Universidade de Aveiro
Departamento de Física

1º Teste Teórico de Avaliação Discreta

Física Computacional — 2017/2018

4 de maio de 2018

Duração: 1h30

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

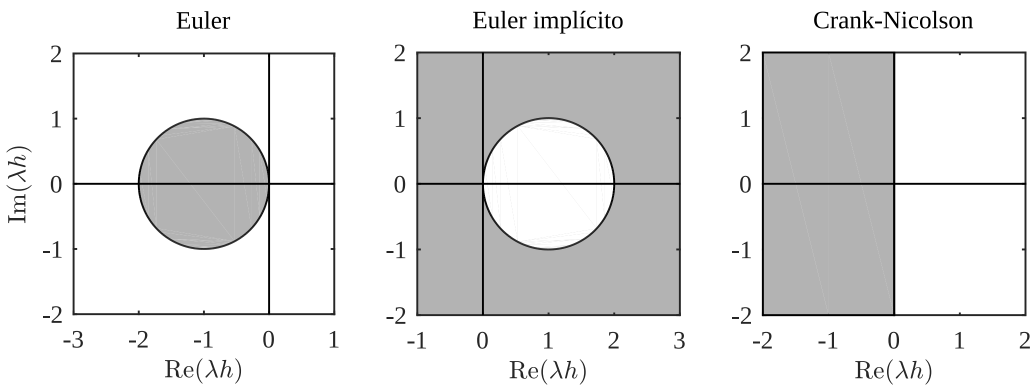
1. (2.0 + 2.5 + 2.5 val.) Considere o seguinte sistema de equações diferenciais:

$$\begin{cases} \dfrac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} = -y, \\ \dfrac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}t} = ax - 2y, \end{cases}$$

onde a é uma constante.

a) Determine os valores próprios associados ao sistema.

b) Na figura seguinte, estão representadas (a cinzento) as regiões de estabilidade de três métodos numéricos usados para resolver problemas de valor inicial. As regiões de estabilidade do método de Euler e do método de Euler implícito são dadas por $(h\lambda_\mathrm{r} + 1)^2 + h^2\lambda_\mathrm{i}^2 \leq 1$ e $(h\lambda_\mathrm{r} - 1)^2 + h^2\lambda_\mathrm{i}^2 \geq 1$, respetivamente.



Para cada um dos seguintes casos:

i) $a = 2$,

ii) $a = 3/4$,

indique quais dos métodos apresentados na figura apresentam estabilidade numérica quando aplicados a este sistema. Nos casos afirmativos, diga para que valores de h a estabilidade se verifica (escreva as condições de estabilidade na sua forma mais simples).

2. (2.0 + 2.5 + 2.5 val.) Considere o seguinte problema de valores próprios ξ, definido num domínio $[a, b]$:

$$\frac{\mathrm{d}^2y}{\mathrm{d}x^2} + xy = \xi x^2 y \quad y(a) = 0, \quad y(b) = 0\,.$$

O domínio é discretizado num conjunto de N pontos com uma separação constante h entre pontos consecutivos: $x_1(= a), x_2, \ldots, x_k, \ldots, x_{N-1}, x_N(= b)$. Como habitual, usando diferenças finitas, o problema pode ser representado por $AY = \lambda Y$, onde λ é um valor próprio, Y é um vetor (próprio) com componentes $y_2, y_3, \ldots, y_k, \ldots, y_{N-2}, y_{N-1}$ e A é uma matriz quadrada.

a) Deduza a expressão para a aproximação da segunda derivada por diferenças finitas centradas e prove que é uma aproximação de 2ª ordem.

b) Usando o resultado da alínea anterior, aproxime a equação diferencial por um sistema de equações algébricas e escreva (parcialmente) $AY = \lambda Y$. Só tem que determinar e representar explicitamente as 3 primeiras e as 2 últimas linhas da matriz A.

c) Descreva a estrutura do programa MATLAB que usaria para resolver este problema, explicando como são obtidos os valores próprios ξ.

3. (2.0 + 2.5 + 2.5 val.)

a) Suponha que escreveu com sucesso um programa de *shooting* que faz uso do método de Euler. É sempre possível reescrever o programa usando um dos métodos de Runge–Kutta de passo fixo que aprendeu? Discuta as vantagens e desvantagens de mudar para o método de Runge–Kutta.

b) 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. Quais são as vantagens do método de passo adaptativo e quando é que elas se revelam importantes?

c) Descreva uma possível maneira de ir avaliando se o passo deve ser aumentado ou diminuído num método de Runge–Kutta de passo adaptativo.

4. (2.5 + 1.0 val.) O ponto de partida para a aplicação de um método de relaxação à resolução de uma equação de Laplace está representado parcialmente na seguinte tabela:

3.0	3.0	3.0	3.0	$\cdots$
3.0	1.0	1.0	1.0	$\cdots$
3.0	1.0	1.0	1.0	$\cdots$
3.0	1.0	1.0	1.0	$\cdots$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\ddots$

Determine quais são os valores de $\phi(2, 2)$ e de $\phi(2, 3)$ após a primeira iteração quando se usa

a) O método de Jacobi.

b) O método de Gauss–Seidel.

c) O método de sobrerelaxação sucessiva com $\alpha = 3/2$.

Nota: não tem concluir os cálculos para $\phi(2, 3)$. Pode deixar a resposta numa forma que permitiria obter imediatamente o seu valor numérico com uma calculadora.