Exame Teórico 2020 - FC

João Franco 93039

(1)

①

~~a)~~ $$m_1 \frac{d^2 y_1}{dt^2} = -k_1 y_1 + k(y_2 - y_1)$$ $$y_1(0) = A$$

$$m_2 \frac{d^2 y_2}{dt^2} = -k_2 y_2 + k(y_2 - y_1)$$ $$\left.\frac{dy_1}{dt}\right|_{t=0} = B$$

$$y_2(0) = C$$

$$m_1 = m_2 = 1$$

$$\left.\frac{dy_2}{dt}\right|_{x=0} = D$$

a)
$$\frac{d^2 y_1}{dt^2} = -k_1 y_1 + k(y_2 - y_1)$$

$$\frac{d^2 y_2}{dt} = -k_2 y_2 + k(y_2 - y_1)$$

Se $\frac{dy_1}{dt} = v_1$ e $\frac{dy_2}{dt} = v_2$ então temos:

$$\begin{cases} \frac{dy_1}{dt} = v_1 \\ \frac{dv_1}{dt} = -k_1 y_1 + k(y_2 - y_1) \end{cases}$$

$$\begin{cases} \frac{dy_2}{dt} = v_2 \\ \frac{dv_2}{dt} = -k_2 y_2 + k(y_2 - y_1) \end{cases}$$

b) ~~Alog.~~ Algoritmo de Euler - Cromer

$$\begin{cases} v_{n+1} = v_n + dt \cdot f(y_n) \\ y_{n+1} = y_n + dt\, v_{n+1} \end{cases}$$

$$\begin{cases} v_{1,n+1} = v_{1,n} + dt \cdot \left(-k_1 y_{1,n} + k(y_{2,n} - y_{1,n})\right) \\ y_{1,n+1} = y_{1,n} + dt\, v_{1,n+1} \end{cases}$$

$\cancel{v_{1,n+1}} = v_{1,n}$

$$\begin{cases} v_{2,n+1} = v_{2,n} + dt\left(-k_2 y_{2,n} + k(y_{2,n} - y_{1,n})\right) \\ y_{2,n+1} = y_{2,n} + dt \cdot v_{2,n+1} \end{cases}$$

João Inácio, 93039 ②

c) Método de Euler Implícito

$$\begin{cases} v_{n+1} = v_n + dt \cdot f(y_{n+1}) \\ y_{n+1} = y_n + dt \cdot v_{n+1} \end{cases}$$

$$\begin{cases} v_{1,n+1} = v_{1,n} + dt\left(-k_1 y_{1,n+1} + k(y_{2,n+1} - y_{1,n+1})\right) \\ v_{2,n+1} = v_{2,n} + dt\left(-k_2 y_{2,n+1} + k(y_{2,n+1} - y_{1,n+1})\right) \\ y_{1,n+1} = y_{res\,1,n} + dt \cdot v_{1,n+1} \\ y_{2,n+1} = y_{2,n} + dt \cdot v_{2,n+1} \end{cases}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} y_{1,n+1} - dt \cdot v_{1,n+1} = y_{1,n} \\ y_{2,n+1} - dt \cdot v_{2,n+1} = y_{2,n} \\ v_{1,n+1} + (k_1 dt + k\,dt)\, y_{1,n+1} - k\,dt\, y_{2,n+1} = v_{1,n} \\ v_{2,n+1} + k\,dt\, y_{1,n+1} + (k_2 dt - k\,dt)\, y_{2,n+1} = v_{2,n} \end{cases}$$

$A y = b$, então

$$y = \begin{bmatrix} y_{1,n+1} \\ y_{2,n+1} \\ v_{1,n+1} \\ v_{2,n+1} \end{bmatrix} \quad A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & k_1 dt + k dt & k dt \\ 0 & 1 & -k dt & k_2 dt - k dt \\ -dt & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -dt & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$b = \begin{bmatrix} y_{1,n} \\ y_{2,n} \\ v_{1,n} \\ v_{2,n} \end{bmatrix}$$

Dada a matriz A e o vetor y com as condições iniciais,

$$y_{1,1} = A \;;\; y_{2,1} = C,\; v_{1,1} = B,\; v_{2,1} = D$$

Poderíamos resolver o problema em MatLab

```
for i = 1: length(t)-1
  b(i) = [y(1,i) ; y(2,i) ; y(3,i) ; y(4,i)];
  y(:, i+1) = linsolve(A, b(i));
end
```

João Inácio, 93039 ③

②

a)

O erro local é o erro cometido a cada iteração do problema em questão. Este é da ordem de $O(h^2)$.
O erro global é o erro cometido em todas as iterações do problema. Corresponde à soma dos erros locais de cada iteração. Este é da ordem de $O(h)$.

b) ~~tendo~~ $t_i = 0$; $t_f = 4$

Na iteração 7,

$Y_a = 4,71875$ e $Y_{num} = 4,9375$

Como o erro local é o erro na iteração i, temos que o erro local é

$$\text{erro local} = |Y_{num} - Y_a| = 0,21875$$

O erro global é a soma de todos os erros locais até à iteração i, logo neste caso,

$$\text{erro Global} = \sum_{i=1}^{7} \text{erro local}(i)$$

$$= \sum_{i=1}^{7} |Y_{num}(i) - Y_a(i)|$$

$$= 2,625$$

~~c) $\lambda = -2 + 5i$~~ $\quad \frac{dy}{dt} = \lambda y$

~~Região de estabilidade para Euler-Cromer~~

~~Como o método de Euler-Cromer e Euler Implícito usam a mesma equação para resolver o problema,~~

$$~~y_n = y_{n-1} + \lambda y_n h~~$$

~~Assim, as regiões de estabilidade dos dois métodos são iguais. Logo a região é~~

$$~~(1 - \lambda_r \cdot h)^2 + \lambda_i^2 h^2 \geq 1~~$$

~~Isto é sempre verdade desde que $\lambda_r \leq 0$, assim, como $\lambda_r = -2$, ambos os métodos são condicionalmente estáveis para o valor próprio~~

$$~~\lambda = -2 + 5i.~~$$

João Inácio, 93039

$(1-h\lambda_r)^2 + \lambda_i^2 . h^2 \geq 1$

Como $\lambda_r = -2$ e $\lambda_i = 5$, temos

$$(1+2h)^2 + 25h^2 \geq 1$$

$$\Rightarrow 1 + 4h + 4h^2 + 25h^2 \geq 1$$

$$\Rightarrow 29h^2 + 4h \geq 0$$

$$29h^2 + 4h = 0 \Rightarrow h = 0 \vee 29h = -4$$

$$\Rightarrow h = 0 \vee h = -\frac{4}{29}$$

c) A região de estabilidade para o método de Euler-Cromer é

$$(1 + \lambda_r h)^2 + \lambda_i^2 h^2 \leq 1$$

e para o método Euler Implícito é

$$(1 - \lambda_r h)^2 + \lambda_i^2 h^2 \geq 1$$

No caso do Euler Implícito, se $\lambda_r \leq 0$, então o método é incondicionalmente estável. Como $\lambda_r = -2$, então neste caso, o Euler Implícito vai ser ~~condicionad~~ incondicionalmente estável.

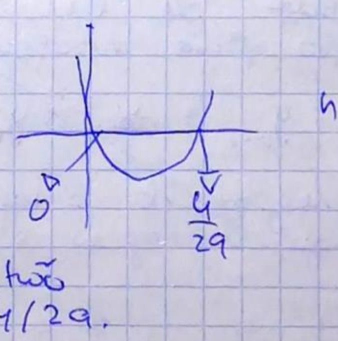
No caso do Euler-Cromer vamos ter uma estabilidade condicionada. Já que λ não é puramente real nem imaginário. Assim,

$$(1-2h)^2 + 25h^2 \leq 1$$

$$\Rightarrow \cancel{1} - 4h + 4h^2 + 25h^2 \leq \cancel{1}$$

$$\Rightarrow 29h^2 - 4h \leq 0$$

$$h = 0 \vee h = \frac{4}{29}$$



Como o método é estável para $29h^2 - 4h \leq 0$, então o valor máximo de h é 4/29.

João Inácio, 93039

5

d) ~~Como o método de Euler Implícito é incondicionalmente estável, espera-se obter uma linha próxima de zero. Pois o método é estável para qualquer h.~~

Como o método de Euler Semi-Implícito é condicionalmente estável, para um

$$\log(h) \geq \log\left(\frac{4}{29}\right)$$

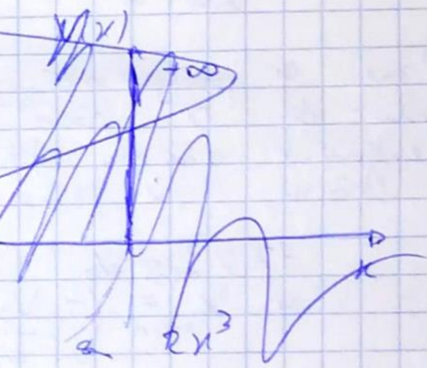
espera-se ter o logaritmo do erro a aumentar com o logaritmo de h. Este aumento tem a forma de uma parábola, assim o erro global deste método é $O(h^2)$.

Como o método de Euler implícito é incondicionalmente estável, esperamos ter uma reta que aumente lentamente com o log(h). Assim o erro global deste método é $O(h)$

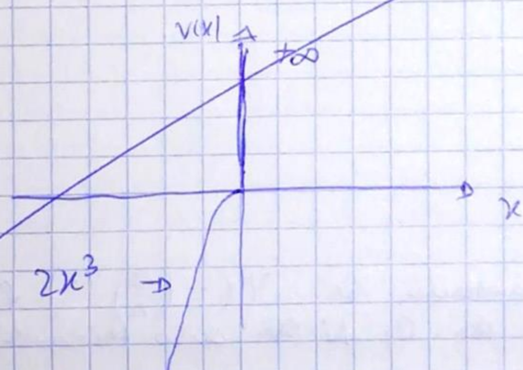
3

$$-\frac{1}{2}\frac{d^2\Psi}{dx^2} + V(x)\Psi = E\Psi$$

$$V(x) = \begin{cases} -2x^3, & x < 0 \\ +\infty, & x \geq 0 \end{cases}$$



d)

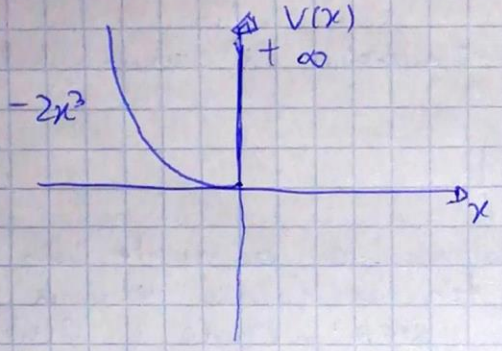


a) $\Psi(0) = 0$

$\lim_{x \to -\infty} \Psi(x) =$

João Inácio, 93039

(3) $$-\frac{1}{2}\frac{d^2\Psi}{dx^2} + V(x)\Psi = E\Psi \qquad V(x) = \begin{cases} -2x^3 & x < 0 \\ +\infty & x \geq 0 \end{cases}$$



a) Como o potencial em $x=0$ é $+\infty$, então a função de onda em $x=0$ tem de ser nula. O potencial quando $x \to -\infty$ é $+\infty$, logo

$$\lim_{x \to -\infty} \Psi(x) = 0 \quad e \quad \Psi(0) = 0.$$

b) Para o programa ser mais preciso, temos de usar um valor de x para que o potencial nesse x seja suficientemente grande tal que a função de onda seja nula. Assim, se esse potencial for V_0,

$$-2x_{min}^3 = V_0$$
$$\Rightarrow x_{min} = \left(-\frac{V_0}{2}\right)^{1/3}$$

e usamos o intervalo de x,

$$-\left(\frac{V_0}{2}\right)^{1/3} \text{ até } 0$$

O intervalo tem de ser aumentado se $\Psi\left(-\left(\frac{V_0}{2}\right)^{1/3}\right)$ for um número não próximo de 0. Nesse caso teríamos de aumentar V_0.

c) Neste caso iria usar o método de Numerov progressivo começando em x_{min} e indo até $x=0$, onde a função de onda é nula, e para verificar esta condição usava o método do shooting.

Assim, começava com duas guesses para a energia da função de onda e resolvia a equação numericamente com o método de Numerov progressivo com a energia igual à primeira guess. Depois usava o método da secante para determinar a próxima aproximação da energia, verificando a função de onda em $x=0$ se o valor produzido $B=0$. Caso a diferença entre duas guesses consecutivas fosse menor que uma dada tolerância parava.

João Inácio, 93032

d) A condição que identifica este tipo de energias é

$$E < V(x)$$

~~Assim,~~

$$\cancel{E < -2x^3}$$

$$\cancel{\Rightarrow -\left(\frac{E}{2}\right)^{1/3} > x}$$

$$\cancel{\Rightarrow x < -\left(\frac{E}{2}\right)^{1/3}}$$

Assim,

$$E < -2x^3$$

$$\Rightarrow -\left(\frac{E}{2}\right)^{1/3} > x \Rightarrow x < -\left(\frac{E}{2}\right)^{1/3}$$