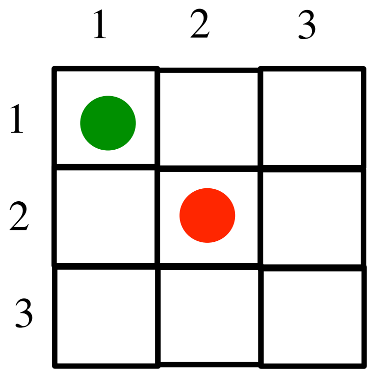
4300259 – Termoestatística

Função de Distribuição de Probabilidade

Exercício: Suponha um “gás” de duas partículas (distintas) contido em um “recipiente” formado por 9 células, como mostrado na figura abaixo. Iremos considerar dois cenários:

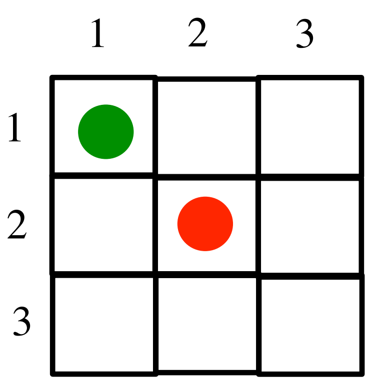
(i) Não há interação, de forma que a posição de uma das partículas não afeta a posição da outra. Caso a partícula verde esteja na célula (1,1), a vermelha poderá estar, com igual probabilidade, em qualquer célula, *incluindo* (1,1).

(ii) Há interação repulsiva de curto alcance, de forma que as duas partículas não podem estar na mesma célula. Caso a partícula verde esteja na célula (1,1), a vermelha poderá estar, com igual probabilidade, em qualquer célula, *excluindo* (1,1).

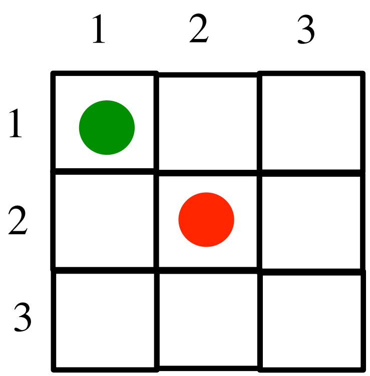


Iremos definir os seguintes eventos:
A – encontrar a partícula vermelha na posição (2,2)
B – encontrar a partícula verde na posição (1,1)

– Discuta se os eventos A e B são dependentes ou independentes nos cenários (i) e (ii) definidos anteriormente. Em cada caso, (a) obtenha as probabilidades $P(A)$, $P(B)$, $P(A|B)$ e (b) aplique a definição de eventos independentes.



– Cenário (i), sem interação. O número de possibilidades de distribuir as duas partículas nas 9 células é $N = 9 \times 9 = 81$.



– A: encontrar a partícula vermelha em (2,2) [com a verde em qualquer posição].

– B: encontrar a partícula verde em (1,1) [com a vermelha em qualquer posição].

$$P(A) = \frac{9}{81} = \frac{1}{9}$$

$$P(B) = \frac{9}{81} = \frac{1}{9}$$

$$P(A \cap B) = \frac{1}{81}$$

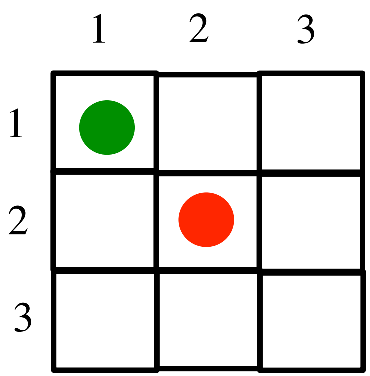
– Probabilidade de encontrar a vermelha em (2,2) dado que a verde está em (1,1):

$$P(A|B) = \frac{P(A \cap B)}{P(B)} = \frac{(1/81)}{(1/9)} = \frac{1}{9} = P(A)$$

$$P(A \cap B) = \frac{1}{81} = P(A)P(B)$$

– A e B são eventos independentes!

– Cenário (ii), com interação. O número de possibilidades de distribuir as duas partículas nas 9 células é $N = 9{\times}8 = 72$.



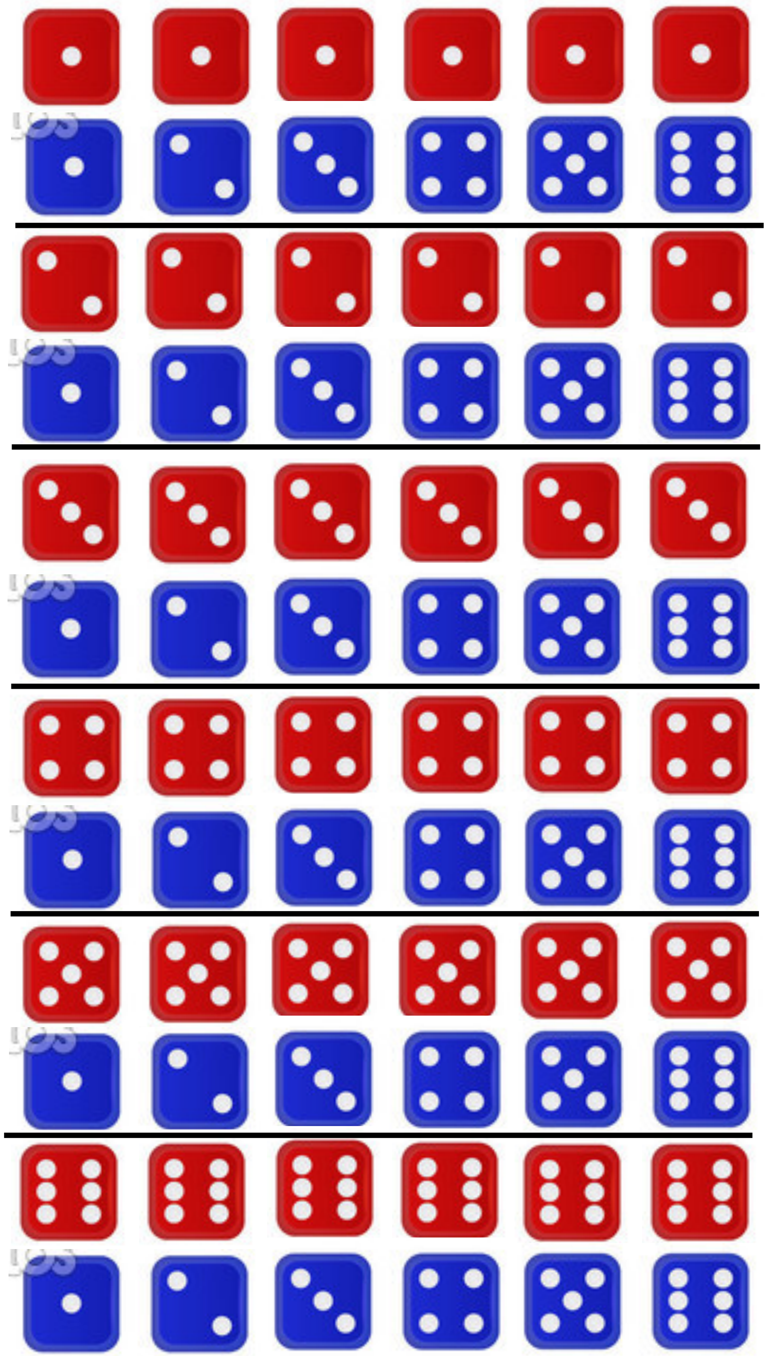
– A: encontrar a partícula vermelha em (2,2) [com a verde em qualquer posição].
– B: encontrar a partícula verde em (1,1) [com a vermelha em qualquer posição].

$$P(A) = \frac{8}{72} = \frac{1}{9}$$
$$P(B) = \frac{8}{72} = \frac{1}{9}$$
$$P(A \cap B) = \frac{1}{72}$$

– Probabilidade de encontrar a vermelha em (2,2) dado que a verde está em (1,1):

$$P(A|B) = \frac{P(A \cap B)}{P(B)} = \frac{(1/72)}{(1/9)} = \frac{1}{8} \neq P(A)$$
$$P(A \cap B) = \frac{1}{72} \neq P(A)P(B)$$

– A e B não são eventos independentes!



– A figura ao lado representa o espaço amostral do lançamento de dois dados.

– Vamos denotar por s o evento "soma das faces superiores", isto é, $s = 2, 3, 4, ..., 12$.

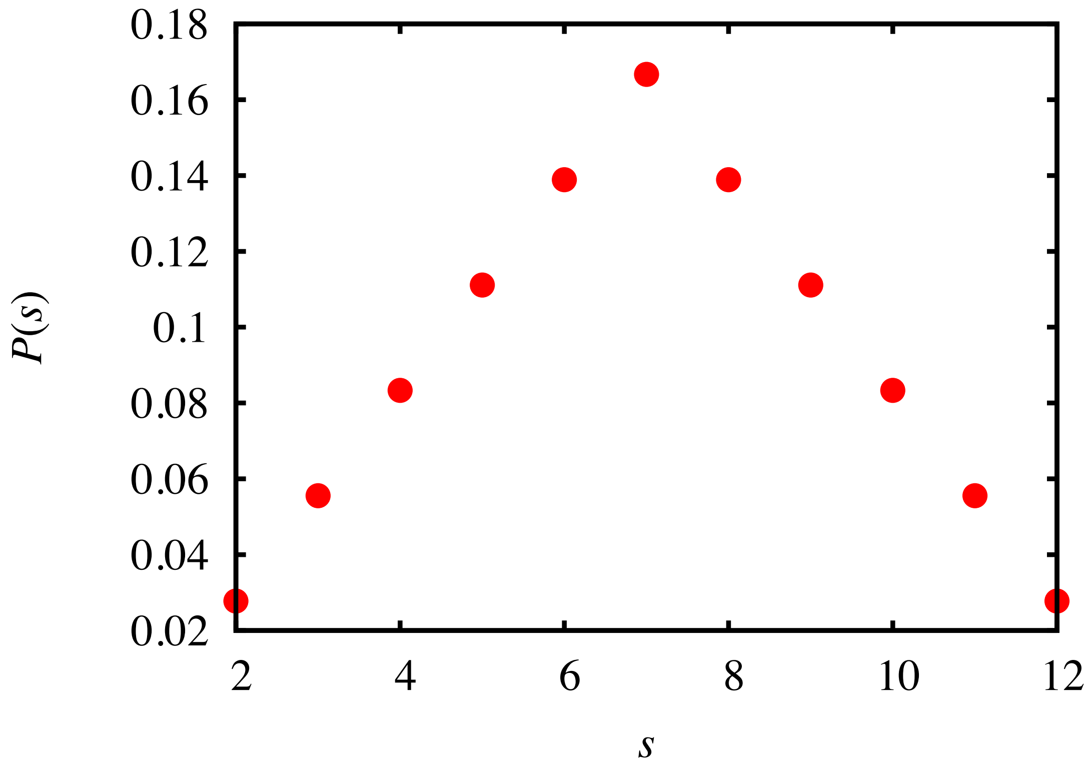
– Reflita: representar eventos no espaço amostral pode ser um tanto complicado.

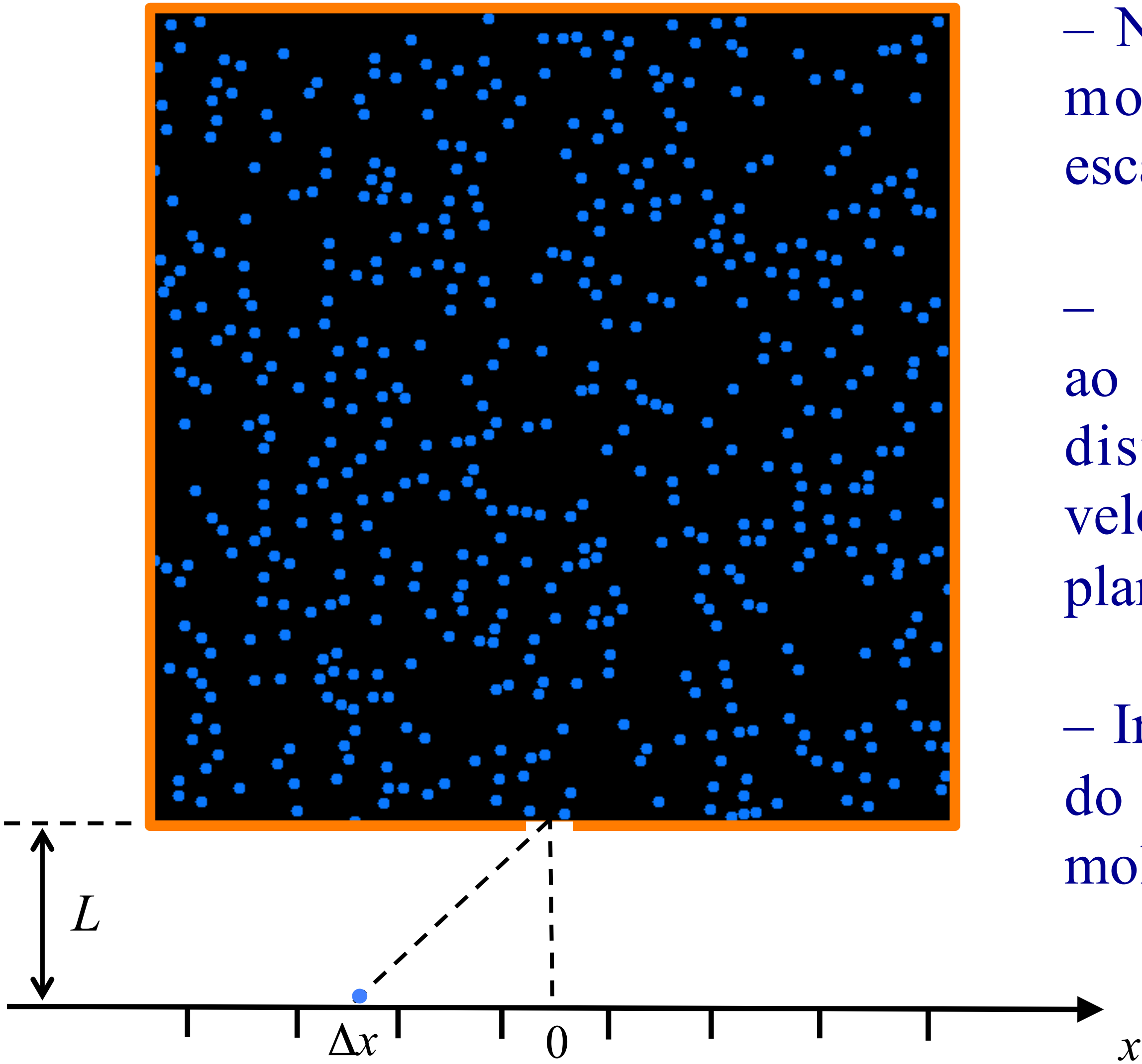
– Em Física Estatística, os eventos ocorrem "aos mols".

– Haveria uma construção mais útil que o espaço amostral?

As probabilidades dos eventos s são mostradas na tabela e gráfico abaixo. A função $P(s)$ representa a **distribuição** das probabilidades dos eventos 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

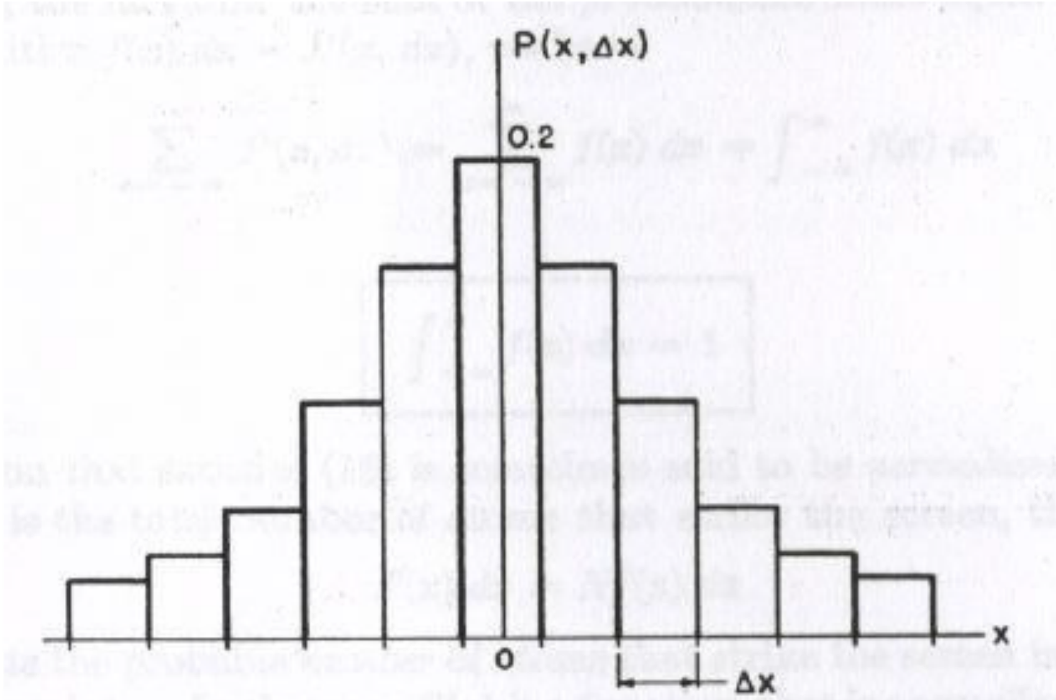




– No experimento indicado, as moléculas do gás podem escapar pelo pequeno orifício.

– A distribuição das posições ao longo do eixo Ox indica a distribuição direcional das velocidades das moléculas no plano Oxy, pois $x/L = v_x/v_y$.

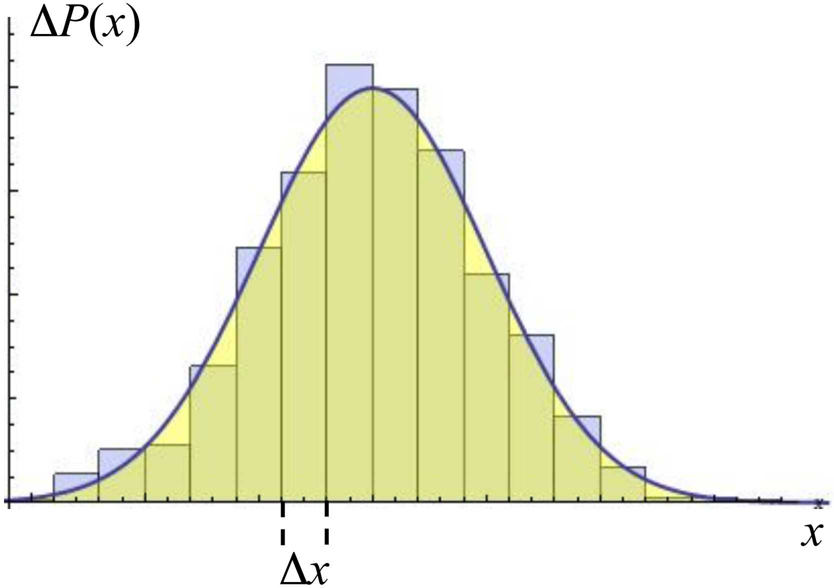
– Iremos consideras os eventos do tipo: “detecção de uma molécula em um intervalo Δx”.

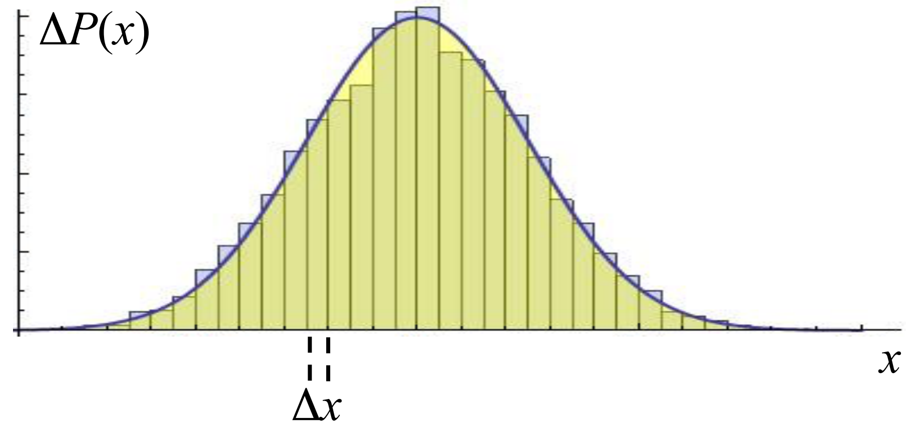


$n(x)$ = número de moléculas detectadas no intervalo Δx centrado na posição x.
N = Número total de moléculas detectadas.
A frequência (ou probabilidade, pois N é muito grande) de detectar uma molécula no intervalo Δx centrado em x será:

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

<u>OBS</u>: A notação acima é a mesma utilizada no texto da Profa. Kaline (e no livro de A. Jackson). Aqui, iremos preferir a notação $\Delta P(x) \equiv P(x, \Delta x)$ para a probabilidade de encontrar uma molécula no intervalo Δx em torno do ponto x.

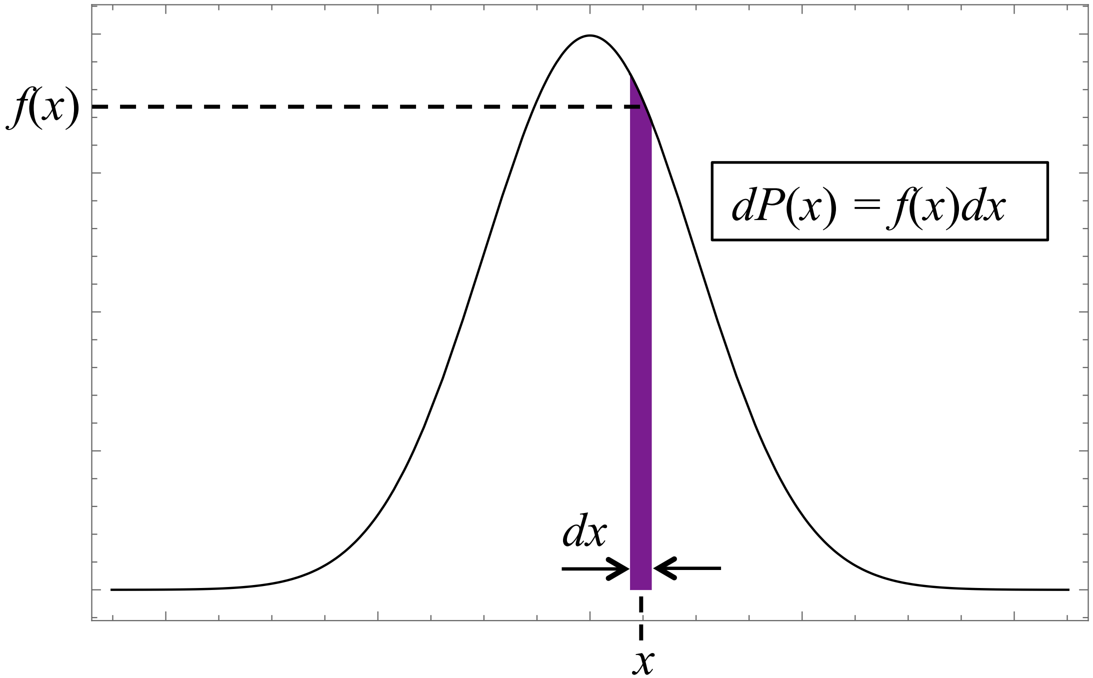




À medida que os histogramas tornam-se mais finos, a probabilidade $\Delta P(x) = n(x)/N$ em cada intervalo diminui. Para expressar a probabilidade de detectar uma partícula no intervalo (infinitesimal) dx em torno da posição x, será conveniente definir a Função de Distribuição de Probabilidade $f(x)$:

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

<u>OBS</u>: Na notação do texto da Profa. Kaline (também no livro de A. Jackson), a probabilidade infinitesimal é denotada por $dP(x) \equiv P(x, dx)$.



– A função de distribuição $f(x)$ **não** representa a probabilidade de encontrar uma molécula no ponto x (esta probabilidade é nula!).

– A função $f(x)$ pode ser interpretada como uma *densidade de probabilidade* por unidade de comprimento.

– A probabilidade $dP(x)$ de encontrar uma molécula no intervalo dx em torno do ponto x é dada por:

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

– Como usualmente normalizamos a probabilidade no intervalo (0, 1), iremos impor a condição de que a probabilidade de detectar uma molécula em qualquer lugar (todos os intervalos) seja igual a 1:

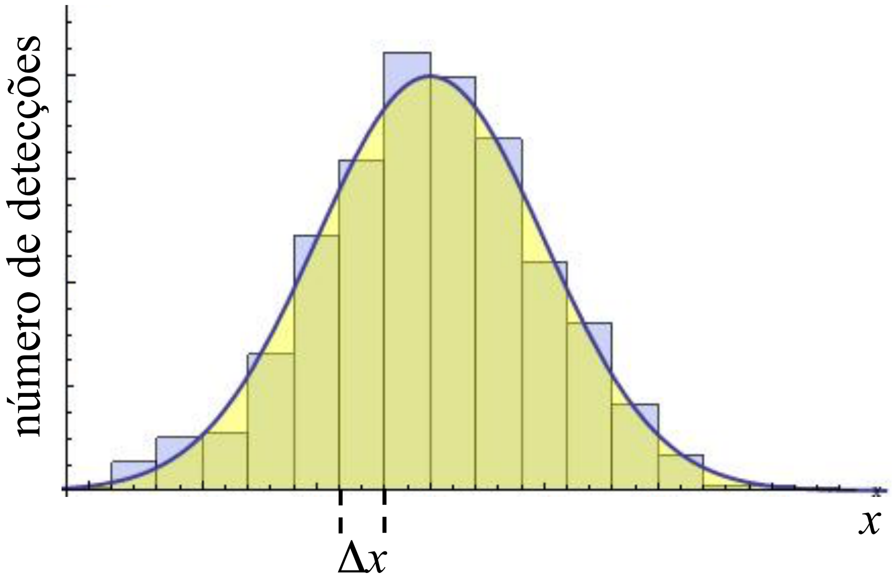
$$\lim_{\Delta x \to 0} \sum_i \Delta P_i \ = \ f(x_i)\Delta x = 1$$

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

– Probabilidade de detectar uma partícula entre $x_0 = a$ e $x = b$:

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

Valor Médio: Dentre outras perguntas, podemos formular: qual o valor médio $< x >$ das posições de todas as moléculas detectadas?



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

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

– Para calcular o valor médio $\langle x \rangle$, iremos aproximar as posições das moléculas em cada intervalo pela posição do centro do intervalo ($x \approx x_i$). Assim, os pesos da média serão os números de moléculas detectadas em cada intervalo, $n(x_i)$. Lembrando que N é a soma dos pesos:

$$\langle x \rangle \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{\eta} n(x_i)\, x_i = \sum_{i=1}^{\eta} \Delta p(x_i)\, x_i \approx \sum_{i=1}^{\eta} f(x_i)\, x_i\, \Delta x$$

– Tomando o limite $\Delta x \to 0$ ($\eta \to \infty$):

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