

3º Teste Prático — Melhoria

Física Computacional — 2016/2017

23 de junho de 2017

Duração: 2 horas

Justifique as suas respostas às perguntas.

Note que os símbolos a **negrito** representam vetores.

Deve ser criada uma pasta no desktop contendo os ficheiros .m e eventuais figuras.

1. (3.0 + 3.0 + 3.0 val.) Nas alíneas seguintes pode usar sempre uma temperatura reduzida igual a 2.3.

- a) Adapte o seu programa do Trabalho 7.3 de maneira a fazer para a energia total e para a energia média por partícula aquilo que fez, no ponto 9, para a magnetização total e para a magnetização média por partícula.
- b) Escreva um único programa que lhe permita fazer um gráfico da estimativa numérica da magnetização por partícula em função do tamanho *N* do sistema (sempre à mesma temperatura).
- c) Nesta alínea, pretende-se que reescreva o seu programa do Trabalho 7.3 sem usar condições fronteira periódicas. Uma maneira simples de fazer isto é considerar que existem uns spins "fantasma" em toda a periferia do sistema com valores de *S* iguais a zero, e que nunca podem mudar. Note que para continuar a usar a matriz comp seria preciso alterá-la bastante. Em vez disso, defina simplesmente um escalar comp que é calculado de cada vez que se tenta virar um spin:

$$comp = \exp(-\Delta E/T) ,$$

onde

$$\Delta E = 2 \cdot S(i, j) \cdot SSVP(i, j)$$
,

e compare-o com um número aleatório para decidir se o spin é invertido.

- **2.** (1.0 + 5.5 + 1.5 + 1.5 + 1.5 val.) Considere um domínio cúbico de lado igual a 20, centrado na origem. Nesse espaço, existe:
 - Uma esfera interior, centrada na origem, com raio igual a 5 e uniformemente carregada com uma densidade: $\rho(r \le 5) = 1$, onde r é a distância à origem.
 - Uma superfície metálica, centrada na origem, com raio igual a 10 e com um potencial fixo igual a zero: $V(r \ge 10) = 0$.
 - Espaço vazio descarregado no resto do domínio.
 - a) Calcule a carga total na esfera interior.
 - b) Use o método de sobre-relaxação sucessiva para determinar o potencial elétrico em todo o espaço. Recomenda-se que use um valor (inicial) do parâmetro α dado por:

$$\alpha = \frac{2}{1 + \pi/N},$$

onde N é o numero de pontos segundo cada uma das 3 direções do domínio discretizado. Represente graficamente o potencial elétrico no plano z=0.

- c) Determine e represente graficamente o campo elétrico no plano z=0. Assuma que E_z é zero nesse plano.
- d) Dada a simetria do problema, podemos admitir que a densidade superficial de carga na superfície esférica condutora é uniforme. Sabendo isso, apresente uma estimativa numérica da carga total nessa superfície (o resultado deveria ser o mesmo da primeira alínea).
- e) Estime o valor V' do potencial elétrico na periferia da esfera interior (r=5). Se a esfera fosse condutora (e se a sua carga total Q se mantivesse), V' seria o potencial em todos os seus pontos. Estime a capacidade C=Q/V' do condensador que teríamos nesse caso e compare com o valor exato, $C=40\pi$.