CDP7600 - TÓPICOS DE FÍSICA TEORICA I
Professor - Saulo Davi Soares e Reis
Programa de pós-graduação em física
Universidade Federal do Ceará (UFC)

Lista 1

Métodos de Monte Carlo

Aluno: Antonio Mauricio Rocha Alencar Júnior Matrícula: 561824
Aluno: Carlos Germano Lima de Sousa Matrícula: 551955

GitHub

Conteúdo

Página

Questão 1

Enunciado: Em sistemas termodinâmicos, a distribuição de Boltzmann descreve a probabilidade de encontrar um sistema em um estado específico com energia E. Este conceito é fundamental em diferentes níveis de energia. Considere a distribuição de Boltzmann para o problema do oscilador harmônico *clássico*:

$$P(x) \propto e^{-\beta E(x)}, \quad \text{com} \quad E(x) = \frac{1}{2}kx^2, \tag{1}$$

onde $\beta = 1/k_B T$, k_B é a constante de Boltzmann e T é a temperatura. Sob estas condições, a distribuição de equilíbrio para a coordenada x é gaussiana, com média zero e variância $\sigma^2 = 1/\beta k$.

Item (a)

Enunciado: Gere valores aleatórios de x a partir de uma distribuição uniforme e aceite-os com probabilidade proporcional a $P(x)$ (método da rejeição). Assim, obtém-se uma amostra de valores x que devem refletir a distribuição de Boltzmann.

No processo de *Rejecting Sampling* foi implementado com uma distribuição uniforme para decidir quais valores seriam aceitos. A função utilizado para esse processo foi

$$g(x) = \frac{1}{2a} \quad \text{com} - a \leq x \leq a, \tag{2}$$

adotando $M = 50$ e $a = 10$, para que a inequação $P(x) \leq Mg(x)$, $\forall x$, com $P(x)$ dada pela Eq. (1).

Item (b)

Enunciado: Crie um histograma dos valores simulados de x e normalize-o para estimar a densidade de probabilidade empírica.

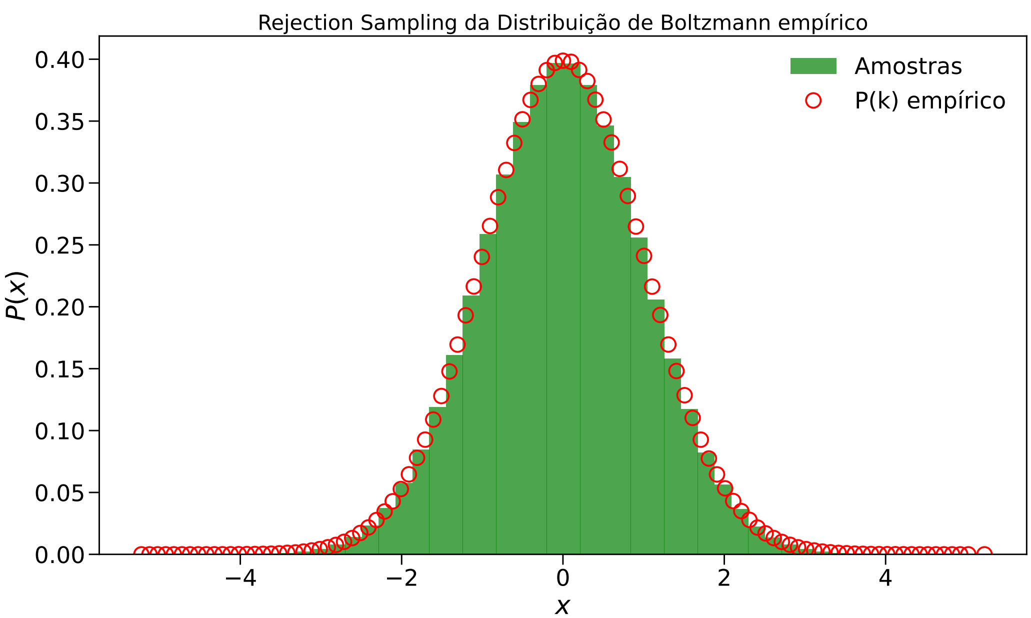

Figura 1: Histograma para a distribuição de amostras após o processo de *Rejecting Sampling*. Foi utilizado $N_s = 10^7$ amostras. Os círculos vermelhos representam a distribuição normalizada oriunda do histograma. Foi utilizado $k = k_B = T = 1$, nos dando $\beta = 1$.

item (c)

Enunciado: Sobreponha a curva teórica da distribuição de Boltzmann, dada por:

$$P_{teórica}(x) = \sqrt{\frac{\beta k}{2\pi}} exp\Big(-\frac{\beta k x^2}{2}\Big). \tag{3}$$

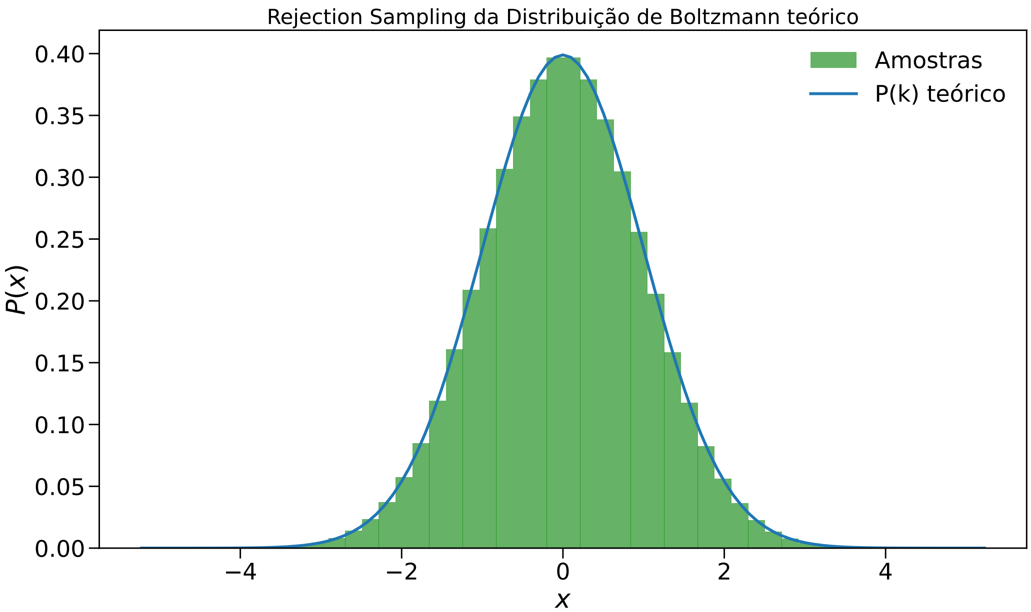

Figura 2: Histograma para a distribuição de amostras após o processo de *Rejecting Sampling*. A curva azul representa a curva teórica dada pela Eq. (3). Foi utilizado $k = k_B = T = 1$, nos dando $\beta = 1$.

Item (d)

Enunciado: Calcule a média e a variância da amostra obtida e compare com os valores teóricos:

$$\mathbb{E}[x] = 0, \quad Var(x) = \frac{1}{\beta k}, \tag{4}$$

Com o conjunto de amostras aceitas através do *Rejecting Sampling*, nós obtemos

$$\mathbb{E}_{emp}[x] = 0.00029, \quad Var_{emp}(x) = 0.99932, \tag{5}$$

comparando com o teórico, tendo $Var(x) = 1/k\beta = 1$:

$$\begin{cases} \Delta\mathbb{E} = |\mathbb{E}_{teo} - \mathbb{E}_{emp}| = 0.00029, \\ \Delta Var = |Var_{teo} - Var_{emp}| = 0.00068. \end{cases} \tag{6}$$

Item (e)

Enunciado: Realize os teste estatísticos de Kolmogorov-Smirnov (K-S) e qui-quadrado para avaliar quantitativamente se as amostras são consistentes com a distribuição teórica.

Ao realizar o teste de Kolmogorov-Smirnov obtivemos o parâmetro D do teste KS $D = 0.0288461538$ com p-value $= 1.00$, enquanto o $\chi^2 = 0.0000102625$ com p-value $= 1.00$.

Item (f)

Enunciado: Crie um Q-Q plot para fornecer uma ferramenta visual adicional de comparação entre a distribuição empírica e a distribuição teórica. Dessa forma, além de inspeção visual (histograma e curva teórica), a média, a variância, bem como testes estatísticos e o Q-Q plot, fornecerão evidências quantitativas e gráficas da qualidade da aproximação Monte Carlo à solução analítica.

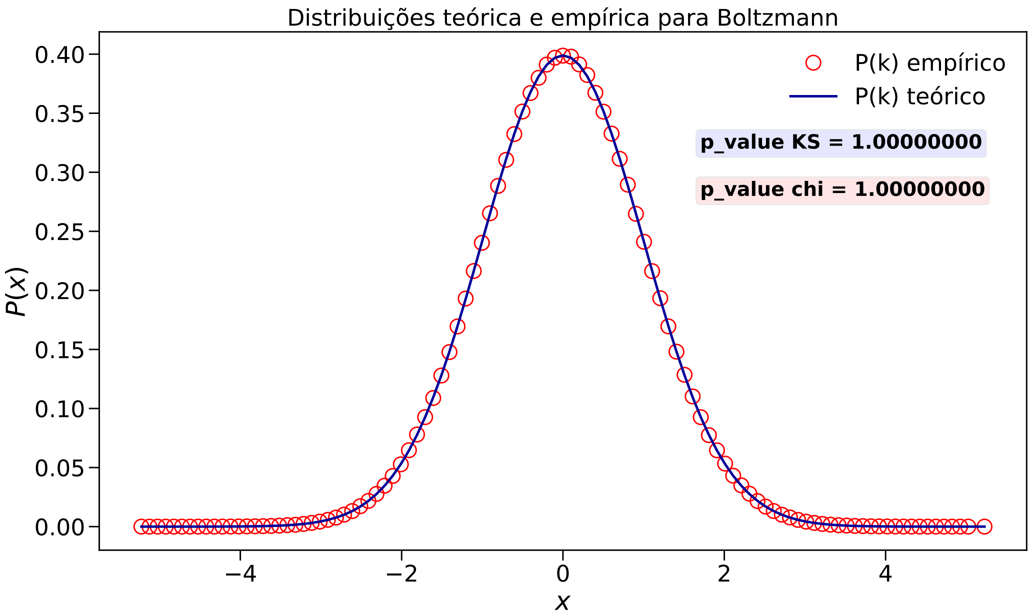

Figura 3: A curva sólida azul representa a distribuição de Boltzmann normalizada, representada na Eq. (3), enquanto os círculos vermelhos representam a distribuição empírica calculada partindo do histograma das amostras, por meio do rejecting sampling. O p-value para os testes de bondade KS e chi-quadrado estão representados no gráfico, sendo o p-value para o KS destacado de azul e o p-value para o teste chi-quadrado de vermelho. Foi utilizado $k = T = k_B = 1$, resultando em $\beta = 1$.

Considerações finais

Tomando $a = 10$ na distribuição uniforme e $M = 50$ no *rejecting sampling*, entrando com $N_{samples} = 10^7$ conseguimos obter um histograma com a distribuição teórica apenas a filtagem realizada pelo método, como expresso na Fig. 1.

Após aplicar o método *rejecting sampling*, realizamos um plot da distribuição teórica, expressa matematicamente na Eq. (3), e, como podemos notar, a curva encontra-se em concordância com o histograma. Com desvios na média e variância, em comparação ao teórico, muito baixo. Indicando uma concordância entre as distribuição teórica e empírica.

Após os cálculos dos desvios na média e variância, realizando os testes de bondade KS e chi-quadrado, com $D = 0.0288461538$ e $\chi^2 = 0.0000102625$, ambos com p-value = 1.00. Indicando que a distribuição obtida através do *rejecting sampling* é oriunda da distribuição teórica. A Fig .3 reforça essa afirmação, onde a curva sólida azul representa a distribuição teórica e os círculos vermelho a distribuição empírica obtida pelo *rejecting sampling*.

Questão 2

Enunciado: Sistemas estáveis, como reações químicas em equilíbrio ou certos tipos de circuitos biológicos, frequentemente apresentam potenciais com múltiplos mínimos. Um exemplo clássico é o potencial

$$V(x) = x^4 - 4x^2, \tag{7}$$

que possuí mínimos estáveis e uma barreira entre eles. A dinâmica de uma partícula sujeita a este potencial, na presença de ruído térmico, pode ser descrita pela *equação de Langevin*, tipicamente escrita na forma unidimensional na forma:

$$\frac{dx}{dt} = -\frac{1}{\gamma}\frac{dV}{dx} + \eta(t), \tag{8}$$

onde γ é um coeficiente de amortecimento e $\eta(t)$ é o ruído gaussiano com média zero e correlação $\langle \eta(t)\eta(t')\rangle = 2D\delta(t-t')$.

Item (a)

Enunciado: Mostre que no *equilíbrio*, a distribuição de probabilidade estacionária da posição da partícula é a distribuição de Boltzmann:

$$P_{eq}(x) \propto e^{-\beta V(x)}, \tag{9}$$

com $\beta = 1/k_B T$.

Nós temos que D representa a intensidade do ruído, que é relacionado com a temperatura através da relação $D = \frac{k_B T}{\gamma}$. A equação de *Fokker-Planck* descreve a evolução temporal de uma função de densidade de probabilidade. Tendo uma distribuição de probabilidade no tempo e espaço $\mathcal{P} = \mathcal{P}(x,t)$

$$\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial t} = \left[-\sum_{i=1}^{N} \frac{\partial}{\partial x_i} D_i^{(1)}(x_1,\ldots,x_N) + \sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} D_{ij}^{(2)}(x_1,\ldots,x_N) \right] \mathcal{P}, \tag{10}$$

tendo apenas um conjunto de variáveis $x_1 = x$, além de $\mathcal{P} = P_{eq}$, obtemos

$$\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{1}{\gamma}\left(-\frac{dV}{dx}\right)\mathcal{P}\right) + D\frac{\partial^2 \mathcal{P}}{\partial x^2}. \tag{11}$$

No estado estacionário $\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial t} = 0$, obtendo

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{1}{\gamma}\frac{dV}{dx}\mathcal{P}_{\text{eq}}(x)\right) = D\frac{\partial^2 \mathcal{P}_{\text{eq}}(x)}{\partial x^2}. \tag{12}$$

Multiplicando ambos os lados por γ e substituindo $D = \frac{k_B T}{\gamma}$:

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{dV}{dx}\mathcal{P}_{\text{eq}}(x)\right) = k_B T\frac{\partial^2 \mathcal{P}_{\text{eq}}(x)}{\partial x^2}. \tag{13}$$

Reorganizando:

$$\frac{dP_{eq}}{P_{eq}} = -\frac{1}{k_B T}\frac{dV}{dx}dx, \tag{14}$$

integrando ambos os lados

$$\ln P_{eq}(x) = -\frac{1}{k_B T}V(x) + C, \tag{15}$$

aplicando exponencial em ambos os lados

$$P_{eq}(x) \propto e^{V(x)/k_B T} = e^{\beta V(x)}. \tag{16}$$

Item (b)

Enunciado: Ao invés de resolver a equação de Langevin diretamente, utilize o *algoritmo de Metropolis* para simular o comportamento estatístico da partícula neste potencial. Escolha uma posição inicial aleatória x_0. A cada passo, preponho uma nova posição:

$$x_{nova} = x + \Delta x, \tag{17}$$

onde Δx é um passo aleatório, por exemplo, gerado a partir de uma distribuição uniforme ou normal. Calcule a variação do potencial:

$$\Delta V = V(x_{nova}) - V(x), \tag{18}$$

onde V(x) é dado pela Eq. (7). A nova posição x_{nova} é aceita com probabilidade:

$$P = min(1, e^{-\beta \Delta V}). \tag{19}$$

Caso não seja aceita, a posição permanece em x. Plote a posição x como função do tempo t.

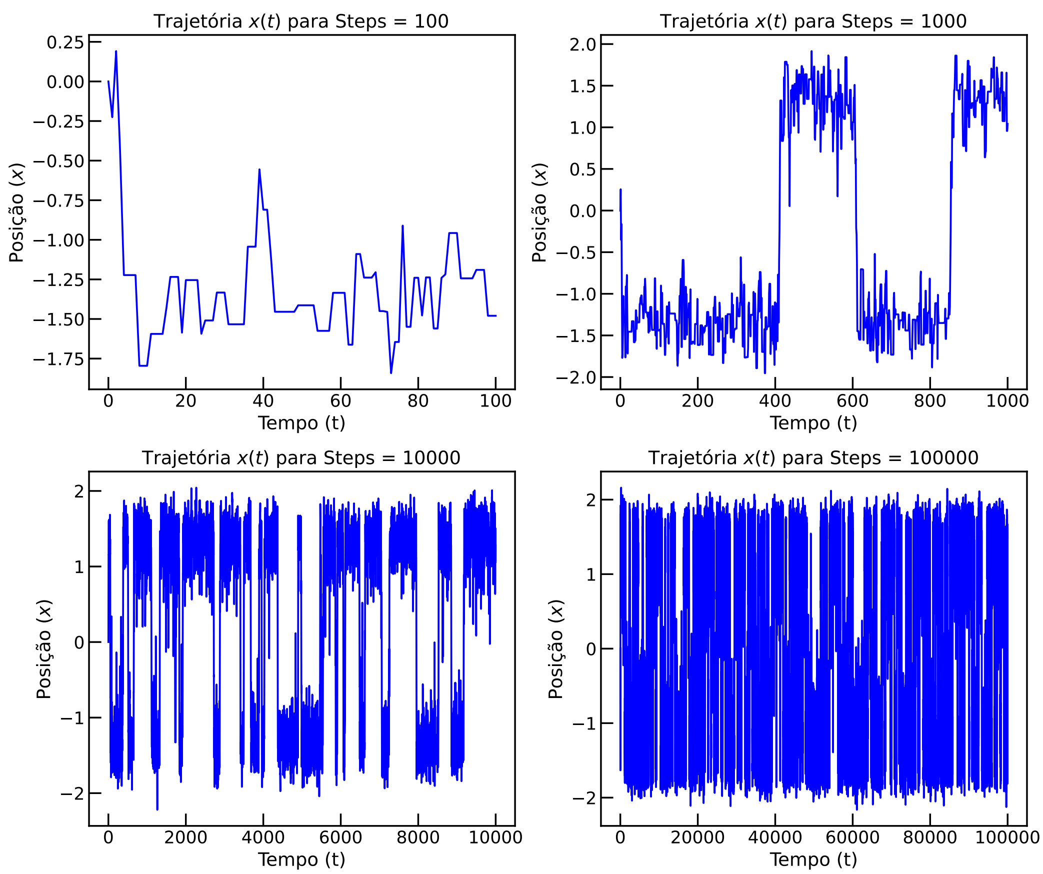

Figura 4: Em todas as quatro implementações expressa nos gráficos a posição inicial foi $x_0 = 0$, com $\beta = 1.0$ e $\Delta x = 0.5$. Foram realizados quatro implementações com $N_{steps} = [10^2, 10^3, 10^4, 10^5]$.

Item (c)

Enunciado: Compare as distribuições estacionárias obtidas pela solução do estado estacionário e o histograma resultante das simulações do algoritmo de Metropolis e verifique que a distribuição de posições obtidas pelo Monte Carlo coincide com a distribuição de Boltzmann resultante da dinâmica de Langevin.

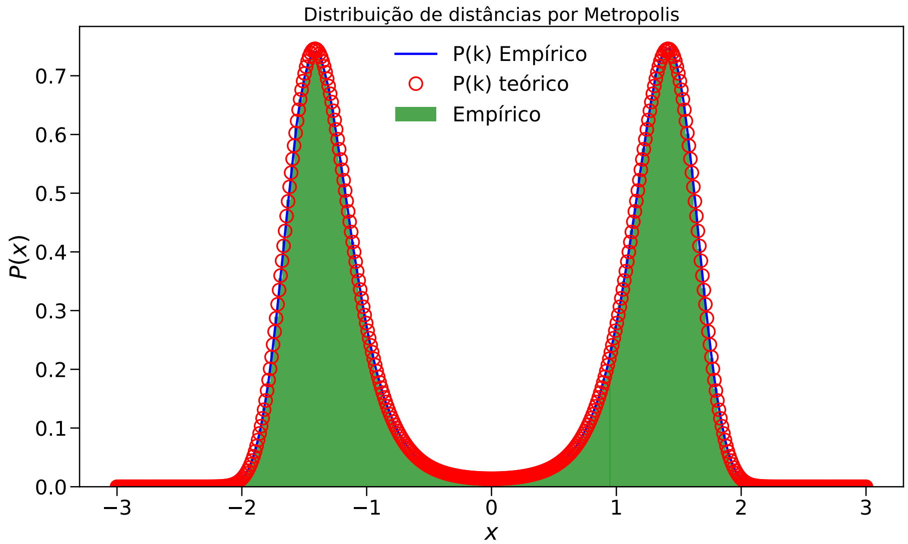

Figura 5: A curva sólida azul representa a distribuição empírica, obtida partindo do algoritmo de Metropolis para o problema. Enquanto os círculos representam a distribuição teórica expressa na Eq. (9). Foi utilizado $\beta = 1.0$, $x_0 = 0.0$, $\Delta x = 0.5$ e $N_{steps} = 10^7$.

Item (d)

Enunciado: Realize longas simulações de Monte Carlo e calcule a probabilidade de encontrarmos a partícula na vizinhança dos mínimos do potencial V(x) como função da temperatura β.

O primeiro passo é encontrar os mínimos do potencial, tendo

$$V(x) = x^4 - 4x^2, \tag{20}$$

teremos

$$\frac{dV}{dx} = 4x^3 - 8x, \tag{21}$$

Tendo o ponto crítico em $dV/dx = 0$, obtemos

$$4x^3 - 8x = 0 \Longrightarrow x(x^2 - 4) = 0, \tag{22}$$

teremos as três raízes

$$\begin{cases} x = 0, \\ x = \sqrt{2}, \\ x = -\sqrt{2}, \end{cases} \tag{23}$$

tomando a derivada segunda do potencial

$$\frac{d^2V}{dx^2} = 12x^2 - 8, \tag{24}$$

tomando em cada um dos pontos, obtemos

$$\begin{cases} \ddot{V}(x = 0) = -8, \\ \ddot{V}(x = \sqrt{2}) = 16, \\ \ddot{V}(x = -\sqrt{2}) = 16, \end{cases} \tag{25}$$

logo, $x = 0$ é um máximo e $x = \pm\sqrt{2}$ são os mínimos

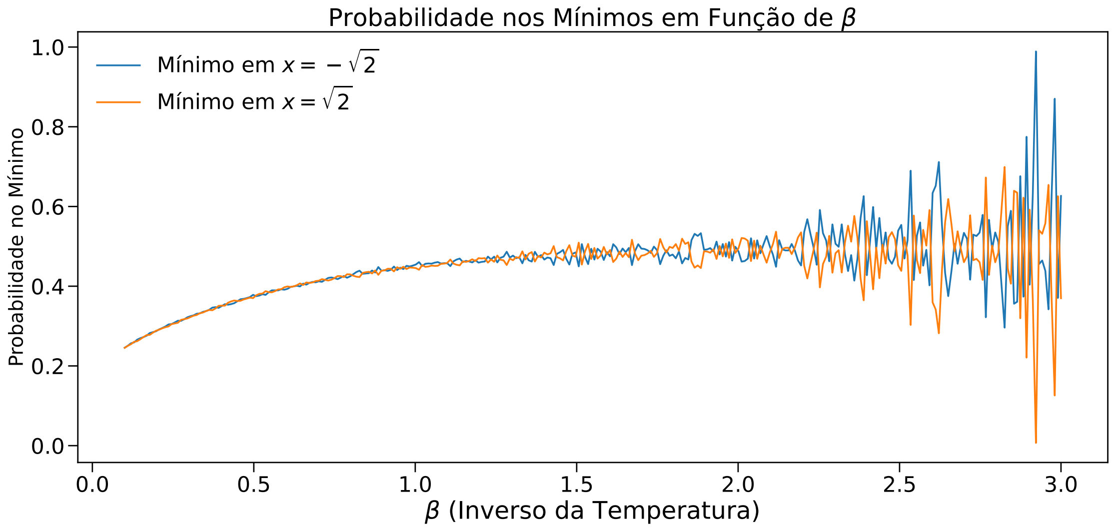

Figura 6: Em todas implementações foi utilizado a vizinhança do mínimo, $x_{min} \pm \delta x$, com $\delta x = 0.5$. Em todas implementações do Metropolis, tomamos os parâmetros $x_0 = 0.0$, $\Delta x = 0.5$, $N_{steps} = 10^7$ passos e $\beta = [0.1, 3.0]$ com 100 valores igualmente espaçados neste intervalo. A curva laranja representa a vizinhança do mínimo $x_{min} = \sqrt{2}$, enquanto a azul $x_{min} = -\sqrt{2}$.

Considerações finais

Ao estabelecer $x_0 = 0.0$ definimos que a partícula se encontra inicialmente num ponto de instabilidade, no máximo do potencial, entre os 2 poços de potencial. Após o primeiro passo de Metropolis, essa partícula tenderá para esquerda ou direita, com igual probabilidade. Uma vez definido o lado do seu próximo passo, a tendência é que ela caminhe em direção ao mínimo potencial em $x_{min} = \pm\sqrt{2}$, isso pode ser observado pela Fig 4. Com um número de passos pequeno, a partícula se encontrará presa, oscilando entorno desse mínimo. Conforme aumentamos o número de passos, a partícula adquira energia suficiente para sair daquele poço, no outro poço. Conforme observamos ao aumentar o número de passos. Mantendo esse comportamento ao longo do tempo.

Podemos observar pela Fig 5 que a distribuição de Boltzmann proposta na questão, expressa na Eq. (9) representada pelos círculos, coincidem com a curva empírica obtida pelo algoritmo de Metropolis, representada pela curva sólida azul. Mostrando que o método de Metropolis resulta numa dinâmica similar a dinâmica de Langevin.

Ao variamos o valor de β, a probabilidade de encontrarmos a partícula entorno dos mínimos aumenta consideravelmente, como pode ser observado na Fig. 6. Isso ocorre devido ao fato do β controlar a largura dos máximos de probabilidade, como pode ser observado na Fig. 7. Para pequenos valores de β, a probabilidade de encontrarmos a partícula entorno do mínimo é pequena, conforme aumentamos o valor de β, o pico de probabilidade torna-se cada vez mais acentuado, refletindo em maiores chances de encontrarmos a partícula naquela região.

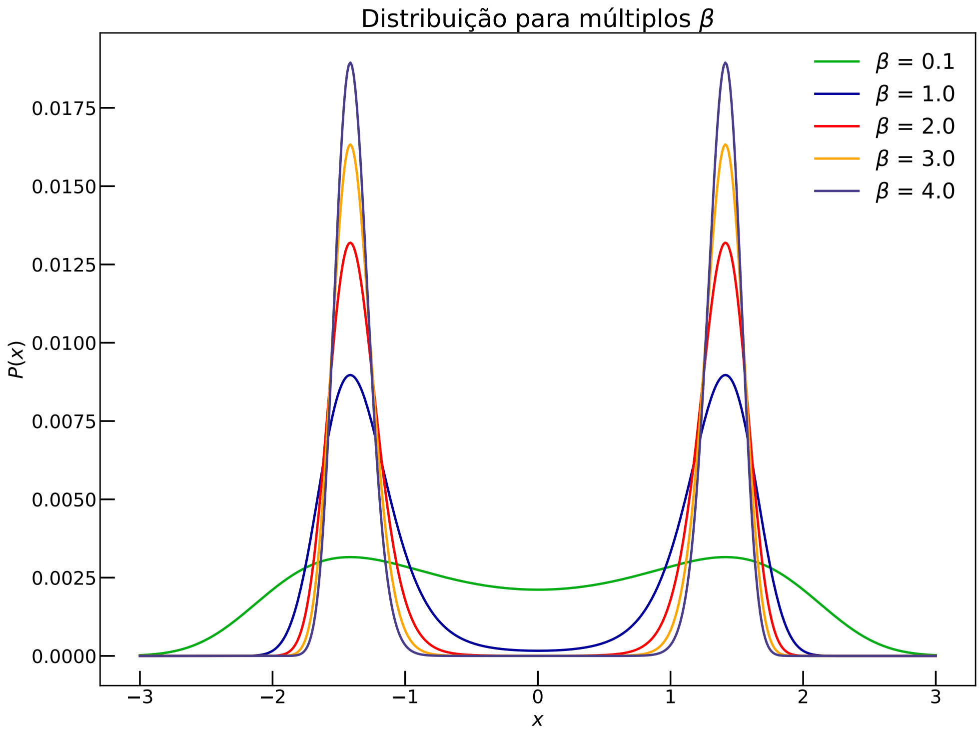

Figura 7: Distribuição de probabilidade em função da posição. Para $\beta = [0.1, 1.0, 2.0, 3.0, 4.0]$

Questão 3

Enunciado: A constante de Stefan-Boltzmann, σ, relaciona a energia total emetida por um corpo negro com sua temperatura. Ela é dada por:

$$\sigma = \frac{\pi^2 k_b^4}{60\hbar^3 c^2} \cdot \zeta(4), \tag{26}$$

onde $\zeta(s)$ é a função zeta de Riemann. A função zeta de Riemann pode ser expressa na forma integral:

$$\zeta(s) = \frac{1}{\gamma(s)} \int_0^\infty \frac{x^{s-1}e^{-x}}{1-e^{-x}} dx, \tag{27}$$

onde $\gamma(s) = (s-1)!$ é a função Gamma. Utilizando *importance sampling*, gere amostras aleatórias de x de uma distribuição exponencial, $\omega(x) = e^{-x}$, que corresponde ao termo e^{-x} no integrando. Reescreva a integral como:

$$\zeta(s) = \frac{1}{\gamma(s)} \mathbb{E}\Big[\frac{x^{s-1}}{1-e^{-x}}\Big]. \tag{28}$$

Compare seu resultado de Monte Carlo com o valor exato:

$$\zeta(4) = \frac{\pi^4}{90}. \tag{29}$$

Nós reescrevemos a integral como na Equação (15), calculando a média das realizações para $N = 10^6$ amostras um valor sorteado uniformemente de x no intervalo $[0, 1]$ e depois atualizando este valor para $x \leftarrow -log(x)$.

Assim, obtendo,

$$\langle\zeta(s)\rangle = 1.08$$

Sendo o valor exato,

$$\zeta(4) = 1.082323234...$$

Assim, temos uma diferença de 0.171%.

Questão 4

Enunciado: Considere a integral de uma função $f(\boldsymbol{x})$ em um espaço de d dimensões. A integral pode ser expressa como:

$$I = \int_{[0,1]^d} f(\boldsymbol{x}) d\boldsymbol{x}. \tag{30}$$

Item (a)

Enunciado: Utilize Monte Carlo para estimar a integral acima. Gere N vetores $\boldsymbol{x}$ com componentes uniformemente distribuídas no intervalo $[0, 1]$ para $d = 1$ e $f(\boldsymbol{x}) = e^{-|\boldsymbol{x}|^2}$.

Semelhante à questão anterior, calculamos a média sobre N realizações da soma da expressão (17) sorteando uniformemente os valores de x no intervalo $(0, 1)$ para $d = 1$.

Item (b)

Enunciado: Para diferentes valores de d ($d = 2, 6, 10$), estude como o número de amostras N necessário para alcançar a precisão desejada varia com a dimensionalidade.

Ao variar a dimensão, vemos que o valor de I se aproxima com menor amostras do valor esperado quanto maior a dimensão.

Item (c)

Enunciado: Calcule o erro padrão da média para cada caso e analise a taxa de convergência.

Ao calcular o erro padrão da média e plotá-lo em uma escala log-log, observamos que este erro cai com o número de amostras N seguindo uma lei de potência com expoente aproximadamente 0.5. Além disso, notamos como dito anteriormente que quanto maior a dimensão menor o erro.

Questão 5

Enunciado: Em física de partículas, distribuições angulares podem descrever a probabilidade de observação de partículas em diferentes direções após colisões de alta energia. Como exemplo, considere a reação de aniquilação entre elétron e um pósitron para formar um par de múons ($\mu^+\mu^-$). A probabilidade de observar um múon em um determinado ângulo θ (medido a partir da direção do elétron incidente) é proporcional a:

$$P(\theta) \propto 1 + cos^2(\theta), \quad \text{com} \quad 0 \leq \theta \leq \pi. \tag{31}$$

Sob essas condições, o problema propõe a geração de amostras do ângulo θ cuja distribuição segue a função de probabilidade acima usando métodos de Monte Carlo.

Item (a)

Enunciado: Normalize a distribuição de probabilidades $P(\theta)$, determinando o fator de normalização.

Para encontrar o fator de normalização calculamos a integral

$$\int_0^\pi A(1 + cos^2\theta d\theta) = 1,$$

em que A é o fator de normalização. Daí, encontrando a solução da integral,

$$\int_0^\pi 1 + cos^2\theta d\theta = \int_0^\pi cos^2\theta d\theta + \int_0^\pi d\theta =$$

$$\int_0^\pi cos^2\theta d\theta + \pi = \int_0^\pi \frac{1 + cos(2\theta)}{2} d\theta + \pi =$$

$$\int_0^\pi \frac{1}{2} d\theta + \int_0^\pi \frac{cos(2\theta)}{2} d\theta + \pi =$$

$$\pi + \frac{\pi}{2} = \frac{3\pi}{2}.$$

Portanto,

$$A\left(\frac{3\pi}{2}\right) = 1$$

Ficando com a constante de normalização,

$$\boxed{A = \frac{2}{3\pi}}.$$

Portanto, a probabilidade é dado por

$$P(\theta) = \frac{2}{3\pi}\left(1 + cos^2(\theta)\right), \quad \text{com} \quad 0 \leq \theta \leq \pi. \tag{32}$$

Item (b)

Enunciado: Implemente um método de amostragem para gerar valores de θ que sigam $P(cos(\theta))$ utilizando métodos de Monte Carlo por rejeição, ou seja, sorteie ângulos θ uniformemente distribuídos em $[0, \pi]$. Assim, gere números aleatórios uniformes para decidir se cada θ proposto é aceito com base em sua probabilidade relativa $1 + cos^2(\theta)$.

A probabilidade obtida pela questão anterior tem como argumento o ângulo θ,

$$P(\theta) = \frac{2}{3\pi}\left(1 + cos^2(\theta)\right), \quad \text{com} \quad 0 \leq \theta \leq \pi.$$

Ao reescrevê-la em função de $cos(\theta)$, ficamos com

$$P(cos(\theta)) = \frac{2}{3\pi}\left(\frac{1 + cos^2(\theta)}{sen(\theta)}\right), \quad \text{com} \quad 0 \leq \theta \leq \pi.$$

Note que o termo do seno no denominador vem da mudança de variável. Podemos também chamar $x = cos(\theta)$ e escrever a equação como,

$$P(x) \propto \frac{2}{3\pi}\left(\frac{1 + x^2}{\sqrt{1 - x^2}}\right), \quad \text{com} \quad -1 \leq x \leq 1.$$

Assim, aplicando o método de Monte Carlo por rejeição. Obtemos

Item (c)

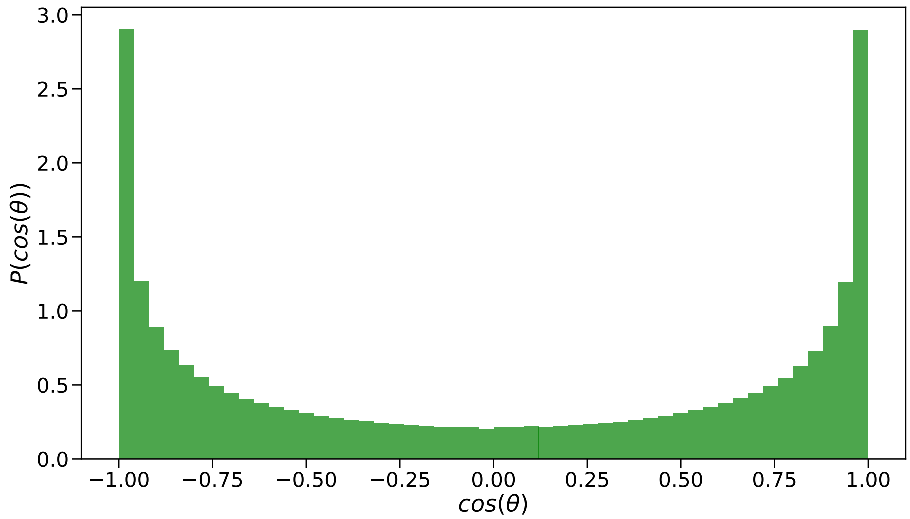

Figura 8: Histograma da distribuição de amostras após o processo de Monte Carlo por rejeição (Rejecting Sampling) utilizando $P(cos(\theta))$. Foram utilizadas $N_s = 10^6$ amostras. Note que a curva não está normalizada e a curva diverge em $x = \pm 1$.

Enunciado: Crie um histograma dos valores de θ obtidos e compare com a distribuição teórica $P(\theta)$. Compare seu resultado com a Figura 10.

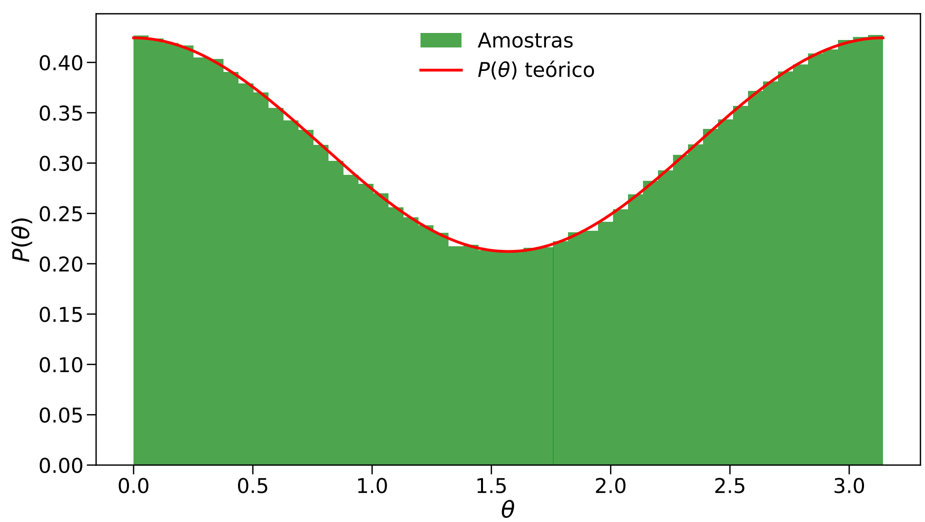

Figura 9: Histograma da distribuição de amostras após o processo de Monte Carlo por rejeição (Rejecting Sampling) utilizando $P(\theta)$. Foram utilizadas $N_s = 10^6$ amostras. A curva sólida representa a probabilidade teórica $P(\theta)$. Obversamos que as duas curvas coincidem.

A Fig. 8 representa uma curva proporcional à probabilidade $P(cos(\theta))$ bem como a Fig. 9 representa a probabilidade $P(\theta)$ em si. Por outro lado, o histograma da Fig. 10 não representa a probabilidade, pois não foi realizada adequadamente a mudança de variável $\theta \to cos(\theta)$.

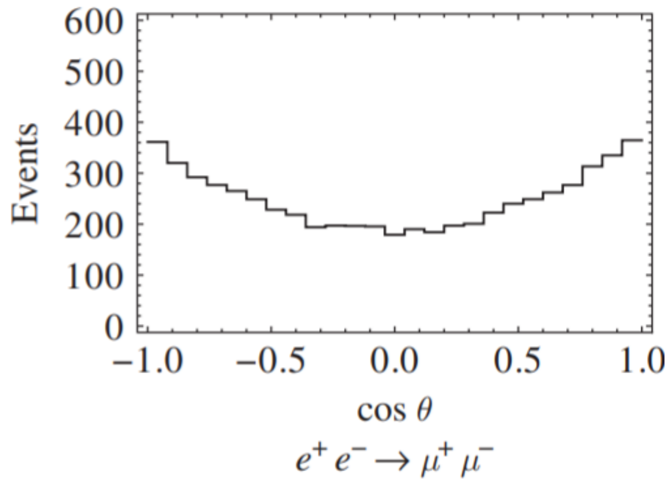

Figura 10: Distribuição angular na aniquilação $\mu^+\mu^-$ produzida por simulações de Monte Carlo. Fonte: Mathew D. Schwartz, Quantum field theory and the standard model (Cambridge University Press, New York, 2014).

Item (d)

Enunciado: Calcule a média e a variância das amostras obtidas e compare com os valores teóricos para a distribuição normalizada.

O resultado da média e variância teórica são:

$$\mathbb{E}[x] = \frac{\pi}{2}, \quad Var(x) = \frac{2}{3\pi}\left(\frac{\pi^3}{3} + \frac{\pi^3}{6}\right) - \left(\frac{\pi}{2}\right)^2, \tag{33}$$

Com o conjunto de amostras aceitas através do *Rejecting Sampling*, nós obtemos

$$\mathbb{E}_{emp}[x] = 1.5705, \quad Var_{emp}(x) = 0.98, \tag{34}$$

comparando com o teórico, tendo $Var(x) = 1/k\beta = 1$:

$$\begin{cases} \Delta\mathbb{E} = |\mathbb{E}_{teo} - \mathbb{E}_{emp}| = 0.00029, \\ \Delta Var = |Var_{teo} - Var_{emp}| = 0.16. \end{cases} \tag{35}$$

Item (e)

Enunciado: Realize testes estatísticos como Kolmogorov-Smirnov (K-S) e qui-quadrado para avaliar quantitativamente se as amostras obtidas são consistentes com a distribuição teórica.

Ao realizar o teste de Kolmogorov-Smirnov obtivemos o parâmetro D do teste KS $D = 0.000186$ com p-value $= 0.8764$, enquanto o $\chi^2 = 0.00002337$ com p-value $= 1.00$.

Os valores de p-value indicam que as amostras obtidas são consistentes com a distribuição teórica.