Ciências ULisboa

Modelação Numérica 2023, Exame 1 (2 de Junho)

1. Admita que pretende calcular a transformada discreta de Fourier de uma série temporal $\mathbf{x}$ com $\boldsymbol{N} = 100$ elementos, com período de amostragem $\Delta t = 0.5\ s$.
   (a) Enuncie o teorema da amostragem, mostrando as suas consequências no cálculo pretendido. Que frequências máximas e mínimas se poderão calcular com esses dados?

   Uma função contínua de banda limitada, i.e. que inclua oscilações de frequência inferior um certo valor, pode ser totalmente representada por uma amostra regularmente espaçada com pelo menos 2 amostras pelo ciclo de mais alta frequência (menor período). Assim a frequência máxima a representar, a frequência de Nyquist será $f_{Nyq} = \frac{1}{2\Delta t} = 1Hz$. A frequência mínima depende do comprimento da série e será $\Delta f = \frac{2f_{Nyq}}{N} = \frac{2}{100} = 0.02\ Hz$ (N par).

   (b) Escreva um fragmento de código capaz de realizar o cálculo proposto e de o representar graficamente, num número conveniente de gráficos, incluindo o cálculo das escalas adequadas nos diferentes eixos.

```
N=len(x)
dt=0.5; fNyq=(1/(2*dt))
t=np.arange(0,N*dt,dt)
X=np.fft.fft(x)
fig,ax=plt.subplots(nrows=3)
ax[0].plot(t,x);ax[0].set_xlabel('t(s)')
df=2*fNyq/N # df=fNyq/(N//2)
freq=np.arange(0,fNyq+df,df)
ax[1].plot(freq,np.real(X[0:N//2+1])/(N//2))
ax[1].set_xlabel('f(Hz)')
ax[2].plot(freq,np.imag(X[0:N//2+1])/(N//2))
ax[2].set_xlabel('f(Hz)')
fig.tight_layout()
```

   Nota: em vez de real e imag, podia ser amplitude e fase.

   (c) Se calcular a transformada discreta inversa do resultado calculado em (b) que resultado esperaria? Será esse resultado dependente da natureza da série original?
   Recuperaria, sempre, a série original a menos do erro de arredondamento.

2. Admita que dispõe de um algoritmo genérico de otimização na forma **`V=optimize(cost,vmin,vmax,N)`** em que **`vmin`** e **`vmax`** representam os limites (n-dimensionais) de busca, N um critério de paragem do método, V a solução (D-dimensional) ótima e **`cost(V)`** é a função de custo. Admita que o seu problema consiste no cálculo dos coeficientes de $y = ke^x + ax^2 + bx + c$, dados $\vec{x} = [x_0, \dots, x_{N-1}], \vec{y} = [y_0, \dots, y_{N-1}]$. Admita que os D=4 parâmetros (k, a, b, c) se encontram no intervalo [0,100].

(a) Escreva a função de custo como uma função PYTHON.

```
def custo(k,a,b,c,xO,yO):
    yE=k*np.exp(xO)+a*xO**2+b*xO+c
    err2=np.mean((yE-yO)**2)
    return err2
```

(b) Escreva um fragmento de código que calcule a série sintética y, para 1000 valores de x regularmente espaçados no intervalo [0,10], dados $k = 5.8, a = 12, b = 8, c = 76.1$

```
def sintetic(k=5.8,a=12,b=8,c=76.1,N=1000):
    xO=np.linespace(0,10,N)
    yO= k*np.exp(xO)+a*xO**2+b*xO+c
   return yO
```

(c) Escreva um fragmento de código para calcular $[k, a, b, c]$ por otimização.

```
N=...
vmin=np.array([0,0,0,0]);vmax=np.array([100,100,100,100])
V=optimize(cost,vmin,vmax,N)
k,a,b,c=V
```

(d) Indique como poderá aferir a qualidade do cálculo efetuado em (c).

Poderia representar a função de custo nos 6 planos que passam na solução encontrada. O valor final do custo poderia ser aferido. Podia repetir a otimização com diferentes estados iniciais e analisar o histograma. Podia repetir a otimização com diferentes valores do critério de paragem (N).

3. Considere a equação de advecção-difusão:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -U\frac{\partial C}{\partial t} + K\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$$

(a) Discretize essa equação usando diferenças avançadas no tempo e centradas no espaço, num método explícito.

$$\frac{C_k^{n+1} - C_k^n}{\Delta t} = -U\frac{C_{k+1}^n - C_{k-1}^n}{2\Delta x} + K\frac{C_{k-1}^n + C_{k+1}^n 2C_k^n}{\Delta x^2}$$

(b) Qual a precisão do método proposto?

Primeira ordem no tempo, segunda ordem no espaço.

(c) Discuta sucintamente a estabilidade do método e a sua dependência de U e K.

Se K=0 o método é absolutamente instável. Com difusão (K>0) o método poderá ser estável se o número de Courant $(\boldsymbol{U\Delta t/\Delta x}) \leq \mathbf{1}$