Universidade de São Paulo
Instituto de Física de São Carlos
7600023 - Termodinâmica e Física Estatística - 2023-2

Prof. Leonardo Paulo Maia

Gabarito da Prova 01 - 2023/10/16

$$\boxed{\Gamma(p) = \int_0^{\infty} z^{p-1}\mathrm{e}^{-z}\,dz = (p-1)!}\ \boxed{\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-\alpha x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}}\ \boxed{\sum_{n=0}^{\infty} \beta^n = (1-\beta)^{-1}},\ |\beta| < 1$$

1. (2,5)

a Determine uma expressão geral para a covariância $\mathrm{cov}(X, Y)$ de duas variáveis aleatórias quaisquer X e Y (não necessariamente independentes) em termos das médias $\langle X \rangle$, $\langle Y \rangle$ e $\langle X.Y \rangle$. É preciso partir da definição, que não envolve essas quantidades, e obter uma expressão final que as exiba explicitamente. Quanto vale $\mathrm{cov}(X, Y)$ se X e Y forem independentes?

b Determine a variância $\mathrm{var}(X + Y)$ da soma de duas variáveis aleatórias quaisquer, X e Y, em termos de $\mathrm{cov}(X, Y)$ e das variâncias das parcelas da soma.

Resolução:

a

$$\begin{aligned}\mathrm{cov}(X, Y) &= \langle (X - \langle X \rangle)(Y - \langle Y \rangle) \rangle = \langle XY - Y\langle X \rangle - X\langle Y \rangle + \langle X \rangle\langle Y \rangle \rangle = \\ &= \langle XY \rangle - \langle Y \rangle\langle X \rangle - \langle X \rangle\langle Y \rangle + \langle X \rangle\langle Y \rangle \therefore \boxed{\mathrm{cov}(X, Y) = \langle XY \rangle - \langle X \rangle\langle Y \rangle}\end{aligned}$$

Se X e Y forem independentes, $\rho_{X,Y}(x, y) = \rho_X(x) \cdot \rho_Y(y)$ e

$$\langle X \cdot Y \rangle = \int x \cdot y\, \rho_{X,Y}(x, y)\, dx\, dy = \left[\int x\, \rho_X(x)\, dx\right] \cdot \left[\int y\, \rho_Y(y)\, dy\right] = \langle X \rangle\langle Y \rangle,$$

de modo que $\boxed{\mathrm{cov}(X, Y) = 0}$.

b

$$\begin{aligned}\mathrm{var}(X + Y) &= \Big\langle \left[(X + Y) - \langle X + Y \rangle \right]^2 \Big\rangle = \Big\langle \left[(X - \langle X \rangle) + (Y - \langle Y \rangle) \right]^2 \Big\rangle = \\ &= \Big\langle (X - \langle X \rangle)^2 + 2(X - \langle X \rangle)(Y - \langle Y \rangle) + (Y - \langle Y \rangle)^2 \Big\rangle = \\ &= \Big\langle (X - \langle X \rangle)^2 \Big\rangle + 2 \Big\langle (X - \langle X \rangle)(Y - \langle Y \rangle) \Big\rangle + \Big\langle (Y - \langle Y \rangle)^2 \Big\rangle \\ &\therefore \boxed{\mathrm{var}(X + Y) = \mathrm{var}(X) + \mathrm{var}(Y) + 2\,\mathrm{cov}(X, Y)}.\end{aligned}$$

2. (4,0) Considere a variável aleatória τ (letra grega "tau"), que é o "tempo de espera até um sucesso", onde $p \in [0,1]$ é a probabilidade de sucesso. Sua distribuição de probabilidade é dada por $\boxed{p_n \equiv \mathbb{P}(\tau = n) = (1-p)^{n-1} \cdot p}$, com $n = 1, 2, \cdots$.

a Mostre que a distribuição de probabilidade $\{p_n\}$ está devidamente normalizada, como deveria.

b Calcule $\langle \tau \rangle$, a média de τ.

c Calcule $\mathrm{var}(\tau)$, a variância de τ.

d Calcule a função geradora de τ,

$$g_\tau(z) \equiv \sum_{n \in S_\tau} p_n z^n$$

onde S_τ é o espaço de realizações de τ.

e (apenas explicativo) Agora considere a variável aleatória T_k, que é o "tempo de espera até o k-ésimo sucesso". É possível mostrar (mas você não deve fazer isso!) que sua distribuição de probabilidade é dada por

$$\boxed{q_m \equiv \mathbb{P}(T_k = m) = \binom{m-1}{k-1} p^k (1-p)^{m-k}},$$

com $m = k, k+1, k+2, \cdots$. A variável T é mais complexa do que τ e, comparativamente, seu estudo a partir de $\{q_m\}$ poderia exigir muito mais esforços do que o caso anterior. Porém, há um ponto de vista que pode simplificar muito o cálculo da média e da variância de T sem utilizar $\{q_m\}$! Note que T_1 é exatamente uma variável como τ. Além disso, após cada "sucesso", o "tempo aleatório de espera" também é uma variável aleatória que pode ser facilmente reconhecida.

f Expresse T_k como algum tipo de combinação de variáveis aleatórias mais simples (que devem ser adequadamente identificadas/indexadas) e determine $\langle T_k \rangle$ e $\mathrm{var}(T_k)$ a partir de características dessas componentes mais simples.

Resolução: A função geradora, pedida no item d, será, antes de tudo, discutida para uma variável aleatória geral X e obtida para a particular variável aleatória do início deste problema, τ, pois rapidamente fornece as respostas dos itens a, b e c.

Normalização: se a distribuição estiver devidamente normalizada,

$$g_X(z) \equiv \sum_{n \in S_X} p_n z^n \implies g_X(1) = \sum_{n \in S_X} p_n = 1$$

$$\therefore \boxed{g_X(1) = 1}.$$

Além disso,

$$g_X(z) \equiv \sum_{n \in S_X} p_n z^n \implies g'_X(z) = \sum_{n \in S_X} n\, p_n z^{n-1} \implies g'_X(1) = \sum_{n \in S_X} n\, p_n$$

$$\therefore \boxed{g'_X(1) = \langle X \rangle}$$

e

$$g_X(z) \equiv \sum_{n \in S_X} p_n z^n \implies g''_X(z) = \sum_{n \in S_X} n(n-1)\, p_n z^{n-2} \implies g''_X(1) = \sum_{n \in S_X} n(n-1)\, p_n$$

$$\therefore \boxed{g''_X(1) = \langle X(X-1) \rangle}$$

Neste problema,

$$g_\tau(z) = \sum_{n=1}^{\infty} pq^{n-1} z^n = pz \sum_{n=1}^{\infty} (qz)^{n-1} = pz \sum_{m=0}^{\infty} (qz)^m$$

$$\therefore \boxed{g_\tau(z) = \frac{pz}{1-qz}}$$

e valem as derivadas

$$g_\tau(z) = \frac{pz}{1-qz} \implies \boxed{g'_\tau(z) = \frac{p}{(1-qz)^2}} \implies \boxed{g''_\tau(z) = \frac{2pq}{(1-qz)^3}}.$$

Assim,

$$g_\tau(1) = \frac{p}{1-q} = 1,$$

$$\langle \tau \rangle = g'_\tau(1) = \frac{p}{(1-q)^2} = \frac{p}{p^2} \therefore \boxed{\langle \tau \rangle = \frac{1}{p}}$$

e

$$\begin{aligned}\operatorname{var}\tau = \langle\tau^2\rangle - \langle\tau\rangle^2 = [\langle\tau(\tau-1)\rangle + \langle\tau\rangle] - \langle\tau\rangle^2 = [g''_\tau(1) + g'_\tau(1)] - [g'_\tau(1)]^2 = \\ = \left[\frac{2q}{p^2} + \frac{1}{p}\right] - \frac{1}{p^2} = \left[\frac{2(1-p)}{p^2} + \frac{1}{p}\right] - \frac{1}{p^2} = \frac{1}{p^2} - \frac{1}{p} \\ \therefore \boxed{\operatorname{var}\tau = \frac{q}{p^2} = \frac{1-p}{p^2}}.\end{aligned}$$

O tempo de espera até o k-ésimo sucesso é a soma de k v.a.'s independentes τ_i, $T_k = \sum_{i=1}^{k} \tau_i$, onde cada τ_i é identicamente distribuída à variável τ já estudada. É fácil calcular diretamente a média e a variância de T_k: pela independência estatística, $\langle T_k\rangle = k \cdot \langle\tau_i\rangle = k/p$ e $\operatorname{var} T_k = k \cdot \operatorname{var}\tau_i = kq/p^2$.

3. (3,5) *Distribuição de Maxwell 1D e 2D* - Vamos recordar a dedução da distribuição de velocidades (em módulo, $v > 0$) de Maxwell de um gás tridimensional termalizado à temperatura T e adaptá-la aos casos unidimensional e bidimensional. Tudo começa com um problema unidimensional e um fator de Boltzmann, $e^{-\beta E}$, onde $\beta = (k_B T)^{-1}$, k_B é a constante de Boltzmann e E é a energia de uma partícula do fluido sob análise. A densidade de probabilidade $\rho_1(v_x)$ de uma partícula de velocidade v_x (que pode ser negativa, $-\infty < v_x < +\infty$) deve ser proporcional ao seu fator de Boltzmann.

a. Qual é a energia $E = E(m, v_x)$ de uma partícula livre de massa m que se move em uma dimensão com velocidade v_x? Dado que $\rho_1(v_x) = C \cdot e^{-\beta E}$, onde C é uma constante de normalização, determine C.

b. Este item não pede respostas, é apenas explicativo! A famosa distribuição de velocidades de Maxwell para o **módulo** da velocidade de uma partícula em 3 dimensões, $v > 0$, é dada por

$$f_3(v) = 4\pi v^2 \cdot C^3 \cdot \exp\left\{-\frac{\beta m}{2}v^2\right\},$$

onde C é a mesma constante do item anterior. Ela é obtida em dois passos.

Primeiro, adota-se uma hipótese de independência estatística, que leva à construção da distribuição conjunta

$$\begin{aligned}\rho_3(v_x, v_y, v_z) = C^3 \cdot \exp\left\{-\frac{\beta m}{2}v_x^2\right\} \cdot \exp\left\{-\frac{\beta m}{2}v_y^2\right\} \cdot \exp\left\{-\frac{\beta m}{2}v_z^2\right\} = \\ = C^3 \cdot \exp\left\{-\frac{\beta m}{2}v^2\right\},\end{aligned}$$

tal que $\rho_3(v_x, v_y, v_z)dv_x dv_y dv_z$ é a probabilidade de ocorrência/observação de um vetor velocidade bem definido, de componentes cartesianas (v_x, v_y, v_z), $-\infty < v_x, v_y, v_z < +\infty$. Segundo, para eliminar a desnecessária informação sobre a direção do vetor velocidade, a "probabilidade por unidade de volume" $\rho_3(v_x, v_y, v_z)$ é multiplicada pelo volume infinitesimal $4\pi v^2 dv$ de uma casca esférica onde o módulo da velocidade é bem definido, v, e impõe-se que

$$f_3(v)dv = \rho_3(v_x, v_y, v_z)4\pi v^2 dv.$$

c. Determine expressões $f_1(v)$ e $f_2(v)$ para as distribuições de probabilidade dos módulos das velocidades das partículas de gases termalizados em uma dimensão e duas dimensões, respectivamente. Por exemplo,

$$f_2(v)dv = \rho_2(v_x, v_y) \cdot (\text{área infinitesimal de um anel circular}).$$

Por outro lado, no caso 1D, v é simplesmente o módulo de v_x, $v = |v_x|$. Determine $\langle v \rangle$ e $\langle v^2 \rangle$ nos casos 1D e 2D.

Resolução:

- $$\boxed{E = \frac{mv_x^2}{2}}$$

  Seja $\boxed{\alpha \equiv \frac{m}{2k_BT}}$. Essa constante será utilizada nos cálculos a seguir, para simplificá-los.

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} \rho_1(v_x)\, dv_x = C \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-\alpha v_x^2}\, dv_x = C\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$$
$$\therefore \boxed{C = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} = \sqrt{\frac{m}{2\pi k_BT}}}$$

- 1D: Em uma dimensão, como o mesmo módulo v pode ser obtido com $v < v_x < v+dv$ e $-v-dv < v_x < -v$ e ρ_1 é uma função par, o "termo geométrico" corresponde a "dois intervalos dv":

$$f_1(v)dv = \rho_1(+v)\, dv + \rho_1(-v)\, dv = \rho_1(v) \cdot (2\, dv)$$
$$\therefore \boxed{f_1(v) = 2\sqrt{\frac{\alpha}{\pi}}\, \mathrm{e}^{-\alpha v^2}}.$$

$$\langle v\rangle_{1\mathrm{D}} = \int_0^{+\infty} v\, f_1(v)\, dv = 2\sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \int_0^{+\infty} v\, \mathrm{e}^{-\alpha v^2}\, dv = 2\sqrt{\frac{\alpha}{\pi}}\frac{1}{2\alpha} \int_0^{+\infty} 2\alpha v\, \mathrm{e}^{-\alpha v^2}\, dv =$$
$$= \frac{1}{\sqrt{\alpha\pi}} \int_0^{+\infty} \mathrm{e}^{-z}\, dz = \frac{1}{\sqrt{\alpha\pi}}\,\Gamma(1) = \frac{1}{\sqrt{\alpha\pi}} \therefore \boxed{\langle v\rangle_{1\mathrm{D}} = \frac{1}{\sqrt{\alpha\pi}}}.$$

$$\langle v^2\rangle_{1\mathrm{D}} = \int_0^{+\infty} v^2\, f_1(v)\, dv = 2\sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \int_0^{+\infty} v^2\, \mathrm{e}^{-\alpha v^2}\, dv = 2\sqrt{\frac{\alpha}{\pi}}\frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} v^2\, \mathrm{e}^{-\alpha v^2}\, dv =$$
$$= \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \left(-\frac{d}{d\alpha}\right) \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-\alpha v^2}\, dv = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \left(-\frac{d}{d\alpha}\right) \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} = -\sqrt{\alpha}\left(-\frac{1}{2}\right)\alpha^{-3/2}$$
$$\therefore \boxed{\langle v^2\rangle_{1\mathrm{D}} = \frac{1}{2\alpha}}.$$

- 2D:

$$f_2(v)dv = \rho_2(v_x, v_y)\, \cdot (2\pi v\, dv)$$
$$\therefore \boxed{f_2(v) = 2\pi v\, C^2\, \mathrm{e}^{-\alpha v^2} = 2\alpha\, v\mathrm{e}^{-\alpha v^2}}.$$

$$\begin{aligned}\langle v\rangle_{2\mathrm{D}} &= \int_0^{+\infty} v\, f_2(v)\, dv = 2\alpha \int_0^{+\infty} v^2\, \mathrm{e}^{-\alpha v^2}\, dv = 2\alpha \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} v^2\, \mathrm{e}^{-\alpha v^2}\, dv = \\ &= \alpha \left(-\frac{d}{d\alpha}\right) \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-\alpha v^2}\, dv = \alpha \left(-\frac{d}{d\alpha}\right) \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} = -\alpha\sqrt{\pi} \left(-\frac{1}{2}\right) \alpha^{-3/2} \\ &\therefore \boxed{\langle v\rangle_{2\mathrm{D}} = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}}.\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\langle v^2\rangle_{2\mathrm{D}} &= \int_0^{+\infty} v^2\, f_2(v)\, dv = 2\alpha \int_0^{+\infty} v^3\, \mathrm{e}^{-\alpha v^2}\, dv = \frac{1}{\alpha} \int_0^{+\infty} (2\alpha v)\, (\alpha v^2)\, \mathrm{e}^{-\alpha v^2}\, dv = \\ &= \frac{1}{\alpha} \int_0^{+\infty} z\, \mathrm{e}^{-z}\, dz = \frac{1}{\alpha}\, \Gamma(2) = \frac{1}{\alpha} \\ &\therefore \boxed{\langle v^2\rangle_{2\mathrm{D}} = \frac{1}{\alpha}}.\end{aligned}$$