Universidade de Aveiro
Departamento de Física

1º Teste Teórico de Avaliação Discreta

Física Computacional — 2016/2017

19 de abril de 2017

Duração: 1h30

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

1. (2.0 + 2.5 + 2.5 val.) Considere um decaimento radioativo em dois passos:

$$A \xrightarrow{K_1} B \xrightarrow{K_2} C\,.$$

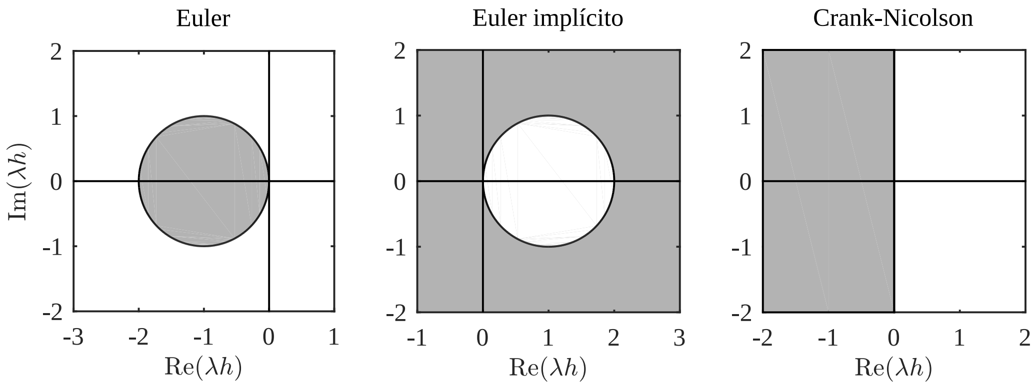
O sistema de equações diferenciais que descreve a evolução com o tempo das concentrações a, b e c das espécies é o seguinte

$$\begin{cases} \dfrac{\mathrm{d}a}{\mathrm{d}t} = -K_1 a, \\ \dfrac{\mathrm{d}b}{\mathrm{d}t} = K_1 a - K_2 b, \\ \dfrac{\mathrm{d}c}{\mathrm{d}t} = K_2 b, \end{cases}$$

onde, obviamente, as constantes K_1 e K_2 são reais e positivas. Considere que $K_1 > K_2$.

a) Determine os valores próprios associados ao sistema.

b) Na figura, estão representadas (a cinzento) as regiões de estabilidade de três métodos numéricos usados para resolver problemas de valor inicial.



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. Se não conseguiu resolver a alínea anterior, assuma que todos os valores próprios são reais e negativos e que $\lambda_1 < \lambda_2 < \lambda_3$.

c) Escreva o ciclo das iterações usadas para integrar a equação pelo método de Euler implícito. Pode usar matrizes e a rotina `linsolve` do MATLAB, ou resolver o sistema que resulta da aplicação do método e escrever as expressões que determinam explicitamente os novos valores das concentrações em cada iteração.

2. (2.0 + 2.0 + 2.0 val.)

a) Explique os conceitos de erro global e de erro local aplicados a métodos numéricos usados para resolver problemas de valor inicial descritos por equações diferenciais ordinárias (ODE). Qual é a relação numérica entre as ordens dos dois tipos de erro quando o método é estável?

b) Descreva o procedimento associado a cada iteração de um método de Runge–Kutta de quarta ordem e de passo fixo aplicado a uma ODE de primeira ordem, $y'(t) = f(t, y)$.

c) 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?

3. (2.0 + 2.5 + 2.5 val.) Considere o seguinte problema de valores próprios, definido num domínio $[a, b]$:

$$\begin{cases} \dfrac{\mathrm{d}^4 y}{\mathrm{d}x^4} = \omega^4 y, \\ y(a) = 0, \quad \dfrac{\mathrm{d}^2 y}{\mathrm{d}x^2}(a) = 0, \quad y(b) = 0, \quad \dfrac{\mathrm{d}^2 y}{\mathrm{d}x^2}(b) = 0. \end{cases}$$

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) Usando a aproximação de diferenças finitas centradas,

$$\frac{\mathrm{d}^4 y}{\mathrm{d}x^4} = \frac{y(x-2h) - 4y(x-h) + 6y(x) - 4y(x+h) + y(x+2h)}{h^4} + O(h^2)\,,$$

mostre que a equação algébrica para um ponto de índice k, suficientemente longe das fronteiras, é

$$y_{k-2} - 4y_{k-1} + 6y_k - 4y_{k+1} + y_{k+2} = \lambda y_k\,.$$

Escreva λ em função de ω e h.

b) Deduza a expressão para a aproximação da segunda derivada por diferenças finitas centradas e prove que é uma aproximação de 2ª ordem. Mostre que a aplicação do seu resultado à condição fronteira $y''(a) = 0$ leva a que se chegue a $y_0 = -y_2$. Note que y_0 é um ponto fictício.

c) Escreva (parcialmente) $AY = \lambda Y$. Só tem que determinar e representar explicitamente as quatro primeiras linhas da matriz A.