Universidade de Aveiro
Departamento de Física

2º Teste Teórico de Avaliação Discreta

Física Computacional — 2016/2017

23 de junho de 2017

Duração: 1h45

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

1. (2.0 + 3.5 + 1.5 val.)

a) Explique porque é que a integração numérica por métodos de Monte Carlo se torna mais vantajosa que os métodos numéricos tradicionais de quadratura quando o integral é múltiplo, com um número elevado de variáveis de integração.

b) Considere uma rede quadrada de n por n spins. A interação entre os spins é descrita pelo modelo de Ising: a energia (em unidades reduzidas) de uma dada configuração α do sistema é dada por uma soma sobre todos os pares de vizinhos próximos:

$$E_\alpha = -\sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j \,.$$

A magnetização de uma dada configuração é

$$M_\alpha = \sum_{i=1}^{n^2} S_i \,.$$

Se forem selecionadas L configurações com igual probabilidade, a estimativa de Monte Carlo da magnetização média será

$$\langle M \rangle_{\mathrm{MC}} = \frac{\sum_{\alpha=1}^{L} M_\alpha \, \mathrm{e}^{-E_\alpha/T}}{\sum_{\alpha=1}^{L} \mathrm{e}^{-E_\alpha/T}} \,,$$

onde M_α e E_α são a magnetização e a energia da configuração α. Escreva em pseudocódigo um programa para determinar a magnetização média por partícula do sistema a uma dada temperatura, usando configurações geradas com igual probabilidade. Pode assumir que está disponível uma função `randi(nmax,a,b)` que gera uma matriz de $a \times b$ números inteiros aleatórios uniformemente distribuídos entre 0 e $nmax$. Ignore completamente o problema das fronteiras do domínio. Ao contrário do algoritmo de Metropolis, não é necessário desprezar algumas configurações.

c) O algoritmo da alínea anterior é extremamente ineficiente. Explique o conceito de amostragem por importância.

2. (2.5 + 2.5 + 1.0 val.) Para os pontos interiores de um íman magnético em forma de anel cilíndrico, pode-se escrever a equação

$$\nabla^2 \Phi = 0\,.$$

Φ é um potencial magnético escalar a partir do qual se pode calcular o campo magnético.

a) Dada a simetria do problema, escrevendo o laplaciano em coordenadas esféricas, fica-se com:

$$\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho\frac{\partial\Phi(\rho,z)}{\partial\rho}\right) + \frac{\partial^2\Phi(\rho,z)}{\partial z^2} = 0\,.$$

Use aproximações de diferenças finitas centradas e, para simplificar, o mesmo espaçamento h nas discretizações segundo ρ e z. Mostre que para aplicar os métodos de Jacobi ou de Gauss–Seidel, se deve partir da seguinte relação:

$$\Phi_{i,j} = \frac{1}{4}\left[\left(1 - \frac{h}{2\rho_i}\right)\Phi_{i-1,j} + \left(1 + \frac{h}{2\rho_i}\right)\Phi_{i+1,j} + \Phi_{i,j-1} + \Phi_{i,j+1}\right]\,.$$

Note que a questão das condições fronteira exigiria um tratamento relativamente complexo.

b) Explique as diferenças entre os métodos de Jacobi, de Gauss–Seidel e de sob- ou sobre-relaxação sucessiva.

c) Dada a maneira como o problema foi discretizado, explique, justificando, se seria obrigatório o uso de um método de relaxação.

Aproximações de diferenças centradas:

$$y'(x) = \frac{y(x+h) - y(x-h)}{2h} + O(h^2)$$
$$y''(x) = \frac{y(x+h) - 2y(x) + y(x-h)}{h^2} + O(h^2)$$

3. (3.5 + 1.0 + 2.5 val.) Para resolver numericamente a equação de condução de calor a uma dimensão,

$$\frac{\partial T(x,t)}{\partial t} = \frac{k}{c\rho}\frac{\partial^2 T(x,t)}{\partial x^2}\,,$$

pode-se usar uma aproximação de diferenças finitas para a derivada em ordem a x, e fica-se com um conjunto de $(N_x - 2)$ ODE:

$$\frac{\partial T(x,t)}{\partial t} = \frac{k}{c\rho}\frac{T(x-\Delta x,t) - 2T(x,t) + T(x+\Delta x,t)}{(\Delta x)^2}\,.$$

Aplicando o método de Crank–Nicolson, chega-se a

$$\begin{aligned} &- T(i-1,n+1) + \left(\frac{2}{\eta} + 2\right)T(i,n+1) - T(i+1,n+1) \\ &\qquad\qquad = T(i-1,n) + \left(\frac{2}{\eta} - 2\right)T(i,n) + T(i+1,n) \end{aligned}$$

com $\eta = k\Delta t/[c\rho(\Delta x)^2]$.

a) Considere um problema deste tipo em que as condições fronteira são

$$T(0,t) = 20, \quad T(L,t) = 25 + 50 \times \tanh(t/1000).$$

O sistema de equações para cada passo de tempo pode ser escrito na forma matricial,

$$\boldsymbol{A}\begin{bmatrix} T(2,n+1) \\ T(3,n+1) \\ \vdots \\ T(N_x-2,n+1) \\ T(N_x-1,n+1) \end{bmatrix} = \boldsymbol{b}\,,$$

onde $\boldsymbol{A}$ é uma matriz quadrada e $\boldsymbol{b}$ é um vetor coluna. Justificando adequadamente, escreva as duas primeiras e as duas últimas linhas de $\boldsymbol{A}$ e os dois primeiros e os dois últimos elementos de $\boldsymbol{b}$.

b) Explique porque é que se usarmos o método de Euler para este problema já não temos que nos preocupar com a escolha de um método de resolução de sistemas de equações algébricas lineares.

c) Para este problema, explique as vantagens do método de Crank–Nicolson em relação ao método de Euler. São estas as duas únicas alternativas possíveis?