

## Exercícios

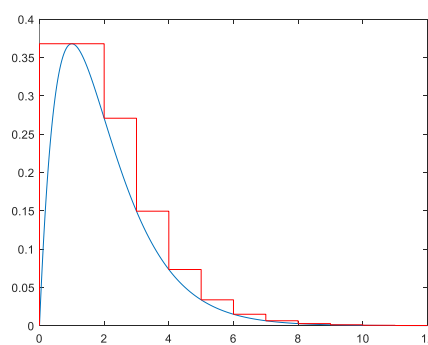
### Conceitos de Estatística e Probabilidade

1.

- Usando o método de transformação de variáveis crie um programa que gera números aleatórios  $\theta$  no intervalo  $[0, \pi]$  com uma densidade de probabilidade  $p(\theta) = \frac{\sin \theta}{2}$
- Use o programa gerado em a) para gerar pontos distribuídos uniformemente sobre a superfície de uma esfera de raio unitário.

2. Considere a família de distribuições de probabilidade conhecida por distribuição gama com a densidade de probabilidade  $p_{k,\lambda}(x) = \frac{\lambda^k}{\Gamma(k)} x^{k-1} e^{-\lambda x}$  com  $k > 0$ ,  $\lambda > 0$  e  $0 \leq x < \infty$ . A quantidade  $\Gamma(k)$  representa a função gama,  $\Gamma(k) = \int_0^\infty y^{k-1} e^{-y} dy$  que é igual a  $(k-1)!$  para  $k$  inteiro. A distribuição exponencial é o caso particular  $p_{1,\lambda}(x) = \lambda e^{-\lambda x}$ .

- Mostre analiticamente que a soma de 2 números aleatórios com distribuição exponencial,  $p_{1,\lambda}(x) = \lambda e^{-\lambda x}$  segue a distribuição  $p_{2,\lambda}(x)$  e que a soma de  $k$  números aleatórios exponenciais segue uma distribuição  $p_{k,\lambda}(x)$ . Faça um programa usando a soma de números aleatórios exponenciais para gerar números com distribuição  $p_{k,\lambda}(x)$ . Este método só serve para  $k$  inteiro.
- Use o método da aceitação/rejeição para gerar números aleatórios com a distribuição  $p_{k,\lambda}(x)$ . Considere em primeiro lugar  $k = 2$  e  $\lambda = 1$ . Comece por considerar pontos distribuídos uniformemente sobre um retângulo que contém a função e avalie a eficiência do método. Considere de seguida uma função em escada como mostra a figura.



c. Gere os números aleatórios primeiro escolhendo um retângulo proporcionalmente à sua área e depois gerando pontos com distribuição uniforme dentro do retângulo. As coordenadas  $x$  dos pontos gerados que tiverem ordenada inferior a  $p_{k,\lambda}(x)$  têm coordenada  $x$  com a distribuição de probabilidade pretendida.

- Faça um programa que, usando o método de transformação de variáveis gera números aleatórios de acordo com a distribuição gama para qualquer  $k$  real. Note que tem que considerar a função de distribuição cumulativa  $F_{k,\lambda}(x) = \int_0^x p_{k,\lambda}(y) dy$ . Esta função está relacionada com a função gama incompleta  $\gamma(k, x) = \int_0^x y^{k-1} e^{-y} dy$  que está disponível no Matlab (ver [gammainc](#)). Para aplicar este método é necessário obter

valores da função gama incompleta inversa,  $x = \gamma^{-1}(k, u)$  que também está definida no Matlab (ver [gammaincinv](#)).

- Use o método de transformação de variáveis para criar um programa que gera números aleatórios com distribuição de probabilidade:

$$p(r) = \begin{cases} \frac{9}{4}r^2 & \Leftarrow 0 \leq r \leq 1 \\ \frac{9}{4}r^{-10} & \Leftarrow 1 < r < \infty \end{cases}.$$

- Um jogo de azar consiste no lançamento de uma moeda que produz cara (1) ou coroa (0) com probabilidade  $p$  e  $1-p$  respetivamente. Um jogador tem uma quantidade de dinheiro  $D(t)$ , após  $t$  rondas apostando em cada ronda todo o seu dinheiro. Uma fração  $w(1)=p$  do seu dinheiro é apostada em cara e uma fração  $w(0)=1-p$  em coroa. A quantidade de dinheiro apostada no resultado que sai é dobrada e perde-se aquilo que se apostou no resultado que não sai. O dinheiro que o jogador tem após a ronda  $t$  é  $D(t) = D(0) \prod_{r=1}^t 2w(X_r)$  onde  $X_r$  é uma variável aleatória de Bernoulli igual a 1 com probabilidade  $p$  e igual a 0 com probabilidade  $1-p$ . A quantidade de dinheiro na ronda  $t$  pode escrever-se como  $D(t) = D(0)2^{W_t}$  onde  $W$  é a taxa de duplicação do dinheiro. Esta taxa média pode calcular-se analiticamente obtendo-se  $\bar{W} = 1 + p \log_2 p + (1-p) \log_2 1-p = 1 - S(p)$ . Faça um programa de computador que simula várias realizações do jogo e faz uma estimativa numérica do valor de  $\bar{W}$  comparando o resultado com a expressão analítica para diferentes valores de  $p$ . Se  $p = 0.5$  a taxa média de duplicação é nula e toma o valor máximo  $\bar{W} = 1$  para  $p = 0$  ou  $p = 1$ .
- Demonstre a desigualdade de Jensen: para  $f(x)$  função convexa, verifica-se que  $\overline{f(X)} \geq f(\bar{X})$ .

**Resolução:** A equação da reta que une os pontos  $(x_1, f(x_1))$  e  $(x_2, f(x_2))$  é  $y = f(x_1) + \frac{f(x_2)-f(x_1)}{x_2-x_1}(x-x_1)$ . Por definição uma função convexa verifica,  $f(x) \leq y$  para  $x_1 \leq x \leq x_2$ . Considerando uma v.a.  $X$  que toma valores em  $\mathcal{X} = \{x_1, x_2\}$  com  $p_X(x_1) = p_1 = 1 - p_2$  e  $p_X(x_2) = p_2$ , temos  $\overline{f(X)} = p_1 f(x_1) + p_2 f(x_2) = f(x_1) + p_2(f(x_2) - f(x_1))$ . Escolhendo  $p_2 = \frac{x-x_1}{x_2-x_1}$  ou seja  $x = p_1 x_1 + p_2 x_2 = \bar{X}$  e obtemos, pela propriedade de convexidade,  $\overline{f(X)} = y \geq f(x) = f(\bar{X})$ .

Consideremos agora o caso de uma v.a.  $X$  que toma valores em  $\mathcal{X} = \{x_1, x_2, x_3\}$  com  $p_X(x_1) = p_1$ ,  $p_X(x_2) = p_2$ , e  $p_X(x_3) = p_3$ . Temos agora,  $\overline{f(X)} = p_1 f(x_1) + p_2 f(x_2) + p_3 f(x_3)$ . Escrevemos,  $\overline{f(X)} = (p_1 + p_2) \left[ \frac{p_1}{p_1+p_2} f(x_1) + \frac{p_2}{p_1+p_2} f(x_2) \right] + p_3 f(x_3)$ . Aplicando o caso anterior, temos

$\frac{p_1}{p_1+p_2} f(x_1) + \frac{p_2}{p_1+p_2} f(x_2) \geq f\left(\frac{p_1}{p_1+p_2} x_1 + \frac{p_2}{p_1+p_2} x_2\right)$  e portanto,  $\overline{f(X)} \geq (p_1 + p_2)f\left(\frac{p_1}{p_1+p_2} x_1 + \frac{p_2}{p_1+p_2} x_2\right) + p_3 f(x_3)$ . Aplicando novamente o caso anterior obtemos  $\overline{f(X)} \geq f\left((p_1 + p_2)\left[\frac{p_1}{p_1+p_2} x_1 + \frac{p_2}{p_1+p_2} x_2\right] + p_3 x_3\right)$ . Obtemos portanto, por indução, que  $\overline{f(X)} \geq f(\bar{X})$  para uma distribuição de probabilidade qualquer,  $p_X(x)$ .

6. Mostre que uma v. a. Gaussiana,  $X$  tem a função característica  $Q_X(k) = e^{ik\mu - \frac{\sigma^2}{2}k^2}$ , com  $\mu = \bar{X}$  e  $\sigma^2 = \text{var}X$

**Resolução:** como  $p_X(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}$  e  $Q_X(k) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} p_X(x) dx$  escrevemos primeiro  $ikx - \frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}$  como  $-\frac{(x-\mu-ik\sigma^2)^2}{2\sigma^2} + C$  e determinamos  $C$ . Como  $-\frac{(x-\mu-ik\sigma^2)^2}{2\sigma^2} = -\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2} + ikx - ik\mu - i^2k^2\frac{\sigma^2}{2}$  temos que  $C = ik\mu - k^2\frac{\sigma^2}{2}$ .

Então,  $Q_X(k) = e^{ik\mu - k^2\frac{\sigma^2}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{(x-\mu-ik\sigma^2)^2}{2\sigma^2}} dx$  e como  $\int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{(x-\mu-ik\sigma^2)^2}{2\sigma^2}} dx = 1$  obtemos  $Q_X(k) = e^{ik\mu - k^2\frac{\sigma^2}{2}}$ . Note-se que  $\int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{y^2}{2\sigma^2}} dy = 1$  e podemos fazer a substituição  $y = x - \mu - ik\sigma^2$  no integral anterior transformando-o neste último integral.

7. Mostre que a v.a.  $Y = \sum_{i=1}^N X_i$  com  $X_i$  v. a. independentes e identicamente distribuídas, para  $N$  grande tem distribuição Gaussiana com média  $\bar{Y} = N\bar{X}$  e var  $Y = N \text{var} X$ . Ou seja demonstre o teorema do limite central.

**Resolução:** Como as v.a. são independentes e identicamente distribuídas  $Q_Y(k) = \overline{e^{ikY}} = Q_X^N(k)$ . Como  $Q_X(k)$  diminui com  $k$  quando  $k$  aumenta e  $Q_X^N(k)$  ainda diminui mais rapidamente, podemos fazer uma expansão de  $\ln Q_Y(k) = N \ln Q_X(k)$  em potências de  $k$  até 2ª ordem em  $k$ :

$$\ln Q_Y(k) \cong \ln Q_Y(0) + \left(\frac{\partial \ln Q_Y(k)}{\partial k}\right)_{k=0} k + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 \ln Q_Y(k)}{\partial k^2}\right)_{k=0} k^2$$

Como  $Q_Y(0) = 1$ ,  $\frac{\partial \ln Q_Y(k)}{\partial k} = \frac{N}{Q_X(k)} \frac{\partial Q_X(k)}{\partial k}$  e  $\frac{\partial^2 \ln Q_Y(k)}{\partial k^2} = N \left[ \frac{1}{Q_X(k)} \frac{\partial^2 Q_X(k)}{\partial k^2} - \frac{1}{Q_X^2(k)} \left(\frac{\partial Q_X(k)}{\partial k}\right)^2 \right]$  e ainda  $Q_X(0) = 1$ ,  $\left(\frac{\partial Q_X(k)}{\partial k}\right)_{k=0} = i\bar{X}$ ,  $\left(\frac{\partial^2 Q_X(k)}{\partial k^2}\right)_{k=0} = -\bar{X}^2$  temos  $\left(\frac{\partial \ln Q_Y(k)}{\partial k}\right)_{k=0} = iN\bar{X}$  e  $\left(\frac{\partial^2 \ln Q_Y(k)}{\partial k^2}\right)_{k=0} = -N\bar{X}^2 + N\bar{X}^2$ .

Substituindo na expressão anterior temos

$$\ln Q_Y(k) \cong iN\bar{X}k - \frac{1}{2}N\text{var } X k^2$$

que é a função característica de uma v.a. Gaussiana de média  $N\bar{X}$  e variância  $N \text{ var } X$ .

8. Considere um passeio aleatório em que em cada passo uma partícula desloca-se uma distância  $S$ , com probabilidade  $w_S(s)$ , onde  $S$  é uma v.a. de Bernoulli,  $S \in \{a, -a\}$  com probabilidade  $w_S(a) = q$  e  $w_S(-a) = 1 - q$

- a. Faça uma simulação do passeio aleatório considerando  $M = 100$  realizações, mostrando que a distribuição de probabilidade da posição da partícula no passo  $n$ ,  $X = \sum_{i=1}^n S_i$  se aproxima de uma distribuição Gaussiana de média  $\bar{X} = (2q - 1)at$  e variância  $\text{var } X = 4q(1 - q)a^2n$  quando  $n$  aumenta. Este resultado corresponde ao teorema do limite central. Considere  $a = 1$  e  $q = 0.5$ .
- b. Mostre que a distribuição de probabilidade de  $X$ , no passo  $n$ , obedece a:
- $$p(x, n + 1) = p(x - a, n)q + p(x + a, n)(1 - q)$$
- c. Considere  $q = 0.5$  e mostre que introduzindo tempo contínuo,  $t = n\delta t$  e fazendo as aproximações,

$$\begin{cases} \frac{\partial p}{\partial t} \cong \frac{p(x, n+1) - p(x, n)}{\delta t} \\ p(x - a, n) \cong p(x, t) - a \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{a^2}{2} \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} \\ p(x + a, n) \cong p(x, t) + a \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{a^2}{2} \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} \end{cases}$$

válidas quando  $a \rightarrow 0$  e  $\delta t \rightarrow 0$ , se obtém a equação de difusão,  $\frac{\partial p}{\partial t} = D \frac{\partial^2 p}{\partial x^2}$  com  $D = \frac{a^2}{2\delta t}$ . Ao tomar-se o limite  $a \rightarrow 0$  e  $\delta t \rightarrow 0$ , tem que se manter  $\frac{a^2}{\delta t}$  constante.

Multiplicando ambos os membros da equação de difusão por  $e^{ikx}$  e integrando sobre  $x$ , mostre que se obtém a equação para a função característica,  $Q(k, t) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} p(x, t) dx$ ,

$$\frac{\partial Q(k, t)}{\partial t} = -Dk^2 Q(k, t),$$

Cuja solução com,  $Q(k, 0) = 1$  é,  $Q(k, t) = e^{-Dk^2 t}$  que é a função característica de uma v.a. Gaussiana de média zero e variância  $\sigma^2 = 2Dt$ .

A correspondente distribuição de probabilidade é,  $p(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}}$

9. Um núcleo radioativo decai com uma taxa de decaimento  $\lambda$  (probabilidade de decair por unidade de tempo). A probabilidade de decair entre  $t$  e  $t + \Delta t$ , designada por  $w(t)\Delta t$  obedece à equação,

$$w(t)\Delta t = \left[ 1 - \int_0^t w(t') dt' \right] \lambda \Delta t$$

- a. Explique a expressão anterior e mostre que  $w(t) = \lambda e^{-\lambda t}$ .
- b. Seja  $P_n(t)$  a probabilidade de haver  $n$  decaimentos no intervalo  $[0, t]$ . Então  $P_0(t) = 1 - \int_0^t w(t') dt' = e^{-\lambda t}$ ,  $P_1(t) = \int_0^t w(t') P_0(t - t') dt' = (\lambda t) e^{-\lambda t}$  e em geral  $P_n(t) = \int_0^t w(t') P_{n-1}(t - t') dt'$ . Mostre por indução que a probabilidade de observar  $n$  decaimentos no intervalo  $[0, t]$  é a distribuição de Poisson,  $P_n = \frac{(\lambda t)^n}{n!} e^{-\lambda t}$ , com  $n = 0, 1, \dots, \infty$

10. Mostre que a entropia de uma v.a.  $X$  com uma distribuição de probabilidade,  $p_X(x)$  é máxima quando  $p_X(x)$  tem uma distribuição uniforme sobre os valores  $x \in \mathcal{X}$ . Considere o multiplicador de Lagrange  $\alpha$  e obtenha o máximo a partir de,  $\frac{d}{dp_X(x)} S_X = -\sum_{y \in \mathcal{X}} p_X(y) \ln p_X(y) + \alpha (\sum_{y \in \mathcal{X}} p_X(y) - 1) = 0$

11. Considere uma caixa com dois compartimentos que contém  $N$  partículas (com densidade baixa de partículas) e com uma abertura pequena que permite que as partículas passem de um compartimento para o outro. Se observarmos o sistema durante um tempo muito curto apenas observamos as partículas a moverem-se dentro de um compartimento e muito raramente vemos uma partícula a passar de um compartimento para outro. Imaginemos que observamos o sistema o tempo suficiente para em média observarmos uma partícula durante esse intervalo de tempo a atravessar a abertura. O número de partículas no passo  $t$  no compartimento 1,  $N_1(t)$  pode ser considerado uma cadeia de Markov com probabilidade de transição  $w(N_1 \rightarrow N_1 - 1) = \frac{N_1}{N}$  e  $w(N_1 \rightarrow N_1 + 1) = 1 - \frac{N_1}{N}$  representando a probabilidade de uma das  $N_1$  partículas que se encontram no compartimento 1 passar para o compartimento 2 diminuindo  $N_1$  em uma unidade ou de uma partícula do compartimento 2 passar para o compartimento 1 aumentando  $N_1$  em uma unidade.

- a. Construa a matriz de transição de probabilidade para a cadeia de Markov considerando  $N=10$ .
- b. Determine o vetor próprio à direita da matriz de transição com valor próprio igual a 1, que corresponde à distribuição de probabilidade em regime estacionário e mostre que o valor concorda com o resultado analítico,  $p_{N_1}(n_1) = \frac{N!}{(N-n_1)! n_1!} 2^{-N}$ , que é a distribuição binomial.
- c. Faça um programa que gera realizações do processo estocástico para um número máximo de passos igual a 1000. Comece com todas as partículas no compartimento 1 e considere  $N=30$  partículas. Considerando apenas uma realização, desprezando os primeiros 100 passos, faça um histograma dos valores observados em regime estacionário e compare com a probabilidade estacionária esperada.

- d. Fazendo médias sobre 100 realizações faça uma média sobre as realizações, em cada passo, e compare a dependência temporal observada para  $\overline{N_1(t)}$  com o valor analítico esperado,

$$\overline{N_1(t)} = \frac{N}{2} + \left(N_1(0) - \frac{N}{2}\right) e^{-t \log_{1-2/N}}$$

### Introdução à Teoria de Informação.

12. Mostre que para uma cadeia de Markov em que existe uma distribuição de probabilidade estacionária,  $p_X(x) = \lim_{N \rightarrow \infty} p_{X_N}(x)$  a taxa de entropia vem dada por,  $h_X = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{S_{X_N}}{N} = \sum_{x,y} p_X(x) w(x \rightarrow y) \log w(x \rightarrow y)$ .
13. Mostre que a informação mútua entre as v.a.  $X$  e  $Y$ ,  $I_{X,Y}$ , é uma quantidade sempre positiva ou nula. Mostre ainda que a divergência de Kullback-Leibler,  $D_{KL}(q \parallel p)$  é sempre positiva e escreva  $I_{X,Y} = D_{KL}(p_{X,Y} \parallel p_X p_Y)$ .
14. Mostre que  $I_{X,Y} = S_Y - S_{Y|X} = S_X - S_{X|Y}$ .
15. Mostre que  $I_{X,YZ} = I_{X,Z} - I_{X,Y|Z} = I_{X,Y} - I_{X,Z|Y}$ . Mostre ainda que para uma cadeia de Markov onde as v.a. estão temporalmente ordenadas,  $X \rightarrow Y \rightarrow Z$  a informação mútua decresce com o tempo,  $I_{X,Y} \geq I_{X,Z}$ .

### Compressão de dados

16. Considere o algoritmo de Huffman.
- Determine (*à la patte*) o código ótimo de 1 caracter para comprimir o texto AAAAAABBBBBBCCCCDDDEEF. Qual o comprimento da mensagem escrita no código ótimo? Sem compressão o texto registando o código ascii ocuparia 21 bytes.
  - Se considerasse um código para 2 caracteres qual seria o comprimento ótimo? Compare com o previsto pelo Teorema de Shannon.
  - Qual seria o código ótimo de 1 caracter para o texto AAAAAABBBBBBCCCCDDDDDEEEEEE?

### Transmissão de dados

17. Numa cadeia de transmissão uma informação binária  $X_0 \in \mathcal{X} = \{0,1\}$  com  $p_{X_0}(0) = p_{X_0}(1) = 0.5$  é transmitida sucessivamente ao elemento seguinte da cadeia, produzindo uma mensagem no elemento  $n$ ,  $X_n \in \mathcal{X} = \{0,1\}$ . A probabilidade de erro em cada transmissão é igual a  $p$ . Mostre que a informação mútua,  $I_{X_0, X_n} = \sum_{x,y \in \mathcal{X}} p_{X_0, X_n}(x,y) \log_2 \frac{p_{X_0, X_n}(x,y)}{p_{X_0}(x)p_{X_n}(y)}$  se aproxima de zero de acordo com,  $I_{X_0, X_n} \cong \frac{(1-2p)^n}{\log 2} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0$ . O problema também pode ser resolvido usando a teoria de cadeias de Markov.

**Resolução:** Temos  $p_{X_0, X_1}(0,0) = \frac{1-p}{2}$ ,  $p_{X_0, X_1}(0,1) = \frac{p}{2}$ ,  $p_{X_0, X_1}(1,0) = \frac{p}{2}$  e  $p_{X_0, X_1}(1,1) = \frac{1-p}{2}$ . Calculamos agora,  $p_{X_0, X_2}(x, y)$ , obtendo,  $p_{X_0, X_2}(0,0) = \frac{(1-p)^2}{2} + \frac{p^2}{2}$ ,  $p_{X_0, X_2}(0,1) = \frac{1-p}{2}p + \frac{p}{2}(1-p)$ ,  $p_{X_0, X_2}(1,0) = \frac{p}{2}(1-p) + \frac{1-p}{2}p$  e  $p_{X_0, X_2}(1,1) = \frac{(1-p)^2}{2} + \frac{p^2}{2}$ . Definindo  $p_2 = 2p(1-p)$ , verifica-se que  $p_{X_0, X_2}(0,0) = \frac{1-p_2}{2}$ ,  $p_{X_0, X_2}(0,1) = \frac{p_2}{2}$ ,  $p_{X_0, X_2}(1,0) = \frac{p_2}{2}$  e  $p_{X_0, X_2}(1,1) = \frac{1-p_2}{2}$  com a mesma forma de  $p_{X_0, X_1}(x, y)$  mas com um parâmetro  $p$  diferente dado por,  $1 - 2p_2 = (1 - 2p)^2$ . Fazendo os cálculos para  $p_{X_0, X_3}(x, y)$  verificamos que podemos escrever  $p_{X_0, X_3}(0,0) = \frac{1-p_2}{2}(1-p) + \frac{p_2}{2}p$ ,  $p_{X_0, X_3}(0,1) = \frac{1-p_2}{2}p + \frac{p_2}{2}(1-p)$ ,  $p_{X_0, X_3}(1,0) = \frac{p_2}{2}(1-p) + \frac{1-p_2}{2}p$  e  $p_{X_0, X_3}(1,1) = \frac{1-p_2}{2}(1-p) + \frac{p_2}{2}p$ . Como se pode escrever  $\frac{1-p_2}{2}(1-p) + \frac{p_2}{2}p = \frac{1-p_3}{2}$  e  $\frac{1-p_2}{2}p + \frac{p_2}{2}(1-p) = \frac{p_3}{2}$  com  $1 - 2p_3 = (1 - 2p_2)(1 - 2p)$  verifica-se que  $p_{X_0, X_n}(x, y)$  se escreve na mesma forma de  $p_{X_0, X_1}(x, y)$  mas com  $1 - 2p_n = (1 - 2p)^n$ .

Portanto temos,  $I_{X_0, X_n} = 2(1 - p_n)\frac{1}{2}\log_2 \frac{1-p_n}{\frac{1}{4}} + 2p_n\frac{1}{2}\log_2 \frac{p_n}{\frac{1}{4}}$ . Como  $\log_2(1 \pm x) \cong \pm \frac{x}{\log 2}$  para  $x$  pequeno e como  $p_n = \frac{1}{2}(1 - (1 - 2p)^n)$  e  $1 - p_n = \frac{1}{2}(1 + (1 - 2p)^n)$  temos,

$$I_{X_0, X_n} \cong (1 - p_n) \frac{(1 - 2p)^n}{\log 2} + p_n \left( -\frac{(1 - 2p)^n}{\log 2} \right) = \frac{(1 - 2p)^{2n}}{\log 2} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0$$

18. Considere um canal de transmissão de informação em que um bit tem uma probabilidade  $p$  de ser transmitido com erro e  $1-p$  de ser transmitido sem erro (canal binário simétrico, BSC).

- Se  $X$  for uma variável binária de entrada que toma valor 0 com probabilidade  $q$  e 1 com probabilidade  $1-q$  e  $Y$  a variável correspondente ao bit recebido, determine os valores da probabilidade conjunta,  $p_{X,Y}(x, y)$ . Os valores da função podem ser dados como uma tabela.
- Mostre a partir de  $p_{X,Y}(x, y)$  que  $p_X(x) = q\delta_{x,0} + (1-q)\delta_{x,1}$  e  $p_Y(y) = (q(1-p) + (1-q)p)\delta_{y,0} + (qp + (1-q)(1-p))\delta_{y,1}$  onde  $\delta_{x,y}$  representa o delta de Kronecker.
- Mostra que a informação mútua  $I_{X,Y}$  se pode escrever na forma:  $I_{X,Y} = (1-p)\log_2 1-p + p\log_2 p - A\log_2 A - (1-A)\log_2 1-A$  com  $A = q + p - 2qp$ .
- Determina a capacidade do canal de informação definida como  $C = \max_q I_{X,Y}$ . Comenta a dependência de  $C$  na probabilidade  $p$ .

**Resolução:**

a. A probabilidade  $p_{X,Y}(x,y)$  obtém-se usando a fórmula de Bayes:  $p_{X,Y}(x,y) = p_{Y|X}(y|x) p_X(x)$ . Temos  $p_{Y|X}(0|0) = p_{Y|X}(1|1) = 1 - p$  e  $p_{Y|X}(1|0) = p_{Y|X}(0|1) = p$ . Então  $p_{X,Y}(x,y)$  é dada pela tabela:

$p_{X,Y}(x,y)$		$y$	
		0	1
$x$	0	$q(1-p)$	$qp$
	1	$(1-q)p$	$(1-q)(1-p)$

b. A soma dos valores da tabela ao longo de cada coluna para uma dada linha dá-nos a probabilidade  $p_X(x) = \sum_y p_{X,Y}(x,y)$  obtendo-se,  $p_X(0) = q(1-p) + qp = q$  e  $p_X(1) = (1-q)p + (1-q)(1-p)p = 1-q$ . A soma dos valores da tabela ao longo de cada linha para uma dada coluna dá-nos a probabilidade  $p_Y(y) = \sum_x p_{X,Y}(x,y)$  obtendo-se,  $p_Y(0) = q(1-p) + (1-q)p = A$  e  $p_Y(1) = (1-q)(1-p) + qp = 1-A$  com  $A = q + p - 2qp$ .

c. Usando a definição de informação mútua:  $I_{X,Y} = \sum_{x,y} p_{X,Y}(x,y) \log_2 \frac{p_{X,Y}(x,y)}{p_X(x)p_Y(y)}$  obtemos:

$$I_{X,Y} = p_{X,Y}(0,0) \log_2 \frac{1-p}{A} + p_{X,Y}(0,1) \log_2 \frac{p}{1-A} + p_{X,Y}(1,0) \log_2 \frac{p}{A} + p_{X,Y}(1,1) \log_2 \frac{1-p}{1-A},$$

que se pode escrever como:

$$I_{X,Y} = (p_{X,Y}(0,0) + p_{X,Y}(1,1)) \log_2(1-p) - (p_{X,Y}(0,0) + p_{X,Y}(1,0)) \log_2 A + (p_{X,Y}(0,1) + p_{X,Y}(1,0)) \log_2 p - (p_{X,Y}(0,1) + p_{X,Y}(1,1)) \log_2(1-A)$$

e simplificar para

$$I_{X,Y} = (1-p) \log_2(1-p) - A \log_2 A + p \log_2 p - (1-A) \log_2(1-A)$$

d. Começa-se por determinar a o máximo de  $I_{X,Y}$  relativamente à variável  $q$ :

$$\frac{d}{dq} I_{X,Y} = -\frac{dA}{dq} \log_2 A - \frac{A}{A \log 2} \frac{dA}{dq} + \frac{dA}{dq} \log_2(1-A) + \frac{1-A}{(1-A) \log 2} \frac{dA}{dq}$$

ou seja,  $\frac{d}{dq} I_{X,Y} = \frac{dA}{dq} \log_2 \frac{1-A}{A}$ . Portanto,  $\frac{d}{dq} I_{X,Y} = 0$  para  $A = \frac{1}{2}$ .

Como  $A = q + p - 2qp$  podemos escrever  $q(1-2p) = \frac{1}{2} - p$  obtendo  $q = \frac{1}{2}$ . Então, temos para a capacidade  $C = \max_q I_{X,Y} = (1-p) \log_2(1-p) + p \log_2 p - 1$ . A capacidade é máxima para  $p = 0$  ou  $p = 1$ , isto é, quando não há erros de



transmissão ou quando todas as transmissões têm erro. A capacidade é nula quando  $p = \frac{1}{2}$ .

19. Mostre que a capacidade,  $C$  de um *erasure channel* em que um bit tem probabilidade  $\varepsilon$  de não ser transmitido vem dada por  $C = 1 - \varepsilon$ .
20. Calcule a capacidade de um canal  $Z$ .
21. Mostre que para um código de repetição simples a operar num canal BSC com probabilidade de erro,  $p$ , em que um bit na mensagem a ser transmitida é repetido  $k$  vezes (com  $k$  ímpar) tem uma probabilidade de ser decodificado com erro igual a  $P_B^{av} = \sum_{r=[k/2]}^k \binom{k}{r} p^r (1-p)^{k-r}$  onde  $[k/2]$  é o menor inteiro não inferior a  $k/2$ .

## Descrição microscópica e macroscópica de sistemas físicos

### Sistemas com energia total fixa.

22. Mostra para um gás ideal clássico de  $N$  partículas a ocupar um volume  $V$ , com energia,  $E = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m}$ , que o número de estados com energia entre  $E$  e  $E + \delta E$  é aproximadamente igual ao número de estados com energia inferior a  $E$  e é dado por  $\Omega_{GI}(N, V, E) = V^N \frac{\left(\frac{2\pi m E}{h^2}\right)^{3N/2}}{\left(\frac{3N}{2}\right)! N!}$ . Mostra a partir deste resultado que  $E = \frac{3}{2} N k_B T$ .
23. Mostra para um sólido de Einstein, clássico, de  $N$  osciladores tridimensionais, com energia,  $E = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \sum_{i=1}^N r_i^2$ , que o número de estados com energia entre  $E$  e  $E + \delta E$  é aproximadamente igual ao número de estados com energia inferior a  $E$  e é dado por  $\Omega_{SE}(N, E) = \frac{\left(\frac{E}{\hbar\omega}\right)^{3N}}{(3N)!}$ . Mostra a partir deste resultado que  $E = 3N k_B T$ .
24. Considera um sólido de Einstein quântico com energia  $E = \hbar\omega \sum_{i=1}^{3N} (n_i + 1/2)$  com  $n_i = 0, 1, 2, \dots$  tem número de estados de energia  $E$ , dado por,

$$\Omega_{SEQ}(N, E) = \frac{\left(\frac{E - 3N\hbar\omega/2}{\hbar\omega} + 3N - 1\right)!}{\left(\frac{E - 3N\hbar\omega/2}{\hbar\omega}\right)! (3N - 1)!}$$

Mostra a partir deste resultado que  $E = 3N\hbar\omega \left( \frac{1}{2} + \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1} \right)$

25. Construa um programa que simula a duas dimensões, usando dinâmica molecular e o algoritmo de leap-frog, um sistema formado por  $N=12$  partículas de massa  $m$ , que interagem através de um potencial de Lennard-Jones (de parâmetro  $\varepsilon$  e  $\sigma$ ) e que se encontram num quadrado de lado  $L = 12\sigma$ , com condições fronteira periódicas. No instante inicial as partículas encontram-se igualmente espaçadas segundo a direção  $y$  com a coordenada  $x$  das partículas

todas iguais com o valor correspondente ao centro do quadrado, com um momento segundo  $x$  dado por  $p_x = 1/\sqrt{\epsilon m}$ ,  $p_y = 0$ .

Faça uma animação mostrando a posição e velocidade das partículas ao longo do tempo usando o passo de integração,  $dt = 0.01 \sqrt{m/\epsilon}$ . Integre as equações do movimento durante 1000 passos e faça uma inversão dos momentos e evolua o sistema por mais 1000 passos. Adicione uma pequena perturbação aos momentos das partículas e faça evoluir o sistema por 1000 passos. Inverta os momentos das partículas e faça evoluir o sistema por mais 2000 passos. Calcule a energia cinética, a energia potencial e a energia total ao longo do tempo. Discuta o comportamento observado.

26. Um sistema de partículas de Lennard-Jones num recipiente de volume  $V$  a 3 dimensões tem uma temperatura crítica  $T_C = 1.326(2)\epsilon/k_B$  e densidade crítica  $\rho_C = \frac{N}{V} = 0.316(2)/\sigma^3$ . Isso significa que a temperaturas superiores e densidades próximas do valor crítico, o sistema comporta-se como um fluido. A densidades superiores o sistema separa-se numa fase sólida e numa fase fluída. A temperaturas inferiores a  $T_C$  o sistema pode separar-se numa fase líquida e gasosa ou numa fase líquida e sólida dependendo da densidade.

Elabore um programa de simulação de dinâmica molecular, no ensemble microcanónico em que a energia total é fixa e com condições fronteira periódicas. Considere um sistema de  $N=30$  partículas, com uma densidade próxima da densidade  $\rho_C$  e uma energia cinética por partícula  $\frac{2E_C}{3Nk_B} = T > T_C$ .

Não se esqueça que é necessário deixar equilibrar o sistema antes de fazer médias temporais. Para obter a temperatura desejada pode fazer-se um escalonamento das velocidades na fase inicial de equilibração. Os momentos iniciais podem ter uma distribuição uniforme com um módulo tal que  $E_C = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m}$  verifica  $\frac{2E_C}{3Nk_B} = T$ .

Calcule a variação da pressão e da energia interna do sistema com a densidade. Calcule o histograma das velocidades das partículas em regime estacionário e mostre que é bem aproximado por uma Gaussiana de média nula e variância  $T$  (em unidades de  $\epsilon/k_B$ ) independentemente do valor da densidade.

27. Considere um gás ideal de  $N=40$  partículas que se movem a 3 dimensões e um *demon* de energia  $E_D$ . A energia total do gás e do *demon* conserva-se. Inicialmente o gás tem uma energia  $E_0$  e o *demon* energia  $E_D = 0$ . Escolha as seguintes unidades:  $u_m = m$ ;  $u_v = \sqrt{u_E/m}$ ;  $u_T = u_E/k_B$  e uma unidade de energia arbitrária,  $u_E$ . Nestas unidades a energia do gás ideal é  $E = \frac{3}{2}NT$ . Considere  $E_0 = 100$ . Inicialmente atribua a todas as partículas uma mesma velocidade  $v_0$  na direção  $x$  do espaço. Durante 1500 passos perturbe aleatoriamente a velocidade de uma partícula escolhida ao acaso adicionando-lhe uma quantidade  $dv_i$  com  $i = x, y, z$  distribuição uniforme no intervalo

$] -dv_0, dv_0[$  com  $dv_0 = v_0/10$ . Um passo corresponde a perturbar a velocidade de uma partícula uma vez em média.

- a. Desprezando os 500 passos iniciais calcule o histograma das velocidades em regime estacionário e mostre que a densidade de probabilidade de observar um módulo da velocidade para uma partícula do gás tem a

$$\text{forma } p(v) = \frac{4\pi v^2}{(2\pi T)^{3/2}} e^{-\frac{v^2}{2T}}.$$

- b. Calcule a densidade de probabilidade das energias do *demon* registadas ao longo da simulação em regime estacionário e mostre que tem a forma aproximada,  $p(E_D) = \frac{1}{T} e^{-\frac{E_D}{T}}$ , com  $0 \leq E_D \leq \infty$ .

28. Pretende-se fazer uma simulação de um gás de fotões bidimensional, confinado a um quadrado de lado  $L$ , usando o algoritmo do *demon*. Os estados de um gás de fotões, partículas indiscerníveis, são especificados pelo número de fotões,  $n_{\vec{k}}$  com um vetor de onda,  $\vec{k} = \frac{\pi}{L}(n_x, n_y)$  onde  $n_x$  e  $n_y$  tomam valores  $1, 2, \dots, \infty$ . A energia de um fotão com vetor de onda  $\vec{k}$  é dada por  $E_{\vec{k}} = \hbar c k$  onde  $c$  é a velocidade da luz e  $\hbar$  é a constante de Planck dividida por  $2\pi$ . Podemos usar para unidade de energia,  $u_E = \frac{\hbar c}{2L}$  e uma unidade de temperatura  $u_T = \frac{u_E}{k_B}$ .

- a. Mostre que se a energia total for  $E_0$  podemos fazer simulações

$$\text{considerando } n_{x(\text{ou } y)} < n_{\max} = \left\lceil \sqrt{\left(\frac{2LE_0}{\hbar c}\right)^2 - 1} \right\rceil.$$

- b. Escreve um programa para simular o gás de fotões usando o algoritmo do *demon* com uma energia total  $\sqrt{2} \leq E_0 \leq 80\sqrt{2}$ . Considere o estado inicial aquele em que não existem fotões no sistema. Despreza 2000 passos iniciais e faz medidas sobre os seguintes 10000 passos. Em cada passo considera  $n_{\max}^2$  atualizações do estado do sistema. Uma atualização do estado consiste na escolha de um tipo de fotão (o valor de  $\vec{k}$  define o tipo do fotão) e de um incremento ou diminuição em uma unidade do seu número tendo em atenção que o número de fotões de cada tipo não pode ser negativo. Calcula a temperatura do gás de fotões através da energia média do *demon*,  $T = \overline{E_D}$  em regime estacionário e mostra que  $\overline{E}$  observada para o gás de fotões segue o resultado analítico,  $\overline{E} = 1.20206 \frac{4\pi L^2 T^3 k_B^3}{(hc)^2}$ .

- c. Calcula em regime estacionário o número médio de fotões com energia entre  $\varepsilon$  e  $\varepsilon + d\varepsilon$ ,  $N(\varepsilon)d\varepsilon$  comparando com o valor esperado para a distribuição de Planck de um gás de fotões a duas dimensões,

$$N(\varepsilon) = \frac{2\pi L^2}{(hc)^2} \frac{\varepsilon}{e^{\frac{\varepsilon}{k_B T}} - 1}$$

29. Considerando apenas as coordenadas das partículas e condições fronteira periódicas faça uma simulação de um sistema de partículas de Lennard-Jones usando o algoritmo do *demon*. Nesta simulação pode ignorar os momentos das partículas já que a sua contribuição para as propriedades dos sistemas podem ser calculadas analiticamente. Escolha temperaturas e densidades iguais às usadas nas simulações de dinâmica molecular (exercício 26) e compare os resultados para a energia interna e pressão com os obtidos no exercício 26. Para obter a temperatura desejada a energia total tem que ser ajustada de forma a que a energia média do *demon* seja igual à temperatura.

30. Simule, usando o algoritmo do demon:

- a. Um sistema de  $N$  osciladores unidimensionais clássicos com Hamiltoniano,  $\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \left[ \frac{1}{2} k x_i^2 + \frac{p_i^2}{2m} \right]$ . Faça uma função **[Emed,EDmed]=Osciladores\_classicos(N,E0,npassos,nequi)** que simula o sistema para uma energia total **E0** durante **npassos** e desprezando os primeiros **nequi** passos para se atingir o regime estacionário. Considere uma unidade de energia, **uE** arbitrária, uma unidade de massa, **uM=m** e uma unidade de tempo, **ut=sqrt(m/k)**, **unidade de temperatura, uT=uE/k<sub>B</sub>**. A unidade de velocidade é, **uv=sqrt(uE/uM)** e a de distância **uL=uV x uT**. Nestas unidades podemos escrever  $\mathcal{H} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N [x_i^2 + p_i^2]$ . Em cada passo considere uma perturbação aleatória  $[-\Delta, \Delta]$  da posição e velocidade de uma partícula escolhida ao acaso. Escolha  $\Delta = \sqrt{\frac{2E0}{10N}}$ . Em geral o parâmetro  $\Delta$  pode ser escolhido acertando o seu valor para obter uma fração de atualizações aceites igual a 0.5. Em cada passo considere  $N$  atualizações de modo a que uma partícula seja atualizada em média uma vez.
- b. Um sistema de  $N$  osciladores unidimensionais quânticos em que a energia do sistema vem dada por  $E = \frac{N\hbar\omega}{2} + \hbar\omega \sum_{i=1}^N n_i$  onde  $n_i = 0, 1, 2, \dots, n_{max}$  representa os números quânticos dos osciladores. Considere para unidade de energia, **uE =  $\hbar\omega$**  e unidade de temperatura **uT=uE/k<sub>B</sub>**. Construa a função:  
**[Emed,EDmed]=Osciladores\_quanticos(N,E0,npassos,nequi)** que simula o sistema para uma energia total **E0** durante **npassos**, desprezando os primeiros **nequi** passos para se atingir o regime estacionário. Em cada passo escolha um oscilador e proponha com igual probabilidade aumentar ou diminuir o seu número quântico  $n_i$  em 1 unidade. Faça  $N$  atualizações destas em cada passo.
- c. Faça um gráfico em que representa os valores numéricos obtidos para a energia média do sistema clássico e para a energia média do sistema quântico em função da temperatura. Para o sistema clássico em que a

energia do *demon* toma valores contínuos temos  $T = \overline{E_D}$  e para o sistema quântico para o qual a energia do *demon* toma valores discretos,  $E_D = 0, 1, \dots$  temos  $T = \frac{1}{\log(1+1/E_D)}$ . Considere nas simulações numéricas  $N=40$ ,  $n_{\text{passos}}=10000$  e  $n_{\text{eq}}=1000$  e valores de energia  $E_0=1:4:2*N+1$ . Compare também com os resultados analíticos,  $\bar{E} = Nk_B T$ , para o sistema clássico, e  $\bar{E} = N\hbar\omega \left( \frac{1}{2} + \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1} \right)$  para o sistema quântico.

### Sistemas de partículas em contacto com um reservatório térmico.

31. Para um gás ideal as coordenadas espaciais das partículas são independentes entre si e têm uma distribuição uniforme no interior do recipiente. Usando como unidade de distância o comprimento de um recipiente cúbico, podemos considerar que as coordenadas  $x, y$  são números aleatórios uniformes no intervalo  $[-1/2, 1/2]$  e a coordenada  $z$  no intervalo  $[-1, 0]$ . As velocidades das partículas seguem uma distribuição Gaussiana com variância  $T$  (nas unidades  $u_m = m; u_v = \sqrt{u_E/m}; u_T = u_E/k_B$ ). Usando geradores de números aleatórios gere estados de um sistema formado por  $N=1000$  partículas.

- Considere um elemento de área  $dA = \pi dr^2$  com  $dr = 0.01$  no centro da parede  $z=1$  do recipiente. Calcule, para 10000 estados do sistema, o fluxo médio de partículas,  $\Phi$ , que embatem no elemento de área após se deslocarem durante um tempo  $dt=0.01$ . Se o elemento de área fôr uma abertura no recipiente estas partículas abandonam o recipiente. Faça um estudo da variação desse fluxo com a temperatura,  $T$ . Mostre analiticamente que  $\Phi = \frac{N}{V} \sqrt{\frac{k_B T}{2\pi m}}$  e compare com os resultados numéricos.
- Adaptando o mesmo cálculo determine a força por unidade de área, exercida pelo choque das partículas com a parede, isto é, a pressão. Compare a variação da pressão com a temperatura com o esperado para um gás ideal.

32. Pretende-se fazer uma simulação de um gás ideal bidimensional de Bosões, em que as partículas estão confinadas a um quadrado de lado  $L$ , usando o algoritmo de Metropolis (no qual o sistema se encontra a temperatura  $T$  com número de partículas fixo). Os estados de um gás de Bosões podem ser especificados pelo número de Bosões,  $n_{\vec{k}}$  que têm um dado vetor de onda,  $k_x = \frac{\pi}{L}n_x$  e  $k_y = \frac{\pi}{L}n_y$  com  $n_x$  e  $n_y$  a tomar valores  $1, 2, \dots, \infty$ . A energia de um Bosão com vetor de onda  $\vec{k}$  é  $E_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$  onde  $m$  é a massa das partículas e  $\hbar$  é a constante de Planck dividida por  $2\pi$ . A simulação é feita escolhendo uma partícula com um dado vetor de onda  $\vec{k}$  e movendo essas partículas para um valor de  $\vec{k}$  vizinho próximo de maneira a que as variações de energia sejam pequenas e aceitando esta alteração respeitando *detailed balance* relativamente à distribuição de probabilidade estacionária dos estados do sistema. Os números quânticos  $1 \leq n_x \leq n_{max}$  e  $1 \leq n_y \leq n_{max}$  constituem uma rede quadrada com tamanho máximo de rede  $n_{max} = 50$  e sem condições fronteira periódicas. Pode usar-se um índice para especificar um dado valor de  $\vec{k}$ ,  $ik = n_x + n_{max} \times (n_y - 1)$  em lugar dos dois índices  $n_x$  e  $n_y$ . Por outro lado, dado  $ik$ , podemos obter os números quânticos  $n_x$  e  $n_y$  fazendo,  $n_x = \text{mod}(ik-1, n_{max})+1$  e  $n_y = \text{floor}((ik-1)/n_{max})+1$ ; . Use unidade de energia,  $u_E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}$  e uma unidade de temperatura,  $u_T = u_E/k_B$ .

a. Construa uma função

**function [Emedio,E2medio, nkmed] = metropolis(T,nequi, nmedidas, N, nmax)**

que simula o sistema usando o algoritmo de Metropolis:

(1) Inicialize todas as  $N$  partículas no estado  $i_k = 1$ . Use o vetor  $nk$  de dimensão  $n_{max}^2$  para registar o estado do sistema (número de partículas com vetor de onda  $\vec{k}$ ). Use um vetor auxiliar de dimensão  $N$ , **estado\_particula**, que regista o estado em que se encontra cada partícula. Inicialmente todas as partículas estão no estado 1. A energia inicial do sistema é  $E=2N$ .

(2) Para um total de  $n_{passos}=nequi+n_{medidas}$  com  $nequi$  igual ao número de passos para equilibrar e  $n_{medidas}$  igual ao número de passos para cálculo de médias temporais atualiza-se o estado do sistema  $N$  vezes em cada passo:

2a) Escolhe-se uma partícula  $ip$ , ao acaso do vetor **estado\_particula**. Suponha que essa partícula se encontra no estado  $ik$ .

2b) Propõe-se o movimento dessa partícula para um estado vizinho na rede quadrada de estados escolhendo um vizinho ao acaso e identificando o índice desse estado (aqui não se usam condições fronteira

periódicas). Seja esse estado vizinho o estado  $ikv$ . Calcula-se a variação de energia  $dE$ .

2c) Aceita-se o movimento da partícula com probabilidade:

$$p_A = \min\left(1, \frac{nv(ik)(nk(ikv) + 1)}{nv(ikv)nk(ik)} e^{-dE/T}\right)$$

2d) Caso seja aceite atualizam-se as variáveis  $E=E+dE$ ,  $nk(ik)=nk(ik)-1$ ,  $nk(ikv)=nk(ikv)+1$ , estado\_particula(ip)=ikv.

2e) Se o passo for maior que nequi fazem-se médias da energia na variável Emedio, do quadrado da energia na variável E2medio e do vetor nk na variável nkmedio.

- b. Considerando nequi=5000, nmedidas=20000 e N=100 partículas obtenha resultados de simulação para 30 temperaturas entre 3 e 300. Compare os resultados obtidos para Emedio-2N e para a fugacidade  $z$  (calculada a partir de nkmedio(1) usando a relação  $\langle n_1 \rangle = \frac{1}{z^{-1}-1}$  com os valores esperados para um gás de Bosões bidimensional ( nas unidades definidas):  $\langle E \rangle = \frac{\pi}{4} T^2 \text{Li}_2(1-z)$  e  $1-z = \exp\left(-\frac{4N}{\pi T}\right)$  onde  $\text{Li}_2(x)$  é a função di-logaritmica cujos valores podem ser obtidos em Matlab fazendo dlog(x). Faça gráficos que comparem os valores obtidos com os valores esperados. Calcule também a partir das simulações a capacidade térmica,  $C_V$ , do sistema em função da temperatura. Faça um gráfico em função da temperatura desta quantidade.

- c. Mostre analiticamente, usando a condição de equilíbrio detalhado, que a probabilidade de aceitar uma proposta definida acima garante que a distribuição estacionária de energia vem dada por  $P_{est}(\{n_k\}) \sim e^{-\beta E(\{n_k\})}$  como é esperado para um gás ideal de partículas indiscerníveis. Mostre ainda que se usar,

$$p_A = \min\left(1, \frac{nv(ik)}{nv(ikv)} e^{-dE/T}\right),$$

a distribuição estacionária vem dada por  $P_{est}(\{n_k\}) \sim \frac{e^{-\beta E(\{n_k\})}}{\prod_k n_k!}$  como se espera para partículas discerníveis. Tenha em atenção que escolher uma partícula ao acaso é equivalente a escolher um vetor  $\vec{k}$  com probabilidade proporcional ao número de partículas que têm esse vetor  $\vec{k}$ , isto é  $n_k$ .

33. Pretende-se simular um gás ideal de Bose-Einstein formado por  $N=200$  partículas confinado a uma caixa tridimensional cúbica de lado  $L$  em contacto térmico com um reservatório a temperatura  $T$ . Os estados de um gás de Bosões podem ser especificados pelo número de partículas,  $n_{\vec{k}}$  que têm um dado vetor de onda,  $k_x = \frac{\pi}{L} n_x$ ,  $k_y = \frac{\pi}{L} n_y$ ,  $k_z = \frac{\pi}{L} n_z$  com  $n_x$ ,  $n_y$  e  $n_z$  a tomar valores  $1, 2, \dots, \infty$ . A energia de um Bosão com vetor de onda  $\vec{k}$  é  $E_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$  onde  $m$  é a massa das partículas e  $\hbar$  é a constante de Planck dividida por  $2\pi$ . Considere uma unidade de energia,  $u_E = \frac{\hbar^2 4\pi^2}{2mL^2}$  e uma unidade de temperatura,  $u_T = u_E/k_B$  e uma unidade de distância,  $u_L = L$ . Nestas unidades o sistema sofre uma transição de fase conhecida por condensação de Bose-Einstein a uma temperatura,  $T_c = N^{2/3} \times \frac{3.31}{2\pi^2}$ . Estude o sistema para temperaturas entre  $T_c/10$  e  $2T_c$  em intervalos de  $T_c/20$ .

Inclua estados  $\vec{k}$  correspondentes a  $\sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2} < n_{max} = 60$ . Simule o sistema durante  $n_{passos}=20000$  e considere  $nequi=2000$  passos para equilíbrio.

Calcule, em função da temperatura, o número médio de partículas em cada estado  $\vec{k}$ ,  $\langle n_{\vec{k}} \rangle$ , a energia interna média,  $\langle E \rangle$  e a capacidade térmica,  $C_V$ , a fração de partículas no estado de mais baixa energia,  $f_0$ , e a fugacidade  $z$ .

Compare com os valores esperados para  $T < T_c$ ,  $\langle E \rangle/N = T_c \times 0.7701 \times (T/T_c)^{5/2}$ ,  $C_V/N = 1.925 \times (T/T_c)^{3/2}$ ,  $z = 1$ ,  $f_0 = 1 - (T/T_c)^{3/2}$ . A altas temperaturas compare com os valores esperados para um gás ideal clássico,  $\langle E \rangle/N = \frac{3}{2}T$ ,  $z_{GI} = 2.612 \times (T_c/T)^{3/2}$ .

34. Pretende-se fazer uma simulação de um gás ideal bidimensional de Fermiões, em que as partículas estão confinadas a um quadrado de lado  $L$ , usando o algoritmo de Metropolis (no qual o sistema se encontra a temperatura  $T$  com número de partículas fixo). Os estados de um gás de Fermiões podem ser especificados pelo número de Bosões,  $n_{\vec{k}}$  que têm um dado vetor de onda,  $k_x = \frac{\pi}{L} n_x$  e  $k_y = \frac{\pi}{L} n_y$  com  $n_x$  e  $n_y$  a tomar valores  $1, 2, \dots, \infty$ . A energia de um Bosão com vetor de onda  $\vec{k}$  é  $E_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$  onde  $m$  é a massa das partículas e  $\hbar$  é a constante de Planck dividida por  $2\pi$ . Considere uma unidade de energia,  $u_E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}$  e uma unidade de temperatura,  $u_T = u_E/k_B$ .

- a. Construa uma função,

function [Emedio,E2medio,nkmed]=metropolisFermioes(T,nequi,nmedidas,N,nmax)  
que simula o sistema usando o algoritmo de Metropolis.



- b. Considerando  $n_{\text{eq}}=5000$ ,  $n_{\text{medias}}=20000$ ,  $n_{\text{max}} = 60$  e  $N=100$  partículas obtenha resultados de simulação para 30 temperaturas entre 3 e 300. Compare os resultados obtidos para Emedio-2N e para a fugacidade  $z$  (calculada a partir de  $n_{\text{kmedio}}(1)$  usando a relação  $\langle n_1 \rangle = \frac{1}{z^{-1}+1}$  com os valores esperados das mesmas quantidades para um gás de Fermiões bidimensional ( nas unidades definidas):  $\langle E \rangle = -\frac{\pi}{4} \text{Li}_2(1+z)$  e  $1+z = \exp\left(\frac{4N}{\pi T}\right)$  onde  $\text{Li}_2(x)$  é a função di-logaritmica cujos valores podem ser obtidos em Matlab fazendo  $\text{dilog}(x)$ . Faça gráficos que comparem os valores obtidos com os valores esperados. Calcule também a partir das simulações a capacidade térmica,  $C_V$ , do sistema em função da temperatura. Faça um gráfico em função da temperatura desta quantidade

35. Pretende-se simular um gás ideal de Fermi-Dirac formado por  $N=200$  partículas confinado a uma caixa tridimensional cúbica de lado  $L$  em contacto térmico com um reservatório a temperatura  $T$ . Os estados de um gás de Fermiões podem ser especificados pelo número de partículas,  $n_{\vec{k}}$  que têm um dado vetor de onda,  $k_x = \frac{\pi}{L} n_x$ ,  $k_y = \frac{\pi}{L} n_y$ ,  $k_z = \frac{\pi}{L} n_z$  com  $n_x$ ,  $n_y$  e  $n_z$  a tomar valores  $1, 2, \dots, \infty$ . A energia de um fermião com vetor de onda  $\vec{k}$  é  $E_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$  onde  $m$  é a massa das partículas e  $\hbar$  é a constante de Planck dividida por  $2\pi$ . Considere uma unidade de energia,  $u_E = \frac{\hbar^2 4\pi^2}{2mL^2}$  e uma unidade de temperatura,  $u_T = u_E/k_B$  e uma unidade de distância,  $u_L = L$ . Nestas unidades, o estado de maior energia ocupado a  $T = 0$  é  $\varepsilon_F = \left(\frac{3N}{4\pi}\right)^{2/3}$  e a temperatura de Fermi é  $T_F = \left(\frac{3N}{4\pi}\right)^{2/3}$ . Inclua estados  $\vec{k}$  correspondentes a  $\sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2} < n_{\text{max}} = 60$ . Simule o sistema durante  $n_{\text{passos}}=20000$  e considere  $n_{\text{eq}}=2000$  passos para equilíbrio.

Calcule, em função da temperatura, para as temperaturas  $T_v=[T_F/20: T_F/20: 2 T_F]$ , o número médio de partículas em cada estado  $\vec{k}$ ,  $\langle n_{\vec{k}} \rangle$ , a energia interna média,  $\langle E \rangle$ , a capacidade térmica,  $C_V$ , o potencial químico em função da temperatura.

Compare com os valores esperados para  $T < T_F$ ,  $\langle E \rangle/N = \frac{3}{5} \varepsilon_F \left(1 + \frac{5\pi^2}{12} \left(\frac{T}{T_F}\right)^{5/2}\right)$ ,  $C_V/N = \frac{\pi^2}{2} \left(\frac{T}{T_F}\right)$ ,  $\mu = \varepsilon_F \left(1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{T}{T_F}\right)^2\right)$ . A altas temperaturas compare com os valores esperados para um gás ideal clássico,  $\langle E \rangle/N = \frac{3}{2} T$ ,  $C_V/N = \frac{3}{2}$ ,  $\mu = T \log\left(\frac{4}{3\sqrt{\pi}} \left(\frac{T_F}{T}\right)^{3/2}\right)$ .

### Propagação de epidemias

36. Considera uma rede aleatória (*random graph*) na qual existem vértices suscetíveis, infecciosos, e recuperados (modelo SIR). Os vértices suscetíveis podem tornar-se infecciosos a uma taxa  $\beta$  e os infecciosos podem recuperar a uma taxa  $\gamma$ . Faz um

programa que simula usando o método de Monte Carlo este modelo epidémico e compara com resultados disponíveis na literatura.

### Modelos de sistemas magnéticos

37. Simula o modelo Ising a uma dimensão usando o algoritmo de Metropolis para um sistema em contacto com um reservatório térmico a temperatura  $T$ . Usa uma unidade de energia  $u_E = J$  e uma unidade de temperatura,  $u_T = J/k_B$ , onde  $J$  é a constante de acoplamento entre spins. Considera  $N$  spins e um campo magnético externo nulo.
- Calcula a energia interna, a capacidade térmica, a magnetização e a susceptibilidade magnética. Compara com os resultados exatos para um sistema finito e um sistema infinito considerando sistemas de tamanho  $N = 20$  e  $N = 200$ .
  - Calcula o tamanho médio dos domínios a uma temperatura  $T=1$  e  $T=0.5$  e compara com a expressão teórica para o comprimento de correlação.
  - Porque é que o algoritmo de Metropolis é ineficiente a baixa temperatura?
38. Faz simulações do modelo Ising na rede quadrada, usando escalonamento em tamanho finito para obter uma estimativa dos expoentes  $\frac{\beta}{\nu}$ ,  $\frac{\gamma}{\nu}$  e  $\nu$ . Considera temperaturas próximo de  $T_c = 2.269 \dots$  e sistemas de tamanho  $L = 8, 16, 32$  e  $64$ .

### Percolação

39. Considera o problema de percolação de vértices numa rede quadrada, onde  $p$  é a probabilidade de um vértice estar presente. Considera sistemas de tamanho,  $L=8, 16, 32$  e  $64$ .
- Faz simulações para diferentes valores de  $p$  e 1000 amostras, tendo em conta que a probabilidade de percolação se espera ser próximo de  $p_c = 0.592$ . Calcula o parâmetro de ordem  $P_\infty = \frac{N_\infty}{N}$  onde  $N_\infty$  é o tamanho do maior agredado na rede e  $N$  é o número total de vértices para as diferentes simulações.
  - Faz um gráfico de  $F_\pm(x) = L^{\frac{\beta}{\nu}} P_\infty(p)$  em função de  $x = L|p - p_c|^\nu$  com  $\beta=5/36$  e  $\nu=4/3$ .
  - Faz um gráfico de  $N_\infty$  para  $p = p_c$  em função do tamanho do lado do sistema,  $L$ , em escala log-log e determina deste modo a dimensão fractal dos agregados,  $d_f$ . Compara com o valor esperado,  $d_f = \frac{91}{48}$ .