



Основы молекулярной и статистической физики

Лекция 07(10)

Распределения вероятности.
Нормальное распределение.
Вероятностная энтропия.

Лектор: Доцент НИЯУ МИФИ, к.ф.-м.н.,
Ольчак Андрей Станиславович



Результаты, основанные на статистике



Основное уравнение состояния идеального газа и УМК :

$$P = nkT \Rightarrow PV = nkTV = \nu RT = (M/\mu)RT$$

Главное допущение статистической термодинамики: на каждую степень свободы молекулы (каждый способ накопления энергии) приходится в среднем одинаковые величины этой энергии $\varepsilon_i = kT/2$, а внутренняя энергия идеального газа равна сумме энергий движения всех молекул

$$U = (i/2)\nu RT,$$

НО! Чтобы полностью использовать все возможности статистического анализа нужна соответствующая математика: *теория вероятностей (probability theory)*.

Теория игр «Орлянка» и «игра в кости»





ПРИМЕР 1:

Бросаем монетку.



Результат испытаний: тип 1 – если выпала решка; тип 0 – если орел

Если бросать очень много раз, то

Вероятность выпадения результата $P_{0,1} = 1/2$ как для результата типа 1, так и для результата типа 0.

ПРИМЕР 2:

Бросаем кости

Типы результатов испытаний (сумма 2-х костей) и способы их получения:

- | | |
|-------------------------------------|--------------------------------|
| 2: 1+1 (1) | 8: 6+2, 5+3, 4+4, 3+5, 2+6 (5) |
| 3: 1+2, 2+1 (2) | 9: 6+3, 5+4, 4+5, 3+5 (4) |
| 4: 1+3, 2+2, 3+1 (3) | 10: 6+4, 5+5, 4+5 (3) |
| 5: 1+4, 2+3, 3+2, 4+1 (4) | 11: 6+5, 5+6 (2) |
| 6: 1+5, 2+4, 3+3, 4+2, 5+1 (5) | 12: 6+6 (1) |
| 7: 1+6, 2+5, 3+4, 4+3, 5+2, 6+1 (6) | |



Вероятности выпадения результата: $P_2 = P_{12} = 1/36$; $P_3 = P_{11} = 2/36$;

$P_4 = P_{10} = 3/36$; $P_5 = P_9 = 4/36$; $P_6 = P_8 = 5/36$; $P_7 = 6/36$;



Сложение и умножение вероятностей.

$P_{i \text{ или } k}$ – вероятность выпадения ИЛИ результата типа i , ИЛИ результата типа k (ПРИМЕР с костями: $P(<5) = (1+2+3)/36 = 1/6$.

$$P_{i \text{ или } k} = \frac{N_i + N_k}{N} = \frac{N_i}{N} + \frac{N_k}{N} = P_i + P_k$$



$P_{i \text{ и } k}$ – вероятность выпадения в результате пары исп... одного результата типа i и одного результата типа k .

ПРИМЕР с костями: $P_{4+1} = 1/6 \times 1/6 = 1/36$.

$$P(x_i, y_k) = \frac{N(x_i, y_k)}{N} = P(x_i)P(y_k)$$

ВАЖНО! Эти соотношения справедливы **ТОЛЬКО** если результаты испытаний не зависят один от другого (НЕ связаны причинноследственной связью!).



N – общее число испытаний,

N_i – число испытаний с результатом типа i

P_i – вероятность выпадения результата типа i

$$P_i = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{N_i}{N}$$

Для непрерывно распределенных величин X : вероятность при испытании

найти ее в интервале от X до $X + dX$ $dP(x) = f(x)dx$

$f(x)$ - функция распределения

А вероятность того, что величина x принадлежит интервалу от x_1 до x_2 :

$$P(x_1 \leq x \leq x_2) = \int_{x_1}^{x_2} f(x)dx$$

Для непрерывно распределенной величины вероятность

того, что величина x точно равна x_0 , нулевая $P(x = x_0) = 0$.



Вернемся к игре в «орлянку». Бросаем монету 2 раза.

Это – одна СЕРИЯ испытаний (длина серии $N_s = 2$)

Результаты испытаний (типы):

0 – выпало 2 орла



1 – выпал 1 орел и 1 решка



2 – выпало 2 решки



$$P_i = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{N_i}{N} = 0,25 \text{ для результатов типа 0 и 2}$$
$$= 0,5 \text{ – для результата типа 1}$$

N – число СЕРИЙ испытаний (желательно $N \gg \gg 1$),

N_s – длина каждой серии испытаний (в нашем случае $N_s = 2$)

N_i – число СЕРИЙ испытаний с результатом типа i

P_i – вероятность выпадения результата типа i



Распределение результатов испытаний ПРИМЕР с монеткой



Бросаем монетку N раз. Это – одна серия испытаний длиной N
Нумеруем все результаты (типы результатов) числами i от 0 до N по числу выпавших решек. Для разных типов результатов получатся разные вероятности, пропорциональные числу способов, которым мог выпасть данный результат!

Тип	Число способов реализации
$i = 0$	1 (все время выпадали орлы)
$i = 1$	N (решка выпала на 1, 2, 3, ... последнем броске)
$i = 2$	$N(N-1)/2$
$i = 3$	$N(N-1)(N-2)/6$
.....	
$i = k$	$N(N-1)(N-2)\dots(N-k+1)/k! = N!/k!(N-k)!$
.....	
$i = N-1$	N
$i = N$	1



Распределение результатов испытаний ПРИМЕР с монеткой



Бросаем монетку N раз. Это – одна серия испытаний длиной N

Число способов выпадения результата k равно

$$\Omega_k = N! / k!(N-k)! \quad \sum \Omega_k = 2^N$$

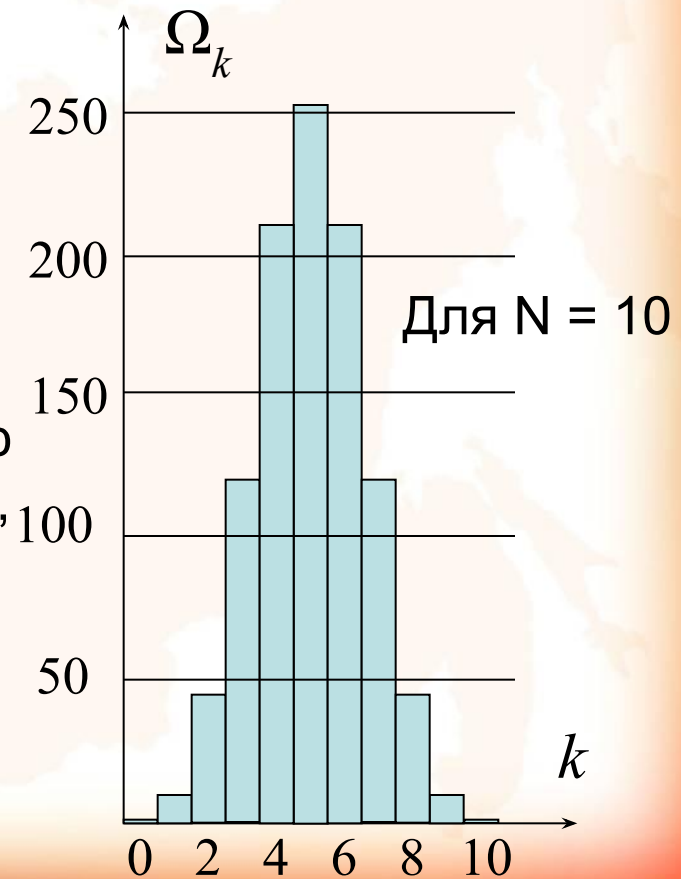
Вероятность выпадения результата k равна:

$$P_k = \Omega_k / 2^N = N! / k!(N-k)! 2^{-N}$$

Для $N \gg 1$ гистограмму распределения вероятности можно превратить в непрерывную функцию распределения вероятности, используя приближенную формулу Стирлинга:

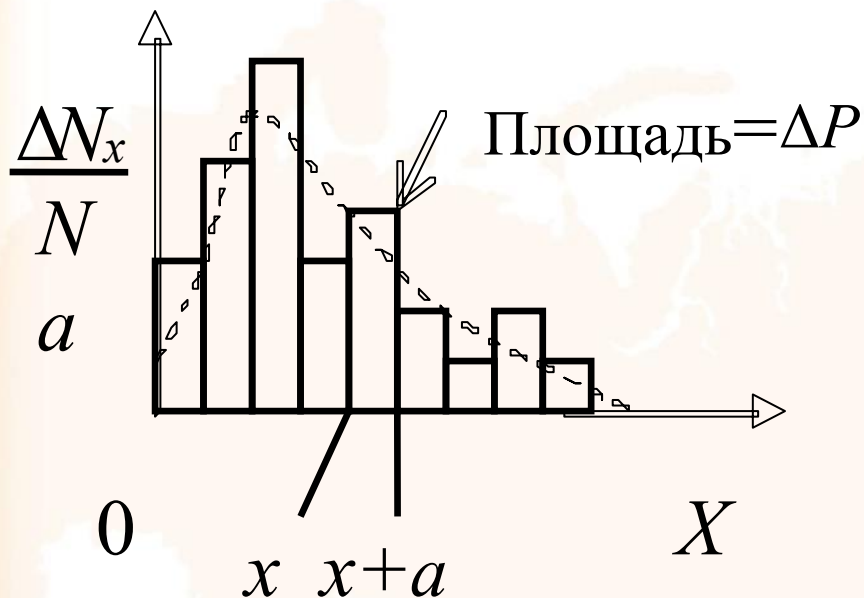
$$N! \sim (2\pi N)^{1/2} (N/e)^N, \text{ или}$$

$$\ln(N!) \sim N \ln(N/e)$$

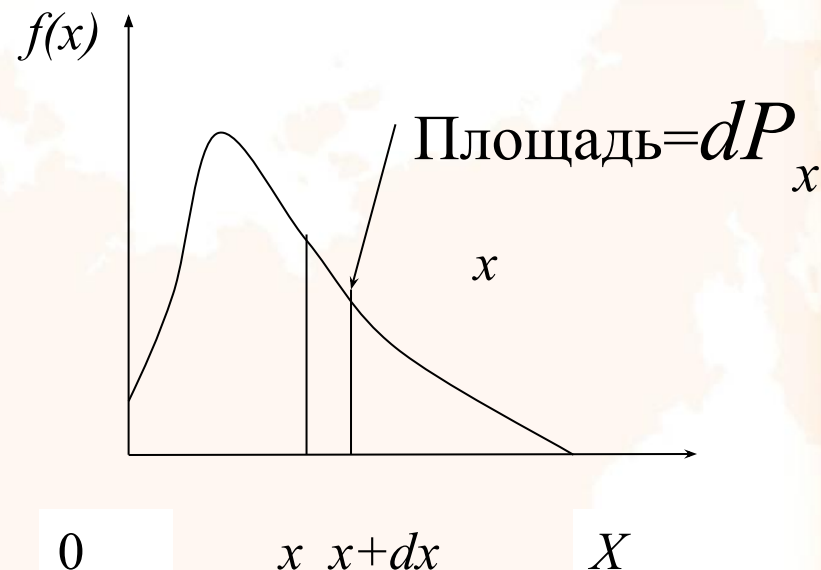




ГИСТОГРАММА



ФУНКЦИЯ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ



$$dP_x = f(x)dx \quad f(x) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{dN_x}{Ndx} = \lim_{x \rightarrow \infty} \frac{\Delta P_x}{\Delta x} = \frac{dP_x}{dx}$$

$$\sum_i P_i = \frac{\sum N_i}{N} = 1,$$

$$\int dP_x = \int f(x)dx = 1$$



Вероятность выпадения результата k равна:

$$P_k = \Omega_k / 2^N = N! / (k!(N-k)! 2^N$$

Для $N \gg \gg 1$ есть формула Стирлинга:

$$N! \sim (2\pi N)^{1/2} (N/e)^N,$$

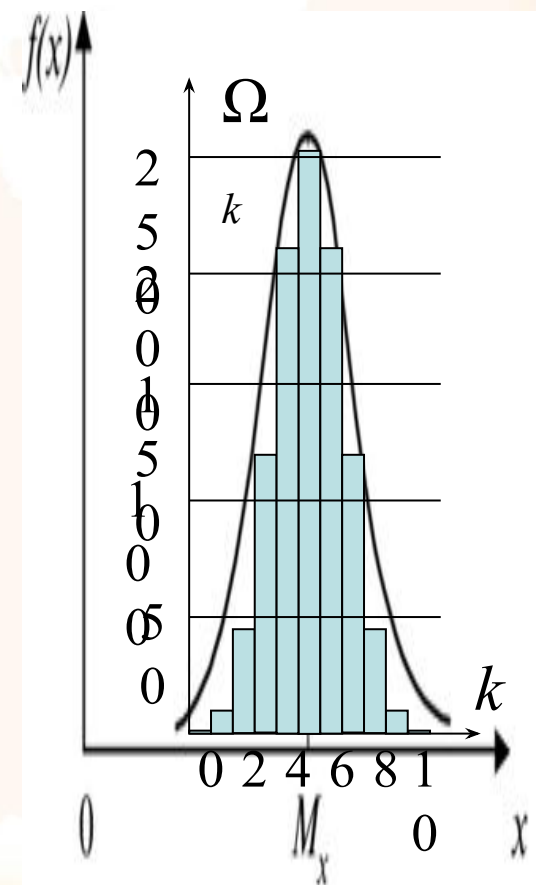
Применяя ее, находим:

$$P_k = (2/\pi N)^{1/2} \exp(-2n^2/N)$$

где $n = (k - N/2)$ - отклонение результата от среднего.

Заметные вероятности соответствуют n

$$\sim \ll N^{1/2} \ll N$$



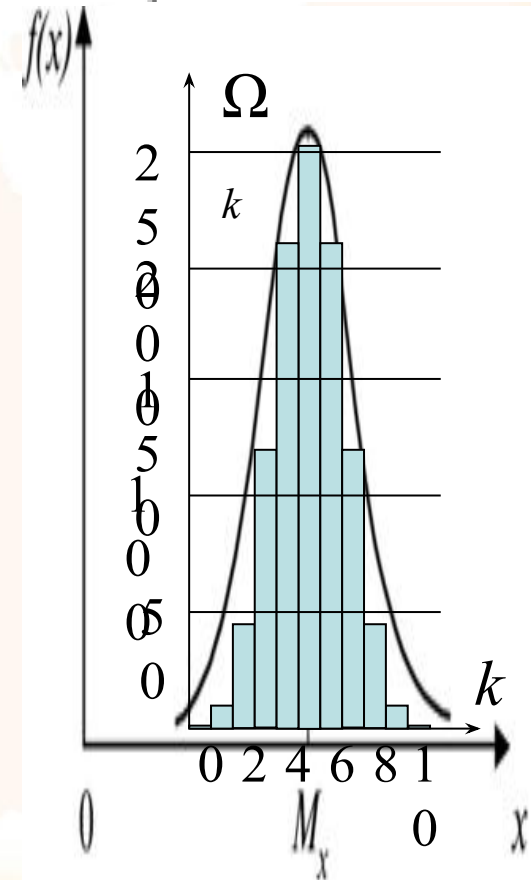


$$P_k = (2/\pi N)^{1/2} \exp(-2(k-N/2)^2/N) \Rightarrow f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}$$

Это **нормальное распределение** вероятности, также называемое **распределением Гаусса**

Параметр μ — среднее значение (математическое ожидание) случайной величины (указывает положение максимума плотности распределения), а σ — дисперсия (разброс значений случайной величины).

В случае с игрой в орлянку $\mu = N/2$,
а $\sigma = N^{1/2}/2 \ll N$





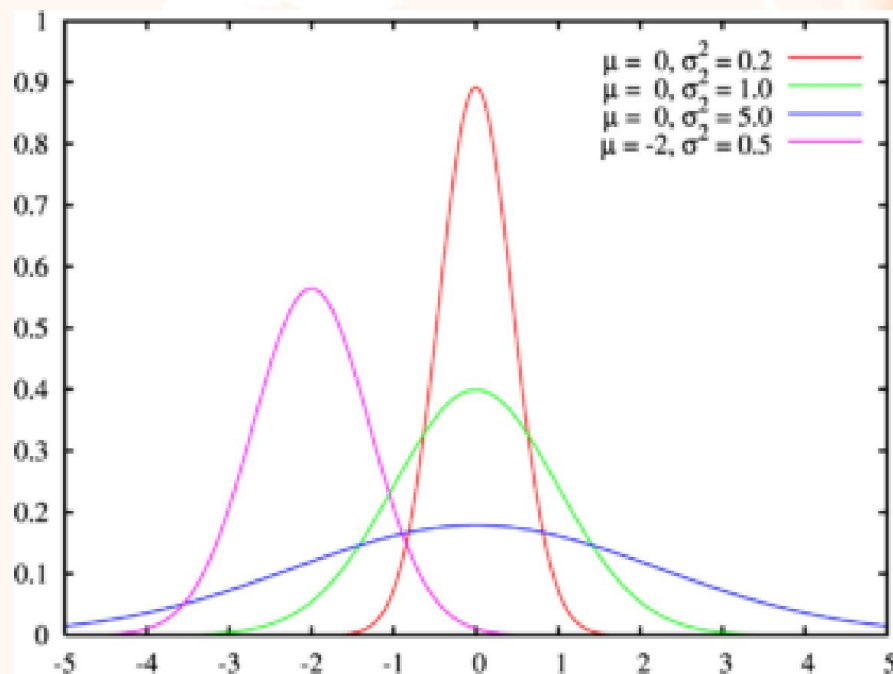
Распределение Гаусса

Нормальное распределение очень часто встречается в природе.

Например, следующие случайные величины хорошо моделируются

нормальным распределением:

- бросание монетки
- отклонение при стрельбе
- **погрешности измерений**
- и мн.др...





Распределение Гаусса Энтропия в информатике и в статистической физике



Распределение результатов испытаний ПРИМЕР с монеткой



Число способов выпадения результата k (из $N = 10$) равно

$$\Omega_k = N! / k!(N-k)!$$

$$\sum \Omega_k = 2^N$$

Тип Реализация

$k = 0$ 0000000000

$k = 1$ 1000000000 0100000000
0010000000 ... 0000000001

...

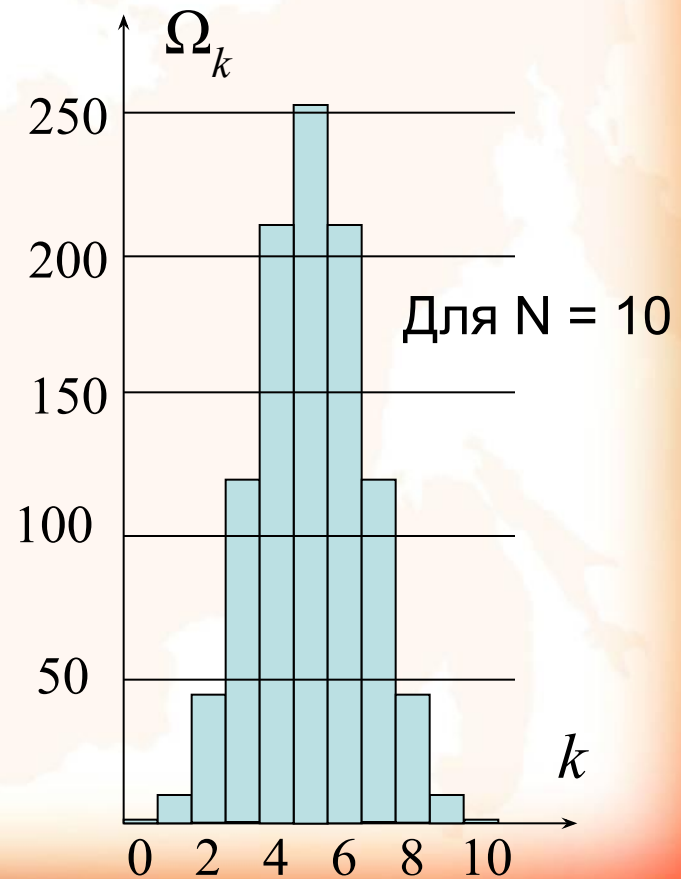
$k = 5$ 0100110011 1101000101 ... -

- всего 252 варианта

Чем больше вариантов реализации - тем ниже степень «упорядоченности» полученного результата

$S(k) = \ln(\Omega_k)$ - энтропия,

характеризующая степень упорядоченности результата (чем выше «порядок» - тем меньше энтропия)





$S(k) = \ln(\Omega_k)$ - энтропия, характеризующая степень упорядоченности результата

Для $N = 10$

$$S(0) = S(10) = \ln(1) = 0$$

$$S(5) = \ln(252) = \sim 5,6$$

чем выше «порядок» - тем меньше энтропия

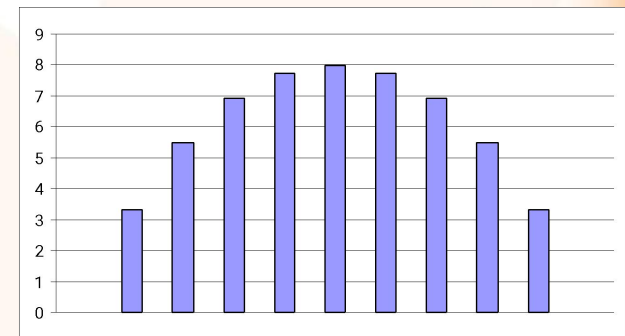
$$S(k) = A \ln(P_k) = A \ln(\Omega_k) - AN \ln 2$$

чем выше «порядок» - тем меньше энтропия

$$P(k \text{ u } i) = P_k P_i \Rightarrow S(k \text{ u } i) = S(k) + S(i)$$

Энтропия - величина аддитивная

Для $N = 10$





Тип Реализация

$k = 0$ 0000000000

$k = 1$ 1000000000 0100000000 ...

$k = 5$ 0100110011 1101000101 ...

Любое информационное сообщение можно представить в виде двоичного кода: 011001010111001001010111110001010111....

Любому двоичному коду, содержащему N знаков, из которых k единиц можно приписать значение энтропии:

$S(N,k) = \ln(\Omega_{N,k})$, где $\Omega_{N,k}$ - число способов, каким можно составить строку, содержащую k единиц и $(N-k)$ нулей

- Сообщения типа 00000000.. 11111111... $S = 0$
- Сообщения с равным числом нулей и единиц имеют максимальную энтропию.
- Энтропия двух сообщений равна сумме их энтропий.



Любое информационное сообщение можно представить в виде двоичного кода: 011001010111001001010111110001010111....

$S(N,k) = \ln(\Omega_{N,k})$, где $\Omega_{N,k}$ - число способов, каким можно составить строку, содержащую k единиц и $(N-k)$ нулей

- Сообщения типа 00000000.. 11111111... $S = 0$ - информационная ценность невелика
- Сообщения с равным числом нулей и единиц имеют максимальную энтропию - скорее всего, это случайный набор символов.

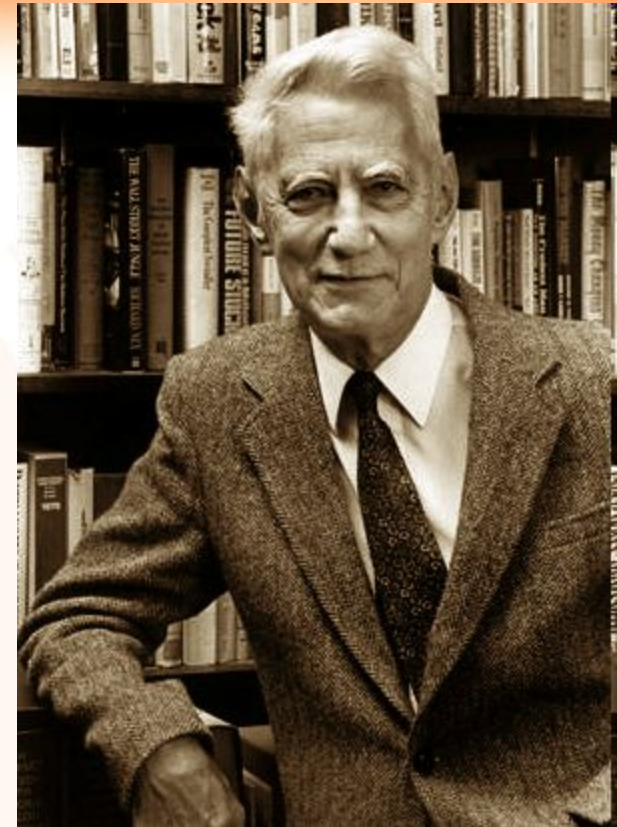
Реальные информационные сообщения, как правило, имеют:

- флуктуации (фрагменты) с заметным преобладанием нулей или единиц
- энтропию отличную как от минимальной, так и от максимальной (по некоторым расчетам ~20-30% от максимальной)



Понятие энтропии, как меры случайности и беспорядка в информационных системах, впервые введено Клодом Шенноном в статье «A Mathematical Theory of Communication», опубликованной в двух частях в [Bell System Technical Journal](#) в 1948 году.

Идеи Шеннона послужили основой разработки теории информации, теории коммуникационных систем, теории кодирования



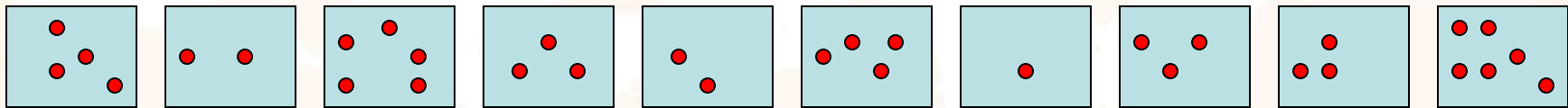
Claude Elwood Shannon
1916 - 2001



Энтропия в статистической физике и термодинамическая энтропия



Пусть у нас есть K ячеек (состояний) по которым распределены N “шариков” (частиц):



Совокупность чисел заполнения $(n_1, n_2, \dots, n_K) = n(i)$ образует «макросостояние» системы. Каждое макросостояние может быть реализовано большим числом способов $\Omega(n(i))$. Эта величина называется статистическим весом макросостояния.

$S(n(i)) = k \ln(\Omega(n(i)))$ - энтропия данной реализации (макросостояния)
Чем больше энтропия - тем выше вероятность реализации этого состояния.

При $N \gg K$ наибольшим стат. весом и энтропией обладает состояние, когда частицы равномерно распределены по ячейкам.



В равновесном состоянии система описывается макропараметрами: энтропию равновесного состояния можно выразить через макропараметры.

Правдоподобные соображения:

- статистический вес состояния тем больше, чем больше его фазовый объем для каждой молекулы (произведение объема и объема пространства импульсов (скоростей)):

$$\sim dx dy dz dp_x dp_y dp_z \sim V p^3 \sim V E^{3/2} \sim V T^{3/2}$$

- для N молекул фазовый объем следует возвести в степень N :

$$\Omega \sim V^N T^{3N/2}. \text{ Для многоатомного газа } \Omega \sim V^N T^{iN/2}$$

- из-за полной неразличимости молекул их перестановки не меняют микросостояния системы, отчего статистический вес следует

поделить на число возможных перестановок $\sim N!$

$$\begin{aligned} \Omega &\sim V^N T^{iN/2} / N!; \quad S = k \ln \Omega = k N \ln(V T^{i/2} / N C) = \\ &= \nu (R \ln(V/\nu) + c_V \ln T + s_0) \end{aligned}$$



Энтропия в статистической физике.



Энтропия макро-состояния системы в статистической физике = логарифм от числа возможных микро-реализаций этого состояния

$$S = k \ln \Omega \quad \text{Дж/К}$$

Она совпадает с классической термодинамической энтропией, выражаемой через параметры P, V, T .

- В состоянии термодинамического равновесия энтропия замкнутой системы имеет максимально возможное (при заданной энергии) значение.
- Если систему (при помощи внешнего воздействия)) вывести из равновесного состояния - ее энтропия может стать меньше
- Если неравновесную систему предоставить самой себе - она релаксирует в равновесное состояние и ее энтропия при этом возрастет
- **Энтропия изолированной системы при любых процессах не убывает, т.е. $\Delta S \geq 0$ – это т.н. Второе начало термодинамики**

Энтропия является количественной мерой беспорядка в системе.



Основы молекулярной и статистической физики

Лекция 08(11) Распределение молекул по скоростям и энергиям

.

Лектор: Доцент НИЯУ МИФИ, к.ф.-м.н.,
Ольчак Андрей Станиславович