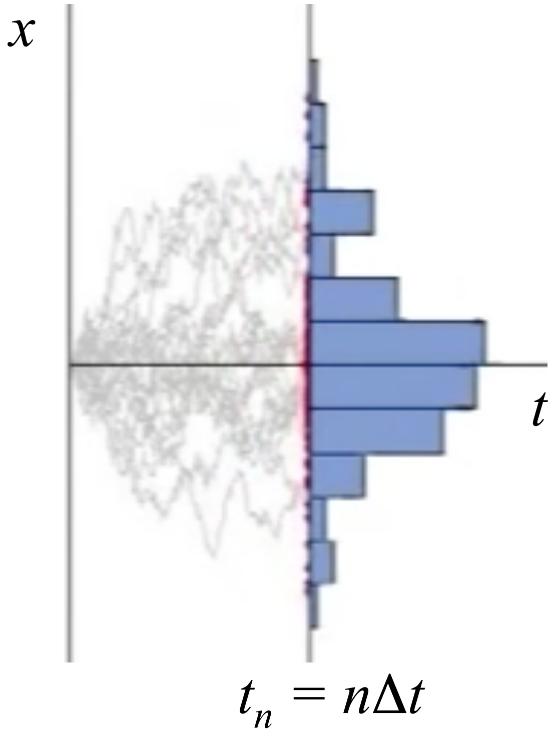
4300259 – Termoestatística

Movimento Browniano - IV

Distribuição Binomial



p = probabilidade de um passo para frente

q = probabilidade de um passo para trás

$(p + q) = 1$

N = número total de passos

n = número de passos para frente

m = número de passos para trás

$N = (n+m)$ ou $n = (N-m)$

$$\boxed{P_N(n) = \frac{N!}{n!\,(N-n)!}\, p^n\, q^{N-n} \equiv \binom{N}{n} p^n\, q^{N-n}}$$

Distribuição Binomial

– Fixando N e n (ou n e m), fixaremos também a posição dos passeios ao final de N passos, x_N, pois cada passo tem comprimento l:

$$x_N = (n - m)\,l = (2n - N)\,l$$

– **Exercício**: Considere a mesma situação discutida na última aula, um passeio aleatório com $p = q = ½$, e $N = 5$. Calcule o valor médio da posição (sobre uma grande coleção de passeios), após os cinco passos, $\langle x_5 \rangle$.

<u>Sugestão</u>: Obtenha o valor médio do número de passos para frente, $\langle n \rangle$, e explore a relação $x_N = (2n - N)l$.

– Valor médio de n:

$$\langle n \rangle = \sum_{n=0}^{5} n\, P_5(n) = 0 \times \frac{1}{32} + 1 \times \frac{5}{32} + $$

$$+ 2 \times \frac{10}{32} + 3 \times \frac{10}{32} + 4 \times \frac{5}{32} + 5 \times \frac{1}{32} = \frac{80}{32} = 2.5$$

– Valor médio de x_5:

$$x_N = (2n - N)\, l \Longrightarrow \langle x_N \rangle = (\, 2\langle n \rangle - N\,)\, l$$

$$\frac{1}{l} \langle x_5 \rangle = 2\langle n \rangle - 5 = 2 \times \frac{80}{32} - 5 = 0$$

– Em geral, podemos realizar a média de *n* na forma:

$$\langle n \rangle = \sum_{n=0}^{N} n\, P_N(n) = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\begin{array}{c} N \\ n \end{array} \right) n\, p^n\, q^{N-n}$$

– Porém: $np^n = p \dfrac{d}{dp} (p^n)$

$$\langle n \rangle = \sum_{n=0}^{N} n\, P_N(n) = p \frac{d}{dp} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\begin{array}{c} N \\ n \end{array} \right) p^n\, q^{N-n}$$

$$= p \frac{d}{dp} (p+q)^N = p\, N\, (p+q)^{N-1} = pN$$

– Por um argumento semelhante, podemos demonstrar que a variância do número de passos é dada por:

$$\langle \sigma_n^2 \rangle = \langle n^2 \rangle - \langle n \rangle = Npq$$

$$\langle n \rangle = Np \qquad \sigma_n^2 = \langle n^2 \rangle - \langle n \rangle^2 = Npq$$

– **Exercício**: Utilizando os resultados acima, calcule os valores médios $\langle x_N \rangle$ e $\langle x^2{}_N \rangle$, para o caso $p = q = ½$.

<u>Sugestão</u>: Uma vez mais, explore a relação $x_N = (2n - N)$

– Valor médio de x_N (para p = ½):

$$\langle x_N \rangle = \langle (n-m)l \rangle = \langle (2n-N)l \rangle = 2l\langle n \rangle - Nl$$
$$= 2lNp - Nl = Nl - Nl = 0$$

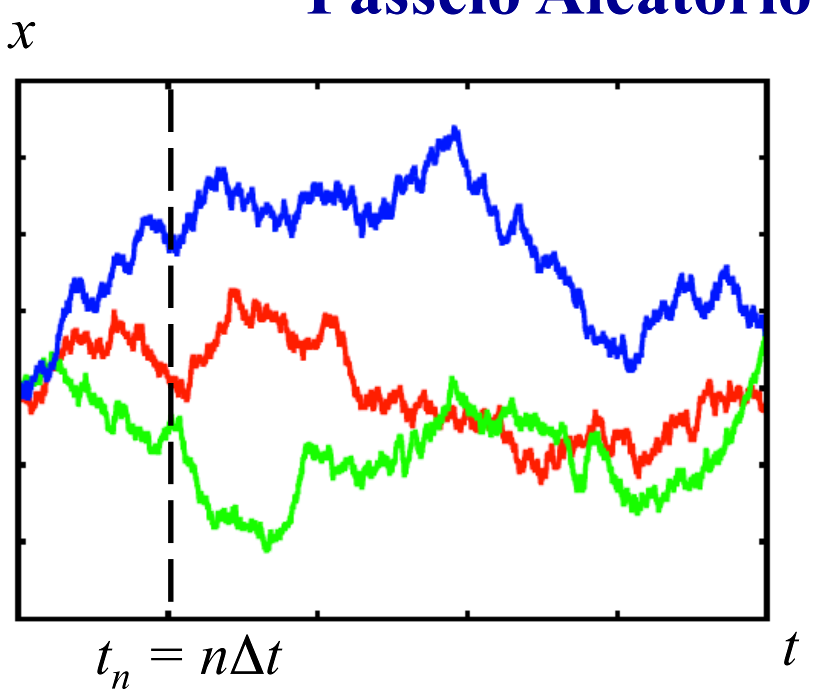
– A variância pode ser obtida na forma:

$$\sigma_x^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = \langle [(2n-N)l]^2 \rangle = 4l^2\langle n^2 \rangle - 4Nl^2\langle n \rangle + N^2l^2$$

– Para $p = q$ = ½, temos $<n> = N/2$, e $\sigma^2_n = N/4$. Assim:

$$\sigma_x^2 = 4l^2\langle n^2 \rangle - 8l^2\langle n \rangle^2 + N^2l^2$$
$$= 4l^2\left(\langle n^2 \rangle - \langle n \rangle^2\right) - 4l^2\langle n \rangle^2 + N^2l^2$$
$$= 4l^2\frac{N}{4} - 4l^2\left(\frac{N}{2}\right)^2 + N^2l^2 = Nl^2$$

Passeio Aleatório e Coeficiente de Difusão



– O exercício anterior reproduz o resultado obtido anteriormente, ilustrando o fato de que a Distribuição Binomial representa uma densidade de probabilidade para uma coleção de passeios aleatórios.

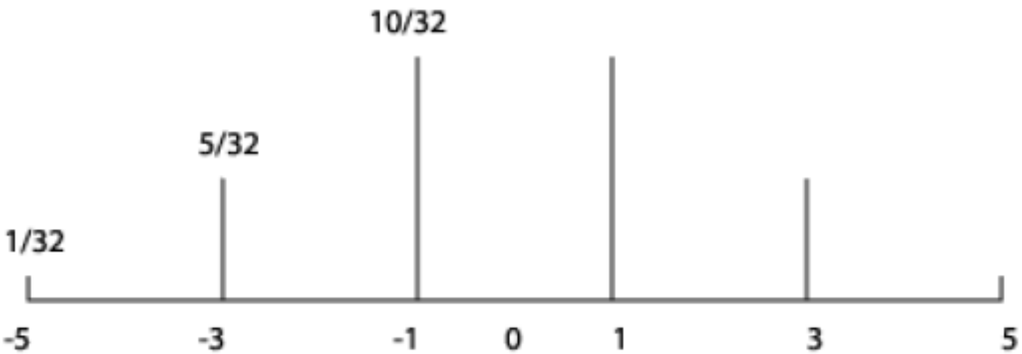
$$\langle x_N \rangle = 0 \qquad \langle x_N^2 \rangle = N l^2$$

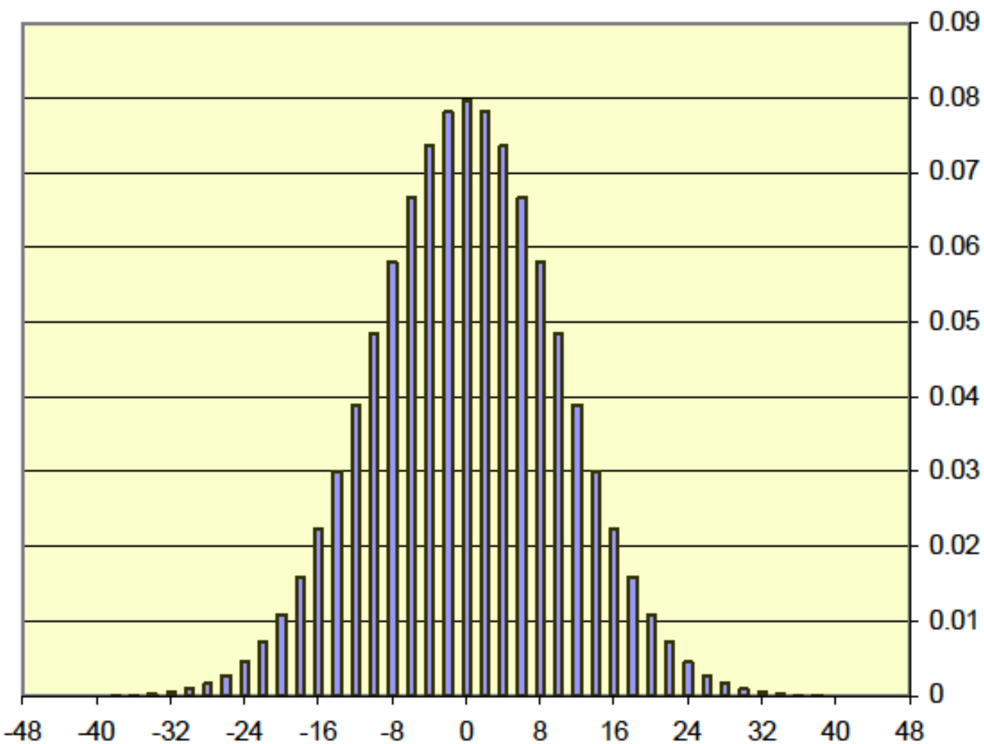
$$\sigma_N^2 = \langle x_N^2 \rangle - \langle x_N \rangle^2 = N l^2$$

–*Coeficiente de Difusão* (*D*):

$$\langle x_N^2 \rangle = N l^2 = \frac{l^2}{\Delta t} t_N \equiv 2 D t_N$$

$$P_N(n) = \binom{N}{n} p^n q^{N-n}$$





$x/l = (n - m)$

– Os gráficos ao lado mostram a distribuição binomial $P_N(n)$ para $p = q = ½$. São mostrados os casos $N = 5$ e para $N = 100$, em função da posição final, $x = (n - m)l$, que varia de $-Nl$ a $+Nl$.

– Perceba que o gráfico para $N = 100$ se assemelha a uma Distribuição Normal. Isso não é uma coincidência!

– Embora $-100l \leq x \leq 100l$, a função $P_{100}(x)$ assume valores muito pequenos para $\pm 40l$.

– Note que em N passos de comprimento l, as posições finais possíveis estarão no intervalo $-Nl \leq x_N \leq +Nl$.

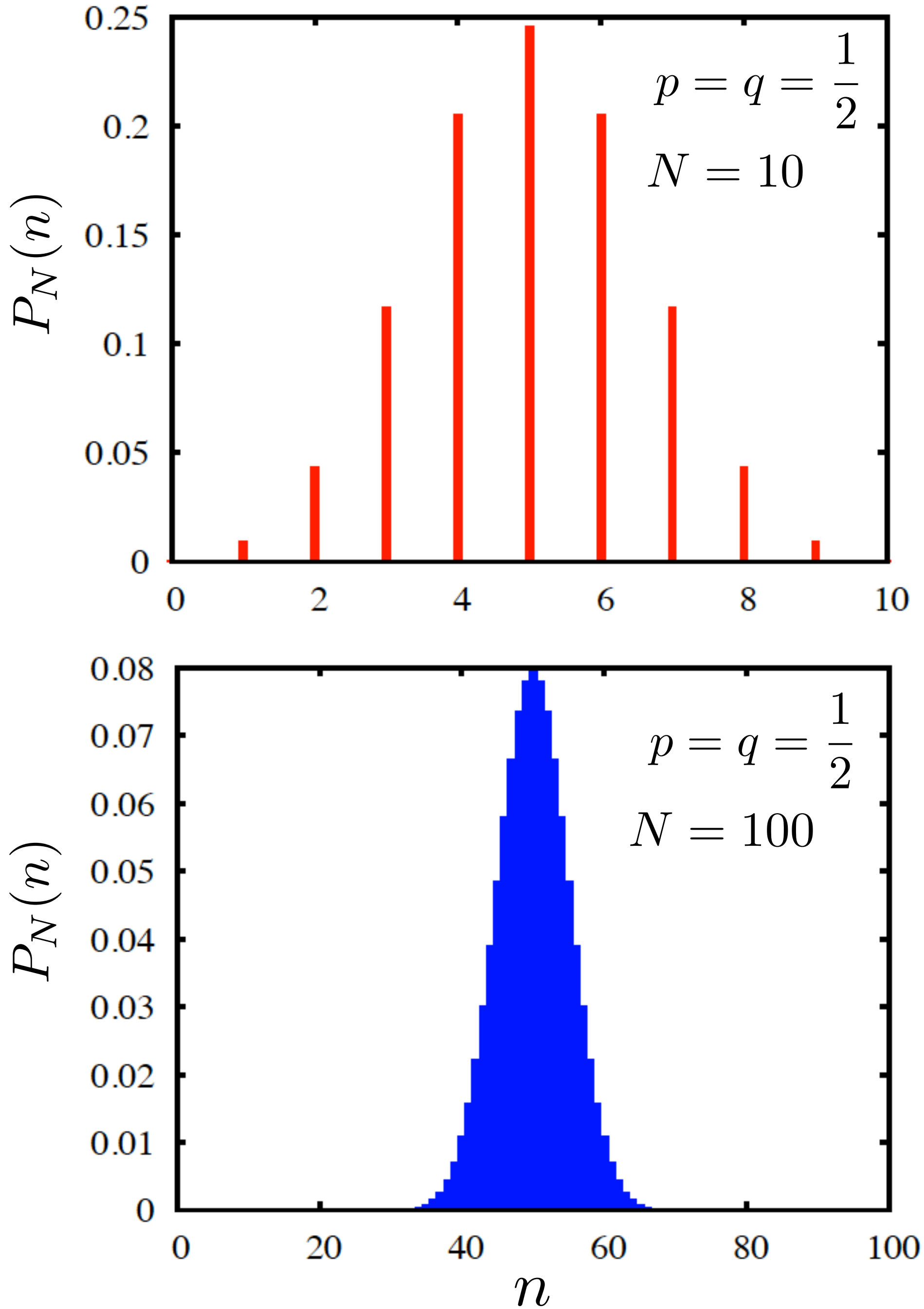
– Perceba também que:

$$N = 10 \Longrightarrow \frac{l}{2Nl} = \frac{1}{20} \quad \text{e} \quad -10l \leq x_{10} \leq 10l$$

$$N = 100 \Longrightarrow \frac{l}{2Nl} = \frac{1}{200} \quad \text{e} \quad -100l \leq x_{100} \leq 100l$$

$$N = 1000 \Longrightarrow \frac{l}{2Nl} = \frac{1}{2000} \quad \text{e} \quad -1000l \leq x_{1000} \leq 1000l$$

– Assim, no limite de um grande número de passos ($N \to \infty$) a distribuição das posições finais se torna contínua.



– Em termos relativos, a distribuição torna-se mais estreita para $N = 100$.

– As barras verticais em ambos os gráficos têm a mesma espessura. A impressão de distribuição contínua ("área preenchida") no caso $N = 100$ resulta da menor separação relativa entre as barras:

$$\frac{\Delta n}{N} = \frac{1}{N}$$

$$\frac{\Delta x}{2Nl} = \frac{2\Delta n\, l}{2Nl} = \frac{1}{N}$$

Limite de Distribuição Normal

– Como demonstrado por F. Reif, *Fundamentals of Stastistical and Thermal Physics*, Sec. 1.5 (e em vários outros livros-textos), no limite $N \to \infty$, a Distribuição Binomial se aproxima de uma Distribuição Normal:

$$\lim_{N\to\infty} P_N(x) \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_x^2}} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma_x^2} x^2\right)$$

– Em termos do coeficiente de difusão: $\langle {\sigma_x}^2 \rangle = \langle {x_N}^2 \rangle = 2Dt_N$ (ainda no limite $N \to \infty$):

$$P(x,t) \approx \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp\left(-\frac{1}{4Dt} x^2\right)$$

Exercício: Verifique que a Função de Distribuição, no limite $N \to \infty$, satisfaz a equação diferencial (denominada Equação de Difusão):

$$D \frac{\partial^2}{\partial x^2} P(x,t) - \frac{\partial}{\partial t} P(x,t) = 0$$

$$P(x,t) \;=\; \frac{1}{\sqrt{4\pi D t}}\,\exp\left(-\frac{1}{4Dt}x^2\right)$$

Basta realizar as derivadas e verificar sua igualdade:

$$D\frac{\partial}{\partial x}P(x,t) \;=\; D\frac{1}{\sqrt{4\pi D t}}\;\frac{\partial}{\partial x}\exp\left(-\frac{1}{4Dt}x^2\right) \;=$$

$$=\; -D\frac{1}{\sqrt{4\pi D t}}\;\frac{1}{4Dt}(2x)\exp\left(-\frac{1}{4Dt}x^2\right) \;=\; -\frac{x}{2t}P(x,t)$$

$$D\frac{\partial^2}{\partial x^2}P(x,t) \;=\; \frac{\partial}{\partial x}\left(-\frac{x}{2t}P(x,t)\right) \;=\; -\frac{1}{2t}P(x,t) \;+\; \frac{x^2}{4t^2}P(x,t)$$

Acima, no cálculo da segunda derivada, foi utilizado o resultado da primeira.
Já em relação ao tempo:

$$\frac{\partial}{\partial t}P(x,t) \;=\; \frac{\partial}{\partial t}\left[\frac{1}{\sqrt{4\pi D t}}\;\exp\left(-\frac{1}{4Dt}x^2\right)\right] \;=$$

$$=\;\left[-\frac{1}{2}\frac{1}{\sqrt{4\pi D t^3}} \;+\; \frac{1}{\sqrt{4\pi D t}}\left(-\frac{x^2}{4D}\right)\left(-\frac{1}{t^2}\right)\right]\exp\left(-\frac{1}{4Dt}x^2\right) \;=$$

$$=\; -\frac{1}{2t}P(x,t) \;+\; \frac{x^2}{4t^2}P(x,t)$$