Universidade de Aveiro
Departamento de Física

2º Teste Teórico de Avaliação Discreta

Física Computacional — 2018/2019

21 de junho de 2019

Duração: 1h30

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

1.[7.0 v.] Num domínio quadrado, com condições fronteira de Dirichlet, a variável $V(x, y)$ é a solução da equação de Poisson

$$\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial y^2} = f(x, y).$$

a)[1.6 v.] Usando a aproximação de diferenças finitas centradas de segunda ordem para a segunda derivada,

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

mostre que discretizando o domínio de integração com o mesmo intervalo h segundo as direções x e y se obtém, para os pontos interiores, as seguintes equações algébricas:

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

Nas alíneas seguintes, considere que $f(x, y) = 0$ e que após a discretização, o problema fica descrito pela seguinte tabela

8.0	8.0	6.0	4.0
8.0	$V(2,2)$	$V(2,3)$	4.0
8.0	$V(3,2)$	$V(3,3)$	4.0
8.0	8.0	6.0	4.0

Partindo de estimativas iniciais nulas para as 4 incógnitas, calcule os valores intermédios de $V(2, 2)$ e $V(2, 3)$ após a primeira iteração do

b)[1.8 v.] método de Jacobi;

c)[1.8 v.] método de Gauss–Seidel;

d)[1.8 v.] método de sobrerelaxação sucessiva com $\alpha = 3/2$.

2.[6.0 v.] Considere agora um problema descrito pela mesma tabela do problema anterior, mas com $f(2,2) = f(3,2) = 4$ e $f(2,3) = f(3,3) = 2$. Usou-se $h = 1$.

a)[2.2 v.] Partindo de estimativas iniciais nulas para as 4 incógnitas, calcule os valores intermédios de $V(2,2)$ e $V(2,3)$ após a primeira iteração do método de Jacobi.

b)[2.2 v.] Identificando claramente a sequência das quatro incógnitas, escreva a matriz $\boldsymbol{A}$ e o vetor $\boldsymbol{b}$ que permitiriam obter a solução do problema usando `A\b` no MATLAB.

c)[1.6 v.] Explique porque, ao realizar os trabalhos práticos, usou matrizes esparsas quando resolveu problemas descritos pela equação de Poisson usando o método direto. Ao usar o MATLAB para resolver o sistema de equações da alínea anterior, justificar-se-ia usar matrizes esparsas?

3.[7.0 v.] Considere o integral

$$I = \int_{a_1}^{b_1} \mathrm{d}x_1 \int_{a_2}^{b_2} \mathrm{d}x_2 \cdots \int_{a_d}^{b_d} \mathrm{d}x_d \; f(x_1, x_2, \dots, x_d)\,.$$

a)[2.3 v.] Pretende-se escrever um programa para determinar uma estimativa numérica do integral, usando o método de Monte Carlo. Assuma que os valores de N, de d e dos limites $\{a_i\}$ e $\{b_i\}$ do domínio já foram declarados e que foi definida a função `fun` que aceita como entrada d números reais e que tem como saída os valores da função f. Tem disponível uma função `rand(P,Q)` cuja saída é uma matriz de `P` linhas e `Q` colunas de números reais pseudo-aleatórios uniformemente distribuídos entre 0 e 1. Usando pseudo-código, escreva o resto do programa.

b)[1.7 v.] Sabendo que o erro do método é dado

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

e que `std` é a função do MATLAB para o cálculo do desvio padrão, escreva as linhas de código que lhe permitiriam obter uma estimativa do erro estatístico (incerteza) associado ao resultado.

c)[1.5 v.] Em que condições é que o método de Monte Carlo se tornaria mais vantajoso que os métodos tradicionais de quadratura para o cálculo numérico deste integral? Explique porquê.

d)[1.5 v.] Explique sucintamente o conceito de amostragem por importância (não tem que usar equações).