Facultad de Ciencias

Universidad Autónoma de México

Física Estadística

Tarea 2 - 3.1.5

Profesores:

Dr. Ricardo Atahualpa Solórzano Kraemer

Alumno: Sebastián González Juárez

sebastian_gonzalezj@ciencias.unam.mx

3.1.5 La función de partición como problema de extremización.

- Utilizando la técnica de multiplicadores de Lagrange muestra que la entropía de Shannon

$$S = -k \sum_i P_i \log P_i \ , \tag{15}$$

bajo las constricciones

$$\sum_i P_i = 1 \ , \quad \sum_i E_i P_i = E \ ; \tag{16}$$

se extremiza con

$$P_j = \frac{\exp(-\lambda E_j / k)}{\sum_i \exp(-\lambda E_i / k)} \ , \tag{17}$$

donde λ es un multiplicador de Lagrange sin determinar.

- Compara con la relación de Euler para encontrar dicho multiplicador.
- Usa las P_j encontradas para calcular la entropía.

Sol.

- Utilizamos multiplicadores de Lagrange. Definimos con la entropía de Shannon:

$$\mathcal{L} = -k \sum_i P_i \log P_i + \lambda_1 \left(1 - \sum_i P_i\right) + \lambda_2 \left(E - \sum_i E_i P_i\right)$$

donde λ_1 y λ_2 son multiplicadores de Lagrange.

Ahora derivamos $\mathcal{L}$ con respecto a P_j e igualamos a cero:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial P_j} = -k\left(\log P_j + 1\right) - \lambda_1 - \lambda_2 E_j = 0$$

$$\Rightarrow -k\left(\log P_j + 1\right) = \lambda_1 + \lambda_2 E_j \Rightarrow \log P_j + 1 = -\frac{\lambda_1}{k} - \frac{\lambda_2}{k} E_j \Rightarrow \log P_j = -1 - \frac{\lambda_1}{k} - \frac{\lambda_2}{k} E_j$$

$$\therefore P_j = \exp\left(-1 - \frac{\lambda_1}{k} - \frac{\lambda_2}{k} E_j\right) = e^{-1-\lambda_1/k} e^{-\lambda_2 E_j / k}$$

Definiendo Z const. tal que: $e^{-1-\lambda_1/k} = \frac{1}{Z}$

$$P_j = \frac{e^{-\lambda_2 E_j/k}}{Z}$$

Por proba tenemos la restricción $\sum_i P_i = 1$:

$$\sum_i \frac{e^{-\lambda_2 E_i/k}}{Z} = 1 \Rightarrow Z = \sum_i e^{-\lambda_2 E_i/k}$$

Por lo tanto, las probabilidades son:

$$P_j = \frac{e^{-\frac{\lambda E_j}{k}}}{\sum_i e^{-\frac{\lambda E_i}{k}}}.$$

Para que quede como el problema solo usamos $\lambda_2 = \lambda$.

- Sabemos que:

$$\frac{1}{T} = \left(\frac{\partial S}{\partial E}\right)$$

Sustituimos P_j en la entropía:

$$S = -k \sum_j P_j \log P_j = -k \sum_j P_j \left(-\frac{\lambda}{k} E_j - \log Z\right) = \lambda \sum_j E_j P_j + k \log Z \sum_j P_j = \lambda E + k \log Z$$

Como $\sum_j P_j = 1$.

$$S = \lambda E + k \log Z$$

Derivamos respecto a E: $\frac{dS}{dE} = \lambda$

Por otro lado, sabemos que: $\frac{dS}{dE} = \frac{1}{T}$

Por lo tanto: $\lambda = \frac{1}{T}$

- Ya hemos hecho el cálculo de la entropía,