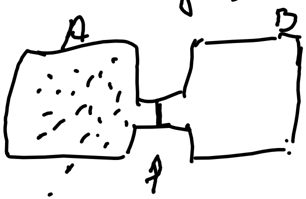
Modelo de Ehrenfest

→ Modelo simplificado de um gás:



Abro em $t=0$

→ 2 urnas com N bolas distinguíveis numeradas de 1 a N.

→ Inicialmente todas as bolas em A

Dinâmica: Sorteio uma das N bolas e a mudo de urna.

$P_\ell(n)$: probabilidade de ter n bolas na urna A no instante ℓ.

$$P_0(n) = \delta_{nN}$$

<u>ex:</u> $N = 6$

nº de bolas em A

$$\begin{tikzcd}
0 \arrow[r, bend left, "1"] & 1 \arrow[l, bend left, "1"] \arrow[r, bend left, "5/6"] & 2 \arrow[l, bend left, "2/6"] \arrow[r, bend left, "4/6"] & 3 \arrow[l, bend left, "3/6"] \arrow[r, bend left, "3/6"] & 4 \arrow[l, bend left, "4/6"] \arrow[r, bend left, "2/6"] & 5 \arrow[l, bend left, "5/6"] \arrow[r, bend left, "1/6"] & 6 \arrow[l, bend left, "1"]
\end{tikzcd}$$

$$\begin{cases} T(n-1, n) = \dfrac{n}{N} \\[2ex] T(n+1, n) = \dfrac{N-n}{N} \\[2ex] T(m, n) = 0 \quad \text{, outros casos} \end{cases} \qquad n \in \{0, 1, \dots, N\}$$

→ Caso mais geral: número de bolas pode ficar fixo.

$$\begin{cases} T(n,n) = p \\ T(n-1,n) = q\,\dfrac{n}{N} \quad ; \quad q = 1-p \\ T(n+1,n) = q\,\dfrac{N-n}{N} \end{cases}$$

$T(m,n) = 0$ outros casos. Se $p=0$, recupera-se o modelo original.

<u>eq. Evolução</u>:

$$|P_{\ell+1}\rangle = \hat{T}\,|P_\ell\rangle$$

$\downarrow$ componentes

$$P_{\ell+1}(n) = \sum_m{}' \; T(n,m)\,P_\ell(m)$$

$$P_{\ell+1}(n) = q\,\frac{N-(n-1)}{N}\,P_\ell(n-1) + p\,P_\ell(n) + q\,\frac{n+1}{N}\,P_\ell(n+1)$$

$$\boxed{P_{\ell+1}(n) = q\,\frac{N-(n-1)}{N}\,P_\ell(n-1) + p\,P_\ell(n) + q\,\frac{n+1}{N}\,P_\ell(n+1)}$$

Fixamos $P_\ell(-1) = P_\ell(N+1) = 0$ e a condição inicial $P_0(n) = \delta_{nN}$ (todas em A)

→ Probrabilidade estacionária

$$|P_\infty\rangle = \hat{T}\,|P_\infty\rangle$$

$$P_\infty(n) = q\,\frac{N-(n-1)}{N}\,P_\infty(n-1) + p\,P_\infty(n) + q\,\frac{n+1}{N}\,P_\infty(n+1)$$

$$(1-p)\,P_\infty(n) = q\left[\frac{N-(n-1)}{N}\,P_\infty(n-1) + \frac{n+1}{N}\,P_\infty(n+1)\right]$$

q

$$\boxed{P_\infty(n) = \frac{N-(n-1)}{N}\,P_\infty(n-1) + \frac{n+1}{N}\,P_\infty(n+1)}$$

Prob. estacionária

- Cada partícula deve ter probabilidade igual de estar em qualquer uma das caixa
- Há 2^N maneiras de distribuir N partículas em 2 urnas
- Há $\binom{N}{n}$ maneiras de escolher n bolas das N.

$$P_\infty(n) = \binom{N}{n}\frac{1}{2^N} = 2^{-N}\binom{N}{n}$$

$$\boxed{P_\infty(n) = 2^{-N}\binom{N}{n}}$$

Pode-se calcular, mas mostraremos que está correto

Eq Autovalores: $\hat{T}|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$

↓ Em componentes

$$\sum_m T(n,m)\,\psi(m) = \lambda\,\psi(n)$$

$$q\,\frac{N-(n-1)}{N}\,\psi(n-1) + p\,\psi(n) + q\,\frac{n+1}{N}\,\psi(n+1) = \lambda\,\psi(n)$$

$n \in \{0,1,\dots,N\}$ e $\psi(-1) = \psi(N+1) = 0$

---

probabilidades p_n, $n \in \{0,1,\dots,N\}$

↳ definimos a função Geratriz

como $f(x) = \sum_{n=0}^{N} p_n x^n$

$$q\,\frac{N-(n-1)}{N}\,\psi(n-1) + p\,\psi(n) + q\,\frac{n+1}{N}\,\psi(n+1) = \lambda\,\psi(n)$$

Define: $\quad f(x) = \sum_{n=0}^{N} \psi(n)\,x^n \quad$ (função geratriz, polinômial)

$$\sum_{n=0}^{N} q\,\frac{N-(n-1)}{N}\,\psi(n-1)\,x^n + p\sum_{n=0}^{N}\psi(n)\,x^n + q\sum_{n=0}^{N}\frac{(n+1)}{N}\,\psi(n+1)\,x^n = \sum_{n=0}^{N}\lambda\,\psi(n)\,x^n$$

$$\sum_{n=0}^{N} q\,[N-(n-1)]\,\psi(n-1)\,x^n + pN\,f(x) + q\sum_{n=0}^{N}(n+1)\,\psi(n+1)\,x^n = N\lambda\,f(x)$$

$$qN\sum_{n=0}^{N}\psi(n-1)\,x^n - q\sum_{n=0}^{N}(n-1)\,\psi(n-1)\,x^n + q\sum_{n=0}^{N}(n+1)\,\psi(n+1)\,x^n = N(\lambda-p)\,f(x)$$

$$qNx\sum_{n=0}^{N}\psi(n-1)\,x^{n-1} - qx^2\sum (n-1)\,\psi(n-1)\,x^{n-2} + q\,\frac{d}{dx}\sum \psi(n+1)\,x^{n+1} = N(\lambda-p)\,f(x)$$

$$\underbrace{qNx \sum_{n=0}^{N}{}' \psi(n-1) x^{n-1}} - q x^2 \sum{}' (n-1)\psi(n-1) x^{n-2} + q \frac{d}{dx} \sum_{n=0}^{N}{}' \psi(n+1) x^{n+1} = N(\lambda-\rho) f(x)$$

$$qNx\left[f(x) - \psi(N)x^N\right] - q x^2 \frac{d}{dx}\left[\sum_{n=0}^{N}{}' \psi(n-1)x^{n-1}\right] + q\frac{d}{dx}f(x) = N(\lambda-\rho)f(x)$$

$$qNx\left[f(x)-\psi(N)x^N\right] - qx^2 \frac{d}{dx}\left[f(x)-\psi(N)x^N\right] + q\frac{df}{dx} = N(\lambda-\rho)f(x)$$

$$q(1-x^2)\frac{df}{dx} + qNxf(x) - qNx\psi(N)x^N + qx^2\frac{d}{dx}\psi(N)x^N = N(\lambda-\rho)f(x)$$

$$q(1-x^2)\frac{df}{dx} + qNx f(x) - qNx\,\psi(N)\,x^N$$

$$+\; q x^2 \frac{d}{dx}\psi(N)x^N = N(\lambda-\rho) f(x)$$

$$q(1-x^2)\frac{df}{dx} - qN\cancel{\psi(N)\,x^{N+1}} + \cancel{qx^2 N\psi(N)x^{N-1}}$$

$$= N(\lambda-\rho-qx) f(x)$$

$$\boxed{q(1-x^2)\frac{df}{dx} = N(\lambda-\rho-qx) f(x)}$$

↳ Eq. de 1ª ordem define a função geratriz $f(x) = \sum_{n=0}^{N} \psi(n)\, x^n$, que é um polinômio.

→ A solução da eq. é

$$f(x) = A(1+x)^{N-k}(1-x)^{k},$$

onde A é constante de integração e

$$k = -\frac{N(\lambda-1)}{2q}, \quad \text{com } k \text{ inteiro não}$$

negativo porque $f(x)$ é polinômio de grau N (definição)

$$\rightarrow \quad N(\lambda-1) = -2qk$$

$$\boxed{\lambda_k = 1 - \frac{2q}{N}k}$$

→ Espectro discreto

$k \in \{0, 1, 2, \ldots, N\}$

A cada λ_k corresponde um autovetor $|\psi_k\rangle$ cujos coeficientes de

$$f_k(x) = \sum_{n=0}^{N} \psi_k(n)\, x^n$$

Função geratriz dos autovetores.

$\Rightarrow |\psi_0\rangle$ deve corresponder ao vetor probabilidade estacionária $|P_\infty\rangle$:

$$f_0(1) = \sum_{n=0}^{N} \psi_0(n) = \sum_{n=0}^{N} P_\infty(n) = 1$$

normalização

Como $f_k(x) = A\,(1+x)^{N-k}\,(1-x)^k$,

temos $f_0(1) = 1 = A\,(1+1)^N = 2^N A$

$$\Rightarrow \boxed{A = 2^{-N}}$$

Portanto: $f_k(x) = 2^{-N}(1+x)^{N-k}(1-x)^k$

$$f_0(x) = 2^{-N}(1+x)^N = 2^{-N}\sum_m \binom{N}{m} x^m$$

$$= \sum_m \left[2^{-N}\binom{N}{n}\right] x^m$$

$$f_0(x) = \sum_{m=0} \psi_0(m)\, x^m$$

↳ os coeficientes de $f_0(x)$ me dão os valores de $|\psi_0\rangle$

É possível mostrar, (Não trivial, ver M.Kac 1945)

usando

$$\langle \phi_k | \psi_m \rangle = \delta_{km} \quad \text{e}$$

$$\sum_k |\psi_k\rangle\langle \phi_k| = \hat{I} \quad \text{é identidade,}$$

que

$$\phi_k(n) = 2^N \psi_n(k)$$

Note os índices trocados.

<u>Solução</u> : condição inicial $P_0(n) = \delta_{nN}$

$$|P_\ell\rangle = \hat{T}^\ell |P_0\rangle \rightarrow P_\ell(n) = \sum_m T^\ell(n,m) P_0(m)$$

$$P_\ell(n) = \sum_m T^\ell(n,m)\, P_0(m) = \sum_m T^\ell(n,m)\, \delta_{mN}$$

$$= T^\ell(n,N)$$

$$= \sum_{k=0}^{N} \lambda_k^\ell\, \psi_k(n)\, \phi_k(N)$$

Para obter os momentos $\left(\langle n \rangle_\ell = \sum_{n=0}^{N} n\, P_\ell(n) \right)$

$$\langle x^n \rangle_\ell = \sum_{n=0}^{N} x^n\, P_\ell(n)$$

$$= \sum_{n=0}^{N} x^n \sum_k \lambda_k^\ell\, \psi_k(n)\, \phi(N)$$

$$= \sum_k \lambda_k^\ell \left[\sum_n x^n \psi_k(n) \right] \phi(N)$$

$$\langle x^n \rangle_\ell = \sum_k \lambda_k^\ell \, f_k(x) \, \phi_k(N)$$

$$\phi_k(N) = 2^N \psi_N(k) = \cdots = (-1)^k \binom{N}{k}$$

$$f_k(x) = 2^{-N} (1+x)^{N-k} (1-x)^k$$

$$\langle x^n \rangle_\ell = \sum_k \lambda_k^\ell (-1)^k \binom{N}{k} 2^{-N} (1+x)^{N-k} (1-x)^k$$

deriva em relação a x e depois faz $x=1$

$\vdots$

$$\langle n x^{n-1} \rangle_\ell \Big|_{x=1} = \langle n \rangle = \frac{N}{2} + \frac{N}{2} \lambda_1^\ell = \frac{N}{2} + \frac{N}{2} \left(1 - \frac{2q}{N} \right)^\ell$$

$\rightarrow$ aproximação exponencial da solução estacionária.