

## Trabalhos de FIS444

### 1) Processos Markovianos e Teorema do Limite Central

#### Objetivo:

Este trabalho tem como objetivo treinar o aluno nas idéias de distribuições de probabilidade, processos Markovianos e também apresentar um exemplo da Teoria do Limite Central. Para tanto o aluno deverá usar ferramentas computacionais para programação e resolução de integrais.

#### Método:

Faça um programa em computador para obter, numericamente, a distribuição de probabilidade de uma variável  $x$ , onde  $x$  é um número aleatório entre 0 e 1. Normalmente o número aleatório pode ser gerado pela função RANDOM ou análogos. Por exemplo, em FORTRAN o comando seria:  $x = \text{RAND}()$ . Obs.: o programa de computador deve gerar os números aleatórios e calcular a distribuição de probabilidade e não apenas gerar os números aleatórios para serem usados em outros softwares.

Monte o gráfico da distribuição de probabilidade usando qualquer programa gráfico (Origin, Excel, SigmaPlot, Kaleidagraph, SciDavis, QTIPlot ou outros).

Repita todos os procedimentos acima, mas para  $x$  sendo a soma de duas variáveis geradas por RANDOM. Repita, novamente, os procedimentos para  $x$  igual a soma de três, quatro, e vinte variáveis geradas por RANDOM. Em FORTRAN, por exemplo, um valor para  $x$  igual a quatro variáveis RANDOM teria o código:

$$s1 = \text{RAND}(); \quad s2 = \text{RAND}(); \quad s3 = \text{RAND}(); \quad s4 = \text{RAND}()$$
$$x = s1 + s2 + s3 + s4$$

- Verifique por gráficos que as funções  $P(x)$  se aproximam cada vez mais de uma distribuição Normal (ou Gaussiana) a medida que o número de variáveis aumenta. Sugere-se que essa verificação seja feita com a apresentação de gráficos.
- Faça um texto descrevendo a metodologia usada, a análise dos resultados e o código fonte desenvolvido. O TEXTO DEVE SER NECESSARIAMENTE ESCRITO EM LATEX.

#### Referências:

*Fundamentals of Statistical and Thermal Physics* – F. Reif

## 2) O Jogo do Quanta

### Objetivo:

Construir gráficos como os da figura 4.9 com a frequência em que uma célula da rede ter uma energia  $E$  vs o valor dessa energia.

### Método:

Como explicado no exemplo, deve-se definir uma rede  $N \times N$  com um valor inicial para a energia em cada célula ( $E_0$ ). Sugere-se usar um número inteiro para  $E_0$ .

Escolha uma célula aleatória e diminua o valor da energia dessa célula em uma unidade (caso a célula escolhida não tenha energia igual a zero), aumentando o valor da energia de outra célula escolhida ao acaso também de uma unidade.

Repita esse procedimento várias vezes de modo que a nova configuração do sistema, ou seja, o conjunto dos valores de energia de cada célula, esteja descorrelacionada da configuração anterior. Isso porque mudar apenas o valor de apenas duas células, por exemplo, praticamente não altera significativamente o estado do sistema como um todo. Como queremos fazer um cálculo estatístico, é interessante obter configurações que sejam descorrelacionadas. SUGERE-SE QUE REPITA O PROCEDIMENTO UM NÚMERO 10 VEZES O VALOR DO NÚMERO DE CÉLULAS. Assim, se o sistema for  $50 \times 50$ , repita o procedimento de transferência de energia entre duas células 25.000 vezes ( $=10 \times 50 \times 50$ ).

Obtenha a distribuição de valores das energias em cada célula. Obs.: pode ser necessário fazer várias repetições para obter um resultado preciso.

Faça todo o procedimento anterior novamente, com um novo valor de  $E_0$ . Repita com, pelo menos, 4 valores diferentes de  $E_0$ .

Monte o gráfico da frequência de cada valor de energia usando qualquer programa gráfico (Origin, Excel, SigmaPlot, Kaleidagraph, SciDavis, QTIPlot ou outros).

Compare os gráficos obtidos para os diferentes  $E_0$ 's e discuta o significado físico desse parâmetro, além de ser a energia inicial de cada célula.

### Variantes do método (opcional):

O valor retirado da energia pode ser um valor real, escolhido através de um gerador de números aleatórios gaussiano, por exemplo. Obviamente o valor não pode ser maior que a energia que está na célula.

Mude o valor do tamanho da rede e compare as distribuições de mesmo valor de  $E_0$ . Qual o efeito do tamanho da rede?

Qual o efeito, nos gráficos de distribuição de energia, se retirarmos a restrição do valor mínimo de energia de cada célula? Ou seja, e se permitirmos, agora, que cada célula possa ter um valor negativo de energia?

### 3) Construção das isotermas de gases de van der Waals e de Dieterici

#### Objetivo:

Construir os gráficos das figuras 26.2, 26.3 (apenas para  $G$  vs  $p$ ) para o gás de van der Waals, identificando a temperatura crítica no gráfico e a linha de coexistência de fases (linha pontilhada). Fazer os mesmo gráficos para o gás de Dieterici.

#### Método:

Fixar os valores de  $a$  e  $b$  para um mol de gás de sua escolha e construir o gráfico de  $p$  vs  $V$  usando as equações de estado do gás de van der Waals (26.3) e do gás de Dieterici (26.36) para várias temperaturas.

Construir os gráficos da energia livre de Gibbs vs pressão para várias temperaturas pelo cálculo numérico da equação (26.29). Deve-se, para isso, desenvolver um programa para integração numérica na linguagem computacional de sua escolha para o cálculo da integral. É sugerido utilizar um método mais simples, como o método do trapézio. Deve-se escolher, no mínimo, 5 valores de temperaturas abaixo de  $T_c$  para esse cálculo. Apresentar as curvas de  $G$  vs  $p$  no mesmo gráfico.

Com base nos gráficos obtidos, fazer uma tabela com o valor de pressão de coexistência de fases e construir a região de coexistência de fases no mesmo gráfico de  $p$  vs  $V$ .

#### Referências:

*Concepts in Thermal Physics* – S. J. Blundell e K. M. Blundell – 2a. edição – Oxford.

### ATENÇÃO:

Os gráficos devem estar em formato apresentável (títulos nos eixos, dados apresentáveis, formatação rigorosa de números sem dados em excesso “sujando” a apresentação do gráfico). Como exemplo, seguem dois gráficos de resultados não-relacionados a esse trabalho, enfatizando resultados apresentados com desleixo em um gráfico (à esquerda) e os mesmos dados apresentados num formato razoável (à direita).

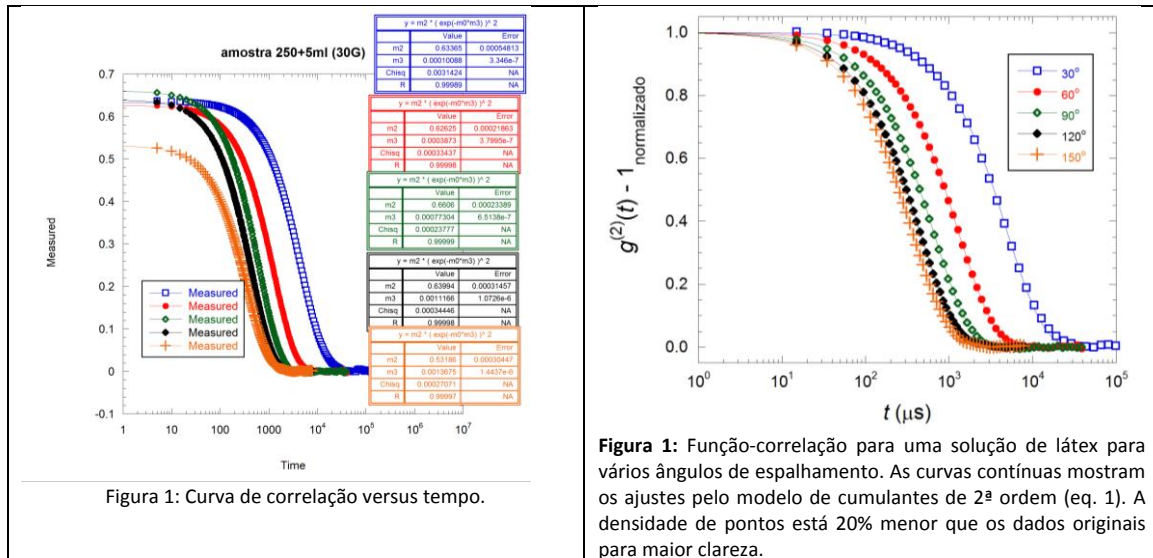


Figura 1: Função-correlação para uma solução de látex para vários ângulos de espalhamento. As curvas contínuas mostram os ajustes pelo modelo de cumulantes de 2ª ordem (eq. 1). A densidade de pontos está 20% menor que os dados originais para maior clareza.

### Observações:

- No texto final não é necessário colocar uma introdução longa e extensa. Porém é esperado que sejam apresentados as análises EXPLICANDO O PROCEDIMENTO E DADOS. Não apresente simplesmente os gráficos e resultados.
- Trabalhos cujos textos forem identificados como sendo cópias de colegas, livros, internet ou de qualquer outra fonte, mesmo que parcialmente, zera a nota.
- O texto deve estar escrito, necessariamente, em LATEX e ser entregue em formato PDF.