EXAME TEÓRICO

Física Computacional 2020/2021

6 de Julho de 2021

Duração: 3h

Universidade de Aveiro

Departamento de Física

1. (7 valores) Considere uma cadeia de decaímento radioativo, contituida por núcleos pai e dois tipos de núcleos filho (Pai→1ºFilho→2ºFilho).

O decaímento e a criação de cada tipo de núcleo é descrito pelo seguinte sistema de equações diferenciais acopladas:

$$\frac{dN_1}{dt} = -\lambda_1 \, N_1(t)$$

$$\frac{dN_2}{dt} = -\lambda_2 \, N_2(t) + \lambda_1 \, N_1(t)$$

$$\frac{dN_3}{dt} = -\lambda_3 \, N_3(t) + \lambda_2 \, N_2(t)$$

Sendo $N_1(t)$ o número de núcleos pai, i.e. do nuclídeo radioativo original, $N_2(t)$ o número de núcleos do 1º filho, e $N_3(t)$ o número de núcleos do 2º filho, existentes num dado instante t. λ_1, λ_2, e λ_3 são as constantes de cada decaímento, respectivamente.

As condições iniciais são:

$$N_1(0) = N01, \qquad N_2(0) = 0, \;\; e \;\; N_3(0) = 0.$$

a) (3 valores) Discretize o sistema de acordo com o algoritmo de Euler.
(ou 2 valores) Se achar o problema complicado, considere apenas o primeiro decaímento e a formação do 1º nuclídeo filho, correspondentes às duas primeiras equações.

b) (4 valores) Escreva o ciclo *for* de um programa em MATLAB que, dadas as condições iniciais, resolveria numericamente o problema usando o método de Crank–Nicolson (por exemplo com o auxílio da função **linsolve**). *Sugestão:* comece por discretizar o sistema pelo algoritmo de Crank-Nicolson.

(ou 3 valores) Se considerar apenas as duas 1ªs equações.

2. (3 valores)

a) (1valor) Distinga entre erro local e erro global.

b) (1valor) Na tabela seguinte está representada a solução numérica de uma dada equação diferencial, Ynum, desde o instante inicial, t = 0s até t = 4 s, para diversos instantes intermédios. A solução analítica, Ya, está também representada para os mesmos instantes. No final da iteração 5 qual é o valor do erro global ? E do erro local? Justifique.

iteração		1	2	3	4	5	6	7	8
Tempo(s)	0.0	0.5	1.0	1.5	2.0	2.5	3.0	3.5	4.0
Solução Analítica Ya	1.00000	3.21875	3.00000	2.21875	2.00000	2.71875	4.00000	4.71875	3.00000
Solução Numérica Ynum	1.00000	3.43750	3.37500	2.68750	2.50000	3.18750	4.37500	4.9375	3.00000

d) (1valores) Para o mesmo problema de valor inicial, fez-se um estudo do erro obtido em cada integração numérica, para o mesmo tempo final, em função do passo h, para o método numérico de Crank-Nicolson. Representou-se graficamente o logarítmo do erro em função do logarítmo do passo h. (*log* |erro| versus *log* h). Que tipo de curva esperava obter? Poderá dizer algo sobre a ordem do método? Justifique.

3. **(5 valores)A equação seguinte modela a distribuição de temperatura T(r) numa resistência elétrica cilíndrica de raio R.**

$$\frac{d^2T}{dr^2}+\frac{1}{r}\frac{dT}{dr}+\frac{Q}{\lambda}= 0$$

a) **(2 valores) Derive a expressão da aproximação da 2ª derivada usando diferenças finitas centradas, de forma a reconhecer a ordem da mesma.**

b) **(3 valores)Por uma questão de simetria, sabe-se que a derivada da temperatura em ordem a r é nula para r = 0. Num caso particular, sabe-se que a temperatura na superfície da resistência é T(R) = 20 ºC. Aproxime a equação acima usando diferenças finitas centradas e diga qual a matriz e o vetor de elementos independentes associados a essa aproximação.**

4. **(5 valores)**

Uma partícula de massa reduzida igual a 1 está num poço de potencial a uma dimensão. A equação de Schrödinger independente do tempo é

$$-\frac{1}{2}\frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\,\psi(x) = E\,\psi(x)$$

Com

$$V(x) = \begin{cases} x^4 - 4 & para \quad x \leq -1 \\ -3 & para \; -1 < x < 2 \\ +\infty & para \quad x \geq 2 \end{cases}$$

Pretende-se calcular os valores próprios das energias de estados ligados, bem como as respectivas funções de onda.

a) **(1 valor)** Esta equação é uma ODE ou é uma PDE?. Justifique a sua resposta.

b) **(1 valor)** Escreva e discuta as condições fronteira do problema.

c) **(1 valor)** Discuta o intervalo de valores que iria usar para a variável independente no seu método numérico. Em que situações este intervalo tem que ser aumentado?

d) **(2 valores)** Descreva o algoritmo que iria usar, realçando os aspetos específicos deste problema em particular.

Nota: Expansão em série de Taylor

$$y(x+h) = y(x) + y'(x) * h + \frac{1}{2!}y''(x) * h^2 + \frac{1}{3!}y'''(x) * h^3 + O(h^4)$$

$$y(x-h) = y(x) - y'(x) * h + \frac{1}{2!}y''(x) * h^2 - \frac{1}{3!}y'''(x) * h^3 + O(h^4)$$