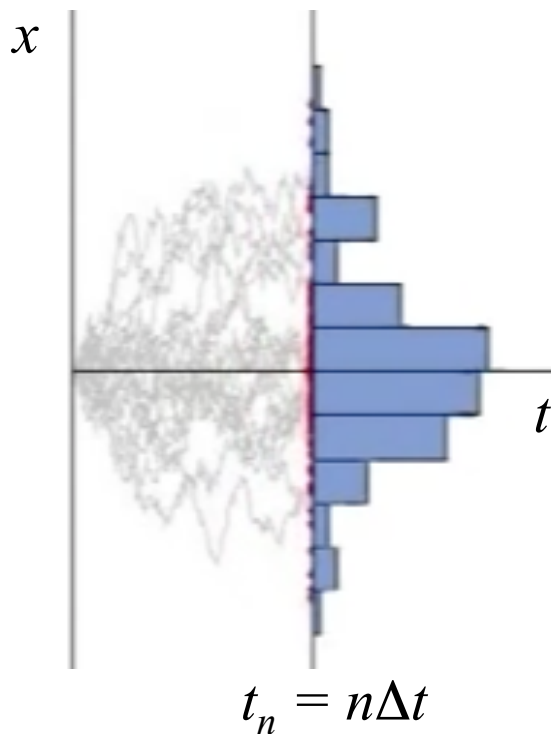




4300259 – Termodinâmica

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

$$N = (n+m) \quad \text{ou} \quad n = (N-m)$$

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

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 $p = q = \frac{1}{2}$, e $N = 5$. Calcule o valor médio da posição (sobre uma grande coleção de passeios), após os cinco passos, $\langle x_5 \rangle$.

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

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

– Valor médio de n :

$$\begin{aligned}
 P_5(0) &= \binom{5}{0} \left(\frac{1}{2}\right)^0 \left(\frac{1}{2}\right)^5 & P_5(1) &= \binom{5}{1} \left(\frac{1}{2}\right)^1 \left(\frac{1}{2}\right)^4 \\
 \langle n \rangle &= \sum_{n=0}^5 n P_5(n) = 0 \times \frac{1}{32} + 1 \times \frac{5}{32} + \\
 &\quad + 2 \times \frac{10}{32} + 3 \times \frac{10}{32} + 4 \times \frac{5}{32} + 5 \times \frac{1}{32} = \frac{80}{32} = 2.5 \\
 &\quad \quad \quad P_5(2) \quad \quad P_5(3) \quad \quad P_5(4) \quad \quad P_5(5)
 \end{aligned}$$

– Valor médio de x_5 :

$$\begin{aligned}
 x_N &= (2n - N) l \implies \langle x_N \rangle = (2\langle n \rangle - N) l \\
 \frac{1}{l} \langle x_5 \rangle &= 2\langle n \rangle - 5 = 2 \times \frac{80}{32} - 5 = 0
 \end{aligned}$$

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

$$\langle n \rangle = \sum_{n=0}^N n P_N(n) = \sum_{n=0}^N \binom{N}{n} n p^n q^{N-n}$$

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

$$\begin{aligned} \langle n \rangle &= \sum_{n=0}^N n P_N(n) = p \frac{d}{dp} \sum_{n=0}^N \binom{N}{n} p^n q^{N-n} \\ &= p \frac{d}{dp} (p+q)^N = p N (p+q)^{N-1} = pN \end{aligned}$$

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

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

Comentário: Para calcular $\langle n^2 \rangle$, basta aplicar duas vezes a identidade utilizada no cálculo de $\langle n \rangle$:

$$\left(p \frac{d}{dp}\right) \left(p \frac{d}{dp}\right) p^n = \left(p \frac{d}{dp}\right) np^n = n^2 p^n$$

$$\begin{aligned}\langle n^2 \rangle &= \sum_{n=0}^N n^2 P_N(n) = \left(p \frac{d}{dp}\right) \left(p \frac{d}{dp}\right) \sum_{n=0}^N \binom{N}{n} p^n q^{N-n} \\&= \left(p \frac{d}{dp}\right) \left(p \frac{d}{dp}\right) (p+q)^N = \left(p \frac{d}{dp}\right) Np(p+q)^{N-1} \\&= Np(p+q)^{N-1} + N(N-1)p^2(p+q)^{N-2} = Np + N(N-1)p^2\end{aligned}$$

A variância será:

$$\begin{aligned}\sigma_n^2 &= \langle n^2 \rangle - \langle n \rangle^2 = Np + N(N-1)p^2 - N^2p^2 \\&= N(p - p^2) = N[p - p(1-q)] = Npq\end{aligned}$$

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

– **Exercício:** Utilizando os resultados acima, calcule os valores médios $\langle x_N \rangle$ e $\langle x_N^2 \rangle$, para o caso $p = q = 1/2$.

Sugestão: Uma vez mais, explore a relação $x_N = (2n - N)l$

– Valor médio de x_N (para $p = 1/2$):

$$\begin{aligned}\langle x_N \rangle &= \langle (n - m)l \rangle = \langle (2n - N)l \rangle = 2l\langle n \rangle - Nl \\ &= 2lNp - Nl = Nl - Nl = 0\end{aligned}$$

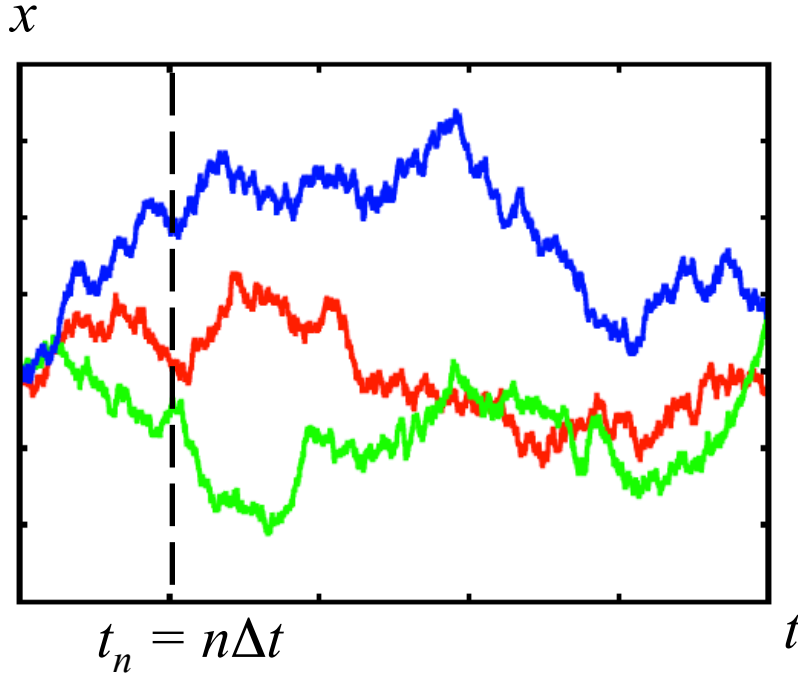
– A variância pode ser obtida na forma:

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

– Para $p = q = 1/2$, temos $\langle n \rangle = N/2$, e $\sigma_n^2 = N/4$. Assim:

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

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.

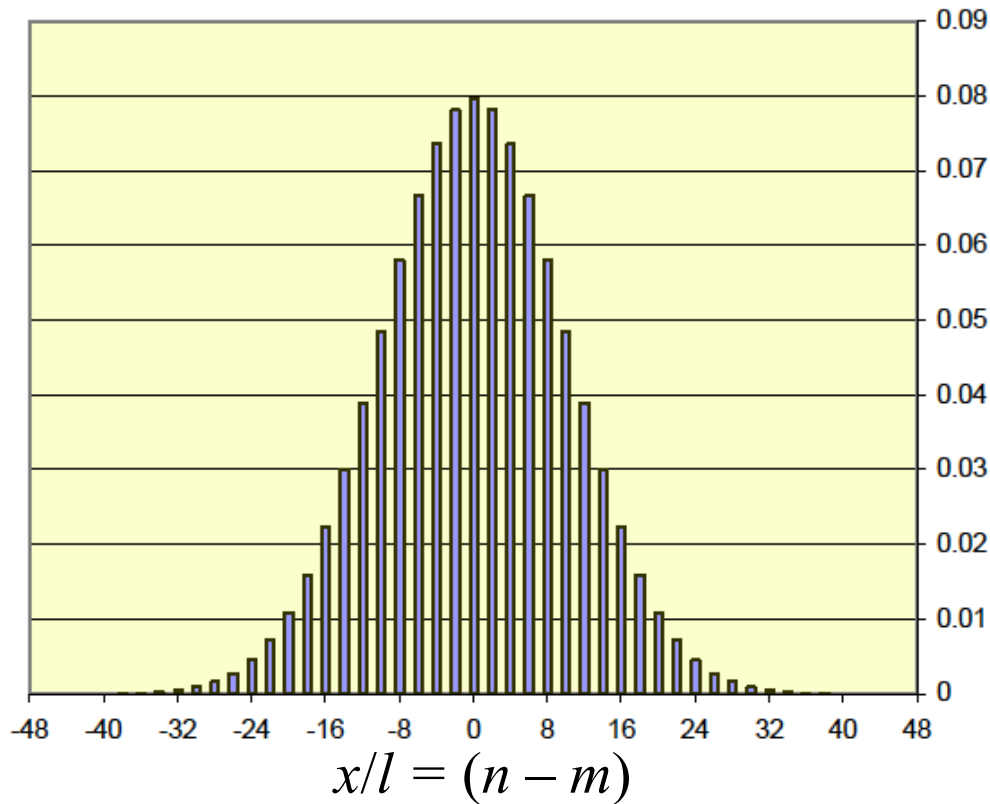
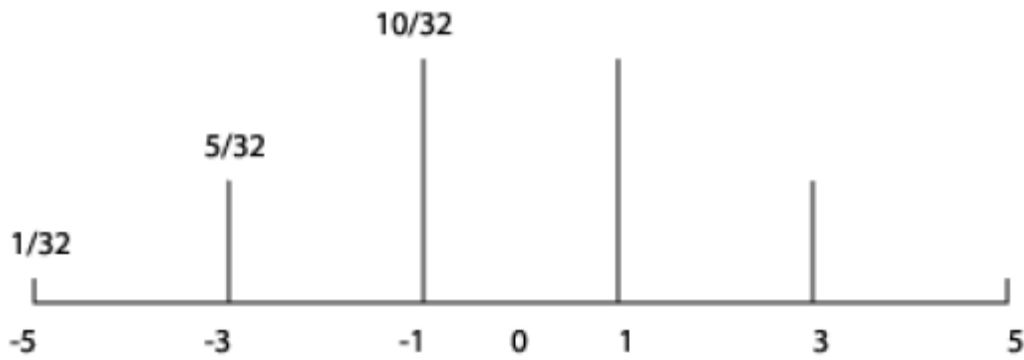
$$\langle x_N \rangle = 0 \quad \langle x_N^2 \rangle = Nl^2$$

$$\sigma_N^2 = \langle x_N^2 \rangle - \langle x_N \rangle^2 = Nl^2$$

–*Coeficiente de Difusão (D):*

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

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



– Os gráficos ao lado mostram a distribuição binomial $P_N(n)$ para $p = q = 1/2$. 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 $-Nl \leq x_N \leq +Nl$.

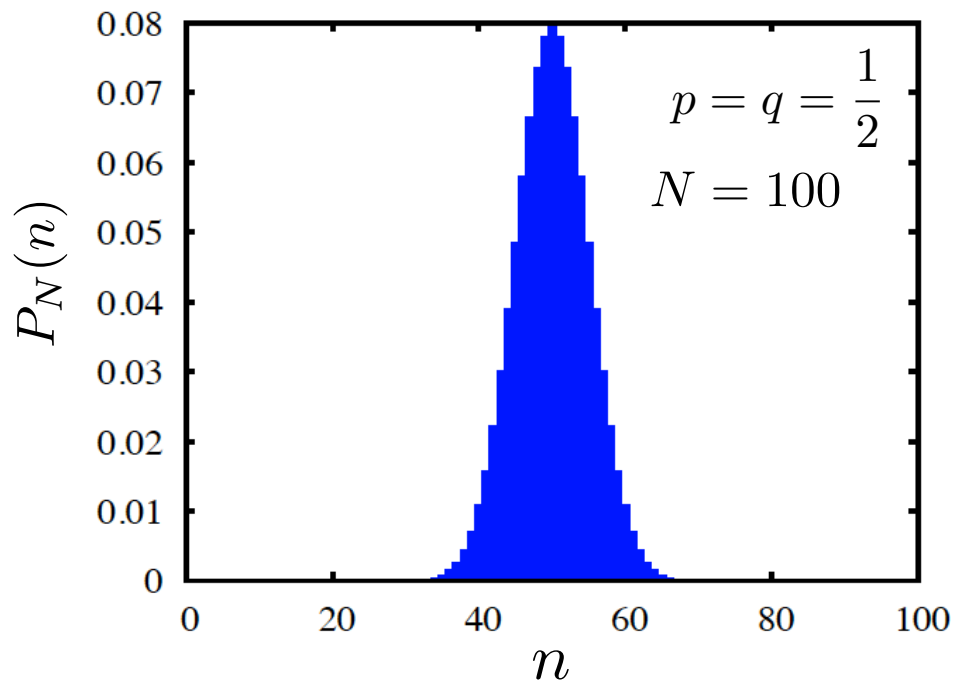
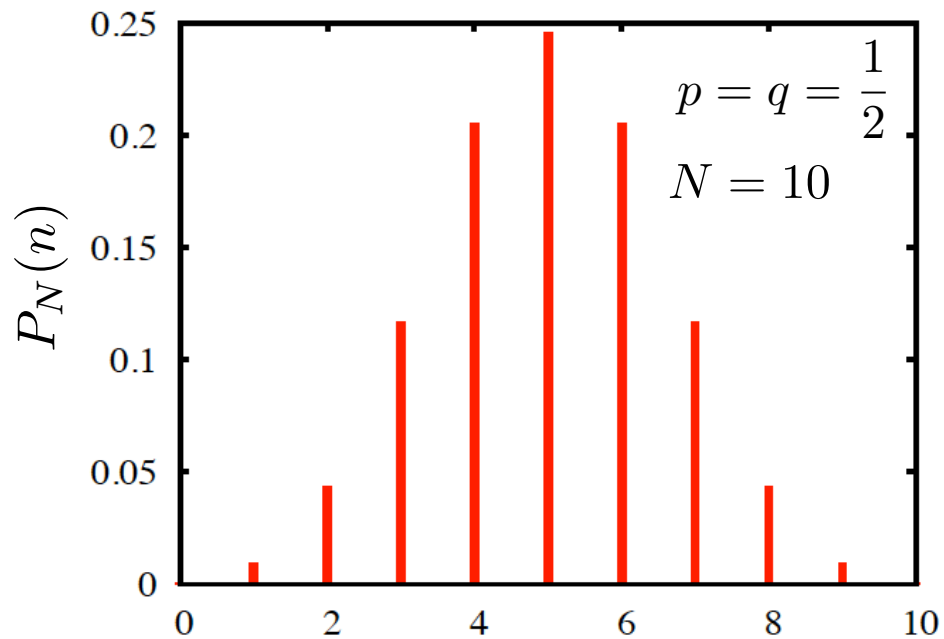
– Perceba também que:

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

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

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

– Assim, no limite de um grande número de passos ($N \rightarrow \infty$) 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 Statistical and Thermal Physics*, Sec. 1.5 (e em vários outros livros-textos), no limite $N \rightarrow \infty$, a Distribuição Binomial se aproxima de uma Distribuição Normal:

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

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

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

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

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

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

Basta realizar as derivadas e verificar sua igualdade:

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

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

Acima, no cálculo da segunda derivada, foi utilizado o resultado da primeira.

Já em relação ao tempo:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} P(x, t) &= \frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp\left(-\frac{1}{4Dt}x^2\right) \right] = \\ &= \left[-\frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt^3}} + \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \left(-\frac{x^2}{4D}\right) \left(-\frac{1}{t^2}\right) \right] \exp\left(-\frac{1}{4Dt}x^2\right) = \\ &= -\frac{1}{2t} P(x, t) + \frac{x^2}{4t^2} P(x, t) \end{aligned}$$