Clase 3 - Mecánica Estadística

Duración: 1:10 hrs. Prof. Álvaro Núñez
Publicada el 8 de septiembre de 2016

1. Conceptos Básicos

- Teorema central del límite: distribuciones Gaussianas como un límite universal.
- La aparición de simetrías.
- Multiplicadores de Lagrange: significado y uso.

2. Teorema central del límite.

- Consideremos que la probabilidad de que el borracho (el mismo de la clase anterior) pero con una probabilidad $p(\vec{s})$ de dar un paso a lo largo de $\vec{s}$. Hemos generalizado el problema del borracho a N dimensiones y a pasos de magnitud arbitraria. Además hemos generalizado la distribución de probabilidad a una arbitraria (de variacia finita como veremos).
- Asumiremos que la distribución esta centrada $\langle s \rangle = 0$. Esto no es una reducción en la generalidad de nuestro analisis. Siempre podemos relajar dicha restricción a través de un cambio de variables.
- El borracho antiguo esta déscrito por $p(s) = \frac{1}{2}\delta(-\ell) + \frac{1}{2}\delta(\ell)$, donde ℓ es la magnitud de los pasos.
- La probabilidad de que después de $n+1$ pasos el borracho termine en la posición ζ es simplemente:
$$P_{n+1}(\vec{\zeta}) = \int \mathrm{d}^N s\, p(\vec{s}) P_n(\vec{\zeta} - \vec{s}) \tag{1}$$
Es decir, la probabilidad de que en el paso n el borracho este en $\vec{\zeta} - \vec{s}$ por la probabilidad de dar un paso $\vec{s}$.
- Considerando la diferencia de las probabilidades:
$$P_{n+1}(\vec{\zeta}) - P_n(\vec{\zeta}) = \int \mathrm{d}^N s\, p(\vec{s}) \left(P_n(\vec{\zeta} - \vec{s}) - P_n(\vec{\zeta}) \right), \tag{2}$$
donde hemos usado la normalización de la probabilidad.
- Si consideramos un n grande, obtenemos:
$$\partial_t P(\zeta, t) = D \nabla^2 P(\zeta, t) \tag{3}$$
donde $D = \langle \vec{s}^2 \rangle / 2\tau$. En este analisis hemos desarrollado en una expansión de Taylor la función P_n y truncado a segundo order. Este último paso requiere que los pasos largos tengan baja probabilidad.

2.1. Ejemplos

- https://www.probabilitycourse.com/chapter4/4_2_4_Gamma_distribution.php
- La distribución Γ tiene una densidad de probabilidad dada por: $P_{\alpha,\beta}(x) = \frac{x^{\alpha-1}e^{-\frac{x}{\beta}}\beta^{-\alpha}}{\Gamma(\alpha)}$.

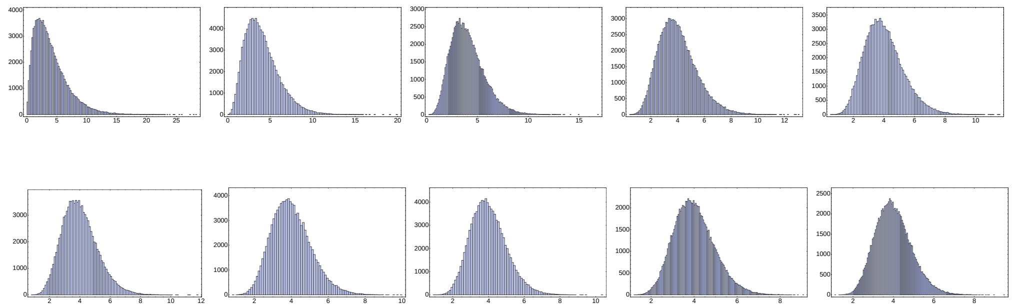

Figura 1: Histograma de la posición promedio de 10^5 caminantes aleatorios después de 1, 2, ..., 10 pasos. Cada paso tiene una longitud s con probabilidad $P_{2,2}(s)$.

2.2. Emergencia de simetrías (!)

- Notemos la ecuación de difusión que obtenemos tiene simetría rotacional. Sin embargo, es evidente que en cada paso $p(s)$ no tiene, necesariamente dicha simetría.

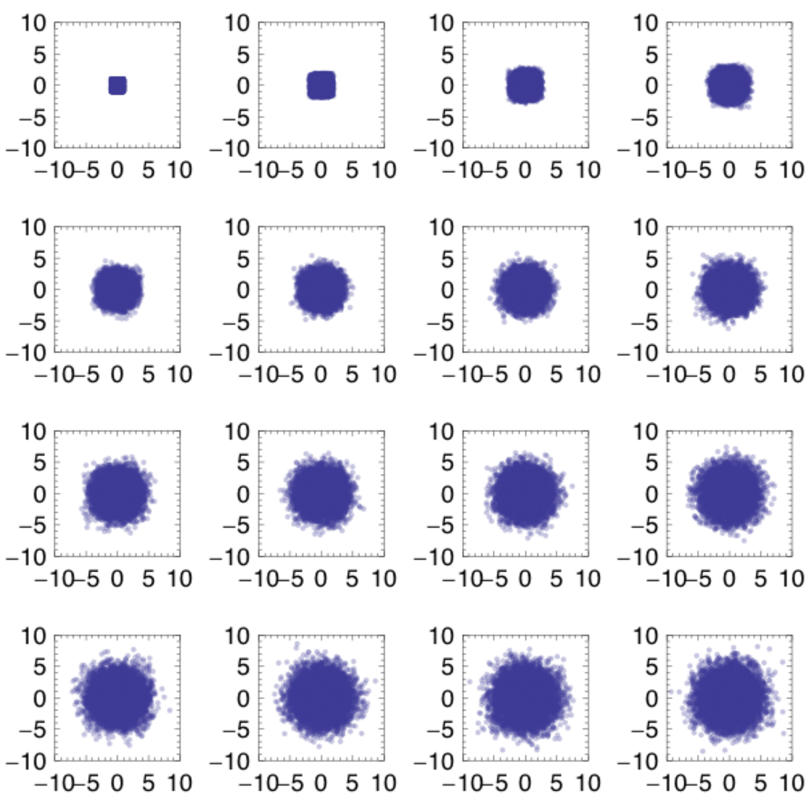

Figura 2: Posición final de 10^4 caminantes aleatorios en 2D después de 1, 2, ..., 16 pasos. Cada paso $\vec{s} = (x, y)$ tiene probabilidad $p(x)p(y)$ con $p(x)$ una distribución uniforme entre -1 y 1.

3. Multiplicadores de Lagrange

Consideraremos la tarea de minimizar (o maximizar) una función sujeta a ciertas restricciones.

- Partiremos con un ejemplo trivial: maximizar el área de un rectangulo de perimetro dado.
- Si a y b son los lados del rectangulo, $P = a + b$ y $A = ab$, donde P es el semiperimetro y A el área.
- Como $b = P - a$, el problema es simplemente, maximizar $a(P - a)$ que claramente tiene su máximo en $a = P/2$. Es decir cada lado es igual y tenemos un cuadrado.

Este cálculo es correcto pero tiene algunos problemas para ser usado como técnica general para un problema de minimización arbitrario. El método de los multiplicadores de Lagrange utiliza un resultado geométrico elemental. Las curvas de nivel de una función son localmente tangentes a la curva de nivel de la restricción. Esto significa que los gradientes de ambas funciones son paralelos:

$$\nabla A = \lambda \nabla P \tag{4}$$

Esto se traduce en $(b, a) = (\lambda, \lambda)$ y por lo tanto $a = b = \lambda$. La solución es entonces $a = P/2$ y el area $A = P^2/4$. Notemos que

$$\lambda = \frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}P} \tag{5}$$

Esta es la interpretación del multiplicador de Lagrange.