Clase 1

miércoles, 18 de octubre de 2023 11:32

1. INTRODUCCIÓN HISTÓRICA

Definimos un sistema de muchas partículas con el nº de Avogadro $\sim 10^{23}$.
En mecánica estadística vamos a intentar conectar partículas (microscópico) con cantidades como densidades, presiones, temperaturas... (macroscópico).

Muchas veces vamos a perder información, puesto que podremos dar cantidades medias pero no saber cuántas partículas tienen según qué características.

Vamos a hablar de fenómenos emergentes y complejidad: fenómenos a nivel macroscópico que no podemos entender con interacciones microscópicas.

Se desarrolla mucho antes la teoría macroscópica (termodinámica) que la microscópica y la mecánica estadística.

CONCEPTOS BÁSICOS

- Microscópico: 1 - 10 Å átomos
- Macroscópico: $\gtrsim 10^{23} \Rightarrow$ Avogadro

} convención

$\Downarrow$

TERMODINÁMICA

- Equilibrio (termodinámico o térmico): sistema en el cual las propiedades macroscópicas no cambian, pero las microscópicas sí pueden variar

- Teoría Cinética: nombre con el que se empezó a conocer la mecánica estadística en sus orígenes (finales sXIX). Desarrollada por Clausius, Maxwell y Boltzman. En el sXX pasamos a llamarlo mecánica estadística, desarrollada tanto por Boltzman como por Gibbs y Einstein.
  - ↳ Teoría "a primer orden", lo cual significa que se toman los primeros términos del desarrollo de Taylor (existen extensiones más complejas). Estudiada por Chapman-Enskog (1916-1917), teoría inacabada.

2. NOCIONES DE PROBABILIDAD

2. NOCIONES DE PROBABILIDAD

2.1. Probabilidad discreta

$p_i = \frac{n_i}{N}$ $\quad i = 1, 2, 3 \ldots \Rightarrow$ Probabilidad del suceso i (donde n_i es el número de sucesos favorables)

$\sum_i p_i = \sum_i \frac{n_i}{N} = \frac{1}{N} \sum_i n_i = \frac{N}{N} = 1 \Rightarrow$ El número total de casos posibles tiene que ser 1 (tiene que estar normalizados)

Distinguimos entre probabilidad teórica vs "empírica" (si tiramos 600 veces un dado, no sacaremos cada número 100 veces exactamente). Muchas veces, ante la falta de la probabilidad teórica hemos de gastar probabilidad empírica derivada de lo experimental. Es aquí donde entra la teoría de errores.

$\hookrightarrow$ LEY DE LOS GRANDES NÚMEROS

Límite $N \to \infty \Rightarrow$ Empírica tiende a teórica (error $\to 0$)

- **Definición:** sucesos independientes

Sean A y B independientes, podemos aplicar ciertas reglas para simplificar el cálculo:

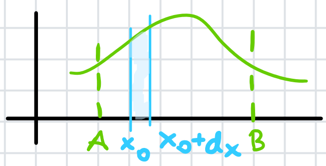
$$P(A \vee B) = P(A) + P(B)$$
$$P(A \wedge B) = P(A) \cdot P(B)$$

Un suceso dependiente sería, por ejemplo, el colapso de la función de onda en cuántica o sacar de una baraja un 7 y sin devolverla sacar dos 7s seguidos.

2.2. Probabilidad continua

Introducimos una cierta función $p(x)$ que represente la probabilidad de obtener un valor x. Ha de estar normalizada.

$x \in [A, B]$; $\int_A^B \underbrace{p(x)\,dx}_{} = 1$



Densidad de probabilidad: no referida a un punto (0, conjunto de medida nula), sino probabilidad de que x esté entre x_0 y $x_0 + dx$

Problema a nivel cálculos: si hacemos cambio de variable, la probabilidad varía ligada a la variación de dx.

Ejemplo

Ejemplo

$$\int p(x)\,dx = \int x^2\,dx \xrightarrow[CV]{} x^2 = u \quad p(u) \neq u$$

$$\Rightarrow dx = \frac{du}{2x} = \frac{du}{2\sqrt{u}} \xrightarrow[CV]{} \int p(x)\,dx = \int u \frac{du}{2\sqrt{u}} \rightarrow p(u) = \frac{u}{2\sqrt{u}}$$

2.3. Combinatoria

$\{1,3,2\} \neq \{1,2,3\}$

• **Definición:** permutaciones (n)

Llamamos permutaciones a las formas de ORDENAR (orden importa!!) n objetos en n posiciones. Las permutaciones de n objetos se definen como:

$$P_n = n!$$

• **Definición:** variaciones (n)

Llamamos variaciones a las formas de ORDENAR n objetos tomados de r en r (en grupos). Las denominamos variaciones de n en orden r:

$$V_{n,r} = \frac{n!}{(n-r)!} \underset{n=r}{\Longrightarrow} V_{n,n} = P_n$$

• **Definición:** combinaciones de n objetos tomados de r en r

orden ya no importa

$$C_{n,r} = \frac{n!}{(n-r)!\,r!} = \binom{n}{r} \Rightarrow \text{definición de combinatoria}$$

Vamos a distinguir entre partículas idénticas (no las podemos distinguir, no importa el orden, usamos combinaciones) y partículas no idénticas (son distintas y por ello sí importa el orden, usamos permutaciones).

En problemas reales, puesto que los átomos son indistinguibles, vamos a usar combinaciones.

• **Definición:** variaciones con repetición

Las variaciones con repetición son iguales que las variaciones, pero se permite repetir elementos. Para n elementos en r grupos:

$$V_{n,r} = n^r$$

3. NOCIONES DE ESTADÍSTICA

• **Definición:** media

notación análoga a cuántica

N_i: número de veces que ocurre x_i (frecuencia)

$$\bar{x} = \langle x \rangle = \sum N_i x_i \ldots$$

• Definición: media

$$\bar{x} \equiv \langle x \rangle = \frac{\sum_i N_i x_i}{N} \Rightarrow$$

N_i: número de veces que ocurre x_i (frecuencia)
x_i: sucesos posibles (valor de mi función)
N: número total de objetos o eventos

Si conozco probabilidades y estoy en grandes números:

$$\langle x \rangle = \sum_i p_i \cdot x_i \Rightarrow \frac{N_i}{N} \rightarrow p_i \text{ si } N \rightarrow \infty$$

En el caso continuo, hemos de integrar la probabilidad:

$$\text{cuántica} \Rightarrow \langle x \rangle = \int_c p(x)\, x\, dx \Rightarrow \text{VALOR ESPERADO}$$

Si los sucesos son independientes, se cumple que (sea continuo o discreto):

$$\left.\begin{aligned} \langle f(x) + g(y) \rangle &= \langle f(x) \rangle + \langle g(y) \rangle \\ \langle f(x) \cdot g(y) \rangle &= \langle f(x) \rangle \cdot \langle g(y) \rangle \end{aligned}\right\} x, y \text{ independientes}$$

Clase 2 - escaneada

lunes, 23 de octubre de 2023

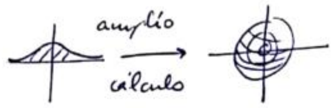
MECÁNICA ESTADÍSTICA - Clase 2 (23/10/2023)

2. REPASO DE INTEGRALES TÍPICAS

- $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2}dx = \sqrt{\pi}$ $\Rightarrow$ integral gaussiana

↳ RESOLUCIÓN

① $I = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2}dx \Rightarrow I^2 = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2}dx \int_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2}dy =$



$$= \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}}_{\text{todo } \mathbb{R}^2} \underbrace{dxdy}_{dS \text{ elemento diferencial superficie}} e^{-(x^2+y^2)} = \iint_{\mathbb{R}^2} r dr d\theta e^{-r^2} = \int_0^{2\pi}\int_0^{\infty} r dr d\theta e^{-r^2} =$$

↑ CAMBIO A POLARES

$$= 2\pi \underbrace{\int_0^{\infty} r e^{-r^2} dr}_{\text{esta integral ya nos queda inmediata}} = \pi\left[-e^{-r^2}\right]_0^{\infty} = \pi \Rightarrow I^2 = \pi \iff I = \sqrt{\pi}$$

② Paso al plano complejo.

A veces cuando una integral es difícil en $\mathbb{R}$, resulta más fácil resolverla en $\mathbb{R}^2$.

En relación con la integral gaussiana tenemos la función error:

$$\boxed{\mathrm{erf}(y) = \sqrt{\frac{2}{\sqrt{\pi}}}\int_0^y e^{-x^2}dx}$$

→ gaussiana "truncada", por simetría de la función entra el factor $\sqrt{\frac{2}{\pi}}$ en juego

- $\int_0^{\infty} e^{-x}x^n dx = n!$

↳ RESOLUCIÓN

$$\int_0^{\infty} e^{-x}x^n dx = n\int_0^{\infty} e^{-x}x^{n-1}dx = \dots = n!$$

↑ PARTES: en ambos límites uno de los dos términos se anula

Permite ampliar la definición de factorial con la función gamma a los reales:

$$\boxed{\Gamma(\alpha) = \int_0^{\infty} e^{-x} x^{\alpha-1}dx}$$

→ definición con un -1, convención

Cumple las siguientes propiedades:

$\Gamma(\alpha+1) = \alpha\Gamma(\alpha)$; $\Gamma(n+1) = n!$; $\alpha \in \mathbb{R}$, $n \in \mathbb{N}$

Ejemplo

$$\Gamma(1/2) = \sqrt{\pi} \rightarrow \Gamma(1/2) = \int_0^{\infty} e^{-x}\cdot x^{-1/2}dx = \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2}dx}_{\text{nos quedará un factor multiplicando la integral gaussiana (ejercicio)}} = \sqrt{\pi}$$

↑ CV

-1-

Escaneado con CamScanner

- $\int_0^{\infty} e^{-\alpha x^2}dx = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$

↳ RESOLUCIÓN

$$\int_0^{\infty} e^{-\alpha x^2}dx = \int_0^{+\infty} e^{-u^2}\cdot\frac{du}{\sqrt{\alpha}} = \sqrt{\frac{\pi}{4\alpha}} = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$$

↑ CV: $u = \sqrt{\alpha}\, x$, $du = \sqrt{\alpha}\, dx$

... ("ampliación" de la integral):

- $\int_0^\infty e^{-\alpha x^2} dx = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$

↳ RESOLUCIÓN

$$\int_0^\infty e^{-\alpha x^2} dx \underset{\substack{\uparrow \\ CV:\ u=\sqrt{\alpha}\,x \\ du = \sqrt{\alpha}\,dx}}{=} \int_0^{+\infty} e^{-u^2} \cdot \frac{du}{\sqrt{\alpha}} = \sqrt{\frac{\pi}{4\alpha}} = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$$

Definimos la siguiente integral ("ampliación" de la integral):

$$\boxed{I_\alpha(n) = \int_0^\infty e^{-\alpha x^2} x^n dx} \longrightarrow I_\alpha(0) = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$$

$$\longrightarrow I_\alpha(1) = \frac{1}{2\alpha} \quad \Rightarrow \quad \text{¿ RELACIÓN RECURRENCIA?} \Rightarrow$$

$\vdots$

⇒ TRUCO! Derivar dentro de la integral respecto al parámetro. $-x^2 e^{-\alpha x^2} \cdot x^n = -e^{-\alpha x^2} x^{n+2} \Rightarrow \boxed{I_\alpha(n) = -\frac{\partial}{\partial\alpha} I_\alpha(n-2)}$

Esta relación nos permite dar todos los valores conocidos $I_\alpha(0)$, $I_\alpha(1)$.

3. APROXIMACIÓN DE STIRLING

Vamos a ver cómo hacer una buena aproximación de un factorial para números grandes. Lo haremos de dos formas y así incluimos un par de trucos matemáticos.

Lo primero que haremos con un número grande es tomar logaritmos para ver su orden de magnitud (a ver si se simplifica).

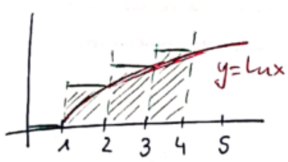
$$N! = n(n-1)(n-2)\dots 1$$

$$\ln N! \underset{\substack{\uparrow \\ \text{propiedades logaritmos} \\ \text{nos ayudan}}}{=} \ln N + \ln(n-1) + \ln(n-2) + \dots + \ln(2) + \ln(1) =$$

despreciable xq $N >> 1$

$$= \sum_{i=1}^N \ln(i) \simeq \int_1^N dx \ln x = [x \ln(x) - x]_1^N = N\ln N - N + \cancel{1}$$

$\Downarrow$



Tomamos un "histograma" con base 1 y altura $\ln(i)$ ⇒ lo que estamos haciendo no es más que una suma de áreas.

La integral de $y = \ln(x)$ nos aproximará muy bien el valor de la suma con un error muy bajo solo asociado a los primeros términos (recordamos que N es grande).

$$\boxed{\ln N! \underset{N>>1}{\simeq} N \cdot \ln N - N}$$ APROXIMACIÓN DE STIRLING

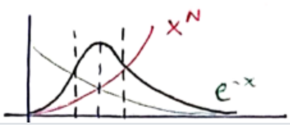
Escaneado con CamScanner

$$N! \simeq \exp(\ln N!) = \exp(N \cdot \ln N - N) = e^{N \cdot \ln N} \cdot e^{-N} \Rightarrow \boxed{N! = N^N \cdot e^{-N}}$$

Vemos que N^N crece más rápido de lo que decrece e^{-N}.

Vamos a intentar mejorar la aproximación (ya que hemos visto que en el paso a la integral se nos quedan fuera esquinitas). Para ello, escribimos el factorial con la función gamma:

$$N! = \int_0^\infty e^{-x} x^N dx \Rightarrow$$



Producto de x^N y e^{-x}

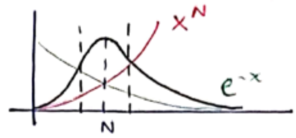
→ va más rápido que cualquier

$$N! \simeq \exp(\ln N!) = \exp(N\cdot\ln N - N) = e^{N\cdot\ln N}\cdot e^{-N} \Rightarrow \boxed{N! = N^N\cdot e^{-N}}$$

Vemos que N^N crece más rápido de lo que decrece e^{-N}.

Vamos a intentar mejorar la aproximación (ya que hemos visto que en el paso a la integral se nos quedan fuera esquinitas). Para ello, escribimos el factorial con la función gamma:

$$N! = \int_0^\infty e^{-x}x^N dx \Rightarrow$$



Producto de x^N y e^{-x}

e^{-x} → va más rápido que cualquier serie de potencias

Esta función tiene un único máximo en $x=N$.

TRUCO! Si tenemos un máximo, esto implica que la derivada se anula, $f'(x)=0$. Si la función es muy picada, nos interesa el área alrededor de este máximo (más allá la función decae mucho). Además, vamos a poder aproximar la función cerca del máximo por una parábola (2° orden del desarrollo de Taylor).

Consideramos Taylor en $x=N$ y la expansión del logaritmo:

$$\left.\begin{array}{l} x' = N+\xi \qquad \xi \ll N \\ \ln(e^{-x}x^N) = -x + N\ln x \end{array}\right\} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \ln(e^{-x'}x'^N) = -x' + N\ln x' = -(N+\xi) + N\ln \overbrace{(N+\xi)}^{N(1+\frac{\xi}{N})} =$$

$$= -(N+\xi) + N\ln N + N\underbrace{\ln\left(1+\frac{\xi}{N}\right)} = -N - \cancel{\xi} + N\ln N + N\left[\cancel{\frac{\xi}{N}} - \frac{\xi^2}{N^2\cdot 2} + \dots\right] =$$

Taylor de este término (tomamos a 2° orden):

$\ln(1+x) \simeq x - \frac{x^2}{2!} + \dots$ → si aquí mantenemos más términos, mejoramos la aproximación

$$= N\ln N - N - \frac{1}{2}\frac{\xi^2}{N} + \dots$$

Retomamos la integral que hemos escrito antes y que ahora podemos aproximar con esta expansión en serie de Taylor:

$$N! = \int_0^\infty \underbrace{e^{-x}x^N}_{e^{\ln(e^{-x}x^N)}} dx = N^N e^{-N}\cdot\int_{-N}^{+\infty} e^{-\frac{\xi^2}{2N}} d\xi = N^N e^{-N}\sqrt{2\pi N}$$

CV $x = N+\xi$ donde N fijo

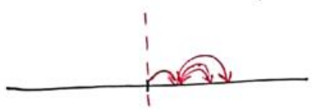
$-N \to -\infty$ porque $\xi \ll N$ y queda la integral gaussiana

$$\boxed{N! = N^N e^{-N}\sqrt{2\pi N}} \qquad \boxed{\ln N! = N\ln N - N + \underbrace{\log\sqrt{2\pi N}}_{\text{corrige parte de los trozos}}}$$

Escaneado con CamScanner

4. CAMINO ALEATORIO

(1D) Si parto de un punto y me pongo a moverme con un salto de longitud l (siendo aleatoria la dirección), ¿cuál es la probabilidad de estar en un sitio dado tras N pasos?



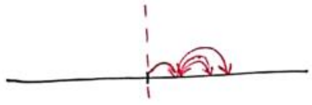
Esperaría quedar alrededor del centro teniendo en cuenta que nos movemos entre $-Nl$ y Nl.

La distribución quedaría algo similar a lo siguiente (no gaussiana):

- n_1: pasos a la derecha

4. CAMINO ALEATORIO

(1D) Si parto de un punto y me pongo a moverme con un salto de longitud l (siendo aleatoria la dirección), ¿cuál es la probabilidad de estar en un sitio dado tras N pasos?



Esperaría quedar alrededor del centro teniendo en cuenta que nos movemos entre $-Nl$ y Nl.

La distribución quedaría algo similar a lo siguiente (no gaussiana):

- n_1: pasos a la derecha
- n_2: pasos a la izquierda $\Rightarrow$
- $m = n_1 - n_2$: exceso de pasos

$\Rightarrow$ distancia recorrida $\Rightarrow$ $x = ml$

- Otra forma de escribir m, sea $N = n_1 + n_2$, es $m = 2n_1 - N$.

Vamos a decir que p es la probabilidad de dar un paso a la dcha y q la de dar pasos a la izq de forma que $q = 1 - p$.

$$\boxed{P(n_1, n_2) = p^{n_1} \cdot q^{n_2}}$$

Para ver la probabilidad total de llegar a un cierto orden hemos de tener en cuenta que se sigue cierto orden (hay muchas combinaciones). Por tanto:

$$\boxed{P(n_1) = \frac{N!}{n_1!(N-n_1)!} p^{n_1} \cdot q^{N-n_1}}$$

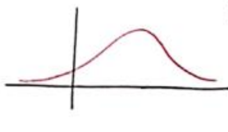
DISTRIBUCIÓN BINOMIAL (para todos sucesos binarios)

¿Esta cantidad está normalizada?

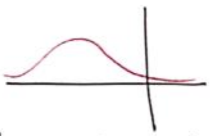
$$\sum_{n_1=0}^{N} \binom{N}{n_1} p^{n_1} q^{N-n_1} \underset{\uparrow}{=} (p+q)^N = 1 \quad \checkmark \rightarrow \text{distribución de probabilidad correcta}$$

BINOMIO DE NEWTON

Podemos tener la distribución desplazada:



$p > q$



$q > p$

Por lo general, usaremos $p = q = \frac{1}{2}$. Ahora podemos dar todos los cálculos probabilísticos que necesitemos (valores esperados):

$$\langle n_1 \rangle = \sum_i n_i P(n_i)$$

Escaneado con CamScanner

Clase 3

martes, 24 de octubre de 2023 13:05

Ayer nos quedamos viendo el valor medio de un cierto valor (pasos a la dcha):

$$\langle n_1 \rangle = \sum_{n_1=0}^{N} n_1 P(n_1) = \sum_{n_1=0}^{N} n_1 \cdot \frac{N!}{n_1!(N-n_1)!} p^{n_1} q^{N-n_1}$$

$$\langle n_1^2 \rangle = \sum_{n_1=0}^{N} n_1^2 P(n_1)$$

Vamos a ver algún truquillo matemático para hacer más fácil esta suma:

Sea $\frac{\partial p^{n_1}}{\partial p} = n_1 p^{n_1-1} \Rightarrow \boxed{p\frac{\partial p^{n_1}}{\partial p} = n_1 p^{n_1}}$ (análogo a lo que hicimos con las integrales)

$\Rightarrow$ REESCRIBIMOS $\langle n_1 \rangle = \sum_{n_1=0}^{N} \frac{N!}{n_1!(N-n_1)!} p\frac{\partial}{\partial p}(p^{n_1}) q^{N-n_1} = p\frac{\partial}{\partial p}\left[\sum_{n_1=0}^{N} \binom{N}{n_1} p^{n_1} q^{N-n_1}\right] =$

conmutamos pq no afecta al sumatorio

Binomio Newton

$= p\frac{\partial}{\partial p}(p+q)^N = pN(\underbrace{p+q}_{=1})^{N-1} \Rightarrow \langle n_1 \rangle = pN$ ¿análogamente $\langle n_2 \rangle = qN$

TRUCO! Cuando en un sumatorio o integral nos "sobre" un orden en la potencia, ver si con su derivada nos queda algo más fácil.

En cuanto al valor medio del cuadrado, vamos a intentar simplificarlo de igual manera:

$$\langle n_1^2 \rangle = \sum_{n_1=0}^{N} n_1^2 P(n_1) = pN + p^2N(N-1) = p^2N^2 + Np(1-p) \Rightarrow$$

ahora tomamos $\underbrace{p\frac{\partial}{\partial p}}_{\text{baja otro } n_1}\left[\underbrace{p\frac{\partial}{\partial p}}_{\text{baja un } n_1}[\ \ ]\right] = p\frac{\partial}{\partial p}[pN(p+q)^{N-1}] =$

$= p[N(p+q)^{N-1} + pN(p+q)^{N-2}] = *$

$\Rightarrow \langle n_1^2 \rangle = p^2N^2 + Np(1-p)$

- **Definición:** desviación de una función $f(x) - \langle f(x) \rangle$

  De aquí podemos dar también la desviación de x: $x - \langle x \rangle$

¿Qué valdrá el valor medio de la desviación? $\langle x - \langle x \rangle \rangle = 0$

Esto ocurre porque x - <x> es una constante. Esto no tiene demasiada información, pero sí la tendrá cuando sacamos la media de la función al cuadrado (nos dice cuánto se desvía en promedio).

• **Definición:** varianza $\langle (\Delta x)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$ repasar definiciones

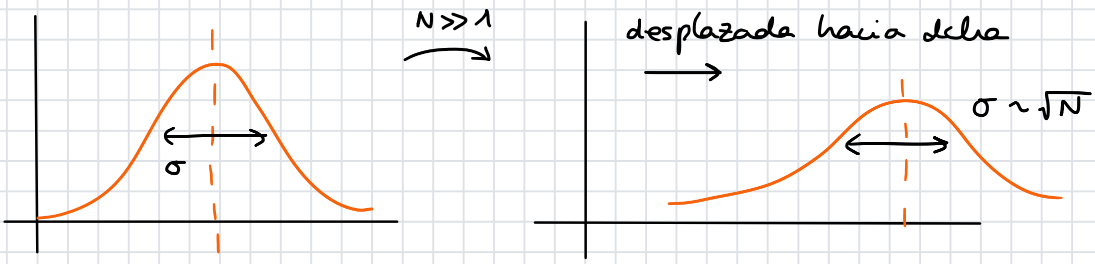
La desviación estándar se define como $\sigma = \sqrt{\langle \Delta x \rangle^2}$

Vamos a calcular la varianza y desviación estándar para n_1:

$$\langle (\Delta n_1)^2 \rangle = \langle n_1^2 \rangle - \langle n_1 \rangle^2 = Np(1-p) = Npq$$

$$\sigma = \sqrt{\langle \Delta n_1 \rangle^2} = \sqrt{Npq}$$

OBSERVACIÓN: ¿Cómo escala el valor medio con N?



$$\frac{\sigma}{\langle n_1 \rangle} \sim \frac{\sqrt{N}}{N} = \frac{1}{\sqrt{N}} \xrightarrow[N \to +\infty]{} 0$$

Cada vez la función será más estrecha y estará más localizada. Esto funcionará para este tipo de distribuciones o para las que se comporten de forma similar.

4.1. Casos particulares de la distribución binomial

i) Consideremos $p \ll 1$ y $n_1 \ll N$ y tomamos límites en la distribución. Dos puntos conflictivos
→ $N \gg 1$ por eso

- $\dfrac{N!}{(N-n_1)!} = N(N-1)(N-2)\dots(N-n_1+1) \simeq N^{n_1}$
- $q^{N-n_1} = (1-p)^{N-n_1} \Rightarrow \ln(1-p)^{N-n_1} = (N-n_1)\ln(1-p) \underset{\uparrow}{\simeq} N(-p) = -pN$
  $\ln(1+x) \simeq x + \dots$

$$\Rightarrow q^{N-n_1} = e^{-pN}$$

Definición: notación $\lambda = pN$

Con esta nueva notación, la probabilidad en este caso queda de la siguiente forma:

$$P(n_1) = \frac{N^{n_1}}{n_1!} p^{n_1} e^{-\lambda} = \frac{\lambda^{n_1} e^{-\lambda}}{n_1!} \Rightarrow \text{DISTRIBUCIÓN DE POISSON}$$

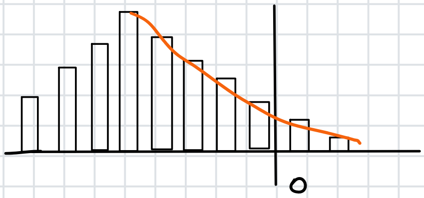
Lo que me determina todo en esta nueva distribución es el valor de λ, que además coincidirá con el valor medio de la distribución.

$$\langle n_1 \rangle = \lambda \quad \text{(se deja como ejercicio)}$$

λ, que además coincidirá con el valor medio de la distribución.

$\langle n_1 \rangle = \lambda$ (se deja como ejercicio)

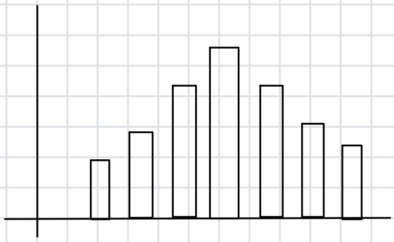
Gráficamente, lo que hemos hecho es:



Aproximamos la cola de la distribución.

Ejemplo físico: desintegración atómica (un suceso que puede pasar o no, y que tiene mucha menor probabilidad de pasar).

ii) Consideramos $N \gg n_1 \gg 1$.



Ahora tenemos muchas barritas muy desplazadas. Se puede pasar al continuo y aproximar por una función continua.

¿Dónde está el máximo de esta función?

$\frac{dP(n_1)}{dn_1} = 0$ → pero ojo, aún tenemos valores discretos! $\Leftrightarrow \frac{d \ln P(n_1)}{d n_1} = 0$ (+ fácil)

Partiendo de la binomial:

- $\| P_N(n_1+1) - P_N(n_1) \| \ll P_N(n_1)$ $\Leftrightarrow$ barritas muy densas
- $\ln P(n_1) = \ln N! - \ln n_1! - \ln(N-n_1)! + n_1 \ln p + (N-n_1)\ln q = f(n_1) =$

  Está picada alrededor de un máximo (que coincidirá con el valor medio).

  $= \ln P(\langle n_1 \rangle) + \frac{d \ln P(n_1)}{d n_1}\Big|_{n_1 = \langle n_1 \rangle} \cdot \eta + \frac{d^2 \ln P(n_1)}{d n_1^2}\Big|_{n_1=\langle n_1 \rangle} \frac{\eta^2}{2} + \dots$

  ↑ expansión alrededor de n_1, $n_1 = \langle n_1 \rangle + \eta$ — 0 máximo

1. Comprobamos que la derivada se anula en $\langle n_1 \rangle$. Para ello necesito aproximar la derivada del factorial:

   $\frac{d}{dn_1} \ln n_1! \underset{\uparrow}{\simeq} \frac{\ln(n_1+1)! - \ln n_1!}{1} = \ln\left(\frac{(n_1+1)!}{n_1!}\right) = \ln(n_1+1) \underset{\uparrow}{\simeq} \ln(n_1)$

   $\varepsilon = 1$ porque $1 \ll n_1$, definición derivada — $n_1 \gg 1$

   Ahora podemos dar la derivada de P:

   $\frac{d}{dn_1} \ln P(n_1) = -\ln n_1 + \ln(N-n_1) + \ln p - \ln q = \ln\left[\frac{(N-n_1)p}{n_1 \cdot q}\right] = 0$

   $\Leftrightarrow \frac{(N-\langle n_1 \rangle)p}{\langle n_1 \rangle q} = 1 \Rightarrow \langle n_1 \rangle = pN$

   pasos, casa

   quiere comprobar que es en $\langle n_1 \rangle$

2. Buscamos la segunda derivada:

que es en $\langle n_1 \rangle$

2. Buscamos la segunda derivada:

$$\frac{d^2}{dn_1^2}\ln P(n_1) = -\frac{1}{n_1} - \frac{1}{N-n_1} \quad ; \quad \frac{d^2}{dn_1^2}\ln(P(n_1))\Big|_{n_1=\langle n_1\rangle = pN} = -\frac{1}{pN} - \frac{1}{N-pN} =$$

$$= -\frac{1}{pN} - \frac{1}{qN} = -\frac{1}{Npq}$$ ← la derivada 2ª tiene que ver con la varianza

3. La aproximación del logaritmo queda:

$$\ln P(n_1) = \ln P(\langle n_1\rangle) - \frac{1}{Npq}\cdot\frac{\eta^2}{2} + \dots \Rightarrow P(n_1) = P(\langle n_1\rangle)\cdot e^{-\frac{\eta^2}{2Npq}}$$

Habría que multiplicar por el factor de normalización, que por ser una integral de una gaussiana va a tener la siguiente forma (se deja como ejercicio):

$$P(n_1) = \frac{1}{\sqrt{2\pi Npq}}\, e^{-\frac{(n_1-\langle n_1\rangle)^2}{2Npq}} \Rightarrow \text{GAUSSIANA}$$

Normalmente vamos a tener una gaussiana para binomiales con números grandes.

TEOREMA CENTRAL DEL LÍMITE: en el límite de tener muchas cosas vamos a tener distribuciones Gaussianas

El **teorema central del límite** o **teorema del límite central** indica que, en condiciones muy generales, si S_n es la suma de n variables aleatorias independientes, con media y varianza finitas, entonces la función de distribución de S_n «se aproxima bien» a una distribución normal (también llamada *distribución gaussiana*, *curva de Gauss* o *campana de Gauss*). Así pues, el teorema asegura que esto ocurre cuando la suma de estas variables aleatorias e independientes es lo suficientemente grande.[1,2]

Clase 4

jueves, 26 de octubre de 2023 13:04

RESUMEN

"Random walk"

↓

Binomial → $p \ll 1, N \gg 1$ pero $pN = \lambda$ finito $\Rightarrow$ POISSON $\langle n_1 \rangle = pN$

Binomial → $N \gg 1$ $\quad P(n_1) = \frac{1}{\sqrt{2\pi Npq}} e^{\frac{-(n_1 - \langle n_1 \rangle)^2}{2Npq}}$

↳ factor multiplicativo

n_1 pasos a la derecha con probabilidad p

$N - n_1$ pasos a la izquierda con probabilidad $q = 1 - p$

PASO AL CONTINUO

Cada paso tiene longitud ℓ, y $m = n_1 + n_2 = 2n_1 - N \Rightarrow x = (2n_1 - N)\ell$. Podemos decir que $dx = 2\ell \Delta n_1 \Rightarrow P(n_1) \cdot \Delta n_1 = P(x) dx$

Hay que renormalizar la función de probabilidad:

$$P(x) = \frac{P(n_1)}{2\ell} \Rightarrow \text{DENSIDAD DE PROBABILIDAD}$$

cuando $N \to +\infty$, histograma pasa al continuo

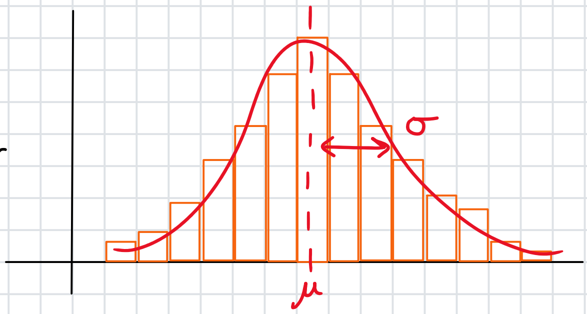
• Definición: densidad de probabilidad Gaussiana

$$P(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{\frac{-(x-\mu)^2}{2\sigma^2}} \Rightarrow \begin{array}{l} \mu = \langle x \rangle \\ \sigma^2 = \langle (\Delta x^2) \rangle \end{array}$$

varianza / desviación (lo gordita que está la distribución es 2σ)

Una de las formas de ver la Gaussiana es como el límite con números grandes de una densidad binomial. Viene caracterizada por dos magnitudes: valor medio y varianza (vs Poisson, que solo tenía un parámetro).

El valor de la desviación nos da una idea de cuánto del área total queda en la parte principal de la gaussiana/error en las mediciones a nivel laboratorio.



NOTA: se habla de momentos como los valores medios de las potencias. En este caso, todo va en función de dos momentos (con los que hemos definido μ y σ) $\Rightarrow \langle x^3 \rangle$ momento de orden 3 ¿?

El momento de orden 3 se llama "skewness", y tiene relación con cuánto se rompe la simetría de una distribución.

4.2. Cálculo de valores medios en el camino aleatorio. Caso general

Tenemos que hacer dos suposiciones nuevas que antes habíamos tomado como dadas:

- El desplazamiento de cada paso PODRÍA ser distinto.
- Las probabilidades de cada paso pueden ser distintas.

¿Cómo planteamos este cálculo ahora que es más complicado?

$P(x)dx \Rightarrow$ después de N pasos, he recorrido entre x y $x+dx$

Si llamamos S_i al desplazamiento del paso i, entonces el camino recorrido total después de N pasos queda:

$$x = S_1 + S_2 + S_3 \dots + S_N = \sum_{i=1}^{N} S_i \Rightarrow \langle x \rangle = \langle \sum_{i=1}^{N} S_i \rangle = \sum_{i=1}^{N} \langle S_i \rangle$$

$\langle s_i \rangle = \sum_i s_i \omega_i \rightarrow$ probabilidad del paso i

Si no nos dan la probabilidad de cada paso sino una función de probabilidad continua:

$$\langle s_i \rangle = \int_a^b s_i \, \omega(s) \, ds \rightarrow \text{integrado en el rango permitido}$$

• Para el primer cálculo que vamos a hacer, vamos a suponer que las probabilidades son las mismas para cada caso:

$\omega_i(s_i)$ iguales $\Rightarrow$ Todo $\langle s_i \rangle = \langle s \rangle \Rightarrow \langle x \rangle = N\langle s \rangle$

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle \Rightarrow \Delta x = x - \langle x \rangle = \sum_{i=1}^{N} s_i - \sum_{i=1}^{N} \langle s \rangle = \sum_{i=1}^{N} (s_i - \langle s \rangle) = \sum_{i=1}^{N} \Delta s_i$$

$$\Rightarrow \left(\sum_{i=1}^{N} (\Delta s_i)\right)\left(\sum_{j=1}^{N} (\Delta s_j)\right) = \sum_{i=1}^{N} (\Delta s_i)^2 + \sum_{i=1}^{N} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{N} (\Delta s_i)(\Delta s_j)$$

$$\left\langle \left(\sum_{i=1}^{N} (\Delta s_i)\right)\left(\sum_{j=1}^{N} (\Delta s_j)\right) \right\rangle = \left\langle \sum_{i=1}^{N} (\Delta s_i)^2 \right\rangle + \left\langle \sum_{i=1}^{N} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{N} (\Delta s_i)(\Delta s_j) \right\rangle = N\langle (\Delta s_i)^2 \rangle$$

¿Cómo calculamos este sumatorio doble?

REVISAR

$$\left\langle \sum_{i=1}^{N} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{N} (\Delta s_i)(\Delta s_j) \right\rangle = \sum_{i=1}^{N} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{N} \langle \Delta s_i \rangle \langle \Delta s_j \rangle = 0$$

porque $\langle \Delta s_i \rangle = \langle s_i - \langle s_i \rangle \rangle = 0$

$\langle s_i \rangle - \langle \langle s_i \rangle \rangle = 0$

pq son indep?

$\sigma = \sqrt{\langle (\Delta x)^2 \rangle}$

Si calculo algo que tiene que ver con $\frac{\sigma}{\langle x \rangle} = \frac{\sqrt{N}\langle (\Delta s)^2 \rangle}{N\langle s \rangle} \rightarrow$ se va comprimiendo la distribución, cada vez + estrecha (por cómo crece con N).

• Ahora suponemos probabilidades distintas y veamos qué ocurre.

Lo 1º que hay que intentar entender es la probabilidad de dar un paso de $l = s_1$ en el primer paso, $l = s_2$ en el 2º paso...

sucesos indep $\rightarrow w(s_1)ds_1 \cdot w_2 ds_2 \cdot w_3 \cdot ds_3 \cdots w_N ds_N \Rightarrow$

$$\Rightarrow P(x)dx = \iiint w(s_1)ds_1 \cdot w_2 ds_2 \cdot w_3 \cdot ds_3 \cdots w_N ds_N$$

Además, queremos $x < \sum_{i=1}^{N} s_i < x + dx \Rightarrow$ RESTRICCIÓN (condiciona integral)

∞ nº de opciones de combinar las s_i para que esto se cumpla

¿Cómo se gestiona la integral? $\Rightarrow$ DELTA DE DIRAC

Queremos añadir un término que nos devuelva un 1 si es cierto y un 0 si no es cierto (análogo a integrales en funcional).

$$P(x)dx = \iiint w(s_1)ds_1 \cdot w_2 ds_2 \cdot w_3 \cdot ds_3 \cdots w_N ds_N \left[\delta\left(x - \sum_{i=1}^{N} s_i\right)dx\right]$$

usamos δ para imponer restricciones en integrales

La representación integral de la delta de Dirac queda:

$$\delta(x - x_0) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} dk\, e^{ik(x-x_0)}$$

si tienes ese valor se va a $+\infty$, $\rightarrow$ si no a 0

La delta de Dirac no es más que un rectángulo de alto infinito y ancho infinitesimal. También se puede aproximar como una Gaussiana de área 1 donde sigma es cada vez más pequeña.

La parte $e^{ik(x-x_0)}$ es una onda plana que se mueve hacia la derecha. Esto es análogo a lo que hemos visto en cuántica. Se puede ver como que para pasar del espacio de posición al espacio de momentos se ha de hacer una transformada de Fourier.

Retomando el cálculo de la integral:

$$P(x)dx = \iiint w(s_1)ds_1 \cdot w_2 ds_2 \cdot w_3 \cdot ds_3 \cdots w_N ds_N \left[\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} dk\, \underbrace{e^{-ik\left(x - \sum_{i=1}^{N} s_i\right)}}_{e^{ikx} \cdot e^{-iks_i} \cdot e^{-iks_2} \cdots e^{-iks_N}}\right] dx =$$

ordenamos las integrales

$$= \frac{1}{2\pi}\int dk\, e^{ikx} \cdot \int w(s_1) e^{-iks_1} ds_1 \int w(s_2) e^{-iks_2} ds_2 \cdots \int w(s_N) e^{-iks_N} ds_N =$$

$$= \frac{1}{2\pi}\int dk\, e^{ikx} [Q(k)]$$

$$Q(k) = \int w(s) e^{-iks} ds$$