Física Computacional

Resolução do Exercício 1 do 2º Teste Teórico de Avaliação Discreta de 2017/2018

1.

a) O primeiro passo é aplicar a aproximação de diferenças finitas centradas,

$$y''(x) = \frac{y(x + \Delta x) - 2y(x) + y(x - \Delta x)}{(\Delta x)^2} + \mathcal{O}((\Delta x)^2),$$

à segunda derivada em ordem à variável independente x:

$$\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}t} = D \frac{u(x - \Delta x, t) - 2u(x, t) + u(x + \Delta x, t)}{(\Delta x)^2}.$$

Obtivemos uma equação diferencial ordinária em ordem à variável independente t. Aplicando o método de Crank–Nicolson, dado por

$$y_{n+1} = y_n + [f(y_{n+1}) + f(y_n)] \frac{h}{2},$$

para um problema do tipo dy/dt = f(y), ao nosso problema concreto de valor inicial segundo t, chega-se a

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

onde i é o índice do valor discretizado de x e n é o índice do valor discretizado de t.

b) A análise da tabela mostra que u(1,1)=0, u(2,1)=1, u(3,1)=1, u(4,1)=1, u(1,2)=0 e u(4,1)=1. O que nos é pedido é que determinemos u(2,2) e u(3,2). A equação (1), escrita para i=2 e n=1, (levando em conta que D=1, $\Delta t=1$ e $\Delta x=1$) é

$$u(2,2) = 1 + \frac{1}{2} \Big[0 - 2u(2,2) + u(3,2) + 0 - 2 \cdot 1 + 1 \Big].$$

Repetindo para i = 3 e n = 1, vem

$$u(3,2) = 1 + \frac{1}{2} \left[u(2,2) - 2u(3,2) + 1 + 1 - 2 \cdot 1 + 1 \right].$$

Temos que resolver o sistema de equações:

$$\begin{cases} u(2,2) = 1 + \frac{1}{2} \Big[-2u(2,2) + u(3,2) - 1 \Big] \\ u(3,2) = 1 + \frac{1}{2} \Big[u(2,2) - 2u(3,2) + 1 \Big] \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} 2u(2,2) = 2 - 2u(2,2) + u(3,2) - 1 \\ 2u(3,2) = 2 + u(2,2) - 2u(3,2) + 1 \end{cases}$$

$$\Leftrightarrow \begin{cases} 4u(2,2) - u(3,2) = 1 \\ -u(2,2) + 4u(3,2) = 3 \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} u(3,2) = 4u(2,2) - 1 \\ -u(2,2) + 4[4u(2,2) - 1] = 3 \end{cases}$$

$$\Leftrightarrow \begin{cases} - \\ 15u(2,2) = 7 \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} u(3,2) = 28/15 - 1 = 13/15, \\ u(2,2) = 7/15. \end{cases}$$

c) Aplicando o método de Euler, dado por

$$y_{n+1} = y_n + f(y_n) h,$$

para um problema do tipo $\mathrm{d}y/\mathrm{d}t=f(y)$, ao nosso problema concreto de valor inicial segundo t, chega-se a

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

onde, de novo, i é o índice do valor discretizado de x e n é o índice do valor discretizado de t. A equação (2), escrita para i=2 e n=1, permite-nos calcular diretamente u(2,2):

$$u(2,2) = 1 + 1 \cdot (+0 - 2 \cdot 1 + 1) = 0.$$

Repetindo para i = 3 e n = 1, vem

$$u(3,2) = 1 + 1 \cdot (1 - 2 \cdot 1 + 1) = 1.$$