Departamento de Física
UNIVERSIDADE DE AVEIRO

Modelação e Física Estatística

2020.04.16

1º teste

1. (5 valores) Pretendemos gerar **n=10000** números aleatórios com a distribuição de probabilidade,

$$p_X(x) = \begin{cases} 4\left(x-\frac{3}{2}\right) \Leftarrow \frac{3}{2} \le x \le 2 \\ -4\left(x-\frac{5}{2}\right) \Leftarrow 2 < x \le \frac{5}{2} \\ 0 \Leftarrow x < \frac{3}{2} \vee x > \frac{5}{2} \end{cases},$$

Escreve um programa que gera estes números aleatórios e mostra que o histograma normalizado dos números aleatórios obtidos concorda com $p_X(x)$. Podes usar, por exemplo, o método da transformação de variáveis, sabendo que a função de probabilidade cumulativa de X, vem dada por,

$$F_X(x) = \begin{cases} 0 \Leftarrow x < \frac{3}{2} \\ 2\left(x-\frac{3}{2}\right)^2 \Leftarrow \frac{3}{2} \le x \le 2 \\ 1-2\left(x-\frac{5}{2}\right)^2 \Leftarrow 2 < x \le \frac{5}{2} \\ 1 \Leftarrow x > \frac{5}{2} \end{cases},$$

ou, podes usar o método da aceitação/rejeição, também trabalhado nas aulas práticas.

2. (15 valores) Considera um sistema formado por N partículas (número par) que se podem encontrar em duas caixas, designadas caixa 1 e caixa 2. Uma partícula na caixa 1 tem energia $-\varepsilon$ e uma partícula na caixa 2 tem energia ε. Usa uma unidade de energia $u_E = \varepsilon$ e uma unidade de temperatura $u_T = u_E/k_B$. A energia total, E_0 toma valores inteiros pares

negativos (em unidades de u_E) . A energia do Demon, $E_{D,}$ toma valores 0, 2, 4, … (para N par e E_0 par) e a relação entre energia média e temperatura do Demon é, $T = \frac{2}{\log \frac{\overline{E_D}+2}{\overline{E_D}}}$.

a. (6 valores)Escreve uma função que simula este sistema usando o algoritmo do *Demon*, considerando as partículas discerníveis, ou seja, considerando como um estado do sistema a especificação da caixa em que se encontra cada partícula. Este estado pode escrever-se como $(s_1, s_2, \dots., s_N)$ em que $s_i = -1$ (partícula *i* na caixa 1) ou $s_i = 1$ (partícula i na caixa 2). A energia de um estado do sistema é então $E = \varepsilon \sum_{i=1}^{N} s_i$. Uma perturbação do estado consiste em escolher uma partícula ao acaso e mover a partícula de uma caixa para a outra, ou seja, fazer $s_i = -s_i$ com uma variação de energia $\Delta E = -2\, \varepsilon\, s_i$. A função deve considerar um sistema formado por **N** partículas, uma energia total, **E0**, deve fazer **npassos** de atualização, desprezando os primeiros **nequi** passos e calculando, nos restantes passos, a média da energia do sistema, **Emed** e do *Demon*, **EDmed**. Em cada passo deve ser atualizado o estado de cada partícula uma vez em média, ou seja, devem ser feitas **N** atualizações do estado do sistema. A função escrever pode ter a sintaxe **[Emedio,EDmedio]=fteste1_2a(N,E0,nequi, npassos).**

b. (5 valores) Escreve uma função que simula este sistema usando o algoritmo do *Demon*, considerando as partículas indiscerníveis, ou seja, considerando como um estado do sistema a especificação do número de partículas na caixa 1, n_1 e do número de partículas na caixa 2, $n_2 = N - n_1$. Em termos destas variáveis a energia do sistema é $E = \varepsilon(n_2 - n_1)$. Uma perturbação do estado consiste em escolher uma das duas caixas ao acaso e mover a partícula para a outra caixa. O número de partículas em cada caixa não pode diminuir se for igual a zero nem pode aumentar se for igual a N. Em cada passo deve ser atualizado uma vez, em média, o número de partículas em cada caixa. A função deve calcular , a média da energia do sistema, **Emed** e do *Demon*, **EDmed** para as mesmas variáveis de entrada do caso a. A função escrever pode ter a sintaxe, **[Emedio,EDmedio]=fteste1_2b(N,E0,nequi, npassos)**

c. (4 valores) Cria um script teste1_2c.m que faz simulações usando as funções escritas em 2.a e 2.b para **N=100** partículas, para valores de **E0=[-N+N/10:N/10:-N+9*N/10]** e **nequi=1000; npassos=10000;** para a simulação da alínea 2.a e **nequi=10000; npassos=100000;** para a simulação da alínea 2.b.

Faz dois gráficos separados que comparam os resultados da simulação para a energia média do sistema, no caso de partículas discerníveis (alínea 2.a) com $\bar{E} = -N \tanh\frac{1}{T}$ e para o caso de partículas indiscerníveis (alínea 2.b) com $\bar{E} = -N + \frac{2}{e^{\frac{2}{T}}-1}$ (nas unidades de energia e temperatura definidas no enunciado).