

CÁLCULO VARIACIONAL.....	2
OBTENÇÃO DAS EQUAÇÕES DE EULER-LAGRANGE.....	3
FORMAS ALTERNATIVAS DE EULER-LAGRANGE.....	8
VÁRIAS VARIÁVEIS DEPENDENTES.....	9
RESTRIÇÃO HOLONÔMICA.....	11
DERIVADAS DE FUNCIONAIS.....	14
NOTAÇÃO VARIACIONAL δ	16
REGRA DA SOMA.....	18
REGRA DO PRODUTO.....	19
REGRA DA CADEIA.....	20
DERIVADA FUNCIONAL EM UMA DIMENSÃO.....	23
DERIVADA FUNCIONAL EM VÁRIAS DIMENSÕES.....	23
EXEMPLOS DE DERIVADA FUNCIONAL.....	26
A FUNÇÃO DELTA DE DIRAC.....	26
FUNCIONAL DA ENERGIA DE THOMAS-FERMI.....	27
<i>Funcional da energia cinética de Thomas-Fermi.....</i>	<i>27</i>
<i>Funcional da energia potencial de interação elétron-núcleo.....</i>	<i>28</i>
FUNCIONAL DA ENERGIA POTENCIAL DE INTERAÇÃO ELÉTRON-ELÉTRON.....	29
FUNCIONAL DA ENERGIA CINÉTICA DE WEIZSÄCKER.....	30

CÁLCULO VARIACIONAL

O cálculo variacional é o ramo da matemática que se preocupa em encontrar os extremos de um problema. Em particular, o cálculo variacional procura determinar quando uma integral definida particular é máxima ou mínima. Desse modo, o cálculo variacional procura formular um certo problema, colocando-o na forma de uma integral definida e então determinar as condições nas quais a integral seja maximizada ou minimizada. Por exemplo, considere dois pontos em um plano, digamos x_i e x_f . É claro que esses dois pontos podem ser ligados por uma infinidade de curvas do tipo $y = y(x)$. O objetivo é descobrir a curva que fornece a menor trajetória entre os dois pontos. Notamos que a trajetória pode ser escrita na forma de uma integral, ou seja,

$$I[y'(x)] = \int_{x_i}^{x_f} ds = \int_{x_i}^{x_f} \sqrt{dx^2 + dy^2} = \int_{x_i}^{x_f} \sqrt{1 + \left(\frac{dy}{dx}\right)^2} dx = \int_{x_i}^{x_f} \sqrt{1 + y'^2} dx, \quad (0.1)$$

onde I representa a trajetória e $ds = \sqrt{dx^2 + dy^2}$ representa uma distância infinitesimal ao longo da trajetória e $y' = dy/dx$. O problema de encontrar a curva que fornece a menor distância entre os pontos x_i e x_f se reduz ao problema de minimizar a integral $I[y'(x)]$. Um segundo exemplo ilustrativo é o problema da *braquistócrona*. Nesse problema, um objeto, digamos uma bola de ferro, percorre certa distância a partir de uma posição inicial mais alta x_i até uma posição final mais baixa x_f . Como a bola está sob a ação da força gravitacional, o problema consiste em encontrar a trajetória com o menor tempo de percurso. O tempo total T pode ser calculado por

$$T = \int dt, \quad (0.2)$$

onde dt é dado por

$$dt = \frac{ds}{v}.$$

v representa a velocidade da bola e pode ser calculado usando a conservação da energia, ou seja,

$$mgh = mgy - \frac{1}{2}mv^2$$
$$v = \sqrt{2g(h - y)},$$

onde h representa a altura inicial e $y = y(x)$ representa a altura da bola quando esta está na posição x . Substituindo dt e v em (0.2), obtemos

$$T = \int \frac{ds}{v} = \int \frac{\sqrt{1+y'^2} dx}{v} = \int_{x_i}^{x_f} \frac{\sqrt{1+y'^2}}{\sqrt{2g(h-y)}} dx$$

$$T[y(x), y'(x)] = \int_{x_i}^{x_f} \frac{\sqrt{1+y'^2}}{\sqrt{2g(h-y)}} dx = \int_{x_i}^{x_f} \sqrt{\frac{1+y'^2}{2g(h-y)}} dx. \quad (0.3)$$

Novamente, o problema de encontrar o menor tempo de percurso se transformou no problema de minimizar o funcional $T[y(x), y'(x)]$.

De um modo geral, o cálculo variacional está interessado em resolver problemas do tipo

Qual a menor distância entre dois pontos em um plano?

- Qual a menor distância entre dois pontos sobre uma esfera?
- Qual é a forma da curva em um plano que fecha a maior área?
- Qual é a forma da figura geométrica que contém o maior volume?

OBTENÇÃO DAS EQUAÇÕES DE EULER-LAGRANGE

Na obtenção das equações de *Euler-Lagrange*, vamos considerar o problema de encontrar a curva que dá a menor distância entre dois pontos em um plano como modelo de derivação. É claro que dados os pontos x_i e x_f sobre o plano, existe uma infinidade de curvas $y = y(x)$ que passa pelos pontos dados. O que queremos é determinar a curva $y = y(x)$ que torna a integral I em (0.1) estacionária.

Para que possamos usar as técnicas do cálculo ordinário, vamos construir uma nova função $Y(x, \epsilon)$, tal que

$$Y(x, \epsilon) = y(x) + \epsilon \eta(x), \quad (0.1)$$

onde ϵ representa um número pequeno e $\eta(x)$ é uma função arbitrária que se anula nas extremidades, *i.e.*, $\eta(x_i) = \eta(x_f) = 0$, pois nesses pontos devemos ter $Y(x_i, \epsilon) = y(x_i)$ e $Y(x_f, \epsilon) = y(x_f)$. Fixando a função $\eta(x)$ e variando ϵ obtém-se uma família de curvas $Y(x, \epsilon)$. Portanto, $Y(x, \epsilon)$ é função de ϵ também. Consequentemente, o comprimento de cada curva depende de ϵ , ou seja,

$$I(\epsilon) = \int_{x_i}^{x_f} F(x, Y, Y') dx, \quad (0.2)$$

onde F tem a forma $F = \sqrt{1+Y'^2}$ em nosso caso particular. Y' é dado por $Y'(x, \epsilon) = y'(x) + \epsilon \eta'(x)$.

Escrevemos I em função somente de ϵ , pois a dependência de I em relação x já foi integrada.

O extremo da Equação (0.2) pode ser encontrado fazendo

$$\left. \frac{dI}{d\epsilon} \right|_{\epsilon=0} = 0 \quad (0.3)$$

Mais precisamente, devemos ter

$$\left. \frac{dI}{d\epsilon} \right|_{\epsilon=0} = \left[\frac{d}{d\epsilon} \int_{x_i}^{x_f} F(x, Y, Y') dx \right]_{\epsilon=0} = \int_{x_i}^{x_f} \left[\frac{d}{d\epsilon} F(x, Y, Y') \right]_{\epsilon=0} dx = 0 \quad (0.4)$$

Não há problema algum em derivar sob o sinal de integração, pois estamos derivando em relação ϵ e integrando em relação a x . Derivando $F(x, Y, Y')$ em relação a ϵ , obtemos

$$\frac{dF(x, Y, Y')}{d\epsilon} = \frac{\partial F}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial \epsilon} + \frac{\partial F}{\partial Y} \frac{\partial Y}{\partial \epsilon} + \frac{\partial F}{\partial Y'} \frac{\partial Y'}{\partial \epsilon} = \frac{\partial F}{\partial Y} \eta(x) + \frac{\partial F}{\partial Y'} \eta'(x) \quad (0.5)$$

$\underline{\underline{=0}}$

A derivada $\partial x / \partial \epsilon = 0$, pois x é independente de ϵ . Usando (0.5) em (0.4), obtemos

$$\left. \frac{dI}{d\epsilon} \right|_{\epsilon=0} = \left[\int_{x_i}^{x_f} \left(\frac{\partial F}{\partial Y} \eta(x) + \frac{\partial F}{\partial Y'} \eta'(x) \right) dx \right]_{\epsilon=0} = 0 \quad (0.6)$$

Avaliando (0.6) em $\epsilon = 0$, obtemos

$$\int_{x_i}^{x_f} \left(\frac{\partial F}{\partial y} \eta(x) + \frac{\partial F}{\partial y'} \eta'(x) \right) dx = 0. \quad (0.7)$$

Esta é a forma fraca da Equação de Euler-Lagrange, pois temos $\eta'(x)$ ao invés de $\eta(x)$. Usando integração por partes, temos que

$$\int_{x_i}^{x_f} \frac{\partial F}{\partial y'} \eta'(x) dx = \underbrace{\frac{\partial F}{\partial y'} \eta(x)}_{=0} \Big|_{x_i}^{x_f} - \int_{x_i}^{x_f} \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial F}{\partial y'} \right) dx = - \int_{x_i}^{x_f} \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial F}{\partial y'} \right) \eta(x) dx \quad (0.8)$$

Em (0.8) usamos a condição de contorno $\eta(x_i) = \eta(x_f) = 0$. Usando (0.8) em (0.7), obtemos

$$\left. \frac{dI}{d\epsilon} \right|_{\epsilon=0} = \int_{x_i}^{x_f} \left(\frac{\partial F}{\partial y} \eta(x) - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial F}{\partial y'} \right) \eta(x) \right) dx = 0. \quad (0.9)$$

$$\left. \frac{dI}{d\epsilon} \right|_{\epsilon=0} = \int_{x_i}^{x_f} \left(\frac{\partial F}{\partial y} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial F}{\partial y'} \right) \right) \eta(x) dx = 0. \quad (0.10)$$

Como $\eta(x)$ é uma função arbitrária, então, usando o *lema fundamental do cálculo variacional*, devemos ter

$$\frac{\partial F}{\partial y} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial F}{\partial y'} \right) = 0. \quad (0.11)$$

A Equação (0.11) é a famosa equação de Euler-Lagrange que é extremamente importante na *mecânica analítica*. Vamos mostra agora que δI é equivalente a

$$\left. \frac{dI}{d\epsilon} \right|_{\epsilon=0} \quad (0.12)$$

De fato, expandindo o funcional $F[x, y, y']$ em série de Taylor, temos

$$\begin{aligned} F[x, y + \delta y, y' + \delta y'] &= F[x, y, y'] + \frac{\partial F}{\partial y} \delta y + \frac{\partial F}{\partial y'} \delta y' + O(\delta^2) \\ \underbrace{F[x, y + \delta y, y' + \delta y'] - F[x, y, y']}_{\delta F} &= \frac{\partial F}{\partial y} \delta y + \frac{\partial F}{\partial y'} \delta y' + O(\delta^2) \end{aligned} \quad (0.13)$$

Portanto, a *primeira variação do funcional F* é dada por

$$\delta F = \frac{\partial F}{\partial y} \delta y + \frac{\partial F}{\partial y'} \delta y' \quad (0.14)$$

Integrando (0.13) em ambos os lados, obtemos

$$\begin{aligned} \underbrace{\int_{x_i}^{x_f} F[x, y + \delta y, y' + \delta y'] dx - \int_{x_i}^{x_f} F[x, y, y'] dx}_{\delta^{(T)}I} \\ = \underbrace{\int_{x_i}^{x_f} \left(\frac{\partial F}{\partial y} \delta y + \frac{\partial F}{\partial y'} \delta y' \right) dx}_{\delta^{(1)}I} + O(\delta^2), \end{aligned} \quad (0.15)$$

onde $\delta^{(T)}I$ e $\delta^{(1)}I$ significam variação total e primeira variação do funcional $F[x, y, y']$, respectivamente. Se desprezarmos os termos de ordem $O(\delta^2)$, teremos apenas a primeira variação, ou seja, a parte linear de (0.15):

$$\delta^{(1)}I = \int_{x_i}^{x_f} \left(\frac{\partial F}{\partial y} \delta y + \frac{\partial F}{\partial y'} \delta y' \right) dx, \quad (0.16)$$

onde $\delta^{(1)}I$ significa que estamos retendo apenas a primeira variação do funcional, o qual denotaremos por

$$\delta I = \int_{x_i}^{x_f} \left(\frac{\partial F}{\partial y} \delta y + \frac{\partial F}{\partial y'} \delta y' \right) dx \quad (0.17)$$

Esta é a forma fraca, pois temos δy e $\delta y'$. Agora, integrando o segundo termo do integrando de (0.17) por partes e usando a condição de contorno $\delta y(x_i) = \delta y(x_f) = 0$, pois nos pontos x_i e x_f não existem variações da função $y(x)$, obtemos

$$\int_{x_i}^{x_f} \frac{\partial F}{\partial y'} \delta y' dx = \underbrace{\frac{\partial F}{\partial y'} \delta y \Big|_{x_i}^{x_f}}_{=0} - \int_{x_i}^{x_f} \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial F}{\partial y'} \right) \delta y dx = - \int_{x_i}^{x_f} \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial F}{\partial y'} \right) \delta y dx$$

Usando este resultado em (0.17), obtemos

$$\delta I = \int_{x_i}^{x_f} \left(\frac{\partial F}{\partial y} \delta y - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial F}{\partial y'} \right) \delta y \right) dx = \int_{x_i}^{x_f} \left(\frac{\partial F}{\partial y} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial F}{\partial y'} \right) \right) \delta y dx \quad (0.18)$$

Como δy é arbitrária e usando o lema fundamental do cálculo variacional, obtemos a condição para encontrarmos o extremo do funcional $F[x, y(x), y'(x)]$, ou seja,

$$\frac{\partial F}{\partial y} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial F}{\partial y'} \right) = 0, \quad (0.19)$$

que é a equação de Euler-Lagrange. Lagrange obteve essa equação usando o princípio de D'Alembert. A derivação acima é atribuída a Euler. Usando a Equação (0.1), temos que

$$Y(x, \epsilon) = y(x) + \epsilon \eta(x) \Rightarrow \underbrace{Y(x, \epsilon) - y(x)}_{\delta y} = \epsilon \eta(x) \Rightarrow \delta y = \epsilon \eta(x)$$

Usando estes resultados em (0.18), temos

$$\delta I = \int_{x_i}^{x_f} \left(\frac{\partial F}{\partial y} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial F}{\partial y'} \right) \right) \epsilon \eta(x) dx \quad (0.20)$$

Observe que (0.20) e (0.10) são iguais, exceto pela constante ϵ . A partir de (0.20) e (0.10) podemos concluir que

$$\delta I = \left[\int_{x_i}^{x_f} \left(\frac{\partial F}{\partial y} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial F}{\partial y'} \right) \right) \eta(x) dx \right] \epsilon = \left. \frac{dI}{d\epsilon} \right|_{\epsilon=0} \epsilon \quad (0.21)$$

A Equação (0.21) mostra que uma função $y(x)$ é extremo do funcional $F[x, y, y']$ se a primeira variação $\delta I = 0$ ou, equivalentemente,

$$\left. \frac{dI}{d\epsilon} \right|_{\epsilon=0} = 0.$$

O operador variação δ e o operador derivada d/dx são comutativos. De fato, derivando a Equação (0.1), obtemos

$$Y'(x, \epsilon) = y'(x) + \epsilon \eta'(x) \Rightarrow \underbrace{Y'(x, \epsilon) - y'(x)}_{\delta y'} = \epsilon \eta'(x) \quad (0.22)$$

$$\delta y' = Y'(x, \epsilon) - y'(x) = \epsilon \eta'(x)$$

$$\delta y' = \delta \left(\frac{dy}{dx} \right) = Y'(x, \epsilon) - y'(x) = \frac{dY}{dx} - \frac{dy}{dx} = \frac{d}{dx} \underbrace{(Y - y)}_{\delta y} = \frac{d}{dx} (\delta y) \quad (0.23)$$

Portanto,

$$\delta \left(\frac{dy}{dx} \right) = \frac{d}{dx} (\delta y)$$

O operador δ pode operar tanto fora quanto dentro do integrando:

$$\delta \int y(x) dx = \int \delta y(x) dx. \quad (0.24)$$

Exercícios.

Encontre a equação da curva que minimiza a distância entre dois pontos no plano.

Resp.

$$I = \int_{x_i}^{x_f} \sqrt{1 + y'^2} dx.$$

Neste caso,

$$F[x, y(x), y'(x)] = \sqrt{1 + y'^2}.$$

Usando Euler-Lagrange, temos

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial y} \left(\sqrt{1 + y'^2} \right) - \frac{d}{dx} \left[\frac{\partial}{\partial y'} \left(\sqrt{1 + y'^2} \right) \right] &= - \frac{d}{dx} \left[\frac{\partial}{\partial y'} \left(\sqrt{1 + y'^2} \right) \right] \\ &= - \frac{d}{dx} \left(\frac{y'}{\sqrt{1 + y'^2}} \right) = 0 \Rightarrow \frac{y'}{\sqrt{1 + y'^2}} = \text{constante} \Rightarrow y' = c \\ &\Rightarrow y(x) = cx + b \end{aligned}$$

FORMAS ALTERNATIVAS DE EULER-LAGRANGE

Existem duas formas alternativas da Equação de Euler-Lagrange

$$\frac{\partial F}{\partial y} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial F}{\partial y'} \right) = 0. \quad (0.1)$$

Essas formas alternativas são úteis em algumas situações. Uma dessas forma é quando (0.1) não depende explicitamente de x e a outra é quando (0.1) não depende explicitamente de y . Se a Equação de Euler-Lagrange não depende explicitamente de y , então

$$\frac{d}{dx} \left(\frac{\partial F}{\partial y'} \right) = 0.$$

Neste caso, obtemos

$$\frac{\partial F}{\partial y'} = \text{constante}. \quad (0.2)$$

No caso em que F não depende explicitamente de x obtemos a *identidade de Beltrami*. Multiplicando a equação de Euler-Lagrange por y' , temos

$$y' \frac{\partial F}{\partial y} - y' \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial F}{\partial y'} \right) = 0. \quad (0.3)$$

Derivando $F(x, y(x), y'(x))$ em relação a x , obtemos

$$\frac{dF}{dx} = \frac{\partial F}{\partial x} + \frac{\partial F}{\partial y} \frac{dy}{dx} + \frac{\partial F}{\partial y'} \frac{dy'}{dx} = \frac{\partial F}{\partial x} + y' \frac{\partial F}{\partial y} + y'' \frac{\partial F}{\partial y'}. \quad (0.4)$$

Isolando o segundo termo do lado direito de (0.4) e substituindo em (0.3), obtemos

$$\begin{aligned} \frac{dF}{dx} - \frac{\partial F}{\partial x} - y'' \frac{\partial F}{\partial y'} - y' \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial F}{\partial y'} \right) &= 0. \\ \frac{dF}{dx} - \left[y'' \frac{\partial F}{\partial y'} + y' \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial F}{\partial y'} \right) \right] &= \frac{\partial F}{\partial x} \\ \frac{dF}{dx} - \frac{d}{dx} \left(y' \frac{\partial F}{\partial y'} \right) &= \frac{\partial F}{\partial x} \\ \frac{d}{dx} \left(F - y' \frac{\partial F}{\partial y'} \right) &= \frac{\partial F}{\partial x} \end{aligned} \quad (0.5)$$

Agora, se F não depender explicitamente de x , então o lado direito de (0.5) deve ser nulo, ou seja,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} \left(F - y' \frac{\partial F}{\partial y'} \right) &= 0 \\ F - y' \frac{\partial F}{\partial y'} &= \text{constante}. \end{aligned} \quad (0.6)$$

Exercício. Use a identidade de Beltrami para minimizar os funcionais (0.1) e (0.3).

VÁRIAS VARIÁVEIS DEPENDENTES

A Equação de Euler-Lagrange que derivamos considerou apenas uma variável dependente, isto é, $F = F(x, y, y')$. Nesta seção, vamos considerar o caso em que o funcional depende de várias variáveis dependente, isto é, $F = F(x, y_1, y_2, \dots, y_n, y'_1, y'_2, \dots, y'_n)$. Nesse caso, as equações de Euler-Lagrange assumem a forma

$$\frac{\partial F}{\partial y_i} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial F}{\partial y'_i} \right) = 0, \quad i = 1, \dots, n. \quad (0.1)$$

Na demonstração de (0.1), usaremos o fato de que estamos procurando as funções $y_1(x), y_2(x), \dots, y_n(x)$ que minimiza ou maximiza a integral

$$I = \int_{x_i}^{x_f} F(x, y_1, y_2, \dots, y_n, y'_1, y'_2, \dots, y'_n) dx. \quad (0.2)$$

O procedimento é inteiramente análogo ao que fizemos na obtenção da fórmula para o caso de uma varável dependente. Como no caso anterior, existe uma infinidade de curvas entre os pontos x_i e x_f . As trajetórias que estão infinitamente próximas das verdadeiras trajetórias podem ser descritas por

$$Y_i(x, \epsilon) = y_i(x) + \epsilon \eta(x). \quad (0.3)$$

Expandindo (0.2) em uma *série de Maclarin*, temos

$$I(\epsilon) = I(0) + \left. \frac{dI}{d\epsilon} \right|_{\epsilon=0} \epsilon + O(\epsilon^2).$$

Desprezando os termos de $O(\epsilon^2)$, temos

$$\delta I = I(\epsilon) - I(0) = \left. \frac{dI}{d\epsilon} \right|_{\epsilon=0} \epsilon.$$

Fazendo $\delta I = 0$ é o mesmo que

$$\left. \frac{dI}{d\epsilon} \right|_{\epsilon=0} = 0,$$

pois, ϵ é infinitamente pequeno, mas não é nulo. Substituindo I pela integral, obtemos

$$\left[\frac{d}{d\epsilon} \int_{x_i}^{x_f} F(x, Y_1, Y_2, \dots, Y'_1, Y'_2, \dots) dx \right]_{\epsilon=0} = \left[\int_{x_1}^{x_1} \frac{d}{d\epsilon} F(x, Y_1, Y_2, \dots, Y'_1, Y'_2, \dots) dx \right]_{\epsilon=0} = 0$$

$$\left[\int_{x_i}^{x_f} \sum_i \left[\frac{\partial F}{\partial Y_i} \frac{\partial Y_i}{\partial \epsilon} + \frac{\partial F}{\partial Y'_i} \frac{\partial Y'_i}{\partial \epsilon} \right] dx \right]_{\epsilon=0} = 0.$$

Integrando o segundo termo do somatório por partes e usando (0.3), obtemos

$$\left[\int_{x_i}^{x_f} \sum_i \left[\frac{\partial F}{\partial Y_i} \eta_i(x) - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial F}{\partial Y'_i} \right) \eta_i(x) \right] dx \right]_{\epsilon=0} = 0$$

$$\left[\int_{x_i}^{x_f} \sum_i \left[\frac{\partial F}{\partial Y_i} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial F}{\partial Y'_i} \right) \right] \eta_i(x) dx \right]_{\epsilon=0} = 0.$$

Usando o lema do cálculo variacional obtemos (0.1), isto é,

$$\frac{\partial F}{\partial y_i} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial F}{\partial y'_i} \right) = 0, \quad i = 1, \dots, n.$$

Portanto, se o funcional depender de várias funções, então deveremos ter uma equação de Euler-Lagrange para cada função para obter o conjunto de funções que minimizarão o funcional.

RESTRIÇÃO HOLONÔMICA

Uma *restrição holonômica* é uma relação entre as coordenadas que pode ser expressa na forma de uma equação do tipo

$$f(q_1, q_2, \dots, q_n, t) = 0,$$

onde os q_i são as coordenadas generalizadas. A restrição holonômica pode envolver também variáveis dependentes. Quando a restrição não depende explicitamente do tempo t , a restrição é chamada de *escleronômica*. Na presença de uma restrição, as variáveis dependentes não são independentes um das outras. Por exemplo, considere o problema descrito por $f(x, y_1, y_2, \dots, y_n)$, onde as n variáveis dependentes, $y_i(x)$, estão relacionadas por m restrições da form

$$\begin{aligned} f_1(x, y_1, y_2, \dots, y_n) &= 0 \\ &\vdots \\ f_m(x, y_1, y_2, \dots, y_n) &= 0. \end{aligned}$$

Cada restrição reduz um grau de liberdade. No nosso caso, se tivermos n variáveis dependentes e m restrições, então o número de graus de liberdade será de $n - m$ e podemos usar apenas $n - m$ equações de Euler-Lagrange para resolver o problema proposto. Na teoria, esse procedimento é simples, mas na prática não é tão fácil assim. O melhor jeito é considerar as n variáveis e usar os *multiplicadores de Lagrange*. Este método consiste em tomar a variação de cada equação da restrição, ou seja,

$$\begin{aligned} \delta f_1 &= \frac{\partial f_1}{\partial y_1} \delta y_1 + \frac{\partial f_1}{\partial y_2} \delta y_2 + \dots + \frac{\partial f_1}{\partial y_n} \delta y_n = 0 \\ &\vdots \\ \delta f_m &= \frac{\partial f_m}{\partial y_1} \delta y_1 + \frac{\partial f_m}{\partial y_2} \delta y_2 + \dots + \frac{\partial f_m}{\partial y_n} \delta y_n = 0. \end{aligned}$$

Em seguida, multiplicamos cada uma destas equações por um *multiplicador indeterminado* λ (*multiplicador de Lagrange*) e os somamos:

$$\lambda_1 \delta f_1 + \lambda_2 \delta f_2 + \dots + \lambda_m \delta f_m = 0. \quad (0.1)$$

Como cada restrição é igual a zero, isto é, $f_i(x, y_1, y_2, \dots, y_n) = 0$, então devemos ter $\delta f_i = 0$, onde $i = 1 \dots m$, o que justifica a soma nula em (0.1). Por outro lado, a variação de F , no ponto estacionário, é zero. Pois,

$$\delta I = 0 \Rightarrow \delta \int F(x, y(x), y'(x)) dx = 0 \Rightarrow \int \delta F(x, y(x), y'(x)) dx = 0.$$

Essa integral só é nula se $\delta F(x, y(x), y'(x)) = 0$. Por outro lado, temos que

$$\delta F = \frac{\partial F}{\partial y_1} \delta y_1 + \frac{\partial F}{\partial y_2} \delta y_2 + \cdots + \frac{\partial F}{\partial y_n} \delta y_n = 0. \quad (0.2)$$

Somando as Equações (0.1) e (0.2), temos

$$\begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial y_1} \delta y_1 + \frac{\partial F}{\partial y_2} \delta y_2 + \cdots + \frac{\partial F}{\partial y_n} \delta y_n + \lambda_1 \left(\frac{\partial f_1}{\partial y_1} \delta y_1 + \frac{\partial f_1}{\partial y_2} \delta y_2 + \cdots + \frac{\partial f_1}{\partial y_n} \delta y_n \right) \\ + \lambda_2 \left(\frac{\partial f_2}{\partial y_1} \delta y_1 + \frac{\partial f_2}{\partial y_2} \delta y_2 + \cdots + \frac{\partial f_2}{\partial y_n} \delta y_n \right) \\ + \cdots + \lambda_m \left(\frac{\partial f_m}{\partial y_1} \delta y_1 + \frac{\partial f_m}{\partial y_2} \delta y_2 + \cdots + \frac{\partial f_m}{\partial y_n} \delta y_n \right) = 0. \end{aligned} \quad (0.3)$$

Rearranjando os termos de (0.3), temos

$$\begin{aligned} 0 = \frac{\partial F}{\partial y_1} \delta y_1 + \frac{\partial F}{\partial y_2} \delta y_2 + \cdots + \frac{\partial F}{\partial y_n} \delta y_n \\ + \lambda_1 \frac{\partial f_1}{\partial y_1} \delta y_1 + \lambda_1 \frac{\partial f_1}{\partial y_2} \delta y_2 + \cdots + \lambda_1 \frac{\partial f_1}{\partial y_n} \delta y_n \\ + \lambda_2 \frac{\partial f_2}{\partial y_1} \delta y_1 + \lambda_2 \frac{\partial f_2}{\partial y_2} \delta y_2 + \cdots + \lambda_2 \frac{\partial f_2}{\partial y_n} \delta y_n \\ \vdots \\ + \lambda_m \frac{\partial f_m}{\partial y_1} \delta y_1 + \lambda_m \frac{\partial f_m}{\partial y_2} \delta y_2 + \cdots + \lambda_m \frac{\partial f_m}{\partial y_n} \delta y_n. \end{aligned}$$

Esta equação pode ser rearranjada na forma de um somatório:

$$\sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial F}{\partial y_i} + \lambda_1 \frac{\partial f_1}{\partial y_i} + \lambda_2 \frac{\partial f_2}{\partial y_i} + \cdots + \lambda_m \frac{\partial f_m}{\partial y_i} \right) \delta y_i = 0. \quad (0.4)$$

A Equação (0.4) só será nula se cada coeficiente de δy_i for zero, pois todos δy_i 's são independentes. Uma outra forma de pensar seria a seguinte: como os λ 's podem assumir quaisquer valores reais, então, podemos escolher um conjunto de λ 's de tal modo que

$$\frac{\partial F}{\partial y_i} + \lambda_1 \frac{\partial f_1}{\partial y_i} + \lambda_2 \frac{\partial f_2}{\partial y_i} + \cdots + \lambda_m \frac{\partial f_m}{\partial y_i} = 0, \quad i = 1, \dots, n \quad (0.5)$$

A Equação (0.5), com a ajuda da Equação (0.1), pode ser escrita como

$$\delta F + \lambda_1 \delta f_1 + \lambda_2 \delta f_2 + \cdots + \lambda_m \delta f_m = 0, \quad (0.6)$$

ou

$$\delta(F + \lambda_1 f_1 + \lambda_2 f_2 + \cdots + \lambda_m f_m) = 0, \quad (0.7)$$

onde os λ 's são obtidos usando as equações (0.5). A Equação (0.7) afirma que a variação de $F + \lambda_1 f_1 + \lambda_2 f_2 + \cdots + \lambda_m f_m$ é zero para uma variação arbitrária nas coordenadas generalizadas. Observe que inicialmente tínhamos que $\delta F = 0$ sujeita as restrições $f_i(y_1, y_2, y_3, \dots, y_n) = 0$. Agora temos $\delta(F + \lambda_1 f_1 + \lambda_2 f_2 + \cdots + \lambda_m f_m) = 0$ sem nenhuma restrição sobre as coordenadas generalizadas.

No caso de termos apenas uma restrição, a Equação (0.7) é dada por

$$\delta(F + \lambda f) = 0. \quad (0.8)$$

Esta Equação produz n equações do tipo

$$\frac{\partial F}{\partial y_i} + \lambda \frac{\partial f}{\partial y_i} = 0, \quad i = 1, \dots, n.$$

Além disso, temos uma outra equação que é $f = 0$. Portanto, temos $n + 1$ equações em $n + 1$ variáveis desconhecidas. Como o número de equações é igual ao número de variáveis, a solução do sistema de equações é única.

Exemplo 1

Considere um plano dado por $\Theta(x, y) = x + y$. Um círculo no plano xy é projetado no plano. Determine os pontos de máximo e mínimo do círculo projetado no plano sujeito a restrição $(x - 2)^2 + (y - 2)^2 = 1$.

Solução:

$$\Theta(x, y) = x + y$$

$$f(x, y) = (x - 2)^2 + (y - 2)^2 - 1 = 0$$

A condição

$$\delta(\Theta + \lambda f) = 0,$$

quando inserida na equação de Euler-Lagrange leva-nos as seguintes relações:

$$\frac{\partial}{\partial x}(\Theta + \lambda f) = 0 \Rightarrow 1 + 2\lambda(x - 2) = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial y}(\Theta + \lambda f) = 0 \Rightarrow 1 + 2\lambda(y - 2) = 0.$$

Além disso, temos uma terceira equação dada por $f = 0$, que é a restrição, ou seja,

$$(x - 2)^2 + (y - 2)^2 - 1 = 0 \quad (0.9)$$

Resolvendo as duas primeiras equações para λ e igualando os resultados, vemos que $x = y$. Substituindo y por x em (0.9), obtemos

$$x = 2 \pm \frac{\sqrt{2}}{2}.$$

Portanto, os pontos extremos de $\Theta(x, y) = x + y$, sujeito à restrição $(x - 2)^2 + (y - 2)^2 = 1$, são $(2 + \frac{\sqrt{2}}{2}, 2 + \frac{\sqrt{2}}{2})$ e $(2 - \frac{\sqrt{2}}{2}, 2 - \frac{\sqrt{2}}{2})$.

Exemplo 2

Encontre o valor máximo de $f(x, y) = x^2y$ com a condição de que x e y pertencem ao círculo $x^2 + y^2 = 3$.

DERIVADAS DE FUNCIONAIS

No cálculo diferencial, a derivada parcial indica a taxa com que uma função varia em relação a uma das coordenadas. Por exemplo, dada uma função $f(x, y, z)$, a taxa de variação de f na direção de x é dada pela derivada parcial $\partial f / \partial x$. Seria interessante descrever de modo similar a taxa de variação de um funcional com respeito a função da qual o funcional depende, ou seja, a variação do funcional $I[u(x)]$ na direção de $u(x)$. Isto pode ser feito usando a derivada funcional denotada por $\delta I / \delta u$ do funcional $I[u(x)]$. Similarmente à definição ordinária de derivada, vamos diferenciar o funcional $I[u(x)]$ com respeito a ϵ , ou seja,

$$\left. \frac{dI}{d\epsilon} \right|_{\epsilon=0} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{I[u + \epsilon\eta] - I[u]}{\epsilon} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon} \left\{ \int_{x_0}^{x_1} F(x, u + \epsilon\eta, u' + \epsilon\eta') dx - \int_{x_0}^{x_1} F(x, u, u') dx \right\} \quad (0.1)$$

Expandindo a primeira integral usando série de Taylor multivariada, temos

$$\left. \frac{dI}{d\epsilon} \right|_{\epsilon=0} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon} \left\{ \int_{x_0}^{x_1} \left[F(x, u, u') + \frac{\partial F}{\partial u} \epsilon\eta + \frac{\partial F}{\partial u'} \epsilon\eta' + O(\epsilon^2) \right] dx - \int_{x_0}^{x_1} F(x, u, u') dx \right\}$$

Desprezando os termos de ordem $O(\epsilon^2)$, obtemos

$$\begin{aligned} \left. \frac{dI}{d\epsilon} \right|_{\epsilon=0} &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon} \left\{ \int_{x_0}^{x_1} \left[F(x, u, u') + \frac{\partial F}{\partial u} \epsilon\eta + \frac{\partial F}{\partial u'} \epsilon\eta' \right] dx - \int_{x_0}^{x_1} F(x, u, u') dx \right\} \\ &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon} \left\{ \int_{x_0}^{x_1} F(x, u, u') dx + \int_{x_0}^{x_1} \left[\frac{\partial F}{\partial u} \epsilon\eta + \frac{\partial F}{\partial u'} \epsilon\eta' \right] dx - \int_{x_0}^{x_1} F(x, u, u') dx \right\} \\ &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon} \left\{ \int_{x_0}^{x_1} \left[\frac{\partial F}{\partial u} \epsilon\eta + \frac{\partial F}{\partial u'} \epsilon\eta' \right] dx \right\} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{x_0}^{x_1} \left[\frac{\partial F}{\partial u} \eta + \frac{\partial F}{\partial u'} \eta' \right] dx \\ &= \int_{x_0}^{x_1} \left(\frac{\partial F}{\partial u} \eta + \frac{\partial F}{\partial u'} \eta' \right) dx \end{aligned}$$

$$\left. \frac{dI}{d\epsilon} \right|_{\epsilon=0} = \int_{x_0}^{x_1} \left(\frac{\partial F}{\partial u} \eta + \frac{\partial F}{\partial u'} \eta' \right) dx.$$

Integrando a segunda integral por parte, obtemos

$$\frac{dI}{d\epsilon}\Big|_{\epsilon=0} = \int_{x_0}^{x_1} \frac{\partial F}{\partial u} \eta(x) dx + \underbrace{\left[\frac{\partial F}{\partial u'} \eta(x) \right]_{x_0}^{x_1}}_{=0} - \int_{x_0}^{x_1} \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial F}{\partial u'} \right) \eta(x) dx.$$

O segundo termo do lado direito se anula, pois $\eta(x_0) = \eta(x_1) = 0$. Logo,

$$\frac{dI}{d\epsilon}\Big|_{\epsilon=0} = \int_{x_0}^{x_1} \left[\frac{\partial F}{\partial u} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial F}{\partial u'} \right) \right] \eta(x) dx = \int_{x_0}^{x_1} \frac{\delta I}{\delta u} \eta(x) dx.$$

onde definimos a derivada funcional como

$$\frac{\delta I}{\delta u} = \frac{\partial F}{\partial u} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial F}{\partial u'} \right).$$

Dizemos que a derivada do funcional $I[u, u']$ existe se puder ser colocada na forma (0.2)

$$\frac{dI}{d\epsilon}\Big|_{\epsilon=0} = \int_{x_0}^{x_1} \frac{\delta I}{\delta u} \eta(x) dx, \quad (0.2)$$

Devemos ter o cuidado de colocar o resultado na forma do lado direito de (0.2) (Parr & Yang 1989, p. 246).

Exemplo 1. Usando a definição (0.2), encontre a derivado do funcional dado por

$$F[y(x)] = \int y^2(x) dx.$$

$$\begin{aligned} \frac{dF[y(x)]}{d\epsilon}\Big|_{\epsilon=0} &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon} \int_{x_0}^{x_1} [(y + \epsilon\eta)^2 - y^2] dx = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon} \int_{x_0}^{x_1} (y^2 + 2y\epsilon\eta + \epsilon^2\eta^2 - y^2) dx \\ &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon} \int_{x_0}^{x_1} (2y\epsilon\eta + \epsilon^2\eta^2) dx = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon} \int_{x_0}^{x_1} (2y\eta + \epsilon\eta^2) dx = \int_{x_0}^{x_1} 2y\eta(x) dx \end{aligned}$$

Portanto, este resultado está na forma (0.2). Consequentemente, a derivada do funcional $F[y(x)]$ é

$$\frac{\delta F}{\delta y(x)} = 2y(x).$$

Exemplo 2. Usando a definição, encontre a derivada do funcional

$$F[\varphi(t)] = \int \sqrt{\varphi(t)} dt.$$

Usando novamente a definição (0.2) e expandindo $(\varphi(t) + \epsilon\phi(t))^{\frac{1}{2}}$ em uma série binomial, obtemos

$$\begin{aligned}
\left. \frac{dF[y(x)]}{d\epsilon} \right|_{\epsilon=0} &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon} \int_{t_0}^{t_1} \left[(\varphi(t) + \epsilon\phi(t))^{\frac{1}{2}} - \varphi^{\frac{1}{2}}(t) \right] \\
&= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon} \int_{x_0}^{x_1} \left[\varphi^{\frac{1}{2}}(t) + \frac{1}{2} \varphi^{-\frac{1}{2}}(t) \epsilon\phi(t) - \frac{1}{8} (\varphi(t))^{-\frac{3}{2}} (\epsilon\phi(t))^2 + \dots - \varphi^{\frac{1}{2}}(t) \right] dt \\
&= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon} \int_{x_0}^{x_1} \left[\frac{1}{2} \varphi^{-\frac{1}{2}}(t) \epsilon\phi(t) - \frac{1}{8} (\varphi(t))^{-\frac{3}{2}} (\epsilon\phi(t))^2 \right] dt \\
&= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{x_0}^{x_1} \left[\frac{1}{2} \varphi^{-\frac{1}{2}}(t) \phi(t) - \frac{1}{8} (\varphi(t))^{-\frac{3}{2}} \epsilon\phi^2(t) \right] dt = \int \frac{1}{2} \varphi^{-\frac{1}{2}}(t) \phi(x) dt
\end{aligned}$$

O resultado obtido está na forma de (0.2), portanto, a derivada do funcional $F[\varphi(t)]$ é

$$\frac{\delta F[\varphi(t)]}{\delta \varphi} = \frac{1}{2} \varphi^{-\frac{1}{2}}(t).$$

Notação variacional δ

Vamos usar o símbolo δ para a notação variacional para que possamos tirar vantagem da similaridade das notações d e ∂ usadas no cálculo diferencial. Desse modo, não precisamos mais nos preocupar com as construções matemáticas envolvendo os símbolos ϵ e η . A principal diferença entre os símbolos d , ∂ e δ é que d e ∂ envolve mudanças na função de ponto a ponto, enquanto o símbolo δ denota mudança de função para função mantendo fixo o ponto x .

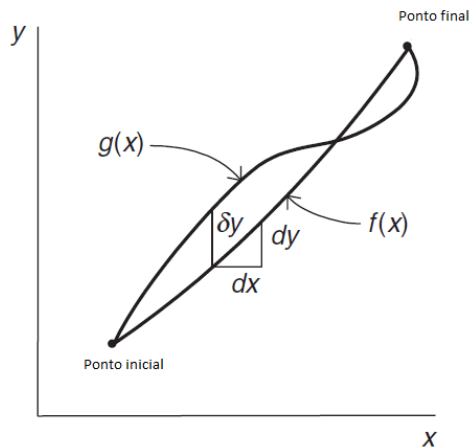


Figura 0.1. Diferença entre as notações δ e d . δ representa um variação infinitesimal da função $f(x)$ mantendo constante a variável independente x . O símbolo d representa um variação da função f devida a uma variação infinitesimal da variável independente x .

Vamos explorar um pouco mais a similaridade entre as notações δ e d . Para tanto, seja o funcional dado por

$$I = \int_{x_0}^{x_1} F(x, u, u') dx.$$

Agora, considere o conjunto de todas as funções com extremos x_0 e x_1 . Queremos encontrar a função $u(x)$ que torna o funcional $I[u(x), u'(x)]$ estacionário, ou seja,

$$\delta I[u(x)] = \delta \int_{x_0}^{x_1} F(x, u, u') dx = \int_{x_0}^{x_1} \delta F(x, u, u') dx = 0. \quad (0.1)$$

Em (0.1), usamos a propriedade (0.24). Usando a notação variacional δ , vemos a similaridade entre a *diferencial* de uma função $f(x, y, z)$

$$df = \frac{\partial f}{\partial x} dx + \frac{\partial f}{\partial y} dy + \frac{\partial f}{\partial z} dz$$

que representa a mudança da função f ao longo da curva de ponto em ponto e de uma função do tipo $F(x, u(x), u'(x))$, ou seja,

$$dF = \frac{\partial F}{\partial x} dx + \frac{\partial F}{\partial u} du + \frac{\partial F}{\partial u'} du'.$$

Para fazermos a distinção entre df e dF , vamos mudar a notação de dF para

$$\delta F = \frac{\partial F}{\partial x} \delta x + \frac{\partial F}{\partial u} \delta u + \frac{\partial F}{\partial u'} \delta u'. \quad (0.2)$$

No entanto, x é uma variável independente e, portanto, não varia: $\delta x = 0$. Com essa observação, podemos escrever

$$\delta F = \frac{\partial F}{\partial u} \delta u + \frac{\partial F}{\partial u'} \delta u'$$

que é a variação de F de função para função. Do cálculo diferencial e integral, sabemos que o ponto estacionário de $f(x, y, z)$ é obtido fazendo $df = 0$. De modo similar, vamos encontrar a função $u(x)$ que torna funcional I estacionário, fazendo $\delta I = 0$. As leis de soma e produto que se aplicam ao diferencial df se aplicam também ao δF :

$$\delta(F + G) = \delta F + \delta G \text{ e } \delta(FG) = F\delta G + G\delta F.$$

Para ilustrar a notação δ , vamos rederivar as equações de Euler-Lagrange usando essa notação, ou seja, vamos procurar a função que torna o funcional

$$I[u] = \int_{x_0}^{x_1} F[x, u(x), u'(x)] dx$$

estacionário. Fazendo $\delta I = 0$, obtemos

$$\delta I[u] = \delta \int_{x_0}^{x_1} F[x, u(x), u'(x)] dx = \int_{x_0}^{x_1} \delta F[x, u(x), u'(x)] dx = 0.$$

Usando (0.2), obtemos

$$\int_{x_0}^{x_1} \delta F[x, u(x), u'(x)] dx = \int_{x_0}^{x_1} \left(\frac{\partial F}{\partial x} \delta x + \frac{\partial F}{\partial u} \delta u + \frac{\partial F}{\partial u'} \delta u' \right) dx = \int_{x_0}^{x_1} \left(\frac{\partial F}{\partial u} \delta u + \frac{\partial F}{\partial u'} \delta u' \right) dx$$

onde usamos o fato de que x não varia e, portanto, $\delta x = 0$. Integrando por parte a segunda integral, obtemos

$$\delta I = \int_{x_0}^{x_1} \frac{\partial F}{\partial u} \delta u dx + \left[\frac{\partial F}{\partial u'} \delta u \right]_{x_0}^{x_1} - \int_{x_0}^{x_1} \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial F}{\partial u'} \right) \delta u dx.$$

Como $u(x)$ não varia nos extremos, então

$$\delta I = \int_{x_0}^{x_1} \frac{\partial F}{\partial u} \delta u dx + \underbrace{\left[\frac{\partial F}{\partial u'} \delta u \right]_{x_0}^{x_1}}_{=0} - \int_{x_0}^{x_1} \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial F}{\partial u'} \right) \delta u dx = \int_{x_0}^{x_1} \left[\frac{\partial F}{\partial u} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial F}{\partial u'} \right) \right] \delta u dx = 0.$$

Usando o lema fundamental do cálculo variacional, temos que

$$\frac{\partial F}{\partial u} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial F}{\partial u'} \right) = 0$$

Que é, exatamente, a equação de Euler-Lagrange para $F = F(x, u, u')$ obtida anteriormente.

Regra da soma

Usando a definição (0.1), podemos mostrar que a derivada funcional segue regras similares às derivadas ordinárias. A primeira destas regras é a regra da soma ou linearidade. Considere, por exemplo, os funcionais $F[f(x)]$ e $G[f(x)]$ e as constantes c_1 e c_2 . Neste caso, a regra da soma para a derivada de funcionais é dada por

$$\frac{\delta}{\delta f(x)} (c_1 F[f(x)] + c_2 G[f(x)]) = c_1 \frac{\delta F[f(x)]}{\delta f(x)} + c_2 \frac{\delta G[f(x)]}{\delta f(x)}.$$

Demonstração:

Seja $I[f(x)] = c_1 F[f(x)] + c_2 G[f(x)]$

$$\begin{aligned}
\frac{\delta I[f(x)]}{\delta f(x)} &= \left. \frac{dI}{d\epsilon} \right|_{\epsilon=0} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{I[u + \epsilon\eta] - I[u]}{\epsilon} \\
&= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{c_1 F[f(x) + \epsilon\phi(x)] + c_2 G[f(x) + \epsilon\phi(x)] - c_1 F[f(x)] - c_2 G[f(x)]}{\epsilon} \\
&= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{c_1 \{F[f(x) + \epsilon\phi(x)] - F[f(x)]\} + c_2 \{G[f(x) + \epsilon\phi(x)] - G[f(x)]\}}{\epsilon} \\
&= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left\{ \frac{c_1 \{F[f(x) + \epsilon\phi(x)] - F[f(x)]\}}{\epsilon} + \frac{c_2 \{G[f(x) + \epsilon\phi(x)] - G[f(x)]\}}{\epsilon} \right\} \\
&= c_1 \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{F[f(x) + \epsilon\phi(x)] - F[f(x)]}{\epsilon} + c_2 \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{G[f(x) + \epsilon\phi(x)] - G[f(x)]}{\epsilon} \\
&= c_1 \frac{\delta F[f(x)]}{\delta f(x)} + c_2 \frac{\delta G[f(x)]}{\delta f(x)}
\end{aligned}$$

Portanto, a derivada de uma soma de funcionais multiplicados por constantes é igual à soma das derivadas dos funcionais multiplicadas pelas respectivas constantes.

Regra do produto

Considere o funcional dado pelo produto de $F[f(x)]$ e $G[f(x)]$, ou seja,

$$I[f(x)] = F[f(x)]G[f(x)]$$

A derivada do produto de funcionais será dada por

$$\frac{\delta}{\delta f(x)}(FG) = \frac{\delta F}{\delta f(x)}G + F \frac{\delta G}{\delta f(x)}$$

Demonstração:

$$\begin{aligned}
\frac{\delta I[f(x)]}{\delta f(x)} &= \left. \frac{dI}{d\epsilon} \right|_{\epsilon=0} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{I[u + \epsilon\eta] - I[u]}{\epsilon} = \\
&= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{F[f(x) + \epsilon\phi(x)]G[f(x) + \epsilon\phi(x)] - F[f(x)]G[f(x)]}{\epsilon} \\
&= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{F[f + \epsilon\phi]G[f + \epsilon\phi] + F[f + \epsilon\phi]G[f] - F[f + \epsilon\phi]G[f] - F[f]G[f]}{\epsilon} \\
&= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left\{ \frac{F[f(x) + \epsilon\phi(x)]\{G[f(x) + \epsilon\phi(x)] - G[f(x)]\}}{\epsilon} \right. \\
&\quad \left. + \frac{\{F[f(x) + \epsilon\phi(x)] - F[f(x)]\}G[f(x)]}{\epsilon} \right\} \\
&= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} F[f(x) + \epsilon\phi(x)] \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{G[f(x) + \epsilon\phi(x)] - G[f(x)]}{\epsilon} \\
&\quad + \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{F[f(x) + \epsilon\phi(x)] - F[f(x)]}{\epsilon} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} G[f(x) + \epsilon\phi(x)] = F \frac{\delta G}{\delta f(x)} + \frac{\delta F}{\delta f(x)} G
\end{aligned}$$

Regra da cadeia

Suponha que F seja um funcional de $f(x)$, ou seja, $F = F[f(x)]$. A diferencial do funcional, ou seja, uma pequena variação δF do funcional F é dado por

$$\delta F = \int \frac{\delta F}{\delta f(x)} \delta f(x) dx. \quad (0.1)$$

Agora, suponha que f , para cada ponto x , seja um funcional de $g(x)$, ou seja, $f = f[x, g(x)]$. Uma pequena variação δf é dada por

$$\delta f = \int \frac{\delta f}{\delta g(x')} \delta g(x') dx'. \quad (0.2)$$

Usando (0.2) em (0.1), obtemos

$$\delta F = \int \int \frac{\delta F}{\delta f(x)} \frac{\delta f}{\delta g(x')} \delta g(x') dx dx' = \int \left(\int \frac{\delta F}{\delta f(x)} \frac{\delta f}{\delta g(x')} dx' \right) \delta g(x) dx \quad (0.3)$$

O lado direito de (0.3) é a regra para a obtenção da regra da cadeia, pois está no formato de (0.2), ou seja,

$$\frac{\delta F}{\delta g(x)} = \int \frac{\delta F}{\delta f(x)} \frac{\delta f}{\delta g(x')} dx'. \quad (0.4)$$

Se f é uma função diferenciável ordinária, então a integral de (0.4) desaparece e podemos escrever

$$\frac{\delta F}{\delta g(x)} = \frac{\delta F}{\delta f(x)} \frac{df}{dg(x)} \quad (0.5)$$

onde $F = F[f(g(x))]$. Na demonstração de (0.5) consideraremos primeiro um funcional do tipo $F = F[f(x)]$. Uma pequena variação de F devida a uma pequena variação de $f(x)$, ou seja, a variação δF é dada por

$$\delta F = \int \frac{\delta F}{\delta f(x)} \delta f(x) dx. \quad (0.6)$$

Agora, suponha que f seja, na verdade, função de $g(x)$, ou seja, $f = f(g(x))$, uma função composta. Então, uma variação de f para um ponto fixo de x devida a uma variação de $g(x)$, será dada por

$$\delta f = \frac{\partial f}{\partial g} \delta g \quad (0.7)$$

Em (0.7) estamos usando os conceitos desenvolvidos em (0.2). Substituindo (0.7) em (0.6), obtemos:

$$\delta F = \int \frac{\delta F}{\delta f} \frac{\partial f}{\partial g} \delta g dx. \quad (0.8)$$

A Equação (0.8) está no formato de (0.2) e, portanto, devemos ter

$$\frac{\delta F}{\delta g} = \frac{\delta F}{\delta f} \frac{\partial f}{\partial g} \quad (0.9)$$

Como exemplo de aplicação de (0.5), considere o funcional da energia:

$$E = E[\rho(\mathbf{r})].$$

A densidade eletrônica ρ , para um sistema de camada fechada, pode ser calculada como

$$\rho(\mathbf{r}) = 2 \sum_i^{N/2} |\phi_i(\mathbf{r})|^2 = 2 \sum_i^{N/2} \phi_i^*(\mathbf{r}) \phi_i(\mathbf{r}).$$

Nesse caso, a derivada da energia em relação ao orbital ϕ_j^* é

$$\frac{\delta E}{\delta \phi_j^*(\mathbf{r})} = \frac{\delta E}{\delta \rho} \frac{\delta \rho}{\delta \phi_j^*(\mathbf{r})} = \frac{\delta E}{\delta \rho} 2\phi_j(\mathbf{r}).$$

Exemplo 2. Considere o funcional

$$F[g(x)] = \int g(x)^2 dx,$$

onde

$$g(x) = \int k(x, y) f(y) dy$$

e $k(x, y)$ é uma função kernel dada. Queremos encontrar a derivada funcional de F com respeito a $f(x)$, denotada por $\delta F / \delta f(x)$. De acordo com a regra da cadeia para a derivada de funcionais, temos que

$$\frac{\delta F}{\delta f(x)} = \int \frac{\delta F}{\delta g(y)} \frac{\delta g(y)}{\delta f(x)} dy$$

1. Encontrar $\frac{\delta F}{\delta g(y)}$:

Como

$$F[g(x)] = \int g(x)^2 dx$$

então

$$\frac{\delta F}{\delta g(y)} = 2g(y).$$

2. Encontrar $\frac{\delta g(y)}{\delta f(x)}$:

Como

$$g(x) = \int k(x, y)f(y)dy$$

então

$$\frac{\delta g(y)}{\delta f(x)} = k(x, y)$$

3. Substituindo estes resultados na fórmula da regra da cadeia, temos

$$\frac{\delta F}{\delta f(x)} = \int 2g(y)k(x, y)dy = 2 \int k(x, y) \left(\int k(x, y)f(z)dz \right) dy$$

Exemplo 3: Seja o funcional $F[g]$ definido como

$$F[g] = \int e^{g(x)}dx$$

e seja

$$g(x) = \int f(y)h(x - y)dy$$

onde $h(x - y)$ é uma função dada. Gostaríamos de encontrar a derivada do funcional F com respeito a $f(x)$, denotado como

$$\frac{\delta F}{\delta f(x)}$$

Encontrar $\frac{\delta F}{\delta g(y)}$:

Como

$$F[g] = \int e^{g(x)}dx$$

então

$$\frac{\delta F}{\delta g(y)} = e^{g(y)}$$

Encontrar $\frac{\delta g(y)}{\delta f(x)}$:

Como

$$g(x) = \int f(y)h(x - y)dy$$

então

$$\frac{\delta g(y)}{\delta f(x)} = h(x - y)$$

Substituindo na fórmula da regra da cadeia, temos

$$\frac{\delta F}{\delta f(x)} = \int \frac{\delta F}{\delta g} \frac{\delta g}{\delta f(y)} dy = \int e^{g(y)} h(x - y) dy = \int e^{\int f(z)h(x-z)dz} h(y - x) dy$$

DERIVADA FUNCIONAL EM UMA DIMENSÃO

Como já vimos, a derivada do funcional

$$F[y(x)] = \int f(x, y(x), y'(x)) dx.$$

é dada por

$$\frac{\delta F[y]}{\delta y} = \frac{\partial f}{\partial y} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial f}{\partial y'} \right). \quad (0.1)$$

Esta fórmula pode ser generalizada para o caso de um funcional do tipo

$$F[y(x)] = \int f(x, y, y^{(1)}, y^{(2)}, y^{(3)}, \dots) dx,$$

onde $y = y(x)$ e $y^{(i)}$ representa a i -ésima derivada de y em relação a x . A fórmula geral é dada por

$$\begin{aligned} \frac{\delta F[y]}{\delta y} &= \frac{\partial f}{\partial y} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial f}{\partial y^{(1)}} \right) + \frac{d^2}{dx^2} \left(\frac{\partial f}{\partial y^{(2)}} \right) - \frac{d^3}{dx^3} \left(\frac{\partial f}{\partial y^{(3)}} \right) + \dots \\ \frac{\delta F[y]}{\delta y} &= \sum_{i=0}^n (-1)^i \frac{d^i}{dx^i} \left(\frac{\partial f}{\partial y^{(i)}} \right). \end{aligned} \quad (0.2)$$

A demonstração de (0.2) é inteiramente análoga a demonstração de (0.1).

DERIVADA FUNCIONAL EM VÁRIAS DIMENSÕES

Seja o funcional

$$F[\rho] = \int f(\mathbf{r}, \rho(\mathbf{r}), \nabla\rho(\mathbf{r})) d\mathbf{r}. \quad (0.1)$$

Considere uma função $\phi(\mathbf{r})$ que se anula nas bordas da região de integração. Vamos definir a função $Y(\mathbf{r}, \epsilon)$, de tal modo que

$$Y(\mathbf{r}, \epsilon) = \rho(\mathbf{r}) + \epsilon\phi(\mathbf{r}) \quad \text{e} \quad \nabla Y(\mathbf{r}, \epsilon) = \nabla\rho(\mathbf{r}) + \epsilon\nabla\phi(\mathbf{r}).$$

A derivada do funcional (0.1), de acordo com a definição é

$$\begin{aligned} \left. \frac{dF}{d\epsilon} \right|_{\epsilon=0} &= \left[\frac{d}{d\epsilon} \int f(\mathbf{r}, Y(\mathbf{r}), \nabla Y(\mathbf{r})) d\mathbf{r} \right]_{\epsilon=0} \\ &= \left[\int \frac{\partial f}{\partial Y} \frac{\partial Y}{\partial \epsilon} + \frac{\partial f}{\partial(\nabla Y)} \frac{\partial(\nabla Y)}{\partial \epsilon} d\mathbf{r} \right]_{\epsilon=0} \\ &= \int \left(\frac{\partial f}{\partial \rho} \phi + \frac{\partial f}{\partial \nabla \rho} \cdot \nabla \phi \right) d\mathbf{r} \\ &= \int \left[\frac{\partial f}{\partial \rho} \phi + \nabla \cdot \left(\frac{\partial f}{\partial \nabla \rho} \phi \right) - \left(\nabla \cdot \frac{\partial f}{\partial \nabla \rho} \right) \phi \right] d\mathbf{r} \\ &= \int \left[\frac{\partial f}{\partial \rho} \phi - \left(\nabla \cdot \frac{\partial f}{\partial \nabla \rho} \right) \phi \right] d\mathbf{r} \\ &= \int \left(\frac{\partial f}{\partial \rho} - \nabla \cdot \frac{\partial f}{\partial \nabla \rho} \right) \phi(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \\ &= \int \left(\frac{\partial f}{\partial \rho} - \nabla \cdot \frac{\partial f}{\partial \nabla \rho} \right) \phi(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \end{aligned} \quad (0.2)$$

A terceira linha de cima para baixo foi obtida fazendo $\epsilon = 0$, onde $\partial f / \partial \nabla \rho$ é definido como

$$\frac{\partial f}{\partial \nabla \rho} \equiv \frac{\partial f}{\partial \rho_x} \hat{i} + \frac{\partial f}{\partial \rho_y} \hat{j} + \frac{\partial f}{\partial \rho_z} \hat{k},$$

onde ρ_x, ρ_y e ρ_z são dados, respectivamente, por $\partial\rho/\partial x$, $\partial\rho/\partial y$ e $\partial\rho/\partial z$. A quarta linha foi obtida usando a regra do produto para a divergência, ou seja,

$$\nabla \cdot \left(\frac{\partial f}{\partial \nabla \rho} \phi \right) = \left(\nabla \cdot \frac{\partial f}{\partial \nabla \rho} \right) \phi + \frac{\partial f}{\partial \nabla \rho} \cdot \nabla \phi.$$

A quinta linha foi obtida usando o teorema da divergência e a condição de que $\phi(\mathbf{r}) = 0$ nas bordas da região de integração, isto é,

$$\int \nabla \cdot \left(\frac{\partial f}{\partial \nabla \rho} \phi(\mathbf{r}) \right) d\mathbf{r} = \oiint \left(\frac{\partial f}{\partial \nabla \rho} \phi(\mathbf{r}) \right) \cdot d\mathbf{s} = 0,$$

onde $d\mathbf{s}$ representa o vetor unitário perpendicular à superfície fechada S . Essa integral de superfície é nula, pois, por definição, $\phi(\mathbf{r}) = 0$ na superfície que é a fronteira da região. Observe que (0.2) está no formato de

$$\left. \frac{dF}{d\epsilon} \right|_{\epsilon=0} = \int \frac{\delta F}{\delta \rho(\mathbf{r})} \phi(\mathbf{r}) d\mathbf{r}$$

Portanto, a derivada de $F[\rho(\mathbf{r})]$ é dada por

$$\frac{\delta F}{\delta \rho(\mathbf{r})} = \frac{\partial f}{\partial \rho} - \nabla \cdot \frac{\partial f}{\partial \nabla \rho} \quad (0.3)$$

onde $\rho = \rho(\mathbf{r})$ e $f = f(\mathbf{r}, \rho(\mathbf{r}), \nabla \rho(\mathbf{r}))$. A fórmula (0.3) é aplicável a um funcional do tipo

$$F[\rho(\mathbf{r})] = \int f(\mathbf{r}, \rho(\mathbf{r}), \nabla \rho(\mathbf{r})) d\mathbf{r}.$$

Esta fórmula pode ser generalizada para o caso de um funcional do tipo

$$F[\rho(\mathbf{r})] = \int f(\mathbf{r}, \rho(\mathbf{r}), \nabla \rho(\mathbf{r}), \nabla^{(2)} \rho(\mathbf{r}), \nabla^{(3)} \rho(\mathbf{r}), \dots, \nabla^{(N)} \rho(\mathbf{r})) d\mathbf{r}, \quad (0.4)$$

onde $\mathbf{r} \in \mathbb{R}^n$ e $\nabla^{(i)}$ é um tensor cujas n^i componentes são os operadores das derivadas parciais de ordem i , ou seja,

$$[\nabla^{(i)}]_{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_i} = \frac{\partial^i}{\partial r_{\alpha_1} \partial r_{\alpha_2} \dots \partial r_{\alpha_i}}$$

onde $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_i = 1, 2, \dots, n$ são as coordenadas generalizadas.

Por exemplo, no caso de $n = 3$ (três dimensões) e $i = 1$, derivada de primeira ordem, as componentes do tensor seriam dadas por

$$[\nabla]_{\alpha} = \frac{\partial}{\partial r_{\alpha}} \Rightarrow \left(\frac{\partial}{\partial r_1}, \frac{\partial}{\partial r_2}, \frac{\partial}{\partial r_3} \right) = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right),$$

onde, na última igualdade, fizemos $r_1 = x, r_2 = y$ e $r_3 = z$ para maior clareza. No caso de três dimensões ($n = 3$) e derivada de segunda ordem ($i = 2$), o tensor tem as seguintes componentes:

$$[\nabla^{(2)}]_{\alpha\beta} = \frac{\partial^2}{\partial r_{\alpha} \partial r_{\beta}},$$

onde $\alpha, \beta = 1, 2, 3$, ou seja, usando a notação x, y, z , temos o tensor (na notação matricial) dado por

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial^2}{\partial x^2} & \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} & \frac{\partial^2}{\partial x \partial z} \\ \frac{\partial^2}{\partial y \partial x} & \frac{\partial^2}{\partial y^2} & \frac{\partial^2}{\partial y \partial z} \\ \frac{\partial^2}{\partial z \partial x} & \frac{\partial^2}{\partial z \partial y} & \frac{\partial^2}{\partial z^2} \end{pmatrix}$$

Para o funcional do tipo (0.4) podemos obter de modo similar ao procedimento usado na obtenção de (0.3) uma fórmula para a derivada funcional:

$$\frac{\delta F[\rho]}{\delta \rho} = \frac{\partial f}{\partial \rho} - \nabla \cdot \frac{\partial f}{\partial(\nabla \rho)} + \nabla^{(2)} \cdot \frac{\partial f}{\partial(\nabla^{(2)} \rho)} - \dots + (-1)^N \nabla^{(N)} \cdot \frac{\partial f}{\partial(\nabla^{(N)} \rho)}$$

$$\boxed{\frac{\delta F[\rho]}{\delta \rho} = \frac{\partial f}{\partial \rho} + \sum_{i=1}^N (-1)^i \nabla^{(i)} \cdot \frac{\partial f}{\partial(\nabla^{(i)} \rho)}} \quad (0.5)$$

As componentes n^i do tensor $\partial f / \partial(\nabla^{(i)} \rho)$ são as derivadas parciais de f em relação as derivadas parciais de ρ , ou seja,

$$\left[\frac{\partial f}{\partial(\nabla^{(i)} \rho)} \right]_{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_i} = \frac{\partial f}{\partial \rho_{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_i}}$$

onde

$$\rho_{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_i} = \frac{\partial^i \rho}{\partial r_{\alpha_1} \partial r_{\alpha_2} \dots \partial r_{\alpha_i}}$$

O produto do tensor escalar é

$$\nabla^{(i)} \cdot \frac{\partial f}{\partial(\nabla^{(i)} \rho)} = \sum_{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_i=1}^n \frac{\partial^i}{\partial r_{\alpha_1} \partial r_{\alpha_2} \dots \partial r_{\alpha_i}} \frac{\partial f}{\partial \rho_{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_i}}$$

Por exemplo, para o caso em que $n = 3$ e $i = 2$, o produto escalar do tensor é

$$\nabla^{(2)} \cdot \frac{\partial f}{\partial(\nabla^{(2)} \rho)} = \sum_{\alpha=1}^3 \sum_{\beta=1}^3 \frac{\partial^2}{\partial r_{\alpha} \partial r_{\beta}} \frac{\partial f}{\partial \rho_{\alpha\beta}}$$

onde

$$\rho_{\alpha\beta} = \frac{\partial^2 \rho}{\partial r_{\alpha} \partial r_{\beta}}$$

EXEMPLOS DE DERIVADA FUNCIONAL

A função delta de Dirac

Veremos na seção **Error! Reference source not found.**, que toda função pode ser escrita como um funcional usando a função delta de Dirac. Por exemplo, seja $\rho(\mathbf{r})$ uma função de \mathbf{r} . Então,

$$\rho(\mathbf{r}) = F[\rho] = \int \rho(\mathbf{r}') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d\mathbf{r}'.$$

A derivada funcional deste funcional usando a fórmula (0.3) é

$$\frac{\delta\rho(\mathbf{r})}{\delta\rho(\mathbf{r}')} \equiv \frac{\delta F[\rho]}{\delta\rho(\mathbf{r}')} = \frac{\partial}{\partial\rho(\mathbf{r}')} [\rho(\mathbf{r}')\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')] = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}').$$

Funcional da energia de Thomas-Fermi

Em 1927, Thomas e Fermi derivou um funcional para o cálculo da energia cinética considerando os elétrons como se fosse um *gás uniforme não interagente*. O funcional da energia cinética obtido por eles pode ser escrito explicitamente como

$$T_{TF} = C_F \int \rho^{5/3}(\mathbf{r}) d\mathbf{r},$$

onde $C_F = 2,871$. Usando o funcional da energia cinética de Thomas-Fermi, o funcional da energia foi escrito por eles como

$$E_{TF}[\rho(\mathbf{r})] = C_F \int \rho^{5/3}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} - \int \rho(\mathbf{r}) v(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + \frac{1}{2} \iint \frac{\rho(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r} d\mathbf{r}'. \quad (0.1)$$

O primeiro termo do lado direito é a energia cinética de Thomas-Fermi; o segundo termo é a energia de interação dos elétrons com os núcleos e o terceiro termo é a energia clássica de interação elétron-elétron (interação de Coulomb). $v(\mathbf{r})$ representa o potencial de interação elétron-núcleo, que no caso de um átomo é dado por

$$v(\mathbf{r}) = \frac{Z_\alpha}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}|}$$

onde \mathbf{R} representa a posição nuclear. Esta foi a primeira tentativa para o cálculo de estrutura eletrônica usando a teoria do funcional da densidade livre de orbitais. Este procedimento fornece resultados razoáveis para cálculos de sistemas no estado sólido. Para moléculas e átomos, os resultados são péssimos. Este resultado ruim é, frequentemente, atribuído ao funcional da energia cinética de Thomas-Fermi, que é um funcional aproximado. Voltaremos a este assunto no futuro, mas, no momento, estamos interessados apenas em encontrar, a título de exemplo, as derivadas dos funcionais que aparecem na Equação (0.1).

Funcional da energia cinética de Thomas-Fermi

A derivada do funcional da energia cinética de Thomas-Fermi, Equação (0.1),

$$T_{TF}[\rho] = C_F \int \rho^{5/3}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \int C_F \rho^{5/3}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}$$

pode ser obtida diretamente usando a fórmula (0.3), ou seja, fazendo $t_{TF} = C_F \rho^{5/3}(\mathbf{r})$, obtemos

$$\frac{\delta T_{TF}[\rho]}{\delta\rho} = \frac{\partial t_{TF}}{\partial\rho} - \nabla \cdot \left(\frac{\partial t_{TF}}{\partial\nabla\rho} \right) = \frac{5C_F \rho^{2/3}(\mathbf{r})}{3}.$$

O segundo termo da equação do meio é nulo, pois o funcional da energia cinética de Thomas-Fermi não depende do gradiente da densidade.

Funcional da energia potencial de interação elétron-núcleo

Na teoria do funcional da densidade derivada por Thomas & Fermi, o funcional da energia potencial de interação elétron-núcleo proposto por eles, Equação (0.1), é dado por

$$V[\rho(\mathbf{r})] = \int \rho(\mathbf{r})v(\mathbf{r})d\mathbf{r} = Z \int \frac{\rho(\mathbf{r})}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}|} d\mathbf{r}, \quad (0.2)$$

onde $|\mathbf{r} - \mathbf{R}|$ representa a distância do elétron ao núcleo de número atômico Z , ou seja,

$$v(\mathbf{r}) = \frac{Z}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}|}.$$

A derivada do funcional (0.2) pode ser obtida usando a Equação (0.3) ou a definição. A fim de ganharmos um pouco mais de habilidade usando a definição, vamos derivar (0.2) usando a definição:

$$\begin{aligned} \left. \frac{dV}{d\epsilon} \right|_{\epsilon=0} &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{V[\rho(\mathbf{r}) + \epsilon\phi(\mathbf{r})] - V[\rho(\mathbf{r})]}{\epsilon} \\ &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon} \left\{ \int [\rho(\mathbf{r}) + \epsilon\phi(\mathbf{r})]v(\mathbf{r}) d\mathbf{r} - \int \rho(\mathbf{r})v(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \right\} \\ &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon} \left\{ \int \rho(\mathbf{r})v(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + \int \epsilon\phi(\mathbf{r})v(\mathbf{r}) d\mathbf{r} - \int \rho(\mathbf{r})v(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \right\} \\ &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon} \int \epsilon v(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \int v(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \\ \left. \frac{dV}{d\epsilon} \right|_{\epsilon=0} &= \int v(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (0.3) \end{aligned}$$

Observe que (0.3) está na forma

$$\left. \frac{dV}{d\epsilon} \right|_{\epsilon=0} = \int \frac{\delta V}{\delta \rho(\mathbf{r})} \phi(\mathbf{r}) d\mathbf{r}$$

Portanto, a derivada de $V[\rho(\mathbf{r})]$ em relação $\rho(\mathbf{r})$ é

$$\frac{\delta V}{\delta \rho(\mathbf{r})} = v(\mathbf{r}).$$

Funcional da energia potencial de interação elétron-elétron

Para a energia clássica de interação elétron-elétron, Thomas e Fermi usou o funcional da energia potencial de Coulomb, ou seja,

$$J[\rho] = \frac{1}{2} \iint \frac{\rho(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}d\mathbf{r}'. \quad (0.1)$$

A derivada deste funcional pode ser obtida usando a regra da cadeia, ou seja,

$$J[\rho] = \frac{1}{2} \int \left(\int \frac{\rho(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r} \right) d\mathbf{r}' = \frac{1}{2} \int V(\mathbf{r}') d\mathbf{r}'$$

onde

$$V(\mathbf{r}') = \int \frac{\rho(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}$$

A derivada do funcional $J[\rho]$ em relação $V(\mathbf{r}')$ é

$$\frac{\delta J}{\delta V} = \frac{1}{2}$$

A derivada de $V(\mathbf{r}')$ em relação a ρ é:

$$\frac{\delta V}{\delta \rho} = \frac{2\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}$$

Substituindo tudo em

$$\frac{\delta J}{\delta \rho} = \int \frac{\delta J}{\delta V(\mathbf{r})} \frac{\delta V(\mathbf{r}')}{\delta \rho} d\mathbf{r}$$

temos

$$\frac{\delta J}{\delta \rho(\mathbf{r})} = \int \frac{\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}'. \quad (0.2)$$

Observe que a derivada (0.2) é, na verdade, um funcional. Portanto, podemos pensar na derivada deste funcional, que, na verdade, é a derivada funcional segunda de (0.1), ou seja,

$$\frac{\delta^2 J}{\delta \rho(\mathbf{r}')\delta \rho(\mathbf{r})} = \frac{\partial}{\partial \rho(\mathbf{r}')} \left(\frac{\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \right) = \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}.$$

Na obtenção da derivada segunda, usamos a fórmula (0.3). Observe que, como no caso do cálculo ordinário, a ordem das derivadas funcionais não é importante.

Funcional da energia cinética de weizsäcker

Em 1935, *Weizsäcker* propôs um novo funcional da energia cinética eletrônica que acrescentava o gradiente como correção da energia cinética de Thomas-Fermi para melhorar o cálculo da energia cinética eletrônica de átomos e moléculas. O funcional proposto por Weizsäcker foi

$$T_w[\rho] = \frac{1}{8} \int \frac{\nabla\rho(\mathbf{r}) \cdot \nabla\rho(\mathbf{r})}{\rho(\mathbf{r})} d\mathbf{r} = \int t_w d\mathbf{r},$$

onde

$$t_w = \frac{1}{8} \frac{\nabla\rho \cdot \nabla\rho}{\rho} \quad e \quad \rho = \rho(\mathbf{r}).$$

Usando (0.3), temos

$$\begin{aligned} \frac{\delta T_w}{\delta\rho(\mathbf{r})} &= \frac{\partial t_w}{\partial\rho} - \nabla \cdot \frac{\partial t_w}{\partial\nabla\rho} = \frac{1}{8} \left\{ -\frac{\nabla\rho \cdot \nabla\rho}{\rho^2} - \nabla \cdot \left(\frac{\nabla\rho + \nabla\rho}{\rho} \right) \right\} \\ &= \frac{1}{8} \left\{ -\frac{\nabla\rho \cdot \nabla\rho}{\rho^2} - \nabla \cdot \left(\frac{2\nabla\rho}{\rho} \right) \right\} \\ &= \frac{1}{8} \left\{ -\frac{\nabla\rho \cdot \nabla\rho}{\rho^2} - \left[\frac{2((\nabla^2\rho)\rho - \nabla\rho \cdot \nabla\rho)}{\rho^2} \right] \right\} \\ &= \frac{1}{8} \left\{ -\frac{\nabla\rho \cdot \nabla\rho}{\rho^2} - \frac{2\nabla^2\rho}{\rho} + \frac{2\nabla\rho \cdot \nabla\rho}{\rho^2} \right\} \\ &= \frac{1}{8} \frac{\nabla\rho \cdot \nabla\rho}{\rho^2} - \frac{1}{4} \frac{\nabla^2\rho}{\rho} \end{aligned}$$

O que nos leva ao resultado

$$\frac{\delta T_w}{\delta\rho(\mathbf{r})} = \frac{1}{8} \frac{\nabla\rho \cdot \nabla\rho}{\rho^2} - \frac{1}{4} \frac{\nabla^2\rho}{\rho}.$$

Exercícios

1. A energia de troca e correlação, na formulação de Khon-Sham da teoria do funcional da densidade, continua sendo um grande desafio para os pesquisadores. Uma das primeiras propostas para o cálculo da energia de troca e correlação foi a aproximação LDA (Local Density Aproximation) que pode ser escrita formalmente como

$$E_{xc}[\rho(\mathbf{r})] = \int \varepsilon_{xc}(\rho(\mathbf{r}))\rho(\mathbf{r})d\mathbf{r},$$

onde $\varepsilon_{xc}(\rho(\mathbf{r}))$ representa a energia de troca e correlação de um gás uniforme de elétrons de densidade $\rho(\mathbf{r})$. Encontre a derivada deste funcional.

2. Na formulação de Hartree-Fock, a energia de interação clássica (interação de Coulomb) é dada por

$$E_c[\chi] = \frac{1}{2} \sum_{a=1}^n \sum_{b=1}^n \langle \chi_a(1)\chi_b(2) | \frac{1}{r_{12}} | \chi_a(1)\chi_b(2) \rangle,$$

onde n representa o número de elétrons; χ 's representam os spin-orbitais e r_{12} representa a distância entre o elétron 1 e o elétron 2. Encontre a derivada deste funcional em relação ao spin-orbital χ_k^* .

3. Na formulação de Thomas-Fermi, a energia total de um átomo é um funcional da densidade eletrônica dada por

$$E[\rho] = C_F \int \rho^{5/3}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} - Z \int \frac{\rho(\mathbf{r})}{r} d\mathbf{r} + \frac{1}{2} \iint \frac{\rho(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r} d\mathbf{r}'.$$

Minimize este funcional sujeito à restrição holonômica

$$\int \rho(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = n,$$

onde n representa o número total de elétrons, Z o número atômico e C_F é uma constante.

4. Encontre a derivada do funcional

$$E[\rho] = \int \left(\frac{\nabla \rho}{\rho^{4/3}} \right)^2 d\mathbf{r}.$$