LISTA 06: FIS670 - Métodos Computacionais da Física. (Prof. Leandro Rizzi)

Exercício 1. Considere um tubo delgado de comprimento L cheio de um líquido com viscosidade η. Dentro do tubo existem partículas esféricas de raio a que podem difudir pelo líquido que é mantido à uma temperatura T. Um dos meios para descrever o processo de difusão dessas partículas é utilizando a segunda lei de Fick, a qual é definida pela seguinte equação diferencial parcial (EDP) *parabólica*:

$$\frac{\partial C(x,t)}{\partial t} = D\frac{\partial^2 C(x,t)}{\partial x^2} \quad ,$$

onde $C(x,t)$ é a concentração de partículas em uma dada posição x em um dado tempo t; o coeficiente de difusão das partículas no líquido é dado por $D = k_B T/6\pi\eta a$ (expressão conhecida como relação de Stokes-Einstein). Assumindo uma concentração inicial $C(x,0)$, é possível obter a evolução temporal da concentração de partículas $C(x,t)$ através do método de diferenças finitas [1], isto é, discretizando as variáveis $x_i = ih$ e $t_k = k\Delta t$ para obter a estimativa $C_{i,k} = C(x_i, t_k)$ com $i = 0, \ldots, N+1$ e $k = 0, \ldots, k_{\max}$. A partir da equação de difusão e considerando as fórmulas discretizadas (vide Lista 02) para as derivadas [1], é possível mostrar que

$$C_{i,k+1} = (1-2\lambda)\, C_{i,k} + \lambda\,(C_{i+1,k} + C_{i-1,k}) \quad ,$$

onde $\lambda = D\Delta t/h^2$. Assumindo que não haja, em nenhum momento, difusão de partículas para fora do tubo, isto é,

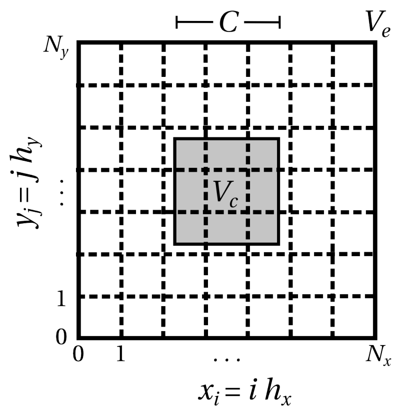
$$\frac{\partial C(x,t)}{\partial x} = 0 \qquad \text{nas extremidades, } i.e. \quad x_0 = 0\,\text{cm} \quad \text{e} \quad x_{N+1} = L \ ,$$

(condições de fronteira também conhecidas como de *Neumann*, vide Lista 04), obtenha a evolução temporal da concentração $C(x,t)$ considerando: $L = 10\,\text{cm}$, $a = 1\,\text{nm}$, $k_B T = 4.2109\,\text{pN.nm}$ ($T = 305\,\text{K}$), $\eta = 0.7644\,\text{mPa.s}$, $h = 0.05\,\text{cm}$, e a condição inicial dada por $C_{i,0} = C_p\, e^{-b(x_i - x_p)^2}$ com $b = 0.1\,\text{cm}^{-2}$, $x_p = 0.6L$ e C_p dado em partículas por cm. Escolha Δt de modo que $\lambda = 0.1$ (indique explicitamente o valor e as unidades de Δt encontrados). Grafique as curvas de concentração por C_p em função de x para vários tempos t_k diferentes e comente o que ocorre no limite de tempos longos ($k_{\max} \gg 1$).

Exercício 2. Considere um cabo coaxial quadrado construido com o fio central de lado C à uma voltagem V_c e a parte externa de lado L que possui uma voltagem V_e, tal como mostra na Figura ao lado. O potencial $V(x,y)$ entre o fio central e a parte externa pode ser obtido através da equação de de Laplace $\nabla^2 V = 0$, que é definida pela seguinte EDP *elíptica*:

$$\frac{\partial^2 V(x,y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 V(x,y)}{\partial y^2} = 0 \quad .$$

A solução $V(x,y)$ pode ser obtida considerando a discretização de x, y via diferenças finitas [1], isto é, $x_i = ih_x$ e $y_j = jh_y$ (com $i = 0, \ldots, N_x$ e $j = 0, \ldots, N_y$), e assumindo condições de fronteira de *Dirichlet*, dadas por: $V_{i,j} = V_e$ se x_i ou y_j estiver na fronteira e $V_{i,j} = V_c$ se $x_{\min} \le x_i \le x_{\max}$ e $y_{\min} \le y_j \le y_{\max}$, com $x_{\min} = y_{\min} = (L-C)/2$ e $x_{\max} = y_{\max} = (L+C)/2$.



a) A partir da equação de Laplace e considerando a discretização de *três pontos com diferença centrada* para as derivadas segundas (vide Lista 02), mostre que

$$V_{i,j} = \frac{V_{i+1,j} + V_{i,j+1} + V_{i-1,j} + V_{i,j-1}}{4} \quad ,$$

com $V_{i,j} = V(x_i, y_j)$ e $h_x = h_y$.

b) Como os valores de $V_{i,j}$ em regiões intermediárias são desconhecidos inicialmente, a solução deve ser obtida de maneira recursiva, isto é, os valores $V_{i,j}^{(k+1)}$ são obtidos através da equação do item (a) a partir dos valores iniciais $V_{i,j}^{(k)}$. Note que, dependendo da ordem de atualização escolhida, os valores $V_{i,j}^{(k+1)}$ serão obtidos utilizando valores de $V_{i,j}$ já atualizados. Por exemplo, atualizando os valores escolhendo a ordem com i da esquerda para a direita e j de cima pra baixo, teremos $V_{i,j}^{(k+1)} = (V_{i+1,j}^{(k)} + V_{i,j+1}^{(k)} + V_{i-1,j}^{(k+1)} + V_{i,j-1}^{(k+1)})/4$. Implemente uma subrotina que, dada a condição inicial $V_{i,j}^{(0)}$, atualiza recursivamente os valores de $V_{i,j}^{(k)}$ até que a quantidade $\varepsilon_k = \max\{|V_{i,j}^{(k+1)} - V_{i,j}^{(k)}|\}$ seja menor que uma tolerância ε ou se $k \le k_{\max}$.

c) Encontre a solução $V(x_i, y_i)$ considerando $V_c = 0\,\text{V}$, $V_e = -100\,\text{V}$, $L = 1\,\text{cm}$, $C = 0.4L$ e $h_x = h_y = h = 0.005\,\text{cm}$, *i.e.* $N_x = L/h_x = L/h_y = N_y = 200$. Assuma a condição inicial $V_{i,j}^{(0)} = V_c$ e considere para o critério de parada uma tolerância de $\varepsilon = 10^{-8}$ ou $k_{\max} = 10^5$. Plote o potencial final em um gráfico tridimensional e/ou bidimensional com curvas de nível equipotenciais.

Exercício 3. Implementar um código utilizando diferenças finitas para resolver a equação de onda (página 600 da ref. [1]), que é uma EDP *hiperbólica*,

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \quad .$$

Resolva o exercício 7 (página 608) da ref. [1] sobre linhas de transmissão elétrica.

Referências:

[1] Capítulo 12 de J. D. Faires e R. L. Burden. Numerical Methods (3^{rd} ed.)
[2] Classificação de EDPs: `http://www.me.metu.edu.tr/courses/me582/files/PDE_Introduction_by_Hoffman.pdf`