Universidade de Aveiro
Departamento de Física

Exame Prático de Recurso

Física Computacional — 2017/2018

3 de julho de 2018

Duração: 3 horas

Justifique as suas respostas às perguntas.
Note que os símbolos a **negrito** representam vetores.
Deve ser criada uma pasta no *desktop* contendo os ficheiros .m e eventuais figuras.

1. (3.7 + 1.5 + 1.5 val.) Um pêndulo de Wilberforce é constituído por uma massa $m = 0.5\,\mathrm{kg}$, com momento de inércia $I = 10^{-4}\,\mathrm{kg\,m^2}$, suspensa de uma mola helicoidal de constante longitudinal $K = 5\,\mathrm{N\,m^{-1}}$ e constante torsional $\delta = 10^{-3}\,\mathrm{N\,m}$. O pêndulo tem modos de oscilação longitudinal (z varia) e torsional (θ varia). A constante de acoplamento entre os modos é $\epsilon = 10^{-2}\,\mathrm{N}$. As equações diferenciais que descrevem o sistema são

$$m\frac{\mathrm{d}^2 z}{\mathrm{d}t^2} = -Kz - \frac{1}{2}\epsilon\theta.$$
$$I\frac{\mathrm{d}^2 \theta}{\mathrm{d}t^2} = -\frac{1}{2}\epsilon z - \delta\theta.$$

Definindo

$$v = \frac{\mathrm{d}z}{\mathrm{d}t} \qquad \text{e} \qquad \omega = \frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}t},$$

a aplicação do método de Crank–Nicolson resulta em

$$v_i - \frac{hK}{2m}z_i - \frac{h\epsilon}{4m}\theta_i = v_{i+1} + \frac{hK}{2m}z_{i+1} + \frac{h\epsilon}{4m}\theta_{i+1},$$
$$z_i + \frac{h}{2}v_i = z_{i+1} - \frac{h}{2}v_{i+1},$$
$$\omega_i - \frac{h\epsilon}{4I}z_i - \frac{h\delta}{2I}\theta_i = \omega_{i+1} + \frac{h\epsilon}{4I}z_{i+1} + \frac{h\delta}{2I}\theta_{i+1},$$
$$\theta_i + \frac{h}{2}\omega_i = \theta_{i+1} - \frac{h}{2}\omega_{i+1}.$$

a) Usando o método de Crank–Nicolson, estude a evolução do sistema até $t = 100\,\mathrm{s}$, dadas as condições iniciais $z(0) = 0.1\,\mathrm{m}$, $v(0) = 0$, $\theta(0) = 0$ e $\omega(0) = 0$.

b) Determine a frequência de oscilação de z.

c) Em intervalos de tempo fixos, o sistema muda de oscilações puramente longitudinais para oscilações puramente torsionais. Calcule e represente graficamente em função do tempo a quantidade

$$\frac{1}{2}Kz^2 + \frac{1}{2}mv^2$$

e estime esse intervalo de tempo.

2. (3.7 + 1.5 + 1.5 val.) O escoamento laminar de um fluido incompressível, de massa volúmica ρ e viscosidade dinâmica μ, entre duas placas paralelas, uma delas em $x = 0$ e a outra em $X = d$, é descrito pela equação diferencial

$$\rho \frac{\partial u(x,t)}{\partial t} = \mu \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2} + G(t).$$

$u(x,t)$ é o perfil das velocidades e $G(t)$ é um gradiente de pressão uniforme. Considere $d = 0.010\,\mathrm{m}$, $\rho = 1.0 \times 10^3\,\mathrm{kg/m^3}$ e $\mu = 1.0 \times 10^{-3}\,\mathrm{Pa \cdot s}$. A equação discretizada é, neste caso, dada por

$$\begin{aligned} &- u(i+1, n+1) + \left(\frac{2}{\eta} + 2\right) u(i, n+1) - u(i-1, n+1) \\ &\qquad = u(i+1, n) + \left(\frac{2}{\eta} - 2\right) u(i, n) + u(i-1, n) + \frac{\Delta t}{\eta\rho}\left[G(n) + G(n+1)\right] \end{aligned}$$

com $\eta = \dfrac{\mu \Delta t}{\rho (\Delta x)^2}$. O fluido em contacto com as paredes está sempre imóvel em relação a elas.

a) Use o método de Crank–Nicolson para determinar o perfil da velocidade ao longo do tempo. Nesta alínea, considere que as paredes estão imóveis e que em $t = 0$ também não há movimento do fluido. Use $G = 800\,\mathrm{kg\,m^{-2}\,s^{-2}}$.

b) Repita a alínea anterior para um gradiente de pressão que varia no tempo:

$$G(t) = 800 \tanh(t/10)\ (\mathrm{kg\,m^{-2}\,s^{-2}}).$$

c) Considere agora que a parede em $X = d$ se move com uma velocidade igual a $5\,\mathrm{m/s}$, que o perfil inicial das velocidades é

$$u(x, 0) = \frac{5x}{d}\ (\mathrm{m\,s^{-1}}),$$

e que o gradiente de pressão é o mesmo da alínea anterior.

3. (3.3 + 1.3 + 2.0 val.) Neste exercício, vamos estudar um modelo das vibrações de uma molécula diatómica. A variável x, que não pode tomar valores negativos, representa a distância entre os dois átomos. A equação de Schrödinger independente do tempo é

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

Vamos usar o seguinte potencial de Morse:

$$V(x) = 200\left[1 - \mathrm{e}^{-2(x-1)}\right]^2.$$

A análise da expressão do potencial permite concluir que a distância de equilíbrio entre os átomos é 1 e que a energia dos estados ligados tem que ser inferior a 200. Para os estados ligados, as condições fronteira são

$$\psi(0) = 0, \qquad \lim_{x\to+\infty}\psi(x) = 0\,.$$

Dada a forma do potencial para valores muito pequenos de x, deve usar o método de *shooting and matching*.

a) Determine o valor próprio da energia do estado fundamental ($n = 1$) e represente a sua função de onda normalizada.

b) Determine os 4 valores próprios mais baixos da energia. Não tem que o fazer de forma sistemática. Pode usar o programa da alínea a). Registe os valores iniciais da energia que usou para obter cada um dos 4 valores próprios. Use a função `polyfit` para determinar os parâmetros a, b e c de um ajuste polinomial de segunda ordem:

$$E_n^{(\mathrm{aj})} = an^2 + bn + c.$$

Represente graficamente o ajuste polinomial (com uma linha) e os 4 valores próprios obtidos usando o *shooting and matching* (com símbolos). Comente.

c) Represente noutra figura (com pontos) os valores de $E_n^{(\mathrm{aj})}$ de $n = 1$ até $n = 15$. Deve verificar que a partir de um certo valor de n, os valores $E_n^{(\mathrm{aj})}$ deixam de aumentar. O último valor de $E_n^{(\mathrm{aj})}$ que é maior que $E_{n-1}^{(\mathrm{aj})}$ é uma estimativa do valor próprio do último estado ligado. Os valores $E^{(\mathrm{aj})}$ que se seguem não têm significado físico. Quantos estados ligados existem? Determine o valor próprio da energia do último estado ligado e represente a sua função de onda normalizada.