Universidade de Aveiro
Departamento de Física

1º Teste Teórico de Avaliação Discreta

Física Computacional — 2018/2019

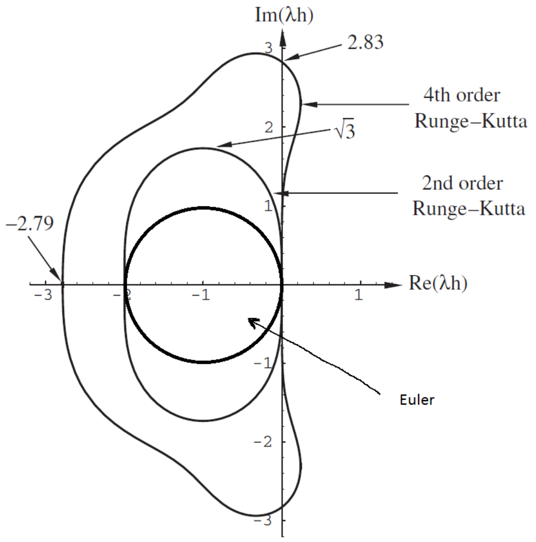
5 de abril de 2019

Duração: 1h30

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

1. (1.5 + 1.5 + 1.5 + 2.0 val.) Considere um problema de valores iniciais descrito pelo seguinte sistema de equações :

$$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} = -x,$$
$$\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}t} = y - 4z,$$
$$\frac{\mathrm{d}z}{\mathrm{d}t} = 2y - 3z.$$



a) Encontre os valores próprios associados ao sistema.

b) Quais dos métodos da figura são estáveis para $h = 1$? Justifique graficamente a sua resposta.

c) A região de estabilidade do método de Euler é dada por $(1 + \lambda_r h)^2 + \lambda_i^2 h^2 \leq 1$. Quais são os valores de h para os quais o método de Euler é estável para este problema.?

d) Escreva o ciclo **`for`** de um programa de MATLAB que, dadas as condições iniciais, resolveria numericamente o problema usando o método de Euler implícito (com o auxílio da função **`linsolve`**).

2. (1.5 + 1.5 + 1.3 + 1.0 + 1.2 val.) Um método de Runge–Kutta de terceira ordem foi aplicado a um problema de valor inicial descrito por uma ODE de primeira ordem. Assuma que o método é estável para este problema. Parte do código foi escrito como:

```
for k=1:N-1
    r1=f(t(k),y(k));
    r2=f(t(k)+2*h/3,y(k)+2*r1*h/3);
    r3=f(t(k)+2*h/3,y(k)+(r1+r2)*h/3);
    y(k+1)=y(k)+(r1+3*r3)*h/4;
end
```

A função anónima `f` tinha sido previamente declarada.

a) Escreva o quadro de Butcher do método.

b) Assuma que o método foi repetido várias vezes, para diferentes valores de h, tendo sido obtidas várias estimativas numéricas para $y(t_f)$. Explique como procederia para obter a melhor estimativa possível de $y(t_f)$ a partir destes resultados.

c) Explique os conceitos de erro local e de erro global neste contexto. Qual é a ordem do erro local do método utilizado?

d) O método usado é explícito ou implícito? Justifique.

e) Explique, de uma forma genérica, quais são as diferenças de um método de Runge–Kutta de passo adaptativo em relação a um método de passo fixo.

3. (1.5 + 1.0 + 1.0 + 1.0 + 1.5 + 1.0 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 $D = 2$. Na discretização do problema, usa-se $\Delta t = 1$ e $\Delta x = 2$.

a) Deduza a aproximação de diferenças finitas centradas para a segunda derivada e mostre qual é a sua ordem.

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

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

As duas tabelas seguintes representam os valores da matriz U em instantes intermédios da execução de um programa em que é usado o método de Crank–Nicolson para resolver o problema de difusão. Os — representam valores ainda não calculados.

0	0	0	0	0	...
1	—	—	—	—	...
1	—	—	—	—	...
1	—	—	—	—	...
1	—	—	—	—	...
3	3	3	3	3	...

0	0	0	0	0	...
1	0.6602	0.5335	—	—	...
1	0.9613	0.9190	—	—	...
1	1.1077	1.2902	—	—	...
1	1.6846	1.9612	—	—	...
3	3	3	3	3	...

c) Explique o significado dos valores preenchidos na tabela da esquerda.

d) Escreva uma relação matemática verdadeira e não trivial entre os números 0.9613, 1.1077, 1.6846, 0.9190, 1.2902 e 1.9612.

e) Se fosse usado o método de Euler para resolver este problema (com os mesmos Δt e Δx), qual seria o valor final de $U(2,3)$ (segunda linha a contar de cima, terceira coluna a contar da esquerda)? Faça o número mínimo necessário de cálculos.

f) Discuta os eventuais cuidados que se deve ter com a estabilidade de cada método.