Introdução ao estudo das variações

" É na variação
que se encontra o prazer."

Deduzir a equação de movimento para um ponto sobre o qual atua apenas a força da gravidade. Discutir o princípio de Fermat.

1. Introdução

O objetivo principal destas notas é, sem sombra de dúvidas, apresentar de maneira quase auto consistente algumas noções do cálculo de variações.

O estudo dos problemas através de cálculo variacional data do século XVII quando Bernoulli propôs o célebre problema da *braquistócrona*.

Caminharemos a passos largos a fim de atingirmos o ponto final, omitiremos várias demonstrações, ou seja, como pretexto, resolver o problema proposto e, enviando o leitor interessado nas demonstrações para a bibliografia.

Estas notas estão direcionadas para a mecânica, isto é, métodos indiretos do cálculo variacional. Existem, também, os métodos chamados diretos dentre eles; o método das diferenças finitas[1] e o método de Ritz[2], também chamado de método de Rayleigh-Ritz. Como exemplo, discutiremos brevemente o método de Ritz aplicado a um problema mecânico-quântico, mais especificamente o problema dos níveis de energia do átomo de hidrogênio.

Enfatizamos que este estudo está direcionado para problemas que emergem da física-matemática, especificamente no contexto da mecânica daí, discutirmos as formulações lagrangiana, hamiltoniana e o princípio de mínima ação. Enfim, resolvemos o problema proposto utilizando-se o princípio de mínima ação e a formulação lagrangiana na aplicação de um problema envolvendo um sólido de revolução.

[1] E. Isaacson and H. B. Keller, *Analysis of Numerical Methods*, John Wiley, New York, (1966).

[2] R. L. Burden and J. D. Faires, *Numerical Analysis*, PWS-KENT Publishing Company, Boston, (1989).

2. Máximos e Mínimos - Extremos

Discutiremos neste parágrafo os extremos sem e com restrições. Para extremos sem restrições apresentaremos o método do gradiente e no caso das restrições o método dos multiplicadores de Lagrange.[3]

i) Método do Gradiente - Sem restrições (escolhido o passo)

O problema se resume em encontrar o mínimo de uma dada função $f(x) = f(x_1, x_2, \ldots, x_n)$, sem restrições. Consideremos, para tanto, um ponto arbitrário $x^0 = (x_1^0, x_2^0, \ldots, x_n^0)$ e calculemos, neste ponto, o gradiente da função $f(x)$, ou seja

$$\operatorname{grad} f(x)\,|_{x=x^0} = \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial}{\partial x_i} f(x^0)\, e_i$$

onde $e_1, e_2, \ldots, e_n$ é uma base ortonormal no espaço $\mathcal{R}^n$.

Se $\operatorname{grad} f(x^0)$ é diferente de zero tomamos

$$x_k^1 = x_k^0 - h_1 \Big(\operatorname{grad} f(x^0), e_k\Big) \qquad k = 1, 2, \ldots, n$$

sendo $h_1 > 0$, suficientemente pequeno. Admitamos ainda que $\operatorname{grad} f(x^1)$ também seja diferente de zero, escolhemos

$$x_k^2 = x_k^1 - h_2 \Big(\operatorname{grad} f(x^1), e_k\Big) \qquad k = 1, 2, \ldots, n$$

com $h_2 > 0$ e suficientemente pequeno.

Enfim, por um processo iterativo obtemos

$$x_k^n = x_k^{n-1} - h_n \Big(\operatorname{grad} f(x^{n-1}), e_k\Big) \qquad k = 1, 2, \ldots, n$$

com $h_n > 0$ ao qual impomos a condição que $\operatorname{grad} f(x^{n-1})$ é distinto de zero.

Ao se cumprirem as restrições obteremos uma seqüência decrescente $\{f(x^n)\}$. Se $x^n \to \overline{x}$ e se $\overline{x}$ for um ponto de mínimo de $f(x)$, então

$$\operatorname{grad} f(x^n) \to 0 \quad \text{com} \quad n \to \infty$$

Exemplo 1 Encontrar o ponto de mínimo da função $f(x, y) = x^2 + y^2$.

[3] E. W. Swokowski, *Cálculo com Geometria Analítica*, Volume 2, Makron Books, São Paulo, (1995).

Escolhamos, a título de primeira aproximação, por exemplo, o ponto $A(1,1)$, isto é, tomemos $x^0 = 1$ e $y^0 = 1$.

Sendo $\hat{\imath}$ e $\hat{\jmath}$ os versores ortogonais temos que:

$$\operatorname{grad} f(x)\Big|_{\substack{x^0 = 1 \\ y^0 = 1}} = 2\hat{\imath} + 2\hat{\jmath}.$$

Como este gradiente é diferente de zero, escolhemos

$$\begin{aligned} x^1 &= x^0 - 2x^0 h = 1 - 2h \\ y^1 &= y^0 - 2y^0 h = 1 - 2h \end{aligned}$$

onde $h > 0$, logo, para $h \neq 1/2$ podemos escrever

$$\operatorname{grad} f(x)\Big|_{\substack{x = x^1 \\ y = y^1}} = 2(1-2h)\hat{\imath} + 2(1-2h)\hat{\jmath}$$

e, como também é diferente de zero escolhamos, agora, x^2 e y^2 tais que

$$\begin{aligned} x^2 &= x^1 - 2x^1 h = (1-2h)^2 \\ y^2 &= y^1 - 2y^1 h = (1-2h)^2. \end{aligned}$$

Então iterando-se podemos escrever

$$\begin{aligned} x^n &= (1-2h)^n \\ y^n &= (1-2h)^n. \end{aligned}$$

Ao escolhermos $0 < h \neq 1/2 < 1$, a seqüência dos pontos $M_n(x^n, y^n)$ convergirá para o ponto de mínimo $M(0,0)$ da função dada.

Enfim, note-se que

$$\operatorname{grad} f(x^n, y^n) = 2(1-2h)^n \hat{\imath} + 2(1-2h)^n \hat{\jmath} \to 0$$

quando $n \to \infty$.

Enfatizamos que este método é para discutir um ponto de mínimo. Se tivéssemos escolhido por exemplo $h = 1/2$ em uma das etapas, obteríamos $\operatorname{grad} f(x^1, y^1) = 0$ e a seqüência estacionária, ou seja, uma seqüência estacionária $\{0\}$ cujo limite é o zero.

ii) Multiplicadores de Lagrange (Com restrições)

Suponhamos que $z = f(x_1, x_2, \ldots, x_n)$ seja uma função de n variáveis definida num certo domínio D do espaço E^n. Admitamos, ademais, que $x_1, x_2, \ldots, x_n$ estão relacionadas por m equações, com $m < n$, isto é

$$\phi_1(x_1, x_2, \ldots, x_n) = 0$$
$$\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots$$
$$\phi_m(x_1, x_2, \ldots, x_n) = 0$$

chamadas condições suplementares.

Seja $x^{(0)} = (x_1^0, x_2^0, \ldots, x_n^0)$ um ponto interior ao domínio D. Dizemos que $f(x_1, x_2, \ldots, x_n)$ tem um máximo condicionado, sujeito às condições suplementares, se a desigualdade

$$f(x_1, x_2, \ldots, x_n) \leq f(x_1^0, x_2^0, \ldots, x_n^0)$$

se cumprir numa certa vizinhança de $(x_1^0, x_2^0, \ldots, x_n^0)$, caso contrário, isto é

$$f(x_1, x_2, \ldots, x_n) \geq f(x_1^0, x_2^0, \ldots, x_n^0)$$

o ponto será de mínimo. Note-se que os pontos $(x_1, x_2, \ldots, x_n)$ e $(x_1^0, x_2^0, \ldots, x_n^0)$ estão sujeitos às condições suplementares.

Agora passemos a discutir os multiplicadores de Lagrange propriamente ditos. Então, admitamos que:

a) As funções $f(x_1, x_2, \ldots, x_n)$ e $\phi_i(x_1, x_2, \ldots, x_n)$ para $i = 1, 2, \ldots, m$ possuam derivadas parciais primeiras no domínio D.

b) $m < n$ e o posto da matriz $||\partial\phi_i/\partial x_j||$ para $i = 1, 2, \ldots, m$ e $j = 1, 2, \ldots, n$, é igual a m em qualquer ponto do domínio D.

Chama-se função de Lagrange a seguinte função

$$\Phi = f + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i \phi_i$$

onde os λ_i são fatores constantes indefinidos, chamados multiplicadores de Lagrange.

Consideremos o sistema de equações

$$\frac{\partial\Phi}{\partial x_1} = 0\,, \quad \frac{\partial\Phi}{\partial x_2} = 0\,, \quad \cdots, \quad \frac{\partial\Phi}{\partial x_n} = 0$$

e as m condições suplementares

$$\phi_1 = 0\,, \quad \phi_2 = 0\,, \quad \cdots \quad , \phi_m = 0.$$

Determinam-se os valores dos multiplicadores de Lagrange $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_m$ e das coordenadas $(x_1, x_2, \ldots, x_n)$ dos pontos críticos, a partir dos pontos candidatos a extremante.

As relações $\partial\Phi/\partial x_j = 0$ para $j = 1, 2, \ldots, n$ deverão necessariamente ser cumpridas a fim de que ocorra um extremo tanto da função de Lagrange quanto da função em estudo $f(x_1, x_2, \ldots, x_n)$.

Se no ponto $(x_1^0, x_2^0, \ldots, x_n^0)$ ocorrer um extremo condicionado da função $f(x_1, x_2, \ldots, x_n)$ este ponto será estacionário para a função de Lagrange, isto é, neste ponto se cumprirá $\partial\Phi/\partial x_j = 0$ com $j = 1, 2, \ldots n$.

A fim de investigar o caráter de um ponto estacionário $(x_1^0, x_2^0, \ldots, x_n^0)$ da função de Lagrange $\Phi(x_1, x_2, \ldots, x_n)$ devemos examinar a seguinte forma quadrática

$$B(dx_1, dx_2, \ldots, dx_{n-m}) = \sum_{i,j=1}^{n-m} b_{ij} dx_i\, dx_j$$

obtida da segunda diferencial da função de Lagrange no ponto em questão e das relações suplementares

$$\frac{\partial\phi_i}{\partial x_1} dx_1 + \frac{\partial\phi_i}{\partial x_2} dx_2 + \cdots + \frac{\partial\phi_i}{\partial x_n} dx_n = 0$$

com $i = 1, 2, \ldots, m$.

Se a forma quadrática for definida, então no ponto $(x_1^0, x_2^0, \ldots, x_n^0)$ ocorrerá um extremo estrito de $f(x_1, x_2, \ldots, x_n)$, sujeito às respectivas condições suplementares, a saber:

Forma quadrática negativa definida	$\rightarrow$	máximo estrito
Forma quadrática positiva definida	$\rightarrow$	mínimo estrito
Forma quadrática indefinida	$\rightarrow$	não ocorre extremo .

É óbvio que a ocorrência num ponto $(x_1^0, x_2^0, \ldots, x_n^0)$ de um máximo (mínimo) incondicional da função de Lagrange para os valores encontrados de $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n$ implica na ocorrência de um máximo (mínimo) da função $z = f(x_1, x_2, \ldots, x_n)$ com as condições suplementares [4]

$$\phi_i(x_1, x_2, \ldots, x_n) = 0$$

com $i = 1, 2, \ldots, m$.

[4]Num ponto estacionário pode ocorrer um extremo condicionado de $f(x_1, x_2, \ldots, x_n)$ sem que ocorra um extremo da correspondente função de Lagrange $\Phi(x_1, x_2, \ldots, x_n)$.

Exemplo 2 Encontrar o extremo da função $f(x,y,z) = xyz$ com as seguintes condições suplementares

$$\begin{array}{l} \phi_1(x,y,z) = x + y - z - 3 = 0 \\ \phi_2(x,y,z) = x - y - z - 8 = 0. \end{array}$$

Primeiramente escrevamos a função de Lagrange como abaixo

$$\Phi(x,y,z) = xyz + \lambda_1(x + y - z - 3) + \lambda_2(x - y - z - 8).$$

Passemos agora a escrever o sistema de equações para determinar os multiplicadores de Lagrange e as coordenadas dos pontos estacionários

$$\begin{array}{rcl} \partial\Phi/\partial x &=& yz + \lambda_1 + \lambda_2 = 0 \\ \partial\Phi/\partial y &=& xz + \lambda_1 - \lambda_2 = 0 \\ \partial\Phi/\partial z &=& xy - \lambda_1 - \lambda_2 = 0 \\ && x + y - z - 3 = 0 \\ && x - y - z - 8 = 0. \end{array}$$

Então, resolvendo o sistema obtemos para os multiplicadores de Lagrange

$$\lambda_1 = 11/32 \qquad \text{e} \qquad \lambda_2 = -231/32$$

e para as coordenadas do ponto estacionário

$$x = 11/4, \qquad y = -5/2, \qquad z = -11/4.$$

Vamos agora escrever a forma quadrática a partir da segunda diferencial da função de Lagrange, isto é

$$d^2\Phi = \frac{\partial^2\Phi}{\partial x^2}dx^2 + \frac{\partial^2\Phi}{\partial y^2}dy^2 + \frac{\partial^2\Phi}{\partial z^2}dz^2 + 2\left(\frac{\partial^2\Phi}{\partial x\partial y}dxdy + \frac{\partial^2\Phi}{\partial x\partial z}dxdz + \frac{\partial^2\Phi}{\partial y\partial z}dydz\right)$$

que em nosso caso se resume à seguinte expressão

$$d^2\Phi = 2z\,dx\,dy + 2y\,dx\,dz + 2x\,dy\,dz.$$

Agora, das relações $x + y - z - 3 = 0$ e $x - y - z - 8 = 0$ obtemos $dx + dy - dz = 0$ e $dx - dy - dz = 0$ de onde $dy = 0$ e $dx = dz$ isto é podemos escrever para a forma quadrática

$$B(dx) = d^2\Phi = 2y\,dx^2$$

que calculada no ponto estacionário $(11/4, -5/2, -11/4)$ fornece

$$B = 2(-5/2)dx^2 = -5dx^2 < 0$$

logo um ponto de máximo dado por

$$f_{\max} = (11/4)(-5/2)(-11/4) = 605/32.$$

Do lar 1 Determine os extremos da função

$$f(x, y) = \cos^2 x + \cos^2 y$$

sujeito à condição $y - x = \pi/4$.

3. Funcionais

Neste parágrafo discutiremos alguns problemas do cálculo de variações chamados clássicos, em particular: o problema da braquistócrona e o caso da geodésicas.
Definição Denomina-se funcional uma correspondência J que associa à cada função $y(x)$ de uma classe M um número, denotado por, $J[y(x)]$. A classe M chama-se domínio do funcional.

Exemplo 3 Um funcional no espaço[5] $C[0, 1]$ das funções contínuas em $[0, 1]$ se dá pela operação

$$J[y(x)] = \int_0^1 y(x)\, dx$$

que associa um número a cada $y(x) \in C[0, 1]$, isto é, que faz corresponder o número $J[y(x)]$ a cada particular $y(x)$. Por exemplo:

$$y(x) = 1 \qquad J[1] = \int_0^1 dx = 1$$

$$y(x) = \mathrm{e}^x \qquad J[\mathrm{e}^x] = \int_0^1 \mathrm{e}^x dx = \mathrm{e} - 1$$

$$y(x) = \cos\pi x \qquad J[\cos\pi x] = \int_0^1 \cos\pi x\, dx = 0.$$

[5] $C[a, b]$ denota o espaço constituído pela totalidade das funções $y(x)$ contínuas sobre $[a, b]$ e munido da norma $||y||_C = \underset{a \leq x \leq b}{\sup y(x)}$.

3.1 Problemas básicos do cálculo variacional

Vamos, aqui, apresentar a equação de Euler, resolver o problema da braquistócrona e o problema envolvendo as chamadas linhas geodésicas.

i) Equação de Euler

Seja $F(x, y, y')$ uma função que admite derivadas parciais contínuas até segunda ordem inclusive, em relação a todos argumentos.

O problema consiste em encontrar uma função $y(x)$ continuamente diferenciável e sujeita às condições de fronteira,

$$y(a) = A \qquad \text{e} \qquad y(b) = B$$

que é um extremante fraco do funcional

$$J[y(x)] = \int_a^b F(x, y, y')\, dx.$$

Antes de prosseguirmos com a discussão do problema, passemos a discutir os conceitos de máximo e mínimo fortes, que utilizaremos mais adiante.

Dizemos que $J[y(x)]$ tem um máximo forte[6] em $y = y_0(x)$ se para qualquer função admissível $y = y(x)$ compreendida numa certa ϵ-vizinhança[7] de ordem zero de $y = y_0(x)$ se se cumprir

$$J[y(x)] \leq J[y_0(x)]$$

Dizemos que $J[y(x)]$ tem um máximo fraco em $y = y_0(x)$ se para toda função admissível $y(x)$ compreendida numa certa ϵ-vizinhança de ordem um de $y = y_0(x)$ se se cumprir

$$J[y(x)] \leq J[y_0(x)].$$

Voltemos à equação de Euler. Trata-se, em outras palavras, da determinação do ponto do domínio constituído pelas curvas lisas[8] ligando os pontos $P_1(a, A)$ e $P_2(b, B)$ em que o funcional acima assume um extremo fraco.

[6] Os conceitos de mínimo forte ou fraco são simétricos, respectivamente, aos acima definidos. Os máximos e os mínimos (fortes e fracos) assim definidos constituem os chamados extremos relativos.

[7] Chama-se ϵ-vizinhança de ordem n de uma função $y = f_1(x)$ a totalidade das funções $y = f(x)$ satisfazendo a condição $\mu_n = \mu_n[f(x), f_1(x)] < \epsilon$. Assim, a ϵ-vizinhança forte de uma função contínua $y = f(x)$ compreenderá as funções contínuas cujos gráficos não se desviarem do gráfico de $y = f(x)$ por mais de ϵ.

[8] É de se mencionar que duas funções $y = y(x)$ e $y = y_1(x)$ dadas em $[a, b]$ serão próximas na métrica de ordem k se $|y(x) - y_1(x)|$; $|y'(x) - y_1'(x)|; \cdots ; |y^{(k)}(x) - y_1^{(k)}(x)|$.

Teorema: Para que uma função $y = y(x)$ seja um extremante do funcional acima, no domínio das funções continuamente diferenciáveis, satisfazendo as condições de fronteira é necessário que $y = y(x)$ satisfaça a chamada equação de Euler

$$F_y - \frac{d}{dx}F_{y'} = 0.$$

As soluções dessa equação são chamadas *lagrangianas* associadas ao funcional.[9] As soluções satisfazendo as condições de fronteira constituem os pontos estacionários ou críticos do funcional com as condições de fronteira.

Passemos, agora, a desenvolver a equação de Euler. Então, consideremos as funções $\phi(x, y, y')$ e $\psi(x, y, y')$ tais que

$$\frac{\partial F}{\partial y} = \phi(x, y, y') \qquad \text{e} \qquad \frac{\partial F}{\partial y'} = \psi(x, y, y').$$

Substituindo-se as expressões acima na equação de Euler temos

$$\frac{d}{dx}\left(\frac{\partial F}{\partial y'}\right) = \frac{d\psi}{dx} = \frac{\partial \psi}{\partial x} + \frac{\partial \psi}{\partial y}\frac{dy}{dx} + \frac{\partial \psi}{\partial y'}\frac{d^2 y}{dx^2} =$$

$$= \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial F}{\partial y'}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{\partial F}{\partial y'}\right)y' + \frac{\partial}{\partial y'}\left(\frac{\partial F}{\partial y'}\right)y'' =$$

$$= \frac{\partial^2 F}{\partial x \partial y'} + \frac{\partial^2 F}{\partial y \partial y'}y' + \frac{\partial^2 F}{\partial y'^2}y''$$

de onde podemos escrever a chamada equação de Euler-Lagrange

$$\frac{\partial^2 F}{\partial y'^2}y'' + \frac{\partial^2 F}{\partial y \partial y'}y' + \frac{\partial^2 F}{\partial x \partial y'} - \frac{\partial F}{\partial y} = 0.$$

Exemplo 4 Determinar as lagrangianas extremantes do funcional

$$J[y(x)] = \int_1^2 (y'^2 - 2xy)dx$$

com as condições de fronteira $y(1) = 0$ e $y(2) = -1$.

À função $F(x, y, y') = (y')^2 - 2xy$ corresponde a seguinte equação de Euler

$$\begin{array}{lll} F_{y'} = 2y' & F_{y'y'} = 2 & F_x = -2y \\ F_y = -2x & F_{yy'} = 0 & F_{xy'} = 0 \end{array}$$

[9] H. Goldstein, *Classical Mechanics*, Addison-Wesley, Massachusetts, (1965).

logo

$$\frac{d^2}{dx^2}y(x) + x = 0$$

cuja solução é dada por

$$y(x) = -\frac{1}{6}x^3 + c_1 x + c_2$$

e utilizando as condições de contorno temos

$$c_1 = \frac{1}{6} \qquad \text{e} \qquad c_2 = 0$$

de onde, um extremo poderá ocorrer apenas em

$$y(x) = \frac{x}{6}(1 - x^2).$$

Exemplo 5: Estudar o comportamento do funcional

$$J[y(x)] = \int_0^a \sqrt{1 + (y')^2}\,\frac{dx}{\sqrt{y}}$$

no domínio das funções sujeitas às condições $y(0) = 0$ e $y(a) = y_1$.

Como o integrando é explicitamente independente de x vale

$$F - y'\,F_{y'} = c$$

onde c é uma constante.

Vamos aproveitar este exemplo para discutir a integrabilidade da equação de Euler, isto é:

i) F não depende de $y' \Longrightarrow F = F(x, y)$ logo $F_y(x, y) = 0$
ii) F depende apenas de $y' \Longrightarrow F = F(y')$ logo $F_{y'y'}y'' = 0$
iii) F não depende explicitamente de $y \Longrightarrow F = F(x, y')$ logo $\dfrac{d}{dx}F_{y'}(x, y') = 0$
iv) F não depende explicitamente de $x \Longrightarrow F = F(y, y')$ logo $\dfrac{d}{dx}\left(F - y'F_{y'}\right) = 0.$

Em nosso exemplo estamos no caso (iv), logo podemos escrever

$$\frac{\sqrt{1 + (y')^2}}{\sqrt{y}} - \frac{y'^2}{\sqrt{y}\sqrt{1 + (y')^2}} = c$$

ou ainda

$$y(1+(y')^2)=c_1.$$

onde c_1 é uma outra constante tal que $c_1 = 1/c^2$.

Vamos passar para uma representação paramétrica, isto é, consideremos

$$y' = \text{cotan}(t/2)$$

de onde podemos escrever

$$dx = \frac{dy}{\text{cotan}(t/2)} = c_1 \text{sen}^2(t/2)\, dt.$$

Integrando-se temos

$$x = c_1 \int \left(\frac{1-\text{cos}t}{2}\right) dt = \frac{c_1}{2}(t - \text{sen}t) + c_2$$

onde c_2 é uma constante de integração, chegando-se assim ao sistema bi-paramétrico de ciclóides[10]

$$\begin{aligned} x &= C(t-\text{sen}t)+D \\ y &= C(1-\text{cos}t) \end{aligned}$$

com C e D constantes.

Enfim, as curvas satisfazendo a condição inicial $y(0)=0$ constituirão a família

$$\begin{aligned} x &= C(t-\text{sen}t) \\ y &= C(1-\text{cos}t). \end{aligned}$$

Passando pelo ponto $P(a, y_1)$ teremos uma certa ciclóide[11] tal que

$$\begin{aligned} x &= R(t-\text{sen}t) \\ y &= R(1-\text{cos}t) \end{aligned}$$

sendo R determinado de modo único ao impormos a restrição $a < 2\pi R$.

---

[10] Curva traçada por um ponto sobre o aro de uma roda, rolando no eixo x.

[11] E. W. Swokowski, *Cálculo com Geometria Analítica*, Makron Books, São Paulo, (1991).

Fig.1 Ciclóide

É de se notar que qualquer que seja o valor atribuído a y' temos

$$F_{y'y'} = \frac{1}{\sqrt{y}(1+(y')^2)^{3/2}} > 0$$

isto é, a ciclóide é um minimante associado ao funcional.

ii) Problema da braquistócrona

Este problema foi proposto e resolvido por Bernoulli em 1696. É um problema que a menos de constantes recai no problema anterior.

Considere a figura abaixo.

Fig.2 Braquistócrona

O problema consiste em determinar a trajetória de uma partícula de massa m que, partindo do repouso e sob ação única da força da gravidade, passa de um ponto fixo A a um ponto também fixo, B num tempo mínimo.

A velocidade V da partícula se expressará, nestas condições, através de sua ordenada y por[12]

$$V = \sqrt{2gy}$$

onde g é o módulo da aceleração gravitacional e y é a ordenada num dado instante de tempo. Note que independe da massa.

Se $y = y(x)$ for a trajetória da partícula e ds denotar o elemento de arco então $V = ds/dt$ logo

$$dt = \frac{ds}{V} = \frac{\sqrt{1+y'^2}}{\sqrt{2gy}}dx.$$

[12]Devido à conservação da energia mecânica.

Integrando-se temos que o tempo T é dado por

$$T = \int_0^a \frac{\sqrt{1+y'^2}}{\sqrt{2gy}} dx.$$

De onde, o problema se reduz à determinação do minimante do funcional, que difere do exemplo anterior apenas por um fator constante.

iii) Linhas geodésicas

Chama-se geodésica sobre uma superfície toda curva de menor comprimento unindo dois pontos arbitrários. As geodésicas são as soluções de Euler para o problema da minimização do caminho entre pontos arbitrários.

Dada a parametrização

$$u = u(t) \qquad \text{e} \qquad v = v(t)$$

de uma curva sobre a superfície $\vec{r} = \vec{r}(u,v)$, o comprimento do arco correspondente aos valores do parâmetro compreendido entre t_0 e t é

$$J[u,v] = \int_{t_0}^{t_1} \sqrt{Eu'^2 + 2Fu'v' + Gv'^2} dt$$

onde E, F e G são os coeficientes da primeira forma quadrática fundamental da superfície $\vec{r} = \vec{r}(u,v)$, ou seja

$$E \equiv \left(\frac{\partial \vec{r}}{\partial u} \cdot \frac{\partial \vec{r}}{\partial u} \right) \qquad F \equiv \left(\frac{\partial \vec{r}}{\partial u} \cdot \frac{\partial \vec{r}}{\partial v} \right) \qquad G \equiv \left(\frac{\partial \vec{r}}{\partial v} \cdot \frac{\partial \vec{r}}{\partial v} \right)$$

onde $(\vec{a} \cdot \vec{b})$ é oproduto escalar entre os vetores $\vec{a}$ e $\vec{b}$.

O sistema das equações de Euler para o funcional é

$$\frac{E_u u'^2 + 2F_u u'v' + G_u v'^2}{\sqrt{s}} - \frac{d}{dt}\left[\frac{2(E\,u' + F\,v')}{\sqrt{s}} \right] = 0$$

e

$$\frac{E_v u'^2 + 2F_v u'v' + G_v v'^2}{\sqrt{s}} - \frac{d}{dt}\left[\frac{2(F\,u' + G\,v')}{\sqrt{s}} \right] = 0$$

onde $s = E\,u'^2 + 2F\,u'\,v' + G\,v'^2$.

Exemplo 6 Determinar as geodésicas sobre a esfera de raio R.

Expressemos, por comodidade, a função vetorial que define a superfície através das coordenadas esféricas por

$$\vec{r} = \vec{r}(\phi, \theta) = x(\phi, \theta)\hat{\imath} + y(\phi, \theta)\hat{\jmath} + z(\phi, \theta)\hat{k}$$

onde

$$\begin{aligned} x &= R\,\cos\phi\,\mathrm{sen}\theta \\ y &= R\,\mathrm{sen}\phi\,\mathrm{sen}\theta \\ z &= R\,\cos\theta. \end{aligned}$$

Os coeficientes da respectiva forma quadrática são dados por

$$\begin{aligned} E &= (r_\phi \cdot r_\phi) = R^2\mathrm{sen}^2\theta \\ F &= (r_\theta \cdot r_\phi) = 0 \\ G &= (r_\theta \cdot r_\theta) = R^2. \end{aligned}$$

Se procurarmos a equação das geodésicas na forma $\phi = \phi(\theta)$, isto é θ como parâmetro, o funcional

$$J[u, v] = \int_{t_0}^{t_1} \sqrt{E\,u'^2 + 2F\,u'\,v' + G\,v'^2}dt$$

toma a seguinte forma

$$J[\phi(\theta)] = R\int_{\theta_1}^{\theta_2} \sqrt{1 + \mathrm{sen}^2\theta\,\phi'^2(\theta)}d\theta.$$

Como o integrando não depende explicitamente de $\phi(\theta)$ a equação de Euler é dada por

$$\frac{d}{d\theta}f_{\phi'} = \frac{d}{d\theta}\left[\frac{\mathrm{sen}^2\theta\,\phi'(\theta)}{\sqrt{1 + \mathrm{sen}^2\theta\,\phi'^2(\theta)}}\right] = 0$$

logo

$$\frac{\mathrm{sen}^2\theta\,\phi'(\theta)}{\sqrt{1 + \mathrm{sen}^2\theta\,\phi'^2(\theta)}} = c_1$$

onde c_1 é uma constante de integração.

Da expressão acima podemos explicitar $\phi'(\theta)$, isto é

$$\phi'(\theta) = \frac{c_1/\mathrm{sen}^2\theta}{\sqrt{1 - c_1^2/\mathrm{sen}^2\theta}} = -c_1\frac{d(\mathrm{cotan}\theta)}{\sqrt{(1 - c_1^2) - c_1^2\mathrm{cotan}^2\theta}}.$$

Integrando-se a expressão acima obtemos

$$\phi(\theta) = \arccos(c\,\mathrm{cotan}\theta) + c_2$$

onde $c = c_1/\sqrt{1-c_1^2}$ e c_2 é uma constante de integração.

Logo podemos escrever a expressão acima como

$$\mathrm{cotan}\theta = A\cos\phi(\theta) + B\,\mathrm{sen}\phi(\theta)$$

onde $A\,C = \cos c_2$ e $B\,C = \mathrm{sen}c_2$.

Multiplicando-se a relação anterior por $R\,\mathrm{sen}\theta$ temos

$$R\cos\theta = A\,R\cos\phi\,\mathrm{sen}\theta + B\,R\,\mathrm{sen}\phi\,\mathrm{sen}\theta$$

ou, em coordenadas cartesianas

$$z = A\,x + B\,y$$

que é a equação de um plano que, passando pelo centro intercepta a esfera segundo uma circunferência de grande círculo. Os arcos de tais circunferências serão as geodésicas.

4. Forma canônica da equação de Euler

Consideremos o seguinte funcional

$$J[y_1, y_2, \ldots, y_n] = \int_{x_1}^{x_2} F(x, y_1, y_2, \ldots, y_n, y_1', y_2', \ldots, y_n')dx$$

e as equações de Euler

$$F_{y_k} - \frac{d}{dx}\left(F_{y_k'}\right) = 0$$

para $k = 1, 2, \ldots, n$.

No caso em que o seguinte determinante

$$\begin{vmatrix} F_{y_1'y_1'} & F_{y_1'y_2'} & \cdots\cdots & F_{y_1'y_n'} \\ F_{y_2'y_1'} & F_{y_2'y_2'} & \cdots\cdots & F_{y_2'y_n'} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ F_{y_n'y_1'} & F_{y_n'y_2'} & \cdots\cdots & F_{y_n'y_n'} \end{vmatrix}$$

for diferente de zero, podemos escrever as equações como

$$F_{y_k'} = p_k$$

com $k = 1, 2, \ldots, n$, em relação a y_k', expressando estes últimos através de $x, y_1, y_2, \ldots, y_n, p_1, p_2, \ldots, p_n$, $y_k' = \phi_k(x, y_1, y_2, \ldots, y_n, p_1, p_2, \ldots, p_n)$. Em termos da chamada função de Hamilton, também conhecida pelo nome de hamiltoniana $\mathcal{H}(x, y_1, y_2, \ldots, y_n, p_1, p_2, \ldots, p_n)$ definida como[13]

$$\mathcal{H} = \{-F(x, y_1, y_2, \ldots, y_n, y_1', y_2', \ldots, y_n') +$$

$$+ \sum_{k=1}^{n} y_k' \;\; F_{y_k'}(x, y_1, y_2, \ldots, y_n, y_1', y_2', \ldots, y_n')\Big\}_{y_k' = \phi_k},$$

as equações de Euler adquirem a seguinte forma

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_k} = \frac{dy_k}{dx} \qquad \text{e} \qquad \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial y_k} = -\frac{dp_k}{dx}$$

com $k = 1, 2, \ldots, n$ que é a chamada forma canônica das equações de Euler. As variáveis $y_1, y_2, \ldots, y_n, p_1, p_2, \ldots, p_n$ são chamadas variáveis canônicas.

Exemplo 7 Escrever o sistema de equações de Euler na forma canônica para o funcional

$$J[y_1, y_2] = \int_0^{\pi} [2y_1 y_2 - 2y_1^2 + (y_1')^2 - (y_2')^2] dx.$$

Temos, $F = F(x, y_1, y_2, y_1', y_2') = 2y_1 y_2 - 2y_1^2 + (y')_1^2 - (y')_2^2$ logo, as equações

$$F_{y_1'} = p_1 \qquad F_{y_2'} = p_2$$

tomam a seguinte forma

$$p_1 = 2y_1' \qquad p_2 = -2y_2'$$

Note que o determinante

$$D = \begin{vmatrix} F_{y_1' y_1'} & F_{y_1' y_2'} \\ F_{y_2' y_1'} & F_{y_2' y_2'} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 2 & 0 \\ 0 & -2 \end{vmatrix} \neq 0$$

logo

$$y_1' = \frac{1}{2} p_1 \quad \text{e} \quad y_2' = -\frac{1}{2} p_2$$

[13] H. Goldstein, *Classical Mechanics*, Addison-Wesley, Massachusetts, (1965).

Então, para a hamiltoniana, calculada nestes pontos, temos

$$\mathcal{H} = 2y_1^2 - 2y_1y_2 + \frac{1}{4}p_1^2 - \frac{1}{4}p_2^2$$

e, o sistema canônico das equações de Euler

$$\frac{dy_1}{dx} = \frac{p_1}{2} \qquad \frac{dy_2}{dx} = -\frac{p_2}{2}$$

$$\frac{dp_1}{dx} = -4y_1 + 2y_2 \qquad \frac{dp_2}{dx} = 2y_1$$

onde y_1, y_2, p_1 e p_2 são funções desconhecidas.

5. Princípios variacionais na mecânica

Vamos, nesta seção, apresentar os princípios de Hamilton, Lagrange e Jacobi bem como o princípio da mínima ação.

i) Princípio de Hamilton

Suponhamos que sobre um sistema de n pontos $M_k(x_k, y_k, z_k)$ de massa m_k com $k = 1, 2, \ldots, n$ sujeito a m $(m \leq n)$, vínculos holônomos[14]

$$\varphi_j(x, y, z, t) = 0$$

para $j = 1, 2, \ldots, m$ atuam certas forças

$$F_k(x_k, y_k, z_k)$$

com $k = 1, 2, \ldots, n$ que admitem um potencial – interpretado como sendo a energia potencial do sistema com o sinal trocado,

$$U = U(x_k, y_k, z_k, t)$$

ou seja

$$X_k = \frac{\partial U}{\partial x_k}, \qquad Y_k = \frac{\partial U}{\partial y_k}, \qquad Z_k = \frac{\partial U}{\partial z_k}.$$

[14]Se os vínculos podem ser expressos como equações que relacionam as coordenadas das partículas e o tempo, da forma $f(\vec{x_1}, \vec{x_2}, \ldots, t) = 0$ são chamados holônomos (partícula obrigada a mover-se ao longo de uma curva). Vínculos que não podem ser expressos desta forma chamam-se não-holônomos (paredes de um recipiente contendo um gás). Ainda mais, vínculos independentes do tempo são chamados esclerônomos enquanto que aqueles que o contém explicitamente são chamados reônomos.

A energia cinética associada ao sistema é dada por

$$T = \frac{1}{2}\sum_{k=1}^{n} m_k \left(\dot{x}_k^2 + \dot{y}_k^2 + \dot{z}_k^2\right)$$

onde o ponto denota a derivada temporal.

Nestas condições, considera-se a classe dos movimentos cinematicamente possíveis, isto é, compatíveis com os vínculos $\varphi_j(x, y, z, t) = 0$ que levam o sistema de uma configuração A no instante $t = t_0$ a uma configuração B no instante $t = t_1$.

Segundo o princípio de Hamilton, o movimento real do sistema passando da posição A para a posição B durante o intervalo de tempo de t_0 a t_1, torna estacionária a seguinte integral

$$J = \int_{t_0}^{t_1} (T + U)dt$$

ou seja, para tal movimento $\delta J = 0$.

Antes de prosseguirmos com a discussão, vamos apresentar a diferenciação de funcionais. Então, suponhamos que o funcional $J[y(x)]$ esteja definido sobre um conjunto M de funções $y(x)$. A qualquer acréscimo ou variação $\delta y(x)$ do argumento corresponderá o acréscimo do funcional

$$\Delta J = \Delta J[y(x)] = J[y(x) + \delta y(x)] - J[y(x)]$$

onde $\delta y(x) = \tilde{y}(x) - y(x)$ com $y(x)$ e $\tilde{y}(x)$ pertencentes a M.

Definição: Se existir um funcional $L[y(x), \delta(y)]$ linear em relação a $\delta(y)$ tal que qualquer acréscimo

$$\Delta J = J[y(x) + \delta y] - J[y(x)]$$

de um funcional J admitir a representação

$$\Delta J = L[y(x), \delta y] + \beta[y(x), \delta y] \,||\delta y||$$

onde $\beta[y(x), \delta y] \to 0$ com $||\delta y|| \to 0$ então o número $L[y(x), \delta y]$ se chama diferencial do funcional $J[y(x)]$ em $y(x)$ correspondente a δy e será denotado por δJ.

Voltando, trata-se de um problema variacional no domínio dos sistemas de $3n$ funções $x_k(t), y_k(t), z_k(t)$ definidas em $[t_0, t_1]$ com valores dados nas extremidades deste intervalo e sujeitas aos vínculos $\varphi_j(x, y, z, t) = 0$ ou seja, é um problema com extremidades fixas e restrições o que nos leva aos multiplicadores de Lagrange.

O método dos multiplicadores de Lagrange introduz uma função auxiliar F, tal que:

$$F = T + U + \sum_{j=1}^{m} \lambda_j(t)\varphi_j$$

e o respectivo sistema de equações de Euler

$$\begin{cases} m_k \dfrac{d^2}{dt^2} x_k - X_k - \displaystyle\sum_{j=1}^{m} \lambda_j(t) \dfrac{\partial \varphi_j}{\partial x_k} = 0 \\ \\ m_k \dfrac{d^2}{dt^2} y_k - Y_k - \displaystyle\sum_{j=1}^{m} \lambda_j(t) \dfrac{\partial \varphi_j}{\partial y_k} = 0 \\ \\ m_k \dfrac{d^2}{dt^2} z_k - Z_k - \displaystyle\sum_{j=1}^{m} \lambda_j(t) \dfrac{\partial \varphi_j}{\partial z_k} = 0 \end{cases}$$

o qual descreve o movimento do sistema.

Do lar 2 Obtenha explicitamente o sistema formado pelas equações de Euler.

ii) Princípio de Lagrange

No caso particular em que os vínculos φ_j e o potencial U não dependam do tempo, o sistema conservará sua energia total, isto é, $T - U$=constante.

O princípio de Lagrange estipula que, no domínio dos movimentos cinematicamente possíveis e satisfazendo a condição $T - U = h =$ constante que conduzem o sistema da posição A, no instante t_0 à posição B, num instante t, o movimento real torna estacionária a integral

$$\int_{t_0}^{t} 2T \, dt'$$

onde t_0 é o instante inicial fixo e t o instante final variável.

Em termos de um problema variacional o princípio de Lagrange se formula como: é um problema com vínculos $\varphi_j(x, y, z) = 0$ com a restrição não holônoma suplementar $T - U = h$ e uma extremidade variável.

Ao se aplicar o método dos multiplicadores de Lagrange, consideramos a seguinte função auxiliar

$$F = \frac{1}{2}T + \frac{1}{2}(U + h) + \sum_{j=1}^{m} \lambda_j \varphi_j$$

conduzindo ao seguinte sistema de equações de Euler

$$\begin{cases} m_k \dfrac{d^2}{dt^2} x_k = \dfrac{\partial U}{\partial x_k} + 2\displaystyle\sum_{j=1}^{m} \lambda_j \dfrac{\partial \varphi_j}{\partial x_k} \\[2ex] m_k \dfrac{d^2}{dt^2} y_k = \dfrac{\partial U}{\partial y_k} + 2\displaystyle\sum_{j=1}^{m} \lambda_j \dfrac{\partial \varphi_j}{\partial y_k} \\[2ex] m_k \dfrac{d^2}{dt^2} z_k = \dfrac{\partial U}{\partial z_k} + 2\displaystyle\sum_{j=1}^{m} \lambda_j \dfrac{\partial \varphi_j}{\partial z_k}. \end{cases}$$

Do lar 3 Obtenha explicitamente o sistema formado pelas equações de Euler.

iii) Princípio de Jacobi

Eliminando-se o tempo da integral

$$\int_{t_0}^{t} 2T \, dt'$$

para $T = U + h$ chega-se ao princípio de Jacobi postulando que a trajetória Γ que conduz um sistema holônomo conservativo de uma posição A a uma posição B torna estacionária a integral

$$\int_{\Gamma} \sqrt{2(U + h)} ds$$

ou ainda, o funcional

$$J = \int_{t_0}^{t} (T + U) dt'$$

representa a ação no sentido de Hamilton; o funcional

$$\int_{t_0}^{t} 2T \, dt'$$

no sentido de Lagrange e o funcional

$$J = \int_\Gamma \sqrt{2(U+h)}ds$$

a ação no sentido de Jacobi e, os respectivos princípio mecânicos chamando-se de *Princípio da Ação Estacionária* ou *Princípio da Mínima Ação*, sendo sempre um mínimo o possível extremo dos funcionais mencionados.

Exemplo 8 (Um dos problemas de partida) Deduzir do princípio da mínima ação o movimento de um ponto sobre o qual atua apenas a força da gravidade.

Admitamos que a massa do ponto é igual a m e que o eixo Oy aponta para cima, logo a energia potencial é dada por

$$U = -m\,g\,y.$$

De acordo com o princípio de Jacobi, qualquer trajetória real Γ deve tornar estacionária a integral

$$J = \int_\Gamma \sqrt{2(U+h)}ds$$

onde ds é o elemento de arco $ds/dx = \sqrt{1+(y')^2}$ logo

$$J = \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2(h-m\,g\,y)}\sqrt{1+(y')^2}dx.$$

Antes de prosseguirmos, vamos discutir as chamada equações de Hamilton-Jacobi bem como o teorema de Jacobi.

iv) Equação de Hamilton-Jacobi Se o problema variacional com fronteira fixa para o funcional

$$J[y_1, y_2, \dots, y_n] = \int_{x_1}^{x_2} F(x, y_1, y_2, \dots, y_n, y_1', y_2', \dots, y_n')dx$$

equivale ao problema variacional para o funcional

$$J[y_1, y_2, \dots, y_n] = \int_{x_1}^{x_2} \left\{ \sum_{k=1}^{n} p_k y_k' - \mathcal{H}(x, y_1, y_2, \dots, y_n, p_1, p_2, \dots, p_n) \right\} dx$$

com $y_1, y_2, \dots, y_n$ fixos na fronteira e $p_1, p_2, \dots, p_n$ arbitrários, então as equações de Euler para o último funcional são as equações canônicas

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_k} = \frac{dy_k}{dx} \qquad \text{e} \qquad \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial y_k} = -\frac{dp_k}{dx}$$

com $k = 1, 2, \ldots, n$.

É fácil determinar as soluções do sistema canônico acima a partir de uma integral geral da respectiva equação de Hamilton-Jacobi

$$\frac{\partial W}{\partial x} + \mathcal{H}\left(x, y_1, y_2, \ldots, y_n, \frac{\partial W}{\partial y_1}, \frac{\partial W}{\partial y_2}, \ldots, \frac{\partial W}{\partial y_n}\right) = 0$$

ou seja, vale o seguinte teorema:

Teorema de Jacobi: Se W for uma integral geral da equação de Hamilton-Jacobi dependendo de n constantes arbitrárias essenciais de modo que o determinante

$$\begin{vmatrix} \dfrac{\partial^2 W}{\partial y_1 \partial C_1} & \dfrac{\partial^2 W}{\partial y_1 \partial C_2} & \cdots\cdots & \dfrac{\partial^2 W}{\partial y_1 \partial C_n} \\ \dfrac{\partial^2 W}{\partial y_2 \partial C_1} & \dfrac{\partial^2 W}{\partial y_2 \partial C_2} & \cdots\cdots & \dfrac{\partial^2 W}{\partial y_n \partial C_n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \dfrac{\partial^2 W}{\partial y_n \partial C_1} & \dfrac{\partial^2 W}{\partial y_n \partial C_2} & \cdots\cdots & \dfrac{\partial^2 W}{\partial y_n \partial C_n} \end{vmatrix}$$

seja diferente de zero, então as relações

$$\frac{\partial W}{\partial C_k} = B_k \qquad \text{e} \qquad \frac{\partial W}{\partial y_k} = p_k$$

com $k = 1, 2, \ldots, n$ onde B_k são constantes arbitrárias, fornecem a solução geral do sistema canônico

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_k} = \frac{dy_k}{dx} \qquad \text{e} \qquad \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial y_k} = -\frac{dp_k}{dx}$$

com $k = 1, 2, \ldots, n$.

Voltando-se ao nosso problema, temos que a hamiltoniana é dada por

$$\mathcal{H} = -F + \sum_k y_k' F_{y_k'}$$

onde neste caso $F = \sqrt{2(h - m\,g\,y)[1 + (y')^2]}$ de onde podemos escrever

$$\mathcal{H} = -\frac{\sqrt{2(h - m\,g\,y)}}{\sqrt{1 + (y')^2}}.$$

Porém, temos

$$F_{y'} = \frac{A\,y'}{\sqrt{1 + (y')^2}} = p \qquad \text{e} \qquad y' = \frac{p}{\sqrt{A^2 - p^2}}$$

logo $\mathcal{H}$, expresso em termos de p, é dado por

$$\mathcal{H} = -\sqrt{2(h - m\,g\,y) - p^2}$$

mas $p = \partial W/\partial y$ logo, a equação de Hamilton-Jacobi é

$$\frac{\partial W}{\partial x} - \sqrt{2(h - m\,g\,y) - \left(\frac{\partial W}{\partial y}\right)^2} = 0$$

ou ainda, na seguinte forma

$$\left(\frac{\partial W}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial W}{\partial y}\right)^2 = 2(h - m\,g\,y).$$

Esta equação admite a integral geral

$$W = A\,x + \int \sqrt{2h - 2m\,g\,y - A^2}dy = A\,x - \frac{1}{3m\,g}\left(2h - 2m\,g\,y - A^2\right)^{3/2} + B$$

onde A e B são constantes arbitrárias. Disto temos que a equação das lagrangianas é dada por

$$\frac{\partial W}{\partial A} = C_1 = \text{constante}$$

logo

$$x + \frac{A}{m\,g}\left(2h - 2g\,y - A^2\right)^{1/2} = C$$

ou ainda, finalmente,

$$y = \frac{h}{m\,g} - \frac{A^2}{2m\,g} - \frac{m\,g}{2A^2}(x - C)^2$$

onde A e C são constantes indeterminadas.

Em particular, passarão pela origem, ou seja $y(0) = 0$, as trajetórias parabólicas da família monoparamétrica

$$y = -\frac{m\,g}{2A^2}x^2 + \frac{\sqrt{2h - A^2}}{A}x$$

com A constante.

6. Método de Ritz - Mecânica Quântica

Como mencionado no início, vamos apresentar apenas o método de Ritz como exemplo de métodos diretos no cálculo variacional, ou seja, utilizaremos o método de Ritz para discutir o problema do átomo de hidrogênio ou o problema do oscilador harmônico tridimensional.[15]

Sendo $\hat{\mathcal{H}}$ o operador hamiltoniano para o estado fundamental do átomo de hidrogênio,[16] devemos calcular os autovalores a ele associados e minimizar, isto é, escrevemos a equação de Schrödinger

$$\hat{\mathcal{H}}\Psi = \lambda\,\Psi$$

onde Ψ são as autofunções de $\hat{\mathcal{H}}$. A condição de normalização para as autofunções é (probabilidade)

$$\int |\Psi|^2 d\tau = 1.$$

Sendo Ψ^* o complexo conjugado de Ψ devemos maximizar ou minimizar o seguinte funcional

$$< \mathcal{H} > [\Psi] = \int \Psi^* \hat{\mathcal{H}} \Psi\, d\tau.$$

Se calculamos a integral

$$< \mathcal{H} > [\varphi] = \int \varphi^* \hat{\mathcal{H}} \varphi\, d\tau$$

para uma função teste $\varphi = \varphi(\vec{r}, A, \alpha, \ldots)$ que satisfaça a condição de normalização

$$\int |\varphi|^2 d\tau = 1$$

[15]Existe uma conexão entre o problema relativo ao átomo de hidrogênio e o oscilador harmônico tridimensional. Ver S. V. Khristenko, *Sturm Expansions of the Green's Functions for very Simples Systems*, Theor. Math. Phys., **22**, 21, (1975).

[16]A forma explícita deste hamiltoniano é descrita no Exemplo 9.

por ajustando-se os parâmetros A, $\alpha, \ldots$, podemos calcular um limite superior de $< \mathcal{H} >$.

Em resumo, o método de Ritz afirma que a partir de uma conveniente escolha para a função teste podemos ajustar seus parâmetros a fim de obter uma boa aproximação.

Exemplo 9: Usando o método variacional de Ritz encontre o estado fundamental para um oscilador harmônico isotrópico tridimensional. Escolha uma função teste do tipo função de onda radial[17] isto é

$$\varphi = A(1 + \alpha\, r)\exp(-\alpha\, r)$$

onde A e α são parâmetros a serem ajustados.

Os parâmetros A e α da função teste são obtidos de tal modo que o valor esperado do hamiltoniano

$$< \mathcal{H} >= \int \varphi^* \hat{\mathcal{H}} \varphi\, d\tau$$

calculado via esta função teste, seja um mínimo. As funções φ sendo normalizadas à unidade temos

$$\int |\varphi|^2 d\tau = A^2 \int (1 + \alpha\, r)^2 \exp(-2\alpha\, r) 4\pi r^2 dr$$

de onde

$$A^2 = \frac{\alpha^3}{7\pi}$$

ou seja, uma relação entre os parâmetros A e α.

A hamiltoniana de um oscilador harmônico isotrópico tridimensional[18]

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{T} + \hat{U} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \frac{m\, w^2}{2} r^2$$

onde T é a energia cinética e U a energia potencial.

Como $\hat{p}$ é hermiteano podemos transformar $< T >$ como

$$< T >= \frac{1}{2m}\int \varphi^* \hat{p}^2 \varphi\, d\tau = \frac{1}{2m}\int |\hat{p}\varphi|^2 d\tau = \frac{\hbar^2}{2m}\int |\mathrm{grad}\, \varphi|^2 d\tau$$

[17] Isto devido a simetria do problema.

[18] J. L. Powell and B. Crasemann, *Quantum Mechanics*, Addison-Wesley, Massachusetts, (1961).

e desde que φ não depende dos ângulos

$$|\text{grad}\,\varphi| = \left|\frac{d\varphi}{dr}\right| = A\alpha^2 r\exp(-\alpha\, r)$$

de onde o valor esperado de T é dado por

$$< T >= \frac{\hbar^2}{2m}A^2\alpha^4 4\pi\int_0^\infty r^4\exp(-2\alpha\, r)dr = \frac{3\hbar^2\alpha^2}{14m}.$$

Passemos a calcular o valor esperado de $< U >$, isto é

$$< U >= \int \varphi^* \frac{m\,w^2}{2} r^2 \varphi\, d\tau =$$

$$= 4\pi A^2\frac{m\,w^2}{2}\int_0^\infty (1+\alpha\, r)^2\exp(-2\alpha\, r)r^4 dr = \frac{81}{28}\frac{m\,w^2}{\alpha^2}$$

de onde, o valor esperado para o hamiltoniano é dado por

$$< \mathcal{H} >\equiv H(\alpha) = \frac{3}{14}\frac{\hbar^2\alpha^2}{m} + \frac{81}{28}\frac{m\,w^2}{\alpha^2}.$$

Agora, devemos encontrar o mínimo desta função

$$\frac{\partial}{\partial\alpha}\left(\frac{3}{14}\frac{\hbar^2\alpha^2}{m} + \frac{81}{28}\frac{m\,w^2}{\alpha^2}\right)_{\alpha=\alpha_0} = 0$$

logo

$$\alpha_0^2 = \sqrt{\frac{27}{2}}\frac{m\,w}{\hbar}$$

e assim

$$H(\alpha_0) =< H >_{min}= \frac{9}{7}\sqrt{\frac{3}{2}}\hbar w \simeq 1,575\hbar w$$

que é somente 5% maior que o valor exato do nível de mais baixa energia[19] para este sistema que é $E_0 = 1.5\hbar w$.

Exemplo 10 Consideremos o modelo do dêuteron como um modelo de força central. A interação próton e nêutron é idealizada pelo potencial de força

[19] Estado fundamental.

central $V(r) = -A\exp(-r/a)$ onde A e a são constantes. Escolhamos a seguinte função teste $\varphi = B\exp(-\dfrac{\alpha\, r}{2a})$ onde B é constante.

A condição de normalização para a função φ é

$$\int |\varphi|^2 d\tau = 4\pi B^2 \int_0^\infty \exp(-\alpha\, r/a) r^2 dr = 4\pi B^2 \frac{2! a^3}{\alpha^3} = 1$$

de onde obtemos a seguinte relação

$$B^2 = \frac{\alpha^3}{8\pi a^3}.$$

E, como no exemplo anterior, temos

$$\frac{d\varphi}{dr} = -B\frac{\alpha}{2a}\exp(-\alpha\, r/2a)$$

e os valores esperados são dados por

$$< T >= \frac{\hbar^2}{2m}\int \left|\frac{d\varphi}{dr}\right|^2 d\tau = \frac{\hbar^2}{2m} B^2 \frac{\alpha^2}{4a^2} 4\pi \int_0^\infty \exp(-\alpha\, r/a) r^2 dr = \frac{\hbar^2\alpha^2}{8ma^2}$$

para a energia cinética enquanto que para a energia potencial temos

$$< U >= -A\int \varphi^* \exp(-r/a)\varphi\, dr =$$

$$= -4\pi A\, B^2 \int_0^\infty \exp[-(\alpha+1)r/a] r^2 dr = -A\frac{\alpha^3}{(1+\alpha)^3}.$$

Enfim, para o valor esperado do hamiltoniano temos

$$< \mathcal{H} > \equiv < T > + < U >= \frac{\hbar^2\alpha^2}{8m\, a^2} - \frac{A\,\alpha^3}{(1+\alpha)^3}$$

e, para a condição de mínimo obtemos a seguinte equação

$$\frac{\hbar^2\alpha_0}{4ma^2} - \frac{3A\alpha_0^2}{(1+\alpha_0)^4} = 0$$

Esta equação de quarto grau em α_0 é solúvel por métodos numéricos necessitando para tal dos valores dos parâmetros. Logo, o estado de mais baixa energia (fundamental) para o dêuteron é igual a $<\mathcal{H}>(\alpha_0)$ onde α_0 é raiz da equação acima.

7. Princípio de Fermat

Consideremos um meio não-homogêneo plano, onde a velocidade de propagação da luz é dada por $v(x,y)$. Então, de acordo com o princípio de Fermat[20] temos que o raio luminoso neste meio será um minimante do funcional

$$\mathcal{J}[y] = \int_{t_0}^{t_1} \frac{\sqrt{\dot{x}^2+\dot{y}^2}}{v(x,y)} dt.$$

Como exemplo, tomemos o caso em que $v(x,y) = \alpha y$ onde α é uma constante, logo, a equação de Euler para x é dada por

$$\mathcal{L}_x - \frac{d}{dt}(\mathcal{L}_{\dot{x}}) = 0$$

de onde podemos escrever

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\dot{x}}{y\sqrt{\dot{x}^2+\dot{y}^2}}\right) = 0$$

cuja integração fornece

$$\frac{\dot{x}}{y\sqrt{\dot{x}^2+\dot{y}^2}} = \text{constante}.$$

Exemplo 11 Determinar as lagrangianas associada ao funcional[21]

$$\mathcal{J}[y(x)] = \int_a^b \frac{\sqrt{1+(y')^2}}{y} dx$$

que unem dois pontos dados (a,A) e (b,B) do semi-plano superior.

Como o integrando não depende explicitamente de x a equação de Euler se reduz a

$$\mathcal{L}_y - \mathcal{L}_{yy'}y' - \mathcal{L}_{y'y'}y'' = 0$$

[20]Um raio de luz em um meio com um índice de refração variável seguirá o caminho que torna mínimo o tempo de percurso.

[21]Do Princípio de Fermat, um caso particular onde a velocidade v é proporcional a y e $\dot{x} = 1$ de onde obtemos $\dot{x}/y\sqrt{\dot{x}^2+\dot{y}^2}$ = constante. A notação de ponto, $\dot{y}$, também é usada para explicitar que a derivada é efetuada em relação à variável temporal.

logo

$$\frac{\sqrt{1+(y')^2}}{y} - y'\frac{y'}{y\sqrt{1+(y')^2}} = C$$

onde C é uma constante de integração, ou ainda

$$y\sqrt{1+(y')^2} = C_1$$

onde $C_1C = 1$.

A integração da última equação fornece

$$(x+C_2)^2 + y^2 = C_1^2$$

isto é, a família das circunferências com centro sobre o eixo Ox.

Assim, o problema terá sempre uma solução e esta será única: por qualquer par de pontos (com abscissas distintas) do semi plano passa uma e uma só circunferência da família mencionada.

No semi plano superior, as soluções serão constituídas por x=constante e pelas soluções do Exemplo 11, isto é, pelos arcos das semi-circunferências com centro no eixo Ox.

Será chamado Caminho Ótico de uma Trajetória qualquer, q, o tempo $T(q)$ gasto no percurso desta trajetória com a velocidade da luz $v(x, y)$.

Exemplo 12 Determinar a forma do sólido de revolução que sofre a menor resistência ao se mover através de um meio gasoso.

Se admitirmos que o choque entre partículas do gás e o sólido é elástico, obteremos para a componente normal da pressão devida ao movimento do corpo o valor

$$p_N = 2\rho\, v^2 \text{sen}^2\theta$$

onde ρ é a densidade do gás, v é a velocidade do gás relativamente ao corpo e θ é o ângulo constituído pelo vetor velocidade e a superfície do corpo[22]

[22]Note que é o princípio do avião.

Fig.3

A resultante das forças exercidas sobre um anel de raio $y(x)$ e largura $(1+y'^2)^{1/2}dx$ será paralela ao eixo Ox e dada por

$$dF = 2\rho v^2 \text{sen}^2\theta \left[2\pi y(1+y'^2)^{1/2}\right] \text{sen}\theta\, dx$$

e a força total aplicada ao corpo, paralela a Ox, é dada por

$$F = \int_0^\ell 4\pi\rho v^2\, y\, \text{sen}^3\theta(1+y'^2)^{1/2}dx.$$

A fim de simplificarmos o problema tomemos

$$\text{sen}\theta = \frac{y'}{\sqrt{1+y'^2}} \approx y'$$

logo a força de resistência oferecida pelo meio é dada por

$$F = 4\pi\rho v^2 \int_0^\ell {y'}^3 y dx.$$

Então, nosso problema se resume em encontrar $y(x)$ a fim de minimizar F e satisfazer as consdições de contorno, isto é

$$y(0) = 0 \qquad \text{e} \qquad y(\ell) = R.$$

Passemos agora a discutir a equação associada ao funcional F, ou seja, a equação de Euler

$${y'}^3 - 3\frac{d}{dx}(y\,{y'}^2) = 0$$

onde $y(x) = 0$ é uma particular solução porém não satisfaz as condições de contorno, logo

$${y'}^3 y = \text{constante}$$

de onde

$$y' = \frac{C}{\sqrt[3]{y}} \qquad \text{e} \qquad y = (C_1 x + C_2)^{3/4}.$$

Utilizando-se as condições de contorno $y(0) = 0$ e $y(\ell) = R$ obtemos

$$C_1 = \frac{R^{4/3}}{\ell} \qquad \text{e} \qquad C_2 = 0$$

de onde, finalmente, podemos escrever

$$y = R\left(\frac{x}{\ell}\right)^{3/4}$$

quer dizer, a geratriz do corpo que encontrará a menor resistência é uma curva algébrica.

Do lar 3 Discutir o problema isoperimétrico.[23]

8. Lista de problemas para o lar

Problema #1 Encontre as curvas extremantes e os valores estacionários para as seguintes integrais

$$\text{(i)} \qquad \int_P^Q \left[\left(\frac{d}{dx}y(x)\right)^2 + 2y(x)x - y^2(x)\right] dx$$

$$\text{(ii)} \qquad \int_R^S \left[2y(x)\,\mathrm{sen}\,x + \left(\frac{d}{dx}y(x)\right)^2\right] dx$$

onde $P = P(0,0)$, $Q = Q(\pi/2, \pi/2)$, $R = R(0,\pi)$ e $S = S(\pi, 0)$.

Problema #2 Encontre as curvas extremantes e os valores estacionários para os seguintes funcionais

$$\text{(i)} \qquad I[y(x)] = \int_P^Q \left[\frac{d}{dx}y(x)\right]^2 [1 + y^2(x)]^{-1} dx$$

$$\text{(ii)} \qquad I[y(x)] = \int_P^Q \left[\frac{d}{dx}y(x)\right]^2 \left[1 + \frac{d}{dx}y(x)\right]^2 dx$$

onde $P = P(0,0)$ e $Q = Q(1,2)$.

Problema #3 Encontre a função $y(x)$ que torna a integral

$$I[y(x)] = \int_0^{\pi/2} \left[\left(\frac{d}{dx}y(x)\right)^2 + 2x\,y(x)\,\frac{d}{dx}y(x)\right] dx$$

[23] G. B. Arfken and H. J. Weber, *Mathematical Methods for Physicists,* Fourth Edition, Academic Press, New York, (1995).

com $y(0)=0$, $y(\pi/2)=1$ e $y(x)$, sujeito à restrição

$$\int_0^{\pi/2} y(x)\,dx = \frac{\pi}{2} - 1\,,$$

mínima.

Problema #4 Minimize a integral

$$I[y(x)] = \int_{t_0}^{t_1} x(t)\sqrt{1+\left(\frac{d}{dt}x(t)\right)^2}dt$$

onde a função $x(t)$ está sujeita à restrição

$$\int_{t_0}^{t_1}\sqrt{1+\left(\frac{d}{dt}x(t)\right)^2}dt = \text{constante.}$$

Problema #5 Uma curva $y=y(x)$ encontra o eixo x nos pontos $x=\pm a$ e tem comprimento entre estes dois pontos igual a πa. Mostre que para a área entre a curva e o eixo x ser máxima devemos ter $x^2+y^2=a^2$ com $y\geq 0$, isto é, uma semi-circunferência, centrada na origem e raio a.

Problema #6 A rota de um avião encontra-se no plano (x,y), e o avião move-se com velocidade $v(y)$, isto é, uma função só de y. Se sua trajetória (assumida como sendo suave) entre dois pontos fixos é tal que minimiza o tempo de vôo, mostre que a equação da trajetória é dada por

$$x = \int \frac{v(y)}{\sqrt{A-v^2(y)}}dy + B$$

onde A e B são constantes.

Problema #7 Uma partícula movendo-se no plano (x,y) tem velocidade $u(y)$ dependendo somente de sua distância ao eixo x; sua direção de movimento forma um ângulo θ com o eixo x que pode ser controlado para dar o tempo mínimo de trânsito entre dois pontos. Se $u(y)=u_0\exp(-y/h)$ onde u_0 e h são constantes, e se a partícula, começando em $x=0$, $y=0$ atinge o ponto $(\pi h/4, h)$ num tempo mínimo, prove que suas direções inicial e final devem ser, respectivamente

$$\theta_0 = \arctan\left(1 - \sqrt{2}/\mathrm{e}\right) \quad \text{e} \quad \theta_1 = \arctan\left(\mathrm{e}\sqrt{2} - 1\right).$$

Problema #8 Encontre um funcional cuja equação diferencial ordinária (uma particular equação)

$$\frac{d^2}{dx^2}y(x) + y(x) + x = 0$$

seja sua equação de Euler. A partir disto obtenha uma solução aproximada da equação dado $y(0) = 0 = y(1)$ usando as seguintes funções teste:

$$\begin{array}{ll} \text{(i)} & y(x) = Cx(1-x) \\ \text{(ii)} & y(x) = C_1x(1-x) + C_2x^2(1-x) \end{array}$$

e encontre os valores das constantes C, C_1 e C_2.

Problema #9 Utilize o princípio de Fermat para mostrar as leis de: (i) reflexão [θ_1=ângulo de incidência e θ_2=ângulo de reflexão (ambos em relação à normal) são iguais] e (ii) refração [$n_1 \operatorname{sen}\theta_1 = n_2 \operatorname{sen}\theta_2$ onde n_1 e n_2 são índices de refração, θ_1 é o ângulo de incidência e θ_2 o ângulo de refração, ambos em relação à normal (note que aqui muda o meio)].