Fizyka statystyczna

Rachunek prawdopodobieństwa

(szkic wstępu do zarysu problematyki)

P. F. Góra

https://zfs.fais.uj.edu.pl/pawel_gora

2023

Niech Ω będzie pewnym zbiorem, którego elementy nazywamy *zdarzeniami elementarnymi*. Dalej, rozważmy *zbiór borelowski* $\mathcal{B}$, czyli taki zbiór podzbiorów Ω, że

- $\Omega \in \mathcal{B}$
- Jeżeli $A \in \mathcal{B}$, to $\bar{A} \in \mathcal{B}$. ($\bar{A}$ oznacza dopełnienie zbioru.)
- Jeżeli $A, B \in \mathcal{B}$, to $A \cup B \in \mathcal{B}$. Co więcej, jeżeli $\{A_i\}$ oznacza dowolną *przeliczalną* rodzinę zbiorów należących do $\mathcal{B}$, to $\cup_i A_i \in \mathcal{B}$.

Elementy zbioru $\mathcal{B}$ nazywamy zdarzeniami. Widać, że zdarzenia elementarne są zdarzeniami. Z powyższych aksjomatów wynika także, że $\emptyset \in \mathcal{B}$, oraz jeżeli $A, B \in \mathcal{B}$, to $A \cap B \in \mathcal{B}$.

Przykłady

Jeśli rzucamy kostką, zdarzeniem elementarnym jest poszczególna ściana kostki; ścianom tym można przypisać liczby do 1 do 6. W tym przypadku $\Omega = \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$, natomiast zbiór $\mathcal{B}$ tworzą wszystkie podzbiory Ω.

Rozważmy zbiór wszystkich liczb rzeczywistych $\mathbb{R}$. Wszystkie przedziały domknięte $x_1 \leqslant x \leqslant x_2$ są borelowskie. Borelowskie są zbiory jednopunktowe (jednoliczbowe), przedziały otwarte i zbiory postaci $x \leqslant \lambda$ dla dowolnych $\lambda \in \mathbb{R}$. **Nie**borelowskie są zbiory niemierzalne, a także pewne szczególne zbiory mierzalne, na przykład zbiór Cantora.

Aksjomaty Kołmogorowa

Rozważamy pewien zbiór Ω i odpowiadającą mu borelowską przestrzeń zdarzeń $\mathcal{B}$. Każdemu zdarzeniu $A \in \mathcal{B}$ przyporządkowujemy pewną liczbę $P(A)$, zwaną prawdopodobieństwem zdarzenia A. Przyporządkowanie to musi spełniać nastepujące aksjomaty:

- $\forall A \in \mathcal{B}: \; P(A) \geqslant 0$.
- $P(\Omega) = 1$.
- Niech $\{A_i\}$ stanowi dowolną przeliczalną rodzinę zdarzeń wzajemnie rozłącznych z $\mathcal{B}$, to znaczy $A_i \cap A_j = \emptyset$ dla $i \neq j$. Wówczas

$$P\left(\cup_i A_i\right) = \sum_i P(A_i)\,.$$

Uwagi

1. Ponieważ $P(A) + P(\bar{A}) = P(\Omega) = 1$, to $P(A) \leqslant 1$.
2. Jeżeli $A_1 \subseteq A_2$, to $P(A_1) \leqslant P(A_2)$.
3. W ogólności

$$P(A_1 \cup A_2) = P(A_1) + P(A_2) - P(A_1 \cap A_2)\,.$$

“Praktyczna” miara prawdopodobieństwa

“Szkolna” definicja prawdopodobieństwa powiada, że

$$P(A) = \frac{\text{liczba zdarzeń elementarnych sprzyjających zdarzeniu } A}{\text{liczba wszystkich zdarzeń elementarnych}} \tag{1}$$

Tę definicję *tylko czasami* daje się zastosować w praktyce. Przykład: prawdopodobieństwo wyrzucenia parzystej liczby oczek wynosi

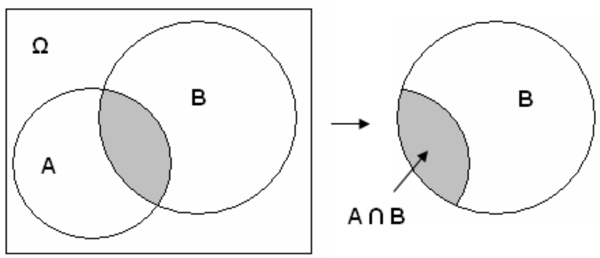
$$P(\text{parzysta}) = \frac{\#\{2,4,6\}}{\#\{1,2,3,4,5,6\}} = \frac{3}{6} = \frac{1}{2}.$$

W praktyce, jako fizycy*, posługujemy się następującą metodą: Przeprowadzamy $N \gg 1$ powtórzeń jakiegoś eksperymentu. Zliczamy wystąpienia pewnego zdarzenia A. Niech zdarzenie to zachodzi w $n(A,N)$ przypadkach. Wówczas

$$\lim_{N\to\infty} \frac{n(A,N)}{N} = P(A)\,. \tag{2}$$

*A raczej jako frekwentyści.

Prawdopodobieństwo warunkowe



Przypuśćmy, że *wiemy*, iż zaszło zdarzenie A. Co, dysponując tą wiedzą, możemy powiedzieć o prawdopodobieństwie zdarzenia B?

Pradopodobieństwo warunkowe zdarzenia B, pod warunkiem, że zaszło zdarzenie A, wynosi:

$$P(B|A) = \frac{P(A \cap B)}{P(A)} \tag{3}$$

Prawdopodobieństwo całkowite

Niech

$$\bigcup_{i=1}^{N} B_i = \Omega\,, \tag{4a}$$

przy czym $B_i \cap B_j = \emptyset$ dla $i \neq j$. Wówczas

$$P(A) = P(A \cap \Omega) = \sum_{i=1}^{N} P(A \cap B_i) = \sum_{i=1}^{N} P(A|B_i) P(B_i)\,. \tag{4b}$$

Wzór (4b) nazywamy wzorem na prawdopodobieństwo całkowite.

Twierdzenie Bayesa

Łączne prawdopodobieństwo wystąpienia zdarzeń A, B

$$P(A \cap B) \;=\; P(A|B)P(B)\,. \tag{5a}$$

Oczywiście

$$P(A \cap B) \;=\; P(B|A)P(A)\,, \tag{5b}$$

a zatem

$$P(B|A) = \frac{P(A|B)P(B)}{P(A)}\,. \tag{6}$$

Twierdzenie Bayesa pozwala obliczyć prawdopodobieństwo $P(B|A)$ jeśli znamy $P(A|B)$ oraz prawdopodobienstwa a priori $P(A), P(B)$. Prawdopodobieństwo $P(B|A)$ nazywa się *w tym kontekscie* prawdopodobieństwem a posteriori.

Przykład 1

Firma produkuje pewne urządzenie w dwu fabrykach. Pierwsza dostarcza 60% całej produkcji, przy czym 35% wyrobów tej fabryki jest wadliwych. Druga dostarcza 40% całej produkcji, przy czym tylko 25% wyrobów drugiej fabryki jest wadliwych. Klient kupił losowe urządzenie i okazało się, że jest ono wadliwe. Jakie jest prawdopodobieństwo, że zostało ono wytworzone w pierwszej fabryce?

Niech A oznacza "urządzenie wyprodukowano w pierwszej fabryce", B oznacza "urządzenie jest wadliwe". Mamy

$$\begin{aligned} P(A|B) &= \frac{P(B|A)P(A)}{P(B)} = \frac{P(B|A)P(A)}{P(B|A)P(A)+P(B|\bar{A})P(\bar{A})} \\ &= \frac{0.6\cdot 0.35}{0.6\cdot 0.35 + 0.25\cdot 0.4} \simeq 0.677 \end{aligned}$$

Przykład 2

Wiadomo, że na pewną chorobę choruje jedna osoba na 1000. Test wykrywający tę chorobę daje następujące wyniki:

- pozytywny z prawdopodobieństwem 95%, gdy badana osoba jest chora,
- negatywny z prawdopodobieństwem 5%, gdy badana osoba jest chora,
- pozytywny z prawdopodobieństwem 5%, gdy badana osoba jest zdrowa,
- negatywny z prawdopodobieństwem 95%, gdy badana osoba jest zdrowa.

Jakie jest prawdopodobieństwo, że osoba, u której test dał wynik pozytywny, rzeczywiście jest chora?

Oznaczmy C/Z fakt, że osoba jest chora/zdrowa oraz $+/-$, że test dał wynik pozytywny/negatywny. Z warunków zadania mamy

$$
\begin{array}{l|l}
P(+|C) = 0.95 & \textit{true positive} \\
P(+|Z) = 0.05 & \textit{false positive} \\
P(-|C) = 0.05 & \textit{false negative} \\
P(-|Z) = 0.95 & \textit{true negative} \\
\hline
P(C) = 0.001 &
\end{array}
$$

Szukamy $P(C|+)$.

$$
\begin{aligned}
P(C|+) &= \frac{P(+|C)P(C)}{P(+)} \\
&= \frac{P(+|C)P(C)}{P(+|C)P(C) + P(+|Z)P(Z)} \\
&= \frac{0.95 \cdot 0.001}{0.95 \cdot 0.001 + 0.05 \cdot 0.999} \simeq 0.02\,.
\end{aligned}
$$

Niezależność statystyczna

Dwa zdarzenia A, B są *statystycznie niezależne*, jeżeli

$$P(A \cap B) = P(A) \cdot P(B)\,. \tag{7}$$

W takim wypadku zachodzi

$$P(A|B) = \frac{P(A \cap B)}{P(B)} = \frac{P(A)P(B)}{P(B)} = P(A)\,. \tag{8}$$

Ta obserwacja uzasadnia przyjętą nazwę tej kategorii zdarzeń.

Zmienne losowe

Dyskretna zmienna losowa to kolekcja wszystkich możliwych zdarzeń elementarnych wraz z ich prawdopodobieństwami. Realizacja dyskretnej zmiennej losowej daje jedno z możliwych zdarzeń elementarnych i czyni to z odpowiednim prawdopodobieństwem. Inna realizacja może dać inne zdarzenie losowe, ale gdybyśmy mieli odpowiednio dużo realizacji, częstości wystąpienia poszczególnych zdarzen elementarnych *powinny* odpowiadać ich prawdopodobieństwom; patrz uwaga o interpretacji frekwentystycznej wyżej.

Ciągła zmienna losowa nie może zawierać prawdopodobieństw wszyskich możliwych zdarzeń elementarnych, a jedynie pewien rozkład prawdopodobieństwa. Jak to można zrobić?

Rozważmy rodzinę zbiorów borelowskich na $\mathbb{R}$. Niech $P_x(\lambda) = P(x \leqslant \lambda)$ oznacza *jakiś* sposób† przyporządkowania prawdopodobieństwa zdarzeniu "wylosowano liczbę niewiększą od λ". $P_x(\lambda)$ nazywa się dystrybuantą zmiennej losowej.

W każdym możliwym przypadku musi zachodzić

$$\lambda \to +\infty : \quad P_x(\lambda) \to 1 \tag{9a}$$

$$\lambda \to -\infty : \quad P_x(\lambda) \to 0 \tag{9b}$$

Jeżeli $P_x(\lambda)$ jest różniczkowalne, to

$$\rho(\lambda) = \frac{dP_x(\lambda)}{d\lambda} \,. \tag{10}$$

†Sposobów tych jest nieskończenie wiele!

W tej sytuacji

$$P_x(\lambda) = \int\limits_{-\infty}^{\lambda} \rho(x)dx\,, \tag{11}$$

przy czym *musi* zachodzić

$$\rho(x) \geqslant 0\,. \tag{12}$$

Funkcję $\rho(x)$ nazywamy gęstością rozkładu prawdopodobieństwa. Mówiąc niezbyt precyzyjnie, $\rho(x)dx$ jest prawdopodobieństwem wylosowania liczby z infinitezymalnie małego przedziału $(x, x+dx)$. Bardzo często ciągłe rozkłady zmiennej losowej określa się przez podanie ich gęstości.

Zachodzi

$$P(x_1 \leqslant x \leqslant x_2) = \int\limits_{x_1}^{x_2} \rho(x)dx\,. \tag{13a}$$

W szczególności

$$\int\limits_{-\infty}^{+\infty} \rho(x)dx = 1\,. \tag{13b}$$

Wszystkie powyższe wyyrażenia (np prawdopodobieństwo całkowite itd.) można łatwo przepisać w języku ciągłych rozkładów prawdopodobieństwa.

Przykład: Jednorodny rozkład prawdopodobieństwa

$$\rho(x) = \begin{cases} 0 & x < a \\ \frac{1}{b-a} & a \leqslant x \leqslant b \\ 0 & x > b \end{cases} \tag{14}$$

Jest to **ciągły** rozkład prawdopodobieństwa.

Przykład: Rozkład Gaussa

$$\rho(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right) \tag{15}$$

Rozkład ten nazywany jest także *rozkładem normalnym*. Niekiedy jest on oznaczany $N(\mu, \sigma^2)$. Jest to **ciągły** rozkład prawdopodobieństwa.

Przykład: Rozkład dwumienny

Rozważmy zmienną losową, która może przyjmować tylko dwie wartości, x_1 z prawdopodobieństwem p oraz x_2 z prawdopodobieństwem $1-p$. Rozpatrujemy n realizacji tej zmiennej losowej. Jakie jest prawdopodobieństwo, że zdarzenie x_1 wystąpiło dokładnie k razy?

$$B(n,p;k) = \binom{n}{k} p^k (1-p)^{n-k} \tag{16}$$

dla $0 \leqslant k \leqslant n$ i 0 poza tym. Rozkład ten nazywany jest także rozkładem Bernoullego. Jest to **dyskretny** rozklad prawdopodobieństwa.

Przykład: Rozkład Poissona

W rozkładzie dwumiennym dokonajmy przejścia granicznego

$$\begin{cases} p \to 0 \\ n \to \infty \\ pn = \lambda = \text{const} \end{cases} \tag{17}$$

Otrzymujemy

$$\rho(\lambda; k) = \frac{\lambda^k}{k!} e^{-k}\,, \quad k = 0, 1, 2, \dots \tag{18}$$

Jest to rozkład **dyskretny**. k jest liczbą zdarzeń w przedziale $(0, T)$, jeżeli prawdopodobieństwo dokładnie jednego zdarzenia w czasie dt wynosi $\lambda dt/T$; bierzemy teraz $dt = T/n$, $p = \lambda/n$ i przechodzimy do granicy.

Klasyczne przykłady rozkładu Poissona to liczba rozpadów promieniotwórczych w jednostce czasu lub liczba rozmów telefonicznych zainicjowanych w jednostce czasu. Można pokazać, że rozkład Poissona pojawia się zawsze w sytuacji, w której mamy nieskończenie wiele “kontenerów”, przy czym do każdego z nich może wpaść całkowita liczba elementów i zawartość poszczególnych “kontenerów” jest niezależna od zawartości innych kontenerów.

Momenty zmiennej losowej

Niech x będzie zmienną losową w $\mathbb{R}$ o gęstości $\rho(x)$ i niech $H(x)$ będzie jakąś funkcją tej zmiennej losowej. Wartość oczekiwaną tej funkcji definiujemy jako

$$\langle H(x) \rangle = \int\limits_{-\infty}^{\infty} H(x)\rho(x)dx \,. \tag{19}$$

Uwaga: Całka w (19) nie musi istnieć! Jeśli całka w (19) nie istnieje, mówimy, że dana wielość H **nie posiada wartości średniej**.

Szczególnie ważnymi wielkościami są (jeśli istnieją)

wartość oczekiwana zmiennej losowej $\langle x \rangle = \int\limits_{-\infty}^{\infty} x \rho(x) dx$

drugi moment zmiennej losowej $\left\langle x^2 \right\rangle = \int\limits_{-\infty}^{\infty} x^2 \rho(x) dx$

wyższe momenty zmiennej losowej $\langle x^n \rangle = \int\limits_{-\infty}^{\infty} x^n \rho(x) dx$

Wariancja zmiennej losowej, jeśli istnieje, zdefiniowana jest przez

$$\mathrm{Var}(x) = \left\langle (x - \langle x \rangle)^2 \right\rangle \tag{20}$$

Funkcja charakterystyczna

Niech $\rho(x)$ będzie jakąś gęstością rozkładu prawdopodobieństwa. Definiujemy funkcję charakterystyczną:

$$G(k) = \left\langle e^{ikx} \right\rangle = \int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} \rho(x) dx \tag{21}$$

Funkcja charakterystyczna jest, z dokładnością do konwencji normalizacyjnej, równa transformacie Fouriera gęstości rozkładu prawdopodobieństwa.

Rozwinięcie kumulantów

Jeżeli wszystkie momenty rozkładu istnieją, funkcję charakterystyczną możemy przedstawić w postaci szeregu

$$G(k) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(ik)^n}{n!} \left\langle x^n \right\rangle \tag{22}$$

Uwaga: Funkcja charakterystyczna istnieje nawet gdy rozwinięcie (22) nie istnieje, to znaczy, gdy nie istnieją wyższe momenty.
Logarytm funkcji charakterystycznej możemy z kolei przedstawić jako

$$\ln G(k) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(ik)^n}{n!} \kappa_n \,, \tag{23}$$

gdzie κ_n to kolejne *kumulanty*:

$$\kappa_1 = \langle x \rangle \tag{24a}$$

$$\kappa_2 = \mathrm{Var}(x) = \left\langle x^2 \right\rangle - \langle x \rangle^2 \tag{24b}$$

$$\kappa_3 = \left\langle x^3 \right\rangle - 3 \left\langle x^2 \right\rangle \langle x \rangle + 2 \langle x \rangle^3 \tag{24c}$$

itd.

Momenty rozkładu normalnego

Dla rozkładu normalnego (15)

- $\langle x \rangle = \kappa_1 = \mu$
- $\mathrm{Var}(x) = \kappa_2 = \sigma^2$
- $G(k) = \exp\left(i\mu k - \frac{1}{2}\sigma^2 k^2\right)$ (transformata Fouriera zmiennej Gaussowskiej jest Gaussowska)
- wszystkie wyższe momenty nieparzyste znikają, wszystkie wyższe momenty parzyste mają postać $1 \cdot 3 \cdot \cdots \cdot (n-1) \cdot \sigma^2$, wobec czego
- wszystkie wyższe kumulanty, począwszy od trzeciego, znikają.

Rozklad Cauchy'ego

Funkcja gęstości rozkładu Cauchy'ego

$$\rho(x) = \frac{1}{\pi} \cdot \frac{1}{x^2 + \gamma^2} \tag{25}$$

tak wolno zmierza do zera w $\pm\infty$, że wartość oczekiwana zmiennej losowej o takim rozkładzie istnieje tylko w sensie wartości głównej, natomiast wyższe momenty nie istnieją. Funkcja charakterystyczna ma postać

$$G(k) = e^{-\gamma|k|}, \quad (\gamma > 0) \tag{26}$$

Wielowymiarowe zmienne losowe

Pojęcie ciągłej zmiennej losowej można uogólnić na przypadek wielowymiarowy: Rozpatruje się d-wymiarowe wektory $\mathbf{x}$ z przestrzeni $\mathbb{R}^d$. Podobnie jak w przypadku jednowymiarowym, wprowadza się wielowymiarową gęstość rozkładu prawdopodobieństwa $\rho(\mathbf{x}) = \rho(x_1, x_2, \ldots, x_d)$. Na przypadek wielowymiarowy można też uogólnić pojęcia wartości oczekiwanej, momentów, funkcji charakterystycznej itd.

Przypuśćmy, że mamy dwymymiarową zmienną losową o gęstości rozkładu $\rho(x, y)$. Można wówczas zdefiniować brzegowy rozkład prawdopodobieństwa

$$\rho_x(x) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \rho(x, y) dy \tag{27}$$

Jest to efekt “rzutowania” rozkładu dwuwymiarowego na jedną ze zmiennych.

Przykład: Wielowymiarowy rozkład Gaussa

Niech $\mathbf{x}, \mathbf{a} \in \mathbb{R}^N$, $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{N\times N}$ będzie macierzą symetryczną i dodatnio określoną. $\mathbf{a}$ jest ustalonym wektorem, $\mathbf{x}$ jest N-wymiarową zmienną losową. Wówczas

$$\rho(\mathbf{x}) = \sqrt{\frac{\det \mathbf{B}}{(2\pi)^N}} \exp\left(-\tfrac{1}{2}(\mathbf{x}-\mathbf{a})^T \mathbf{B}(\mathbf{x}-\mathbf{a})\right) \tag{28}$$

jest N-wymiarowym rozkładem Gaussa. Jego rozkłady brzegowe są jednowymiarowymi rozkładami Gaussa, a $\langle \mathbf{x} \rangle = \mathbf{a}$.

Zmiana zmiennych w rozkładach prawdopodobieństwa

Niech $x \in \mathbb{R}$ będzie jakąś zmienną losową, o rozkładzie $\rho_x(x)$. Niech $z = f(x)$ będzie jakąś funkcją zmiennej losowej x. z jest samo zmienną losową. Jaki jest jej rozkład prawdopodobieństwa? (Ściślej: Jaka jest gęstość rozkładu prawdopodobieństwa zmiennej losowej z?)

$$\rho_z(z) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \delta(z - f(x))\rho_x(x)dx = \sum_i \frac{1}{|f'(x_i(z))|}\,\rho_x(x_i(z)) \tag{29}$$

gdzie $\delta(\cdot)$ oznacza deltę Diraca, zaś $x_i(z)$ oznaczają rozwiązania równania $z = f(x)$ ze względu na x; sumujemy po wszystkich możliwych rozwiązaniach.

Przykład

Przypuśćmy, że zmienna losowa x ma rozkład jednostajny na przedziale $[0, 1]$. Niech $z = -\ln x$. $z \in [0, +\infty)$. Jaki jest rozkład zmiennej z?

$$\rho_z(z) = \int\limits_0^1 \delta(z + \ln x) \cdot 1\, dx$$

Podstawiam $\ln x = -u$, $dx/x = -du$, $dx = -x\, du = -e^{-u} du$. $0 \to +\infty$, $1 \to 0$. Zatem

$$\rho_z(z) = \int\limits_{+\infty}^{0} \left(-e^{-u}\delta(z-u)\right) du = \int\limits_0^{\infty} e^{-u}\delta(z-u) du = e^{-z}\,.$$

Centralne Twierdzenie Graniczne

Niech $\{X_i\}_{i=1}^{\infty}$ będą *niezależnymi* zmiennymi losowymi pochodzącymi z tego samego rozkładu (ang. Independent, Identically Distributed random variables, *i.i.d.*), przy czym rozkład ten posiada dwa pierwsze momenty‡. Wówczas rozkład zmiennej losowej będącej sumą zmiennych X_i dąży do rozkładu Gaussa.

Mówiąc bardziej precyzyjnie, rozkład zmiennej losowej

$$\sqrt{n}\left(\left(\frac{1}{1}\sum_{i}^{n} X_i\right) - \mu\right) \tag{30}$$

dąży do rozkładu normalnego $N(0,\sigma^2)$ gdy $n \to \infty$. μ oznacza średnią wyjściowego rozkładu a σ^2 jego wariancję.

‡To nie jest oczywiste założenie!

Uogólnienie centralnego twierdzenia granicznego

Jeśli jakiś rozkład prawdopodobieństwa ma tę własność, że suma dwóch zmiennych losowych o takim rozkładzie ma taki sam rozkład prawdopodobieństwa, co najwyżej przesunięty i przeskalowany, rozkład taki nazywamy *rozkładem stabilnym*.

Formalnie, niech X oraz $\{X_i\}_{i=1}^{\infty}$ będą i.i.d., pochodzącymi z pewnego rozkładu. Rozkład ten jest stabilny, jeśli dla każdego n istnieją takie stałe c_n, d_n, że zmienne

$$X_1 + X_2 + \cdots + X_n$$

oraz

$$c_n X + d_n$$

mają ten sam rozkład.

Istnieje nieskończenie wiele rozkładów stabilnych, przy czym tylko dla trzech z nich — rozkładu Gaussa, rozkładu Cauchy'ego i rozkładu Levy'ego-Smirnowa — można podać ich funkcje gęstości *explicite*. We *wszystkich* wypadkach znane są funkcje charakterystyczne rozkładów stabilnych. Spośród rozkładów stabilnych jedynie rozkład Gaussa ma dwa skończone momenty.

Uogólnienie centralnego twierdzenia granicznego głosi, że rozkład sumy i.i.d. zmiennych losowych, pochodzących z rozkładu, który nie ma skończonego drugiego lub pierwszego i drugiego momentu, jest zbieżny do jakiegoś rozkładu stabilnego.

Pojęcie entropii informacyjnej

Niech pewien układ fizyczny może znajdować się w jednym z N stanów $\{\omega_i\}_{i=1}^N$. Każdy z tych stanów może być przybrany z prawdopodobieństwem p_i. $\forall i\colon\ p_i \geqslant 0$, $\sum_i p_i = 1$.

Kiedy mamy *pełną* informację o układzie? Kiedy wiemy, że układ z całą pewnością znajduje się w konkretnym, znanym nam stanie ω_{i_0}: $p_{i_0} = 1$, $p_{i\neq i_0} = 0$.

Kiedy mamy *najmniejszą* informację o układzie? Gdy każdy stan układu jest obsadzony z jednakowym prawdopodobieństwem: $p_1 = p_1 = \cdots = p_N$ $(= 1/N)$.

Im *mniej* prawdopodobny jest stan, w którym znajduje się układ, tym *bardziej* uporządkowany nam się wydaje.

Jest to uogólnienie potocznej obserwacji, w której stany uznawane za uporządkowane są, w jakimś sensie, wyróżnione spośród wielu innych możliwych stanów.

Miara informacji

Przykład: w urnie jest sto ponumerowanych kul. Kule o numerach 1,2 są czerwone. Kule o numerach 3,4,. . . ,100 są niebieskie. Ktoś wylosował jedną kulę i mówi nam

- Wylosowałem kulę czerwoną   lub też
- Wylosowałem kulę niebieską

W którym przypadku dowiemy się więcej o szczegółowym ("mikroskopowym") wyniku losowania?

Dowiemy się *więcej*, gdy uzyskany wynik będzie *mniej* prawdopodobny.

Miara informacji powinna być

1. Ciągłą funkcją prawdopodobieństwa zajścia zdarzenia,
2. Musi być tym większa, im prawdopodobieństwo jest mniejsze,
3. Jeżeli zdarzenie jest sumą dwu zdarzeń *niezależnych*, miara informacyjna zdarzenia łącznego musi być równa sumie miar zdarzeń składowych.

Funkcją, która spełnia te wymagania, jest

$$I(\omega_i) = \log_2 \left(\frac{1}{P(\omega_i)} \right) = -\log_2 P(\omega_i) \;\; (= -\log_2 p_i)$$

Można uzasadnić, że logarytm (przy podstawie większej od 1) jest jedyną "cywilizowaną" funkcją spełniającą powyższe wymagania.

Entropia Gibbsa-Shannona

Claude Shannon, 1948: Entropia informacyjna jest średnią miarą informacji zawartej w danym rozkładzie.

$$S = -\sum_{i=1}^{N} p_i \log_2 p_i$$

Jeśli dopuścimy podstawy inne, niż 2, a także (potencjalnie) pozwolimy na wyrażanie entropii w jakichś jednostkach, otrzymamy entropię Gibbsa-Shannona:

$$S = -k\sum_{i=1}^{N} p_i \ln p_i \tag{31}$$

gdzie k jest (na razie niezidentyfikowaną) stałą dodatnią. W przypadku rozkładów ciągłych zamiast (31) mamy

$$S = -k \int\limits_{-\infty}^{\infty} \rho(x)\, \ln \rho(x)\, dx\,. \tag{32}$$

Gdybyśmy mieli do czynienia z układem kwantowym znajdującym się w stanie opisanym operatorem gęstości $\boldsymbol{\rho}$, odpowiednikiem entropii Gibbsa-Shannona byłoby

$$S = -k\mathrm{Tr}\left\{\boldsymbol{\rho}\, \ln \boldsymbol{\rho}\right\}. \tag{33}$$

Zwróćmy uwagę, że ponieważ operator $\boldsymbol{\rho}$ jest hermitowski i dodatnio określony, jego operatorowy logarytm jest dobrze zdefiniowany.

Rozkład maksymalizujący entropię

Rozpatrujemy skończone, dyskretne rozkłady prawdopodobieństwa. Czy można wskazać rozkład, którego entropia jest możliwie największa? Okazuje się, że tak. W tym celu należy znaleźć maksimum warunkowe entropii (31) przy warunku $\sum_i p_i = 1$. Maksymalizujemy zatem

$$\mathcal{L} = -k \sum_{i=1}^{N} p_i \ln p_i - \lambda \left(\sum_{i=1}^{N} p_i - 1 \right), \tag{34}$$

gdzie λ jest *mnożnikiem Lagrange'a*. Otrzymujemy

$$\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial p_i} = -k\ln p_i - k - \lambda = 0 \tag{35a}$$

$$\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial \lambda} = \sum_{i=1}^{N} p_i - 1 = 0 \tag{35b}$$

Pierwsze z równań (35) musi być spełnione *dla wszystkich* i. Wynika z tego, że *wszystkie prawdopodobieństwa muszą być równe*. Zatem $\forall i\colon$ $p_i = \alpha$. Z drugiego z równań (35) wynika wówczas, że $\forall i\colon$ $p_i = 1/N$. Łatwo teraz obliczyć, że wartość entropii wynosi wówczas $k\ln N$.

Rekapitulując, rozkład jednostajny, w którym wszystkie stany są jednakowo prawdopodobne, maksymalizuje entropię Gibbsa-Shannona. Maksymalna wartość entropii wynosi

$$S = k \ln N \,, \tag{36}$$

gdzie N jest liczbą dostępnych stanów. Równość prawdopodobieństw wszystkich stanów odpowiada równości prawdopodobieństw *a priori* w zespole mikrokanonicznym, a maksymalna wartość entropii — entropii Boltzmanna.

Rozkład maksymalizujący entropię przy dodatkowym warunku

Załóżmy, że każdemu stanowi i odpowiada pewna wielkość E_i. Żądamy, aby wartość oczekiwana tych wielkości była z góry ustalona:

$$\sum_{i=1}^{N} E_i p_i = \bar{E}\,. \tag{37}$$

Jaki rozkład prawdopodobieństwa maksymalizuje entropię przy takim warunku dodatkowym?

Znów użyjemy mnożników Lagrange'a, ale tym razem będą potrzebne dwa mnożniki:

$$\mathcal{L} = -k \sum_{i=1}^{N} p_i \ln p_i - \lambda_1 \left(\sum_{i=1}^{N} p_i - 1 \right) - \lambda_2 \left(\sum_{i=1}^{N} p_i E_i - \bar{E} \right). \tag{38}$$

Stąd

$$\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial p_i} = -k\ln p_i - k - \lambda_1 - \lambda_2 E_i = 0\,, \tag{39a}$$

$$\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial \lambda_1} = -\sum_{i=1}^{N} p_i + 1 = 0\,, \tag{39b}$$

$$\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial \lambda_2} = -\sum_{i=1}^{N} E_i p_i + \bar{E} = 0\,. \tag{39c}$$

Z pierwszego z równań (39) otrzymujemy

$$\ln p_i = 1 - \frac{\lambda_1}{k} - \frac{\lambda_2}{k}E_i\,, \tag{40a}$$

$$p_i = \exp\left(1-\frac{\lambda_1}{k}\right)\exp\left(-\frac{\lambda_2}{k}E_i\right) = C\,\exp\left(-\frac{\lambda_2}{k}E_i\right)\,, \tag{40b}$$

gdzie C jest stałą w tym sensie, że nie zależy od numeru stanu, i. Drugie z równań (39) daje

$$\sum_{i=1}^{N} \exp\left(-\frac{\lambda_2}{k}E_i\right) = \frac{1}{C}\,, \tag{41}$$

a ostatnie

$$\sum_{i=1}^{N} E_i \exp\left(-\frac{\lambda_2}{k}E_i\right) = \frac{\bar{E}}{C}\,. \tag{42}$$

Różniczkując równanie (41) po λ_2 otrzymujemy

$$\sum_{i=1}^{N} \left(-\frac{E_i}{k}\right) \exp\left(-\frac{\lambda_2}{k}E_i\right) = -\frac{1}{C^2}\,\frac{dC}{d\lambda_2}\,, \tag{43}$$

a po skorzystaniu z (42)

$$\begin{aligned} \frac{\bar{E}}{kC} &= \frac{1}{C^2}\frac{dC}{d\lambda_2}\,, && \text{(44a)} \\ \frac{\bar{E}}{k}C &= \frac{dC}{d\lambda_2}\,. && \text{(44b)} \end{aligned}$$

Rozwiązaniem równania różniczkowego (44b) jest

$$C = C_0\, e^{\lambda_2 \bar{E}/k}\,. \tag{45}$$

Po skorzystaniu z (41)

$$C_0 = \frac{1}{e^{\lambda_2 \bar{E}/k} \sum\limits_{i=1}^{N} e^{-\lambda_2 E_i/k}} \tag{46}$$

i ostatecznie, łącząc (40b), (45) i (46), otrzymujemy

$$
\begin{aligned}
p_i &= \underbrace{\underbrace{\frac{1}{e^{\lambda_2\bar{E}/k}\sum\limits_{i=1}^{N} e^{-\lambda_2 E_i/k}}}_{C_0}\, e^{\lambda_2\bar{E}/k}}_{C}\; e^{-\lambda_2 E_i/k} \\
&= \frac{e^{-\lambda_2 E_i/k}}{\sum\limits_{j=1}^{N} e^{-\lambda_2 E_j/k}}\,. \qquad (47)
\end{aligned}
$$

Jeśli teraz *oznaczymy* ☺ $\lambda_2 = 1/T$,

$$
\begin{aligned}
p_i &= Z^{-1} e^{-\frac{E_i}{kT}}\,, \qquad (48a) \\
Z &= \sum_{j=1}^{N} e^{-\frac{E_j}{kT}}\,. \qquad (48b)
\end{aligned}
$$

Maksymalna wartość entropii, odpowiadająca rozkładowi (48), wynosi

$$
\begin{aligned}
S &= -k\sum_{i=1}^{N} p_i \ln p_i = -k\sum_{i=1}^{N} p_i\left(-\frac{E_i}{kT} - \ln Z\right) \\
&= \frac{1}{T}\sum_{i=1}^{N} E_i p_i + k\ln Z \sum_{i=1}^{N} p_i = \frac{1}{T}\bar{E} + k\ln Z \\
&= \frac{1}{T}\bar{E} + k\left(-\frac{1}{kT}F\right) = \frac{1}{T}\bar{E} - \frac{1}{T}F\,, \qquad (49) \\
F &= \bar{E} - TS\,, \qquad (50)
\end{aligned}
$$

gdzie *oznaczyliśmy* ☺ $Z = \exp(-F/kT)$. Również $\partial S/\partial\bar{E} = 1/T$. Jak widzimy, wyrażenia (48), (50) odpowiadają zespołowi kanonicznemu. Przy narzuconym więzie na wartość oczekiwaną pewnej wielkości, entropia informacyjna Gibbsa-Shannona odpowiada zespołowi kanonicznemu.