Universidade de Aveiro
Departamento de Física

Exame Teórico de Recurso

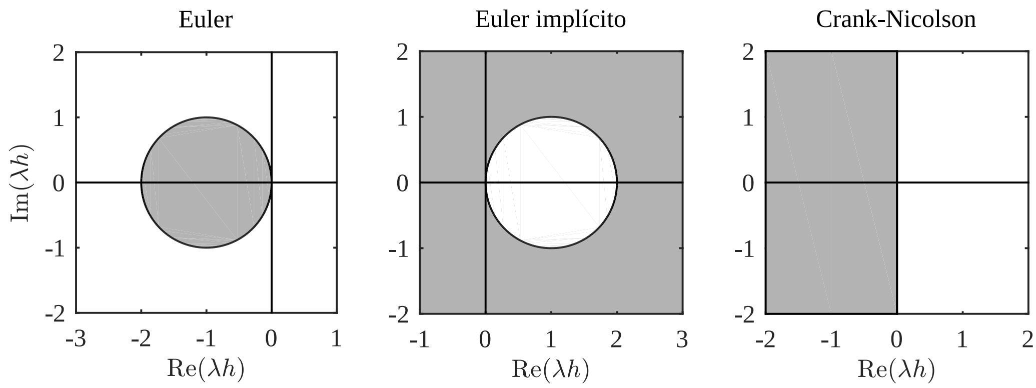
Física Computacional — 2016/2017

11 de julho de 2017

Duração: 2h30

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

1. (2.5 + 1.5 val.) Na figura, estão representadas (a cinzento) as regiões de estabilidade de três métodos numéricos usados para resolver problemas de valor inicial.



a) Discuta a estabilidade numérica dos métodos da figura quando aplicados a um dado problema de valor inicial que tem um valor próprio $\lambda = -10 + 5\mathrm{i}$. Se algum dos métodos for condicionalmente estável, determine o valor máximo de h que pode ser utilizado.

b) Comparando os métodos de Euler implícito e de Crank–Nicolson, verifica-se que um deles não tem nenhuma vantagem em termos de região de estabilidade e é mais complexo de programar, mas é, no entanto, muitas vezes preferido em relação ao outro. Explique pormenorizadamente porquê.

2. (2.5 + 1.5 val.) Considere o seguinte sistema de equações:

$$\begin{cases} \dfrac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} = -y - z\,, \\ \dfrac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}t} = x + 0.2y\,, \\ \dfrac{\mathrm{d}z}{\mathrm{d}t} = 0.2 + x\,. \end{cases}$$

a) Escreva o pseudocódigo de um programa que resolva um problema de valor inicial deste sistema, usando o método de Euler implícito. Se o desejar, pode usar a rotina `linsolve` do MATLAB.

b) O sistema é parecido com as equações de Rössler, mas não pode apresentar soluções caóticas. Explique porquê. Explique também porque é que um programa do tipo do da alínea anterior que use a rotina `linsolve` não pode ser aplicado às equações de Rössler. Para responder a esta questão não é necessário saber a forma exata das equações.

3. (4 val.) Considere os seguintes problemas e diga qual o método numérico que usaria para os resolver. Note que em alguns dos casos pode aplicar-se mais que um método. Indique apenas um deles e dê uma justificação sucinta.

a) $\dfrac{\partial T}{\partial t} = \alpha \dfrac{\partial^2 T}{\partial x^2} - (x^2 - 4x + 2)\mathrm{e}^{-x}, \quad 0 < x < L, \quad T(x,0) = 0, \quad T(0,t) = 0, \quad T(L,t) = L^2\mathrm{e}^{-L}.$

b) $\dfrac{d^2 y}{dx^2} - xy = 0, \quad y(0) = 1, \quad y(100) = 0.$

c) $\dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \dfrac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 1.25\exp(x + y/2), \quad a_x < x < b_x, \quad a_y < y < b_y,$

$u(a_x, y) = u(b_x, y) = u(x, a_y) = u(x, b_y) = 0.$

d) $\dfrac{dC_1}{dt} = -k_1 C_1 + k_2 C_2 C_3,$

$\dfrac{dC_2}{dt} = k_1 C_1 - k_2 C_2 C_3 - 2k_3 C_2^2,$

$\dfrac{dC_3}{dt} = 2k_3 C_2^2,$

$C_1(0) = 0.9, \quad C_2(0) = 0.1, \quad C_3(0) = 0.$

e) $i\dfrac{\partial q}{\partial z} - \tfrac{1}{2}\beta_2 \dfrac{\partial^2 q}{\partial t^2} + \gamma |q|^2 q = 0, \quad q(0,t) = \exp(-t^2/4), \quad q(z,-10) = q(z,10) = 0.$

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 na seguinte tabela:

1.0	2.0	3.0	4.0
0.0	0.0	0.0	6.0
1.0	3.0	5.0	7.0

a) Após o primeiro passo de um dado método (da esquerda para a direita), a nova tabela é

1.0	2.0	3.0	4.0
0.0	2.0	6.4	6.0
1.0	3.0	5.0	7.0

Mostre que o método usado foi o de sobre-relaxação sucessiva e determine o valor de α.

b) Explique em que situações e com que objetivos se usa valores de α menores ou maiores que 1 na aplicação do método de sub- ou sobre-relaxação.

5. (1.5 + 1.0 + 2.0 val.) Considere o seguinte problema de difusão a uma dimensão:

$$\frac{\partial \rho(x,t)}{\partial t} = D\frac{\partial^2 \rho(x,t)}{\partial x^2},$$

com $D = 1$. Na discretização do problema, usa-se $\Delta t = 1$ e $\Delta x = 1$.

a) Deduza a aproximação de diferenças finitas centradas para a segunda derivada e mostre qual é a sua ordem.

b) Mostre que a aplicação do método de Crank–Nicolson permite obter

$$\rho(i,n+1) = \rho(i,n) + \frac{D\Delta t}{2(\Delta x)^2}\Big[\rho(i-1,n+1) - 2\rho(i,n+1) + \rho(i+1,n+1) + \rho(i-1,n) - 2\rho(i,n) + \rho(i+1,n)\Big]$$

c) Após o primeiro passo de aplicação do método, a tabela tem a seguinte forma

0	0	0	…
1	1/2		
1	1		
1	3/2		
2	2	2	…

Quais são as condições iniciais e as condições fronteira? Mostre que o primeiro passo foi bem calculado.