

Taller 2

Ensamble Canónico y Difusión

Juan Diego Salgado Giraldo
Nicolas Cordoba Garzon
Sofía Londoño Toro
Juan Carlos Aranda Muñoz
Juan Pablo Luengas Medina
María Paula Bravo Urrea
John Jaramillo Ortiz

Contenidos

1 La distribución de Maxwell
- Boltzmann en 2D

3 El modelo de Ising
Canónico

5 Deducción Ley de
Ahrrenius

7 Paradoja de Parrondo

2 Magnetización
Paramagnética

4 Equilibrio Químico y Ratas
de Reacción

6 Un Motor por Rachet

8 Mercado de Valores



1

La distribución de Maxwell - Boltzmann en 2D

Cálculo de distribuciones en V y Vx y simulación
de colisiones elásticas como comparativa.

Procederemos de la siguiente manera:

Se calcula teóricamente la distribución en V .

Distribución en V_x

Se calcula teóricamente la distribución en V_x

Distribución en V

Histograma de V_x

Se compara la distribución teórica con la simulación

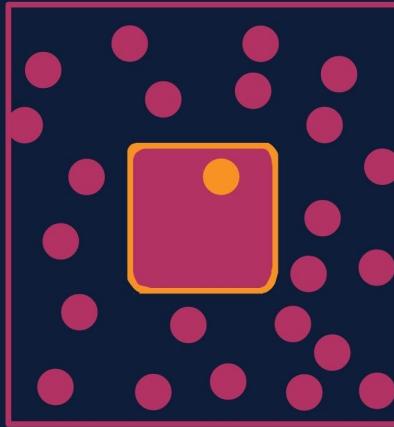
Histograma en V

Distribución de v_x

Consideramos un Gas de N moléculas en dos dimensiones sin interacción entre ellas:

La energía del sistema es $E = \frac{m}{2}(v_x^2 + v_y^2)$ con lo que la probabilidad es proporcional a:

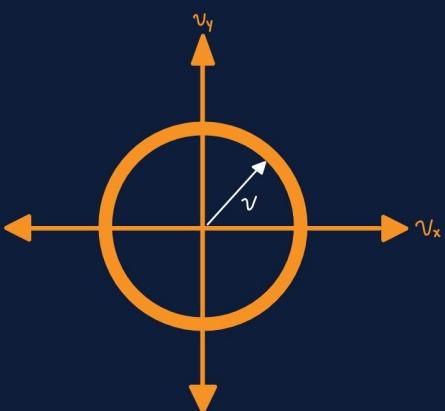
$$P(v_x, v_y) \propto e^{-\frac{\beta m}{2}(v_x^2 + v_y^2)}$$



Tomando solo la dependencia en Vx y normalizando tenemos:

$$P(v_x)dv_x = \frac{e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{v_x}{\sigma_x}\right)^2}}{\sigma_x \sqrt{2\pi}} dv_x \quad \sigma_x = \sqrt{\frac{1}{m\beta}}$$

Distribución en V



La probabilidad de encontrar un estado con velocidad V es proporcional a la cantidad de estados:

$$P(v) \propto (a \lg o)(2\pi v)e^{-\frac{\beta mv^2}{2}}$$

Donde Algo la encontramos normalizado $(a \lg o)2\pi \frac{1}{m\beta} = 1$. Nos resulta la distribución:

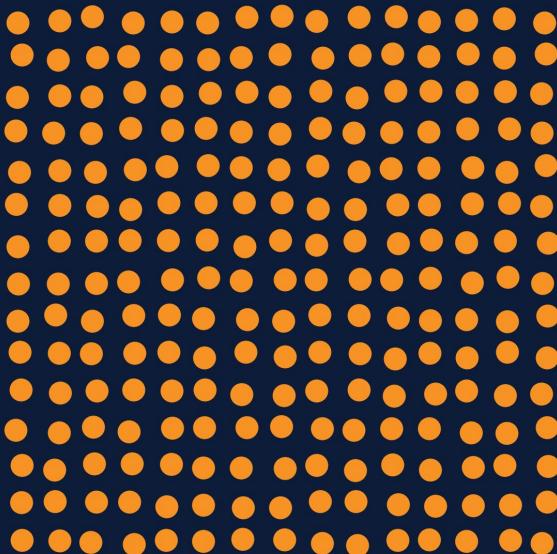
$$P(v)dv = m\beta ve^{-\frac{\beta mv^2}{2}}dv$$

Simulación

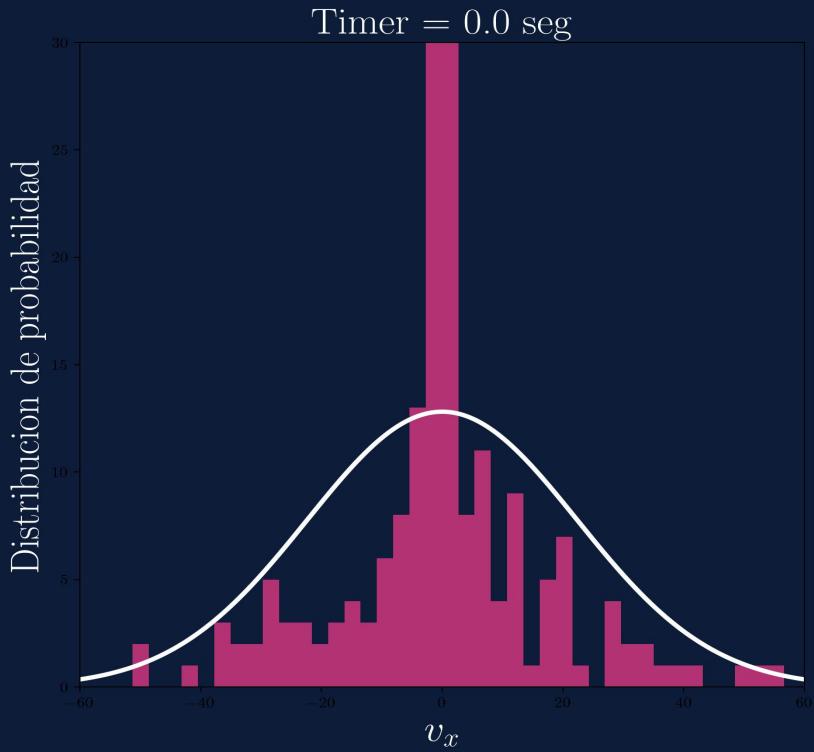
Consideramos $N=225$ moléculas las cuales tienen una velocidad inicial v_0 .

Después de un tiempo t el sistema alcanza el equilibrio térmico y las velocidades se distribuyen según los cálculos anteriores.

Timer = 0.0 seg



Histograma en v_x



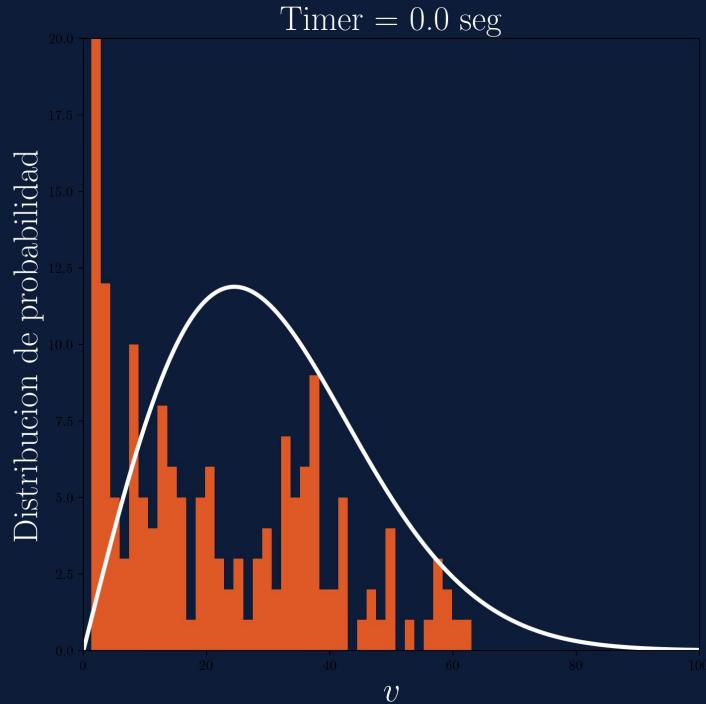
Después de un tiempo t el sistema alcanza el equilibrio térmico y las componentes de la velocidad en x se aproximan a la teoría:

$$P(v_x)dv_x = \frac{e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{v_x}{\sigma_x}\right)^2}}{\sigma_x \sqrt{2\pi}} dv_x$$

Histograma en v

De igual manera, a medida que transcurre el tiempo la distribución converge a la de Maxwell-Boltzmann

$$P(v)dv = m\beta v e^{-\frac{\beta mv^2}{2}} dv$$



Comparativa de Cantidades

Donde usamos:

$$N = 25 \quad m = 1 \quad v_o = 100$$

$$k_b T = \frac{2E}{2N - 1}$$

$$\langle v \rangle = \beta \int_0^{\infty} dv \ v^2 e^{-\beta v^2}$$

Simulación

$$\sigma_{v_x} = 25.922$$

$$\langle v \rangle = 35.38$$

Teoría

$$\sigma_{v_x} = 33.40$$

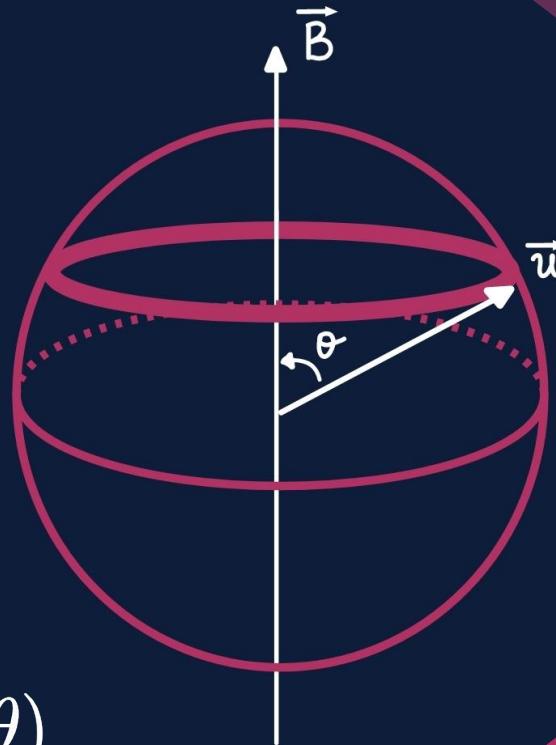
$$\langle v \rangle = 41.87$$

2

Magnetización Paramagnética

Dipolo sometido a un campo magnético orientado en el eje Z.

$$E = - \mathbf{u} \cdot \mathbf{B} = - u B \cos(\theta)$$



PROCEDIMIENTO

1

Distribución para la componente en z del dipolo

Calculamos la función de Partición:

$$Z = \int e^{-\beta E} d\Omega = ?$$

2

$$P(u_z)du_z = ?$$

Calculamos el Valor esperado de la componente en z del dipolo

3

$$\langle u_z \rangle = \int_{-u}^u u_z P(u_z) du_z = ?$$

1

Función de Partición

Integramos el sobre el total de estados posibles, i.e. sobre una esfera de radio u :

$$\begin{aligned} Z(u) &= \int_{\Omega} e^{-\beta E} d\Omega \\ &= \frac{1}{u^2} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} d\theta u^2 e^{\beta Bu \cos(\theta)} \sin(\theta) \\ &= 2\pi \int_{-1}^1 dg e^{(\beta Bu)g} \\ &= \frac{4\pi}{\beta Bu} \sinh(\beta Bu) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} g &= \cos(\theta) \\ dg &= -d\theta \sin(\theta) \end{aligned}$$

Distribución de u_z

2

La distribución $P(u_z)$ debe ser proporcional al número de estados:

$$P(u_z)du_z \propto e^{-\beta Bu_z}du_z$$

Y se debe normalizar:

$$A \int_{-u}^u e^{-\beta Bu_z}du_z = 1 \Rightarrow A = \frac{2\pi}{uZ(u)}$$

Con lo que obtenemos:

$$P(u_z) du_z = \frac{2\pi}{uZ(u)} e^{-\beta Bu_z} du_z$$

3

Valor esperado de u_z

El valor esperado nos indica el cual será el valor de u_z (en promedio) si se realizan muchas muchas mediciones.

En el siguiente apartado comparamos esta curva teórica con una aproximación Monte Carlo.

$$\begin{aligned} \langle u_z \rangle &= \int_{-u}^u du_z u_z P(u_z) \\ &= \frac{2\pi}{uZ(u)} \int_{-u}^u du_z u_z e^{\beta Bu_z} \\ &= \beta B \frac{\frac{u}{\beta B} \cosh(u\beta B) - \frac{1}{\beta^2 B^2} \sinh(u\beta B)}{\sinh(u\beta B)} \\ &= u \left(\coth(x) - \frac{1}{x} \right) \end{aligned}$$

Donde:

$$x = u\beta B$$

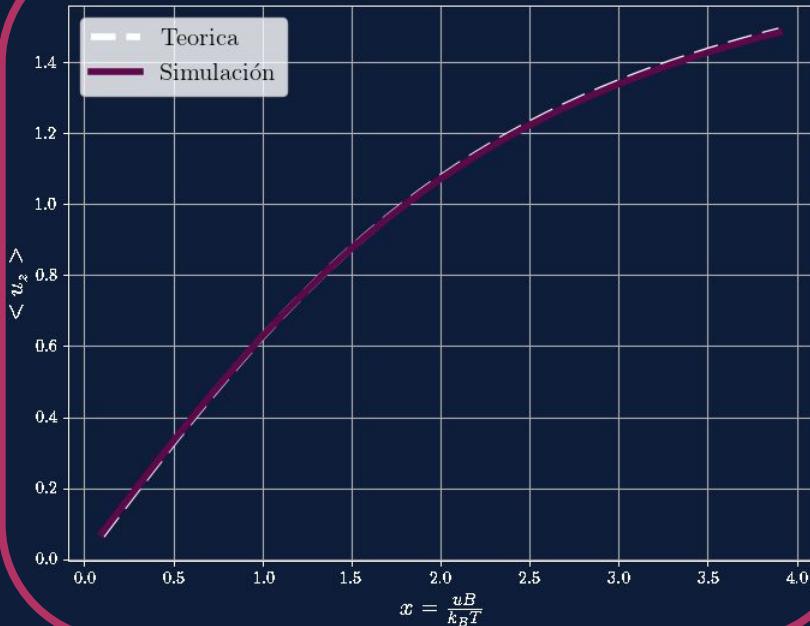
Simulación Monte Carlo

Usando integracion monte Carlo aproximamos:

$$\langle u_z \rangle = \frac{2\pi}{uZ(u)} \int_{-u}^u du_z u_z e^{\beta Bu_z}$$

$$\int_{-u}^u du_z u_z e^{\beta Bu_z} \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N u_{z,i} e^{\beta Bu_{z,i}}$$

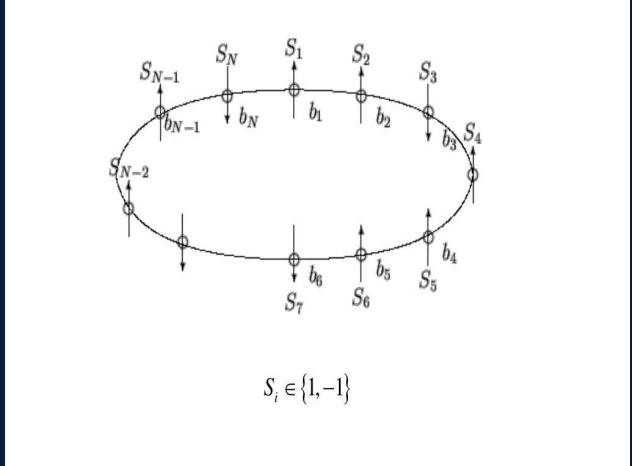
$$Z(u) \int_{-u}^u du_z e^{\beta Bu_z} \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N e^{\beta Bu_{z,i}}$$



3

El modelo de Ising Canónico

Transmisión de señales donde el ruido cambia
los valores recibidos



$$E = -J \sum_{i=0}^{N-1} s_i s_{i+1}; \text{ con } s_0 = s_N$$

$$H(s_i, s_{i+1}) = -J s_i s_{i+1}$$

$$\begin{aligned} Z &= \sum_S \exp(-\beta E) \\ &= \sum_S \exp \left(-\beta \sum_i^{N-1} H(s_i, s_{i+1}) \right) \end{aligned}$$

Donde : $S = \{s_1, s_2, \dots, s_N : s_i \in \{1, -1\}\}$
es una configuración de spin de la red.

¡OJO!: esta notación nos dice que debemos sumar para todos los estados posibles del sistema (una familia de conjuntos), un ejemplo de esta familia sería:

$$S = \{1, 0, \dots, 0\}$$

$$\begin{aligned}
 Z &= \sum_S \exp(-\beta(H(s_0, s_1) + H(s_1, s_2) + \cdots + H(s_{N-1}, s_0))) \\
 &= \sum_S \exp(-\beta(H(s_0, s_1)) \exp(H(s_1, s_2)) \cdots \exp(H(s_{N-1}, s_0))) \\
 &= \sum_S \prod_{i=0}^{N-1} \exp(-\beta H(s_i, s_{i+1}))
 \end{aligned}$$

Debido a que $s_i = \{1, -1\}$, es decir la exponencial sólo puede tomar 4 posibles valores, entonces podemos definir la siguiente matriz :

$$T = \begin{pmatrix} e^{-\beta H(1,1)} & e^{-\beta H(1,-1)} \\ e^{-\beta H(-1,1)} & e^{-\beta H(-1,-1)} \end{pmatrix}$$

De esta manera:

$$T_{ij} = T_{s_i s_j} = e^{-\beta H(s_i, s_j)}$$

Queremos demostrar:

$$T_{0,N}^N = \sum_{s_1, s_2, \dots, s_{N-1}} \prod_{i=0}^{N-1} e^{-\beta H(s_i, s_{i+1})}$$

- Para N=2

$$T_{ik}^2 = T_{ij}T_{jk} = e^{-\beta H(s_i, s_j)}e^{-\beta H(s_j, s_k)}$$

- Hipótesis de inducción:

$$T_{0,N-1} = \sum_{s_1, \dots, s_{N-2}} \prod_{i=0}^{N-2} e^{-\beta H(s_i, s_{i+1})}$$

Ahora:

$$Tr(T^N) = \sum_{s_0} T_{s_0 s_0}^N = \sum_S \prod_{i=0}^{N-1} e^{-\beta H(s_i, s_{i+1})} = Z; \text{ con } s_0 = s_N$$

- Paso inductivo:

$$\begin{aligned} T_{ik}^N &= T_{ij}^{N-1}T_{jk} = \sum_{s_1, s_2, \dots, s_{N-2}} \prod_{i=0}^{N-2} e^{-\beta H(s_i, s_j)}e^{-\beta H(s_j, s_k)} \\ &= \sum_{s_1, s_2, \dots, s_{N-1}} \prod_{i=0}^{N-1} e^{-\beta H(s_i, s_{i+1})} \end{aligned}$$

Ahora como la matriz es simétrica, entonces por el teorema de Schur la matriz es diagonalizable, luego existe una matriz ortogonal tal que:

$$\Lambda = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix} = U^{-1}TU$$

Ahora debido a que la traza es un invariante bajo transformaciones unitarias:

$$\begin{aligned} Tr(T^N) &= Tr(UU^{-1}T^N) && \text{Trivial : } (U^{-1}TU)^N = U^{-1}T^NU \\ &= Tr(U^{-1}T^NU) \\ &= Tr\left((U^{-1}T^NU)^N\right) \\ &= Tr(\Lambda^N) = \lambda_1^N + \lambda_2^N \end{aligned}$$

Para el siguiente caso particular que hemos venido estudiando:

$$T = \begin{pmatrix} e^{\beta J} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta J} \end{pmatrix}$$

La ecuación característica es:

$$Z = 2^N (\cosh^N(\beta J) + \sinh^N(\beta J))$$

$$(e^{\beta J} - \lambda)^2 - e^{-2\beta J} = 0$$

$$\lambda_1 = 2 \cosh(\beta J) \quad \lambda_2 = 2 \sinh(\beta J)$$

Energia libre por sitio:

$$\begin{aligned}f &= \frac{F}{N} = -\frac{K_B T}{N} \ln(Z) \\&= -\frac{K_B T}{N} \ln(\lambda_1^N + \lambda_2^N) \\&= -\frac{K_B T}{N} \ln\left(\lambda_1^N \left(1 + \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^N\right)\right) \\&= -K_B T \ln(\lambda_1) + -\frac{K_B T}{N} \ln\left(1 + \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^N\right)\end{aligned}$$

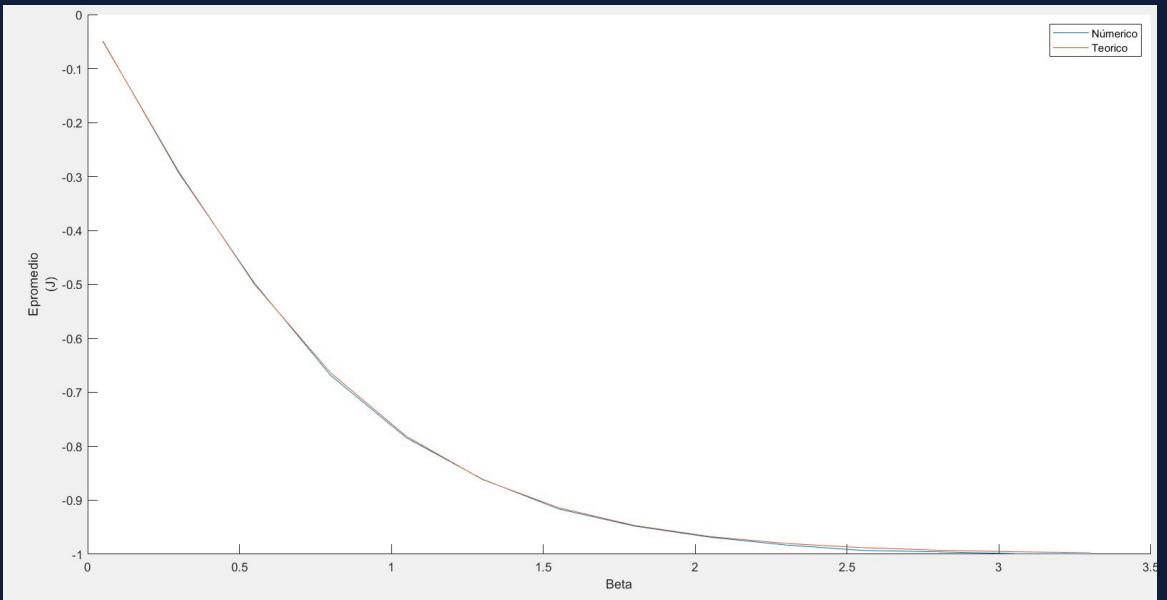
$$\lim_{N \rightarrow \infty} -\frac{K_B T}{N} \ln\left(1 + \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^N\right) = \frac{\infty}{\infty}$$

Utilizando L'Hopital tenemos:

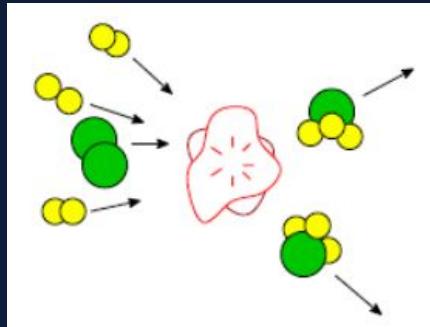
$$\lim_{N \rightarrow \infty} -\frac{K_B T}{N} \ln\left(1 + \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^N\right) = 0 \quad \lambda_2 \gg \lambda_1$$

$$f = -K_B T \ln(\lambda_1)$$

$$\begin{aligned}\frac{\langle E \rangle}{N} &= \frac{\partial}{\partial \beta} (\ln (2 \cosh (\beta J))) \\ &= -J \tanh (\beta J)\end{aligned}$$



4

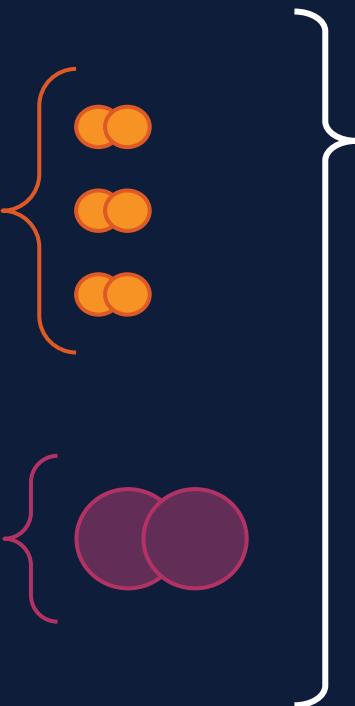


Equilibrio Químico y Ratas de Reacción

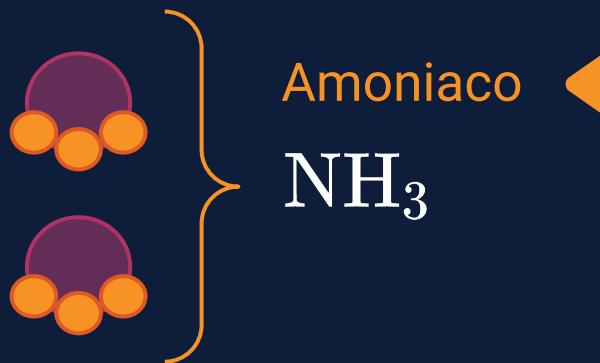
Deducción de la Ley de Acción de Masas

Reacción Química

► Hidrógeno



► Nitrógeno



Amoniaco
 NH_3





Rata de Reacción

Proporcional a la probabilidad de encontrar las moléculas necesarias para que se dé la reacción

Rata Forward

$$r_F = K_F [N_2][H_2]^3$$

Rata Backward

$$r_B = K_B [NH_3]^2$$

En equilibrio $r_F = r_B$

$$K_{eq} = K_F / K_B$$

$$[C] = \frac{N_C}{V} = \frac{\# \text{ moléculas}}{\text{volumen}}$$

Concentración

$$\frac{[NH_3]^2}{[N_2][H_2]^3} = K_{eq}(T)$$

Energía Libre de Helmholtz

$$F = F(T, V, N_{H_2}, N_{N_2}, N_{NH_3}) \quad \text{cte}$$

$$\Delta F = \frac{\partial F}{\partial N_{H_2}} \Delta N_{H_2} + \frac{\partial F}{\partial N_{N_2}} \Delta N_{N_2} + \frac{\partial F}{\partial N_{NH_3}} \Delta N_{NH_3}$$
$$\mu_{H_2} \qquad \qquad \qquad \mu_{N_2} \qquad \qquad \qquad \mu_{NH_3}$$

$$\frac{\partial F}{\partial N_C} = \mu_C$$



Potencial químico

En equilibrio $\Rightarrow \Delta F = 0$

$$\Delta F = \mu_{H_2} \Delta N_{H_2} + \mu_{N_2} \Delta N_{N_2} + \mu_{NH_3} \Delta N_{NH_3}$$

Final - Inicial

$$0 = \mu_{H_2} (\underbrace{0 - 3}_{\text{Final - Inicial}}) + \mu_{N_2} (0 - 1) + \mu_{NH_3} (\underbrace{2 - 0}_{\text{Final - Inicial}})$$

El # de moléculas se reduce de 3 a 0

aumenta en 2

$$-3\mu_{H_2} - \mu_{N_2} + 2\mu_{NH_3} = 0$$

Energía Libre de un Gas Ideal

$$F(T, V, N_C) = -K_B T \ln Z(T, N_C)$$

$$F = N_C K_B T \left[\ln \left(\left(\frac{N_C}{V} \right) \lambda_{T,C}^3 - 1 \right) \right] + N_C F_0^C$$

$$F_0^C \begin{cases} E_0 - K_B T \ln \left(\frac{IT}{h^2} \right) \rightarrow \text{moléculas diatómicas} \\ E_0 - K_B T \ln \left(\frac{\sqrt{8\pi I_1 I_2 I_3 T^3}}{3h^3} \right) \rightarrow \text{moléculas de tres átomos} \end{cases}$$

Potencial Químico

$$\left(\frac{\partial F}{\partial N_C} \right) = K_B T \ln \left(\left(\frac{N_C}{V} \right) \lambda_{T,C}^3 \right) + F_0^C$$

$$\mu_C = K_B T \ln \left([C] \lambda_{T,C}^3 \right) + F_0^C$$

$$-3\mu_{H_2} - \mu_{N_2} + 2\mu_{NH_3} = 0$$

$$0 = K_B T \left[-3 \ln ([H_2] \lambda_{T,H_2}^3) - \ln ([N_2] \lambda_{T,N_2}^3) + 2 \ln ([NH_3] \lambda_{T,NH_3}^3) \right] + \underbrace{\left(-3F_0^{H_2} - F_0^{N_2} + 2F_0^{NH_3} \right)}_{\Delta F_{net}}$$

$$0 = K_B T \ln \left(\frac{[NH_3]^2}{[H_2]^3 [N_2]} \cdot \frac{\lambda_{T,NH_3}^6}{\lambda_{T,H_2}^9 \lambda_{T,N_2}^3} \right) + \Delta F_{net}$$

K_{eq}

$1/K_0$

Ley de Acción de Masas

$$0 = K_B T \ln \left(K_{eq} \cdot \frac{1}{K_0} \right) + \Delta F_{net}$$

$$\begin{aligned}\Delta F_{net} &\approx \Delta E_{net} \\ &\approx 94.4 \text{ kJ/mol}\end{aligned}$$

$$K_{eq} = K_0 \exp \left(-\frac{\Delta F_{net}}{K_B T} \right)$$

A.

$$\Delta F = \frac{\partial F}{\partial N_{H_2}} \Delta N_{H_2} + \frac{\partial F}{\partial N_{N_2}} \Delta N_{N_2} + \frac{\partial F}{\partial N_{NH_3}} \Delta N_{NH_3}$$

$$\Delta F = 0$$

$$\delta = \mu_{H_2} \Delta N_{H_2} + \mu_{N_2} \Delta N_{N_2} + \mu_{NH_3} \Delta N_{NH_3}$$

$$\delta = \underbrace{\mu_{H_2} (0 - 3)}_{\text{final - initial}} + \mu_{N_2} (0 - 1) + \mu_{NH_3} (2 - 0)$$

se reduce el # de moléculas de 3 a 0

$$[\delta = -3\mu_{H_2} - \mu_{N_2} + 2\mu_{NH_3}]$$

B. Energía libre de un gas ideal de la molécula C:

$$F(T, V, N_C) = N_C k_B T \left[\ln \left(\frac{N_C}{V} \cdot \lambda_{T, C}^3 \right) - 1 \right] + N_C F_0$$

F_0 : energía libre de la molécula

E_0 : energía del estado base

I : momentos de inercia (da cuenta de los grados de libertad rotacionales)

$$F_0 = \begin{cases} E_0 - k_B T \ln \left(\frac{I T}{h^2} \right) & \text{para } N_C, H_2 \\ E_0 - k_B T \ln \left(\frac{8\pi T^3 I_1 I_2 I_3}{3h^3} \right) & \text{para } NH_3 \end{cases}$$

$$\frac{\partial F}{\partial N_C} = \frac{\partial}{\partial N_C} \left(N_C k_B T \left[\ln \left(\frac{N_C}{V} \cdot \lambda_{T, C}^3 \right) - 1 \right] + N_C F_0 \right)$$

$$= \frac{\partial}{\partial N_c} \left(N_c k_B T \ln(N_c) - N_c k_B T \ln(V) + 3N_c k_B T \ln(\lambda_{T, c}) - N_c k_B T + N_c F_{oc} \right)$$

$$= k_B T \ln(N_c) + k_B T - k_B T \ln(V) + 3k_B T \ln(\lambda_{T, c}) - k_B T + F_{oc}$$

$$\boxed{U_c = k_B T \ln\left(\frac{N_c}{V}\right) + 3k_B T \ln(\lambda_{T, c}) + F_{oc}}$$

C.

$$0 = -3\mu_{H_2} - \mu_{N_2} + 2\mu_{NH_3}$$

$$= -3k_B T \ln\left(\frac{N_{H_2}}{V} \lambda_{T, H_2}^3\right) - 3F_{oH_2}$$

$$- k_B T \ln\left(\frac{N_{N_2}}{V} \lambda_{T, N_2}^3\right) - F_{oN_2}$$

$$+ 2k_B T \ln\left(\frac{N_{NH_3}}{V} \lambda_{T, NH_3}^3\right) + 2F_{oNH_3}$$

$$= k_B T \left[\ln\left(\frac{V^3}{N_{H_2}^3} \frac{1}{\lambda_{T, H_2}^9}\right) + \ln\left(\frac{V}{N_{N_2}} \frac{1}{\lambda_{T, N_2}^3}\right) \right]$$

$$+ \ln\left(\frac{N_{NH_3}^2}{V^2} \lambda_{T, NH_3}^6\right) \Big] + \underbrace{(2F_{oNH_3} - (3F_{oH_2} + F_{oN_2}))}_{\Delta F_{net}}$$

ΔF_{net}

$$\left. \begin{array}{l} \text{Concentration:} \\ [N_c] = \frac{N_c}{V} \end{array} \right\}$$

$$= k_B T \ln \left(\frac{[NH_3]}{[H_2]^3 [N_2]} \frac{\lambda_{T, NH_3}^6}{\lambda_{T, H_2}^9 \lambda_{T, N_2}^3} \right)$$

+ ΔF_{net}

$$0 = \ln \left(K_{\text{eq}} \frac{\lambda_{T, NH_3}^6}{\lambda_{T, H_2}^9 \lambda_{T, N_2}^3} \right) + \frac{\Delta F_{\text{net}}}{k_B T}$$

$$K_{\text{eq}} \underbrace{\left(\frac{\lambda_{T, NH_3}^6}{\lambda_{T, H_2}^9 \lambda_{T, N_2}^3} \right)}_{k_B^{-1}} = \exp \left(- \frac{\Delta F_{\text{net}}}{k_B T} \right)$$

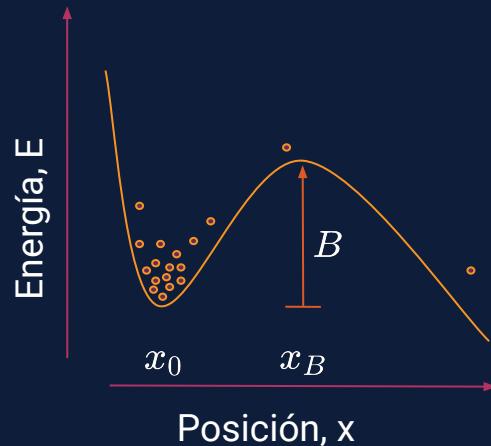
$$\left\{ K_{\text{eq}} = K_0 \exp \left(- \frac{\Delta F_{\text{net}}}{k_B T} \right) \right\}$$

→ Ley de acción de masas

5

Deducción de la Ley de Arrhenius

¿Cómo es la corriente de partículas que logran escapar de una barrera de potencial?



¿Cuáles son los pasos a seguir?

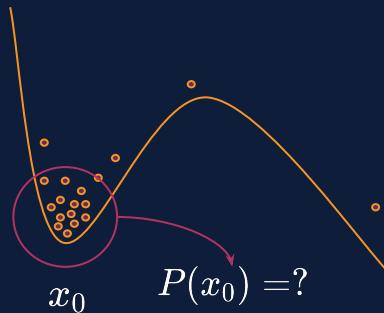
1

¿Cuál es la relación entre las densidades de probabilidad de estar en la barrera y en el pozo?

$$\begin{array}{ccc} \downarrow & & \downarrow \\ P(x_B) & & P(x_0) \end{array}$$

2

¿Cuál es la densidad de probabilidad de hallar el átomo justo en el fondo del pozo?



3

¿Cuál es la densidad de probabilidad de hallarlo en la barrera? Y, ¿cómo resulta la corriente para una distribución de Maxwell-Boltzmann en las velocidades?

$$P(v_x) = \frac{1}{\sigma_v \sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{v_x}{\sigma_v}\right)^2}$$

Relación entre las densidades de probabilidad

1

$$P(X) \propto e^{-\frac{E_x}{\kappa_B T}} \quad \begin{cases} U(x_0) = 0 & \rightarrow P(x_0) \propto e^{-\frac{0}{\kappa_B T}} = e^0 = 1 \\ U(x_B) = B & \rightarrow P(x_B) \propto e^{-\frac{B}{\kappa_B T}} \end{cases}$$

Por lo que,

$$\frac{P(x_B)}{P(x_0)} \propto \frac{e^{-B\beta}}{1} \quad \rightarrow \quad P(x_B) \propto e^{-B\beta} P(x_0)$$

Densidad de probabilidad justo en el pozo

2

En general,

$$P_T(x) = \frac{1}{Z(T)} e^{-\frac{E_x}{\kappa_B T}} \quad \text{con:} \quad Z(T) = \int_{x=-\infty}^{\infty} e^{-\frac{E_x}{\kappa_B T}} dx$$

Alrededor del pozo, suponemos un potencial de la forma:

$$U(x) = \frac{1}{2} M w^2 (x - x_0)^2$$

Así,

$$P_T(x) = \frac{1}{Z(T)} e^{-\frac{1}{2} M w^2 (x - x_0)^2 \beta} = \frac{1}{Z(T)} e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{x - x_0}{\sigma_x} \right)^2}$$

con:

$$\sigma_x^2 = \frac{1}{M w^2 \beta}$$

2

2.1

Por lo que,

$$Z(T) = \int_{x=-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x-x_0}{\sigma_x}\right)^2} dx = \sigma_x \sqrt{2\pi} = \sqrt{\frac{2\pi}{M\beta}} \frac{1}{w}$$

De forma que la densidad de probabilidad para los puntos alrededor del pozo es:

$$P_T(x) = \sqrt{\frac{M\beta}{2\pi}} w e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x-x_0}{\sigma_x}\right)^2}$$

$$P(x_0) = \sqrt{\frac{M\beta}{2\pi}} w$$

Que evaluada exactamente en x_0

De donde,

$$P(x_B) = \sqrt{\frac{M\beta}{2\pi}} w e^{-B\beta}$$

Corriente que supera la barrera de potencial

Maxwell-Boltzmann

3

Se propone la densidad de probabilidad de que una partícula tenga velocidad:

v_x

$$P(v_x) = \sqrt{\frac{M\beta}{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}M\beta v_x^2}$$

$$P(x_B)P(v_x) = \frac{wM\beta}{2\pi} e^{-B\beta} e^{-\frac{1}{2}M\beta v_x^2}$$

Por lo que la probabilidad de que una partícula se encuentre en la barrera y que también lleve una velocidad será

3

3.1

De donde se obtiene que,

$$I = \frac{Nw}{2\pi} e^{-B\beta}$$

de partículas que cumplen las condiciones dadas

$$I = \int \cancel{NP(x_B)P(v_x)} v_x dv_x = Nw \frac{M\beta}{2\pi} e^{-B\beta} \int_{v_x=0}^{\infty} v_x e^{-\frac{1}{2}M\beta v_x^2} dv_x$$

Densidad de probabilidad

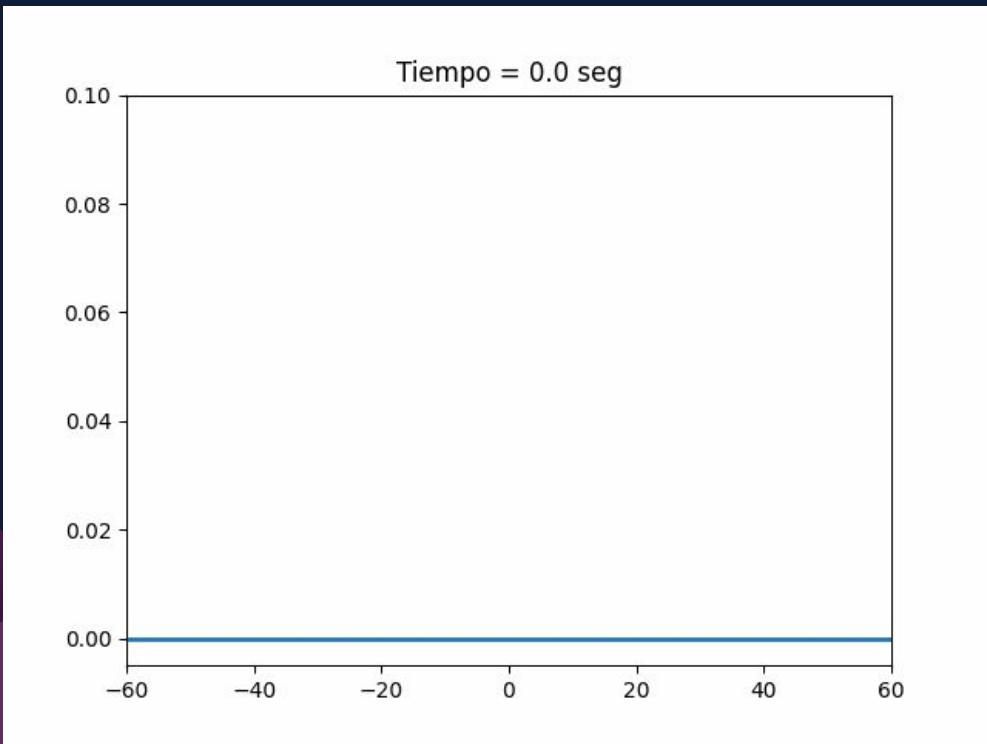
Ecuación que identifica la Ley de Arrhenius

6

Un motor por Rachet

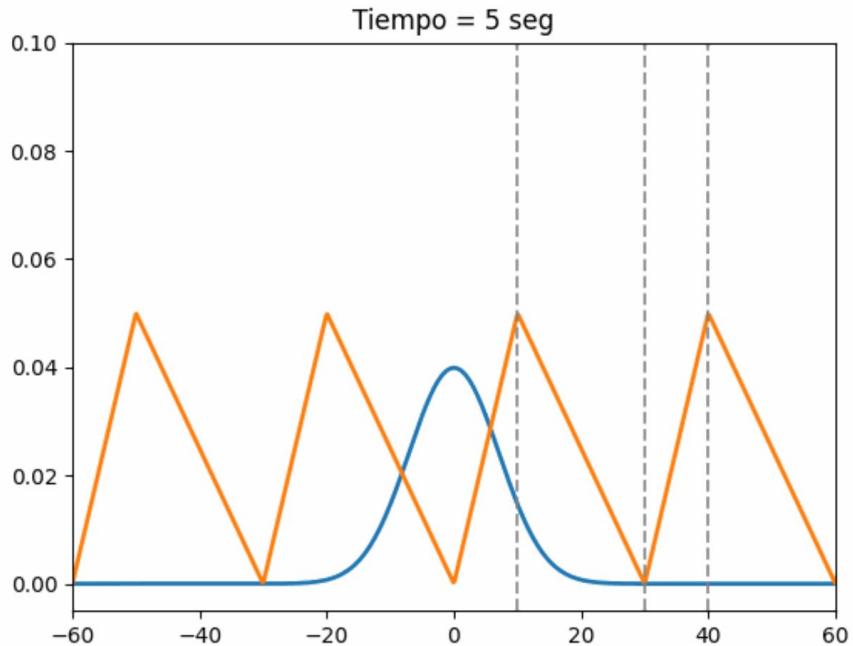
Movimiento a partir de difusión y potencial variable

El fenomeno



Para una distribución de densidad que evoluciona a través de difusión. Se activa un potencial con forma de segueta para capturar las partículas en pozos potenciales cada 30 milímetros

El fenomeno



Los pozos son asimétricos, capturan partículas a 20mm a la izquierda y 10 mm a la derecha. Esto lleva a una dirección preferencial de captura.

Queremos averiguar qué tanto avanza el conjunto de partículas gracias a esta captura preferencial.

Cómo hacerlo

$$A_{pozo} = \int_{\lim_{-pozo}}^{\lim_{+pozo}} \rho_{(x,t)} dx$$

Resolver la integral de los pozos

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2}$$

Encontrar la ecuación de densidad



$$\bar{x} = \sum A_{pozo_n} \cdot x_{pozo_n}$$

$$\bar{v} = \frac{\Delta \bar{x}}{\Delta t}$$

Usar el área de las integrales para hallar la velocidad de las partículas

1

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2}$$

Usamos la linealidad de la ecuación para hallar soluciones con el método de transformadas de fourier

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

En general para condiciones iniciales de delta de dirac en el origen

$$\rho(x, t) = f_{(x,t)} = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}$$

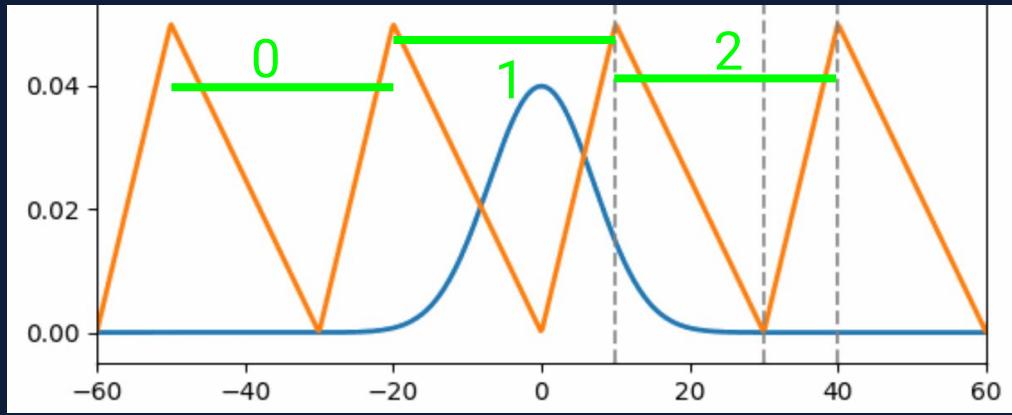
$$f_{(x,t)} = Be^{-ax^2}$$

$$B = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sqrt{2Dt}}$$

$$a = \frac{1}{4Dt}$$

Resolver la integral de los pozos

2



Para saber cuántas partículas caen en cada pozo, debemos integrar la distribución de probabilidad en la región que caería en cada pozo. Es decir, las regiones 0,1 y 2.

2

Digamos una región arbitraria acotada por el origen y un punto l para cuando se activa el potencial, en t=5s.

$$\int_0^l f_{(x)} dx = B \int_0^l e^{-ax^2} dx \quad \text{Con un cambio de variable}$$

$$\int_0^l f_{(x)} dx = \frac{B}{\sqrt{a}} \int_0^{l\sqrt{a}} e^{-u^2} du = \frac{B}{2} \frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{a}} \cdot \operatorname{erf}(l\sqrt{a})$$

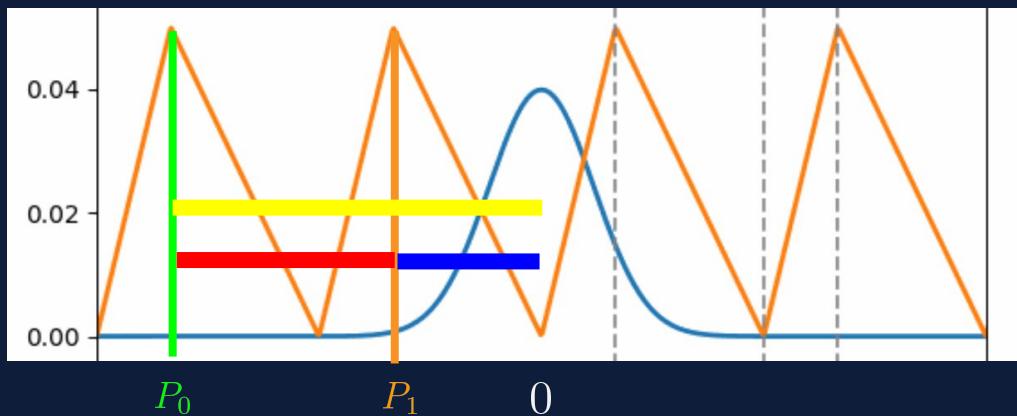
$$\int_0^l f_{(x)} dx = \frac{1}{2} \operatorname{erf}(\sqrt{a}l)$$

En general para una gaussiana normalizada

$$\int_0^l f_{(x)} dx = \frac{1}{2} erf(\sqrt{al})$$

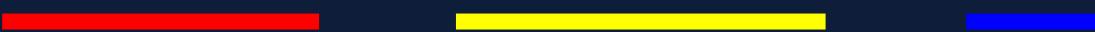
$$A_0 = \int_{P_0}^{P1} f_{(x)} dx = \int_0^{-P_0} f_{(x)} dx - \int_0^{-P_1} f_{(x)} dx$$

2




$$\int_0^l f_{(x)} dx = \frac{1}{2} \operatorname{erf}(\sqrt{a}l)$$

2

$$A_0 = \int_{P_0}^{P_1} f_{(x)} dx = \int_0^{-P_0} f_{(x)} dx - \int_0^{-P_1} f_{(x)} dx$$


$$A_0 = \frac{\operatorname{erf}(P_0\sqrt{a}) - \operatorname{erf}(P_1\sqrt{a})}{2}$$


2

$$A_0 = \frac{\operatorname{erf}(P_0\sqrt{a}) - \operatorname{erf}(P_1\sqrt{a})}{2}$$

$$A_1 = \frac{\operatorname{erf}(P_1\sqrt{a}) + \operatorname{erf}(P_2\sqrt{a})}{2}$$

$$A_2 = \frac{\operatorname{erf}(P_3\sqrt{a}) - \operatorname{erf}(P_2\sqrt{a})}{2}$$

Se procede a calcular estos valores numéricamente.

Los puntos y las áreas numeradas de izquierda a derecha resultan en lo siguiente.

3

```
import numpy as np

def erf(z):
    return np.math.erf(z)

D=10
t=5

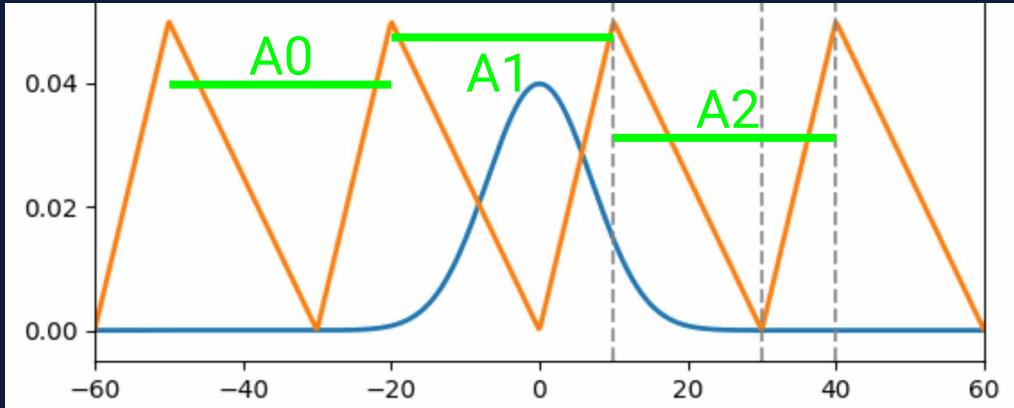
a_r=1/(2*np.sqrt(D*t)) # es el termino de sqrt(a)

p0=50    # para los puntos a la izquierda del orgien se uso el valor absoluto
p1=20    # dado que la gaussiana es simetrica
p2=10
p3=40

L0=-30 #los 3 pozos que se esta tomando en cuenta
L1=0
L2=30

A0=0.5*(erf(a_r*p0)-erf(a_r*p1))
A1=0.5*(erf(a_r*p1)+erf(a_r*p2))
A2=0.5*(erf(a_r*p3)-erf(a_r*p2))
```

Se utilizó este programa para aproximar las áreas bajo la curva en cada región.



Ahora que sabemos qué proporción de partículas está en cada región. Podemos promediarlas para ver cual es la posición media después de encender el potencial.

3

$$\bar{x} = \sum A_{pozo_n} \cdot x_{pozo_n}$$

$$\text{Pos_m} = A0*L0 + A1*L1 + A2*L2$$

Conociendo que la posición media en t=0 es cero. Entonces se conoce el cambio de posición en 5 segundos. Por lo que se puede calcular la velocidad media.

$$\overline{v} = \frac{\Delta \bar{x}}{\Delta t}$$

```
print(" A0: {:.3f}\n".format(A0*100), "A1: {:.3f}\n".format(A1*100), "A2: {:.3f}\n".format(A2*100))
print("Escape: ",(1-(A0+A1+A2)))
print("Posicion media: {:.3f}".format(Pos_m))
print("Velocidad media: {:.3f}".format(Pos_m/t))
```

A0: 2.275%
A1: 81.859%
A2: 15.862%

Escape: 3.195789340493249e-05
Posicion media: 4.076
Velocidad media: 0.815

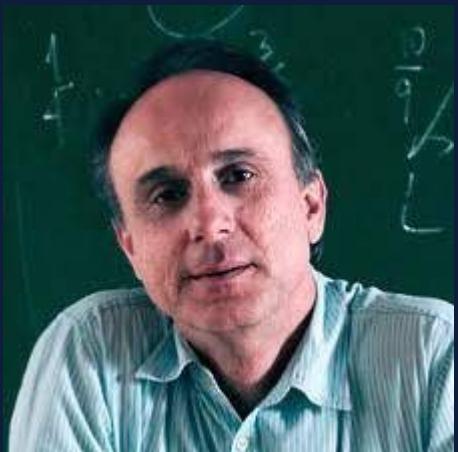
Estos son los resultados la aproximación numérica. Donde el factor de escape representa la proporción de partículas que fueron capturadas por un pozo que no se está teniendo en cuenta.

7

La Paradoja de Parrondo

¿Una combinación de estrategias para perder en un juego se puede convertir en una estrategia de ganancia?

Juan Manuel Rodriguez Parrondo



- Físico Español (1964)
- Investigador de la Teoría de la Información y Termodinámica Estocástica.
- Se ingenió la Paradoja de Parrondo en 1996

Paradoja de Parrondo

JUEGO A



JUEGO B



Pierdes

Pierdes

¿Por qué es una Paradoja?

*Paradoja Aparente

Perder + Perder $\stackrel{?}{=}$ Ganar



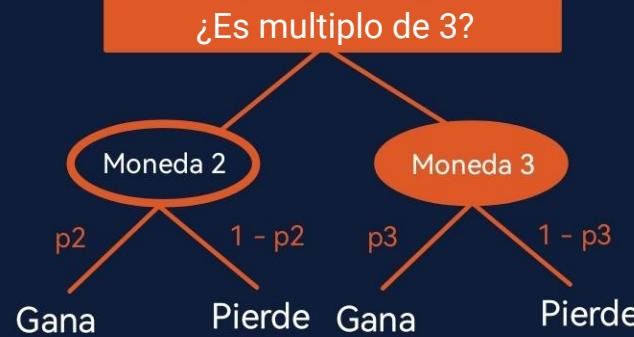
Veamos como

JUEGO A



$$p_1 = \frac{1}{2} - \varepsilon$$

JUEGO B



$$p_2 = \frac{3}{2} - \varepsilon$$

$$p_3 = \frac{1}{10} - \varepsilon$$

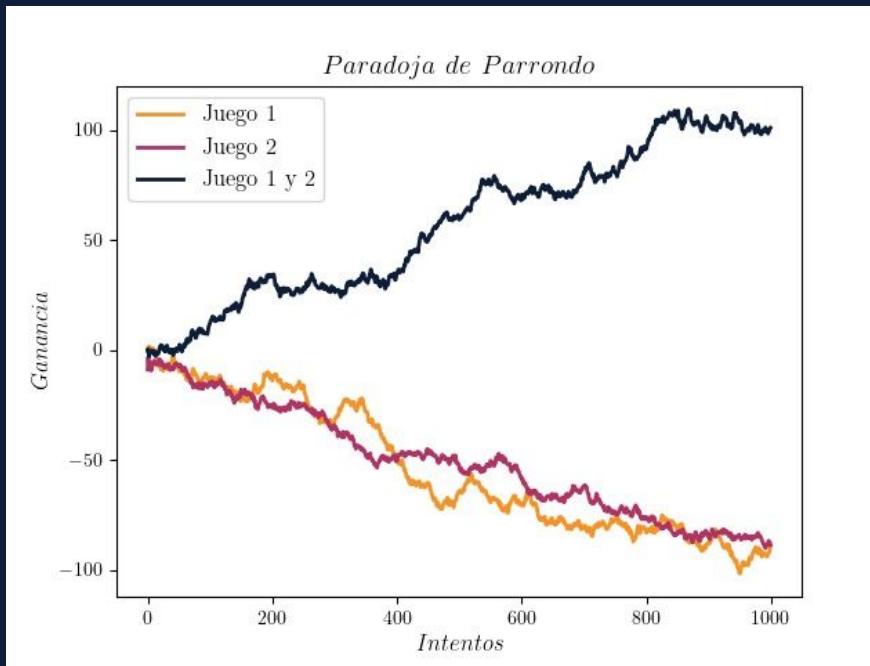
```
# JUEGO 1 SOLO
l = random.random()
if l < ((1/2)- e):
    Cap_init1 = Cap_init1 + 1
else:
    Cap_init1 = Cap_init1 - 1

Cap1 += [Cap_init1]
```

```
# JUEGO 2 SOLO
if (Cap_init2 % 3) == 0:
    l = random.random()
    if l < ((1/10)- e):
        Cap_init2 = Cap_init2 + 1
    else:
        Cap_init2 = Cap_init2 - 1
else:
    l = random.random()
    if l < ((3/4)- e):
        Cap_init2 = Cap_init2 + 1
    else:
        Cap_init2 = Cap_init2 - 1

Cap2 += [Cap_init2]
```

Ahora si juegas 2 veces el juego A y luego 2 veces el juego B, y así sucesivamente....



Aplicaciones

Finanzas

Ganancias a largo plazo de inversiones

Biología

Supervivencia multicelular

Apuestas

Dividir las apuestas entre varios juegos puede generar ganancias a largo plazo

Ecología

Alternancia entre comportamientos nómadas y coloniales

8

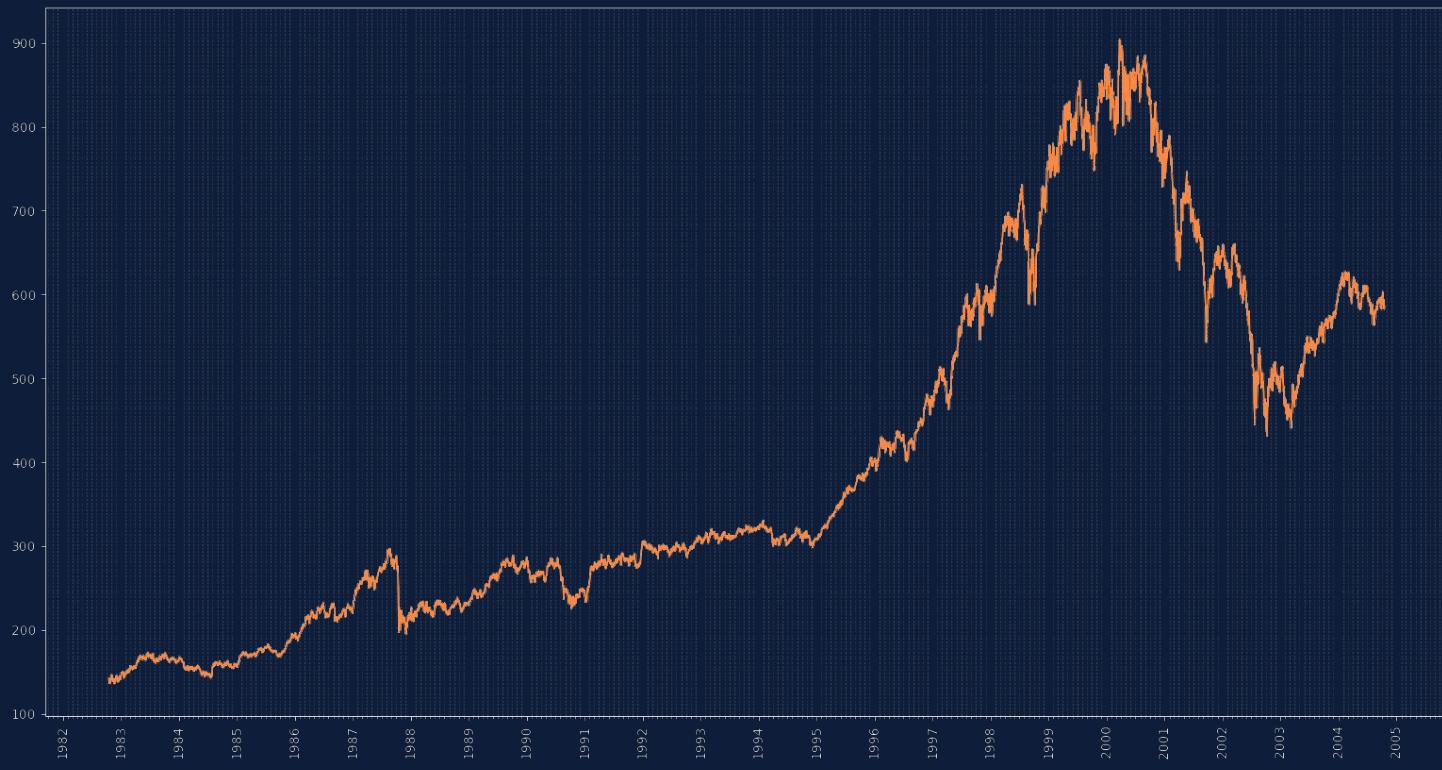
Mercado de Valores

Que podemos decir de la estadística de los precios del mercado
a lo largo de los años



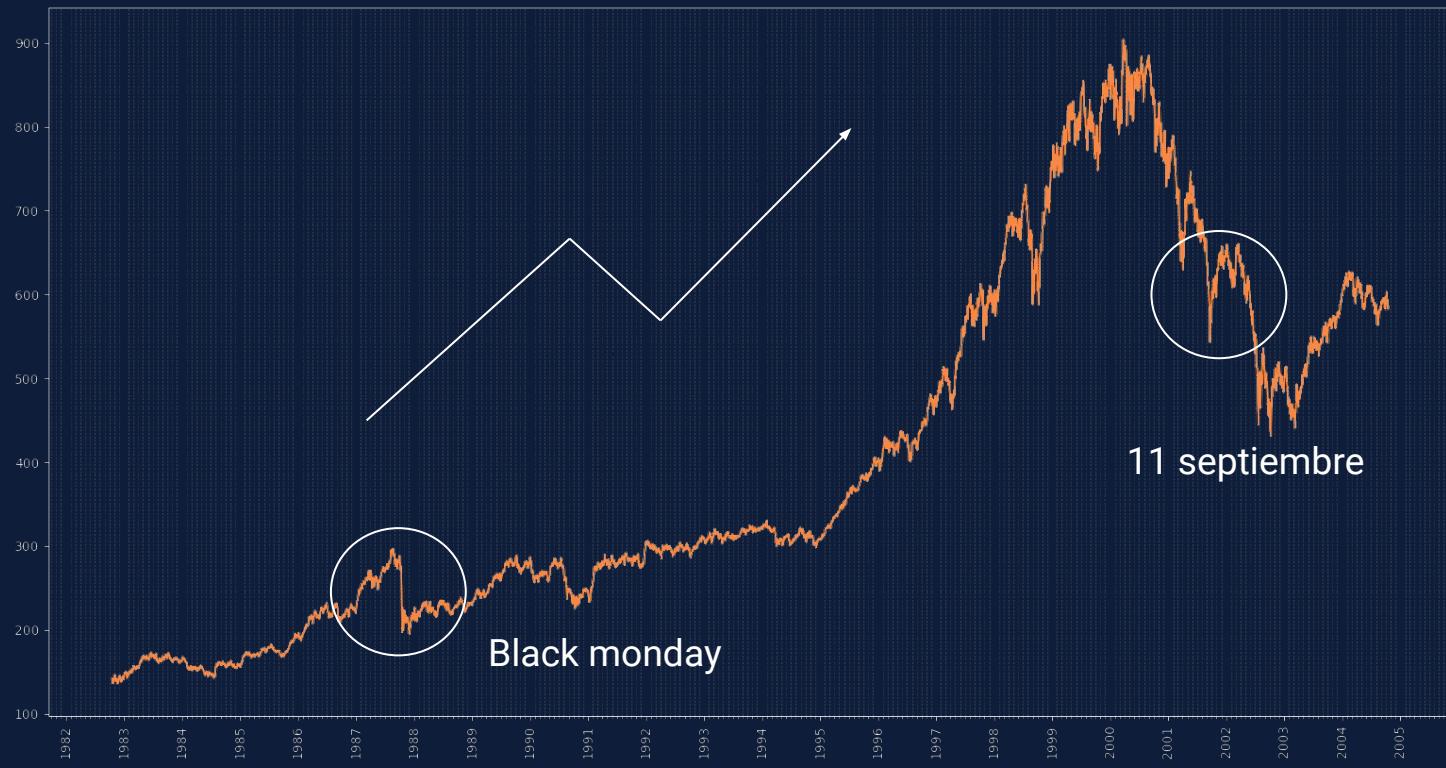


Precio de las acciones

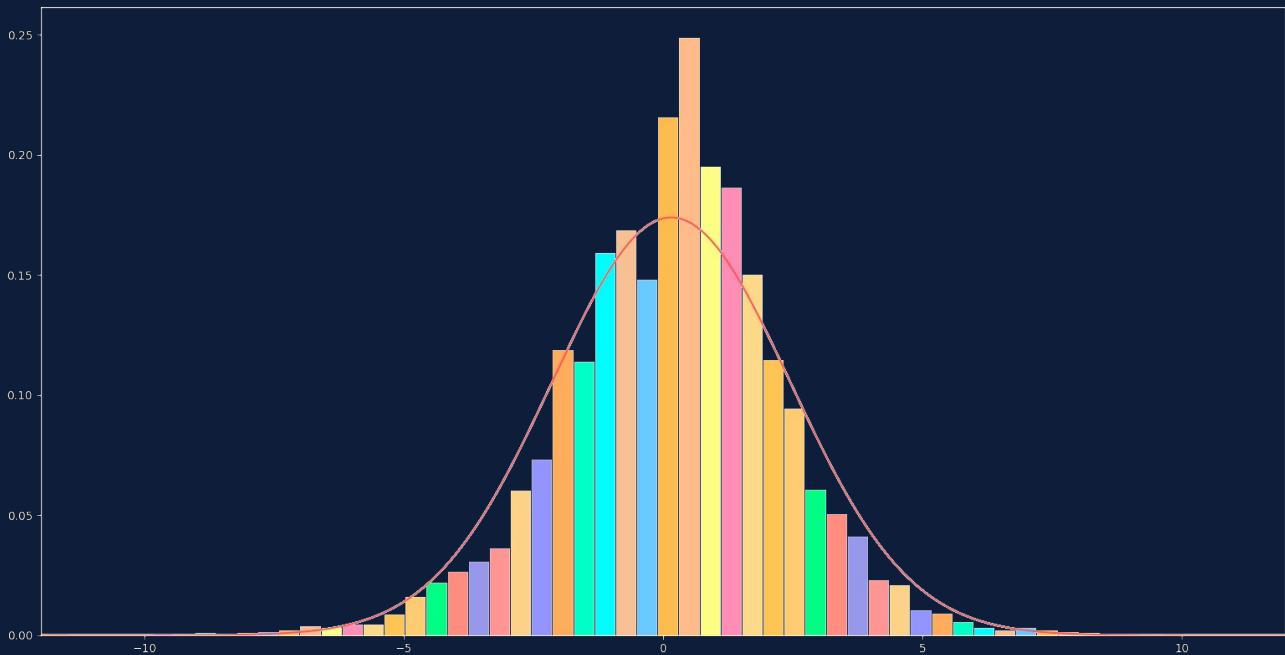




Tendencias de las acciones



Ganancia porcentual semanal



Valor medio semanal

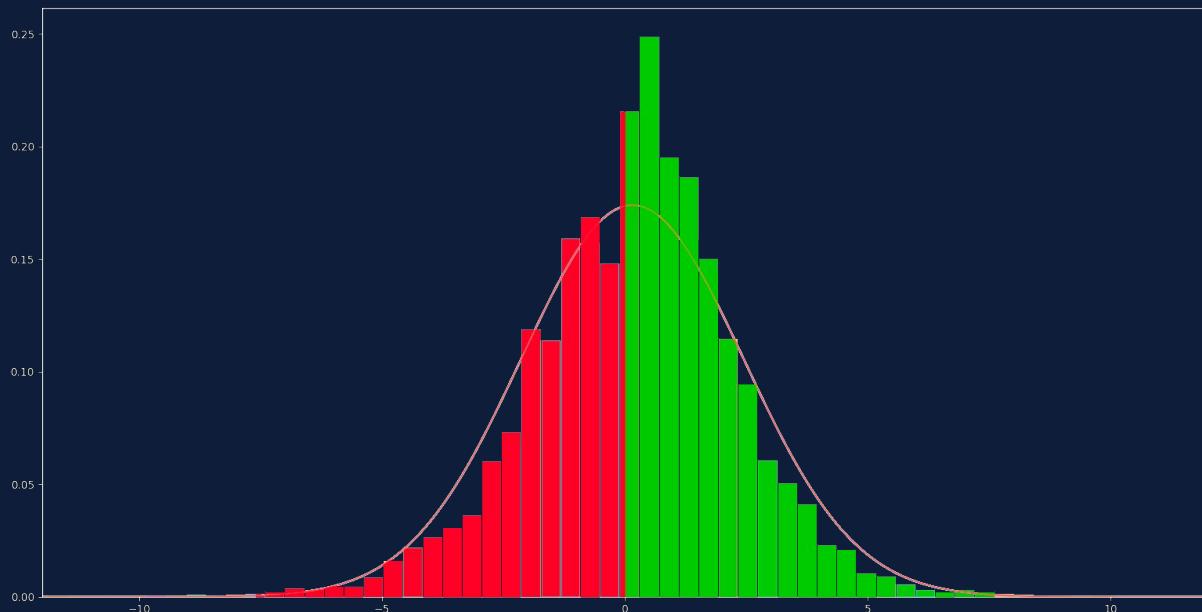
$$\bar{x} = 0.156481$$

Y una volatilidad

$$\sigma_x = 2.290774$$

Ganancia porcentual semanal

¿Cuantos datos corresponden a una ganancia semanal?



¿Cuantos datos son mayores que 0?

3072

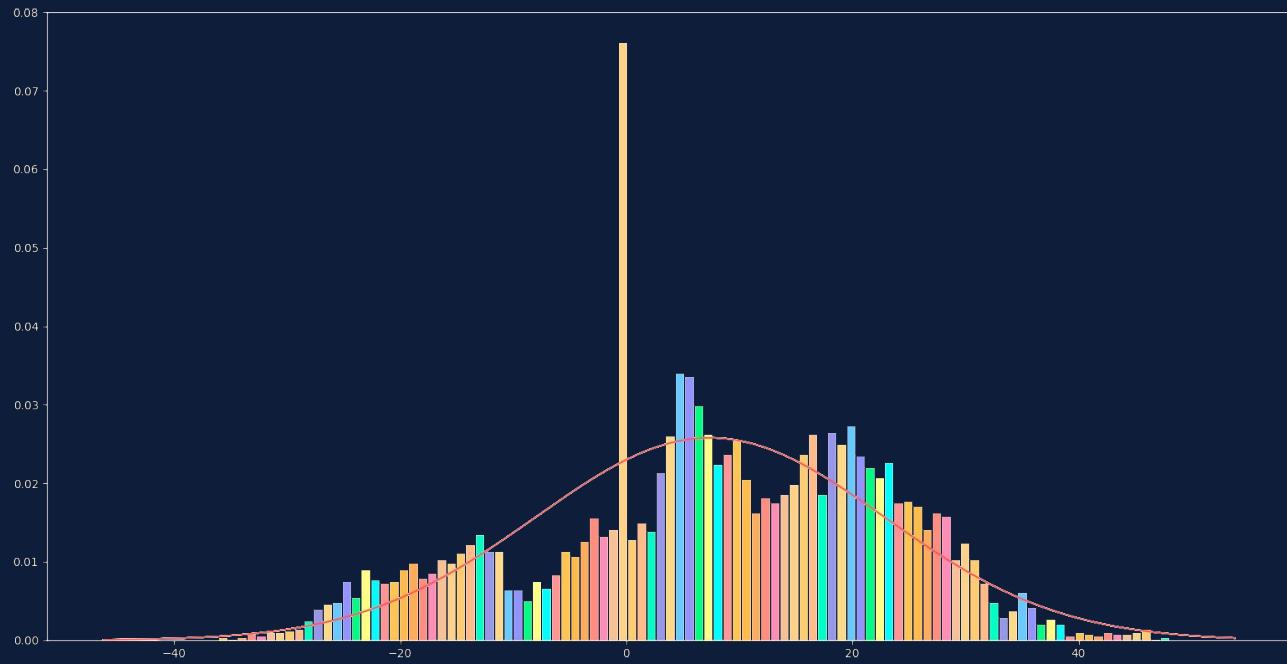
¿Y los datos totales?

5545

Ganancia del 55 %



Ganancia porcentual anual



Valor medio anual

$$\bar{x} = 7.3950$$

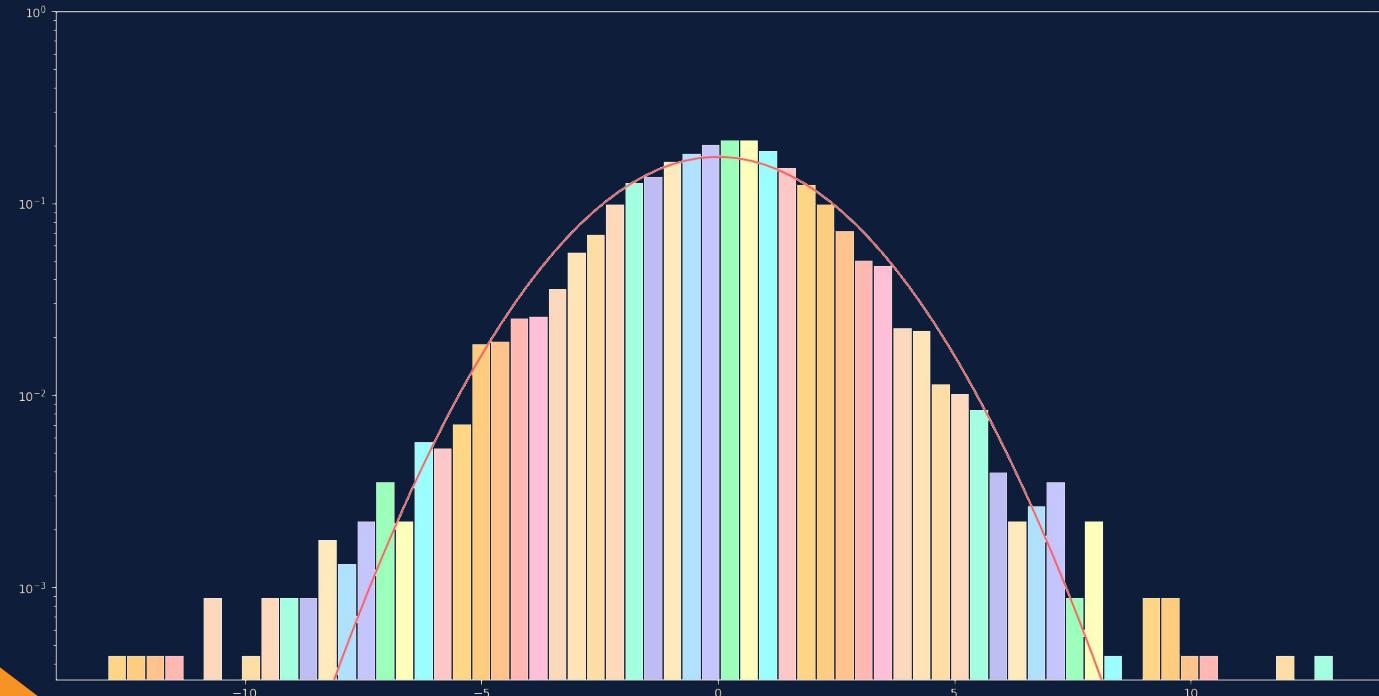
Y una volatilidad

$$\sigma_x = 15.4489$$

Ganancia del 72 %

► Desviación semanal

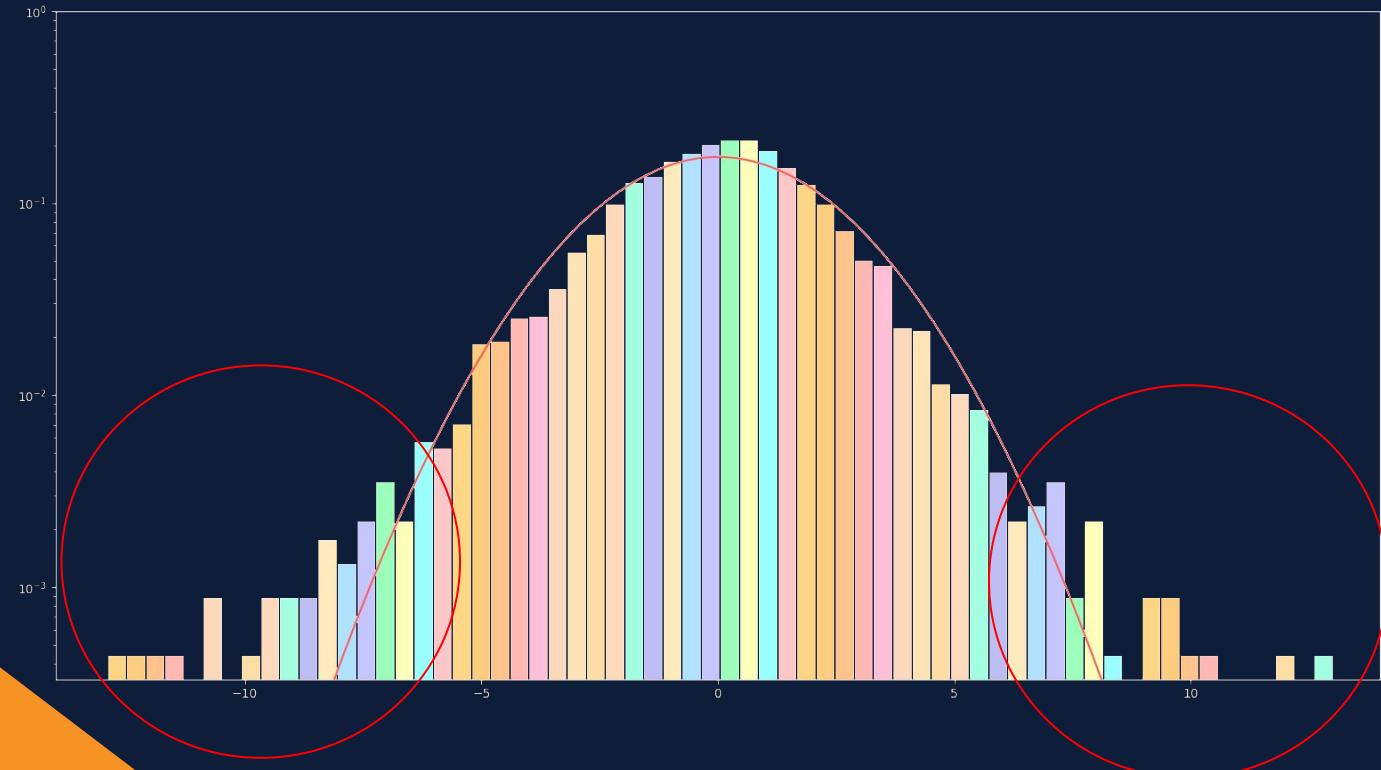
¿Como podemos analizar una desviación semanal?





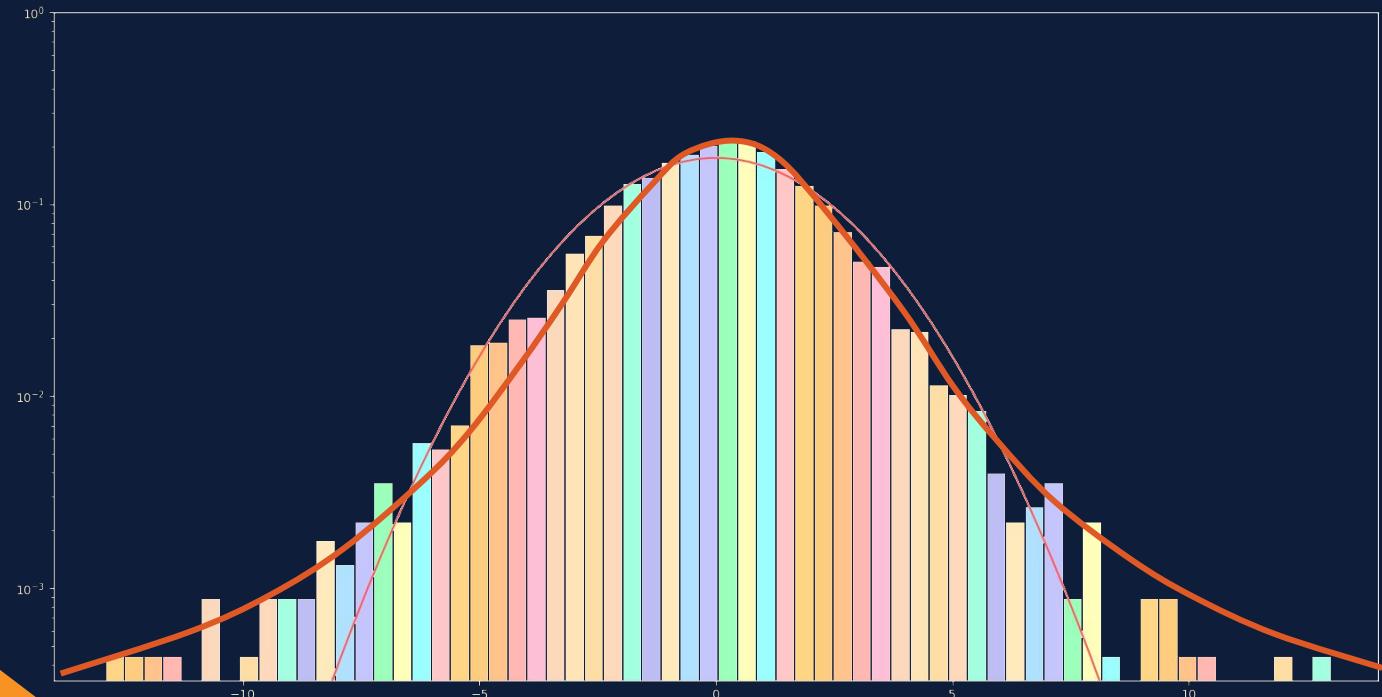
Desviación semanal

Aparentemente parece que la distribución tenga unas “colas”



► Desviación semanal

Observamos que las **distribución** se aproxima mejor a nuestros datos



Levy Flight Distribution

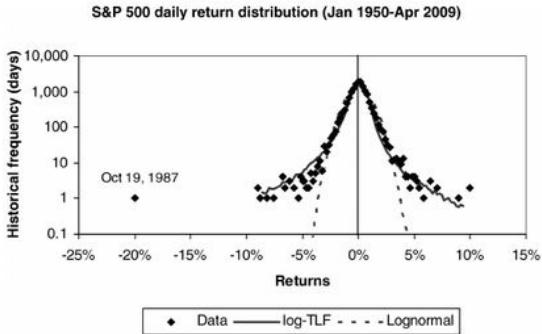
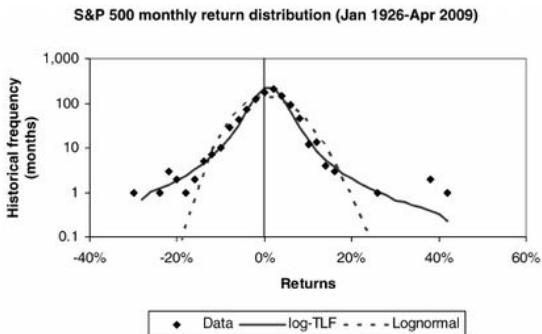


Figure 2: The historical distributions of S&P 500 daily returns fitted by the log-TLF and lognormal models



Distribución de probabilidad

$$P(x) = 0, \quad x < -l, \quad x > l$$

$$P(x) = x^{-a}, \quad -l \leq x \leq l$$

El escalamiento en forma de ley de potencias de las longitudes de pasos, da a los vuelos de Lévy una propiedad de escala invariante, es decir, la propiedad de un fractal.

Levy Flight Distribution

Este método de simulación proviene fuertemente de las matemáticas relacionadas con la teoría del caos y es útil en la medida y las simulaciones estocásticas para los fenómenos naturales al azar o pseudoaleatorios.

Análisis de datos de terremotos

Matemáticas financieras

Análisis de señales

Criptografía

Aplicaciones en astronomía, la biología, y la física.

Matematica Financiera



RIESGO DE BAJA DE LA CARTERA

A través de las distribuciones de lévy, podemos estimar varios factores financieros.

Riesgo Moderado
60% / 40%

Bajo riesgo

40% / 60%

1

2

3

Alto riesgo
80% / 20%

40% / 60%

Hace referencia a un portafolio de 40 % acciones y 60 % bonos de emisión de deuda

Tomaremos tres portafolios con distintos porcentajes para simular varios patrones

Levy Flight Distribution

Riesgo en cartera

Observemos las diferencias entre la estimación del factor de riesgo(CVaR), para las dos distintas distribuciones

Puede sesgar el proceso de presupuestación de riesgos

PROYECCIÓN CRECIMIENTO FINANCIERO

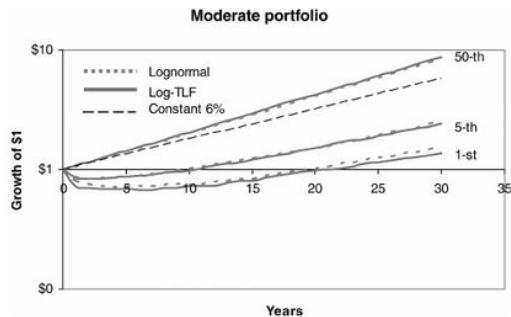


Figure 6: Wealth accumulation for the moderate portfolio with lognormal and log-TLF distributions

Table 4: CVaR estimates for the three portfolios

Portfolios	Mean (%)	SD (%)	CVaR (log-TLF) (%)	CVaR (lognormal) (%)	CVaR diff. (%)
40/60 (conservative)	6.8	10.4	15.3	11.8	3.5
60/40 (moderate)	8.4	14.9	21.7	17.2	4.5
80/20 (aggressive)	10.0	19.5	28.7	23.1	5.6

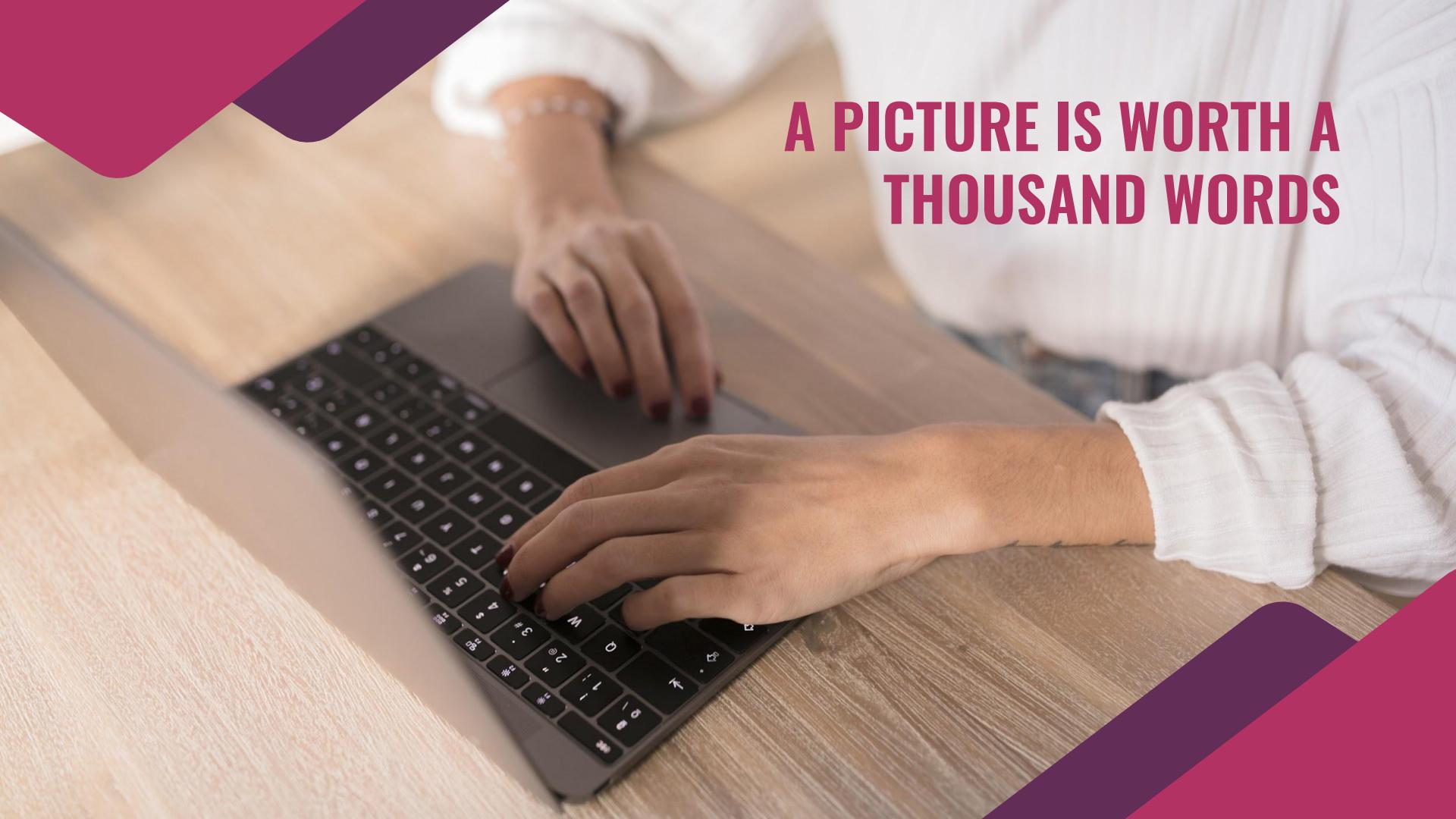
SD, standard deviation; CVaR, conditional value-at-risk

Observemos que las diferencias son notables hasta el percentil 1%, esto es evidente debido a las colas de la distribución de Levy, lo que implica más riesgo

Puede subestimar las pérdidas anuales de los portafolios

Gracias



A photograph showing a person's hands typing on a dark laptop keyboard. The person is wearing a white long-sleeved shirt and blue jeans. The background is a light-colored wooden surface. The image is framed by a pink and purple diagonal border.

A PICTURE IS WORTH A
THOUSAND WORDS

JOB POSITION 1

2006-2010
COMPANY NAME HERE



Job / position title here

- List your responsibilities for this job
- Adapt this to your needs
- Try to keep it short
- Get straight to the point
- Don't omit important information

WHAT SETS ME APART



MERCURY

Mercury is the closest planet to the Sun



JUPITER

Jupiter is the biggest planet of them all

EDUCATION

Venus has a
beautiful name, but
it's terribly hot

Mercury is the
closest planet to
the Sun

1

2

3

4

Despite being red,
Mars is actually a
cold place

Jupiter is the
biggest planet in
the Solar System

INSTITUTION 1

2000-2006
INSTITUTION NAME HERE



Principal subjects / occupational skills covered:

- List the subjects here
- Sort them by relevance
- Adapt this to your needs
- Try to keep it short

My Work

You can enter a subtitle
here if you need it



**“This is a quote, words full of wisdom
that someone important said and can
make the reader get inspired.”**

—SOMEONE FAMOUS

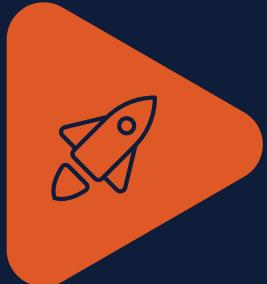


THIS IS A TABLE

		2020	2021
1	Mercury	0.9	3.5
2	Neptune	3.7	0.7
3	Mars	4.5	2.5

COMMUNICATION SKILLS

COMMUNICATION SKILLS



Other language(s)

Language 1 ●●●●●

Language 2 ●○●●●●

Language 3 ○○○●●●

Mother tongue(s)

- Language 1

- Language 2

Awesome words

¿Qué tan probable es encontrar más moléculas de un gas a un lado que al otro de un salón?



MERCURY

Mercury is the closest planet to the Sun



SATURN

Saturn is the ringed one. It's a gas giant



VENUS

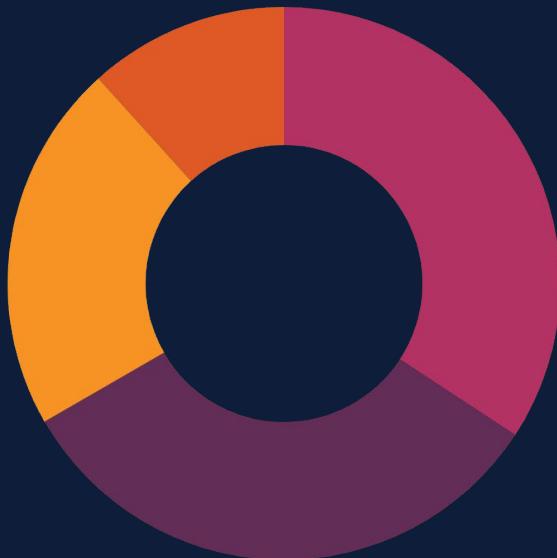
Venus is the second planet from the Sun



MARS

Despite being red, Mars is a cold place

THIS IS A GRAPH



To modify this graph, click on it,
follow the link, change the data
and paste the new graph here

► JUPITER

► MERCURY

► SATURN

► MARS

VOLUNTEER WORK

2010

Jupiter is the
biggest planet



2019

Mercury is the
smallest planet

PERCENTAGES



Mercury is the closest planet to the Sun



Jupiter is the biggest planet of them all



Venus is the second planet from the Sun

539

Big numbers catch your
audience's attention

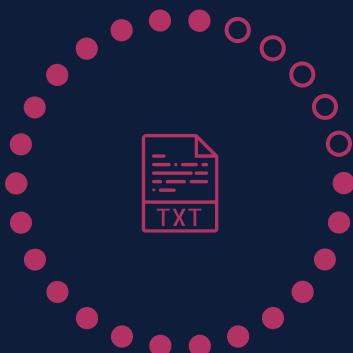
CONTENTS OF THIS TEMPLATE

Here's what you'll find in this **Slidesgo** template:

1. A slide structure based on a CV, which you can easily adapt to your needs. For more info on how to edit the template, please visit **Slidesgo School** or read our **FAQs**.
2. An assortment of icons that are suitable for use in the presentation can be found in the **alternative icons** slide.
3. A **thanks** slide, which you must keep so that proper credits for our design are given.
4. A **resources** slide, where you'll find links to all the elements used in the template.
5. **Instructions for use**.
6. Final slides with:
 - The **fonts and colors** used in the template.
 - A selection of **illustrations**. You can also customize and animate them as you wish with the online editor. Visit **Stories by Freepik** to find more.
 - More **infographic resources**, whose size and color can be edited.
 - Sets of **customizable icons** of the following themes: general, business, avatar, creative process, education, help & support, medical, nature, performing arts, SEO & marketing, and teamwork.

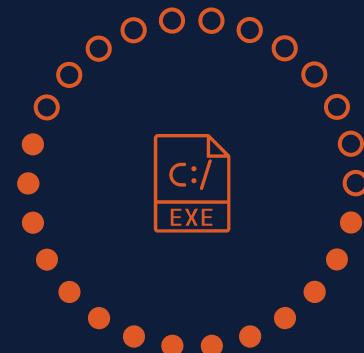
You can delete this slide when you're done editing the presentation.

COMPUTER SKILLS



JUPITER

Jupiter is the biggest planet of them all



MERCURY

Mercury is the closest planet to the Sun



VENUS

Venus is the second planet from the Sun

VOLUNTEER WORK

Inicio
 $x = 0$

MERCURY

Mercury is the closest planet to the Sun



VENUS

Venus is the second planet from the Sun



MARS

Despite being red, Mars is a cold place



SATURN

Saturn is a gas giant and has several rings



MY HOBBIES



MERCURY

Mercury is the closest planet to the Sun



VENUS

Venus is the second planet from the Sun



NEPTUNE

It's the farthest planet from the Sun



MARS

Despite being red, Mars is a cold place



SATURN

Saturn is a gas giant and has several rings

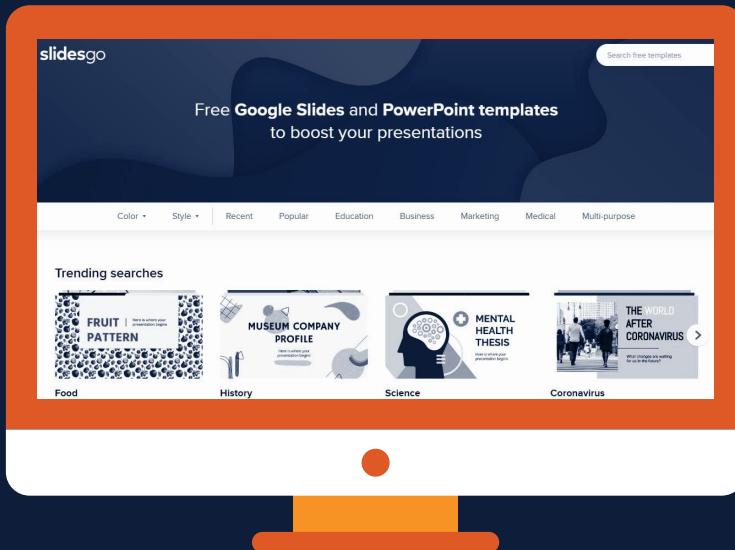


JUPITER

Jupiter is the biggest planet of them all

MEDIA

You can replace the image on the screen with your own work. Just delete this one, add yours and center it properly



CONTACT



ADDRESS

Your address here



PHONE

001 664 123 4567



EMAIL

Email address here



CELL PHONE

001 664 123 4567

THANKS!

Do you have any questions?

addyouremail@freepik.com
+91 620 421 838 yourcompany.com



CREDITS: This presentation template was created by [Slidesgo](#), including icons by [Flaticon](#), and infographics & images by [Freepik](#)

Please keep this slide for attribution

ALTERNATIVE ICONS



RESOURCES

VECTORS:

- Business card template abstract colorful
- Five options comparison slide template
- Construction landing page template

PHOTOS:

- Girl with laptop
- Girl with laptop

ICONS:

- Company 9
- Business plan 1
- Digital business 6
- File type collection



Instructions for use (free users)

- Para entender el problema, imaginemos que podemos extraer n moléculas de la caja una a una (da igual si las sacamos todas) obviamente sin sustitución, queremos saber la probabilidad de que exactamente $k \leq n$ moléculas sean de la zona izquierda, además supongamos que podemos enumerar las N celdas del 1 al N y las celdas en la zona izquierda del 1 a i .
- El espacio muestral va estar dado por N -tuplas que pertenecen a \mathbb{R}^n

For more information about editing slides, please read our FAQs or visit Slidesgo School:

<https://slidesgo.com/faqs> and <https://slidesgo.com/slidesgo-school>

Instructions for use (premium users)

In order to use this template, you must be a Premium user on [Slidesgo](#).

You are allowed to:

- Modify this template.
- Use it for both personal and commercial purposes.
- Hide or delete the “Thanks” slide and the mention to Slidesgo in the credits.
- Share this template in an editable format with people who are not part of your team.

You are not allowed to:

- Sublicense, sell or rent this Slidesgo Template (or a modified version of this Slidesgo Template).
- Distribute this Slidesgo Template (or a modified version of this Slidesgo Template) or include it in a database or in any other product or service that offers downloadable images, icons or presentations that may be subject to distribution or resale.
- Use any of the elements that are part of this Slidesgo Template in an isolated and separated way from this Template.
- Register any of the elements that are part of this template as a trademark or logo, or register it as a work in an intellectual property registry or similar.

For more information about editing slides, please read our FAQs or visit Slidesgo School:

<https://slidesgo.com/faqs> and <https://slidesgo.com/slidesgo-school>

Fonts & colors used

This presentation has been made using the following fonts:

Oswald

(<https://fonts.google.com/specimen/Oswald>)

Roboto

(<https://fonts.google.com/specimen/Roboto>)

#0e1d39ff

#622d57ff

#b23363ff

#de5926ff

#f79324ff

Stories by Freepik

Create your Story with our illustrated concepts. Choose the style you like the most, edit its colors, pick the background and layers you want to show and bring them to life with the animator panel! It will boost your presentation. Check out [How it Works](#).



Pana



Amico



Bro



Rafiki



Cuate

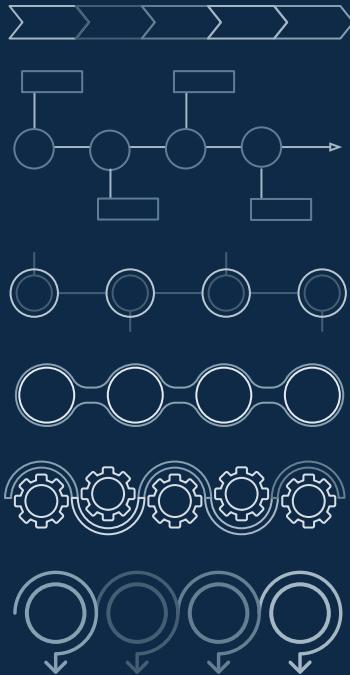
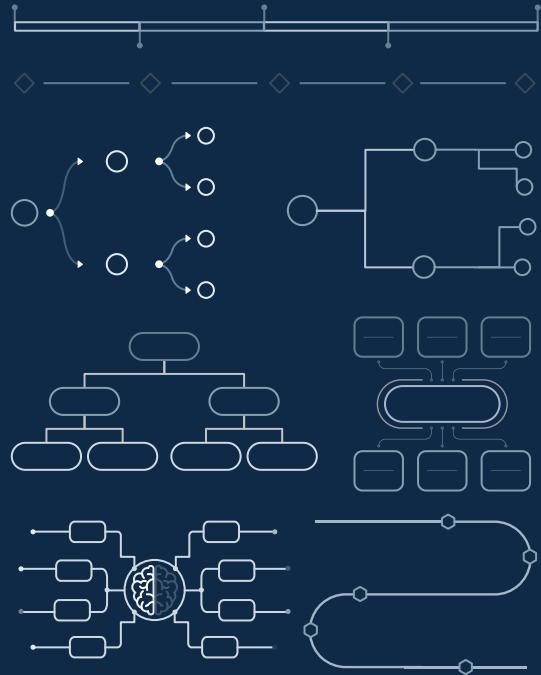
Use our editable graphic resources...

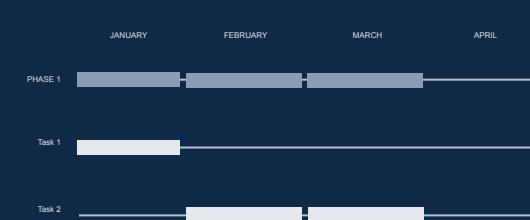
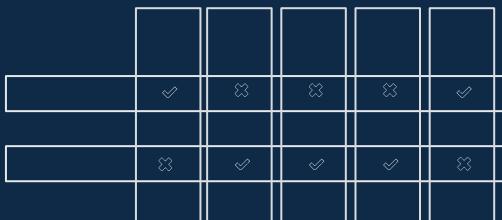
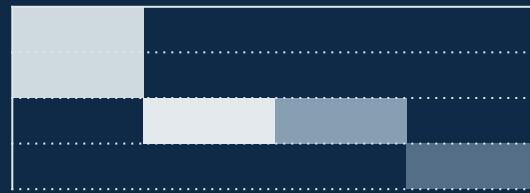
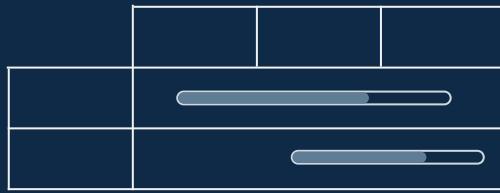
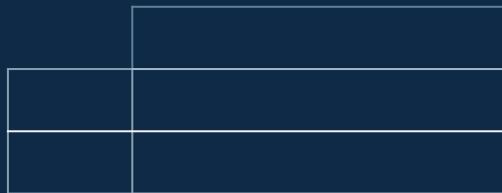
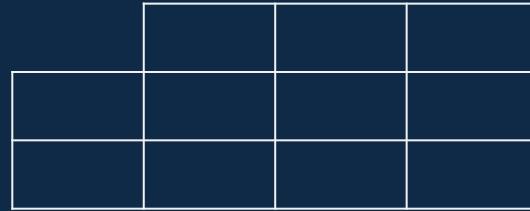
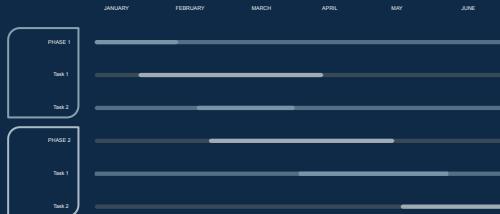
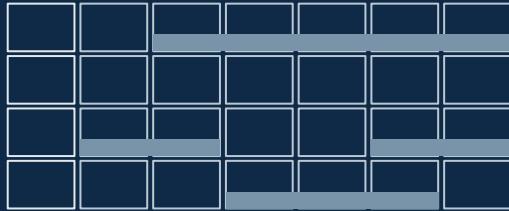
You can easily resize these resources without losing quality. To change the color, just ungroup the resource and click on the object you want to change. Then, click on the paint bucket and select the color you want.

Group the resource again when you're done. You can also look for more infographics on Slidesgo.

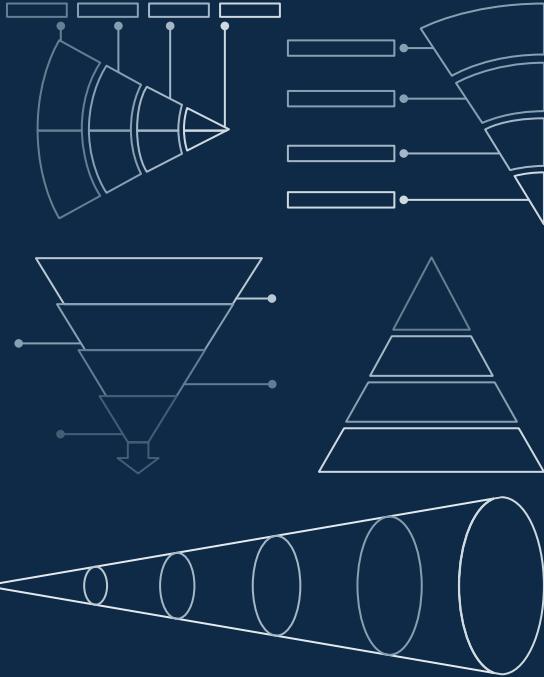
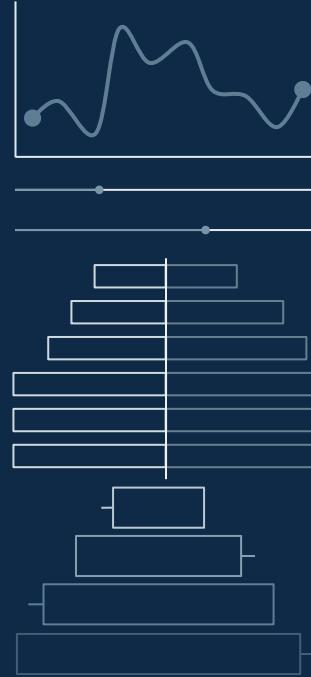
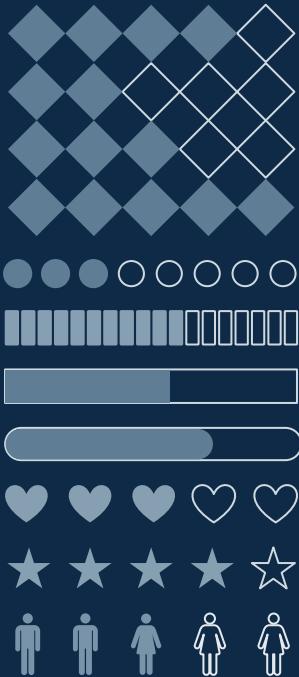
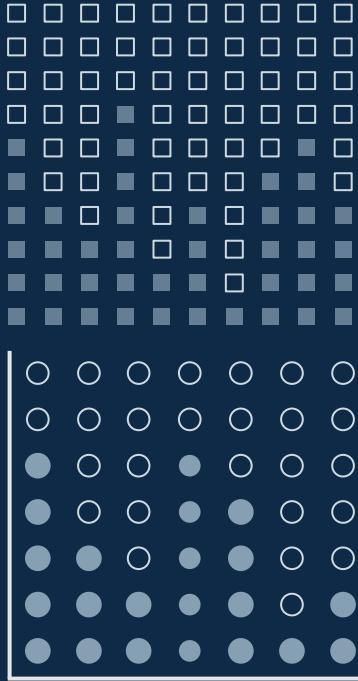












...and our sets of editable icons

You can resize these icons without losing quality.

You can change the stroke and fill color; just select the icon and click on the paint bucket/pen.

In Google Slides, you can also use Flaticon's extension, allowing you to customize and add even more icons.



Educational Icons



Medical Icons



Business Icons



Teamwork Icons



Help & Support Icons



Avatar Icons



Creative Process Icons



Performing Arts Icons



Nature Icons



SEO & Marketing Icons



