

# Física Computacional

## Resolução do Exame Teórico de 2018/2019

Esta resolução está um pouco resumida: alguns passos poderiam ter sido justificados com mais pormenor e os códigos não têm quaisquer comentários.

1.

a) O sistema linear de equações diferenciais pode ser escrito na forma matricial

$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \mathbf{A} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}, \quad \text{com } \mathbf{A} = \begin{bmatrix} 0 & -5/2 \\ i & -2 - 2i \end{bmatrix}.$$

Vamos determinar os valores próprios  $\lambda$  da matriz  $\mathbf{A}$ , resolvendo a equação característica  $|\mathbf{A} - \lambda \mathbf{I}| = 0$ :

$$\begin{aligned} \begin{vmatrix} 0 - \lambda & -5/2 \\ i & -2 - 2i - \lambda \end{vmatrix} &= 0 \\ \lambda(2 + 2i + \lambda) + \frac{5}{2}i &= 0 \\ \lambda^2 + 2(i + 1)\lambda + \frac{5}{2}i &= 0 \\ \lambda &= \frac{-2(1 + i) \pm \sqrt{4(1 + i)^2 - 10i}}{2} \\ \lambda &= \frac{-2(1 + i) \pm \sqrt{4(1 + 2i - 1) - 10i}}{2} \\ \lambda &= \frac{-2(1 + i) \pm \sqrt{-2i}}{2}. \end{aligned}$$

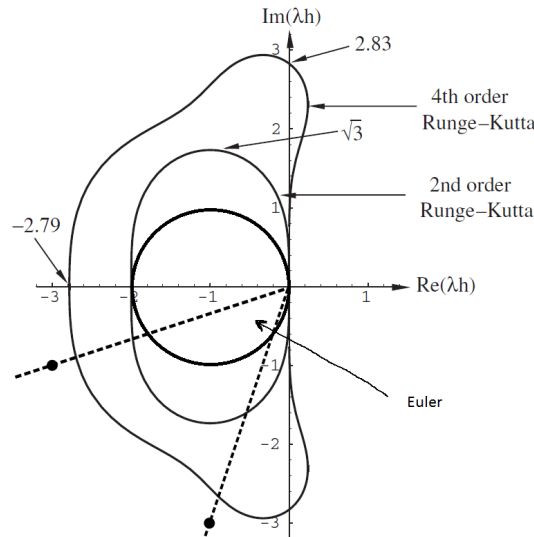
O enunciado diz que  $\sqrt{-2i} = 1 - i$ , logo

$$\begin{aligned} \lambda &= \frac{-2(1 + i) \pm (1 - i)}{2} \\ &= -1 - i \pm \left(\frac{1}{2} - \frac{i}{2}\right). \end{aligned}$$

Os valores próprios são

$$\lambda_1 = -\frac{1}{2} - \frac{3}{2}i, \quad \lambda_2 = -\frac{3}{2} - \frac{1}{2}i.$$

b) Para que cada um dos métodos em estudo seja estável, **ambos** os pontos  $P_1$ , de coordenadas  $(-h/2, -3h/2)$ , e  $P_2$ , de coordenadas  $(-3h/2, -h/2)$ , têm que estar na sua zona de estabilidade. Vamos começar por representar na figura, com pequenos círculos pretos, os pontos  $P_1$  e  $P_2$  quando  $h = 2$ . Unindo cada um destes pontos, com linhas a tracejado, à origem das coordenadas, vemos quais são as localizações de  $P_1$  e  $P_2$ : com o aumento de  $h$ , os pontos vão-se afastando da origem ao longo dessas linhas. Quando  $h = 2$ , já estão fora da região de estabilidade de qualquer um dos métodos.



Para valores muito pequenos de  $h$ , os pontos  $P_1$  e  $P_2$  vão estar ambos dentro das regiões de estabilidade de todos os 3 métodos. Para  $h = 2$ , os dois pontos já não estão dentro das regiões de estabilidade de nenhum dos métodos. Isto quer dizer que todos os métodos são **condicionalmente** estáveis quando aplicados a este problema.

- c) Para  $h = 2$ , os dois pontos já estão fora da região de estabilidade do método de Runge-Kutta de quarta ordem, mas não por muito. É fácil de ver que o valor máximo de  $h$  para o qual o método de Runge-Kutta de 4ª ordem ainda é estável deverá ser um pouco inferior a 2 (mais próximo de 2 do que de 1.5).
- d) Vamos aplicar o método de Crank-Nicolson:

$$\begin{cases} x(k+1) = x(k) + \frac{1}{2} \left[ -\frac{5}{2}y(k) - \frac{5}{2}y(k+1) \right] h \\ y(k+1) = y(k) + \frac{1}{2} \left[ ix(k) + (-2-2i)y(k) + ix(k+1) + (-2-2i)y(k+1) \right] h \end{cases}$$

$$\begin{cases} x(k+1) + \frac{5}{4}hy(k+1) = x(k) - \frac{5}{4}hy(k), \\ -\frac{ih}{2}x(k+1) + (1+h+ih)y(k+1) = \frac{ih}{2}x(k) + (1-h-ih)y(k). \end{cases}$$

O sistema linear de equações pode ser escrito na forma matricial

$$\mathbf{A} \begin{bmatrix} x(k+1) \\ y(k+1) \end{bmatrix} = \mathbf{b},$$

com

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & \frac{5}{4}h \\ -\frac{ih}{2} & 1+h+ih \end{bmatrix}$$

e

$$\mathbf{b} = \begin{bmatrix} x(k) - \frac{5}{4}hy(k) \\ \frac{ih}{2}x(k) + (1-h-ih)y(k) \end{bmatrix}.$$

Note que esta matriz  $\mathbf{A}$  não é a matriz  $\mathbf{A}$  da alínea a).

No MATLAB, escreve-se

```

...
A=[1, 5*h/4; -1*i*h/2, 1+h+1*i*h];
for k=1:N-1
    b=[x(k)-5*h*y(k)/4; 1*i*h*x(k)/2+(1-h-1*i*h)*y(k)];
    aux=linsolve(A,b);
    x(k+1)=aux(1);
    y(k+1)=aux(2);
end
...

```

2.

a) Partimos das seguintes expansões em série de Taylor:

$$y(x+h) = y(x) + y^{(1)}(x) \cdot h + \frac{1}{2!}y^{(2)}(x) \cdot h^2 + \frac{1}{3!}y^{(3)}(x) \cdot h^3 + \mathcal{O}(h^4),$$

$$y(x-h) = y(x) - y^{(1)}(x) \cdot h + \frac{1}{2!}y^{(2)}(x) \cdot h^2 - \frac{1}{3!}y^{(3)}(x) \cdot h^3 + \mathcal{O}(h^4).$$

Vamos somar as duas expansões para obter a aproximação de diferenças centradas para a segunda derivada:

$$y(x+h) + y(x-h) = 2y(x) + 0 + y^{(2)}(x) \cdot h^2 + 0 + \mathcal{O}(h^4)$$

$$y^{(2)}(x) \cdot h^2 = y(x+h) + y(x-h) - 2y(x) + \mathcal{O}(h^4)$$

$$y^{(2)}(x) = \frac{y(x+h) - 2y(x) + y(x-h)}{h^2} + \frac{\mathcal{O}(h^4)}{h^2}$$

$$y^{(2)}(x) = \frac{y(x+h) - 2y(x) + y(x-h)}{h^2} + \mathcal{O}(h^2).$$

Para obter a aproximação de diferenças centradas para a primeira derivada, partimos de

$$y(x+h) = y(x) + y^{(1)}(x) \cdot h + \frac{1}{2!}y^{(2)}(x) \cdot h^2 + \mathcal{O}(h^3),$$

$$y(x-h) = y(x) - y^{(1)}(x) \cdot h + \frac{1}{2!}y^{(2)}(x) \cdot h^2 + \mathcal{O}(h^3),$$

e subtraímos as duas expansões:

$$y(x+h) - y(x-h) = 0 + 2y^{(1)}(x) \cdot h + 0 + \mathcal{O}(h^3)$$

$$y^{(1)}(x) = \frac{y(x+h) - y(x-h)}{2h} + \frac{\mathcal{O}(h^3)}{2h}$$

$$y^{(1)}(x) = \frac{y(x+h) - y(x-h)}{2h} + \mathcal{O}(h^2).$$

b) Definindo um índice  $k$  tal que  $x \rightarrow x_k, y(x) \rightarrow y_k, x+h \rightarrow x_{k+1}, y(x+h) \rightarrow y_{k+1}, x-h \rightarrow x_{k-1}$  e  $y(x-h) \rightarrow y_{k-1}$ , vem

$$\frac{y_{k-1} - 2y_k + y_{k+1}}{h^2} + a \frac{-y_{k-1} + y_{k+1}}{2h} x_k = b x_k$$

$$\left(1 - \frac{ahx_k}{2}\right) y_{k-1} - 2y_k + \left(1 + \frac{ahx_k}{2}\right) y_{k+1} = bh^2 x_k.$$

Definimos um vetor coluna  $\mathbf{y}$  de elementos  $y_1, y_2, \dots, y_N$ , onde  $y_k = y(x = 0) + (k - 1)h$ . A primeira linha de  $\mathbf{A}$  e o primeiro elemento de  $\mathbf{b}$  correspondem à equação

$$y_1 = \alpha.$$

Então,  $b_1 = \alpha$  e a primeira linha de  $\mathbf{A}$  é

$$1 \quad 0 \quad \dots \quad 0 \quad 0.$$

A última linha de  $\mathbf{A}$  e o último elemento de  $\mathbf{b}$  correspondem à equação diferencial

$$\left. \frac{dy}{dx} \right|_{x=L} = 0.$$

Vamos usar a aproximação de diferenças finitas para a primeira derivada mais simples possível:

$$y^{(1)}(L) = \frac{y(L) - y(L - h)}{h}.$$

Substituindo,

$$-1 \cdot y_{N-1} + 1 \cdot y_N = 0.$$

Então,  $b_N = 0$  e a última linha de  $\mathbf{A}$  é

$$0 \quad 0 \quad \dots \quad 0 \quad -1 \quad 1.$$

Para um  $k$  genérico,  $b_k = bh^k x_k$  e a linha de índice  $k$  da matriz  $\mathbf{A}$  é

$$0 \quad 0 \quad \dots \quad 0 \quad 1 - \frac{ahx_k}{2} \quad -2 \quad 1 + \frac{ahx_k}{2} \quad 0 \quad \dots \quad 0 \quad 0,$$

onde o  $-2$  é o elemento da diagonal principal, ou seja,  $A_{kk}$ .

- c) O outro método que aprendeu para resolver numericamente problemas de valor fronteira foi o método de *shooting*. Se o nosso método avançasse no sentido positivo dos  $x$ , o parâmetro desconhecido que teria que ser determinado seria  $y'(x = 0)$ . Escolhiam-se duas estimativas iniciais de  $y'(x = 0)$ , as duas primeiras *guesses*. Em seguida, seria usado um método de resolução de problemas de valor inicial para ODE (Euler ou um método de Runge-Kutta, por exemplo). O nosso *result* seria a derivada em  $x = L$ , que poderia ser obtida a partir da aproximação

$$\frac{y_N - y_{N-1}}{h}.$$

O valor pretendido para o *result* era  $B = 0$ . Depois de serem obtidos os *results* para as duas primeiras *guesses*, seria usado o método da secante para determinar a *guess* seguinte. O procedimento seria repetido até que, por exemplo, o valor da diferença absoluta entre  $B$  e o mais recente *result* fosse inferior a uma dada tolerância.

3.

- a) Vamos substituir a aproximação de diferenças finitas centradas de segunda ordem para a segunda derivada,

$$y^{(2)}(x) = \frac{y(x+h) - 2y(x) + y(x-h)}{h^2} + \mathcal{O}(h^2),$$

na equação de Poisson, definindo índices  $i$  e  $j$  tais que  $x \rightarrow x_i$ ,  $x+h \rightarrow x_{i+1}$ ,  $x-h \rightarrow x_{i-1}$ ,  $y \rightarrow y_j$ ,  $y+h \rightarrow y_{j+1}$  e  $y-h \rightarrow y_{j-1}$ . As segundas derivadas são então dadas por

$$\frac{\partial^2 V(i, j)}{\partial x^2} \approx \frac{V(i+1, j) - 2V(i, j) + V(i-1, j)}{h^2},$$

$$\frac{\partial^2 V(i, j)}{\partial y^2} \approx \frac{V(i, j+1) - 2V(i, j) + V(i, j-1)}{h^2},$$

e a equação de Poisson discretizada fica

$$\frac{V(i+1, j) - 2V(i, j) + V(i-1, j)}{h^2} + \frac{V(i, j+1) - 2V(i, j) + V(i, j-1)}{h^2} = f(i, j)$$

$$-4V(i, j) + V(i+1, j) + V(i-1, j) + V(i, j+1) + V(i, j-1) = h^2 f(i, j).$$

- b) O método de Jacobi, aplicado à equação de Poisson a duas dimensões, escreve-se como

$$V^{(k+1)}(i, j) = \frac{1}{4} \left[ V^{(k)}(i+1, j) + V^{(k)}(i-1, j) \right. \\ \left. + V^{(k)}(i, j+1) + V^{(k)}(i, j-1) - h^2 f(i, j) \right],$$

com as devidas alterações nos pontos fronteira.  $k+1$  é o índice da iteração. De acordo com o enunciado, os valores de  $V^{(0)}(i, j)$  são dados por

8.0	8.0	6.0	4.0
8.0	0.0	0.0	4.0
8.0	0.0	0.0	4.0
8.0	8.0	6.0	4.0

Então,

$$V^{(1)}(2, 2) = \frac{1}{4} \left[ V^{(0)}(3, 2) + V^{(0)}(1, 2) + V^{(0)}(2, 3) + V^{(0)}(2, 1) - h^2 f(2, 2) \right]$$

$$= \frac{1}{4} \left[ 0.0 + 8.0 + 0.0 + 8.0 - 1.0^2 \cdot 4.0 \right]$$

$$= 3,$$

e

$$V^{(1)}(2, 3) = \frac{1}{4} \left[ V^{(0)}(3, 3) + V^{(0)}(1, 3) + V^{(0)}(2, 4) + V^{(0)}(2, 2) - h^2 f(2, 4) \right]$$

$$= \frac{1}{4} \left[ 0.0 + 6.0 + 4.0 + 0.0 - 1.0^2 \cdot 2.0 \right]$$

$$= 2.$$

c) Vamos escrever a equação da alínea a) para cada uma das 4 incógnitas. Para  $V(2, 2)$ , vem

$$\begin{aligned} -4V(2, 2) + V(3, 2) + V(1, 2) + V(2, 3) + V(2, 1) &= h^2 f(2, 2) \\ -4V(2, 2) + V(3, 2) + 8.0 + V(2, 3) + 8.0 &= 4.0 \\ -4V(2, 2) + V(2, 3) + V(3, 2) &= -12.0. \end{aligned}$$

Para  $V(2, 3)$ , vem

$$\begin{aligned} -4V(2, 3) + V(3, 3) + V(1, 3) + V(2, 4) + V(2, 2) &= h^2 f(2, 3) \\ -4V(2, 3) + V(3, 3) + 6.0 + 4.0 + V(2, 2) &= 2.0 \\ V(2, 2) - 4V(2, 3) + V(3, 3) &= -8.0. \end{aligned}$$

Para  $V(3, 2)$ , vem

$$\begin{aligned} -4V(3, 2) + V(4, 2) + V(2, 2) + V(3, 3) + V(3, 1) &= h^2 f(3, 2) \\ -4V(3, 2) + 8 + V(2, 2) + V(3, 3) + 8.0 &= 4.0 \\ V(2, 2) - 4V(3, 2) + V(3, 3) &= -12.0. \end{aligned}$$

Para  $V(3, 3)$ , vem

$$\begin{aligned} -4V(3, 3) + V(4, 3) + V(2, 3) + V(3, 4) + V(3, 2) &= h^2 f(3, 3) \\ -4V(3, 3) + 6.0 + V(2, 3) + 4.0 + V(3, 2) &= 2.0 \\ V(2, 3) + V(3, 2) - 4V(3, 3) &= -8.0. \end{aligned}$$

Juntando os 4 resultados anteriores, ficamos com o sistema

$$\begin{cases} -4V(2,2) + V(2,3) + V(3,2) &= -12.0, \\ V(2,2) - 4V(2,3) + V(3,3) &= -8.0, \\ V(2,2) - 4V(3,2) + V(3,3) &= -12.0, \\ V(2,3) + V(3,2) - 4V(3,3) &= -8.0, \end{cases}$$

que pode ser escrito na forma matricial

$$\mathbf{Az} = \mathbf{b},$$

com

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} -4 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & -4 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & -4 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & -4 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{z} = \begin{bmatrix} V(2, 2) \\ V(2, 3) \\ V(3, 2) \\ V(3, 3) \end{bmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} -12.0 \\ -8.0 \\ -12.0 \\ -8.0 \end{bmatrix}.$$

d) Para um domínio quadrado com uma discretização de cada coordenada cartesiana em  $M$  valores, o número de incógnitas é  $(M - 2)^2$  e o número de elementos da matriz  $\mathbf{A}$  é  $(M - 2)^4$ . Mesmo para valores relativamente pequenos de  $M$ , a matriz facilmente esgota os recursos de memória

do computador. Felizmente, a matriz é esparsa, ou seja, a maior parte dos seus elementos são zero, e o MATLAB permite guardar este tipo de matrizes num formato que reduz em muito o uso de memória, registando apenas os valores e os índices dos elementos diferentes de zero. A matriz  $A$  do sistema de equações da alínea anterior (que nem sequer é esparsa) só tem 16 elementos, por isso o problema de uso excessivo de memória não se coloca neste caso particular.

4.

- a) Vamos escrever o programa em MATLAB, que é uma linguagem tão simples que pode ser usada para esta função (escrever pseudo-código).

```
...
Vd=1;
aleat=rand(N,d);
for i=1:d
    aleat(:,i)=a(i)+(b(i)-a(i))*aleat(:,i);
    Vd=Vd*(b(i)-a(i));
end
for j=1:N
    f(j)=fun(aleat(j,:));
end
estimativa=Vd*sum(f)/N;
...
```

- b) Para obter uma estimativa do erro seria necessário acrescentar a seguinte linha de código ao fim do programa da alínea anterior:

```
erro=std(f)*Vd/sqrt(N);
```

- c) Para valores de  $d$  pequenos, os métodos tradicionais de quadratura seriam mais eficientes. Para maiores valores de  $d$ , o método de Monte Carlo tornar-se-ia mais vantajoso. Isto acontece porque o erro dos métodos de quadratura é de ordem  $\mathcal{O}(N^{-n/d})$ , onde o inteiro positivo pequeno  $n$  é uma constante que depende do método em particular, enquanto que a ordem do erro do método de Monte Carlo é sempre  $\mathcal{O}(N^{-1/2})$ , independentemente do valor de  $d$ . O que é desejável é que o valor absoluto do expoente de  $N$  seja o maior possível. Este valor absoluto diminui com  $d$  para os métodos de quadratura, mas não varia para os métodos de Monte Carlo. Assim, os métodos de Monte Carlo para cálculo de integrais definidos tornam-se melhores que os métodos convencionais para integrais multi-dimensionais (o que acontece, na prática, logo a partir de valores de  $d$  iguais a 5 ou 6).
- d) A pergunta desta alínea era feita num contexto geral do cálculo de integrais pelo método de Monte Carlo e não no contexto do algoritmo de Metropolis aplicado ao modelo de Ising. Sucintamente e sem usar equações, podemos dizer que quando se usa amostragem por importância, em vez de se escolher aleatoriamente valores das variáveis independentes com uma distribuição de probabilidade uniforme em todo o domínio de integração, escolhe-se (sempre aleatoriamente)

esses valores com uma distribuição de probabilidade que é maior para os pontos do domínio que têm mais importância no cálculo do integral (aqueles onde o módulo da função é maior). Isto vai reduzir a variância dos valores calculados de  $f$ , fazendo com que o erro, dado por

$$V_D \frac{\sigma}{\sqrt{N}},$$

se torne menor para o mesmo valor de  $N$ .