

Departamento de Física UNIVERSIDADE DE AVEIRO

Modelação e Física Estatística

2020.06.04

2º teste

- 1. (10 valores) Considera uma partícula que se desloca ao longo do eixo dos xx com uma energia potencial dada por $V(x) = 0.2 x x^2 + 2 x^4$.
 - a. Faz uma função que simula o sistema usando o algoritmo de Metropolis, para um sistema que se encontra a uma temperatura T, perturbando os valores da posição x pela adição de um número aleatório com distribuição uniforme no intervalo $\left[\frac{-dx}{2},\frac{dx}{2}\right]$ com dx=0.5. A função deve ter como entrada a temperatura, T, o número total de passos, npassos, e o número de passos para atingir o equilíbrio, nequi. Na saída a função deve ter o histograma normalizado das posições da partícula em regime estacionário calculado nos pontos xh=-2:0.05:2; e a energia potencial média da partícula.
 - b. Faz um script que simula o sistema para temperaturas Tv=[0.01:0.05:2]; para um número de passos, npassos=10⁶; e número de passos para equilibrar, nequi=10⁴; e compara os resultados obtidos para o histograma normalizado com a distribuição de probabilidade estacionária esperada (também igualmente normalizada). Faz também um outro gráfico da energia potencial média em função da temperatura.
- 2. (10 valores) Usando as funções programadas nas aulas práticas para gerar grafos aleatórios e determinar as componentes presentes no grafo, faz os seguintes cálculos:
 - a. Considera grafos com N=10⁴ vértices⁷ (só 10³ para teste) e com grau médio c dado por cv=0.5:0.1:2. Representa a fração, S, do número total de vértices pertencentes à componente gigante em função de c e compara com o valor teórico que é solução da equação $S_{teorico} = 1 e^{-cS_{teorico}}$. Para resolver esta equação não linear para $S_{teórico}(c)$ usa a função:

```
\begin{array}{c} \text{function St=pfixo(c)} \\ \text{St=1; dS=1; lambda=0.1;} \\ \text{while dS>1e-7} \\ \text{Sto=St;} \\ \text{St=Sto-lambda*(Sto-1+exp(-c*Sto));} \\ \text{dS=abs(St-Sto);} \\ \text{end} \\ \end{array}
```

b. Calcula o tamanho médio da componente pequena à qual pertence um vértice escolhido ao acaso ou seja $\langle s \rangle = \frac{\sum_{i=1}^n [s(i)]^2}{\sum_{i=1}^n s(i)}$ onde s(i) é o número de vértices pertencentes à componente pequena i e n é o número de componentes pequenas. Nota que nestas somas não deve ser contada a contribuição da componente gigante (a maior). Representa num gráfico esta quantidade em função de c. Coloca no mesmo gráfico resultados para grafos de diferentes tamanhos.