Mecânica Estatística - IFUSP - 09/08/2017
primeira série de exercícios

1- A expansão assintótica de Stirling,

$$\ln N! = N\ln N - N + O\left(\ln N\right),$$

que funciona muito bem para $N\to\infty$, é um recurso de grande utilidade em mecânica estatística (em conexão com o limite termodinâmico).

(i) Mostre que

$$\int_0^\infty x^n e^{-x}dx = n!$$

para $n = 0, 1, 2, ...$ (admitindo uma continuação analítica, essa integral dá origem à definição da "função gama").

(ii) A partir da integral acima, utilizando o método de Laplace de integração assintótica, obtenha os dois primeiros termos da expansão de Stirling.

(iii) Prove (com rigor matemático, é claro) que

$$\lim_{n\to\infty}\frac{1}{n}\ln\left\{\int_a^b \exp\left[nf\left(x\right)\right]dx\right\} = f\left(x_0\right),$$

onde x_0 é o ponto de máximo de uma função contínua $f\left(x\right)$ no intervalo entre a e $b > a$.

2- No "problema do caminho aleatório" em uma dimensão, um caminhante tem a probabilidade p $(0 < p < 1)$ de dar um passo de comprimento l para a direita e $q = 1-p$ de dar um passo de mesmo comprimento l para a esquerda.

(i) Escreva uma expressão para a probabilidade $P_N\left(N_1\right)$ do caminhante ter dado N_1 passos para a direita depois de um total de N passos a partir de uma certa origem $(0 \leq N_1 \leq N)$.

(ii) Desenhe um gráfico de $P_N(N_1)$ contra N_1/N para $p = 2/3$ e $N = 15$. Obtenha $\langle N_1\rangle$ e $\langle N_1^2\rangle$, e use esses valores para escrever a "distribuição gaussiana correspondente", $p_G(N_1)$, isto é, a distribuição gaussiana com os mesmos valores do primeiro e do segundo momentos. Desenhe um gráfico de $p_G(N_1)$ contra N_1/N e compare com o resultado anterior.

(iii) Faça de novo os cálculos do item anterior para $N = 150$. Os novos gráficos são muito diferentes? Por que?

3- Uma experiência tem N resultados igualmente prováveis, envolvendo dois eventos, A e B. Seja N_1 o número de resultados em que ocorre A, mas não ocorre B; N_2 o número de resultados em que ocorre B, mas não ocorre A; N_3 o número de resultados em que ocorrem A e B; e N_4 o número de resultados em que não ocorre nem A e nem B.

(i) Note que $N_1 + N_2 + N_3 + N_4 = N$ e que

$$P(A) = \frac{N_1 + N_3}{N} \qquad \text{e} \qquad P(B) = \frac{N_2 + N_3}{N},$$

em que $P(A)$ e $P(B)$ são as probabilidades de ocorrência de A e de B, respectivamente.

(ii) Calcule a probabilidade $P(A+B)$ de ocorrência de A ou B.

(iii) Calcule a probabilidade $P(AB)$ de ocorrência de A e B.

(iv) Calcule a probabilidade condicional $P(A \mid B)$ de ocorrência de A sabendo-se que houve a ocorrência de B. Calcule a probabilidade condicional $P(B \mid A)$ de ocorrência de B sabendo-se que houve a ocorrência de A.

(v) Mostre que

$$P(A+B) = P(A) + P(B) - P(AB)$$

e que

$$P(AB) = P(B)\,P(A \mid B) = P(A)\,P(B \mid A).$$

(viii) Considerando um terceiro evento, C, mostre que

$$\frac{P(B \mid A)}{P(C \mid A)} = \frac{P(B)}{P(C)} \frac{P(A \mid B)}{P(A \mid C)},$$

que é uma expressão do "teorema de Bayes".

4- Num caminho aleatório em uma dimensão, depois de N passos a partir da origem, a posição do caminhante é dada por $x = \sum_{j=1}^{N} s_j$, em que $\{s_j\}$ é um conjunto de variáveis aleatórias independentes e identicamente distribuídas (i. i. d.), dadas pela distribuição de probabilidades

$$w(s) = \begin{cases} 0, & s < -1, \\ a\left(1 - s^2\right), & -1 < s < +1, \\ 0, & s > +1. \end{cases} ,$$

em que a é uma constante.

(i) Qual o valor da constante a para que $w(s)$ seja uma distribuição de probabilidades devidamente normalizada?

(ii) Calcule $\langle x \rangle$ e $\sqrt{\left\langle (\Delta x)^2 \right\rangle}$.

(iii) Obtenha a forma da distribuição gaussiana associada a esse problema, isto é, obtenha a densidade de probabilidades $p(x)$ no limite $N \to \infty$.

****

> "The Ehrenfest model is an example of a "Markov process"....given the present, the future is independent of the past history..."
>
> (Mark Kac e J. Logan, Fluctuations, 1979, ...)

5- A análise do "modelo da urna" de Ehrenfest proporciona uma excelente ilustração da presença das flutuações estatísticas, do papel dos grandes números, e da "seta do tempo" (enfim, do significado estatístico da segunda lei da termodinâmica). Veja, por exemplo, o artigo de Ambegaokar e Clerk, "Entropy and time", Am. J. Phys. **67**, 1068-1073 (1999).

A "equação estocástica" associada ao modelo da urna é linear (e exatamente solúvel). Há muitos trabalhos sobre esse modelo e suas variantes, com destaque para a solução pioneira de Mark Kac de 1947. Veja o artigo relativamente recente de Godrèche e Luck em J. Phys.: Condens. Matter **14**, 1601-1615 (2002), que contém diversas referências.

Na versão original do modelo da urna consideram-se duas caixas, N bolas numeradas, e uma espécie de roleta para gerar N números aleatórios. Inicialmente, há N_1 bolas na urna 1, e $N_2 = N - N_1$ bolas na urna 2. Em cada intervalo de tempo Δt, sorteia-se um número aleatório entre 1 e N, mudando a posição (localização nas urnas) da bola correspondente. É possível fazer simulações numéricas, com um bom gerador de números aleatórios, para desenhar gráficos de N_1 (número de bolas na urna 1) em função do tempo t (devidamente discretizado em intervalos iguais Δt), a partir de uma situação inicial em que $N_1 = N$ (todas as bolas estão na urna 1), por exemplo. O que se poderia dizer sobre as flutuações do valor de N_1? O que aconteceria para tempos muito grandes (no limite $t \to \infty$)?

(a) Vamos fazer uma simulação um pouco mais simples, talvez mais realista sob o ponto de vista físico.. Em cada instante de tempo t, escolha um número aleatório r, no intervalo unitário $0 \leq r < 1$. Se $r \leq N_1/N$, retire uma partícula da urna 1 e coloque na urna 2; isto é, faça $N_1 \to N_1 - 1$ e

$N_2 \to N_2 + 1$. Caso contrário (isto é, se $r \geq N_1/N$), retire uma partícula da urna 2 e coloque na urna 1; isto é, faça $N_1 \to N_1 + 1$ e $N_2 \to N_2 - 1$. Completada essa operação, considere o tempo seguinte, $t + \Delta t$, e repita novamente o mesmo tipo de processo. Faça simulações com o valor inicial $N_1 = N$ para dois valores de N,

$$(i)\, N = 20; \qquad (ii)\, N = 200.$$

O que você pode dizer a respeito das flutuações do valor de N_1? Faça gráficos de N_1 contra o tempo t, com uma escolha conveniente de escalas a fim de enfatizar a "rota para o equilíbrio" e verificar o que acontece com as flutuações no limite $t \to \infty$.

(b) Supondo que $P(N_1, t)$ seja a probabilidade de encontrar N_1 bolas na urna 1 no instante de tempo t, mostre que é "probabilisticamente razoável" escrever a equação de evolução temporal

$$P(N_1, t + \Delta t) = P(N_1 - 1, t)\, W_1 + P(N_1 + 1, t)\, W_2,$$

em que W_1 e W_2 são "taxas de transição". Quais são as "expressões razoáveis" de W_1 e W_2? Por que? Ou seja, qual a hipótese envolvida nessa formulação?

(c) Verifique que a distribuição binomial,

$$P_N(N_1) = \frac{1}{2^N} \frac{N!}{N_1!\,(N - N_1)!},$$

é uma solução dessa equação de evolução temporal na "situação de equilíbrio" (isto é, para $t \to \infty$). Obtenha expressões para os valores médios (ou esperados), $\langle N_1 \rangle$ e $\langle (N_1 - \langle N_1 \rangle) \rangle$, e para o desvio quadrático médio (ou variância), $\sigma^2 = \left\langle (N_1 - \langle N_1 \rangle)^2 \right\rangle$, na situação de equilíbrio (depois de um tempo muito grande). Obtenha a expressão do "desvio padrão" relativo à média,

$$\frac{\sigma}{\langle N_1 \rangle} = \frac{\sqrt{\left\langle (N_1 - \langle N_1 \rangle)^2 \right\rangle}}{\langle N_1 \rangle}.$$

Observe o que acontece no limite $N \to \infty$.

(b) Utilize a "equação estocástica" desse problema para obter uma expressão para a evolução temporal do valor esperado (valor médio) de N_1,

$$\langle N_1 \rangle_t = \sum_{N_1} N_1 P(N_1, t).$$

Compare a forma de $\langle N_1 \rangle_t$ com os gráficos de N_1 contra o tempo t obtidos através das simulações do item (a).