1ª **Lista de Tópicos de Física Teórica I**
Professor: Saulo Reis
Semestre: 2024.2

* * *

Problema 1: 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 para entender fenômenos como equilíbrio térmico e a distribuição de partículas em diferentes níveis de energia. Considere a distribuição de Boltzmann para o problema do oscilador harmônico *clássico*:

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

onde $\beta = \frac{1}{k_B T}$, 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 $\sigma^2 = \frac{1}{\beta k}$. **(a)** Gere valores aleatórios de x a partir de uma distribuição uniforme e aceite-os com probabilidade proporcional a $P(x)$ (método de rejeição). Assim, obtém-se uma amostra de valores de x que devem refletir a distribuição de Boltzmann. **(b)** Crie um histograma dos valores simulados de x e normalize-o para estimar a densidade de probabilidade empírica. **(c)** Sobreponha a curva teórica da distribuição de Boltzmann, dada por:

$$P_{\text{teórica}}(x) = \sqrt{\frac{\beta k}{2\pi}} \exp\left(-\frac{\beta k x^2}{2}\right).$$

(d) Calcule a média e a variância da amostra obtida e compare com os valores teóricos:

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

(e) Realize os testes estatísticos de Kolmogorov-Smirnov (K-S) e qui-quadrado para avaliar quantitativamente se as amostras são consistentes com a distribuição teórica. **(f)** Crie um Q-Q plot para fornecer uma ferramenta visual adicional de comparação entre a distribuição empírica e a distribuição teórica. Dessa forma, além da 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.

* * *

Problema 2: Sistemas biestáveis, como reações químicas em equilíbrio ou certos tipos de circuitos biológicos, frequentemente apresentam potenciais com múltiplos mínimos. Um exemplo clássico é o potencial

$$V(x) = x^4 - 4x^2, \tag{1}$$

que possui dois 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 como:

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

onde γ é um coeficiente de amortecimento e $\eta(t)$ é um ruído Gaussiano com média zero e correlação $\langle \eta(t)\eta(t') \rangle = 2D\delta(t-t')$. **(a)** Mostre que *no equilíbrio*, a distribuição de probabilidade estacionária da posição da partícula é a distribuição de Boltzmann:

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

com $\beta = 1/(k_B T)$. **(b)** 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, proponha uma nova posição:

$$x_{\text{nova}} = x + \Delta x,$$

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

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

onde $V(x)$ é dado pela Eq. (1). A nova posição x_{nova} é aceita com probabilidade:

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

Caso não seja aceita, a posição permanece em x. Plote a porsição x como função do tempo t. **(c)** 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 obtida pelo Monte Carlo coincide com a distribuição de Boltzmann resultante da dinâmica de Langevin. **(d)** Realize longas simulações de Monte Carlo e calule probabilidade de encontrarmos a partícula na vizinhança dos mínimos do potencial $V(x)$ como função da temperatura β.

* * *

Problema 3: A constante de Stefan-Boltzmann, σ, relaciona a energia total emitida por um corpo negro com sua temperatura. Ela é dada por:

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

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

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

onde $\Gamma(s) = (s-1)!$ é a função Gamma. Utilizando *importance sampling*, gere amostras aleatórias de x de uma distribuição exponencial, $\omega(x) = e^{-x}$ para $x \geq 0$, que corresponde ao termo e^{-x} no integrando. Reescreva a integral como:

$$\zeta(s) = \frac{1}{\Gamma(s)} \mathbb{E}\left[\frac{x^{s-1}}{1-e^{-x}}\right].$$

Compare seu resultado de Monte Carlo com o valor exato:

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

* * *

Problema 4: Considere a integral de uma função $f(\mathbf{x})$ em um espaço de d dimensões. A integral pode ser expressa como:

$$I = \int_{[0,1]^d} f(\mathbf{x})\, d\mathbf{x}. \tag{2}$$

(a) Utilize o método de Monte Carlo para estimar a integral acima. Gere N vetores $\mathbf{x}$ com componentes uniformemente distribuídas no intervalo $[0, 1]$ para $d = 1$ e $f(\mathbf{x}) = e^{-|\mathbf{x}|^2}$. **(b)** Para diferentes valores de d ($d = 2, 6, 10$), estude como o número de amostras N necessário para alcançar uma precisão desejada varia com a dimensionalidade. **(c)** Calcule o erro padrão da média para cada caso e analise a taxa de convergência.

* * *

Problema 5: 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 um 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:

$$P(\theta) \propto 1 + \cos^2(\theta), \quad 0 \leq \theta \leq \pi.$$

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. **(a)** Normalize a distribuição de probabilidades $P(\theta)$, determinando o fator de normalização. **(b)** 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 $1 + \cos^2(\theta)$. **(c)** Crie um histograma dos valores de θ obtidos e compare com a distribuição teórica $P(\theta)$. Compare seu resultado com a Figura 13.2 de [1] **(d)** Calcule a média e a variância das amostras obtidas e compare com os valores teóricos para a distribuição normalizada. **(e)** Realize testes estatísticos como Kolmogorov-Smirnov (K-S) e qui-quadrado para avaliar quantitativamente se as amostras obtidas são consistentes com a distribuição teórica.

* * *

[1] Mathew D. Schwartz, *Quantum field theory and the standard model* (Cambridge University Press, New York, 2014).