# Física Estatística

## Ano lectivo 2023/2024

### TPC2 - Cadeias de Markov

**Atenção:**

- Não deve escrever o seu nome nem nenhum código identificador em nenhum sítio.
- Deve entregar ESTE Notebook de Jupyter.
- O trabalho é individual. Podem e devem haver discussões com colegas mas o resultado entregue é individual.
- Não deve acrescentar ou apagar nenhuma célula.
- Todas as explicações devem ser claras e concisas.
- É preferível fazer menos e fazer bem que muito e mal.
- A não verificação de alguma destas regras leva ao anulamento e exclusão da prova.

## 1. Exercício

**Partícula num potencial:** Considere uma partícula que se move num potencial de energia livre dependente da posição dado por

$$V_\beta(x) = x^4 - 2(\beta - 1)x^2$$

supondo que a partícula está em contacto térmico com um reservatório de calor caracterizado por $\beta$ (inverso da temperatura) e a distribuição de probabilidade da partícula estar numa dada posição é dada por

$$\rho_\beta(x) = \frac{e^{-\beta V_\beta(x)}}{Z(\beta)}$$

onde $Z(\beta)$ é a função de partição do sistema.

1. Considere o passeio aleatório especial: A variável $x$ é discreta e toma valores $x_n = 0.04n$ com $n \in \mathbb{Z}$. Em cada tempo o caminhante decide se tenta saltar para a direita ($\Delta x = 0.04$) ou para esquerda ($\Delta x = -0.04$) com probabilidade $1/2$ e aceita a proposta com

$$p_A(x(t-1) \to x(t-1) + \Delta x) = \min\left(1, e^{-\beta\left(V_\beta(x(t-1)+\Delta x) - V_\beta(x(t-1))\right)}\right)$$

   Se aceitou a sua variável $x$ altera-se para $x + \Delta x$, caso contrário, fica no mesmo valor de $x$.

   (a) Escreva uma função que implementa este algoritmo durante um tempo $t$ partindo de uma posição inicial (devolve o valor de $x$ ao fim desse tempo).

   (b) Escreva uma matriz de Markov que representa este algoritmo limitando a variável de posição ao intervalo $x \in [-2, 2]$ - Sempre que uma proposta tentar sair do intervalo recusa.

2. Para $\beta = 1.4$

   (a) Escolha um valor de $x_0 = 0$ para o seu caminhante no instante inicial $t = 0$.

   (b) Evolua a distribuição de probabilidades durante um tempo $t = 1, 4, 16, 64, 256, 512$ e represente a distribuição de probabilidade da simulação para esses instantes.

   (c) Calcule a matriz de Markov que obteve em 1.b) e calcule para cada um destes tempos calcule e represente,

   $$\sum_j [\Omega^t]_{ij} P_j(0)$$

   Será que a matriz de Markov representa exactamente o algoritmo implementado?

   (d) Para a matrix de Markov calculada em 1.b) obtenha o espectro de valores próprios e os vectores próprios à direita e à esquerda usando os módulos de python ( por exemplo $scipy.linalg.eig$ ou o $mpmath.eig$ se precisar de maior precisão). Garanta que os vectores estão normalizados e são ortogonais:

   $$\sum_i l_i^{(n)} r_i^{(m)} = \delta_{mn}$$

   onde $m$ e $n$ são índices dos valores próprios, $r_i^{(n)}$ é o vector próprio à direita e $l_i^{(n)}$ p vector próprio à esquerda ($i$ são os indices do espaço de eventos). Verifique que para cada tempo considerado a distribuição de probabilidade é dada por

   $$P_i(t) = \sum_n \lambda_n^t a_n r_i^{(n)}$$

   onde $a_n = \sum_i l_i^{(n)} P_i(0)$.

   i. Quantos valores próprios $\lambda = 1$ obtém?

   ii. Será que a partir do espectro de valores próprios posso "advinhar " a escala de tempo que a dinâmica demora a equilibrar? Como poderei obter esta escala? (Lembre-se que o módulo dos valores próprios é sempre menor ou igual a 1).

   (e) Para $\beta = 2.4$ existem muitas diferenças com a posição inicial quando a simulação inicia em $x = 0, x = -1.5$ ou $x = 1.5$: Existe apenas uma distribuição de equilíbrio mas dependendo da distribuição inicial pode demorar muito ($x = \pm 1.5$ ) ou pouco ($x = 0$) tempo a ser atingida. À luz do espectro de valores próprios do sistema como posso entender este fenómeno?

## 2. Exercício

**Correlações:** Para $\beta = 2$ o valor médio da posição é nulo. Sabemos que para um determinado tempo, a distribuição de probabilidade deixa de depender do tempo e torna-se a distribuição assimptótica (igual para todos os tempos seguintes). Se construirmos uma amostra de $T$ valores a partir da sequência visitada pelo passeio aleatório para tempos superiores ao tempo de equilíbrio ($\tau$), a distribuição de probabilidade de cada um dos valores é igual à distribuição assimptótica. Logo o valor médio desta amostra tenderá para o valor exacto (zero),

$$\lim_{T\to+\infty} \frac{1}{T} \sum_{t=0}^{T-1} x(\tau + t) = 0.$$

O teorema do limite central diz-nos que o erro da medida com $T$ medições deverá ser da ordem de

$$Erro(T) = \frac{\sigma}{\sqrt{T}} \tag{1.1}$$

onde $\sigma$ é o desvio padrão de uma única medição.

1. Estime o valor do erro do valor médio ($\langle x \rangle = 0$) obtido $T$ medições consecutivas através de

   $$\overline{x}_T(k) = \frac{1}{T}\sum_{t=0}^{T-1} x_k(\tau + t)$$
   $$Erro(T) = \frac{1}{M}\sum_{k=0}^{M-1} (\overline{x}_T(k) - \langle x \rangle)^2$$

   onde $\overline{x}_T(k)$ é o estimador do valor médio obtido na simulação $k$ medindo $T$ valores de posição consecutivos a partir de $t > \tau$ onde $\tau$ é um tempo maior do que o necessário para atingir o equilíbrio. O erro é o valor médio do desvio de cada estimador em relação ao valor exacto em $M$ simulações independentes.

2. Note que pode estimar o desvio padrão de uma medida calculando o valor médio

   $$\sigma \approx \sqrt{\frac{1}{M}\sum_{k=0}^{M-1} x_k^2(\tau)}$$

   a dispersão do ponto inicial. Será que a lei eq: 1.1 é verificada? Represente como função de $T$ a sua estimativa do erro ($T = 1, 2, 4, 16, 64, 256, 1024$). Comente o resultado.

Bom Trabalho