Universidade de Aveiro
Departamento de Física

Exame Teórico de Recurso

Física Computacional — 2017/2018

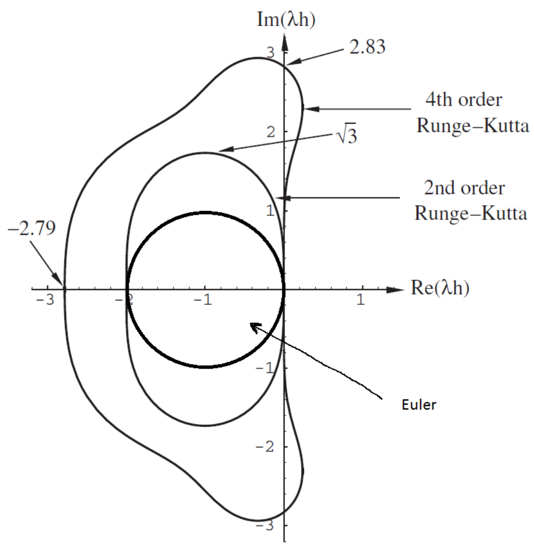
3 de julho de 2018

Duração: 2h30

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

1. (1.5 + 1.5 + 2.0 val.) Três tanques contêm água salgada. As quantidades de sal são x_1, x_2 e x_3 e as concentrações em cada tanque são uniformes. O tanque 2 tem metade do volume dos outros tanques. São forçados iguais fluxos do tanque 1 para o 2, do 2 para o 3 e do 3 para o 1. As equações diferenciais que descrevem o sistema são

$$\frac{dx_1}{dt} = -x_1 + x_3,$$
$$\frac{dx_2}{dt} = x_1 - 2x_2,$$
$$\frac{dx_3}{dt} = 2x_2 - x_3.$$



a) Encontre os valores próprios associados ao sistema.

b) Quais dos métodos da figura são estáveis para $h = 0.9$? Justifique graficamente a sua resposta.

c) Escreva o ciclo `for` de um programa de MATLAB que, dadas as condições iniciais, resolveria numericamente o problema usando o método de Crank–Nicolson (com o auxílio da função `linsolve`. Para simplificar a escrita, pode substituir x_1, x_2 e x_3 por x, y e z.

2. (1.0 + 1.5 + 1.5 + 1.0 val.) Considere a equação diferencial

$$\frac{d^2x(t)}{dt^2} = 2x^2(t) + 4t\,x(t)\frac{dx(t)}{dt},$$

com as condições fronteira

$$x(t=0) = \frac{1}{4}, \qquad x(t=1) = \frac{1}{3}.$$

a) Separe esta ODE de segunda ordem num sistema de ODE de primeira ordem.

b) Explique como aplicaria o método de shooting a este problema em particular.

c) Descreva a estrutura do programa que usaria. Explique a função do método da secante sem entrar em pormenores matemáticos.

d) Qual é o outro método que aprendeu para resolver numericamente problemas de condições fronteira? Esse método poderia ser usado para resolver este problema? Justifique.

3. (0.6 + 2.0 + 1.2 + 1.2 val.) Considere a equação de onda a uma dimensão,

$$\frac{\partial^2 y(x,t)}{\partial t^2} = c^2 \frac{\partial^2 y(x,t)}{\partial x^2},$$

onde c é a velocidade de propagação da onda, t tem valores entre 0 e t_{fin} e x tem valores entre 0 e L.

a) Descreva a discretização das duas variáveis.

b) Mostre como se chega a

$$y(i,n+1) = -y(i,n-1) + 2y(i,n) + C^2\left[y(i-1,n) - 2y(i,n) + y(i+1,n)\right],$$

e escreva a expressão da constante C.

c) Na equação da alínea anterior, considere um i genérico correspondente a um ponto afastado das extremidades e faça a substituição $n = 1$. Explique porque há um problema com a aplicação da expressão assim obtida. Reescreva-a num formato em que ela possa ser aplicada diretamente, partindo do princípio que conhece

$$p(x) = y(x, t=0) \qquad \text{e} \qquad p_{\mathrm{d}}(x) = \left(\frac{\partial y}{\partial t}\right)_{x,t=0}.$$

d) Considere que a extremidade $x = 0$ está presa a uma mola. A condição fronteira é mista:

$$\left(\frac{\partial y}{\partial x}\right)_{x=0,t} = a y(x=0,t),$$

onde a é uma constante positiva. Escreva a equação da alínea b) para um n genérico maior que 2, e para $i = 1$, num formato em que ela possa ser aplicada diretamente.

4. (0.8 + 1.0 + 1.2 + 1.0 + 1.0 val.) Considere o integral

$$I = \int_D f(x_1, x_2, \ldots, x_d)\,\mathrm{d}x_1\,\mathrm{d}x_2 \cdots \mathrm{d}x_d\,.$$

V_D é o volume multidimensional do domínio de integração.

a) Escreva a relação entre I e o valor médio da função f no domínio de integração.

b) Sabendo que o erro da média de uma amostra com $N \gg 1$ é dado por

$$\sigma_\mathrm{m} = \frac{\sigma}{\sqrt{N}}\,,$$

onde σ é o desvio padrão da amostra, qual é o erro associado à estimativa de I quando o integral é calculado pelo método de Monte Carlo?

c) Explique porque é que o método de Monte Carlo se torna mais vantajoso que os métodos tradicionais de quadratura à medida que o número de dimensões d do domínio aumenta.

d) Suponha que usando um número N_1 de pontos obteve uma estimativa para o integral usando o método de Monte Carlo. Assuma ainda que guardou os N_1 valores de f. Explique como calcularia uma estimativa para o erro.

e) Se o erro estimado na alínea anterior fosse 10 vezes maior que o considerado aceitável, o que faria a seguir?