Mecânica Estatística - IFUSP - 2023
terceira série de exercícios

1- Prove as propriedades elementares

$$(i) \quad \langle af\left(x\right)+bg\left(x\right)\rangle = a\left\langle f\left(x\right)\right\rangle + b\left\langle g\left(x\right)\right\rangle ,$$

$$(ii) \quad \langle cf\left(x\right)\rangle = c\left\langle f\left(x\right)\right\rangle ,$$

em que $f\left(x\right)$ e $g\left(x\right)$ são variáveis aleatórias associadas à distribuição de probabilidades $p\left(x\right)$, em que x assume valores no eixo real, e a, b e c são constantes.

2- Mostre que $\left\langle \left(\Delta x\right)^2\right\rangle = \left\langle \left(x-\langle x\rangle\right)^2\right\rangle = \langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2 \geq 0$.

3- Considere uma função de distribuição gaussiana,

$$p\left(x\right) = A\exp\left[-\frac{\left(x-x_0\right)^2}{2\sigma^2}\right],$$

em que A, x_0 e σ são constantes, e a variável aleatória x pode assumir valores em todo o eixo real.

Verifique a famosíssima integral gaussiana,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\alpha x^2\right) dx = \left(\frac{\pi}{\alpha}\right)^{1/2},$$

com $\alpha > 0$. Utilize esse resultado para mostrar que $A = \left(2\pi\sigma^2\right)^{-1/2}$ quando a função $p\left(x\right)$ for normalizada, isto é, quando

$$\int_{-\infty}^{+\infty} p\left(x\right) dx = 1.$$

Supondo que a distribuição esteja devidamente normalizada, mostre que

$$\langle x\rangle = x_0; \qquad \left\langle \left(x-x_0\right)^2\right\rangle = \sigma^2.$$

Note que, tomando $x_0 = \langle N_1\rangle = N/2$ e $\sigma = \sqrt{\left\langle \left(\Delta N_1\right)^2\right\rangle} = N/2$, temos uma excelente representação gaussiana para a distribuição binomial

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

Com um pouco de paciência e habilidade num microcomputador, é possível comparar os gráficos de $P_N(N_1)$ e da gaussiana correspondente (tente construir gráficos para $N = 5$ e $N = 10$, por exemplo). O "teorema do limite central" da teoria das probabilidades garante que, em quase todos os casos de interesse físico, as distribuições de probabilidades tendem para a gaussiana associada quando o número de eventos for suficientemente grande.

4- A expansão assintótica de Stirling,

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

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

Utilizando o método da indução finita e uma integração por partes, mostre que

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

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

O valor assintótico dessa integral (no limite de n muito grande) pode ser obtido através do "método de Laplace". Introduzindo uma mudança de variáveis, temos

$$n! = \int_0^\infty x^n \exp(-x)\, dx = n^{n+1} \int_0^\infty \exp[n(\ln y - y)]\, dy.$$

O problema então fica reduzido ao cálculo de uma integral da forma

$$I(n) = \int_0^\infty \exp[nf(y)]\, dy,$$

em que

$$f(y) = \ln y - y.$$

Note que a função $f(y)$ tem um máximo para $y = y_o = 1$. Note também que as contribuições para a integral de uma função do tipo $\exp[nf(y)]$, quando

$n \to \infty$, provêm essencialmente das vizinhanças desse máximo. Podemos então escrever um desenvolvimento em série de Taylor de $f(y)$ nas vizinhanças do máximo,

$$f(y) = -1 - \frac{1}{2}(y-1)^2 + ...,$$

descartar os termos de ordem superior, e fazer a integração sobre todo o eixo real. Assim temos

$$I(n) \approx \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left[-n - \frac{n}{2}(y-1)^2\right] dy = \left(\frac{2\pi}{n}\right)^{1/2} \exp(-n),$$

de onde é possível obter a forma de Stirling.

Os alunos com (excelente) formação matemática talvez consigam provar - com todo o rigor matemático, é claro - que

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

em que x_0 é o ponto de máximo de uma função contínua $f(x)$, com $a < x_0 < b$.

5- Considere o problema de um bêbado em uma dimensão, dando N passos de mesmo comprimento a partir de determinada origem. Em cada passo, o bêbado pode ir para a direita, com probabilidade p, ou para a esquerda, com probabilidade $q = 1 - p$.

(a) Para $N = 6$ e $p = 2/3$, desenhe um gráfico de $P_N(N_1)$ contra N_1/N, em que N_1 é o número de passos para a direita. 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 (ou seja, do valor médio e do valor quadrático médio). Desenhe um gráfico de $p_G(N_1)$ contra N_1/N e compare com o resultado para a distribuição binomial correspondente.

(b) Faça de novo os cálculos do item anterior para $N = 12$ e $N = 48$. Os novos gráficos são muito diferentes? Por que?

6 ** -** O "modelo da urna" de Ehrenfest proporciona uma ilustração excelente da presença de 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.

Na versão original do modelo da urna nós consideramos duas caixas, N bolas numeradas, e um gerador de 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, nós sorteamos um número aleatório entre 1 e N, e mudamos a posição (localização nas urnas) da bola correspondente.

(i) Faça 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). Faça as simulações para uma situação inicial em que $N_1 = N$ (todas as bolas estão na urna 1). Considere dois valores do número total de bolas: (a) $N = 10$ e (b) $N = 100$. O que você pode dizer a respeito das flutuações do valor de N_1? O que acontece no limite $t \to \infty$?

(ii) Mostre que a evolução temporal de $P(N_1, t)$, probabilidade de encontrar N_1 bolas na urna 1 no tempo t, é dada pela "equação de diferenças"

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

em que W_1 e W_2 são "taxas de transição". Adotando a hipótese de equiprobabilidade das configurações de bolas, quais são as expressões de W_1 e W_2? Verifique que a distribuição binomial é uma solução dessa equação "no equilíbrio" (isto é, para $t \to \infty$).

(iii) Utilize essa equação estocástica 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 t obtidos no item (i).

Se vocês estiveram dispostos a enfrentar considerações muito atuais sobre questões suscitadas pelo modelinho das urnas de Ehrenfest, sugiro que tentem ler um artigo recente de M. Baldovin, L. Caprini e A. Vulpiani, "Irreversibility and typicality: A simple analytical result for the Ehrenfest model", Physica A**524**, 422, 2019.