Departamento de Física
UNIVERSIDADE DE AVEIRO

Modelação e Física Estatística

2020.09.02, 10h, sala 10.2.5

Exame Época Especial
Duração: 3h

1. (4 valores) Pretende-se gerar números aleatórios com a densidade de probabilidade, $p_L(x) = \frac{\pi}{L}\sin\left(\frac{2\pi}{L}x\right),\ 0 \le x \le \frac{L}{2}$.
   a. Faz uma função function x=ex1a(L,n) que devolve um vetor x de n números aleatórios, com a distribuição pretendida.
   b. Faz um script ex1b.m que calcula 10000 números aleatórios usando a função desenvolvida na alínea anterior. Faz um histograma normalizado e compara o resultado com $p_L(x)$ para $L = 2$.

2. (8 valores) Pretende-se fazer uma simulação de um sistema de N osciladores quânticos, de frequência angular, ω, em contacto com um reservatório de energia a uma temperatura T. A energia do sistema vem dada por, $E = N\frac{\hbar\omega}{2} + \hbar\omega\sum_{i=1}^{N} n_i$, onde $0 \le n_i \le \infty$, são números quânticos que tomam valores inteiros no intervalo especificado. Considera uma unidade de energia, $u_E = \hbar\omega$ e uma unidade de temperatura $u_T = \frac{u_E}{k_B}$.
   a. Faz uma função ex2a(N,T, nmedidas, nequi) que simula o sistema usando o algoritmo de Metropolis a uma temperatura T fazendo um número de medidas nmedidas e desprezando os nequi passos iniciais para que o sistema atinja uma distribuição de equilíbrio a uma temperatura T. A saída da função deve ser a energia média.
   b. Faz um script ex2b.m que faz simulações do sistema com $N = 100$, temperaturas entre 0.1 e $T_{max} = 2$, nmedidas=10000 e nequi=1000. Compara com a expressão teórica para a energia média, $\langle E\rangle = N\hbar\omega\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_BT}}-1}\right)$ representando os resultados da simulação para diferentes temperaturas e esta função no mesmo gráfico.

3. (8 valores) Numa rede de N sítios, a uma dimensão espacial, com condições fronteira periódicas, existem, em cada sítio, pessoas que podem ser suscetíveis a uma infeção (S) ou estar infetadas (I). Com uma taxa de probabilidade $\omega(S \to I) = \lambda \, n_I$, onde λ representa uma probabilidade por unidade de tempo e $0 \leq n_I \leq 2$, o número de vizinhos próximos infetados, uma pessoa suscetível pode ficar infetada. Com uma taxa de probabilidade $\omega(I \to S) = \gamma$ uma pessoa infetada recupera tornando-se imediatamente suscetível (modelo SIS). Um estado do sistema é especificado indicando o estado de cada pessoa $\vec{s} = (s_1, \dots, s_i, \dots, s_N)$ com $s_i = 0$ uma pessoa suscetível, $s_i = 1$, uma pessoa infetada . Vamos considerar o caso $0 < \tilde{\gamma} = \frac{\gamma}{\lambda} < 1$. Na configuração inicial cada sítio está infetado com probabilidade p.
   a. Faz uma função ex3a.m que simula uma cadeia de Markov de acordo com o seguinte algoritmo: **1)** Dado N, p $\tilde{\gamma}$, e o número de passos, npassos **2)** Constrói o estado inicial $\vec{s_0}$ 2) Em cada passo fazem-se N atualizações 3) Cada atualização corresponde a: a) escolher uma pessoa ao acaso b) se a pessoa for suscetível passar a infetada com probabilidade $\frac{n_I}{2}$ c) se a pessoa estiver infetada passa a suscetível com probabilidade $\frac{\tilde{\gamma}}{2}$ **3)** repetir 2) e 3) por npassos **4)** Em cada passo regista-se o número de pessoas infetadas observado e define-se o tempo de cada passo como $\mathrm{t(passo + 1) = t(passo)} \ + \frac{1}{2}$. O output da função deve ser o número de pessoas infetadas em cada passo e o vetor com os tempos correspondentes.

   b. Faz um script ex3b.m que usa a função anterior para simular um sistema de $N = 10^2$ partículas para valores de $0 \leq \tilde{\gamma} \leq 1$ começando com toda a população infetada. Simula durante 1000 passos e usa os últimos 100 para cálculo da estimativa do valor estacionário médio da fração de pessoas infetadas na população. Representa graficamente esta quantidade em função de $\tilde{\gamma}$.