Universidade de Aveiro
Departamento de Física

Exame Teórico

Física Computacional — 2016/2017

23 de junho de 2017

Duração: 2h30

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

1. (1.5 + 1.5 + 2.0 val.) Considere a seguinte reação química:

$$A + B \underset{K_2}{\overset{K_1}{\rightleftharpoons}} C\,.$$

O sistema de equações diferenciais que descreve a evolução com o tempo das concentrações u_1, u_2 e u_3 das espécies A, B e C é o seguinte

$$\begin{cases} u_1' = \dfrac{\mathrm{d}u_1}{\mathrm{d}t} = -K_1 u_1 u_2 + K_2 u_3, \\ u_2' = \dfrac{\mathrm{d}u_2}{\mathrm{d}t} = -K_1 u_1 u_2 + K_2 u_3, \\ u_3' = \dfrac{\mathrm{d}u_3}{\mathrm{d}t} = +K_1 u_1 u_2 - K_2 u_3, \end{cases}$$

onde, obviamente, as constantes K_1 e K_2 são reais e positivas.

a) Mostre que o sistema de equações não é linear. De que maneira é que isto pode complicar a aplicação de métodos implícitos?

b) A estabilidade deste problema não linear pode ser estudada, dadas algumas condições, a partir da matriz jacobiana do vetor das concentrações, definida por

$$A = \begin{bmatrix} \dfrac{\mathrm{d}u_1'}{\mathrm{d}u_1} & \dfrac{\mathrm{d}u_1'}{\mathrm{d}u_2} & \dfrac{\mathrm{d}u_1'}{\mathrm{d}u_3} \\ \dfrac{\mathrm{d}u_2'}{\mathrm{d}u_1} & \dfrac{\mathrm{d}u_2'}{\mathrm{d}u_2} & \dfrac{\mathrm{d}u_2'}{\mathrm{d}u_3} \\ \dfrac{\mathrm{d}u_3'}{\mathrm{d}u_1} & \dfrac{\mathrm{d}u_3'}{\mathrm{d}u_2} & \dfrac{\mathrm{d}u_3'}{\mathrm{d}u_3} \end{bmatrix}.$$

Determine a matriz e explique como faria para determinar os seus valores próprios.

c) Os mesmos critérios de estabilidade que foram discutidos a partir dos valores próprios das matrizes de sistemas lineares podem ser usados aqui. Os valores próprios da matriz da alínea b) são $\lambda_1 = \lambda_2 = 0$ e $\lambda_3 = -K_1(u_1 + u_2) - K_2$. Esboce os gráficos das regiões de estabilidade de três hipotéticos métodos numéricos usados para resolver problemas de valor inicial tais que

i) O método seja instável.

ii) O método seja incondicionalmente estável.

iii) O método seja condicionalmente estável. Discuta a condição de estabilidade.

2. (1.5 + 1.0 + 2.5 val.) As ondas de som estacionárias no interior de um tubo fechado numa extremidade e aberto na outra são soluções da equação

$$v^2(x)\,\frac{\mathrm{d}^2y(x)}{\mathrm{d}x^2} = -\omega^2 y(x)\,,$$

com as condições fronteira

$$y(x=0) = 0\,, \qquad \left(\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}\right)_{x=L} = 0\,.$$

a) Este problema pode ser resolvido usando o método de shooting. Explique genericamente como funciona este método.

b) Suponha que quer determinar numericamente a frequência do 4º harmónico usando o método de shooting (com o auxílio do método da secante). Quais são os cálculos exploratórios que têm de ser feitos previamente?

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

3. (1.5 + 2.5 + 1.0 val.)

a) Explique porque é que a integração numérica por métodos de Monte Carlo se torna mais vantajosa que os métodos numéricos tradicionais de quadratura quando o integral é múltiplo, com um número elevado de variáveis de integração.

b) Considere uma rede quadrada de n por n spins. A interação entre os spins é descrita pelo modelo de Ising: a energia (em unidades reduzidas) de uma dada configuração α do sistema é dada por uma soma sobre todos os pares de vizinhos próximos:

$$E_\alpha = -\sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j \,.$$

A magnetização de uma dada configuração é

$$M_\alpha = \sum_{i=1}^{n^2} S_i \,.$$

Se forem selecionadas L configurações com igual probabilidade, a estimativa de Monte Carlo da magnetização média será

$$\langle M \rangle_{\mathrm{MC}} = \frac{\sum_{\alpha=1}^{L} M_\alpha \, \mathrm{e}^{-E_\alpha/T}}{\sum_{\alpha=1}^{L} \mathrm{e}^{-E_\alpha/T}} \,,$$

onde M_α e E_α são a magnetização e a energia da configuração α. Escreva em pseudocódigo um programa para determinar a magnetização média por partícula do sistema a uma dada temperatura, usando configurações geradas com igual probabilidade. Pode assumir que está disponível uma função `randi(nmax,a,b)` que gera uma matriz de $a \times b$ números inteiros aleatórios uniformemente distribuídos entre 0 e $nmax$. Ignore completamente o problema das fronteiras do domínio. Ao contrário do algoritmo de Metropolis, não é necessário desprezar algumas configurações.

c) O algoritmo da alínea anterior é extremamente ineficiente. Explique o conceito de amostragem por importância.

4. (2.5 + 0.7 + 1.8 val.) Para resolver numericamente a equação de condução de calor a uma dimensão,

$$\frac{\partial T(x,t)}{\partial t} = \frac{k}{c\rho}\frac{\partial^2 T(x,t)}{\partial x^2},$$

pode-se usar uma aproximação de diferenças finitas para a derivada em ordem a x, e fica-se com um conjunto de $(N_x - 2)$ ODE:

$$\frac{\partial T(x,t)}{\partial t} = \frac{k}{c\rho}\frac{T(x-\Delta x,t) - 2T(x,t) + T(x+\Delta x,t)}{(\Delta x)^2}.$$

Aplicando o método de Crank–Nicolson, chega-se a

$$\begin{aligned} -T(i-1,n+1) + \left(\frac{2}{\eta}+2\right)T(i,n+1) - T(i+1,n+1) \\ = T(i-1,n) + \left(\frac{2}{\eta}-2\right)T(i,n) + T(i+1,n) \end{aligned}$$

com $\eta = k\Delta t/[c\rho(\Delta x)^2]$.

a) Considere um problema deste tipo em que as condições fronteira são

$$T(0,t) = 20, \quad T(L,t) = 25 + 50 \times \tanh(t/1000).$$

O sistema de equações para cada passo de tempo pode ser escrito na forma matricial,

$$\boldsymbol{A}\begin{bmatrix} T(2,n+1) \\ T(3,n+1) \\ \vdots \\ T(N_x-2,n+1) \\ T(N_x-1,n+1) \end{bmatrix} = \boldsymbol{b},$$

onde $\boldsymbol{A}$ é uma matriz quadrada e $\boldsymbol{b}$ é um vetor coluna. Justificando adequadamente, escreva as duas primeiras e as duas últimas linhas de $\boldsymbol{A}$ e os dois primeiros e os dois últimos elementos de $\boldsymbol{b}$.

b) Explique porque é que se usarmos o método de Euler para este problema já não temos que nos preocupar com a escolha de um método de resolução de sistemas de equações algébricas lineares.

c) Para este problema, explique as vantagens do método de Crank–Nicolson em relação ao método de Euler. São estas as duas únicas alternativas possíveis?