# 1° Lista

Carlos Miguel Moreira Gonçalves Igor Pereira Cavalcante Robert Bertoldo Tavares

21 de janeiro de 2025

#### Problema 1

Considerando a distribuição de Boltzmann para o problema do oscilador harmônico **clássico**, temos:

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

onde  $\beta = \frac{1}{k_BT}$ . Para gerar valores aleatórios de x que sigam essa distribuição, utilizamos o método de rejeição. Nesse método, valores de x são inicialmente sorteados a partir de uma distribuição uniforme e aceitos com probabilidade proporcional a P(x). Essa abordagem funciona porque a probabilidade de aceitação é ajustada para refletir a forma de P(x), garantindo que valores associados a maior probabilidade (maior P(x)) têm maior chance de serem aceitos, enquanto valores menos prováveis são rejeitados. Assim, a amostra gerada reflete fielmente a distribuição de Boltzmann.

Sorteamos valores aleatórios de x, como descrito anteriormente, e em seguida criamos um histograma dos valores sorteados e o normalizamos.

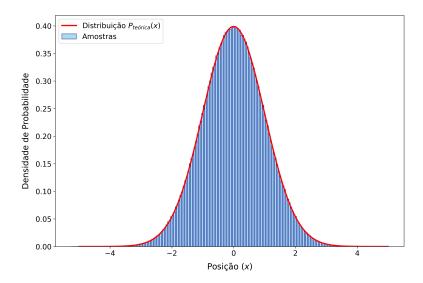


Figura 1: Gráfico da distribuição de Boltzmann (linha contínua vermelha), comparando com a distribuição gerada a partir do método de rejeição (barras azuis).

Na Fig. 1, sobrepomos a curva empírica com a curva teórica da distribuição de Boltzmann, dada por:

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

## d) e e)

Para avaliar quantitativamente se as amostras que obtivemos com o sorteio pelo método da rejeição são consistentes com a distribuição teórica, calculamos a média e a variância, dadas por:

$$\mathbb{E}[x] = 0, \quad \text{Var}(x) = \frac{1}{\beta k}.$$
 (3)

Parâmetro	Valor Encontrado	Valor Teórico	Erro (%)
Média	-0.00122	0	0.1224
Variância	0.99988	1.0	0.0124

Tabela 1: Comparação entre valores encontrados nas simulações e os valores teóricos.

Realizamos ainda os testes estatísticos de Kolmogorov-Smirnov (K-S). Os resultados estão na Tabela 2.

Parâmetro	Valor	
D	0.00106	
$D_{critico}$	0.00135	
$p_{valor}$	0.20624	

Tabela 2: Resultados do teste K-S.

O parâmetro D é pequeno, indicando que a diferença absoluta entre a função de distribuição empírica da amostra (EDF) e a função de distribuição acumulada teórica (CDF) é muito baixa. Isso demonstra uma forte concordância entre a amostra sorteada e a distribuição teórica. Como  $D \leq D_{critico}$ , não podemos rejeitar a hipótese nula  $(H_0)$ , indicando que não há evidências estatísticas para rejeitar que os dados sigam a distribuição teórica.

### Questão 2

Dado um sistema biestável, com um potencial dado por:

$$V(x) = x^4 - 4x^2, (4)$$

que possui dois mínimos estáveis e uma barreira entre eles. A dinâmica de uma partícula sujeita a esse potencial, na presença de ruído térmico, é governada pela equação de Langevin:

$$\frac{dx}{dt} = -\frac{1}{\gamma}\frac{dV}{dx} + \eta(t),\tag{5}$$

onde  $\gamma$  é o coeficiente de amortecimento e  $\eta(t)$  é um ruído Gaussiano com média zero e correlação  $\langle \eta(t)\eta(t')\rangle=2D\delta(t-t')$ . Essa equação pode ser resolvida numericamente para simular a dinâmica da partícula.

**a**)

Simulamos a dinâmica resolvendo numericamente a equação. Consideramos que o sistema atinge equilíbrio quando a diferença entre os passos é consistentemente muito pequena (tolerância de  $10^{-8}$ ). Para evitar tempos de simulação muito longos, fixamos uma temperatura muito baixa ( $\beta=10$ , equivalente a  $D=10^{-7}$ ). Nesse regime, a partícula fica confinada em um dos mínimos. Realizamos 100 simulações e plotamos a distribuição de posições, comparando com a distribuição de Boltzmann:

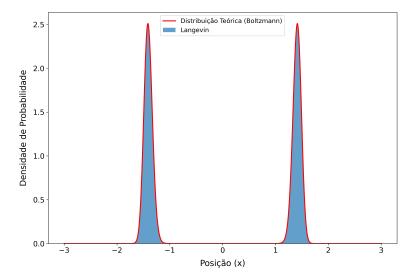


Figura 2: Gráfico da distribuição de Boltzmann (linha contínua vermelha) comparada à distribuição gerada pela dinâmica da equação de Langevin (barras azuis).

### b)

Utilizamos o algoritmo de Metropolis para simular o comportamento estatístico da partícula no potencial. Inicialmente, sorteamos uma posição inicial  $x_0$ . Em cada passo, propomos uma nova posição  $x_{\text{nova}} = x + \Delta x$ , com  $\Delta x$  gerado de uma distribuição uniforme. A nova posição é aceita com probabilidade:

$$P = \min(1, e^{-\beta \Delta V}), \tag{6}$$

onde  $\Delta V = V(x_{\text{nova}}) - V(x)$ . Caso não seja aceita, a posição permanece em x.

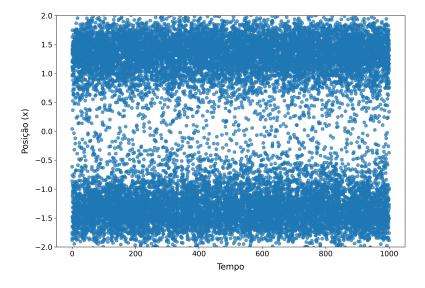


Figura 3: Gráfico da posição em função do tempo para uma simulação de Metropolis.  $\beta = 0.8, dx = 0.7.$ 

Abaixo, apresentamos o histograma da distribuição de posições:

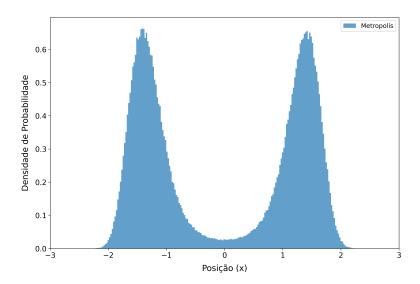


Figura 4: Histograma da distribuição de posições na simulação de Metropolis.  $\beta=0.8,$  dx=0.7.

 $\mathbf{c}$ 

Ao comparar as simulações de Metropolis com a dinâmica de Langevin, as distribuições são muito semelhantes, conforme mostrado na Fig. 5.

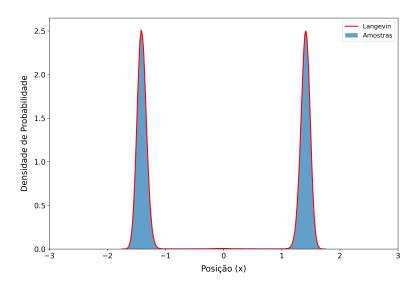


Figura 5: Distribuição da dinâmica de Langevin (linha contínua vermelha) comparada com a distribuição gerada por Metropolis (barras azuis).

Por fim, ao variar  $\beta$ , podemos analisar a probabilidade de encontrar a partícula próxima aos mínimos. Esse comportamento está apresentado na Fig. 6.

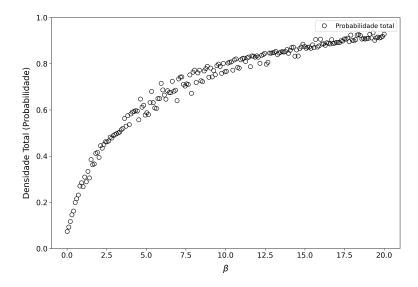


Figura 6: Probabilidade de encontrar a partícula próxima aos mínimos em função do parâmetro  $\beta$ .

#### Problema 2

#### Problema 3

Usando o importance sampling, conseguimos calcular o valor da integral. A amostragem se mostrou muito relevante para a exatidão do valor calculado. Para amostras entre 1000 e 100000, o erro foi acima de 1%. Para uma amostragem de 1000000 ou superior, o erro foi sempre inferior a 1%, mas o custo computacional também aumentou siginificativamente, indo de decimos para dezenas de segundos. Um dos melhores resultados que obtivemos foi:

Monte Carlo: 1.08049

Teórico: 1.08232 Erro: 0.1695

#### Problema 4

A solução para uma dimensão d, dado que a integral não possui uma solução analítica, foi obtida utilizando uma calculadora de integrais e resulta em:

$$\int_{[0,1]^d} f(x) \, dx = 0.7468^d. \tag{7}$$

Com isso, para cada dimensão d, calculamos numericamente o valor da integral e comparamos com o valor teórico. Os resultados obtidos, tomando a média para o máximo de amostragem em cada dimensão (N=200000), foram:

Ao analisarmos o erro absoluto entre o valor teórico e o valor obtido numericamente, observamos que ele apresenta uma relação direta com a dimensão do problema e com a necessidade de amostragem para atingir a convergência. Na Figura 7, podemos observar os

Dimensão	Monte Carlo	Teórico
4	0.2764	0.2764
6	0.17346	0.17347
10	0.05396	0.05396

Tabela 3: Comparação entre o valor da integral numérica e o valor teórico para cada dimensão.

comportamentos. Para dimensões menores, é necessário um maior número de amostragens para que o erro converja para um valor muito pequeno. Em contrapartida, em dimensões maiores, uma menor quantidade de amostragens é suficiente para alcançar uma certa estabilidade do erro.

Por fim, analisando o erro em função da amostrage, fica mais facil observar, na Figura 8 como a depencia da amostragem cai com o aumento da dimensão.

Por fim, para esse caso da integral, entender essa relação pode levar a uma diminuição do custo computacional visto que para dimensões maiores, o número de amostragens necessárias é menor para uma boa solução.

#### Problema 5

Iniciamos o problema gerando N=200000 amostras de uma distribuição uniforme entre  $[0,\pi]$ . Nosso termo de aceite deveria ser algo da forma  $P(\theta) \propto 1 + \cos^2(\theta)$ . Dessa forma, utilizamos a probabilidade de aceitação de uma amostra como sendo  $P(\theta)=1+M*\cos^2(\theta)$ , onde M=0.05. Com isso estabelecido, fizemos o histogram da distribuição de  $\theta$  e o normalizamos para poder comparar com a probabilidade teórica. Antes de realizarmos a comparação, realizamos uma integração numérica para obter o valor da constante de normalização. Sabendo que a seguinte relação é valida, obtivemos como constante de normalização para  $P(\theta)$ :

$$C\int_0^{\pi} P(\theta) d\theta = 1, \tag{8}$$

$$C = \frac{1}{\int_0^{\pi} P(\theta) \, d\theta} = 0.2122. \tag{9}$$

Na Figura 9, temos a comparação entre a distribuição normalizada e a probabilidade  $P(\theta)$ .

Uma vez que conseguiamos com parar a distribuição normalizada com a probabilidade, nos buscamos a melhor forma de gerar a distribuição e estudamos como a constante M afetava a distribuição. Nos observamos que para valores de M muito pequenos, a distribuição se tornava muito parecida com a probabilidade  $P(\theta)$ . Na Figura 10, temos a comparação entre a distribuição e a probabilidade para difentes valores de M. Chegamos a conclusão que M < 1 é a região que começamos a igualar os dados.

Nosso próximo passo foi realizar testes estatisticos para comparar as distribuições. Primeiro calculamos a media e a variança as amostras em ambas as distribuições. Na Tabela 4 temos os resultados obtidos. Ambas as métricas se mostraram praticamente, identicas nas duas distribuições.

Por fim, realizamos um teste de Kolmogorov-Smirnov e qui-quadrado para comparar as distribuições. Os teste mostraram que as amostras de ambas as distribuições são pra-

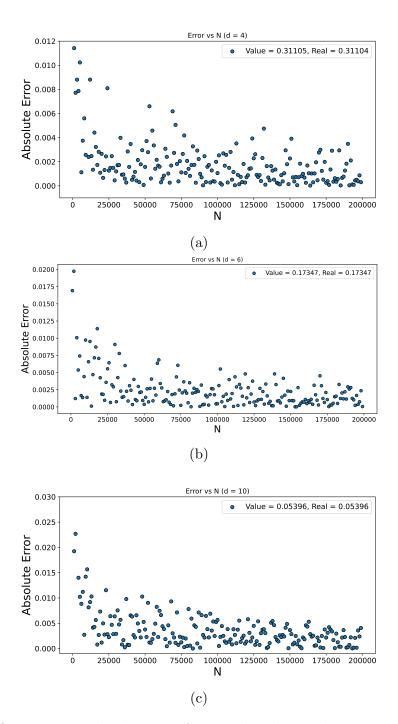


Figura 7: Graficos do erro absoluto em função do número de amostragens para cada dimensão. Na figura (a), temos d = 4, na figura (b), d = 6 e na figura (c), d = 10. Na legenda, temos o valor calculado da integral e o valor teórico.

ticamente identicas. Abaixo, temos os resultados obtidos para os testes:

#### Kolmogorov-Smirnov Test:

**Estatística D:** 0.0043647

Valor-p: 1.9961936

Pela hipotese nula do teste de Kolmogorov-Smirnov, as distribuições são iguais, como o p>0.05, ela não pode ser rejeitada, portanto, as distribuições são iguais.

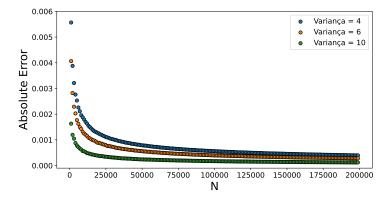


Figura 8: Erro em função do número de amostragens para as dimensões d = 4, 6, 10.

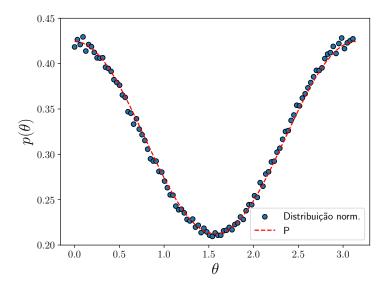


Figura 9: Comparação entre a distribuição normalizada e a probabilidade  $P(\theta)$ .

**Chi-Square Test:** 

Estatística Qui-Quadrado: 5448.6678171

**Valor-p:** 1.0

Pela hipotese nula do teste qui-quadrado, a amostra observada segue a distribuição teórica esperada, as distribuições são iguais, visto que p > 0.05,

	Distribuição	$P(\theta)$
Média	1.570796	1.572278
Variância	0.989133	0.988647

Tabela 4: Comparação entre a média e a variância das amostras para a distribuição e a probabilidade  $P(\theta)$ .

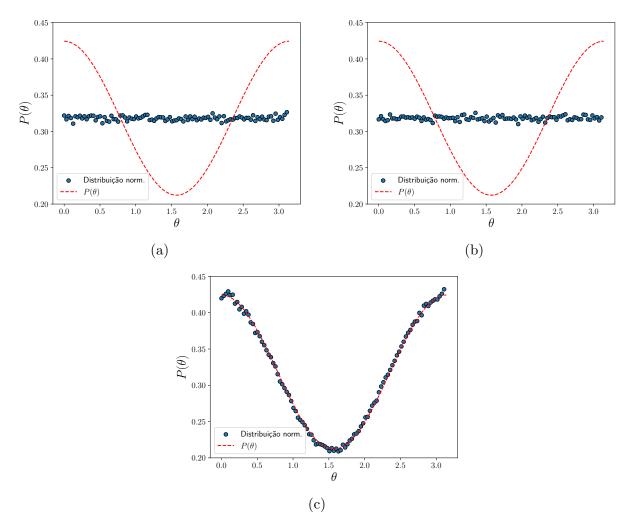


Figura 10: Comparação entre a distribuição normalizada e a probabilidade  $P(\theta)$  para diferentes valores de M. Em (a), M=5, em (b), M=1 e em (c), M=0.1.