

Exercícios

Conceitos de Estatística e Probabilidade

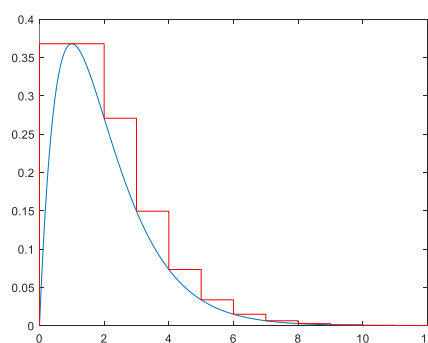
1.

- Usando o método de transformação de variáveis crie um programa que gera números aleatórios θ 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 $0 \leq x \leq \infty$. 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](#)).

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

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

4. 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 $p = 1$.

5. 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 $\text{var} Y = N \text{var} X$. 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 $w_S(-a) = 1 - q$

- 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 $q = 0.5$.
- Mostre que a distribuição de probabilidade de X , no passo n , obedece a:
$$p(x, n + 1) = p(x - a, n)q + p(x + a, n)(1 - q)$$
- 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 λ (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 α 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,

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

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. Compare com o previsto pelo Teorema de Shannon
 - Faça um programa que implementa o algoritmo de Huffman para determinar um código instantâneo ótimo para um dado conjunto de caracteres e uma determinada distribuição de probabilidade desses caracteres.

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, $p_X(0) = q(1-q) + qp = q$ 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 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 ε de não ser transmitido vem dada por $C = 1 - \varepsilon$.

20. Calcule a capacidade de um cana 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. Ensemble Micro-canónico.

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 $E = 3N\hbar\omega \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1}\right)$

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 ε e σ) 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 $p_x = 1/\sqrt{\varepsilon m}$, $p_y = 0$.

Faça uma animação mostrando a posição e velocidade das partículas ao longo do tempo usando o passo de integração, $dt = 0.01 \sqrt{m/\varepsilon}$. 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 $T_C = 1.326(2)\varepsilon/k_B$ 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 ρ_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 equilíbrio. 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 ε/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-

Ihe 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.

- 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 forma $p(v) = \frac{4\pi v^2}{(2\pi T)^{3/2}} e^{-\frac{v^2}{2T}}$.
- 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 fótons bidimensional, confinado a um quadrado de lado L , usando o algoritmo do *demon*. Os estados de um gás de fótons, partículas indiscerníveis, são especificados pelo número de fótons, $n_{\vec{k}}$ 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 fóton 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 2π . Podemos usar para unidade de energia, $u_E = \frac{\hbar c}{2L}$ e uma unidade de temperatura $u_T = \frac{u_E}{k_B}$.

- Mostre que se a energia total for E_0 podemos fazer simulações considerando $n_{x(\text{ou } y)} < n_{\max} = \left\lfloor \sqrt{\left(\frac{2LE_0}{\hbar c}\right)^2 - 1} \right\rfloor$.
- Escreve um programa para simular o gás de fótons 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 fótons 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 fóton (o valor de \vec{k} define o tipo do fóton) e de um incremento ou diminuição em uma unidade do seu número tendo em atenção que o número de fótons de cada tipo não pode ser negativo. Calcula a temperatura do gás de fótons através da energia média do *demon*, $T = \overline{E_D}$ em regime estacionário e mostra que \overline{E} observada para o gás de fótons segue o resultado analítico, $\overline{E} = 1.20206 \frac{4\pi L^2 T^3 k_B^3}{(\hbar c)^2}$.
- Calcula em regime estacionário o número médio de fótons com energia entre ε e $\varepsilon + d\varepsilon$, $N(\varepsilon)d\varepsilon$ comparando com o valor esperado para a distribuição de Planck de um gás de fótons a duas dimensões,

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

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_B**. 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 Δ 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_B**. 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 $T = \frac{1}{\log(1+1/\overline{E_D})}$. 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. Ensemble Canónico.

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, Φ , 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 2π . 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 $\text{dilog}(x)$. 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.
- 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 2π . Considere uma unidade de energia, $u_E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}$ e uma unidade de temperatura, $u_T = u_E/k_B$ 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, $T_C = 0.671253 \times N^{2/3}$. Estude o sistema para temperaturas entre $T_C/10$ e $2T_C$ em intervalos de $T_C/20$.

Inclua estados \vec{k} correspondentes a $n_{max} = 60$. Simule o sistema durante npassos=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 2π . 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 $n_{\text{qui}}=5000$, $n_{\text{medias}}=20000$, $n_{\text{max}} = 60$ 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 2π . 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 $n_{\text{qui}}=2000$ 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, $\langle E \rangle/N = \frac{3}{2} T$, $C_V/N = \frac{3}{2}$, $\mu = T \log\left(\frac{4}{3\sqrt{\pi}} \left(\frac{T_F}{T}\right)^{3/2}\right)$.

Sistemas de partículas em contacto com um reservatório térmico e um reservatório de partículas. Ensemble Grande-canónico.

36. Considera um gás de rede (lattice-gas) numa rede quadrada onde cada sítio i , $1 \leq i \leq V = L^2$ pode estar ocupado por uma partícula ou estar vazio. As partículas são indistinguíveis. Na versão mais simples a única interação entre partículas deriva de não ser permitido ter mais que uma partícula em cada sítio. Queremos estudar este sistema no ensemble grande-canónico usando o método de Monte Carlo.

Para isso podemos usar o seguinte algoritmo:

- Com probabilidade $1/2$ removemos uma partícula escolhendo uma das partículas ao acaso e aceitamos a remoção com uma probabilidade $\min\left(1, \frac{N}{V} \exp(-\beta(\Delta E + \mu))\right)$, com $\Delta E=0$, no caso a estudar.
- Com probabilidade $1/2$ adicionamos uma partícula escolhendo um sítio ao acaso e aceitando a adição com probabilidade $\min\left(1, \frac{V}{N+1} \exp(-\beta(\Delta E - \mu))\right)$ onde ΔE é infinito se o sítio já estiver ocupado.

Responde às seguintes questões fazendo programas de computador:

- Mostra que as probabilidades de aceitar as perturbações propostas verificam a condição de equilíbrio detalhado.
- Faz um programa que simula um sistema na rede quadrada com $V=100$, $\beta\mu=1$, número total de passos por sítio, 5×10^4 . Despreza os 10^3 passos iniciais para se atingir o regime estacionário. Em cada passo são feitas V perturbações do estado do sistema. Calcula em regime estacionário a probabilidade de se observar uma densidade N/V , isto é $P(N/V)$ e a densidade média $\frac{\bar{N}}{V}$.
- Fazendo simulações para vários valores de $\beta\mu$, e $V=100$, mostra que $P(N/V)$, segue uma

densidade de probabilidade Gaussiana, $P\left(\frac{N}{V}\right) = \frac{V}{\sigma_N \sqrt{2\pi}} e^{-V^2 \frac{(\frac{N}{V} - \frac{\bar{N}}{V})^2}{2\sigma_N^2}}$ com $\bar{N} = V \frac{e^{\beta\mu}}{1+e^{\beta\mu}}$ e $\sigma_N^2 = V \frac{e^{\beta\mu}}{(1+e^{\beta\mu})^2}$.

37. Faz uma simulação do gás ideal clássico tridimensional no ensemble grande-canónico a várias temperaturas usando uma unidade de energia $u_E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}$ e mostra que fixando o potencial químico de acordo com $z = \exp\left(\frac{\mu-3}{T}\right) = \frac{8}{\pi^{3/2}} \frac{\langle N \rangle}{T^{3/2}}$ o número de partículas médio se mantém constante (considera um número inicial de 200 partículas). Mostra também que o valor da fugacidade se obtém neste caso de $z = \langle n_1 \rangle$. Mostra também que os valores observado da energia média seguem a lei, $\langle E \rangle / N = \frac{3}{2} T$.

Propagação de epidemias

38. Considera o numero de infecciosos ativos ao longo do tempo numa epidemia, que ocorreu numa população de 763 indivíduos (colégio interno),

$[t;i]=[0,1,2,3,4,5,6,7,8,9,10,11,12,13,14; 1, 3, 7, 25, 72, 222, 282, 256, 233, 189, 123, 70, 25, 11, 4]$. Ajusta o modelo SIR aos dados e obtém os parâmetros β e γ que melhor se ajustam. Calcula o valor de R_0 desta epidemia e a percentagem da população que contactou com o vírus antes de se estabelecer a imunidade de grupo.

- 39.** 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 β e os infecciosos podem recuperar a uma taxa γ . 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

- 40.** 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?
- 41.** 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 ν . Considera temperaturas próximo de $T_c = 2.269 \dots$ e sistemas de tamanho $L = 8, 16, 32$ e 64 .

Percolação

- 42.** 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_∞ é o tamanho do maior agredado na rede e N é o número total de vértices para as diferentes simulações.

- b. 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 $\nu=4/3$.
- c. Faz um gráfico de N_{∞} 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, $d_f = \frac{91}{48}$.