4302401 – Mecânica Estatística

Prof. Marcio Varella

mvarella@if.usp.br

http://fig.if.usp.br/~mvarella/

Edifício Principal, Ala I, Sala 330

Cadastrem-se no Moodle Stoa USP

- Repositório de informações da disciplina
- É imprescindível se **cadastrar** no Stoa e **visitar frequentemente a página da disciplina**:

  http://disciplinas.stoa.usp.br

    - Informações gerais
    - Leitura
    - Notas
    - Listas
    - ...

Avaliação

– Duas Provas (P1 e P2), valendo 10,0 pontos cada.

– Quatro provinhas, valendo 2,5 pontos cada.

– Na média final (MF), a soma das provinhas (S) terá peso de uma prova:

$$MF = (P1 + P2 + S)/3$$

Calendário

Provinha1: 13/03 Provinha2: 10/04 Prova1: 24/04

Provinha3: 22/05 Provinha4: 07/06 Prova2: 28/06

SUB (se necessário): 03/07 Recuperação: 19/07

Noções de Probabilidade

1) Referência Principal: Aulas 1 e 2 (Lecture 1 & Lecture 2) do curso online do MIT, *Statistical Physics I*.

Página principal do curso:
https://ocw.mit.edu/courses/physics/8-044-statistical-physics-i-spring-2013/index.htm

Download das aulas:
https://ocw.mit.edu/courses/physics/8-044-statistical-physics-i-spring-2013/readings-notes-slides/

2) Leitura Adicional: Sheldon Ross, *Probabilidade: Um Curso Moderno com Aplicações*, Bookman, 2010.

Definições Elementares

– **Evento**: resultado de um "experimento" de interesse: cara/coroa no lançamento de uma moeda, resultado de uma observação em um laboratório de Física, etc.

Exp. no.	Evento
1	ca
2	ca
3	co
4	ca
5	co
6	co
7	ca
8	co
9	ca
10	ca

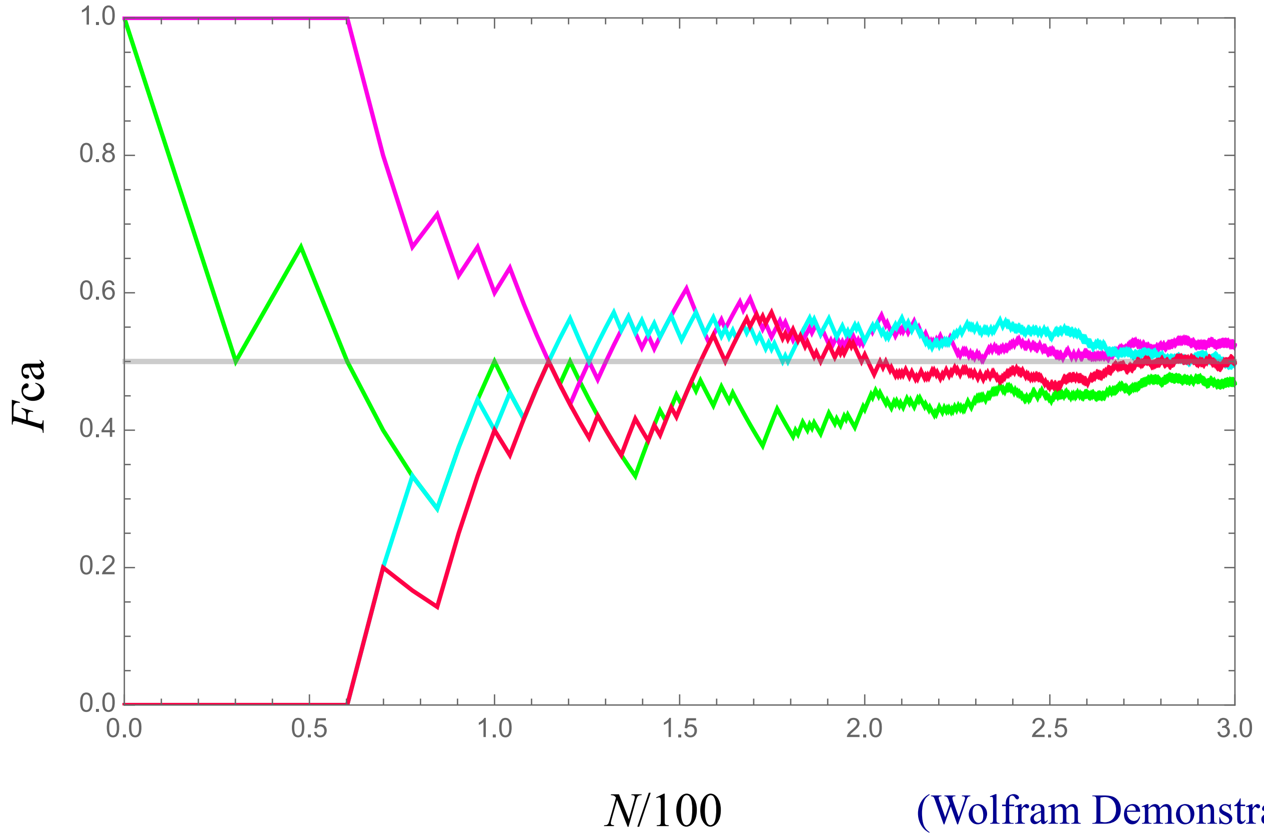
–**Frequência**: em uma sequência de "experimentos" é a razão entre o número de vezes em que ocorre um determinado evento (n_i) e o número total de experimentos (N). Por exemplo, se em N = 10 lançamentos de uma moeda ocorrem n_{ca}= 6 caras e n_{co}= 4 coroas, teremos:

$$F_{\text{ca}} = n_{\text{ca}}/N = 6/10 = 0.60$$
$$F_{\text{co}} = n_{\text{co}}/N = 4/10 = 0.40$$

Em geral:

$$\boxed{F_i = \frac{n_i}{N}}$$

– **Ilustração**: as cores representam a frequência do evento "cara" (F_{ca}) em diferentes sequências de lançamentos de um dado. Para $N = 300$ realizações (lançamentos), $F_{ca} \approx 0.5$ em todos os casos.



(Wolfram Demonstration Project)

Definições Elementares

– **Probabilidade a Priori**: Probabilidade (hipotética) atribuída a um evento, independente da realização do experimento. Exemplos: lançamento de uma moeda não viciada: 1/2 para o evento "cara" e 1/2 para o evento "coroa"; lançamento de um dado não viciado: 1/6 para qualquer dos eventos possíveis.

– **Probabilidade a posteriori**: Frequência calculada no limite de um grande número de realizações:

$$\boxed{P_i = \lim_{N\to\infty} F_i = \lim_{N\to\infty} \frac{n_i}{N} \geq 0}$$

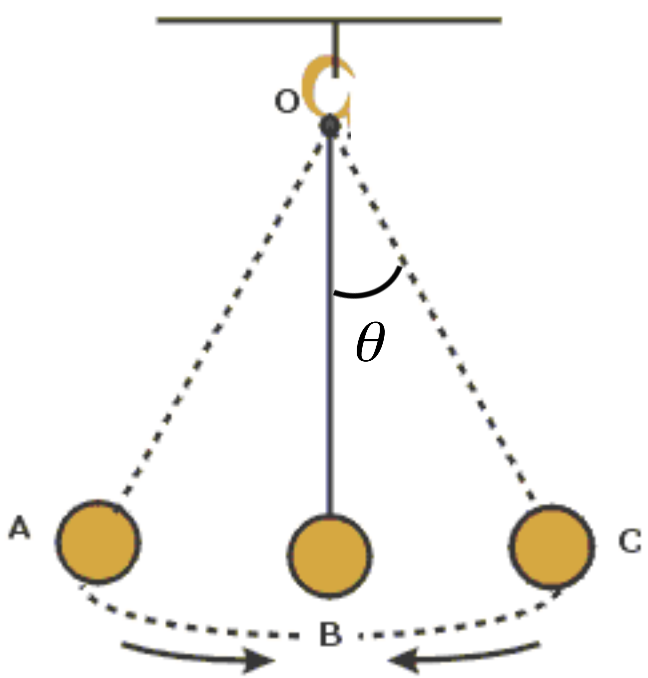
– Soma das probabilidades dos eventos possíveis:

$$\sum_i n_i(N) = N \Longrightarrow \sum_i F_i(N) = 1 \Longrightarrow \sum_i P_i = 1$$

Definições Elementares

– **Variável Determinística**: valor pode ser previsto com base em informações acessíveis.

– **Variável Aleatória**: valor *não* pode ser previsto com base em informações acessíveis. Informação limitada obtida da teoria de probabilidades.



Exemplos:

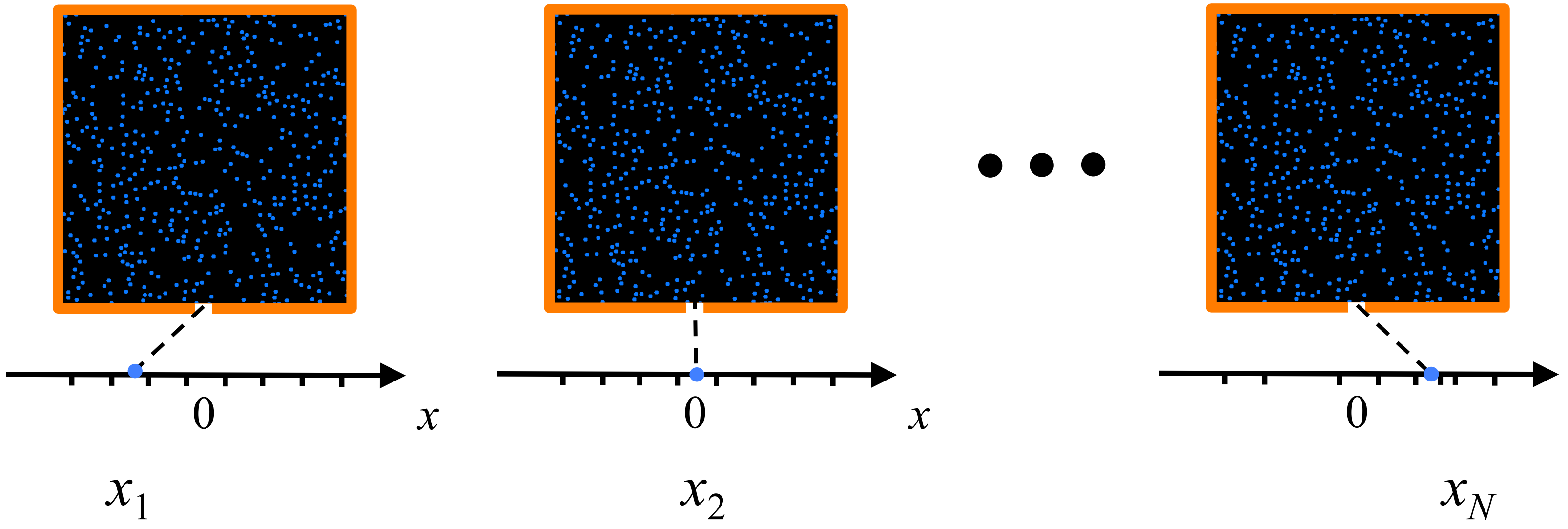
i) Posição angular de um pêndulo simples com características (l, m, g) e condições iniciais conhecidas.

ii) Posição angular do mesmo pêndulo, com energia conhecida (sem informação sobre condições iniciais).

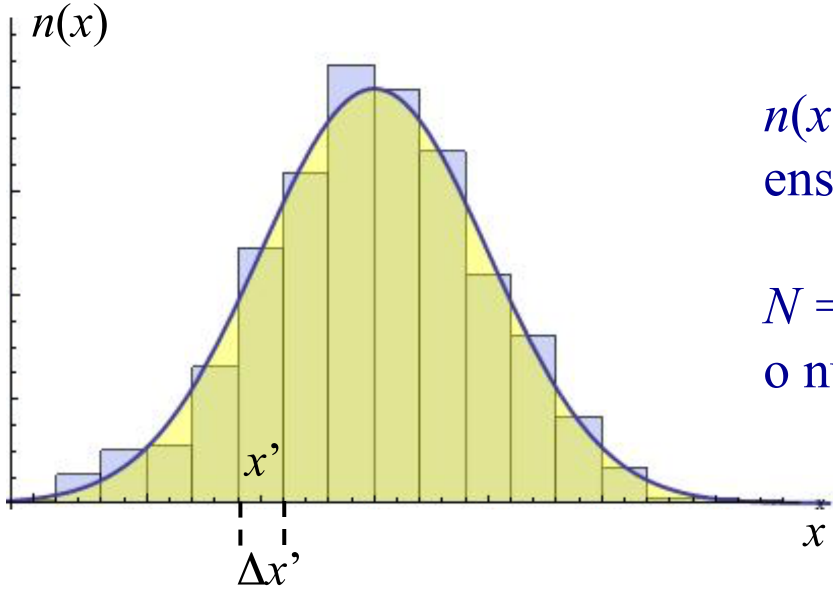
Definições Elementares

– **Ensemble**: conjunto de sistemas preparados de forma similar. Em um experimento (hipotético), cada elemento do ensemble define um valor da variável aleatória.

Exemplo: amostras de um dado gás, preparadas no mesmo estado termodinâmico (N, P, T, ...).



Função Densidade de Probabilidade

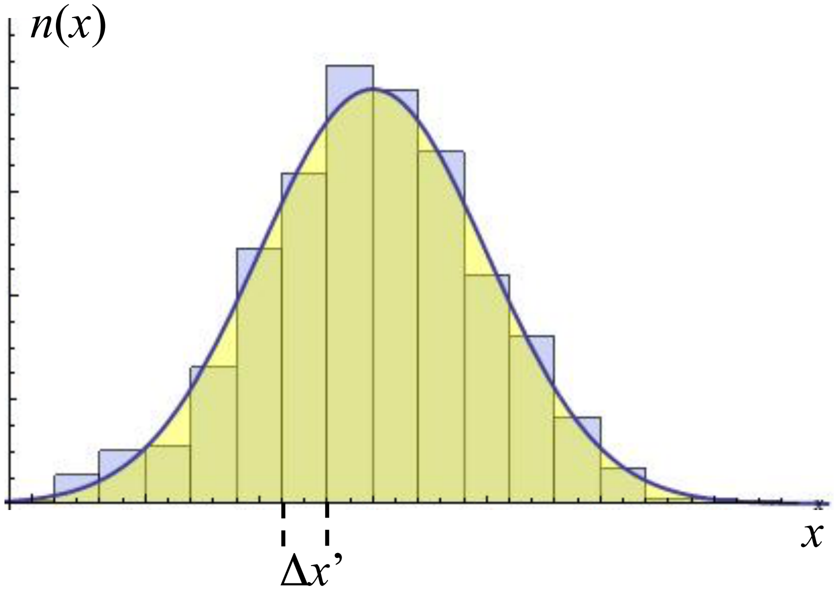


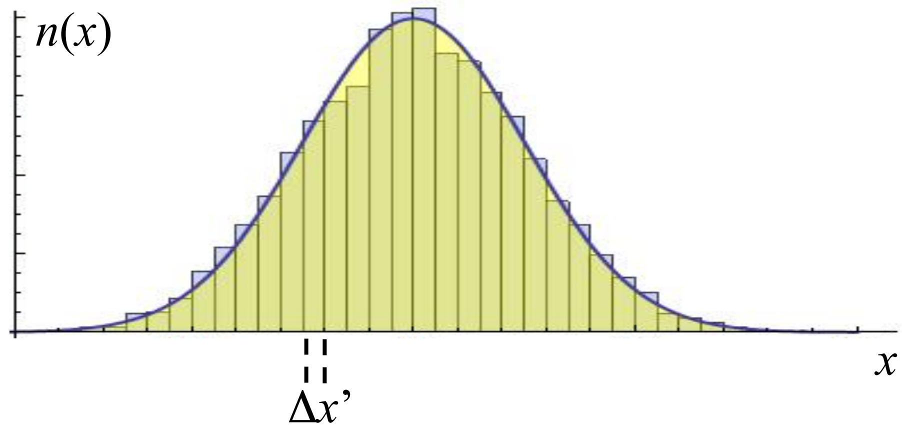
$n(x')$ = número de sistemas (elementos do ensemble) no intervalo $\Delta x'$ em torno de x'.

N = Número de sistemas no ensemble (isto é, o número de detecções).

A frequência (ou probabilidade, pois N é muito grande) de detectar uma partícula no intervalo $\Delta x'$ em torno x' de será:

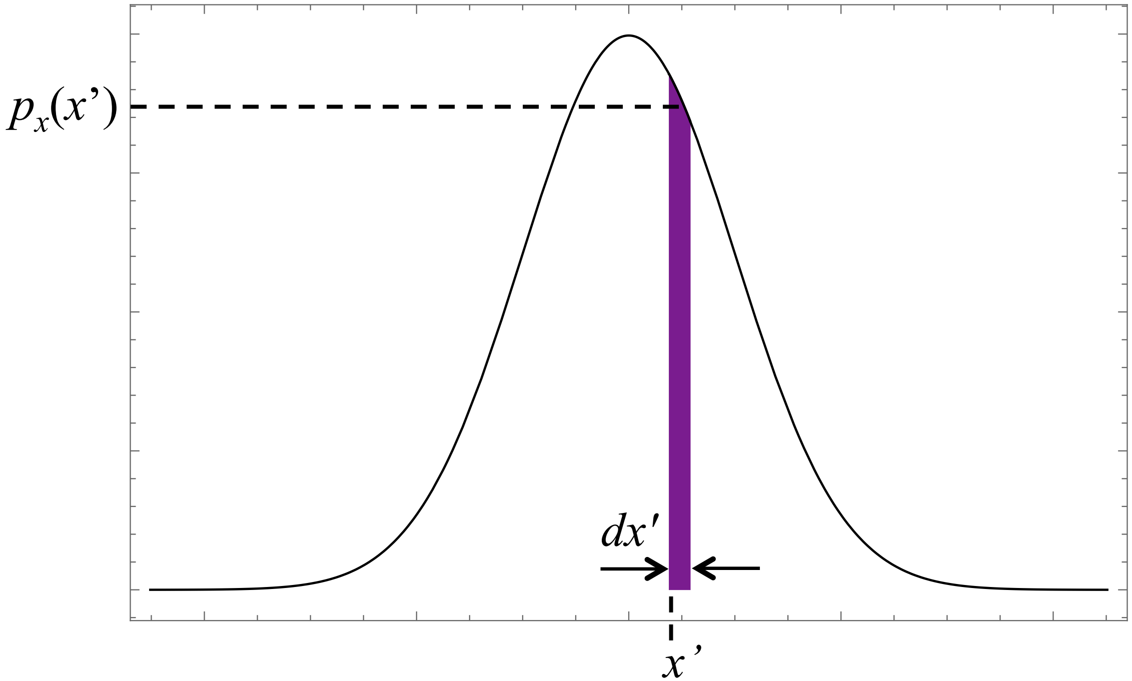
$$P(x', \Delta x') \approx F(x', \Delta x') = \frac{n(x')}{N}$$





Histogramas mais estreitos: $n(x')/N$ em cada intervalo diminui. Para expressar a probabilidade de detectar uma partícula no intervalo (infinitesimal) dx' em torno da posição x', será conveniente definir a função *densidade de probabilidade* $p_x(x')$:

$$p_x(x') = \lim_{\substack{\Delta x' \to 0 \\ N \to \infty}} \frac{P(x', \Delta x')}{\Delta x'} = \lim_{\substack{\Delta x' \to 0 \\ N \to \infty}} \frac{n(x')}{N \Delta x'}$$



– prob($x' \leq x < x' + dx'$): $p_x(x')dx'$

– Probabilidade Cumulativa: $P_x(x') = \int_{-\infty}^{x'} p_x(x'')\,dx''$

– prob($a \leq x < b$): $\int_a^b p_x(x')\,dx' = P_x(b) - P_x(a)$

– Relação entre densidade de probabilidade e probabilidade cumulativa:

$$\frac{d}{dx'}P_x(x') = \lim_{\Delta x' \to 0} \frac{P_x(x' + \Delta x') - P_x(x')}{\Delta x'} =$$

$$= \lim_{\Delta x' \to 0} \frac{1}{\Delta x'} \int_{x'}^{x' + \Delta x'} p_x(x'')dx'' = \lim_{\Delta x' \to 0} \frac{1}{\Delta x'}\, p_x(x')\Delta x'$$

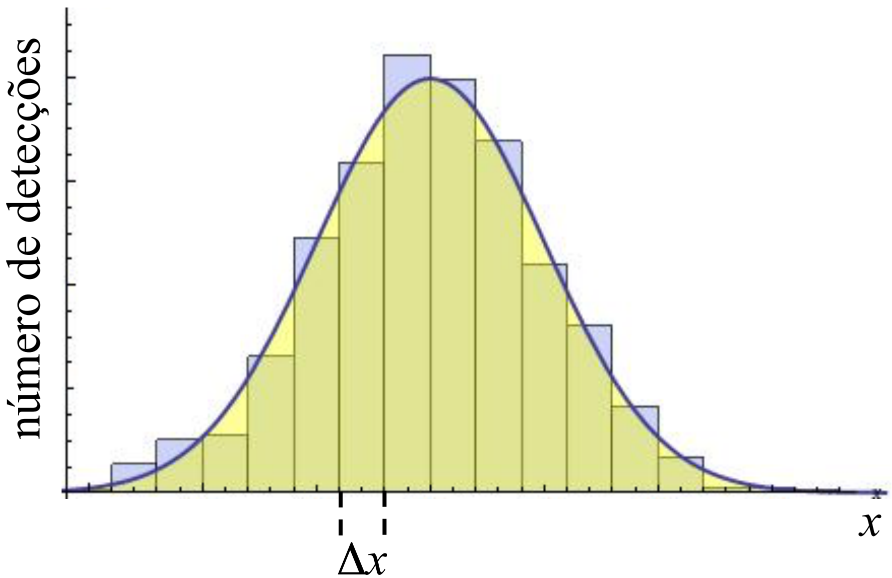
$$\boxed{p_x(x') = \frac{d}{dx'}P_x(x')}$$

– Notação simplificada:

$$p_x(x') \longrightarrow p(x)$$

$$P_x(x') \longrightarrow P(x)$$

Valor Esperado (Médio): Qual o valor médio $\langle x \rangle$ das posições de todas as partículas detectadas?



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

$$\langle x \rangle = \underbrace{\frac{1}{N}\sum_{\alpha=1}^{N} x_\alpha}_{\text{soma sobre } N \text{ detecções}} \approx \underbrace{\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{\eta} n(x_i)x_i}_{\text{soma sobre } \eta \text{ histogramas}} = \sum_{i=1}^{\eta} \underbrace{\left[\frac{n(x_i)}{N\Delta x}\right]}_{\approx p_x(x_i)} x_i \, \Delta x$$

– Distribuição contínua:

$$\langle x \rangle = \lim_{\substack{\Delta x \to 0 \\ \eta \to \infty}} \sum_{i=1}^{\eta} \left[\frac{n(x_i)}{N \Delta x} \right] x_i \, \Delta x = \int_{-\infty}^{\infty} p_x(x') \, x' \, dx'$$

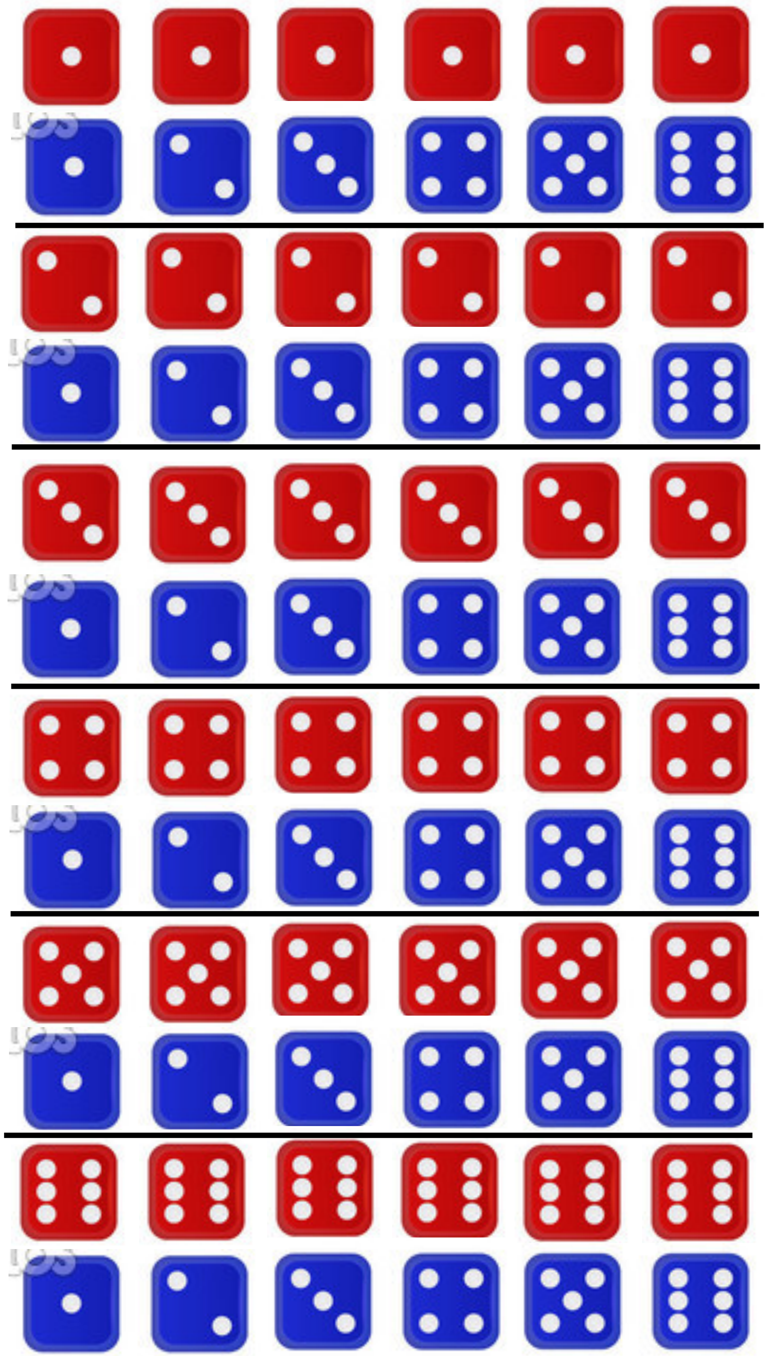
– Valor esperado de uma função *f*(*x*) da variável aleatória:

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

– Variância (quadrado do desvio padrão):

$$\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = \langle x^2 - 2x\langle x \rangle + \langle x \rangle^2 \rangle = \langle x^2 \rangle - 2\langle x \rangle \langle x \rangle + \langle x \rangle^2 =$$

$$= \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = \int_{-\infty}^{\infty} p_x(x') x'^{\,2} dx' - \left[\int_{-\infty}^{\infty} p_x(x') x' dx' \right]^2$$

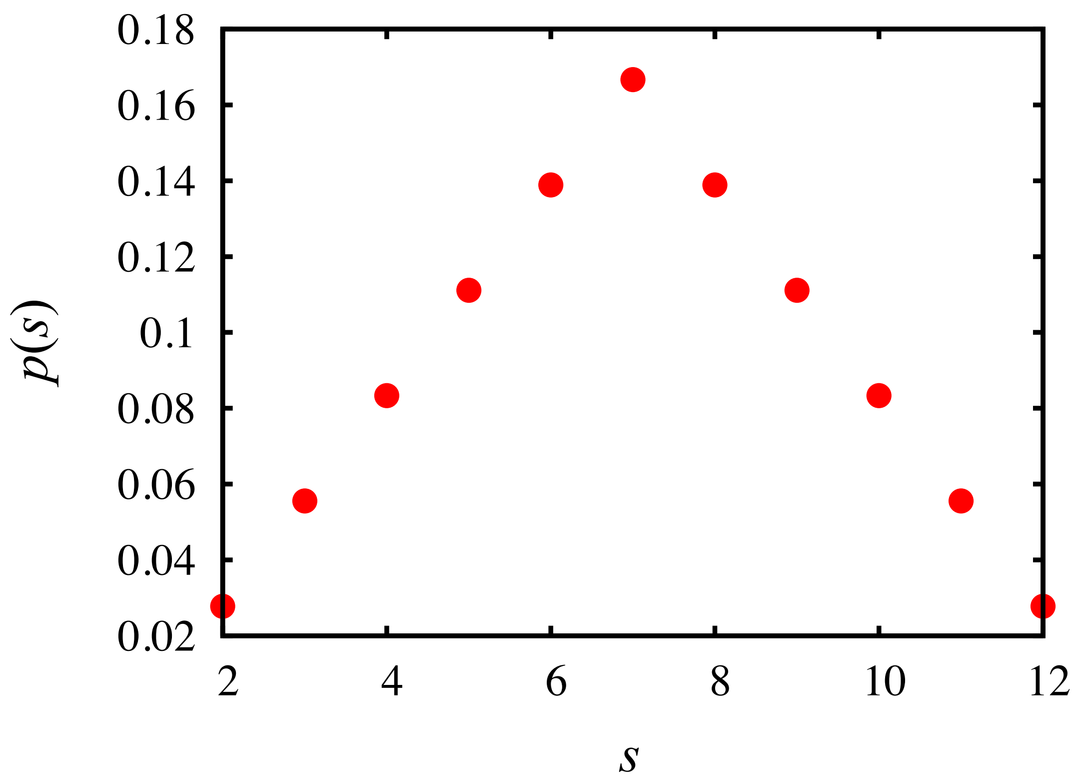


Variável Aleatória Discreta:

– A figura ao lado representa o espaço amostral (conjunto dos resultados possíveis) no lançamento de dois dados.

As probabilidades dos eventos s são mostradas na tabela e gráfico abaixo, definindo a densidade $p(s)$

s	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
$p(s)$	1/36	2/36	3/36	4/36	5/36	6/36	5/36	4/36	3/36	2/36	1/36



– Valor esperado de s em $N >> 1$ lançamentos:

$$\langle s \rangle \;=\; \frac{1}{N}\sum_{i=\alpha}^{N} s_\alpha \;=\; \sum_{i=2}^{12} \frac{n_i}{N} s_i \;=\; \sum_{i=2}^{12} p(s_i)s_i \;=\; 7$$

– Desvio padrão:

$$\langle s^2 \rangle \;=\; \sum_{i=2}^{12} p(s_i)s_i^2 \;=\; \frac{329}{6} \;=\; 54.8$$

$$\sigma_s \;=\; \sqrt{\langle s^2 \rangle - \langle s \rangle^2} \;=\; 2.4$$

– Em geral (variável aleatória discreta x):

$$\langle f(x) \rangle \;=\; \sum_i p(x_i)\, f(x_i)$$