А. А. Лодкин

Одна задача об условном экстремуме: вывод канонического распределения Гиббса

В этом примере рассматривается задача статистической физики о распределении N частиц по энергиям. Размерность фазового пространства системы равна $6N$. На практике N огромно — сравнимо с числом Авогадро $6 \cdot 10^{23}$.

Предположим, что система может находиться в одном из состояний $1, \ldots, n$, характеризующихся значениями энергии $E_1, \ldots, E_n$. Допустим, что температура T системы фиксирована (это обеспечивается, например, взаимодействием (обменом энергии) нашей системы со значительно бо́льшим источником теплоты). Имеет место физический закон: вероятность p_i, с которой система пребывает в состоянии i, задается *распределением Гиббса*:

$$p_i = \frac{e^{-\beta E_i}}{\sum\limits_{j=1}^{n} e^{-\beta E_j}}.$$

Физический смысл константы: $\beta = 1/kT$, где k — постоянная Больцмана.

Функцию $H(p_1, \ldots, p_n) = -\sum\limits_{i=1}^{n} p_i \ln p_i$ физики называют *энтропией Больцмана — Гиббса*, а специалисты по теории информации *энтропией Шеннона*. Будем считать, что выражение $p \ln p$ принимает нулевое значение при $p = 0$. Мы выведем справедливость распределения Гиббса из принципа «природа максимизирует энтропию». Поскольку p_i — вероятности, выполняются условия $p_i \geqslant 0, \sum_i p_i = 1$. Мы будем также для простоты предполагать, что средняя энергия системы $\sum_i p_i E_i = E$ постоянна (в отсутствие этого предположения нужно вместо H рассматривать и минимизировать *свободную энергию* $E - kTH$).

Будем искать максимум энтропии при двух ограничениях методом множителей Лагранжа. Введем функции $F(p_1, \ldots, p_n) = \sum_i p_i$, $\quad G(p_1, \ldots, p_n) = \sum_i p_i E_i$, множествами уровня которых заданы ограничения. Для поиска точек $p = (p_1, \ldots, p_n)$, «подозрительных» на экстремум, решим систему

$$\begin{cases} \nabla H(p) = \lambda \nabla F(p) + \mu \nabla G(p), \\ F(p) = 1, \\ G(p) = E. \end{cases}$$

Получаем:

$$\begin{cases} -\ln p_i - 1 = \lambda + \mu a_i, \; i = 1, \ldots, n, \\ \sum\limits_i p_i = 1, \\ \sum\limits_i p_i E_i = E, \end{cases}$$

откуда $p_i = e^{-\lambda - 1} e^{-\mu E_i} = \Lambda e^{-\mu E_i}$, причем $\Lambda = e^{-\lambda-1} = (\sum_i e^{-\mu E_i})^{-1}$. Таким образом, из третьего равенства получаем:

$$\Lambda \sum_i E_i \, e^{-\mu E_i} = E.$$

Поскольку левая часть равенства представляет собой непрерывную функцию от μ, строго убывающую на $\mathbb{R}$ от $+\infty$ до 0, это равенство достигается при единственном значении μ.

Таким образом, существует единственная «подозрительная» на экстремум точка p с положительными координатами p_i. Функция H на компактном множестве (*симплексе*)

$$\{(p_1 \ \ldots, p_n) \mid \sum_i p_i = 1, p_i \geqslant 0\}$$

неотрицательна, достигает наибольшего и наименьшего значений, обращается в нуль на границе. Следовательно, найденная подозрительная точка и есть искомая точка максимума.