Universidade de Aveiro
Departamento de Física

Exame Teórico

Física Computacional — 2015/2016

15 de junho de 2016 — Duração: 2h30

1. (5 val) Considere os métodos de Euler e de Runge–Kutta de 4ª ordem.

a) Diz-se que o método de Euler é de 1ª ordem e o Runge–Kutta de 4ª ordem é de 4ª ordem. Qual o significado destas afirmações?

b) Se integrarmos a equação $\mathrm{d}y/\mathrm{d}t = f(y)$ desde $t = 0$ a $t = t_f$ usando um passo dt, qual o número de iterações necessárias em cada método?

c) Suponha que queremos um erro inferior a 10^{-4}, qual o dt máximo que pode usar em cada um dos métodos? Considere que a contante de proporcionalidade das expressões do erro é 1 em ambos os casos. Quantas iterações são necessárias em cada método? Suponha ainda que cada iteração de Runge–Kutta de 4ª ordem requer 5 vezes o tempo de cálculo de uma iteração de Euler, qual o tempo total em cada caso?

d) Continue a assumir as condições da alínea anterior, mas agora encontre o erro a partir do qual o método de Runge–Kutta se torna mais rápido.

2. (5 val) Considere a equação de Schrödinger independente do tempo de uma partícula sujeita a uma força constante F dada por

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\phi}{\mathrm{d}x^2} + Fx\phi = E\phi$$

com as seguintes condições fronteira $\phi(0) = 0$ e $\phi(L >> 1) = 0$.

a) A equação é uma ODE ou PDE? Justifique.

b) A equação é linear ou não linear? Justifique.

c) Use diferenças finitas centradas e escreva a matriz que lhe permite calcular numericamente os valores próprios E.

d) Que outro método poderia usar para calcular os valores próprios? Como procederia para obter dois valores próprios?

3. (5 val) Considere a seguinte equação de condução de calor

$$\frac{\partial T(x,t)}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T(x,t)}{\partial x^2} + f(x),$$

onde $f(x)$ representa uma fonte de calor.

Integração da equação no domínio de Fourier:

a) Aplique a toda a equação a transformada de Fourier associada à variável x, transformando-a num sistema de equações diferenciais ordinárias (ODE).

b) Escreva o ciclo de Euler adequado à integração das ODEs que obteve na alínea anterior.

Integração da equação usando diferenças finitas:

c) Use diferenças finitas centradas para aproximar a segunda derivada em ordem a x, e apresente as ODEs resultantes.

d) Considere agora $f(x) = 0$ e escreva o ciclo que permitiria integrar as ODEs da alínea c) usando o método de Runge–Kutta de 2ª ordem.

4. (5 val) Considere o seguinte sistema linear de 2 equações a 2 incógnitas

$$\begin{cases} 5x_1 & +2x_2 & = & 2 \\ x_1 & -4x_2 & = & 1. \end{cases}$$

a) Encontre a matriz T e o vetor $\mathbf{c}$ tal que se possa aplicar o método de Jacobi pela expressão $\mathbf{x}^{(k)} = T\mathbf{x}^{(k-1)} + \mathbf{c}$.

b) Usando os resultados da alínea anterior, prove que o método de Jacobi aplicado a esta equação é convergente.

c) A matriz T e o vetor $\mathbf{c}$ do método de Gauss–Seidel aplicado ao sistema acima são

$$T = \begin{bmatrix} 0 & -\frac{2}{5} \\ 0 & -\frac{1}{10} \end{bmatrix}, \qquad c = \begin{bmatrix} \frac{2}{5} \\ -\frac{3}{20} \end{bmatrix}$$

O método de Gauss–Seidel aplicado a este sistema converge? Se sim, qual dos dois converge mais rápido?

Formulário:

Equação diferencial $\mathrm{d}y/\mathrm{d}t = f(y,t)$

Euler	$y_{k+1} = y_k + f(y_k, t_k)h$
Euler implícito	$y_{k+1} = y_k + f(y_{k+1}, t_{k+1})h$
Crank-Nicolson	$y_{k+1} = y_k + \frac{h}{2}\left[f(y_{k+1}, t_{k+1}) + f(y_k, t_k)\right]$
Runge–Kutta de 2ª ordem	$r_1 = f(t_k, y_k)$
	$r_2 = f(t_k + \frac{h}{2}, y_k + \frac{h}{2}r_1)$
	$y_{k+1} = y_k + r_2 h$

Transformada de Fourier da derivada:

$g(t) = f^{(n)}(t), \quad G(\omega) = (i\omega)^n F(\omega)$