Folha de Revisões 3

Problema FR3.1 Dependência com M da convergência dos métodos de relaxação

Neste exercício, vamos estudar o seguinte problema de condução de calor num domínio espacial quadrado a 2 dimensões:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + q(x,y),$$

onde $q(x,y) = 2(2 - x^2 - y^2)$ representa uma fonte de calor não homogénea. O estado de equilíbrio pode ser encontrado ao impor $\partial T/\partial t = 0$, o que transforma a equação acima numa equação de Poisson. Considere que o domínio espacial se encontra entre $-1 \leq x \leq 1$ e $-1 \leq y \leq 1$, nas fronteiras do qual T é igual a zero. Discretize o domínio de tal forma que o número de pontos segundo a direção x é igual ao número de pontos segundo a direção y: $M_x = M_y = M$. Use como estimativa inicial $T(x,y) = 0$ para todos os pontos do domínio e use como critério de paragem

$$\frac{\sqrt{\sum_{i,j}(V^{(k)}(i,j) - V^{(k-1)}(i,j))^2}}{\sqrt{\sum_{i,j}(V^{(k)}(i,j))^2}} < \delta,$$

com $\delta = 10^{-7}$.

a) Aplique o método de relaxação de Jacobi para os seguintes valores de M: `[35 49 63 81 101 123]`. Use a função `linspace` do MATLAB para escrever os vetores `x` e `y`. Determine o número de iterações necessárias para atingir o mesmo nível de convergência. Represente graficamente o logaritmo desse número em função do logaritmo de M. Determine o declive da reta média e discuta os resultados.

b) Aplique o método de relaxação de Gauss–Seidel para os mesmos valores de M da alínea anterior. Determine o número de iterações necessárias para atingir o mesmo nível de convergência e verifique se, para cada M, ele é aproximadamente metade do valor obtido na alínea anterior. Represente graficamente o logaritmo desse número em função do logaritmo de M. Determine o declive da reta média e discuta os resultados.

c) Aplique o método de relaxação de sobre-relaxação sucessiva (SRS) para os valores de M obtidos no MATLAB através de `71:20:171`, usando

$$\alpha = 2 - \frac{2\pi}{M}.$$

Determine o número de iterações necessárias para atingir o mesmo nível de convergência. Represente graficamente o logaritmo desse número em função do logaritmo de M. Determine o declive da reta média e discuta os resultados

d) Repita a alínea anterior, mas agora usando um valor de α mais próximo do que realmente minimiza o número de iterações. Para cada M, aplique o método SRS para os seguintes valores de α:

```
linspace(alfa_rec*0.96+0.08,alfa_rec*0.94+0.12,10)
```

onde `alfa_rec` é o valor de α usado na alínea anterior, determine o valor mínimo do número de iterações e use esse valor para o estudo da dependência com M da convergência do método.

Problema FR3.2 Oscilador harmónico quântico

Neste problema, vamos considerar uma partícula de massa reduzida igual a 1 sujeita a um potencial harmónico (a uma dimensão). A equação de Schrödinger independente do tempo é

$$-\frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}^2\psi(x)}{\mathrm{d}x^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x)\,,$$

e agora temos

$$V(x) = \frac{1}{2}\omega^2 x^2.$$

Considere $\omega = 2$. Como $V(x)$ vai para $+\infty$ quando $|x| \to \infty$, as condições fronteira são

$$\lim_{x\to-\infty} \psi(x) = 0 \qquad \text{e} \qquad \lim_{x\to+\infty} \psi(x) = 0.$$

Os valores próprios da energia em unidades reduzidas são

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\omega, \qquad \text{com } n = 0, 1, 2, \ldots\,.$$

Para este problema físico, não é evidente como encontrar um intervalo de valores de x com que se possa começar. Pensando em termos de ordem de grandeza, podemos partir do caso em que a energia é $\omega/2$ e calcular o valor de x_{EV} tal que $V(\pm x_{\mathrm{EV}}) = E$. Vem que

$$x_{\mathrm{EV}} = \frac{1}{\sqrt{\omega}}.$$

Sugere-se então que comece com um intervalo

$$x \in \left[-5\Big/\sqrt{\omega},\ +5\Big/\sqrt{\omega}\right],$$

e que vá avaliando se é necessário alargá-lo.

a) Obtenha todos os valores próprios E_n até $n = 4$. Compare com os valores esperados.

b) Para o estado fundamental, calcule a probabilidade de encontrar a partícula numa região em que $E \leq V(x)$. Compare com o valor esperado, $1 - \mathrm{erf}(1)$.

Problema FR3.3: Métodos de Monte Carlo

O valor do seguinte integral,

$$I = \int_{-L/2}^{+L/2} \mathrm{d}x \int_{-L/2}^{+L/2} \mathrm{d}y \left(L - 2\max(|x|, |y|)\right),$$

no domínio quadrado de lado L, é o volume de uma pirâmide com uma base quadrada de lado L e uma altura também igual a L.

a) Considere $L = 2$ e use um método de Monte Carlo, com $N = 50000$, para obter uma estimativa numérica do integral I. Compare com o valor exato, $I_{\text{exato}} = L^3/3$.

b) Verifique qual é a dependência do erro médio com o valor de N. Para o cálculo do erro, use $\left\langle (I_{\text{num}} - I_{\text{exato}})^2 \right\rangle^{1/2}$. Verifique se o erro é proporcional a $N^{-1/2}$ e dado aproximadamente por $A\sigma N^{-1/2}$, onde A é a área do domínio de integração e σ é o desvio padrão dos valores de $L - 2\max(|x|, |y|)$. Basta estimar σ uma vez, usando a função `std` do MATLAB.

c) O integral pode ser generalizado para o caso de uma hiperpirâmide no espaço d–dimensional:

$$I_d = \int_{-L/2}^{+L/2} \mathrm{d}x_1 \int_{-L/2}^{+L/2} \mathrm{d}x_2 \cdots \int_{-L/2}^{+L/2} \mathrm{d}x_{d-1} \left(L - 2\max(|x_1|, |x_2|, \ldots, |x_{d-1}|)\right).$$

A base desta pirâmide é um hipercubo de $d - 1$ dimensões e aresta L. A altura da hiperpirâmide é também igual a L. O valor exato do integral é $I_{d,\text{exato}} = L^d/d$. Escreva um programa de Monte Carlo que permita estimar o integral I_d para qualquer valor de d. Calcule uma estimativa para $L = 2$ e $d = 7$ e compare com o valor exato.