Departamento de Física
UNIVERSIDADE DE AVEIRO

Modelação em Física Estatística

2019.03.27

1º teste

1. Considera um canal 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).

a) **(2 valores)** 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, determina os valores da probabilidade conjunta $p_{X,Y}(x,y)$. Os valores da função podem ser dados como uma tabela.

Resolução: 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:

<table>
<tr><td colspan="2" rowspan="2">$p_{X,Y}(x,y)$</td><td colspan="2">y</td></tr>
<tr><td>0</td><td>1</td></tr>
<tr><td rowspan="2">x</td><td>0</td><td>$q(1-p)$</td><td>$q\,p$</td></tr>
<tr><td>1</td><td>$(1-q)\,p$</td><td>$(1-q)(1-p)$</td></tr>
</table>

b) **(1 valor)** Mostra a partir de $p_{X,Y}(x,y)$ que:

$p_X(x)=q\,\delta_{x,0}+(1-q)\delta_{x,1}$ e $p_Y(y)=\left(q(1-p)+(1-q)p\right)\delta_{y,0}+\left(q\,p+(1-q)(1-p)\right)\delta_{y,1}$ onde $\delta_{x,y}$ representa o delta de Kronecker.

Resolução: 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:

$$p_X(0)=q(1-p)+q\,p=q \quad \text{e} \quad p_X(1)=(1-q)\,p+(1-q)(1-p)\,p=1-q \quad .$$

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:

$$p_Y(0)=q(1-p)+(1-q)\,p=A \quad \text{e} \quad p_Y(1)=(1-q)(1-p)+q\,p=1-A \quad \text{com} \quad A=q+p-2qp \quad .$$

c) **(3 valores)** Mostra que a informação mútua $I_{X,Y}$ se pode escrever na forma:

$$I_{X,Y}=(1-p)\log_2(1-p)+p\log_2 p-A\log_2 A-(1-A)\log_2(1-A) \quad \text{com} \quad A=q+p-2qp \quad .$$

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

obtendo:

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

que se pode escrever como,

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

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) **(2 valores)** Determina a capacidade do canal de informação definida como $C=max_q I_{X,Y}$. Comenta a dependência de *C* na probabilidade p .

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

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

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

Como $A=q+p-2qp$ podemos escrever $q(1-2p)=1/2-p$ obtendo $q=\frac{1/2-p}{(1-2p)}=1/2$.

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 $p=1$ quando não há erros na transmissão ou quando todas as transmissões têm erro e toma o valor 0 quando $p=1/2$.

2. Pretende-se fazer uma simulação de um gás de fotões bidimensional, confinado a um quadrado de lado L, usando o algoritmo *Demon*. Os estados de um gás de fotões são especificados pelo número de fotões, $n_{\vec{k}}$ que têm um dado vetor de onda, $k_{x,y}=\frac{\pi}{L}n_{x,y}$ e $n_{x,y}=1,2,\ldots,\infty$. A energia de um fotão com vetor de onda $\vec{k}$ é $E=\hbar c k$ onde c é a velocidade da luz e $\hbar=\frac{h}{2\pi}$ é a constante de Planck dividida por 2π .

a) Mostra que se a energia total fôr E_0 podemos fazer simulações considerando $n_{x,y}<n_{max}=ceil\left(\sqrt{\left(\frac{2LE_0}{hc}\right)^2-1}\right)$.

Resolução: Pretendemos encontrar o maior $n_{x,y}=n_{max}$ tal que a energia de fotões com $n_x\leq n_{max}, n_y=1$ ou $n_y\leq n_{max}, n_x=1$ é inferior a E_0 . Esse valor é dado pela condição $E_0=\frac{hc}{2L}\sqrt{n_{max}^2+1}$ e portanto $n_{max}=\sqrt{\left(\frac{2LE_0}{hc}\right)^2-1}$. Deste modo todos os fotões não considerados, $n_{x,y}>n_{max}$, têm uma energia superior a E_0 e portanto não podem ser criados durante a simulação.

b) **(alínea a+ alinea b – 6 valores)** Escreve um programa para fazer uma simulação de Monte Carlo usando o algoritmo do Demon de um gás de fotões a duas dimensões. Um estado do gás é especificado pelo número de fotões de cada tipo (n_x,n_y) , registado numa matriz **nk** de dimensão $n_{max}\times n_{max}$.

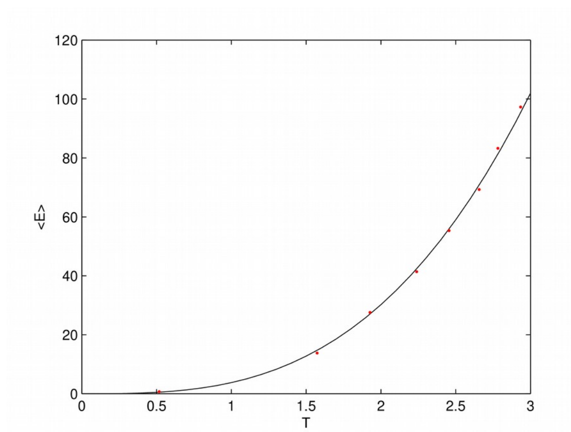
Usa um valor de $n_{max}=min\left(\left[ceil\left(\sqrt{\left(\frac{2LE_0}{hc}\right)^2-1}\right),50\right]\right)$. A variável $nk(n_x,n_y)$ regista o número de fotões com energia $E=\frac{hc}{2L}n$, com $n=\sqrt{n_x^2+n_y^2}$. Considera a unidade de energia, $u_E=\frac{hc}{2L}$, e uma unidade de temperatura, $u_T=u_E/k_B$. Para atualizar o estado do sistema escolhe aleatóriamente um tipo de fotão, $1\leq n_{x,y}\leq n_{max}$ e propõe, com igual probabilidade, aumentar ou diminuir o número de fotões desse tipo em uma unidade. O número de fotões, $nk(n_x,n_y)$, é sempre uma quantidade positiva ou nula. Em cada passo de Monte Carlo consideram-se n_{max}^2 atualizações do estado do sistema. O programa deverá permitir escolher a energia total do sistema E_0 . Considera como estado inicial aquele em que não existem fotões no sistema e $E_D=E_0$. Despreza os `nequi=2000` passos iniciais e calcula médias considerando as `nmedidas=10000` efetuadas nos passos seguintes. É conveniente programar uma função:

[Emedio,Edmedio]=fprob2b(E0,nequi,nmedidas) que faz os cálculos para cada valor de E_0 .

Resolução: Ver ficheiro prob2.m e fprob2.m

c) **(3 valores)** Calcula numericamente a energia interna, em regime estacionário, do gás de fotões em função da temperatura medida pelo Demon, $T=\frac{\langle E_D\rangle}{k_B}$, e compara com a expressão teórica esperada: $\langle E\rangle=\frac{4\pi(k_B T)^3 L^2}{(hc)^2}1.20206$. Faz uma representação gráfica das duas quantidades usando as unidades definidas na alínea anterior. Como a energia do Demon não varia continuamente, a expressão $T=\langle E_D\rangle$, em unidades de u_E e u_T é aproximada. Obtêm-se melhores resultados usando $T=\langle E_D\rangle-0.2$. Considera 8 valores de E_0 entre $\sqrt{2}$ e $80\sqrt{2}$. As temperaturas calculadas numéricamente, em unidades de u_T estão no intervalo [0,3].

Resolução: ver ficheiro prob2.m. A figura seguinte compara o resultado numérico para a energia interna do gás em função da temperatura com a expressão analítica.



d) **(3 valores)** Para uma configuração gerada num dado passo, calcula o número de fotões com energia entre ε e $\varepsilon+d\varepsilon$, $N(\varepsilon,d\varepsilon)$. Para isso convém definir previamente os vetores:

```
E=sqrt(2):sqrt(2):sqrt(nmax^2+1); % define o vetor de energias
ne=zeros(length(E),1); % regista o número de fotões com uma dada energia
iE=zeros(nmax,nmax); % faz a correspondencia entre (nx,ny) e a energia
for nx=1:nmax
   for ny=1:nmax
       iE(nx,ny)=floor((sqrt(nx^2+ny^2)-E(1))/(E(2)-E(1)))+1;
   end
end
```

No final de cada passo, em regime estacionário, calcula-se:

```
for nx=1:nmax
        for ny=1:nmax
            if(iE(nx,ny)<=length(E))
              % acumula valores para calculo de medias
              ne(iE(nx,ny))=ne(iE(nx,ny))+nk(nx,ny);
            end
        end
 end
```

ou seja, acumulam-se o número de fotões com energia dentro de cada intervalo de energia. No final da simulação calcula-se a média: `ne=ne/nmedidas;`

Compara a média, em regime estacionário, desta quantidade com o resultado esperado $N(\varepsilon, d\varepsilon)=\frac{2\pi L^2}{(hc)^2}\frac{\varepsilon}{e^{\beta\varepsilon}-1}d\varepsilon$ para 3 temperaturas correspondentes a $E_0=20\sqrt{2}$, $50\sqrt{2}$ e $80\sqrt{2}$. A quantidade $N(\varepsilon, d\varepsilon)$ é a distribuição de Planck para um gás de fotões bidimensional.

Resolução: ver ficheiro prob2.m e função fprob2d.m. O resultado da comparaçãoentre a expressão teórica para o número médio de fotões com uma dada energia $N(\varepsilon, d\varepsilon)$ e o cálculo numérico, para as 3 temperaturas, encontra-se na figura seguinte: