Exame Teórico Final

Física Computacional — 2018/2019

21 de junho de 2019

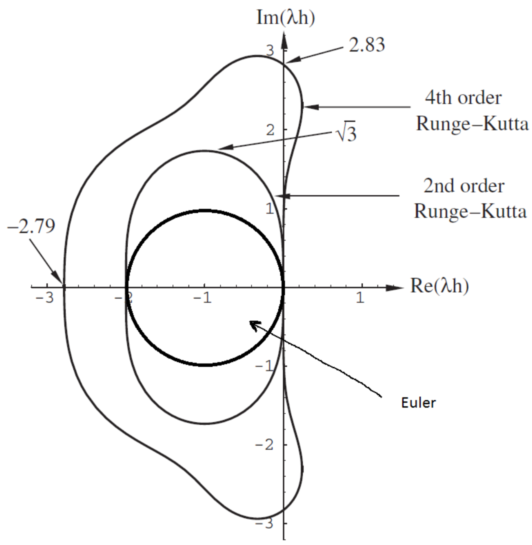
Duração: 2h30

Universidade de Aveiro
Departamento de Física

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

1.[5.5 v.] Considere um problema de valores iniciais descrito pelo seguinte sistema de equações :

$$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} = -\frac{5}{2}y,$$
$$\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}t} = \mathrm{i}x + (-2 - 2\mathrm{i})y$$



a)[1.3 v.] Determine os valores próprios associados ao sistema. Note que $(1-\mathrm{i})^2 = -2\mathrm{i}$.

b)[1.2 v.] Se resolveu corretamente a alínea a), obteve $\lambda_1 = -1/2 - 3\mathrm{i}/2$ e $\lambda_2 = -3/2 - \mathrm{i}/2$. Discuta a estabilidade de cada um dos métodos da figura quando aplicado a este problema.

c)[1.2 v.] Qual é o valor máximo aproximado de h para o qual o método de Runge–Kutta de 4ª ordem é estável?

d)[1.8 v.] 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`).

2.[4.5 v.] Considere a seguinte equação diferencial:

$$\frac{\mathrm{d}^2y(x)}{\mathrm{d}x^2} + ax\frac{\mathrm{d}y(x)}{\mathrm{d}x} = bx,$$

onde a e b são constantes. As condições fronteira são

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

a)[1.3 v.] Deduza as expressões para as aproximações da primeira e da segunda derivada por diferenças finitas centradas, mostrando qual é a ordem de cada uma delas.

b)[1.7 v.] Usando os resultados da alínea anterior, aproxime a equação diferencial por um sistema de equações algébricas, $\boldsymbol{Ay} = \boldsymbol{b}$. Identifique os elementos de $\boldsymbol{y}$. Escreva a primeira e a última linha de $\boldsymbol{A}$. Escreva o primeiro e o último elemento de $\boldsymbol{b}$. Escreva a linha de $\boldsymbol{A}$ e o elemento de $\boldsymbol{b}$ de índice n genérico (excluindo os valores extremos de n).

c)[1.5 v.] Indique um método alternativo para resolver este problema, descrevendo todos os passos.

3.[5.0 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)[1.1 v.] Usando a aproximação de diferenças finitas centradas de segunda ordem para a segunda derivada, 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:

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

Após a discretização, o problema fica descrito pela seguinte tabela. Considere $f(2, 2) = f(3, 2) = 4$ e $f(2, 3) = f(3, 3) = 2$ e $h = 1$.

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

b)[1.4 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.

c)[1.4 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.

d)[1.1 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?

4.[5.0 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)[1.6 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)[1.2 v.] Sabendo que o erro do método é dado por

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

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)[1.1 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)[1.1 v.] Explique sucintamente o conceito de amostragem por importância (não tem que usar equações).