4302401 – Mecânica Estatística

Distribuição Binomial

(Passeio Aleatório)

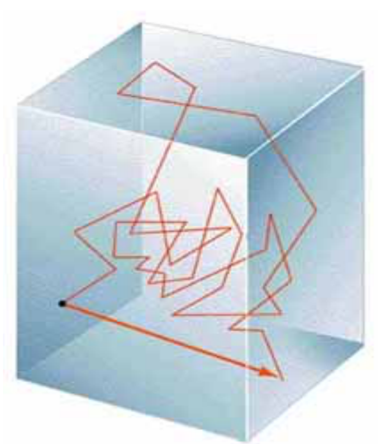
Referências: Reif, Secs. 1.7 a 1.9; Salinas, Cap. 1

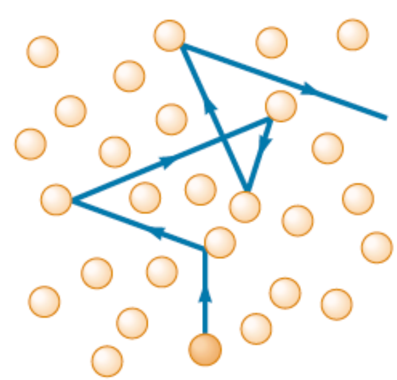
Distribuições de Bernoulli e Binomial

– Seja x = 0, 1 uma variável aleatória, com $p_x(1) = p$ e $p_x(0)=(1- p)$. Essa variável caracteriza a *Distribuição de Bernoulli*, que se aplica a situações do tipo sucesso/insucesso, ligado/desligado, etc.

– Havendo N realizações independentes, a variável aleatória x, que corresponde ao número de "sucessos" com probabilidade p, caracteriza a *Distribuição Binomial*.

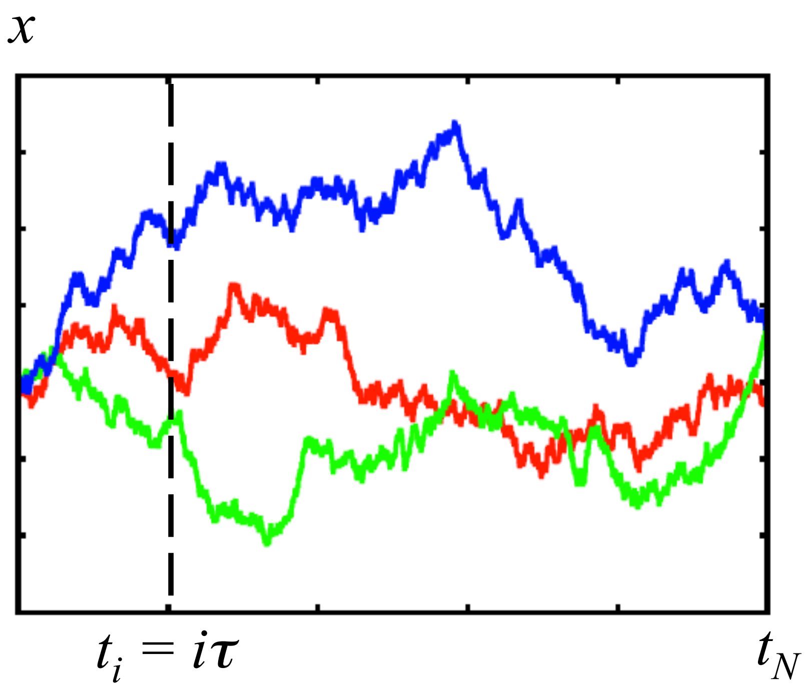
– Um importante exemplo em Física é o *Passeio Aleatório*, que serve de modelo ao movimento difusivo (Browniano).





Entre colisões sucessivas, livre caminho médio (l) e livre tempo médio (τ).

Passeio Aleatório



Posição após N passos:

$$x_N = (n_1 - n_2)l = ml$$

– Passos com comprimento l (fixo) e intervalo de tempo τ.

– Prob. de um passo para frente: p

– Prob. de um passo para trás: $q = (1 - p)$

– n_1 = no. de passos para frente

– n_2 = no. de passos para trás

– $N = (n_1 + n_2)$ = no. de passos

– Probabilidade de n_1 passos adiante a n_2 passos para trás (independentes):

$$p^{n_1} q^{n_2} = p^{n_1} q^{N-n_1}$$

– Há maneiras distintas de realizar N passos, sendo n_1 para frente (f) e n_2 para trás (t):

$$\begin{array}{ccccc} f & f & t & t & t \\ f & t & f & t & t \\ t & t & f & t & f \\ & & \vdots & & \end{array}$$

$N = 5$
$n_1 = 2$
$n_2 = 3$

– Os passos podem ser entendidos como "objetos idênticos". Assim, a permutação de dois passos para trás (ou para frente) é *redundante*. Há $N!$ possibilidades (permutações) de ordenar N objetos, mas o cômputo das possibilidades distintas exige que se remova a redundância:

$$\frac{N!}{n_1!\, n_2!} = \frac{N!}{n_1!\,(N-n_1)!} = \binom{N}{n_1}$$

– Em uma grande coleção de passeios aleatórios com N passos, a probabilidade de ocorrência de n_1 passos adiante será:

$$
\begin{aligned}
W_N(n_1) &= \frac{N!}{n_1!\, n_2!}\, p^{n_1}\, q^{n_2} = \left(\begin{array}{c} N \\ n_1 \end{array} \right) p^{n_1}\, q^{N-n_2} \\
&= \frac{N!}{n!\,(N-n_1)!}\, p^{n_1}\, q^{N-n_1} = \left(\begin{array}{c} N \\ n_1 \end{array} \right) p^{n_1}\, q^{N-n_1}
\end{aligned}
$$

– A probabilidade também pode ser expressa em termos do "deslocamento" $m = (n_1 - n_2)$, teremos, lembrando que $N = (n_1 + n_2)$:

$$
P_N(m) = \frac{N!}{\left[\frac{1}{2}(N+m)!\right]\left[\frac{1}{2}(N-m)!\right]}\, p^{(N+m)/2}\, q^{(N-m)/2}
$$

– Normalização:

$$\sum_{n_1=0}^{N} W_N(n) \;=\; \sum_{n_1=0}^{N} \left(\begin{array}{c} N \\ n_1 \end{array} \right) p^{n_1}\, q^{N-n_1} \;=\; (p+q)^N \;=\; 1$$

– Valor esperado de n_1 (no. de passos adiante):

$$\langle n_1 \rangle \;=\; \sum_{n_1=0}^{N} n_1\, W_N(n_1) \;=\; \sum_{n_1=0}^{\infty} \left(\begin{array}{c} N \\ n_1 \end{array} \right) n_1\, p^{n_1}\, q^{N-n_1}$$

– Porém: $$\left(p\frac{d}{dp}\right) p^{n_1} \;=\; n_1 p^{n_1}$$

$$\langle n_1 \rangle \;=\; \sum_{n_1=0}^{N} n_1\, W_N(n_1) \;=\; p\frac{d}{dp} \sum_{n_1=0}^{\infty} \left(\begin{array}{c} N \\ n_1 \end{array} \right) p^{n_1}\, q^{N-n_1}$$

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

– Variância:

$$\langle n_1^2 \rangle = \sum_{n_1=0}^{N} n_1 \, W_N(n_1) = \sum_{n_1=0}^{\infty} \left(\begin{array}{c} N \\ n_1 \end{array} \right) n_1^2 \, p^{n_1} \, q^{N-n_1} =$$

$$= \left(p \frac{d}{dp} \right)^2 \sum_{n_1=0}^{\infty} \left(\begin{array}{c} N \\ n_1 \end{array} \right) p^{n_1} \, q^{N-n_1} = \left(p \frac{d}{dp} \right)^2 (p+q)^N =$$

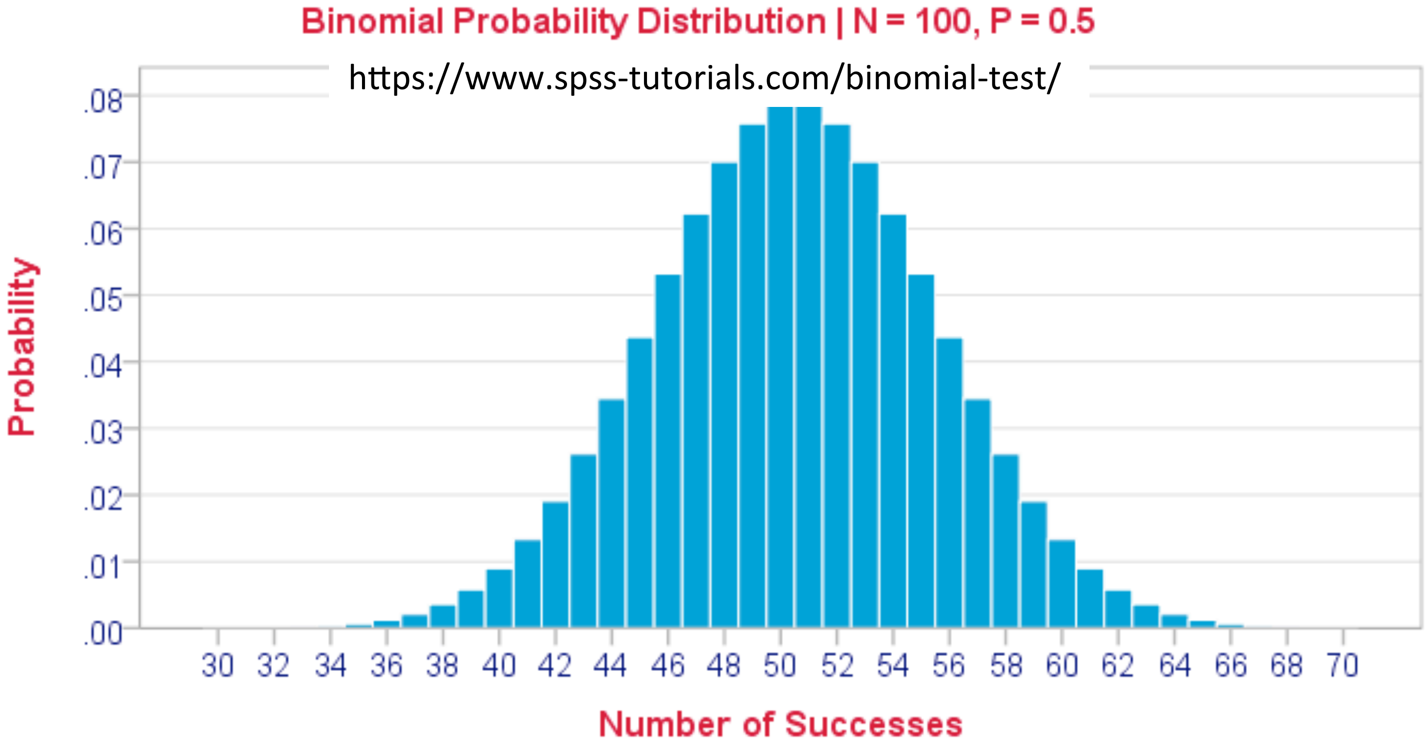
$$= p[N + pN(N-1)] = pN[1 + p(N-1)] =$$

$$= pN \, [q + pN] = (Np)^2 + Npq$$

Finalmente:

$$\mathrm{var}(n_1) = \sigma_{n_1}^2 = \langle n_1^2 \rangle - \langle n_1 \rangle^2 = (Np)^2 + Npq - (Np)^2 = Npq$$

Limite Gaussiano



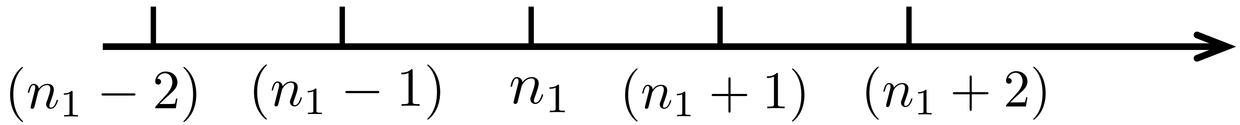
– Para $N >> 1$, percebemos que $W_N(0) \approx W_N(N) \approx 0$.

$$\langle n_1 \rangle = Np \gg 1 \qquad \sigma_{n_1}^2 = Npq \gg 1$$

– Iremos considerar o limite $N \to \infty$, dado $p \sim ½$ e $q \sim ½$:

$$\frac{|W_N(n_1+1) - W_N(n_1)|}{W_N(n_1)} \ll 1$$

– **Limite de distribuição contínua:** $W_N(n_1) = p(n_1)dn_1$



– A variável discreta n_1 varia segundo Δn_1:

$$\left[\frac{1}{\Delta n_1} W_N(n_1)\right] \Delta n_1 \equiv p(n_1)\Delta n_1$$

– No limite $N \to \infty$, a probabilidade $W_N(n_1)$ essencialmente não varia sobre um intervalo I na vizinhança de n_1:

$$\sum_{n_1 \in I} \left[\frac{1}{\Delta n_1} W_N(n_1)\right] \Delta n_1 \approx p(n_1) \sum_{n_1 \in I} \Delta n_1 \approx p(n_1)dn_1$$

– Acima, $1 = \Delta n_1 << dn_1 <<< N$. Uma vez que $\Delta n_1 = 1$, teremos:

$$p(n_1) = W(n_1) \,, \quad \text{onde} \quad W(n_1) = \lim_{N \to \infty} W_N(n_1)$$

Aproximação de Stirling

$$\ln(n!) = n\ln(n) - n + \mathcal{O}[\ln(n)]$$

(válida para *n* >> 1)

n	$\ln(n!)$	$n\ln(n) - n$	erro (%)
10	1.510441E+01	1.302585E+01	13.8
100	3.637394E+02	3.605170E+02	8.86E–01
1000	5.912128E+03	5.907755E+03	7.40E–02
10000	8.210893E+04	8.210340E+04	6.73E–03

A aproximação, portanto, produz erro insignificante (resultado exato em qualquer sentido prático), desde que *n* >>>1:

$$\text{erro} \approx \frac{\ln(n)}{\ln(n!)} \approx \frac{\ln(n)}{n\,[\ln(n) - 1]} \approx n^{-1}$$

– Será conveniente tomar o logaritmo da probabilidade:

$$f(n_1) = \ln[W_N(n_1)] = \ln(N!) - \ln(n_1!) - \ln[(N - n_1)!] + \\ + n_1 \ln(p) + (N - n_1)\ln(q)$$

– Na vizinhança do pico da distribuição, utilizaremos a aproximação de Stirling:

$$\begin{aligned} \ln(x!) &= x[\ln(x) - 1] + \mathcal{O}[\ln(x)] \\ &\approx x[\ln(x) - 1] \, , \quad x \gg 1 \end{aligned}$$

– No limite $N \longrightarrow \infty$, é essencialmente exato escrever:

$$f(n_1) = N\ln(N) - n_1\ln(n_1) - (N - n_1)\ln(N - n_1) + \\ + n_1 \ln(p) + (N - n_1)\ln(q)$$

– Máximo da distribuição:

$$\frac{d}{dn_1} f(n_1) = \ln(N - n_1) - \ln(n_1) + \ln(p) - \ln(q)$$

$$\frac{d}{dn_1} f(n_1) = 0 \Longrightarrow \bar{n_1} = pN = \langle n_1 \rangle$$

– Curvatura:

$$\frac{d^2}{dn_1^2} f(n_1) = -\frac{N}{n_1(N - n_1)}$$

$$\frac{d^2}{dn_1^2} f(\bar{n_1}) = -\frac{1}{Npq} = -\frac{1}{\sigma_{n_1}^2}$$

– Expandindo $f(n_1)$ numa série de Taylor de segunda ordem:

$$f(n_1) \approx f(\bar{n}_1) - \frac{1}{2\sigma_{n_1}^2}(n_1 - \langle n_1 \rangle)^2$$

– Tomando a exponencial dos dois lados da igualdade, e normalizando, obteremos uma densidade Gaussiana:

$$\boxed{p(n_1) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_{n_1}^2}} \exp\left[-\frac{(n_1 - \langle n_1 \rangle)^2}{2\sigma_{n_1}^2}\right]}$$