Física Computacional

Resolução dos Exercícios 1 a 3 do
1º Teste Teórico de Avaliação Discreta de 2017/2018

1.

a) O sistema linear de equações diferenciais pode ser escrito na forma matricial

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \boldsymbol{A}\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}, \quad \text{com } \boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ a & -2 \end{pmatrix}.$$

Vamos determinar os valores próprios λ da matriz $\boldsymbol{A}$, resolvendo a equação característica $|A - \lambda I| = 0$:

$$\begin{vmatrix} 0-\lambda & -1 \\ a & -2-\lambda \end{vmatrix} = 0$$

$$-\lambda(-2-\lambda) + a = 0$$

$$\lambda^2 + 2\lambda + a = 0$$

$$\lambda = \frac{-2 \pm \sqrt{4-4a}}{2}$$

$$\lambda = -1 \pm \sqrt{1-a}.$$

b)

i) Quando $a = 2$, os valores próprios são $\lambda_1 = -1 + \mathrm{i}$ e $\lambda_2 = -1 - \mathrm{i}$. Para cada um dos métodos ser estável, ambos os pontos, P_1, de coordenadas $(-h, +h)$, e P_2, de coordenadas $(-h, -h)$, têm que estar na zona de estabilidade (a sombreado). As regiões de estabilidade dos métodos de Euler Implícito e de Crank-Nicolson contêm todos os pontos de abcissa negativa, logo estes dois métodos são incondicionalmente estáveis para $a = 2$. É fácil de ver que o método de Euler vai ser condicionalmente estável: se h for muito pequeno, os pontos estarão dentro da região de estabilidade, se h for muito grande, estarão fora dela. Temos que fazer as contas:

$$(-h+1)^2 + h^2(\pm 1)^2 \le 1$$

$$(-h+1)^2 + h^2 \le 1.$$

Simpaticamente, ambos os valores próprios dão origem à mesma condição.

$$(-h+1)^2 + h^2 \le 1$$

$$h^2 - 2h + 1 + h^2 \le 1$$

$$2h^2 - 2h \le 0$$

$$h(h-1) \le 0.$$

Como h tem que ser positivo, fica

$$\begin{aligned} h - 1 &\leq 0 \\ h &\leq 1. \end{aligned}$$

O método de Euler é condicionalmente estável para $a = 2$, com a condição $h \leq 1$.

ii) Quando $a = 3/4$, os valores próprios são puramente reais: $\lambda_1 = -1/2$ e $\lambda_2 = -3/2$. Para cada um dos métodos ser estável, ambos os pontos P_1, de coordenadas $(-h/2, 0)$, e P_2, de coordenadas $(-3h/2, 0)$, têm que estar na zona de estabilidade (a sombreado). As regiões de estabilidade dos métodos de Euler Implícito e de Crank-Nicolson contêm todos os pontos de abcissa negativa, logo estes dois métodos são incondicionalmente estáveis para $a = 2$. É fácil de ver que o método de Euler vai ser condicionalmente estável: se h for muito pequeno, os pontos estarão dentro da região de estabilidade (neste caso, o segmento do eixo horizontal entre -2 e 0), se h for muito grande, estarão fora dela. As contas são muito fáceis:

$$\begin{cases} -\dfrac{1}{2}h \geq -2 \\ -\dfrac{3}{2}h \geq -2 \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} h \leq 4 \\ h \leq \dfrac{4}{3} \end{cases}.$$

Se a segunda condição for satisfeita, a primeira também o será. Assim, o método de Euler é condicionalmente estável para $a = 3/4$, com a condição $h \leq 4/3$.

2.

a) Partimos das seguintes expansões em série de Taylor:

$$\begin{aligned} y(x+h) &= y(x) + y^{(1)}(x) \cdot h + \frac{1}{2!}y^{(2)}(x) \cdot h^2 + \frac{1}{3!}y^{(3)}(x) \cdot h^3 + \mathcal{O}(h^4) \\ y(x-h) &= y(x) - y^{(1)}(x) \cdot h + \frac{1}{2!}y^{(2)}(x) \cdot h^2 - \frac{1}{3!}y^{(3)}(x) \cdot h^3 + \mathcal{O}(h^4) \end{aligned}$$

Vamos somar as duas expansões para obter a aproximação de diferenças centradas para a segunda derivada:

$$\begin{aligned} y(x+h) + y(x-h) &= 2y(x) + 0 + y^{(2)}(x) \cdot h^2 + 0 + \mathcal{O}(h^4) \\ y^{(2)}(x) \cdot h^2 &= y(x+h) + y(x-h) - 2y(x) + \mathcal{O}(h^4) \\ y^{(2)}(x) &= \frac{y(x+h) - 2y(x) + y(x-h)}{h^2} + \frac{\mathcal{O}(h^4)}{h^2} \\ y^{(2)}(x) &= \frac{y(x+h) - 2y(x) + y(x-h)}{h^2} + \mathcal{O}(h^2). \end{aligned}$$

b)

$$\frac{y_{k+1} - 2y_k + y_{k-1}}{h^2} + x_k y_k = \xi x_k^2 y_k.$$

O nosso objetivo é que no membro direito apareça apenas o termo ξy_k, eventualmente multiplicado por uma constante.

$$\frac{1}{h^2} y_{k-1} + \frac{-2 + h^2 x_k}{h^2} y_k + \frac{1}{h^2} y_{k+1} = \xi x_k^2 y_k$$
$$\frac{1}{h^2 x_k^2} y_{k-1} + \frac{-2 + h^2 x_k}{h^2 x_k^2} y_k + \frac{1}{h^2 x_k^2} y_{k+1} = \xi y_k. \tag{1}$$

No Matlab, depois de escrita a matriz, os n primeiros valores próprios são calculados a partir de `eigs(A,n,'sm')`. Cada linha da matriz `A` tem `N-2` elementos: o primeiro elemento é o que vai ser multiplicado por `y(2)`, o segundo é o que vai ser multiplicado por `y(3)` e assim sucessivamente até ao último elemento, que é o que vai ser multiplicado por `y(N-1)`. A primeira linha corresponde a `k=2`, a segunda a `k=3` e assim sucessivamente, até à última linha, que corresponde a `k=N-1`. A linha correspondente a um dado `k` afastado dos extremos é

```
[0 0 ⋯ 1/(h^2*x(k)^2) (-2+h^2*x(k))/(h^2*x(k)^2) 1/(h^2*x(k)^2) ⋯ 0 0]
```

Substituindo $k = 2$ na equação (1), e levando em conta que $y_1 = 0$, ficamos com

$$\frac{1}{h^2 x_2^2} \cdot 0 + \frac{-2 + h^2 x_2}{h^2 x_2^2} y_2 + \frac{1}{h^2 x_2^2} y_3 = \xi y_2$$
$$\frac{-2 + h^2 x_2}{h^2 x_2^2} y_2 + \frac{1}{h^2 x_2^2} y_3 = \xi y_2.$$

Isto permite-nos escrever a primeira linha da matriz:

```
[(-2+h^2*x(2))/(h^2*x(2)^2)  1/(h^2*x(2)^2)  ⋯  0  0]
```

Substituindo $k = 3$ na equação (1), ficamos com

$$\frac{1}{h^2 x_3^2} y_2 + \frac{-2 + h^2 x_3}{h^2 x_3^2} y_3 + \frac{1}{h^2 x_3^2} y_4 = \xi y_3.$$

Isto permite-nos escrever a segunda linha da matriz:

```
[1/(h^2*x(3)^2)  (-2+h^2*x(3))/(h^2*x(3)^2)  1/(h^2*x(3)^2)  ⋯  0  0]
```

Seguindo um procedimento semelhante, é bastante fácil escrever a terceira linha da matriz ($k = 4$):

```
[0  1/(h^2*x(4)^2)  (-2+h^2*x(4))/(h^2*x(4)^2)  1/(h^2*x(4)^2)  ⋯  0  0]
```

A penúltima linha corresponde a $k = N - 2$:

```
[0 0  ⋯  1/(h^2*x(N-2)^2)  (-2+h^2*x(N-2))/(h^2*x(N-2)^2)  1/(h^2*x(N-2)^2)]
```

Substituindo $k = N - 1$ na equação (1), e levando em conta que $y_N = 0$, ficamos com

$$\frac{1}{h^2 x_{N-1}^2} y_{N-2} + \frac{-2 + h^2 x_{N-1}}{h^2 x_{N-1}^2} y_{N-1} + \frac{1}{h^2 x_{N-1}^2} \cdot 0 = \xi y_{N-1}$$
$$\frac{1}{h^2 x_{N-1}^2} y_{N-2} + \frac{-2 + h^2 x_{N-1}}{h^2 x_{N-1}^2} y_{N-1} = \xi y_{N-1}.$$

Isto permite-nos escrever a última linha da matriz:

```
[0 0 ··· 1/(h^2*x(N-1)^2)  (-2+h^2*x(N-1))/(h^2*x(N-1)^2)]
```

c) Muito resumidamente, a estrutura de um programa que calculasse, por exemplo, os 3 primeiros valores próprios, seria a seguinte:

- Escolhe-se um `h`, a que corresponde um dado `N`.
- Escreve-se o vetor `x`.
- Escreve-se a matriz `A`.
- Neste caso, o output de `eigs(A,3,'sm')` dá-nos diretamente os 3 primeiros valores próprios de xi

3.

a) O método de Runge–Kutta, como o método de Euler, permite resolver problemas de valor inicial descritos por ODE, logo é sempre possível reescrever o programa usando um método de Runge–Kutta. Para responder a esta alínea não era necessário discutir estabilidade, mas sabe que a região de estabilidade dos método de Runge–Kutta que estudou inclui completamente a região de estabilidade do método de Euler: se o método de Euler é estável, o de Runge–Kutta também é. Os métodos de Runge–Kutta são de maior ordem que o de Euler, por isso, para o mesmo erro, vai ser, em geral, necessário um número inferior de passos. O inconveniente é a complexidade acrescida do programa.

b) Consulte o slide 16 da Apresentação 3.

c) Nesta alínea podia, por exemplo, referir um dos dois procedimentos descritos no slide 17 da Apresentação 3.