Universidade de Aveiro
Departamento de Física

Exame Teórico

Física Computacional — 2017/2018

14 de junho de 2018

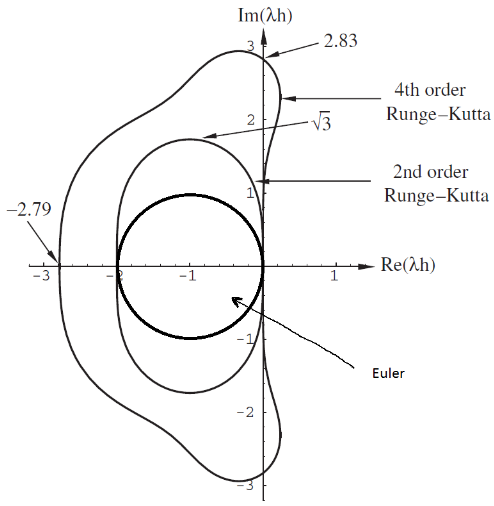
Duração: 2h30

Justifique as suas respostas às perguntas. O uso de calculadora não é permitido.

1. (1.0 + 1.0 + 1.5 + 1.0 + 1.0 val.) Considere a aproximação para pequenas oscilações de um pêndulo amortecido, de acordo com a seguinte equação diferencial:

$$\frac{\mathrm{d}^2\theta(t)}{\mathrm{d}t^2} = -a\theta(t) - b\frac{\mathrm{d}\theta(t)}{\mathrm{d}t},$$

onde a e b são constantes positivas.



a) Definindo $\omega(t) = \mathrm{d}\theta(t)/\mathrm{d}t$, separe a equação diferencial em duas ODE de primeira ordem.

b) Encontre os valores próprios associados ao sistema.

c) Para o caso em que não há amortecimento, para o caso sobre-amortecido e para o caso sub-amortecido, diga se cada um dos métodos da figura é instável, incondicionalmente estável ou condicionalmente estável (não tem que obter as expressões das regiões de estabilidade neste último caso).

d) Obtenha as equações que lhe permitiriam usar diretamente o método de Euler implícito para resolver este problema, sem escrever o sistema na forma matricial.

e) Mostre, usando pseudo-código, como as equações da alínea anterior seriam usadas para obter as soluções numéricas do problema. Só tem que escrever o ciclo `for`.

2. (1.5 + 2.0 + 1.0 val.) Considere a equação diferencial que descreve o problema da condução de calor numa barra fina, no estado estacionário:

$$\kappa(x)\frac{\mathrm{d}^2\theta(x)}{\mathrm{d}x^2} + \kappa'(x)\frac{\mathrm{d}\theta(x)}{\mathrm{d}x} = f(x).$$

Note que $\kappa(x)$, $\kappa'(x)$ e $f(x)$ são conhecidos à partida. As condições fronteira são

$$\theta(0) = \alpha, \qquad\qquad \theta(L) = \beta.$$

a) Deduza a expressão para a aproximação da segunda derivada por diferenças finitas centradas e prove que é uma aproximação de 2ª ordem.

b) Usando o resultado da alínea anterior e a aproximação da primeira derivada por diferenças finitas centradas, aproxime a equação diferencial por um sistema de equações algébricas, $AT = b$. Identifique os elementos de T. Escreva a primeira e a última linha de A. Escreva o primeiro e o último elemento de b. Escreva a linha de A e o elemento de b de índice n genérico (excluindo os valores extremos de n).

c) Se a equação fosse linear, poderia usar diretamente este método de diferenças finitas? Porquê? Que alternativas teria?

3. (1.5 +2.0 + 1.5 val.) Considere o seguinte problema de difusão a uma dimensão:

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

com $D = 1$. Na discretização do problema, usa-se $\Delta t = 1$ e $\Delta x = 1$.

a) Mostre que a aplicação do método de Crank–Nicolson permite obter

$$u(i,n+1) = u(i,n) + \frac{D\Delta t}{2(\Delta x)^2}\Big[u(i-1,n+1) - 2u(i,n+1) + u(i+1,n+1) + u(i-1,n) - 2u(i,n) + u(i+1,n)\Big]$$

b) Escreva os valores em falta na segunda coluna da tabela seguinte, usando o método de Crank–Nicolson.

0	0	0	...
1			
1			
1	1	1	...

c) Repita a alínea anterior, usando desta vez o método de Euler progressivo.

4. (1.3 + 1.0 + 1.5 + 1.2 val.) Uma partícula de massa reduzida igual a 1 está num poço de potencial a uma dimensão. A equação de Schrödinger independente do tempo é

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

com

$$V(x) = \begin{cases} -\beta(x+a), & \text{para } x \leq -a, \\ 0, & \text{para } -a < x < +a, \\ +\beta(x-a), & \text{para } x \geq +a, \end{cases}$$

onde a e β são constantes positivas. Pretende-se calcular os valores próprios das energias de estados ligados.

a) Escreva e discuta as condições fronteira do problema.

b) 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?

c) Descreva o algoritmo que iria usar, realçando os aspetos específicos deste problema em particular.

d) Para valores positivos de x, qual é a condição que identifica a zona classicamente proibida para um estado próprio de energia E?