
Folhas de problemas de Física computacional

Problemas seleccionados e traduzidos do livro

Computational Physics

Mark Newman

Ano lectivo 2018/2019

Docentes:

João Manuel Viana Parente Lopes

José Miguel Nunes da Silva

João Manuel Borregana Lopes dos Santos

Física Computacional

Ano lectivo 2017/2018

Folha 1 - Programação em Python para Físicos

1. Exercício

A órbita espacial de um corpo em torno de outro, como um planeta em torno do Sol, não é necessariamente circular. Em geral assume a forma de uma elipse, com o corpo por vezes mais próximo e por vezes mais afastado. Se na máxima aproximação de um planeta ao Sol, também chamado de *periélio*, a distância é ℓ_1 e sua velocidade linear v_1 , então qualquer outra propriedade da órbita pode ser calculado a partir destes dois valores como se segue.

1. A segunda lei de Kepler diz-nos que a distância ℓ_2 e a velocidade v_2 do planeta no ponto de máximo afastamento, o *afélio*, satisfaz $\ell_2 v_2 = \ell_1 v_1$. Também é sabido que a energia mecânica total, cinética mais potencial gravítica, do planeta com velocidade v a uma distância r do Sol é dada por

$$E = \frac{1}{2}mv^2 - G\frac{mM}{r},$$

onde m é a massa do planeta, $M = 1.9891 \times 10^{30}$ kg a massa do Sol, e $G = 6.6738 \times 10^{-11} \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1} \text{ s}^{-2}$ a constante de gravitação universal. Dado que a energia mecânica deve ser conservada, mostre que v_2 é a menor das raízes da equação quadrática

$$v_2^2 - \frac{2GM}{v_1 \ell_1} v_2 - \left[v_1^2 - \frac{2GM}{\ell_1} \right] = 0.$$

Uma vez obtido o valor de v_2 podemos calcular ℓ_2 usando a relação $\ell_2 = \ell_1 v_1 / v_2$.

2. Conhecidos os valores de v_1 , ℓ_1 , e ℓ_2 , outros parâmetros da órbita são dados por expressões simples obtíveis da geometria elíptica da órbita e das leis de Kepler:

$$\begin{aligned} \text{Semi-eixo maior:} \quad a &= \frac{1}{2}(\ell_1 + \ell_2), \\ \text{Semi-eixo menor:} \quad b &= \sqrt{\ell_1 \ell_2}, \\ \text{Período orbital:} \quad T &= \frac{2\pi ab}{\ell_1 v_1}, \\ \text{Excentricidade orbital:} \quad e &= \frac{\ell_2 - \ell_1}{\ell_2 + \ell_1}. \end{aligned}$$

Desenvolva um programa que peça ao utilizador a distância do planeta ao Sol e a sua velocidade no periélio e, depois, calcule e mostre os valores das quantidades ℓ_2 , v_2 , T , e e .

3. Teste o programa fazendo o cálculo das propriedades orbitais da Terra (para a qual $\ell_1 = 1.4710 \times 10^{11}$ m e $v_1 = 3.0287 \times 10^4 \text{ m s}^{-1}$) e do cometa Halley ($\ell_1 = 8.7830 \times 10^{10}$ m e $v_1 = 5.4529 \times 10^4 \text{ m s}^{-1}$). Entre outras coisas, deve obter para a Terra um período orbital de um ano, e de 76 anos para o cometa Halley.

2. Exercício

Os números de Catalan C_n são uma sequência de inteiros 1, 1, 2, 5, 14, 42, 132... com um papel importante em Mecânica Quântica e na Teoria dos Sistemas Desordenados. (Estão na base da demonstração por Eugene Wigner da famosa 'Lei do Semicírculo'.) Estes números podem ser definidos por recorrência:

$$C_0 = 1, \quad C_{n+1} = \frac{4n+2}{n+2} C_n.$$

Desenvolva um programa que mostre, por ordem crescente, todos os números de Catalan até um milhar de milhão.

3. Exercício

Em Física da Matéria Condensada a constante de Madelung representa a energia potencial elétrica total de um ião na rede cristalina. Ela depende das cargas dos outros iões vizinhos e das suas localizações. Considere, por exemplo, o caso do Cloreto de Sódio (sal das cozinhas) onde os iões estão dispostos alternadamente numa rede cúbica simples: o de sódio com uma carga positiva $+e$ e o de cloro com uma carga negativa $-e$, onde e é a carga do elétron. Se etiquetarmos cada nodo da rede por três números inteiros (i, j, k) , então os iões sódio ficam nas posições onde $i + j + k$ é par, e os iões cloro nas posições onde $i + j + k$ é ímpar.

Consideremos o ião sódio situado na origem, $i = j = k = 0$, e calculemos a constante de Madelung. Se o espaçamento entre os iões for a (constante da rede), então a distância da origem ao ião na posição (i, j, k) é

$$\sqrt{(ia)^2 + (ja)^2 + (ka)^2} = a\sqrt{i^2 + j^2 + k^2},$$

e o potencial na origem criado por esse ião é

$$V(i, j, k) = \pm \frac{e}{4\pi\epsilon_0 a \sqrt{i^2 + j^2 + k^2}},$$

(ϵ_0 é a permissividade do vácuo e o sinal da expressão depende de $i + j + k$ ser par ou ímpar). O potencial total na origem V_{total} é então a soma sobre todas as restantes posições. Supondo um cristal de formato cúbico, e centrado na origem, com L iões em todas as direções, vem

$$V_{\text{total}} = \sum_{\substack{i, j, k = -L \\ \text{not } i=j=k=0}}^L V(i, j, k) = \frac{e}{4\pi\epsilon_0 a} M,$$

onde M é (no limite $L \rightarrow \infty$) a constante de Madelung.

Desenvolva um programa que calcule a constante de Madelung do Cloreto de Sódio. Use um valor suficientemente grande para L mas que lhe permita correr o programa num tempo não superior a um minuto. Compare com o valor exato para o NaCl: $-1,748$.

4. Exercício

O coeficiente binomial $\binom{n}{k}$ é um número inteiro igual a

$$\binom{n}{k} = \frac{n!}{k!(n-k)!} = \frac{n \times (n-1) \times (n-2) \times \dots \times (n-k+1)}{1 \times 2 \times \dots \times k}$$

com $k \geq 1$, ou $\binom{n}{0} = 1$ quando $k = 0$.

1. Usando este formulário para o coeficiente binomial, escreva uma função *binomial*(n, k) que calcula o coeficiente binomial para n e k . Certifique-se de que sua função retorna a resposta na forma de

um inteiro (não um float) e forneça o valor correto de 1 para o caso em que $k = 0$.

2. Usando sua função, escreva um programa para imprimir as primeiras 20 linhas do “triângulo de Pascal”. A linha n do triângulo de Pascal contém $n + 1$ números, que correspondem aos coeficientes $\binom{n}{0}$, $\binom{n}{1}$, até $\binom{n}{n}$. As primeiras linhas são,

1 1
1 2 1
1 3 3 1
1 4 6 4 1

3. A probabilidade de uma moeda justa, lançada n vezes, apresenta k resultados de caras é $\binom{n}{k}/2^n$. Escreva um programa que calcula (a) A probabilidade de uma moeda ser lançada 100 vezes e ter como resultado 60 caras, e (b) a probabilidade de ter como resultado pelo menos 60 caras.

5. Exercício

O programa no Exemplo 2.8 do livro adotado não corresponde ao modo mais eficiente de calcular números primos: verifica cada número para ver se é divisível por qualquer número menor que ele. Podemos desenvolver um programa muito mais rápido para números primos usando as seguintes observações:

1. Um número n é primo se não tiver nenhum fator primo menor que n . Por isso, só precisamos verificar se é divisível por outros primos.
2. Se um número n é não primo, tendo um fator r , então $n = rs$, onde s também é um fator. Se $r \geq \sqrt{n}$ então $n = rs \geq s\sqrt{n}$, o que implica que $s \leq \sqrt{n}$. Em outras palavras, qualquer não-primo deve ter fatores e, portanto, também fatores primos, menores ou iguais a \sqrt{n} . Assim, para determinar se um número é primo, temos que verificar seus fatores primos apenas até e incluindo \sqrt{n} - se não houver nenhum, o número é primo.
3. Se encontrarmos um único fator primo menor que \sqrt{n} , então sabemos que o número não é primo e, portanto, não há necessidade de verificar mais nada - podemos abandonar esse número e passar para outra coisa..

Escreva um programa Python que encontre todos os primos até dez mil. Crie uma lista para armazenar os primos, contém inicialmente apenas um elemento, o número primo 2. Então, para cada número n de 3 a 10 000, verifique se o número é divisível por qualquer um dos primos da lista, até e incluindo \sqrt{n} . Assim que encontrar um único fator primo, poderá parar de verificar os restantes - sabe que n não é um primo. Se não encontrar fatores primos \sqrt{n} ou menos, então n é primo e você deve adicioná-lo à lista. Pode imprimir a lista de uma só vez no final do programa, ou pode imprimir os números individuais à medida que os encontrar.

6. Exercício

Um recurso útil de funções definidas pelo utilizador é a capacidade de uma função se chamar recursivamente. Por exemplo, considere a seguinte definição do fatorial $n!$ de um inteiro positivo n :

$$n! = \begin{cases} 1 & \text{se } n = 1, \\ n \times (n - 1)! & \text{se } n > 1. \end{cases}$$

Isto constitui uma definição completa do fatorial que nos permite calcular o valor de $n!$ para qualquer inteiro positivo. Podemos empregar essa definição diretamente para criar uma função Python para fatoriais, como este:

```
def factorial(n):
    if n==1:
        return 1
    else:
        return n*factorial(n-1)
```

Note como, se n não for igual a 1, a função chama a si própria para calcular o fatorial de $n - 1$. A este procedimento chamamos recursão. Se executarmos `factorial(5)` o computador irá imprimir corretamente a resposta 120.

1. Encontramos os números de Catalan C_n no Exercício 2. Com apenas um pequeno rearranjo, a definição pode ser reescrita na forma

$$C_n = \begin{cases} 1 & \text{se } n = 0, \\ \frac{4n-2}{n+1} C_{n-1} & \text{se } n > 0. \end{cases}$$

Escreva uma função Python, usando recursão, que calcule C_n . Use essa função para calcular e imprimir C_{100} .

2. Euclides mostrou que o maior divisor comum $g(m, n)$ de dois inteiros não negativos m e n satisfaz

$$g(m, n) = \begin{cases} m & \text{if } n = 0, \\ g(n, m \bmod n) & \text{if } n > 0. \end{cases}$$

Escreva uma função Python que empregue recursão para calcular o maior divisor comum de m e n usando essa fórmula. Use sua função para calcular e imprimir o maior divisor comum de 108 e 192.

Comparando o cálculo dos números de Catalan na parte (a) acima com o do Exercício 2, vemos que é possível fazer o cálculo de duas maneiras, diretamente ou usando recursão. Na maioria dos casos, se uma quantidade puder ser calculada sem recursão, será mais rápido fazer isso, e normalmente recomendamos que siga essa rota, se possível. Existem alguns cálculos, no entanto, que são essencialmente impossíveis (ou pelo menos muito mais difíceis) sem recursividade. Veremos alguns exemplos mais adiante no livro.

Física Computacional

Ano lectivo 2017/2018

Folha 2 - Representação gráfica de dados experimentais

1. Exercício

Nos recursos on-line do livro adotado existe um ficheiro de nome `sunspots.txt` que contém o número de manchas solares observadas em cada mês desde Janeiro de 1749. Este ficheiro tem duas colunas de números em que a primeira refere o mês e a segunda refere o número de manchas solares.

1. Desenvolva um programa que leia esses dados e trace um gráfico do número de manchas solares em função do tempo.
2. Modifique o programa para que mostre apenas os primeiros 1000 pontos do gráfico.
3. Adapte esse programa de forma a que também calcule e represente num gráfico as médias móveis definidas por

$$Y_k = \frac{1}{2r+1} \sum_{m=-r}^r y_{k+m},$$

onde $r = 5$ (e os y_k são os números de manchas solares). Trace no mesmo gráfico os dados originais e as médias móveis, limitando a representação aos primeiros 1000 pontos.

2. Exercício

Embora a função `plot` seja primeiramente entendida para a construção de gráficos y em função de x , também pode ser adaptada a outros tipos de gráficos.

1. Obtenha um gráfico da curva conhecida por *deltoide* e que é definida parametricamente pelas equações

$$x = 2 \cos \theta + \cos 2\theta, \quad y = 2 \sin \theta - \sin 2\theta,$$

onde $0 \leq \theta < 2\pi$. Considere um conjunto de valores para θ entre zero e 2π , calcule os correspondentes x e y para cada das equações anteriores e, então, represente y como função de x .

2. Indo mais além, faça uma representação polar $r = f(\theta)$, com uma função f adequada, de forma a obter a conhecida lei de transformação de coordenadas cartesianas para coordenadas polares: $x = r \cos \theta$, $y = r \sin \theta$. Use este método para obter o gráfico da Espiral Galileana $r = \theta^2$ for $0 \leq \theta \leq 10\pi$.

3. Usando esse mesmo método, obtenha o gráfico da 'função de Fey'

$$r = e^{\cos \theta} - 2 \cos 4\theta + \sin^5 \frac{\theta}{12}$$

no intervalo $0 \leq \theta \leq 24\pi$.

3. Exercício

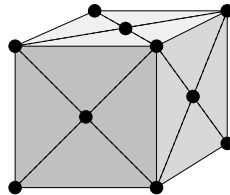
Nos recursos on-line do livro adotado existe um ficheiro de nome `stm.txt`, que contém uma grelha de valores medidos num microscópio de efeito-túnel da superfície (111) do silício. Estes valores representam as alturas na referida superfície. Desenvolva um programa que leia esses dados e depois trace um gráfico de densidades. Estude as melhores opções e variantes de forma a melhor representar a estrutura dessa superfície do silício.

4. Exercício

Usando como ponto de partida o programa do Exemplo 3.2 do livro adoptado, ou se preferir começando do início, faça o seguinte:

1. Um cristal de cloreto de sódio tem átomos de sódio e cloro dispostos em uma rede cúbica, mas os átomos alternam entre o sódio e o cloro, de modo que cada átomo sódio é cercado por seis átomos de cloro e cada átomo cloro é cercado por seis átomos de sódio. Crie uma visualização da estrutura de cloreto de sódio usando duas cores diferentes para representar os dois tipos de átomos.

2. A rede cúbica de face centrada (FCC), que é a rede cristalina mais comum na natureza, consiste de uma estrutura cúbica com átomos posicionados não apenas nos cantos de cada cubo, mas também no centro de cada face:



Faça uma visualização de uma rede do FCC com uma única espécie de átomo (como ocorre no ferro metálico, por exemplo).

5. Exercício

Os seis planetas mais profundos do nosso sistema solar giram em torno do Sol em órbitas aproximadamente circulares, todas localizadas aproximadamente no mesmo plano (elíptico). No seguinte quadro podemos observar os seus parâmetros:

Objecto	Raio (km)	Raio da órbita (milhões de km)	Período da órbita (dias)
Mercúrio	2440	57.9	88.0
Vénus	6052	108.2	224.7
Terra	6371	149.6	365.3
Marte	3386	227.9	687.0
Júpiter	69173	778.5	4331.6
Saturno	57316	1433.4	10759.2
Sol	695500	–	–

Usando as facilidades fornecidas pelo módulo *visual*, crie uma animação do sistema solar que mostre o seguinte:

1. O Sol e planetas como esferas nas suas posições apropriadas e com tamanhos proporcionais aos seus tamanhos reais. Como os raios dos planetas são minúsculos em comparação com as distâncias entre eles, represente os planetas por esferas com raios c_1 vezes maiores que seus valores originais, para que possam ser visualmente distinguida a diferença de raios. Encontre um bom valor para c_1 que torne os planetas visíveis. Também é necessário encontrar um bom raio para o sol. Escolha

qualquer valor que forneça uma visualização clara. Não funciona para reescalar o raio do Sol pelo mesmo fator dos planetas porque ficará muito grande. Para um realismo adicional, atribua cores diferentes às esferas. Por exemplo, a Terra pode ser azul e o Sol pode ser amarelo.

2. O movimento dos planetas em torno do Sol (fazendo as esferas dos planetas moverem-se). No interesse de aliviar o tédio, construa seu programa para que o tempo de animação seja um fator de c_2 mais rápido que o tempo real. Encontre um bom valor de c_2 que torne o movimento das órbitas facilmente visível, mas não excessivamente rápido. Faça uso da função *rate* para a animação funcionar sem problemas.

Sugestão: Pode ser útil armazenar as coordenadas das esferas numa matriz do tipo descrito na página 115 do livro adotado.

6. Exercício

Um dos exemplos mais famosos de caos é o *mapa logístico*, definido pela equação

$$x' = rx(1 - x)$$

Para um dado valor da constante r , escolhemos um valor de x - digamos $x = 1/2$ - e avaliamos o lado direito equação para calcular x' . Fazendo $x = x'$ recalculamos o lado direito, e obtemos um novo valor x' e assim por diante. Este é um *mapa iterativo*. Fazendo a mesma operação repetidamente, acontece uma de três coisas a x :

1. O valor de x deixa de variar (ponto fixo). Por exemplo, $x = 0$ é sempre um ponto fixo do mapa logístico (colocando $x = 0$ no lado direito e obtemos $x' = 0$ à esquerda).
2. O valor de x não converge para um valor único, mas estabelece um padrão periódico, percorrendo periodicamente um conjunto de valores (ciclo limite).
3. O mapa gera uma sequência aparentemente aleatória de números que parecem não ter nenhum padrão. Este é o caos determinista. *Caos* porque parece *caótico* e *determinista* porque, embora os valores pareçam aleatórios, não o são. São totalmente previsíveis, porque são gerados por uma equação a partir de uma condição inicial. O comportamento é determinado, embora possa não o parecer.

Escreva um programa que calcule e exiba o comportamento do mapa logístico. Para um determinado valor de r , comece com $x = 1/2$ e itere a equação do mapa logístico mil vezes. Esta iteração inicial permite chegar a um ponto fixo ou ciclo limite. De seguida, execute por mais de 1.000 iterações e represente os pontos (r, x) num gráfico com r no eixo horizontal e y no eixo vertical (pode usar a função *plot* com as opções “*ko*” ou “*k.*” para representar pontos ou a função *scatter*). Repita o cálculo para diferentes valores de r de 1 a 4 em passos de 0,01, representando os pontos para todos os valores de r na mesma figura e, finalmente, usando a função *show* uma vez para exibir a figura completa.

O seu programa deve gerar um gráfico muito típico que se parece com uma árvore inclinada para o lado. Esta famosa figura é chamada de *Feigenbaum plot*, depois da sua descoberta por Mitchell Feigenbaum, ou às vezes por *figtree plot*, uma alusão ao fato às semelhanças com uma árvore e ao facto que Feigenbaum significar *figueira* em alemão.

Responda às seguintes perguntas:

1. Para um dado valor de r , como seria um ponto fixo no gráfico de Feigenbaum? E um ciclo limite? E como seria o caos?
2. Com base no gráfico que obteve, em que valor de r o sistema move-se de um comportamento ordenado (pontos fixos ou ciclos de limite) para um comportamento caótico? Este ponto é às vezes chamado de *fronteira do caos*.

O mapa logístico é um sistema matemático muito simples, mas o caos determinístico é observado em muitos sistemas físicos mais complexos, incluindo a dinâmica de fluidos e o clima. Por causa de sua natureza aparentemente aleatória, o comportamento de sistemas caóticos é difícil de prever e é fortemente afetado por pequenas perturbações nas condições externas. Provavelmente já ouviu falar do exemplo clássico do caos na meteorologia, o *efeito borboleta*, que foi popularizado pelo físico Edward Lorenz em 1972, numa palestra dada na *Associação Americana para o Avanço da Ciência*, intitulada “*O bater de asas de uma borboleta no Brasil desencadeou um tornado no Texas?*” (embora a primeira pessoa a sugerir o efeito borboleta não fosse um físico, mas o escritor de ficção científica Ray Bradbury no seu famoso conto de 1952, *A Sound of Thunder*, em que a destruição descuidada de uma borboleta pelo viajante do tempo durante uma viagem turística à era jurássica muda o curso da história).

Comentário: Existe outra abordagem para calcular o gráfico Feigenbaum, que é mais puro e rápido, fazendo uso da capacidade do Python de realizar aritmética com arrays. Crie um array r com um elemento contendo cada valor distinto de r que quer investigar: $[1.0, 1.01, 1.02, \dots]$. Em seguida, crie outra matriz x do mesmo tamanho para manter os valores correspondentes de x , que devem ser inicialmente definidos como 0, 5. Numa iteração do mapa logístico podemos executar para todos os valores de r de uma só vez com uma declaração da forma $x = r * x * (1 - x)$. Devido à velocidade com a qual o Python pode executar cálculos em matrizes, esse método deve ser significativamente mais rápido do que o método mais básico acima.

7. Exercício

O conjunto de Mandelbrot, batizado com o nome do matemático francês Benoît Mandelbrot, é um fractal, um objeto matemático infinitamente ramificado que contém estrutura dentro da estrutura e dentro da estrutura, tão fundo quanto observemos. A definição do conjunto Mandelbrot pode ser feita através de números complexos.

Considere a equação

$$z' = z^2 + c,$$

onde z é um número complexo e c é uma constante complexa. Para qualquer valor dado de c , esta equação transforma um número de entrada z num número de saída z' . A definição do conjunto Mandelbrot envolve a iteração repetida dessa equação: a partir de um valor inicial inicial de z , calculamos a equação para obter um novo valor z' . Com esse novo valor o fornecemos novamente para obter outro valor, e assim por diante. O conjunto Mandelbrot é o conjunto de pontos no plano complexo que satisfaz a seguinte definição:

Para um dado valor complexo de c , comece com $z = 0$ e repita o procedimento iterativo.

Se a magnitude $|z|$ do valor resultante alguma vez for maior que 2, então o ponto no plano complexo na posição c não está no conjunto Mandelbrot, caso contrário, ele está no conjunto.

Para usar essa definição, seria necessário, em princípio, iterar infinitas vezes para provar que um ponto está no conjunto Mandelbrot, já que um ponto está no conjunto apenas se a iteração *nunca* passar $|z| = 2$. Na prática, no entanto, apenas executamos um grande número de iterações, digamos 100, e se $|z|$ não excedeu 2, assumimos que não o fará. Escreva um programa para fazer uma imagem do conjunto Mandelbrot executando a iteração para todos os valores de $c = x + iy$ numa grelha $N \times N$ abrangendo a região onde $-2 \leq x \leq 2$ e $-2 \leq y \leq 2$. Faça um gráfico de densidade em que os pontos da grelha dentro do conjunto de Mandelbrot são coloridos em preto e os de fora são coloridos em branco. O conjunto Mandelbrot tem uma forma muito distinta que se parece com um escaravelho com um focinho comprido - saberá quando o vir.

Sugestão: Provavelmente achará útil começar com uma grelha bastante grossa, ou seja, com um pequeno valor de N - talvez $N = 100$ - para que seu programa seja executado rapidamente enquanto testa. Quando tiver certeza de que está funcionando corretamente, aumente o valor de N para produzir uma imagem final de alta qualidade da forma do conjunto.

Se estiver entusiasmado, pode fazer outra variante do mesmo exercício que produz imagens incríveis. Em vez de pontos de cor apenas preto ou branco, atribua a cor de acordo com o número de iterações da equação antes de $|z|$ se tornar maior que 2 (ou o número máximo de iterações se $|z|$ nunca se tornar maior que 2). Se usar um dos esquemas de cores que o Python fornece para gráficos de densidade, como os esquemas *“hot”* ou *“jet”*, pode fazer algumas imagens espetaculares. Outra variante interessante é colorir de acordo com o logaritmo do número de iterações, o que ajuda a revelar algumas das estruturas mais finas fora do conjunto.

Física Computacional

Ano lectivo 2017/2018

Folha 3 - Exactidão e velocidade

1. Exercício

Escreva um programa para calcular e imprimir o fatorial de um número digitado pelo utilizador. Se quiser, pode basear seu programa na função para fatorial na Seção 2.6, mas escreva seu programa para que calcule o fatorial usando variáveis inteiras, não variáveis de ponto flutuante. Use seu programa para calcular o fatorial de 200.

Modifique seu programa para usar variáveis de ponto flutuante e, novamente, calcule o fatorial de 200? Discuta o resultado.

2. Exercício

1. Escreva um programa que tome como dados três números, a , b e c , e imprima as duas soluções na equação quadrática $ax^2 + bx + c = 0$ usando a fórmula resolvente,

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

Use seu programa para calcular as soluções de $0.001x^2 + 1000x + 0.001 = 0$.

2. Existe outra maneira de escrever as soluções para uma equação quadrática. Multiplicando a parte superior e inferior da solução acima por $-b \mp \sqrt{b^2 - 4ac}$, mostre que as soluções também podem ser escritas como

$$x = \frac{2c}{-b \mp \sqrt{b^2 - 4ac}}.$$

Adicione código ao seu programa para imprimir esses valores além dos anteriores e use novamente o programa para resolver $0.001x^2 + 1000x + 0.001 = 0$. O que vê? Como o explica ?

3. Usando o que aprendeu, escreva um novo programa que calcule ambas as raízes de uma equação quadrática com precisão em todos os casos.

Este é um bom exemplo de como os computadores nem sempre funcionam como se espera. Se aplicar simplesmente a fórmula padrão para a equação quadrática, pode receber uma resposta errada. Na prática, o método que elaborou aqui é a maneira correta de resolver uma equação quadrática num computador, mesmo que seja mais complicado do que a fórmula padrão. Se estivesse em escrever um programa que envolvesse a solução de muitas equações quadráticas, este método poderia ser um bom candidato para definir função: poderia colocar os detalhes do método dentro de uma função para evitar o problema de passar passo a passo todas as vezes que tiver uma nova equação para resolver.

3. Exercício

Suponha que temos função $f(x)$ e queremos calcular sua derivada num ponto x . Podemos fazer isso com lápis e papel, se soubermos a forma matemática da função, ou podemos fazê-lo no computador, fazendo uso da definição da derivada:

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

No computador, não podemos realmente tomar o limite, pois δ vai para zero, mas podemos obter uma aproximação razoável apenas fazendo δ pequeno.

1. Escreva um programa que defina uma função $f(x)$ que devolve o valor $x(x-1)$, calcula a derivada da função no ponto $x = 1$ usando a fórmula acima com $\delta = 10^{-2}$. Calcule o valor real da mesma derivada analiticamente e compare com a resposta do seu programa. Os dois não concordarão perfeitamente. Por que não?
2. Repita o cálculo para $\delta = 10^{-4}, 10^{-6}, 10^{-8}, 10^{-10}, 10^{-12}$, e 10^{-14} . Verá que a precisão do cálculo inicialmente melhora à medida que o delta diminui, mas piora novamente. Porquê?

Vamos examinar derivadas numéricas em mais detalhe na Seção 5.10, onde estudaremos técnicas para lidar com esses problemas e maximizar a precisão de nossos cálculos.

4. Exercício

Cálculo de integrais

Suponha que queremos calcular o valor do integral

$$I = \int_{-1}^1 \sqrt{1-x^2} dx.$$

o gráfico da função integranda é um semicírculo de raio um: e, portanto, o valor do integral—a área sob a curva—deve ser $\pi/2 = 1.57079632679\dots$

Alternativamente, podemos avaliar o integral no computador dividindo o domínio de integração em um grande número N de fatias de largura $h = 2/N$ cada, e usando a definição de Riemann da integral:

$$I = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{k=1}^N h y_k,$$

em que

$$y_k = \sqrt{1-x_k^2} \quad \text{and} \quad x_k = -1 + hk.$$

Na prática, não podemos tomar o limite $N \rightarrow \infty$, mas podemos fazer uma aproximação razoável tornando N grande.

1. Escreva um programa para avaliar a integral acima com $N = 100$ e compare o resultado com o valor exato. Os dois não concordarão muito bem, porque $N = 100$ não é um número suficientemente grande de fatias.
2. Aumente o valor de N para obter um valor mais preciso para o integral. Se precisar que o programa seja executado em cerca de um segundo ou menos, qual a precisão que consegue?

O cálculo de integrais é uma tarefa comum em física computacional. Estudaremos técnicas para fazer integrais em detalhe no próximo capítulo. Como veremos, existem métodos substancialmente mais rápidos e precisos do que o que usamos aqui.

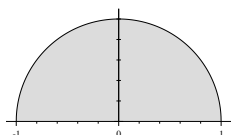


Figura 3.1:

Física Computacional

Ano lectivo 2017/2018

Folha 4 - Integrais e derivadas

1. Exercício

Nos recursos on-line encontra um ficheiro com o nome `velocities.txt` que contém duas colunas de números, a primeira representando o tempo t em segundos e a segunda a velocidade x em metros por segundo de uma partícula, medida uma vez por segundo desde o tempo $t = 0$ até $t = 100$. As primeiras linhas têm o aspecto:

```
0 0
1 0.069478
2 0.137694
3 0.204332
4 0.269083
5 0.331656
```

Escreva um programa para fazer o seguinte:

1. Ler os dados e, usando a regra trapezoidal, calcular a distância aproximada percorrida pela partícula na direção x em função do tempo. Veja a Seção 2.4.3 na página 57 se quiser recordar como ler dados de um arquivo.
2. Fazer um gráfico que mostre, na mesma janela, a curva de velocidade original e a distância percorrida em função do tempo.

2. Exercício

1. Escreva um programa para calcular um valor aproximado para o integral $\int_0^2 (x^4 - 2x + 1)dx$ do Exemplo 5.1, mas usando a regra de Simpson com 10 intervalos, em vez da regra trapezoidal. Pode querer basear seu programa no programa de regras trapezoidais na página 142.
2. Execute o programa e compare seu resultado com o valor correto conhecido de 4.4. Qual é o erro fraccionário no seu cálculo?
3. Modifique o programa para usar uma centena de intervalos, e depois mil. Observe a melhoria no resultado. Como se comparam os resultados aos do Exemplo 5.1 para a regra trapezoidal com o mesmo número de intervalos?

3. Exercício

Considere o integral

$$E(x) = \int_0^x e^{-t^2} dt.$$

1. Escreva um programa para calcular $E(x)$ para valores de x de 0 a 3 em passos de 0.1. Escolha o método que você usará para executar a integral e um número adequado de intervalos.
2. Quando estiver convencido de que seu programa está a funcionar, complete-o para fazer um gráfico de $E(x)$ como uma função de x . Se quiser lembrar-se de como fazer um gráfico, consulte a Seção 3.1, na página 88.

4. Exercício

Limite de difração de um telescópio

Nossa capacidade para resolver detalhes em observações astronômicas é limitada pela difração de luz nos telescópios. A luz das estrelas pode ser tratada efetivamente como proveniente de uma fonte pontual no infinito. Quando essa luz, com comprimento de onda λ , passa pela abertura circular de um telescópio (que assumimos ter raio unitário) e é focada pelo telescópio no plano focal, não produz um único ponto, mas um padrão circular de difração, consistindo num ponto central rodeado por uma série de anéis concêntricos. A intensidade da luz neste padrão de difração é dada por

$$I(r) = \left(\frac{J_1(kr)}{kr} \right)^2,$$

onde r é a distância no plano focal do centro do padrão de difração, $k = 2\pi/\lambda$, e $J_1(x)$ é uma função de Bessel. As funções de Bessel, $J_m(x)$, são dadas por

$$J_m(x) = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \cos(m\theta - x \sin \theta) d\theta,$$

onde m é um inteiro não negativo e $x \geq 0$.

1. Escreva uma função Python $J(m, x)$ que calcule o valor de $J_m(x)$ usando a regra de Simpson com $N = 1000$ pontos. Use a sua função num programa para fazer um gráfico, numa única janela, das funções de Bessel J_0, J_1 e J_2 como um funções de x , de $x = 0$ a $x = 20$.
2. Escreva um segundo programa que faça um gráfico de densidade da intensidade do padrão de difração circular de uma fonte de luz pontual com $\lambda = 500$ nm, num quadrado do plano focal, usando a fórmula dada acima. A sua imagem deve cobrir valores de r de zero a cerca de $1 \mu m$.

Sugestão 1: Você pode achar útil saber que $\lim_{x \rightarrow 0} J_1(x)/x = 1/2$. Sugestão 2: O ponto central no padrão de difração é tão brilhante que pode ser difícil ver os anéis ao seu redor no ecrã do computador. Se se deparar com este problema, uma maneira simples de lidar com ele é usar um dos outros esquemas de cores para gráficos de densidade descritos na Seção 3.3. O esquema `hot` funciona bem. Para uma solução mais sofisticada do problema, o `imshow` tem um argumento adicional `vmax` que permite definir o valor que corresponde ao ponto mais claro da gráfico. Por exemplo, se disser `imshow(x, vmax = 0.1)`, os elementos com valor 0,1, ou qualquer valor maior, produzirão a cor mais brilhante (mais positiva) na tela. Baixando `vmax`, pode reduzir o intervalo total de valores entre o brilho mínimo e máximo e, portanto, aumentar a sensibilidade do gráfico, tornando detalhes subtis visíveis. (Há também um argumento `vmin` que pode ser usado para definir o valor que corresponde à cor mais escura (mais negativa).) Para este exercício, um valor `vmax = 0.01` parece funcionar bem.

5. Exercício

Erro na regra de Simpson

Seguindo o mesmo argumento que levou à Eq. (5.28), mostre que o erro num integral usando a regra de Simpson é dado, na ordem dominante em h , por Eq. (5.29).

6. Exercício

Escreva um programa, ou modifique um programa já feito, para mais uma vez calcular o valor do integral $\int_0^2 (x^4 - 2x + 1) dx$ do Exemplo (5.28), usando a regra do trapézio com 20 intervalos, mas desta vez o programa deve escrever a estimativa do erro do resultado, calculado através do método da Eq. (5.28). Para isto precisa de efectuar o integral duas vezes, uma com $N_1 = 10$ intervalos e novamente com $N_2 = 20$. Através da Eq. (5.28) obtemos o erro. Como se compara o erro calculado deste modo com o cálculo directo do erro como a diferença entre o valor do integral e o valor exacto de 4.4? Porque é que não têm um acordo perfeito?

7. Exercício

Considere o integral

$$I = \int_0^1 \sin^2 \sqrt{100x} dx$$

1. Escreva um programa que use o método de regra trapezoidal adaptativa da Seção 5.3 e Eq. (5.34) para calcular o valor deste integral com uma precisão aproximada de $\epsilon = 10^{-6}$ (isto é, correcto até seis dígitos após o ponto decimal). Comece com um único intervalo de integração e aumente a partir daí para dois, quatro, oito e assim por diante. Peça ao seu programa para imprimir o número de intervalos, a sua estimativa do integral e a sua estimativa do erro no integral, para cada valor do número de intervalos N , até que a precisão desejada seja atingida. (Dica: deverá encontrar o resultado em torno de $I = 0,45$)
2. Agora modifique seu programa para avaliar o mesmo integral usando a técnica de integração Romberg descrita nesta seção. Peça ao seu programa para imprimir uma tabela triangular de valores, como na página 161, de todas as estimativas de Romberg do integral. Calcule o erro em suas estimativas usando Eq. (5.49) e continue novamente o cálculo até chegar a uma precisão de $\epsilon = 10^{-6}$. Deverá descobrir que o método Romberg atinge a precisão requerida consideravelmente mais rápido que a regra trapezoidal por si só.

8. Exercício

Aplicação do método adaptativo de Romberg

Escreva um programa que use o método adaptativo da regra de Simpson apresentados na secção 5.3 e Eqs. (5.35) a (5.39) para calcular o mesmo integral do último problema da folha anterior, novamente para uma precisão aproximada de $\epsilon = 10^{-6}$. Desta vez, comece com dois intervalos de integração, e em seguida com quatro, oito e assim por diante. Mostre os resultados em cada etapa até que a precisão necessária seja atingida. Deve obter que alcança essa precisão para um número significativamente menor de intervalos do que com o a regra trapezoidal, mas com um número um pouco maior do que com a integração de Romberg.

9. Exercício

Capacidade calorífica de um sólido

A teoria de sólidos de Debye dá a capacidade calorífica de um sólido à temperatura T como um integral

$$C_V = 9V\rho k_B \left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3 \int_0^{\theta_D/T} \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} dx,$$

onde V é o volume do sólido, ρ é a densidade de átomos, k_B é a constante de Boltzmann, e θ_D é a chamada *temperatura de Debye*, uma propriedade dos sólidos que depende da sua densidade e da velocidade de propagação do som nesse sólido.

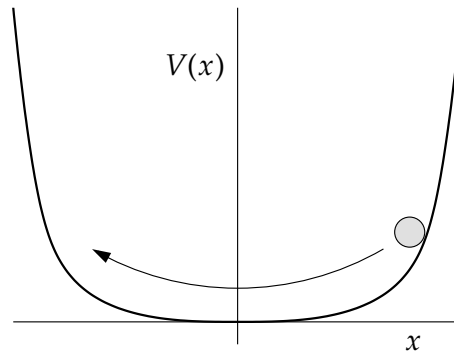
1. Escreva uma função Python, $cv(T)$, que calcule C_V para um dado valor da temperatura, para uma amostra de 1000 centímetros cúbicos de alumínio sólido, que tem uma densidade atômica de $\rho = 6.022 \times 10^{28} \text{ m}^{-3}$ e uma temperatura de Debye de $\theta_D = 428 \text{ K}$. Use a quadratura de Gauss para avaliar o integral, com $N = 50$ pontos de amostra.
2. Use essa função para fazer um gráfico da capacidade calorífica em função da temperatura de $T = 5 \text{ K}$ até $T = 500 \text{ K}$.

10. Exercício

Período de oscilador anarmônico

O oscilador harmônico simples pode ser estudado facilmente usando métodos analíticos e tem a importante propriedade de que seu período de oscilação é uma constante, independente de sua amplitude, tornando-o útil, por exemplo, para manter o tempo dos relógios. Frequentemente, em Física, no entanto, também nos deparamos com osciladores anarmônicos, cujo período varia com a amplitude e cujo comportamento geralmente não pode ser calculado analiticamente.

Um oscilador clássico geral pode ser considerado uma partícula num potencial côncavo. Quando perturbada, a partícula vai oscilar para frente e para trás nesse poço de potencial:



O oscilador harmônico corresponde a um potencial quadrático $V(x) \propto x^2$. Qualquer outra forma dá um oscilador anarmônico. (Assim, existem muitos tipos diferentes de osciladores anarmônicos, dependendo da forma exata do potencial.)

Uma maneira de calcular o movimento de um oscilador é escrever a equação para a conservação de energia no sistema. Se a partícula tiver massa m e posição x , então a energia total é igual à soma das energias cinética e potencial, assim:

$$E = \sqrt{m \left(\frac{dx}{dt}\right)^2 + V(x)}.$$

Como a energia deve ser constante ao longo do tempo, esta equação é efetivamente uma equação diferencial (não-linear) de evolução de x em t .

Vamos supor que o potencial $V(x)$ é simétrica relativamente a $x = 0$ e vamos impor uma amplitude a . Isto é, em $t = 0$ libertamos a massa em repouso na posição $x = a$ e seguimos a sua evolução até que volta à origem. Então a $t = 0$ temos $dx/dt = 0$ e a equação acima lê-se $E = V(a)$, o que nos dá a energia total da partícula em termos de amplitude.

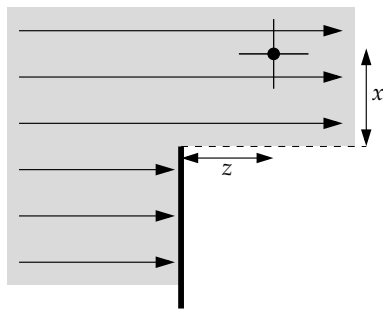
1. Quando a partícula atinge a origem pela primeira vez, passou por um quarto de um período do oscilador. Reorganizando a equação acima para dx/dt e, em seguida, integrando em relação a t de 0 a $\frac{1}{4}T$, mostre que o período T é dado por

$$T = \sqrt{8m} \int_0^a \frac{dx}{\sqrt{V(a) - V(x)}}.$$

2. Suponha que o potencial é $V(x) = x^4$ e a massa da partícula é $m = 1$. Escreva uma função Python que calcula o período do oscilador para uma dada amplitude usando a quadratura de Gauss com $N = 20$ pontos, em seguida, use sua função para fazer um gráfico do período para amplitudes que vão desde $a = 0$ a $a = 2$.
3. Deve obter que o oscilador fica mais rápido à medida que a amplitude aumenta, mesmo que a partícula tenha que viajar ainda mais para uma amplitude maior. Deve obter que o período diverge à medida que a amplitude vai para zero. Como explica esses resultados?

11. Exercício

Suponha que uma onda plana, como luz ou onda sonora, é bloqueada por um objeto com uma fronteira rectilínea, representada pela linha sólida na parte inferior desta figura:



A onda será difractada na fronteira e a intensidade resultante na posição (x, z) marcada pelo ponto, é dada pela teoria de difracção de campo próximo,

$$I = \frac{I_0}{8} \left([2C(u) + 1]^2 + [2S(u) + 1]^2 \right),$$

onde I_0 é a intensidade da onda antes da difracção e

$$u = x\sqrt{\frac{2}{\lambda z}}, \quad C(u) = \int_0^u \cos \frac{1}{2}\pi t^2 dt, \quad S(u) = \int_0^u \sin \frac{1}{2}\pi t^2 dt.$$

Escreva um programa que calcule I/I_0 e faça o gráfico como função de x na gama -5 m a 5 m no caso da velocidade do som com comprimento de onda $\lambda = 1$ m, medido $z = 3$ m após a fronteira rectilínea. Calcule os integrais usando a quadratura gaussiana com $N = 50$ pontos. Deve encontrar uma variação significativa na intensidade de som difractada – suficiente para que se possa facilmente ouvir o efeito se o som for difractado na fronteira de um edifício alto.

12. Exercício

Derivada de função

Crie uma função $f(x)$ em Python que devolva o valor de $1 + \frac{1}{2} \tanh 2x$. Usando o esquema da diferença central calcule a derivada dessa função no intervalo $-2 \leq x \leq 2$. Calcule analiticamente a derivada dessa função e trace num mesmo gráfico esta derivada (linha contínua) e a obtida anteriormente por via numérica (pontos a cheio).

13. Exercício

Mesmo quando podemos encontrar o valor de $f(x)$ para qualquer valor de x a diferença progressiva pode ser mais precisa do que a diferença centrada para h suficientemente grande. Para que valores de h o erro de aproximação na diferença progressiva da Eq. (5.87) é menor que na diferença centrada da Eq. (5.95)?

Física Computacional

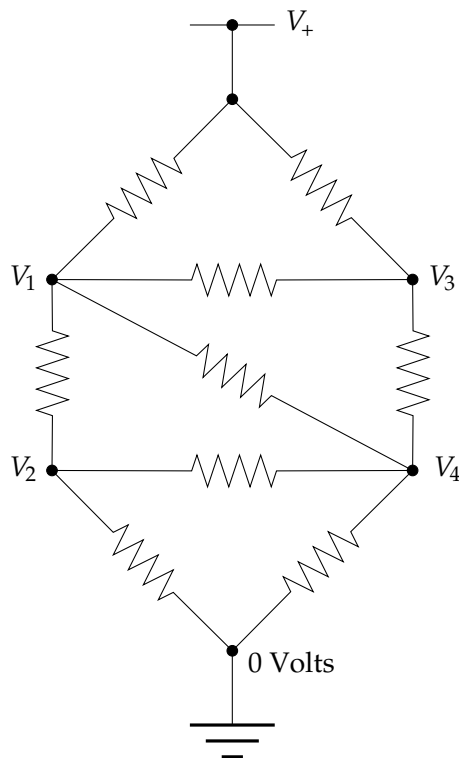
Ano lectivo 2017/2018

Folha 5 - Equações Lineares e Não Lineares

1. Exercício

Circuito de resistências

Considere o seguinte circuito de resistências:



Todas as resistências têm o mesmo valor R . O barramento de energia no topo está na voltagem $V_+ = 5\text{ V}$. Quais são as outras quatro voltagens, V_1 a V_4 ?

Para responder a esta pergunta, usamos a lei de Ohm e a lei de nós de Kirchhoff, que diz que o fluxo de corrente líquido total de (ou em) qualquer junção em um circuito deve ser zero. Assim, para o nó do potencial V_1 , por exemplo, temos

$$\frac{V_1 - V_2}{R} + \frac{V_1 - V_3}{R} + \frac{V_1 - V_4}{R} + \frac{V_1 - V_+}{R} = 0,$$

ou, noutra forma,

$$4V_1 - V_2 - V_3 - V_4 = V_+.$$

1. Escreva equações semelhantes para os outros três nós com os potenciais desconhecidos.
2. Escreva um programa para resolver as quatro equações resultantes usando a eliminação de Gauss determinando os quatro potenciais (pode modificar um programa pré-existente `gausselim.py` no Exemplo 6.1).

2. Exercício

1. Modifique o programa `gausselim.py` do Exemplo 6.1 para incorporar o pivotamento parcial. Execute esse programa e mostre que fornece as mesmas respostas que o programa original quando aplicado à Eq. (6.1).
2. Modifique o programa para resolver a equação (6.17) e mostre que ele também pode encontrar a solução para essa equação vetorial, mesmo que a eliminação de Gauss sem pivotar falhe.

3. Exercício

Decomposição LU

Este exercício convida-o a desenvolver o seu próprio programa para resolver equações simultâneas usando o método de decomposição LU.

1. Se desejar, partindo do programa para eliminação de Gauss do Exemplo 6.1, escreva uma função Python que calcule a decomposição da LU de uma matriz. O cálculo é o mesmo que para a eliminação de Gauss, exceto que em cada etapa do cálculo precisa extrair os elementos apropriados da matriz e juntá-los para formar a matriz diagonal inferior L da Eq. (6.32). Teste essa função calculando a decomposição LU da matriz da Eq. (6.2), e depois multiplique L por U para verificar que obtém a matriz original.
2. Use a sua função de decomposição de LU para criar um programa completo para resolver Eq. (6.2) através de uma dupla substituição conforme é descrito no texto. Resolva as mesmas equações usando a função `solve` do pacote `numpy` e verifique se obtém a mesma resposta.
3. Tente a sua incursão na decomposição da LU com pivotamento parcial. O pivotamento parcial funciona da mesma forma para a decomposição da LU, tal como ocorre na eliminação de Gauss, trocando linhas para obter o maior elemento diagonal, conforme explicado na Seção 6.1.3, mas a extensão para a decomposição da LU requer duas etapas adicionais. Primeiro, sempre que trocar duas linhas também terá que trocar as mesmas linhas na matriz L . Segundo, quando usar a decomposição da LU para resolver um conjunto de equações $A\bar{x} = \bar{v}$, também precisa executar a mesma sequência de trocas no vetor \bar{v} no lado direito. Isso significa que precisa registrar as trocas enquanto está fazendo a decomposição para que possa recriá-los mais tarde. A maneira mais simples de fazer isso é configurar uma lista ou matriz na qual o valor do i -ésimo elemento registra a linha com a qual trocou na i -ésima etapa do processo. Por exemplo, se trocou a primeira linha com a segunda e a segunda com a quarta, os dois primeiros elementos da lista seriam 2 e 4. Resolver um conjunto de equações para determinado \bar{v} envolve primeiro executar a sequência necessária de trocas nos elementos de \bar{v} , em seguida, executando uma substituição dupla, como de costume. (Na eliminação gaussiana ordinária com pivotamento, troca-se os elementos de \bar{v} à medida que o algoritmo avança, ao invés de todos de uma só vez, mas a diferença não tem efeito sobre os resultados, então é bom realizar todas as trocas de uma só vez se assim o desejarmos.)

Modifique a função que escreveu para a parte (a) para executar a decomposição da LU com pivotamento parcial. A função deve retornar as matrizes L e U para a decomposição da LU da matriz trocada, além de uma lista das trocas realizadas. Em seguida, modifique o resto do programa para resolver equações da forma $A\bar{x} = \bar{v}$ usando a decomposição da LU com pivotamento. Teste o seu programa no exemplo da Eq. (6.17), que não pode ser resolvido sem pivotamento devido ao zero no primeiro elemento da matriz. Verifique os seus resultados com uma solução das mesmas equações usando a função `solve` de `numpy`.

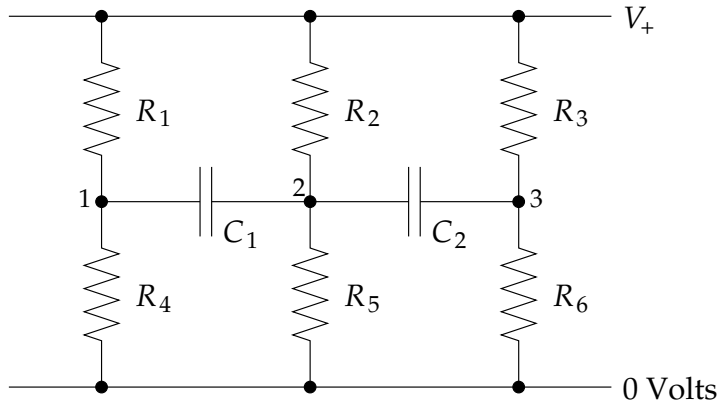
4. Exercício

Escreva um programa que resolva a rede de resistências do problema do Exercício 6.1 na página 220 usando a função `solve` do `numpy.linalg`. Se também fez o Exercício 6.1, pode verificar que obtém a mesma resposta em ambos os casos.

5. Exercício

Um circuito resistivo-capacitivo

Aqui está um problema de circuito mais complicado:



$$\begin{aligned} \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_4} + i\omega C_1 \right) x_1 - i\omega C_1 x_2 &= \frac{x_+}{R_1}, \\ -i\omega C_1 x_1 + \left(\frac{1}{R_2} + \frac{1}{R_5} + i\omega C_1 + i\omega C_2 \right) x_2 - i\omega C_2 x_3 &= \frac{x_+}{R_2}, \\ -i\omega C_2 x_2 + \left(\frac{1}{R_3} + \frac{1}{R_6} + i\omega C_2 \right) x_3 &= \frac{x_+}{R_3}. \end{aligned}$$

A tensão V_+ é variável no tempo e sinusoidal na forma $V_+ = x_+ e^{i\omega t}$, com x_+ constante. As resistências no circuito podem ser tratados usando a lei de Ohm como de costume. Para os condensadores, a carga Q e a tensão V através deles são relacionadas pela lei dos condensadores $Q = CV$, onde C é a capacidade. Diferenciando ambos os lados dessa expressão, vem a corrente I que passa pelo condensador é:

$$I = \frac{dQ}{dt} = C \frac{dV}{dt}.$$

1. Assumindo que as tensões nos pontos marcados 1, 2 e 3 são da forma $V_1 = x_1 e^{i\omega t}$, $V_2 = x_2 e^{i\omega t}$, e $V_3 = x_3 e^{i\omega t}$, aplique a lei de Kirchhoff em cada um dos três nodos junto com a lei de Ohm e a lei dos condensadores, para mostrar que as constantes x_1 , x_2 , e x_3 satisfazem as equações

$$\begin{aligned} \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_4} + i\omega C_1 \right) x_1 - i\omega C_1 x_2 &= \frac{x_+}{R_1}, \\ -i\omega C_1 x_1 + \left(\frac{1}{R_2} + \frac{1}{R_5} + i\omega C_1 + i\omega C_2 \right) x_2 - i\omega C_2 x_3 &= \frac{x_+}{R_2}, \\ -i\omega C_2 x_2 + \left(\frac{1}{R_3} + \frac{1}{R_6} + i\omega C_2 \right) x_3 &= \frac{x_+}{R_3}. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_4} + i\omega C_1 \right) x_1 - i\omega C_1 x_2 &= \frac{x_+}{R_1}, \\ -i\omega C_1 x_1 + \left(\frac{1}{R_2} + \frac{1}{R_5} + i\omega C_1 + i\omega C_2 \right) x_2 - i\omega C_2 x_3 &= \frac{x_+}{R_2}, \\ -i\omega C_2 x_2 + \left(\frac{1}{R_3} + \frac{1}{R_6} + i\omega C_2 \right) x_3 &= \frac{x_+}{R_3}. \end{aligned}$$

2. Escreva um programa para resolver x_1 , x_2 , e x_3 quando

$$\begin{aligned} R_1 = R_3 = R_5 &= 1 \text{ k}\Omega, \\ R_2 = R_4 = R_6 &= 2 \text{ k}\Omega, \\ C_1 &= 1 \mu\text{F}, \quad C_2 = 0.5 \mu\text{F}, \\ x_+ &= 3 \text{ V}, \quad \omega = 1000 \text{ s}^{-1}. \end{aligned}$$

Observe que a matriz para esse problema possui elementos complexos. Precisar  definir uma matriz complexa para a acomodar, mas ainda pode usar a fun  o `solve`, como anteriormente, para resolver as equa  es - ela funciona com argumentos reais ou complexos. Usando essa solu   o, calcule e imprima as amplitudes das tr s tens es V_1 , V_2 , e V_3 e as suas fases em graus. (Nota: Pode achar  teis as fun  es `polar` ou `phase` no pacote `cmath`. Se z   um n mero complexo ent o "`r, theta = polar(z)`" retornar  o m dulo e a fase (em radianos) de z e "`r, theta = polar(z)`" retornar  somente a fase.)

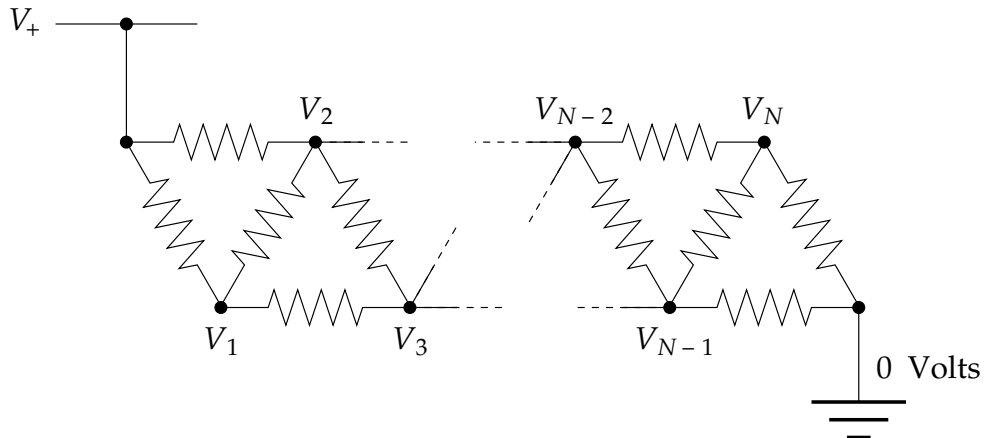
6. Exerc cio

Partindo ou do programa `springs.py` na p gina 237 ou `springsb.py` na p gina 238, remova o c digo que produz o gr fico dos resultados e substitua-o pelo c digo que gera uma anima   o das massas na sua vibra   o, os seus deslocamentos relativamente  s suas posi  es de equil brio s o dados pela parte real da Eq. (6.53). Para maior clareza, assuma que as suas posi  es de equil brio est o separadas por duas unidades na linha horizontal. Pelo menos a anima   o sever  mostrar cada uma das massas individuais, por exemplo como pequenas esferas (de raio 0.2 ou 0.3).

7. Exerc cio

Cadeia de resist ncias

Considere a cadeia de resist ncias da figura



Todas as resist ncias t m o mesmo valor R . O barramento do topo est  ao potencial $V_+ = 5 \text{ V}$. O problema   encontrar os potenciais, $V_1 \dots V_N$, nos n dos internos do circuito.

1. Usando a lei de Ohm e a lei de nodos de Kirchhoff, que diz que o fluxo de corrente líquido total de (ou em) qualquer nodo num circuito deve ser zero, mostre que os potenciais V_1, \dots, V_N satisfazem as equações

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

2. Exprima essas equações em forma vetorial $A\vec{v} = \vec{w}$ e encontre os valores da matriz A e do vetor \vec{w} .
3. Escreva um programa para resolver os valores do V_i quando houver $N = 6$ junções internas com potenciais desconhecidas. (Dica: Todos os valores de V_i devem estar entre zero e 5 V. Se não, algo está errado.)
4. Agora repita o seu cálculo para o caso em que existem $N = 10\,000$ junções internas. Esta parte não é possível usando ferramentas padrão como a função `linalg.solve`. Tem de usar o facto de a matrix \vec{A} ser em banda, e usar função `banded` do ficheiro `banded.py`, discutido Appendix E, ou a função `linalg.solve_banded`.

8. Exercício

O algoritmo QR

Neste exercício escreverá um programa para calcular os valores próprios e vetores próprios de uma matriz simétrica real usando o algoritmo QR. O primeiro desafio é escrever um programa que encontre a decomposição QR de uma matriz. Então iremos usar essa decomposição para encontrar os valores próprios.

Como descrito acima, a decomposição QR expressa uma matriz quadrada real A na forma $A = QR$, onde Q é uma matriz ortogonal e R é uma matriz triangular superior. Dado uma matriz A , $N \times N$, podemos calcular a decomposição QR da seguinte forma.

Vamos pensar na matriz como um conjunto de N vetores de coluna $\vec{a}_0 \dots \vec{a}_{N-1}$ então:

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

Onde numeramos os vetores em Python, começando do zero, o que será conveniente ao escrever o programa. Agora definimos dois novos conjuntos de vetores $\vec{u}_0 \dots \vec{u}_{N-1}$ e $\vec{q}_0 \dots \vec{q}_{N-1}$ do seguinte modo:

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

e assim por diante. As fórmulas gerais para calcular \vec{u}_i e \vec{q}_i são

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

1. Mostre, por indução ou de outra forma, que os vetores \vec{q}_i são ortonormais, isto é, que satisfazem

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

Agora, reorganizando as definições dos vetores, temos

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

e assim por diante. Ou podemos agrupar os vetores \vec{q}_i juntos como as colunas de uma matriz e escrever todas essas equações como uma equação matricial única

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

(Se isso parece complicado, vale a pena multiplicar as matrizes à direita para verificar por si mesmo que obtém as expressões corretas para o \vec{a}_i .)

Observe agora que a primeira matriz no lado direito desta equação, a matriz com colunas \vec{q}_i , é ortogonal, porque os vetores \vec{q}_i são ortonormais e a segunda matriz é triangular superior. Por outras palavras, encontramos a decomposição QR $A = QR$. As matrizes Q e R são

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

1. Escreva uma função Python que tome como argumento uma matriz quadrada real A e retorna as duas matrizes Q e R que formam a decomposição QR. Como teste, experimente essa função na matriz

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

Verifique os resultados multiplicando Q e R juntos para recuperar a matriz original A .

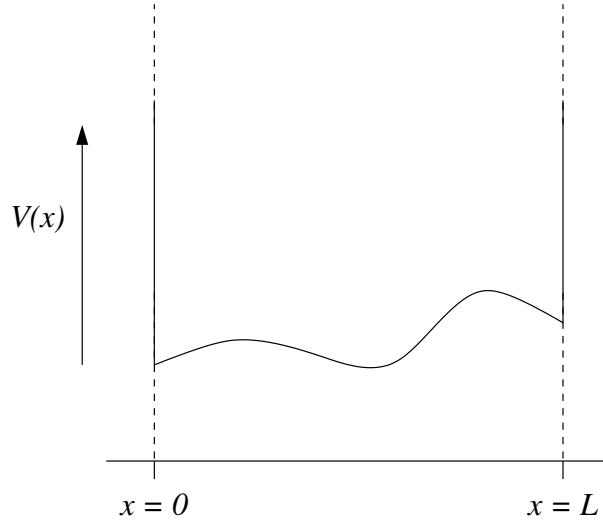
2. Usando essa função, escreva um programa completo para calcular os valores próprios e vetores próprios de uma matriz simétrica real usando o algoritmo QR. Continue o cálculo até que a magnitude de todos os elementos fora da diagonal da matriz seja menor que 10^{-6} . Teste o programa na matriz do exemplo acima. Deve obter que os valores próprios são 1, 21, -3 , e -8 .

9. Exercício

Poço de potencial quântico assimétrico

A mecânica quântica pode ser formulada como um problema de matriz e resolvida num computador usando métodos da álgebra linear. Suponha, por exemplo, que temos uma partícula de massa M num

poço de potencial uni-dimensional de largura L . Suponha que o potencial $V(x)$ varia de alguma forma dentro do poço:



Não podemos resolver tais problemas analiticamente em geral, mas podemos resolvê-los no computador.

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

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

Por simplicidade, vamos supor que as paredes do poço são infinitamente altas, de modo que a função de onda seja zero fora do poço, o que significa que ele deve ir a zero $x = 0$ e $x = L$. Nesse caso, a função de onda pode ser expressa como uma série de senos de Fourier:

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

onde ψ_1, ψ_2, \dots são os coeficientes de Fourier.

1. Observando que, para m, n inteiros positivos

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

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

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

Assim, definindo uma matriz H com elementos

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

mostre que a equação de Schrödinger pode ser escrita em forma de $H\psi = E\psi$, onde ψ é o vetor (ψ_1, ψ_2, \dots) . Então ψ é um vetor próprio da *matriz hamiltoniana* H com valor próprio E . Se pudermos calcular os valores próprios desta matriz, então sabemos as energias permitidas da partícula no poço.

2. Para o caso $V(x) = ax/L$, avalie analiticamente o integral em H_{mn} e assim encontre uma expressão geral para o elemento da matriz H_{mn} . Mostre que a matriz é real e simétrica. Provavelmente achará útil saber que

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

Escreva um programa em Python para avaliar a expressão para H_{mn} para arbitrários m e n quando a partícula no poço é um elétron, o poço tem largura 5 Å, e $a = 10$ eV. (A massa e carga de um elétron são 9.1094×10^{-31} kg e 1.6022×10^{-19} C respectivamente.)

3. A matriz H é teoricamente infinitamente grande, então não podemos calcular todos os seus valores próprios. Mas podemos obter uma solução bastante precisa para os primeiros, cortando a matriz após os primeiros elementos. Modifique o programa que escreveu para a parte (2) acima para criar uma matriz dos 10×10 elementos de H até $m, n = 10$. Calcule os valores próprios dessa matriz usando a função apropriada de `numpy.linalg` e, portanto, imprima, em unidades de elétron-volt, os dez primeiros níveis de energia do poço quântico, dentro dessa aproximação. Deve descobrir, por exemplo, que a energia do estado fundamental do sistema está próxima 5.84 eV. (Nota: lembre-se de que os índices matriciais em Python começam em zero, enquanto os índices em expressões algébricas padrão, como as acima, começam em um. Precisarás fazer adaptações para isso no programa.)
4. Modifique o programa para usar em alternativa um array 100×100 e que calcule novamente os dez primeiros valores próprios de energia. Comparando com os valores calculados na parte (3), o que conclui sobre a precisão do cálculo?
5. Agora modifique o programa mais uma vez para calcular a função de onda $\psi(x)$ para o estado fundamental e os dois primeiros estados excitados no poço. Use esses resultados para criar um gráfico com três curvas mostrando a densidade de probabilidade $|\psi(x)|^2$ como função de x em cada um desses três estados. Preste especial atenção à normalização da função de onda - ela deve satisfazer a condição $\int_0^L |\psi(x)|^2 dx = 1$. Isso é verdade da sua função de onda?

10. Exercício

Considere a equação $x = 1 - e^{-cx}$, em que c é um parâmetro conhecido and x uma incógnita. Esta equação surge numa variedade de situações, incluindo a física dos processos de contacto, os modelos matemáticos de epidemias e a teoria de gráficos aleatórios.

- Escreva um programa para resolver esta equação para x usando o método de relaxação para o caso $c = 2$. Calcule a sua solução com uma exactidão de pelo menos 10^{-6} .
- Modifique seu programa para calcular a solução para valores de c de 0 a 3 em passos de 0.01 e faça um gráfico de x em função de c . Deve ver uma transição clara de um regime em que $x = 0$ para um regime de $x \neq 0$. Este é outro exemplo de transição de fase. Na física, essa transição é conhecida como *transição de percolação*; em epidemiologia é o *limiar epidémico*.

II. Exercício

Sobre-relaxação sucessiva

Se não fez o Exercício 6.10, deve fazê-lo antes de iniciar este.

O método de sobre-relaxação envolve iterar a equação $x' = f(x)$, começando de um palpite inicial, até convergir. Como vimos, essa é uma maneira rápida e fácil de encontrar soluções para equações não-lineares. No entanto, é possível, em alguns casos, tornar o método ainda mais rápido usando a técnica de *sobre-relaxação*. Suponha que nosso palpite inicial na solução de uma equação seja, digamos, $x = 1$, e que a verdadeira solução é $x = 5$. Após o primeiro passo do processo iterativo, podemos ver um valor de, digamos, $x = 3$. No método de sobre-relaxação, observamos esse valor e notamos que x está a aumentar, então deliberadamente ultrapassamos o valor calculado, na esperança de que isso nos aproxime da solução final — neste caso podemos passar $x = 3$ e atingir por exemplo o valor de $x = 4$, que está mais próximo da verdadeira solução $x = 5$ e, portanto, deve nos levar à solução mais rapidamente. O método de sobre-relaxação fornece uma fórmula para executar esse tipo de aceleração de modo controlado e, muitas vezes, embora nem sempre, leva-nos à solução mais rapidamente. Em detalhe, funciona da seguinte forma.

Podemos reescrever a equação $x' = f(x)$ na forma $x' = x + \Delta x$, onde

$$\Delta x = x' - x = f(x) - x.$$

O método de sobre-relaxação envolve a iteração da equação modificada

$$x' = x + (1 + \omega) \Delta x,$$

(mantendo a mesma definição de Δx). Se o parâmetro ω é nulo, então este método é igual à relaxação habitual, contudo para $\omega > 0$ o método pega na quantidade Δx da qual o valor x iria ser alterado e incrementa-a um pouco. Usando $\Delta x = f(x) - x$, nós também podemos escrever x' como

$$x' = x + (1 + \omega)[f(x) - x] = (1 + \omega)f(x) - \omega x,$$

que é a sua forma habitual.

Para que o método funcione, o valor de ω deve ser escolhido corretamente, embora haja algum espaço de manobra - existe um valor ótimo, mas valores na sua vizinhança também fornecem bons resultados. Infelizmente, não há uma teoria geral que nos diga qual é o valor ideal. Geralmente é encontrado por tentativa e erro.

1. Derive um equivalente de Eq. (6.81) para o método de sobre-relaxação e, portanto, mostrem que o erro em x' , o equivalente da Eq. (6.83), é dado por

1.

$$\epsilon' \simeq \frac{x - x'}{1 - 1/[(1 + \omega)f'(x) - \omega]}.$$

2. Considere novamente a equação $x = 1 - e^{-cx}$ que resolvemos no Exercício 6.10. Usando o programa que fez para a alínea (a) do exercício, que resolveu a equação para o caso $c = 2$, e modificando-o para que imprima o número de iterações necessárias para que a solução convirja com uma precisão de 10^{-6} .
3. Agora escreva um novo programa (o modifique o já existente) para resolver a mesma equação $x = 1 - e^{-cx}$ para $c = 2$, novamente com um precisão de 10^{-6} , mas usando a sobre-relaxação. Programe o seu programa para imprimir as respostas que encontrar junto com o número de iterações necessárias para encontrá-las. Experimente valores diferentes de ω para ver o quão rápido você pode fazer com que o método convirja. Um valor de $\omega = 0.5$ é um ponto de partida razoável. Com alguma tentativa e erro, você deve conseguir que o cálculo convirja duas vezes mais rápido que o método de relaxação simples, ou seja, em cerca de metade das iterações.

4. Há alguma circunstância em que usar um valor $\omega < 0$ nos ajudaria a encontrar uma solução mais rápido do que podemos com o método de relaxação comum? (Dica: a resposta é sim, mas por quê?)

12. Exercício

O processo bioquímico de glicólise, a quebra da glicose no corpo para liberar energia, pode ser modelado pelas equações

$$\frac{dx}{dt} = -x + ay + x^2y, \quad \frac{dy}{dt} = b - ay - x^2y.$$

As variáveis x e y representam concentrações de dois químicos, ADP e F6P, e a e b são constantes positivas. Uma das características importantes de equações lineares não-lineares como estas são os seus pontos fixos, significando valores de x e y nos quais as derivadas de ambas as variáveis se tornam zero simultaneamente, de modo que os valores das variáveis deixam de mudar e se tornam constantes no tempo. Pondo as derivadas a zero acima, os pontos fixos das equações de glicólise são soluções de

$$-x + ay + x^2y = 0, \quad b - ay - x^2y = 0.$$

1. Demonstre, analiticamente, que a solução dessas equações é

$$x = b, \quad y = \frac{b}{a + b^2}.$$

2. Mostre que as equações podem ser reorganizadas na forma

$$x = y(a + x^2), \quad y = \frac{b}{a + x^2}$$

e escreva um programa para determinar o ponto estacionário usando o método de relaxação com $a = 1$ e $b = 2$. Deve encontrar que o método não converge para uma solução neste caso.

3. Encontre uma maneira diferente de organizar as equações de forma que, quando aplicar novamente o método de relaxação, convirja agora para um ponto fixo. Verifique se a solução obtida concorda com a solução analítica.

13. Exercício

Constante de Wien

A lei de radiação de Planck diz-nos que a intensidade da radiação por unidade de área e por unidade de comprimento de onda λ de um corpo negro à temperatura T é

$$I(\lambda) = \frac{2\pi hc^2 \lambda^{-5}}{e^{hc/\lambda k_B T} - 1},$$

em que h é a constante de Planck, c a velocidade da luz, e k_B a constante de Boltzmann.

1. Mostre que o máximo de intensidade radiada é obtida para um comprimento de onda λ determinado pela equação

$$5e^{-hc/\lambda k_B T} + \frac{hc}{\lambda k_B T} - 5 = 0.$$

Com a substituição $x = hc/\lambda k_B T$ prove que o comprimento de onda do máximo de intensidade satisfaz a *lei de deslocamento de Wien*:

$$\lambda = \frac{b}{T},$$

em que a chamada *constante de Wien* é $b = hc/k_B x$, sendo x a solução da equação não linear

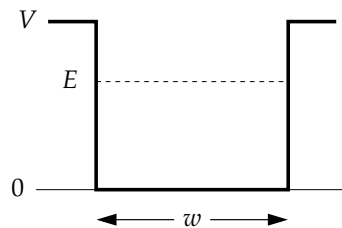
$$5e^{-x} + x - 5 = 0.$$

Escreva um programa para resolver essa equação com uma exactidão de $\epsilon = 10^{-6}$, usando o método de bisecção e determine o valor da constante de Wien.

2. A lei do deslocamento de Wien é a base para o método de *pirometria óptica*, um método para medir as temperaturas dos objetos, observando a cor da radiação térmica que emitem. O método é comumente usado para estimar as temperaturas da superfície de corpos astronómicos, como o Sol. O pico de comprimento de onda na radiação emitida pelo Sol cai em $\lambda = 502 \text{ nm}$. Das equações acima e do seu valor da constante de deslocamento, estime a temperatura da superfície do Sol.

14. Exercício

Considere um potencial quadrado de largura w , com paredes de altura V :



Usando a equação de Schrödinger, é possível mostrar-se que as energias E permitidas de uma partícula única quântica de massa m presa no poço são soluções de,

$$\tan\left(\sqrt{w^2 m E / 2\hbar^2}\right) = \begin{cases} \sqrt{(V - E)/E} & \text{índice par} \\ -\sqrt{E/(V - E)} & \text{índice ímpar} \end{cases}$$

onde os estados são numerados a partir de zero, com o estado fundamental correspondendo ao estado zero, o primeiro estado excitado numerado por um, etc.

1. Para um electrão (massa $9.1094 \times 10^{-31} \text{ kg}$) num poço com $V = 20 \text{ eV}$ e $w = 1 \text{ nm}$, escreva um programa de Python que represente as três quantidades

$$y_1 = \tan\left(w^2 m E / 2\hbar^2\right) \quad y_2 = \sqrt{\frac{V - E}{E}} \quad y_3 = -\sqrt{\frac{E}{V - E}}$$

no mesmo gráfico, como função de E desde $E = 0$ até $E = 20 \text{ eV}$. A partir do gráfico faça uma estimativa aproximada das energias dos primeiros seis níveis de energia da partícula.

2. Escreva um segundo programa que calcule os valores dos primeiros seis níveis de energia em electrão-volt com uma precisão de 0.001 eV usando o método de bisecção.

15. Exercício

Raízes de um polinómio

Considere o polynómio de sexta ordem

$$P(x) = 924x^6 - 2772x^5 + 3150x^4 - 1680x^3 + 420x^2 - 42x + 1.$$

Não existe uma fórmula geral para as raízes de um polinómio de sexta ordem, mas é possível encontrá-las facilmente usando um computador.

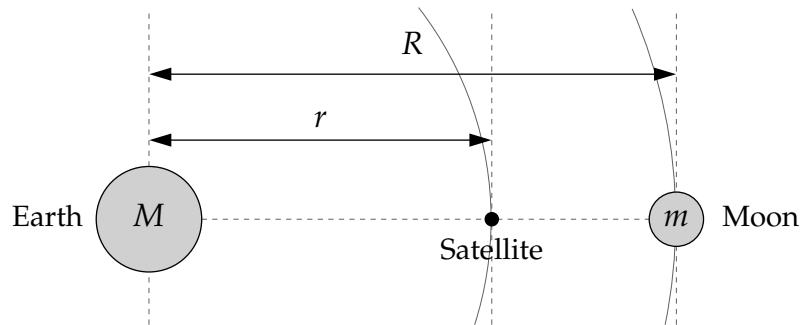
1. Faça um gráfico de $P(x)$ de $x = 0$ a $x = 1$ e, por inspeção, encontre valores aproximados para as seis raízes do polinômio—os pontos nos quais a função é zero.
2. Escreva um programa em Python para determinar as posições de todas as seis raízes com pelo menos dez casas decimais, usando o método de Newton.

Note que o polinômio deste exemplo é o sexto polinômio de Legendre (mapeado no intervalo de zero a um), pelo que o cálculo executado aqui é o mesmo que encontrar os pontos de integração para a quadratura gaussiana de 6 pontos (ver Seção 5.6.2). De facto, o método de Newton é o método de eleição para calcular os pontos de quadratura de Gauss.

16. Exercício

Pontos de Lagrange

Existe um ponto mágico entre a Terra e a Lua, chamado de L_1 Ponto de Lagrange, no qual um satélite orbitará a Terra em perfeita sincronia com a Lua, permanecendo sempre entre os dois. Isso funciona porque a atração interior da Terra e a atração externa da Lua se combinam para criar exatamente a força centrípeta necessária que mantém o satélite em sua órbita. Aqui está a configuração:



1. Assumindo órbitas circulares, e assumindo que a Terra é muito mais massiva que a Lua ou o satélite, mostre que a distância r do centro da Terra para o L_1 ponto satisfaz

$$\frac{GM}{r^2} - \frac{Gm}{(R-r)^2} = \omega^2 r,$$

onde M e m são as massas da Terra e da Lua, G é a constante gravitacional de Newton, e ω é a velocidade angular da Lua e do satélite.

2. A equação acima é uma equação polinomial de quinta ordem em r (também chamado de equação quártica). Tais equações não podem ser resolvidas exatamente de forma fechada, mas é simples resolvê-las numericamente. Escreva um programa que use o método de Newton ou o método da secante para obter a distância r da Terra para o L_1 ponto. Calcule uma solução com precisão de pelo menos quatro números significativos.

Os valores dos vários parâmetros são:

$$G = 6.674 \times 10^{-11} \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1} \text{ s}^{-2},$$

$$M = 5.974 \times 10^{24} \text{ kg},$$

$$m = 7.348 \times 10^{22} \text{ kg},$$

$$R = 3.844 \times 10^8 \text{ m},$$

$$\omega = 2.662 \times 10^{-6} \text{ s}^{-1}.$$

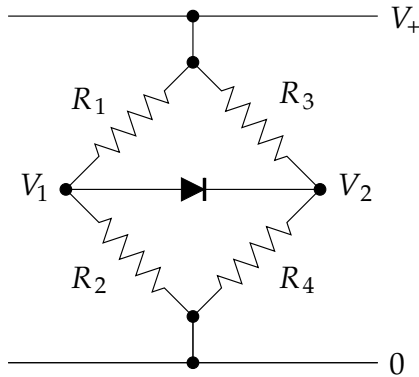
Também precisará escolher um valor inicial adequado para r , ou dois valores iniciais se usar o método da secante.

17. Exercício

Circuitos não lineares

O Exercício 6.1 usou equações lineares simultâneas para resolver o comportamento dos circuitos de resistências. As resistências são componentes lineares - a corrente é proporcional à tensão - e as equações resultantes que precisamos resolver são, portanto, também lineares e podem ser resolvidas por métodos matriciais padrão. Circuitos reais, no entanto, geralmente incluem componentes não-lineares. Para resolver o comportamento desses circuitos, precisamos resolver equações não-lineares.

Considere o seguinte circuito simples, uma variação da clássica ponte de Wheatstone:



As resistências obedecem à lei de Ohm normal, mas o diodo obedece à equação do diodo:

$$I = I_0(e^{V/V_T} - 1),$$

onde V é a tensão através do diodo e I_0 e V_T são constantes.

1. A lei dos nodos de Kirchhoff diz que o saldo das correntes fluem para dentro ou para fora de cada nodo de um circuito deve ser zero. Aplicando a lei ao nodo com tensão V_1 temos

$$\frac{V_1 - V_+}{R_1} + \frac{V_1}{R_2} + I_0[e^{(V_1 - V_2)/V_T} - 1] = 0.$$

Derive a equação correspondente para tensão V_2 .

2. Resolva as duas equações não-lineares para as tensões V_1 e V_2 com as condições

$$\begin{aligned} V_+ &= 5 \text{ V}, \\ R_1 &= 1 \text{ k}\Omega, \quad R_2 = 4 \text{ k}\Omega, \quad R_3 = 3 \text{ k}\Omega, \quad R_4 = 2 \text{ k}\Omega, \\ I_0 &= 3 \text{ nA}, \quad V_T = 0.05 \text{ V}. \end{aligned}$$

Pode usar o método de relaxamento ou o método de Newton para resolver as equações. Se usar o método de Newton, então pode resolver a Eq. (6.108) para $\Delta \vec{x}$ usando a função `solve()` de `numpy.linalg` se assim quiser, mas neste caso a matriz é apenas uma matriz 2×2 , por isso é fácil calcular o inverso diretamente também.

3. A regra prática do engenheiro eletrônico para os diodos é que a tensão num diodo (polarizado diretamente) é sempre de aproximadamente 0,6 volts. Confirme se os resultados estão de acordo com essa regra.

18. Exercício

Temperatura de uma lâmpada

Uma lâmpada incandescente é um dispositivo simples - ela contém um filamento, geralmente feito de tungstênio, aquecido pelo fluxo de eletricidade até ficar suficientemente quente para irradiar luz visível. Essencialmente toda a energia consumida por tal lâmpada é irradiada como energia eletromagnética, mas parte da radiação não está nos comprimentos de onda visíveis, o que significa que é inútil para fins de iluminação.

Vamos definir a eficiência de uma lâmpada para ser uma fração da energia irradiada que cai na faixa visível. É uma boa notícia a radiação emitida por um filamento à temperatura T obedecer à lei de radiação de Planck, o que significa que a potência irradiada por unidade de comprimento de onda λ obedece

$$I(\lambda) = 2\pi Ahc^2 \frac{\lambda^{-5}}{e^{hc/\lambda k_B T} - 1},$$

onde A é a área da superfície do filamento, h é a constante de Planck, c é a velocidade da luz e k_B é a constante de Boltzmann. Os comprimentos de onda visíveis são de $\lambda_1 = 390$ nm a $\lambda_2 = 750$ nm, pelo que a energia total irradiada na janela visível é $\int_{\lambda_1}^{\lambda_2} I(\lambda) d\lambda$ e a energia total em todos os comprimentos de onda é $\int_0^\infty I(\lambda) d\lambda$. Dividindo uma expressão pela outra e substituindo $I(\lambda)$, temos uma expressão para a eficiência η da lâmpada:

$$\eta = \frac{\int_{\lambda_1}^{\lambda_2} \lambda^{-5} / (e^{hc/\lambda k_B T} - 1) d\lambda}{\int_0^\infty \lambda^{-5} / (e^{hc/\lambda k_B T} - 1) d\lambda}.$$

Fazendo a substituição $x = hc/\lambda k_B T$, também pode ser escrita como

$$\eta = \frac{\int_{hc/\lambda_2 k_B T}^{hc/\lambda_1 k_B T} x^3 / (e^x - 1) dx}{\int_0^\infty x^3 / (e^x - 1) dx} = \frac{15}{\pi^4} \int_{hc/\lambda_2 k_B T}^{hc/\lambda_1 k_B T} \frac{x^3}{e^x - 1} dx,$$

onde fizemos uso do valor exato conhecido do integral no denominador.

1. Escreva uma função Python que tem a temperatura T como argumento e que calcule o valor de η para essa temperatura a partir da fórmula acima. O integral na fórmula não pode ser feito analiticamente, mas também pode fazê-lo numericamente usando qualquer método de sua escolha. (Por exemplo, a quadratura gaussiana com 100 pontos de amostra funciona bem.) Use essa função para fazer um gráfico de η em função da temperatura entre 300 K e 10 000 K. Deve verificar que há uma temperatura intermediária em que a eficiência é máxima.
2. Calcule a temperatura de eficiência máxima da lâmpada dentro de 1 K usando a pesquisa da proporção áurea. (Nota: uma precisão de 1 K é o equivalente a algumas partes em dez mil, neste caso. Para obter esse tipo de precisão, neste cálculo, precisará usar valores para as constantes fundamentais que sejam adequadamente precisas, ou seja, precisará de valores precisos com vários algarismos significativos.)
3. É prático usar uma lâmpada de filamento de tungstênio na temperatura que encontrou? Se não, por que não?

Física Computacional

Ano lectivo 2017/2018

Folha 6 - Transformadas e Séries de Fourier

1. Exercício

Transformadas de Fourier de funções simples

Escreva programas em Python para calcular os coeficientes nas transformadas discretas de Fourier das seguintes funções periódicas amostradas em $N = 1000$ pontos uniformemente espaçados, e faça gráficos de suas amplitudes similares ao gráfico mostrado na Fig. 7.4 do livro:

1. Um ciclo único de onda-quadrada com amplitude 1
2. A onda dente-de-serra $y_n = n$
3. A onda sinusoidal $y_n = \sin(\pi n/N) \sin(20\pi n/N)$

Se quiser, pode usar a função de transformada de Fourier a partir do arquivo `dft.py` como ponto de partida para o seu programa.

2. Exercício

Detetando periodicidade

Nos recursos on-line existe um arquivo chamado `sunspots.txt`, que contém o número observado de manchas solares no Sol para cada mês desde janeiro de 1749. O arquivo contém duas colunas de números, a primeira representando o mês e a segunda é o número de manchas solares.

1. Escreva um programa que leia os dados no arquivo e faça um gráfico das manchas solares em função do tempo. Deve observar que o número de manchas solares flutuou num ciclo regular enquanto as observações foram registadas. Faça uma estimativa da duração do ciclo em meses.
2. Modifique esse programa para calcular a transformada de Fourier dos dados das manchas solares e, em seguida, faça um gráfico da magnitude ao quadrado $|c_k|^2$ dos coeficientes de Fourier em função do k - também chamado de *potência espectral* do sinal de manchas solares. Deve observar que há um pico notável no espectro de energia num k não nulo. A existência deste pico revela que há uma frequência na série de Fourier que tem uma amplitude maior do que as outras em torno dela - o que significa que há uma grande amplitude de onda sinusoidal com essa frequência, que corresponde à onda periódica que pode observar nos dados originais.
3. Encontre o valor aproximado de k ao qual o pico corresponde. Qual é o período da onda sinusoidal com este valor de k ? Deve observar que o período corresponde aproximadamente à duração do ciclo que calculou na parte (1).

Este tipo de análise de Fourier é um método sensível para detetar a periodicidade dos sinais. Mesmo nos casos em que não está claro para os olhos que existe uma componente periódica para um sinal ainda é possível encontrar uma usando uma transformada de Fourier.

3. Exercício

Transformadas de Fourier de instrumentos musicais

Nos recursos on-line encontrará ficheiros chamados `piano.txt` e `trumpet.txt` que contêm dados representando a forma de onda de uma única nota tocada, respetivamente, por um piano e um trompete.

1. Escreva um programa que carregue uma forma de onda de um desses ficheiros, faça um gráfico, calcule a transformada discreta de Fourier e represente as magnitudes dos primeiros 10 000 coeficientes de maneira semelhante à Fig. 7.4 do livro. Note que terá que usar uma transformada rápida de Fourier para o cálculo, pois existem demasiados dados nos ficheiros para que consiga de outro modo obter resultados num tempo razoável.

Aplique esse programa às formas de onda do piano e do trompete e discuta brevemente o que se pode concluir sobre o som do piano e do trompete a partir dos gráficos dos coeficientes de Fourier.

2. Ambas as formas de onda foram registadas na taxa padrão da indústria de 44 100 amostras por segundo e ambos os instrumentos estavam tocando a mesma nota musical quando as gravações foram feitas. A partir dos resultados da transformada de Fourier, calcule a nota que eles estavam tocando. (Obs.: A nota musical de Dó médio tem uma frequência de 261 Hz.)

4. Exercício

Filtragem e alisamento de Fourier

Nos recursos on-line encontrará um ficheiro chamado `dow.txt`. Este contém o valor diário de encerramento, para cada dia útil, do final de 2006 até o final de 2010 da Dow Jones Industrial Average, que é uma medida dos preços médios no mercado de ações dos EUA.

Escreva um programa para fazer o seguinte :

1. Leia os dados de `dow.txt` e mostre-os num gráfico.
2. Calcule os coeficientes da transformada de Fourier discreta dos dados usando a função `rfft` de `numpy.fft`, que produz uma matriz de $\frac{1}{2}N + 1$ números complexos.
3. Agora retenha apenas os primeiros 10% dos elementos dessa matriz (isto é, defina os últimos 90% como zero, mas mantenha os valores dos primeiros 10%) .
4. Calcule a transformada inversa de Fourier da matriz resultante, usando a função `irfft`, e trace-a no mesmo gráfico que os dados originais. Pode precisar variar as cores das duas curvas para se certificar de que ambas aparecem no gráfico. Comente o que observa. O que ocorre quando anula os coeficientes de Fourier?
5. Modifique seu programa para que ele anule todos menos os primeiros 2% dos coeficientes e execute-o novamente .

5. Exercício

Onda-quadrada

Se não fez o exercício 7.4, então deve fazê-lo antes deste.

A função $f(t)$ representa uma onda quadrada com amplitude 1 e frequência 1 Hz:

$$f(t) = \begin{cases} 1 & \text{se } \lfloor 2t \rfloor \text{ é par,} \\ -1 & \text{se } \lfloor 2t \rfloor \text{ é ímpar,} \end{cases} \quad (6.1)$$

onde $\lfloor x \rfloor$ significa x arredondado por defeito para o próximo inteiro. Vamos tentar suavizar essa função usando uma transformada de Fourier, como fizemos no exercício anterior. Escreva um programa que

crie uma matriz de $N = 1000$ elementos contendo mil amostras igualmente espaçadas de um único ciclo dessa onda quadrada. Calcule a transformada de Fourier discreta da matriz. Agora anule todos, exceto os dez primeiros coeficientes de Fourier, e depois inverta a transformada de Fourier novamente para recuperar o sinal suavizado. Faça um gráfico do resultado e nos mesmos eixos mostre também a onda quadrada original. Deve observar que o sinal não é simplesmente suavizado - há artefactos, oscilações nos resultados. Explique brevemente de onde eles vêm.

Artefactos semelhantes a estes surgem quando os coeficientes de Fourier são descartados em esquemas de compressão de áudio e vídeo, como os descritos na Secção 7.3.1 do livro, e são a principal fonte de imperfeições em imagens e sons digitalmente comprimidos.

Física Computacional

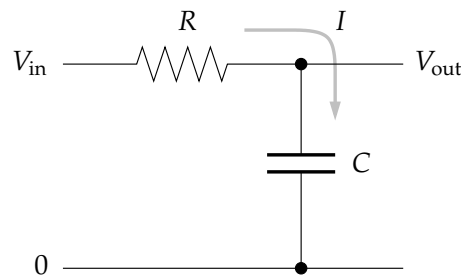
Ano lectivo 2017/2018

Folha 7 - Equações diferenciais ordinárias

1. Exercício

Um filtro passa-baixa

Aqui está um circuito eletrónico simples com um resistência e um condensador:



Este circuito funciona como um filtro passa-baixa: é aplicado um sinal à esquerda que sai filtrado à direita.

Usando a lei de Ohm e a lei do condensador e assumindo que a carga de saída tem uma impedância muito alta, de modo que uma quantidade insignificante de corrente flua através dela, podemos escrever as equações que governam este circuito como segue. Sendo I a corrente que flui através R e do condensador, e sendo Q a carga no condensador., então:

$$IR = V_{\text{in}} - V_{\text{out}}, \quad Q = CV_{\text{out}}, \quad I = \frac{dQ}{dt}.$$

Substituindo a segunda equação na terceira, e depois substituindo o resultado na primeira equação, descobrimos que $V_{\text{in}} - V_{\text{out}} = RC(dV_{\text{out}}/dt)$, ou equivalente

$$\frac{dV_{\text{out}}}{dt} = \frac{1}{RC}(V_{\text{in}} - V_{\text{out}}).$$

1. Escreva um programa (ou modifique um programa anterior) para resolver esta equação para $V_{\text{out}}(t)$ usando o método de Runge-Kutta de quarta ordem quando o sinal de entrada é uma onda-quadrada com frequência 1 e amplitude 1:

$$V_{\text{in}}(t) = \begin{cases} 1 & \text{se } \lfloor 2t \rfloor \text{ é par,} \\ -1 & \text{se } \lfloor 2t \rfloor \text{ é ímpar,} \end{cases} \quad (7.1)$$

onde $\lfloor x \rfloor$ significa x arredondado por defeito para o próximo inteiro. Use o programa para fazer gráficos da saída do circuito do filtro de $t = 0$ a $t = 10$ quando $RC = 0.01, 0.1$, e 1 , com condição inicial $V_{\text{out}}(0) = 0$. Terá que tomar uma decisão sobre qual valor de h a usar. Valores pequenos fornecem resultados mais precisos, mas o programa levará mais tempo para ser executado. Experimente uma variedade de valores diferentes e escolha um para os seus cálculos finais que lhe pareçam sensato.

- Baseado nos gráficos produzidos por esse programa, descreva o que vê e explique o que o circuito está fazendo.

Um programa semelhante ao que escreveu é usado na maioria dos aparelhos de som, para criar o efeito do controle de “baixos”. Antigamente, o controle de graves num aparelho estereofônico teria sido ligado a um filtro passa-baixo eletrônico no circuito do amplificador, mas hoje em dia há apenas um processador de computador que simula o comportamento do filtro de maneira semelhante ao seu programa.

2. Exercício

As equações de Lotka-Volterra

As equações de Lotka-Volterra são um modelo matemático de interações predador-presa entre espécies biológicas. Represente duas variáveis x e y como proporcionais ao tamanho das populações de duas espécies, tradicionalmente chamadas de “coelhos” (as presas) e “raposas” (os predadores). Pode pensar em x e y como sendo a população em milhares, digamos, para que $x = 2$ significa que existem 2000 coelhos. Estritamente os únicos valores permitidos de x e y seriam então múltiplos de 0,001, já que você só pode ter um número inteiro de coelhos ou raposas. Mas 0,001 é um espaçamento muito próximo de valores, logo é uma aproximação decente para tratar x e y como números reais contínuos, desde que nenhum deles fique muito próximo de zero.

No modelo de Lotka-Volterra, os coelhos reproduzem-se com uma taxa proporcional à sua população, mas são comidos pelas raposas a uma taxa proporcional à sua própria população e à população de raposas.:

$$\frac{dx}{dt} = \alpha x - \beta xy,$$

onde α e β são constantes. Ao mesmo tempo, as raposas reproduzem-se proporcionalmente à taxa com que comem coelhos - porque precisam de comida para crescer e se reproduzir -, mas também morrem de velhice a uma taxa proporcional à sua própria população.:

$$\frac{dy}{dt} = \gamma xy - \delta y,$$

onde γ e δ também são constantes.

- Escreva um programa para resolver essas equações usando o método Runge-Kutta de quarta ordem para o caso $\alpha = 1$, $\beta = \gamma = 0.5$, e $\delta = 2$, a partir da condição inicial $x = y = 2$. Faça o programa traçar um gráfico mostrando ambos x e y em função do tempo nos mesmos eixos de $t = 0$ a $t = 30$. (Nota: Observe que as equações diferenciais neste caso não dependem explicitamente do tempo t - na notação vetorial, o lado direito de cada equação é uma função $f(\vec{r})$ sem dependência em t . Pode, no entanto, achar conveniente definir uma função Python $f(\mathbf{r}, t)$ incluindo a variável tempo, de modo que seu programa tenha a mesma forma dos programas dados anteriormente neste capítulo. Não precisa fazer isso dessa maneira, mas pode evitar alguma confusão. Vários dos seguintes exercícios têm uma falta similar de dependência explícita no tempo.
- Descreva o que está acontecendo no sistema, em termos de coelhos e raposas.

3. Exercício

As equações de Lorenz

Um dos mais famosos sistemas de equações diferenciais da Física são as equações de Lorenz:

$$\frac{dx}{dt} = \sigma(y - x), \quad \frac{dy}{dt} = rx - y - xz, \quad \frac{dz}{dt} = xy - bz,$$

onde σ , r , e b são constantes. (Os nomes σ , r , e b são estranhas, mas tradicionais - elas são sempre usadas nessas equações por razões históricas.)

Essas equações foram primeiramente estudadas por Edward Lorenz em 1963, que as derivaram de um modelo simplificado de padrões climáticos. A razão dessa sua fama é que elas foram um dos primeiros exemplos incontestáveis de *caos determinístico*, a ocorrência de movimento aparentemente aleatório, embora não haja aleatoriedade incorporada nas equações. Encontramos um exemplo diferente de caos no mapa logístico do Exercício 3.6.

1. Escreva um programa para resolver as equações de Lorenz para o caso $\sigma = 10$, $r = 28$, e $b = \frac{8}{3}$ no intervalo $t = 0$ a $t = 50$ com condições iniciais $(x, y, z) = (0, 1, 0)$. Faça esse programa traçar um gráfico de y como uma função do tempo. Observe a natureza imprevisível do movimento.
2. Modifique esse programa para produzir um gráfico de z em função de x . Deve observar uma imagem do famoso “atrator estranho” das equações de Lorenz, um entrelaçamento em forma de borboleta que nunca se repete.

4. Exercício

Movimento não-linear do pêndulo

Com base nos resultados do Exemplo 8.6, calcule o movimento não-linear de um pêndulo como segue.

1. Escreva um programa para resolver as duas equações de primeira ordem, Eqs. (8.45) e (8.46), usando o método de quarta ordem de Runge-Kutta para um pêndulo com um comprimento de 10 cm. Use este programa para calcular o ângulo θ de deslocamento durante vários períodos de oscilação do pêndulo, quando é libertado a partir da posição $\theta = 179^\circ$ da vertical. Faça um gráfico de θ em função do tempo.
2. Estenda este programa para criar uma animação do movimento do pêndulo. Esta animação deve, no mínimo, incluir uma representação da massa em movimento e do fio que a suspende.

5. Exercício

O pêndulo forçado

Um pêndulo como o do exercício anterior pode ser forçado, por exemplo, exercendo uma pequena força oscilante horizontalmente sobre a massa. Então a equação de movimento para o pêndulo fica

$$\frac{d^2\theta}{dt^2} = -\frac{g}{\ell} \sin \theta + C \cos \theta \sin \Omega t,$$

onde C e Ω são constantes.

1. Escreva um programa para resolver esta equação para θ em função do tempo com $\ell = 10$ cm, $C = 2 \text{ s}^{-2}$ e $\Omega = 5 \text{ s}^{-1}$ e trace essa função de $t = 0$ a $t = 100$ s. Comece o pêndulo em repouso com $\theta = 0$ e $d\theta/dt = 0$.
2. Altere o valor de Ω , mantendo o valor de C , para encontrar um valor para o qual o pêndulo entra em ressonância com a força excitadora e oscila amplamente de um lado para o outro. Faça um gráfico para este caso também.

6. Exercício

Osciladores harmônicos e anarmônicos

O oscilador harmônico simples surge em muitos problemas físicos, em mecânica, eletricidade e magnetismo, e física da matéria condensada, entre outras áreas. Considere a equação padrão do oscilador

$$\frac{d^2x}{dt^2} = -\omega^2 x.$$

1. Transforme esta equação de segunda ordem em duas equações de primeira ordem acopladas. Em seguida, escreva um programa para resolvê-las para o caso $\omega = 1$ no intervalo de $t = 0$ a $t = 50$. Uma equação de segunda ordem requer duas condições iniciais, uma para x e outra para a sua derivada. Para este problema use $x = 1$ e $dx/dt = 0$ como condições iniciais. Faça esse programa traçar um gráfico mostrando o valor de x em função do tempo.
2. Agora, aumente a amplitude das oscilações fazendo o valor inicial de x maior - digamos $x = 2$ - e confirme que o período das oscilações permanece mais ou menos o mesmo.

3. Modifique esse programa para resolver o movimento do oscilador anarmônico descrito pela equação

$$\frac{d^2x}{dt^2} = -\omega^2 x^3.$$

Novamente faça $\omega = 1$ com condições iniciais $x = 1$ e $dx/dt = 0$ e trace um gráfico do movimento do oscilador. Mais uma vez, aumente a amplitude. Deve observar que as oscilações são mais rápidas para amplitudes mais altas.

4. Modifique esse programa para que, em vez de traçar x em função de t , represente dx/dt em função de x , ou seja, a "velocidade" do oscilador em função da sua "posição". Esse gráfico é chamado de *trajetória no espaço de fase*.
5. O *oscilador de Van der Pol*, que aparece em circuitos eletrônicos e em física do laser, é descrito pela equação

$$\frac{d^2x}{dt^2} - \mu(1 - x^2) \frac{dx}{dt} + \omega^2 x = 0.$$

Modifique o programa anterior para resolver esta equação de $t = 0$ a $t = 20$ e, portanto, fazer um gráfico no espaço de fase da trajetória para o oscilador de Van der Pol com $\omega = 1$, $\mu = 1$, e condições iniciais $x = 1$ e $dx/dt = 0$. Experimente também para $\mu = 2$ e $\mu = 4$ (ainda com $\omega = 1$). Certifique-se que usa um valor suficientemente pequeno para o intervalo de tempo h de forma a obter um gráfico no espaço de fase suave e preciso.