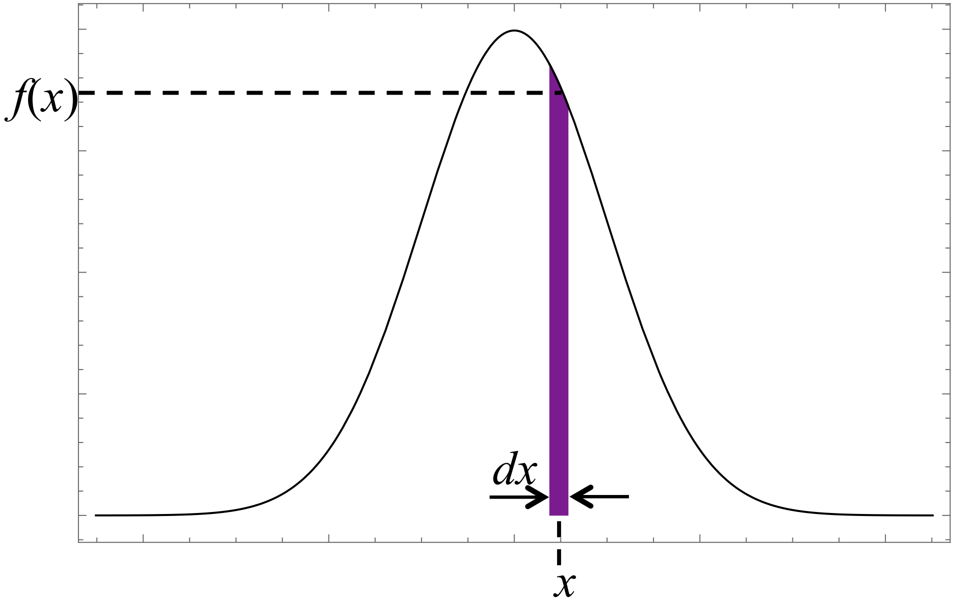
4300259 – Termoestatística

Funções de Distribuição de Probabilidade – II



– Função de Distribuição (Densidade) de Probabilidade:

$$f(x) = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{\Delta P(x)}{\Delta x} = \frac{dP(x)}{dx}$$

– Probabilidade de um evento no intervalo *dx* em torno de *x*:

$$dP(x) = f(x)\, dx$$

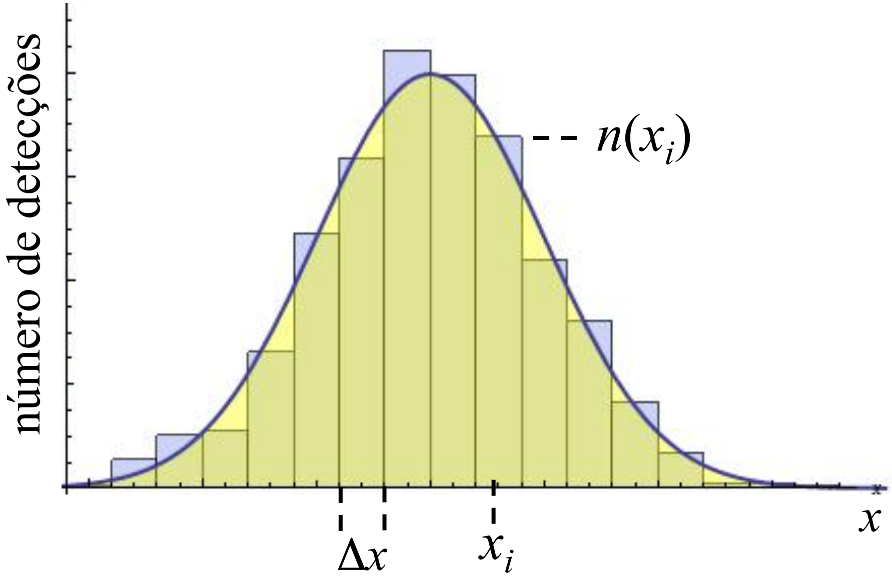
– Normalização:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dP = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) dx = 1$$

– Probabilidade de detectar uma partícula entre $x = a$ e $x = b$:

$$P(a < x < b) = \lim_{\Delta x \to 0} \underbrace{\sum_i \Delta P_i}_{\text{soma sobre intervalos } a < x_i < b} = \int_a^b dP = \int_a^b f(x) dx$$

Valor Médio: Qual o valor médio <x> das posições de todas as moléculas detectadas?



$n(x_i)$ = número de moléculas detectadas no i-ésimo intervalo
x_i = centro do i-ésimo intervalo.
N = número total de moléculas detectadas
η = número de intervalos. Portanto:

$$N = \sum_{i=1}^{\eta} n(x_i)$$

– O valor médio <x> corresponde à média aritmética das posições (x_α) das N partículas detectadas:

$$\langle x \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\alpha=1}^{N} x_\alpha$$

– Se o intervalo Δx for estreito, todas as $n(x_i)$ detecções dentro do i-ésimo histograma serão próximas ao seu centro, $x_\alpha \approx x_i$ (dentro do intervalo Δx).

– Poderemos aproximar a soma sobre detecções (índice α) por uma soma sobre histogramas (índice *i*):

$$\langle x\rangle = \underbrace{\tfrac{1}{N}\textstyle\sum_{\alpha=1}^{N} x_\alpha}_{\text{soma sobre } N \text{ detecções}} \approx \underbrace{\tfrac{1}{N}\textstyle\sum_{i=1}^{\eta} n(x_i)x_i}_{\text{soma sobre } \eta \text{ histogramas}} = \textstyle\sum_{i=1}^{\eta} \underbrace{\Delta P(x_i)}_{\text{Probabilidade de detectar uma partícula no intervalo centrado em } x_i.} x_i$$

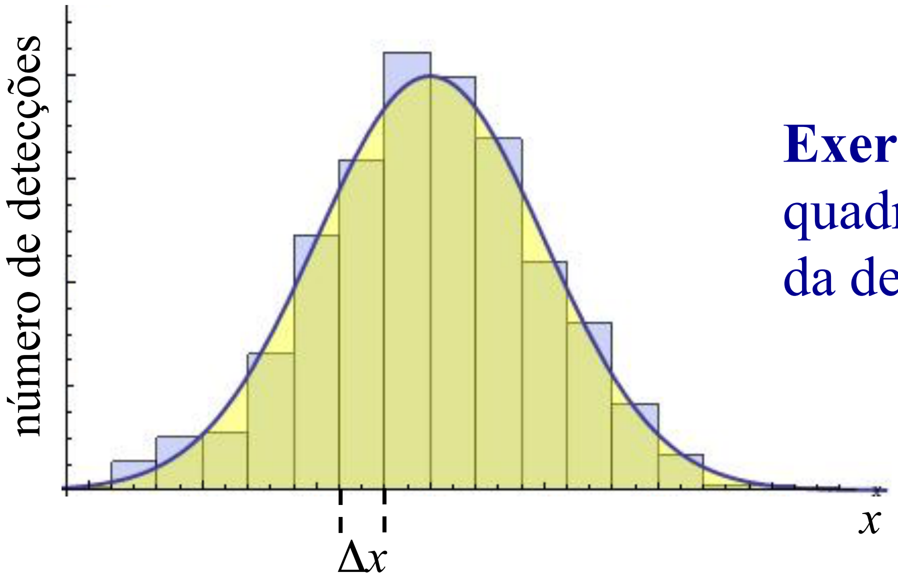
– Tomando o limite de distribuição contínua ($\Delta x \to 0$ e $\eta \to \infty$):

$$\langle x\rangle = \lim_{\Delta x\to 0} \textstyle\sum_{i=1}^{\eta} \Delta P(x_i)x_i = \int_{-\infty}^{+\infty} x\, dP$$

– Em termos da densidade de probabilidade:

$$\boxed{\langle x\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\, x\, dx}$$

(valor médio das posições x ponderado pela probabilidade $dP = f(x)dx$)



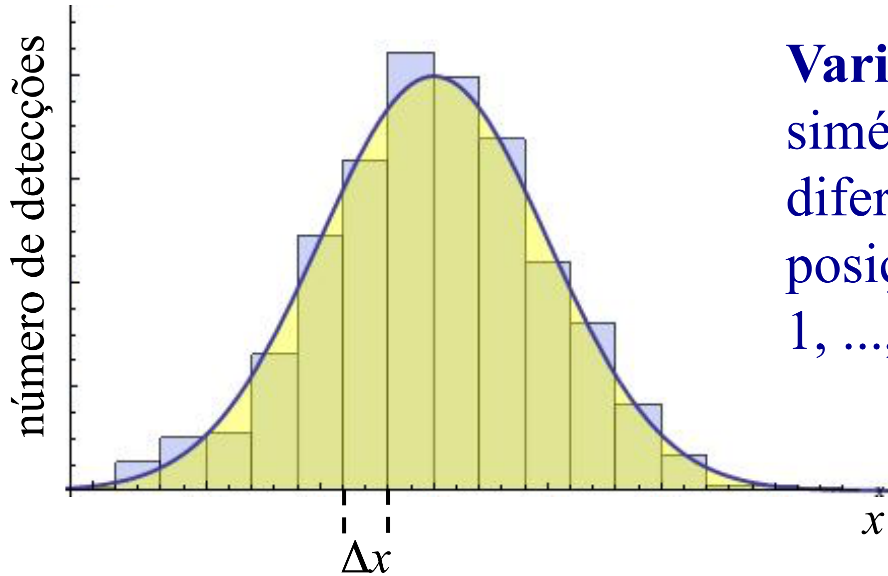
Exercício: expresse o valor médio dos quadrados das posições $\langle x^2 \rangle$ em termos da densidade de probabilidade $f(x)$.

– Basta tomar o valor médio de x^2 sobre todas as detecções e utilizar os mesmos argumentos:

$$\langle x^2 \rangle \;=\; \tfrac{1}{N}\sum_{\alpha=1}^{N} x_\alpha^2 \;\approx\; \tfrac{1}{N}\sum_{i=1}^{\eta} n(x_i)x_i^2 \;=\; \sum_{i=1}^{\eta} \Delta P(x_i)x_i^2$$

$$\langle x^2 \rangle \;=\; \lim_{\Delta x \to 0} \sum_{i=1}^{\eta} \Delta P(x_i)x_i^2 \;=\; \int_{-\infty}^{+\infty} x^2\, dP$$

$$\boxed{\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\, x^2\, dx}$$



Variância: uma vez que a distribuição é simétrica em torno de $x = 0$, a soma das diferenças ($x_\alpha - \langle x \rangle$), onde x_α denota as posições das moléculas detectadas ($\alpha = 1, ..., N$) deve ser nula. Em geral:

$$\frac{1}{N}\sum_{\alpha=1}^{N}(x_\alpha - \langle x\rangle) \approx 0$$

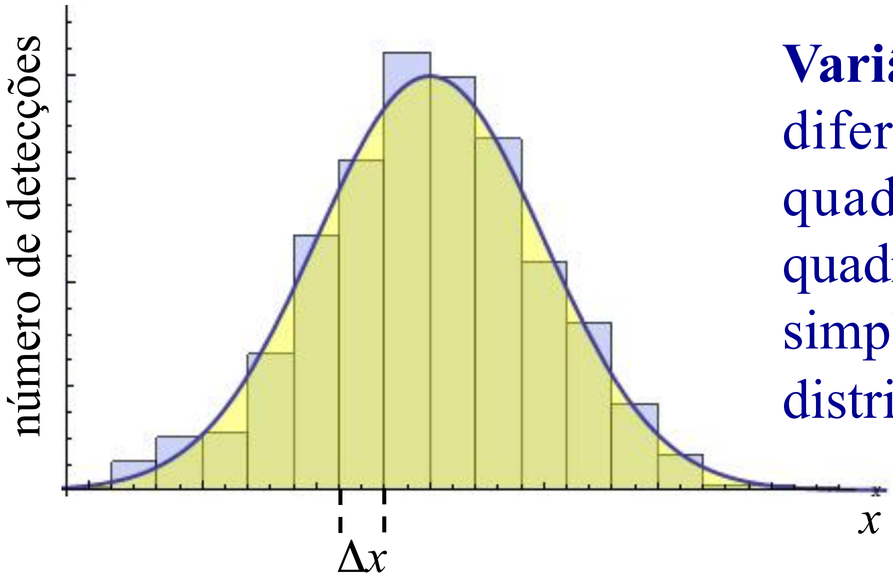
– Para contornar essa dificuldade, a *variância* (σ^2) da distribuição dos eventos em torno da média é definida pelo quadrado das diferenças:

$$\sigma^2 = \frac{1}{N}\sum_{\alpha=1}^{N}(x_\alpha - \langle x\rangle)^2$$

$$= \frac{1}{N}\sum_{\alpha=1}^{N}(x_\alpha)^2 - \frac{2}{N}\sum_{\alpha=1}^{N}x_\alpha\langle x\rangle + \frac{1}{N}\sum_{\alpha=1}^{N}\langle x\rangle^2$$

$$= \langle x^2\rangle - 2\langle x\rangle\langle x\rangle + \frac{N}{N}\langle x\rangle^2$$

$$\boxed{\sigma^2 = \langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2}$$



Variância: Como a variância é dada pela diferença entre o valor médio dos quadrados das posições $<x^2>$ e o quadrado da posição média $<x>^2$, é simples obtê-la a partir da função de distribuição:

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\, x\, dx$$

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\, x^2\, dx$$

$$\boxed{\sigma^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$$