Clase 1 - Mecánica Estadística

Duración: 1:10 hrs.
Publicada el 1 de septiembre de 2016

Prof. Álvaro Núñez

1. Conceptos Básicos

- Las leyes de la física son *emergentes*, ejemplo: ley de difusión.
- La ignorancia es nuestra ventaja: equiprobabilidad de los *microestados*.
- El *macroestado* más probable es MUCHO más probable.

2. More is Different[1]

- **Reduccionismo:** los únicos aspectos fundamentales que tienen los problemas en ciencia estan relacionados con los mecanismos microscópicos que regulan el comportamiento de las partes de los sistemas bajo estudio. Dichas ideas están basadas implícitamente en la noción de que la gran variedad de fenómenos desarrollados en sistemas complejos son una manifestación de las leyes "microscópicas"que describen a sus componentes e interacciones.
- Ésta hipótesis ha sido objeto de un interesante debate a lo largo de la historia de la ciencia. Nuestro interés en esta discusión es ilustrar como el análisis de la realidad en términos de dicho principio se hace ineficiente e improductivo. El progreso del conocimiento científico ha hecho manifiesta la necesidad de complementar el análisis con un principio adicional.
- El principio básico: **more is different**. Al considerar un sistema compuesto por un número muy grande de componentes que interactúan, debemos recurrir a una descripción basada en leyes físicas distintas y complementarias a las microscópicas.
- Se hace evidente que las leyes microscopicas no son capaces de predecir de manera adecuada (debido a la incapacidad intrínseca que tenemos para resolver los modelos predictivos).
- Dichos sistemas no pueden entenderse en términos de sus componentes microscópicas.
- Al considerar MUCHOS elementos las leyes que describen dichos sistemas son mejor escritas en términos de principios de organización que naturalmente carecen de sentido desde el punto de vista microscópico.
- El ejemplo paradigmático de este tipo de ley es el de rompimiento espontáneo de la simetría. Dicho principio será estudiado en detalle en este curso.
- Las leyes de la física que corresponden a principios de organización se llaman leyes emergentes.
- Postura radical: todas las leyes de la física son emergentes.

3. Ejemplo: ley de difusión... o la caminata del borracho

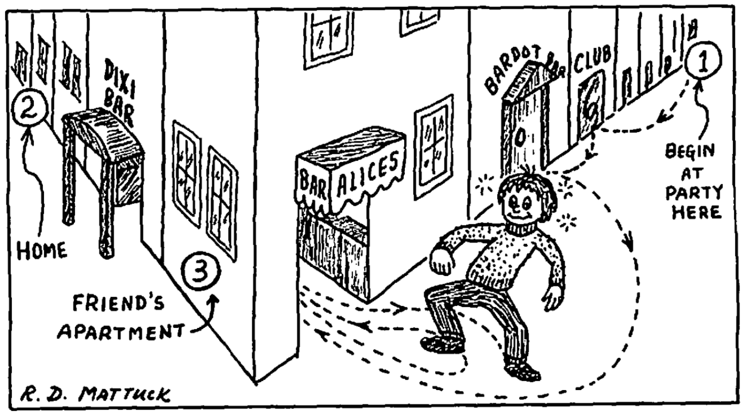

Figura 1: Representación artística de un caminante aleatorio[3].

La idea es considerar un borracho que camina dando pasos de manera aleatoria[2]. En una dimensión el problema es sencillo:

- Cada paso se da en forma aleatoria, con probabilidad $\frac{1}{2}$ a la derecha o a la izquierda.
- Nos interesa saber la probabilidad de que avance una distancia $x = m\ell$ después de un tiempo $t = n\tau$.
- Equiprobabilidad de los microestados: Todos los posibles caminos tienen la misma probabilidad $(1/2^n)$.
- Para avanzar al sitio m el borracho necesita dar $N = (n+m)/2$ a la derecha y $M = (n-m)/2$ pasos a la izquierda.
- La solución es simplemente el número de maneras en que puedo dar N pasos a la derecha y M pasos a la izquierda:

$$P(m,n) = \left(\frac{1}{2}\right)^n \frac{n!}{N!M!} \tag{1}$$

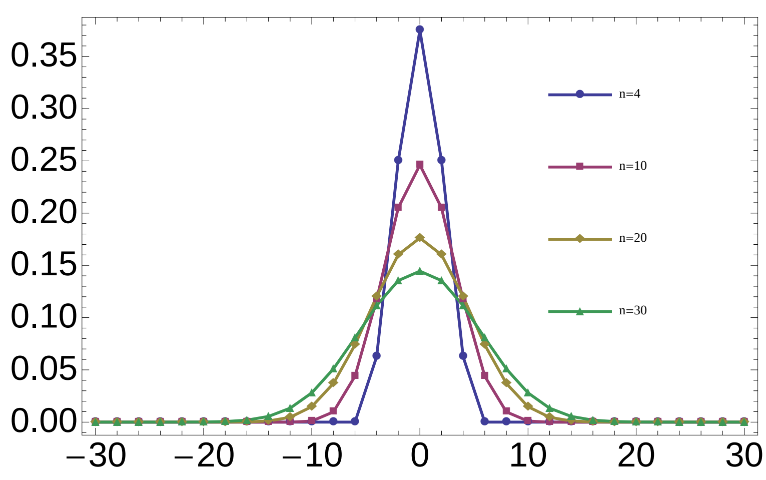

Figura 2: Distribución de probabilidades de terminar en posición m (eje x) tras n pasos

Nuestra solución corresponde a la conocida distribución de Bernoulli. Obtengamos una solución alternativa. Consideremos el problema de determinar la probabilidad $P(m, n+1)$ a partir de las probabilidades $P(m, n)$. Naturalmente tenemos:

$$P(m, n+1) = P(m+1, n) \times \text{Prob. a la izquierda} + P(m-1, n) \times \text{Prob. a la derecha} \quad (2)$$

que en el caso equilibrado corresponde a la ecuación (llamada <u>ecuación maestra</u>):

$$P(m, n+1) = \frac{1}{2}(P(m+1, n) + P(m-1, n)) \quad (3)$$

evidentemente esta relación da origen al triángulo de Pascal. Sin embargo considerando el caso en que $n \gg 1$ podemos establecer la relación:

$$\boxed{\partial_t P = \frac{\ell^2}{2\tau}\partial_{xx} P \equiv \mathcal{D}\, \partial_{xx} P}$$

conocida como <u>ecuación de difusión.</u> La solución de esta ecuación diferencial para la condición inicial $P(x, 0) = \delta(x)$ es conocida:

$$P(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi\mathcal{D}t}} \mathrm{e}^{-x^2/4\mathcal{D}t} \quad (4)$$

4. Aproximación de Stirling

A continuación se presenta un resultado que será de mucha utilidad en lo que sigue. Conocida como la aproximación de Stirling, consiste en una representación para el factorial de un número. En realidad no se trata de una aproximación, es una serie asintótica. Demostraremos que podemos aproximar el factorial de un número grande por la expresión de Stirling. ¿Qué tan precisa es esta aproximación?. Para un $\epsilon > 0$ arbitrario, existe un número N tal que el error es menor que ϵ para todos los $n > N$.

Podemos motivar este resultado con un análisis elemental. Partiendo de la definición:

$$n! = 1 \times 2 \times \cdots \times n \quad (5)$$

y tomado logaritmo natural, obtenemos:

$$\log n! = \log 1 + \log 2 + \cdots + \log n \approx \int_1^n \mathrm{d}x \log x = n \log n - n \quad (6)$$

Esta aproximación resulta ser muy buena para valores de n moderadamente grandes. Ahora presentaremos un cálculo alternativo para obtener la aproximación de manera directa. Se puede hacer a partir de la representación de Euler del factorial:

$$N! = \Gamma(N+1) = \int_0^\infty u^N \mathrm{e}^{-u} \mathrm{d}u. \quad (7)$$

Notamos que el integrando tiene un máximo muy marcado para valores de N grandes. Esto es fácil de entender. Escribiendo $u^N \mathrm{e}^{-u} = \mathrm{e}^{N \log u - u}$. Haciendo un cambio de variables obtenemos:

$$\begin{aligned} N! &= N\mathrm{e}^{N \log N} \int_0^\infty \mathrm{e}^{-N(u - \log u)} \mathrm{d}u && (8) \\ &= N\mathrm{e}^{N \log N} \int_0^\infty \mathrm{e}^{-N\mathrm{f}(u)} \mathrm{d}u && (9) \end{aligned}$$

Ahora, la función exponencial reduce la contribución en el integrando para valores lejos de los mínimos de f. Lo anterior nos permite usar la aproximación $\mathrm{e}^{-N\mathrm{f}(u)} \approx \mathrm{e}^{-N\left(1 + \frac{1}{2}(u-1)^2\right)}$ y obtener la aproximación de Stirling,

$$N! = \Gamma(N+1) = \int_0^\infty u^N \mathrm{e}^{-u} \mathrm{d}u \approx \sqrt{2\pi N}\, \mathrm{e}^{N \log N - N} \quad (10)$$

La tabla a continuación muestra algunos valores de la función factorial y de la estimación.

n	$\log(n!)$	$\log(\text{Stirling})$
1	0.	$-0{,}0810615$
3	1,79176	1,76408
5	4,78749	4,77085
7	8,52516	8,51326
9	12,8018	12,7926
11	17,5023	17,4947
13	22,5522	22,5458
15	27,8993	27,8937
17	33,5051	33,5002
19	39,3399	39,3355

(11)

Antes de terminar reconciliaremos Ec.(1) con Ec. (4).

Con la ayuda de la relación de Stirling es posible probar, a partir de la Ec. (1) que:

$$P(n,m) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi n}} \mathrm{e}^{-m^2/2n} \tag{12}$$

5. Fenomenos Difusivos

Aunque la ecuación que desarrollamos es para la densidad de probabilidad de un caminante aleatorio, el fenómeno descrito por dicha ecuación es universal. Sin importar la naturaleza microscópica de los constituyentes (fotones, átomos de impurezas en un metal, electrones en un semiconductor, iones en una membrana celular, y un gran etc.) diversos sistemas admiten una descripción en términos de procesos difusivos.

Revisemos los aspectos más esenciales de un fenómeno difusivo:

- Es un proceso lento, una señal difusiva se propaga una magnitud $\sqrt{\mathcal{D}t}$.
-

6. Microestado/Macroestado

- El hecho de que todas las secuencias sean equiprobables parece contraintuitivo.
- Debemos distinguir entre microestado (e.g. $CSCSSSCCCCCC$) contra macroestado (e.g. 8 C y 4 S.)
- El macroestado más probable es un número igual de caras y sellos.

A. Problemas

A.1. Stirling

- Determine la primera corrección a la aproximación de Stirling.
- Calcule el error relativo al usar la aproximación para distintos valores de N. Verifique el comportamiento de la corrección dominante predicho en la parte anterior.
- Estime el error relativo al usar la aproximación de Stirling para evaluar

$$\binom{N}{M} = \frac{N!}{(N-M)!M!} \tag{13}$$

Considere el caso $N = nN_A$ y $M = mN_A$, donde n y m son de orden 1 y $N_A \sim 10^{23}$.

A.2. Borrachito I

Un hombre, cuyo estado etílico es puesto en evidencia, además de su hálito alcohólico, por lo errático de su andar, se dirige a su hogar siguiendo un camino unidimensional. El camino es trazado a pasos de largo ℓ dados cada τ segundos. La probabilidad de dar un paso hacia su hogar es p, mientras que un paso en el sentido contrario tiene probabilidad $q = 1 - p$.

1. Determine la densidad de probabilidad $P(x, t)$ de la posición del beodo tras un tiempo largo, de tal modo que $P(x, t)dx$ corresponda a la probabilidad de que el sujeto se encuentre en el intervalo comprendido entre x y $x + dx$ en el instante t. Asuma que tras la serie de eventos que llevó al sujeto al presente estado de intemperancia, nuestro protagonista emprendió su camino en el instante $t = 0$ desde una taberna ubicada en $x = 0$.

2. Determine las modificaciones en la ecuación de difusión para la probabilidad.

A.3. Borrachito II

Un borracho se dirige a su hogar siguiendo un camino unidimensional. El camino es trazado a pasos de largo ℓ dados cada τ segundos. La probabilidad de dar un paso hacia su hogar es $1/2$, mientras que un paso en el sentido contrario tiene probabilidad $1/2$. El principal obstaculo que el beodo debe salvar antes de llegar a su hogar es un tugurio de mala muerte, ubicado en $x = L$, que ofrece la oportunidad de terminar la noche en su interior.

1. Asumiendo que el borracho comienza su camino en $x = 0$, cual es la probabilidad de llegar a $x = C$ donde se ubica su casa después de un tiempo t.

2. Determine las modificaciones en la ecuación de difusión para la probabilidad del borracho. Este modelo matemático se puede usar para estimar la tasa de adsorción de algun gas sobre una película que atrapa sus átomos.

Referencias

[1] P. W. Anderson. More is different. *Science*, 177:393, 1972.

[2] S. Chandrasekhar. Stochastic problems in physics and astronomy. *Rev. Mod. Phys.*, 15:1, 1943.

[3] R. Mattuck. *A guide to Feynman diagrams in the many-body problem.* Dover, New York, 1992.