\} = 0.$$

Cada termo em chaves depende de uma variável apenas. Fazendo cada um igual a $l(l+1)$:

$$\left\{ \frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \frac{2mr^2}{\hbar^2} [V(r) - E] \right\} = l(l+1), \quad (\text{D.7})$$

$$\frac{1}{Y} \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{dY}{d\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{d^2 Y}{d\varphi^2} \right\} = -l(l+1). \quad (\text{D.8})$$

Como o potencial não depende de r , não há termo angular. Veja que a Eq. D.8 é idêntica a parte angular da Eq. 7.39. Assim, a solução é $Y(\theta, \varphi) = \Theta(\theta)\Phi(\varphi)$ como na Eq. 7.45, que são os harmônicos esféricos.

b) O potencial $V(r)$ afeta apenas a equação radial D.7. Fazendo a substituição $R(r) = u(r)/r$, temos:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dr^2} + \left[V(r) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \right] u = Eu.$$

Usando agora o potencial eletrostático $V(r)$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dr^2} + \left[\frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right] u = Eu.$$

c) O estado fundamental correspondo a $n = 1$ e $l = m = 0$:

$$\Psi_{100} = e^{-r/a} \sqrt{\left(\frac{2}{a}\right)^3 \frac{1}{2}} L_0^1 \left(\frac{2r}{a}\right) Y_0^0(\theta, \varphi) = e^{-r/a} \sqrt{\frac{4}{a^3} \frac{1}{\sqrt{4\pi}}} = \frac{e^{-r/a}}{\sqrt{\pi a^3}},$$

onde usamos $L_0^1(x) = 1$ e $Y_0^0 = 1/\sqrt{4\pi}$ (Eq. 7.48).

O primeiro estado excitado é:

$$\begin{aligned} \Psi_{200} &= e^{-r/2a} \left(\frac{2r}{2a}\right)^0 \sqrt{\left(\frac{2}{2a}\right)^3 \frac{(2-1)!}{4(2!)^3}} L_{2-1}^1 \left(\frac{2r}{2a}\right) Y_0^0 = e^{-r/2a} \sqrt{\frac{1}{2^5 a^3}} L_1^1 \left(\frac{r}{a}\right) Y_0^0, \\ &= e^{-r/2a} \frac{1}{4\sqrt{2}a^3} \left(4 - 2\frac{r}{a}\right) \frac{1}{\sqrt{4\pi}} = \frac{e^{-r/2a}}{4\sqrt{2\pi}a^3} \left(2 - \frac{r}{a}\right), \end{aligned} \quad (\text{D.9})$$

onde usamos $L_1^1(x) = 4 - 2x$.

7.17) A normalização exige que a integral do quadrado da função seja 1 em todo o espaço. Os harmônicos esféricos são já normalizados (veja seção 7.4.1). Resta então que a parte radial também tem de ser normalizada:

$$\int |R(r)|^2 r^2 dr = 1.$$

Usando a solução da Eq. 7.69 nesta expressão, temos:

$$A^2 \int_0^a |j_l(\kappa_{1nl}r)|^2 r^2 dr + C^2 \int_a^L |k_l(\kappa_{2nl}r)|^2 r^2 dr = 1 \quad (\text{D.10})$$

Repare que a segunda integral é feita de a até L . Teoricamente $L \rightarrow \infty$, porém computacionalmente isso é inviável. Assim deve-se escolher um $L \gg a$ grande o suficiente de forma que essa integral não dependa de L . Escrevemos as constantes como:

$$A^2 = \frac{A_l^2}{a^3}, \quad C^2 = \frac{C_l^2}{a^3}$$

onde l é o estado para o qual está sendo resolvido e fazemos também a transformação de coordenadas $r = au$. Veja que agora u e as constantes A_l, C_l são adimensionais. Assim, após algumas manipulações, a Eq. (D.10) recai na Eq. 7.73.

Bibliografia

- [1] P. J. Nahin, *Inside Interesting Integrals*, Springer (2015).