Universidade de Aveiro
Departamento de Física

2º Teste Teórico de Avaliação Discreta

Física Computacional — 2017/2018

14 de junho de 2018

Duração: 1h30

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

1. (2.1 + 2.8 + 2.1 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 o método de Euler progressivo.

2. (2.0 + 2.0 + 2.0 val.) A equação Korteweg–de Vries (KdV) modela a propagação de ondas em águas pouco profundas:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} + \frac{\partial}{\partial x}u^2 = 0.$$

a) Dada a seguinte forma para a transformada de Fourier $F(k)$ de uma função $f(x)$,

$$F(k) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\mathrm{e}^{-ikx}\mathrm{d}x,$$

mostre que a transformada de Fourier $G(k)$ da derivada de ordem n, $g(x) = f^{(n)}(x)$ da função $f(x)$ é dada por

$$G(k) = (ik)^n F(k).$$

Qual é a condição a que tem que obedecer $f(x)$ para se poder obter este resultado?

b) Mostre que aplicando transformadas de Fourier, a equação KdV fica

$$\frac{\partial \tilde{u}}{\partial t} - ik^3\tilde{u} + ik\,\mathrm{TF}(u^2) = 0,$$

onde tanto $\tilde{v}$ como $\mathrm{TF}(v)$ representam a transformada de Fourier da função v.

c) Mostre que se definirmos

$$\tilde{U} = \mathrm{e}^{-ik^3 t}\tilde{u},$$

se pode obter a equação da alínea anterior a partir de

$$\frac{\partial \tilde{U}}{\partial t} = -ik\mathrm{e}^{-ik^3 t}\,\mathrm{TF}(u^2).$$

3. (1.8 + 1.4 + 2.1 + 1.7 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?