Exame 2021/22

1 a)

$$\begin{cases} N_1(k+1) = N_1(k) - \lambda_1 N_1(k) . h \\ N_2(k+1) = N_2(k) + h\left(-\lambda_2 N_2(k) + \lambda_1 N_1(k)\right) \\ N_3(k+1) = N_3(k) + h\left(-\lambda_3 N_3(k) + \lambda_2 N_2(k)\right) \end{cases}$$

b) Euler Implicito:

$$\begin{cases} N_1(k+1) = N_1(k) + h\left(-\lambda_1 N_1(k+1)\right) \\ N_2(k+1) = N_2(k) + h\left(-\lambda_2 N_2(k+1) + \lambda_1 N_1(k+1)\right) \\ N_3(k+1) = N_3(k) + h\left(-\lambda_3 N_3(k+1) + \lambda_2 N_2(k+1)\right) \end{cases} \Leftrightarrow$$

$$\Leftrightarrow \begin{cases} N_1(k+1)\left(1 + \lambda_1 h\right) = N_1(k) \\ N_1(k+1)(-\lambda_1 h) + N_2(k+1)(1 + \lambda_2 h) = N_2(k) \\ N_2(k+1)(-\lambda_2 h) + N_3(k+1)(1 + \lambda_3 h) = N_3(k) \end{cases}$$

$$\Downarrow \quad Ax = b$$

$$\begin{bmatrix} 1+\lambda_1 h & 0 & 0 \\ -\lambda_1 h & 1+\lambda_2 h & 0 \\ 0 & -\lambda_2 h & 1+\lambda_3 h \end{bmatrix} \begin{bmatrix} N_1(k+1) \\ N_2(k+1) \\ N_3(k+1) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} N_1(k) \\ N_2(k) \\ N_3(k) \end{bmatrix}$$

MATLAB:

```
>> A = [1+λ1*h, 0, 0 ; -λ1*h, 1+λ2*h, 0 ; 0, -λ2*h, 1+λ3*h];
>> for k = 1 : N-1
```

```
>> b= [N1(x) ; N2 (x) ; N3(x)];
>> aux = linsolve (A,b);
>> N1 (k+1) = aux (1);
>> N2 (k+1) = aux (2);
>> N3 (k+1) = aux (3);
>> end
```

2

a) Neste caso, uma vez que estamos perante uma EDO linear poderia-mos utilizar qualquer um destes métodos:

- Euler
- Euler - Cromer
- Euler - Implícito
- Crack - Nicholson
- Runge - Kutta

b) Neste caso, temos uma equação parabólica, para resolver poderiamos utilizar o método de Euler. Primeiro usariamos diferenças finitas para as derivadas referentes a uma das variáveis independentes, convertendo a PDE num sistema de ODEs.

c) Método das diferenças finitas.

3 a)

b) $\frac{\partial T}{\quad}$ $\quad \frac{\partial^2 T}{\quad}$ $\quad \frac{\partial T}{\quad}$

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} - \beta \frac{\partial T}{\partial x} \Leftrightarrow$$

$$\Leftrightarrow \frac{T(i,n+1)-T(i,n)}{\Delta t} = \alpha \frac{T(i-1,n+1)-2T(i,n+1)+T(i+1,n+1)}{\Delta x^2} - \beta \frac{T(i+1,n+1)-T(i-1,n+1)}{2\Delta x}$$

$$\Leftrightarrow T(i,n+1)-T(i,n) = \alpha \Delta t \frac{T(i-1,n+1)-2T(i,n+1)+T(i+1,n+1)}{\Delta x^2} - \beta \Delta t \frac{T(i+1,n+1)-T(i-1,n+1)}{2\Delta x}$$

$$D = \alpha \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \quad \text{e} \quad C = \frac{\beta}{2} \frac{\Delta t}{\Delta x}$$

$$\Leftrightarrow T(i,n+1)-T(i,n) = D\left(T(i-1,n+1)-2T(i,n+1)+T(i+1,n+1)\right) - C\left(T(i+1,n+1)-T(i-1,n+1)\right)$$

$$\Leftrightarrow T_{i,n+1} - T_{i,n} = DT_{i-1,n+1} - 2DT_{i,n+1} + DT_{i+1,n+1} - CT_{i+1,n+1} + CT_{i-1,n+1} \Leftrightarrow$$

$$\Leftrightarrow -(C+D)T_{i-1,n+1} + (1+2D)T_{i,n+1} + (C-D)T_{i+1,n+1} = T_{i,n}$$

c) O que nos pedem aqui é o A genérico e o b genérico:

4 a) ODE, porque se fosse uma PDE teria de conter derivadas parciais

de uma função desconhecida em ordem a duas ou mais variáveis independentes.

b) Para $x \leq -2$, o $\Psi(x) = 0$, uma vez que, o potencial tende para infinito.

Para $x \geq 1$, o $\Psi(x) \approx 0$, uma vez que, o potencial irá aumentar rapidamente com o aumento de x, tendendo para infinito

c) $x \in]-2; 1[$ é bastante adequado, pois o potencial não tende para ∞ dentro destes casos.

Este intervalo teria de ser aumentado, caso o potencial não crescesse tão abruptamente em função de x como cresce.

d) Usaria o algoritmo de Numerov.

Numerov progressivo até à metade dos meus índices de x e Numerov regressiva para a outra metade.

Deste modo conseguiria-mos resolver a equação:

$$\frac{d^2 \Psi(x)}{dx^2} + \Psi(x)\, 2\,(E(x) - V(x)) = 0$$

//