1. Matematický aparát

1.1. **Stirlingova formule.** Víme, že ve statistice a kombinatorice často používaný objekt je faktoriál. S tím se však nesmírně těžko pracuje. Proto je vhodné si jej vyjádřit nějak přibližně. Vyjdeme z jeho logaritmu:

$$\ln n! = \sum_{k=1}^{n} \ln k$$

Pro dostatečně vysoké n je možné nahradit sumu integrálem a z diskrétního problému udělat spojitý. Zintegrovat $\ln x$ už ale umíme:

$$\int \ln k \, dk = k(\ln k - 1) = k(\ln k - \ln e) = k \ln \frac{k}{e} = \ln \left(\frac{k}{e}\right)^k$$

Porovnáme-li výše uvedené výrazy, zjistíme, že

$$\ln n! \approx \ln \left(\frac{n}{e}\right)^n \qquad \Rightarrow \qquad n! \approx \left(\frac{n}{e}\right)^n$$

To je tzv. *Stirlingova formule* odhadující faktoriál pro vysoká n. Přesnější odhad je $\sqrt{2\pi n}\left(\frac{n}{e}\right)^n$.

1.2. **Základní definice počtu pravděpodobnosti.** Zaveďme si potřebné pojmy počtu pravděpodobnosti:

Klasická pravděpodobnost je definována jako limita podílu

$$p(A) = \lim_{n\to+\infty} \frac{n_A}{n}$$

kde n je celkový počet pozorovaných opakování náhodného pokusu a n_A počet případů příznivých jevu A. Pravděpodobnost p udává relativní četnost výskytu jevu A. Tato definice je svázána s počátky rozvoje teorie pravděpodobnosti a je již vpravdě historická, nám však bude stačit. Je ovšem použitelná jen pro diskrétní úlohy — ve spojitých problémech si musíme vypomoci hustotou pravděpodobnosti. Pravděpodobnost (i ve spojitém případě) má následující vlastnosti:

(1) $0 \le p(A) \le 1$
(2) $p(S) = 1$, $p(\emptyset) = 0$
(3) $p(A \cup B) = p(A) + p(B) \qquad$ pro $p(A \cap B) = 0$

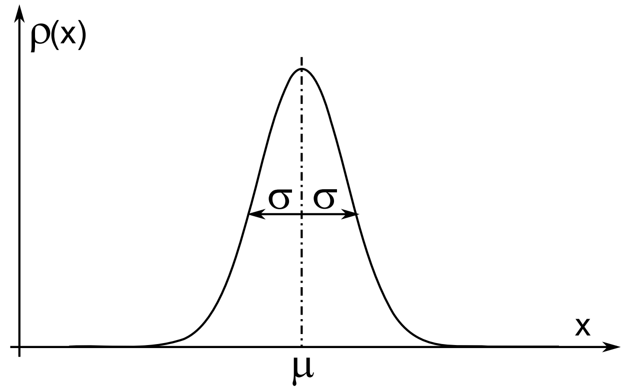
kde S značí jev jistý, $\emptyset$ jev vyloučený a výraz $p(A \cup B)$ pravděpodobnost toho, že se realizuje alespoň jeden z jevů A, B.

Hustota pravděpodobnosti ϱ je funkce, analogická s obyčejnou hustotou (hmotnosti). Stejně tak, jako hustota hmotnosti hovoří o rozdělení hmoty v tělese (a hmotnost tělesa nebo jeho části získáme integrací), tak hustota pravděpodobnosti udává rozložení pravděpodobnosti a pravděpodobnost toho, že nastane jev z nějaké spojité oblasti (například že $A : x \in (-1, +1)$), získáme integrací přes tuto oblast (zde $p(A) = \int_{-1}^{+1} \varrho(x)dx$). Pravděpodobnosti toho, že padnou čísla $\{2, 3, 4\}$ na kostce a že veličina x je z intervalu $(2, 4)$, se pak získají opticky velmi podobně:

$$p(A) = \sum_{\gamma=2}^{4} w_\gamma \qquad\qquad p(A) = \int_2^4 \varrho(x)dx$$

V tomto případě $w_2 = w_3 = w_4 = \frac{1}{6}$, funkce $\varrho(x)$ pak má tvar podle toho, o jaký jev se jedná. Povšimněme si, že pravděpodobnost toho, že $x =$ *přesné číslo*, je ve spojitém případě nulová. Na pravděpodobnosti základních jevů (tj. takových, která se neskládají z nějakých jiných, např. jev: na kostce padne číslo k) lze pohlížet jako na diskrétní hustotu pravděpodobnosti.

Typickým příkladem hustoty pravděpodobnosti je Gaussovo rozdělení:



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

Takové rozdělení říká, že provedeme-li náhodný pokus, hodnota x padne nejspíše někam do okolí μ.

Důležitou podmínkou je tzv. *normovací podmínka*

$$\sum_\gamma w_\gamma = 1 \qquad\qquad \int_\gamma \varrho(x) dx = 1$$

Zde γ jde přes všechny jevy, které vůbec mohou nastat. Toto tvrzení je vcelku zřejmé — zrealizujeme-li pokus, pak je jisté, že některou z přípustných možností výsledku určitě uvidíme.

Střední hodnoty (nebo také očekávané hodnoty) definujeme jako

$$\langle x \rangle = \sum_\gamma x_\gamma w_\gamma$$

$$\langle x \rangle = \int_\gamma x \varrho(x) dx$$

Udávají nám, která oblast je pro dané rozdělení nejvýznamnější, tj kde máme s největší pravděpodobností očekávat výsledek pokusu. Pro již zmíněné Gaussovo rozdělení je $\langle x \rangle = \mu$, což je nanejvýš názorné.

Střední hodnoty libovolné funkce x pak definujeme jako

$$\langle f(x) \rangle = \sum_\gamma f(x_\gamma) w_\gamma$$

$$\langle f(x) \rangle = \int_\gamma f(x) \varrho(x) dx$$

Rozptyl (též varianci) definujeme jako

$$D(x) = \sum_\gamma (x_\gamma - \langle x \rangle)^2 w_\gamma$$

$$D(x) = \int_\gamma (x - \langle x \rangle)^2 \varrho(x) dx$$

resp.

$$D(f) = \sum_\gamma (f(x_\gamma) - \langle f(x) \rangle)^2 w_\gamma$$

$$D(f) = \int_\gamma (f(x) - \langle f(x) \rangle)^2 \varrho(x) dx$$

Vzhledem k vlastnostem integrálů a sum lze rozptyl vyjádřit také takto (nezapomeňte, že $\langle x \rangle$ je reálné číslo):

$$D(x) = \left\langle (x - \langle x \rangle)^2 \right\rangle = \left\langle x^2 - 2 \langle x \rangle x - \langle x \rangle^2 \right\rangle =$$
$$= \left\langle x^2 \right\rangle - 2 \langle x \rangle \langle x \rangle + \langle x \rangle^2 = \left\langle x^2 \right\rangle - \langle x \rangle^2$$

Dále se zavádí tzv. *směrodatná odchylka*:

$$\sigma = \sqrt{D}$$

Poznámka 1. V dalším textu budeme vždy množinu všech přípustných jevů značit γ. Nebudeme již ale rozlišovat, zda se jedná o diskrétní množinu (jako kostka) či kontinuum (hodnoty fyzikálních veličin jako třeba rychlost). Všechny pravděpodobnosti budeme značit pomocí sum a výraz

$$\sum_\gamma w_\gamma$$

přechází na

$$\int_\gamma \varrho(x) dx$$

je-li γ spojité. Není-li v textu řečeno něco jiného, jsou obecně vždy přípustné obě možnosti a závisí pak na konkrétním fyzikálním problému.

Na závěr několik příkladů rozdělovacích funkcí:

Binomické rozdělení využijeme tam, kde sledujeme jeden určitý jev, který buď nastane s pravděpodobností p, nebo nenastane (s pravděpodobností $1 - p$). Buď N celkový počet pokusů. Potom pravděpodobnost toho, že uvidíme právě n příznivých případů, kdy jev nastal, bude

$$w(n) = \binom{N}{n} p^n (1-p)^{N-n}$$

Střední hodnota počtu příznivých pokusů při binomickém rozdělení je $\langle n \rangle = Np$, kde vidíme jasný vztah ke klasické definici pravděpodobnosti. Rozptyl binomického rozdělení je $D(n) = Np(1-p)$, tedy ve zvláštních případech $p = 1$ (pokus vždy vyjde) a $p = 0$ (pokus nevyjde nikdy) je rozptyl nulový.

Poissonovo rozdělení je limitním případem binomického rozdělení za předpokladu, že $p \to 0$, $N \to \infty$, $p\,N \to \lambda = const$. Pomocí **Stirlingovy formule** $n! \approx \sqrt{2\pi n}(\frac{n}{e})^n$ nebo přímým limitním přechodem je možné binomické rozdělení upravit na následující tvar:

$$w_N(n) = \frac{\lambda^n}{n!} \exp(-\lambda)$$

Přímým výpočtem, nebo limitním přechodem v příslušných vzorcích pro binomické rozdělení, snadno odvodíme, že střední hodnota i rozptyl náhodné veličiny n jsou pro Poissonovo rozdělení rovny hodnotě parametru λ. Mějme však na paměti, že rozptyl je třeba odmocnit, pokud chceme mluvit o směrodatné odchylce!

1.3. **Vázané extrémy.** V mnoha fyzikálních aplikacích se setkáváme s problémem najít extrém funkce jedné či více proměnných. Jedná-li se o obyčejný extrém na celém definičním oboru (či podmnožině definičního oboru o stejné dimenzi), není to nic těžkého — stačí položit všechny parciální derivace rovny nule a vyřešit soustavu rovnic. Úloha se však zkomplikuje, má-li uvažovaná podmnožina definičního oboru dimenzi nižší než sám definiční obor — chceme například znát extrém funkce vzhledem k nějaké křivce.

Tento problém je důkladně teoreticky rozebrán v předmětu *Matematická analýza 4*. V *Termodynamice a statistické fyzice* na něj ale narazíme dříve, a proto si ukažme praktický postup, jak vázané extrémy řešit.

Mějme reálnou funkci

$$f = f(x_1, \ldots, x_n)$$

několika reálných proměnných. Hledejme extrém na varietě (obecně nikoliv lineární), která je popsána rovnicemi

$$\begin{aligned} \Phi_1(x_1, x_2, \ldots, x_n) &= 0 \\ \Phi_2(x_1, x_2, \ldots, x_n) &= 0 \\ &\ldots \\ \Phi_k(x_1, x_2, \ldots, x_n) &= 0 \end{aligned}$$

Jako první krok utvoříme tzv. *Lagrangeovu funkci* následujícím způsobem:

$$\Lambda(x_1, x_2, \ldots, x_n) = f(x_1, x_2, \ldots, x_n) - \sum_{\ell=1}^{k} \lambda_\ell \Phi_\ell(x_1, x_2, \ldots, x_n)$$

Čísla λ_ℓ se nazývají Lagrangeovy multiplikátory a mohou být obecná. Vyčíslují se spolu s hodnotami $(x_1, x_2, \ldots, x_n)$, nicméně jsou na nich nezávislá. Nyní vypočítáme všechny parciální derivace Lagrangeovy funkce a položíme je rovny nule. Tím jsme získali n rovnic, ovšem neznámých je $n + k$, neboť máme navíc Lagrangeovy multiplikátory. Proto přidáme ještě rovnice popisující varietu a tím je určena soustava $n + k$ rovnic o $n + k$ neznámých:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Lambda}{\partial x_1} &= 0 \\ \frac{\partial \Lambda}{\partial x_2} &= 0 \\ &\ldots \\ \frac{\partial \Lambda}{\partial x_n} &= 0 \\ \Phi_1(x_1, x_2, \ldots, x_n) &= 0 \\ \Phi_2(x_1, x_2, \ldots, x_n) &= 0 \\ &\ldots \\ \Phi_k(x_1, x_2, \ldots, x_n) &= 0 \end{aligned}$$

Tuto soustavu vyřešíme a získáme tak body $(x_1, x_2, \ldots, x_n)$ a $(\lambda_1, \ldots, \lambda_k)$. Dále bychom určili, zda se jedná o minimum, maximum či sedlo, to ale v této přednášce nebude třeba a tak se tím zde není nutné zabývat.

Příklad. Mějme reálnou funkci

$$f(x,y,z) = x.y + y.z + x.z$$

a zjistěme její extrém vázaný na povrch koule

$$\Phi_1(x,y,z) = x^2 + y^2 + z^2 - 4 = 0$$

Tedy nejprve Lagrangeova funkce:

$$\Lambda(x,y,z) = f(x,y,z) - \lambda\Phi_1(x,y,z) = x.y + y.z + x.z - \lambda(x^2 + y^2 + z^2 - 4)$$

a z ní soustava rovnic:

$$\begin{aligned} \frac{\partial\Lambda}{\partial x} &= y + z - 2\lambda x = 0 \\ \frac{\partial\Lambda}{\partial y} &= x + z - 2\lambda y = 0 \\ \frac{\partial\Lambda}{\partial z} &= x + y - 2\lambda z = 0 \\ x^2 + y^2 + z^2 &= 4 \end{aligned}$$

Řešme. Odečtěme od první druhou rovnici a také od druhé třetí:

$$\begin{aligned} y - x + 2\lambda(y - x) = (y - x)(1 + 2\lambda) &= 0 \\ z - y + 2\lambda(z - y) = (z - y)(1 + 2\lambda) &= 0 \\ x + y - 2\lambda z &= 0 \\ x^2 + y^2 + z^2 &= 4 \end{aligned}$$

Prozkoumejme případ, kdy $\lambda \neq -\frac{1}{2}$. Potom z prvních dvou rovnic plyne, že $x = y = z$ a z poslední pak $3x^2 = 4 \Rightarrow x = y = z = \pm\frac{2}{\sqrt{3}}$. Nakonec můžeme spočítat λ ze zbylé rovnice:

$$\lambda = \frac{1}{2}\frac{x+y}{z} = \frac{1}{2}\frac{\frac{4}{\sqrt{3}}}{\frac{2}{\sqrt{3}}} = \frac{1}{2}2 = 1$$

Otázkou zůstává, co by se stalo, kdybychom připustili, že $\lambda = -\frac{1}{2}$. V takovém případě vidíme z původní soustavy, že první tři rovnice jsou závislé a soustava přejde na tvar

$$\begin{aligned} x + y + z &= 0 \\ x^2 + y^2 + z^2 &= 4 \end{aligned}$$

Tato soustava rovnic ovšem zjevně nemá jedno řešení. Jedná se o průnik roviny s koulí a výsledkem bude kružnice. To ovšem není ostrý extrém. Našli jsme tedy pouze body $\frac{2}{\sqrt{3}}(1,1,1)$ a $-\frac{2}{\sqrt{3}}(1,1,1)$. Lagrangeův multiplikátor lambda už nyní není k ničemu potřebný, ve fyzikálních aplikacích může mít ale velmi konkrétní smysl.

1.4. **Legendreova transformace.** Mějme funkci $f(x_i, t_j)$ několika nezávislých proměnných. Dejme tomu, že se nám její proměnné nelíbí a více by se nám hodily proměnné jiné, třeba (y_i, t_j), které jsou rovněž mezi sebou nezávislé, a platí $y_i = \frac{\partial f}{\partial x_i}$. Přejdeme proto k nové funkci podle vztahu

$$g(y_i, t_j) = f(x_i, t_j) - \sum_i x_i y_i$$

To je vzorec pro tzv. *Legendreovu transformaci*, ve kterém je za x_i provedena substituce $x_i = x_i(y_j, t_k)$, vypočtená z rovnic

$$y_i = \frac{\partial f(x_j, t_k)}{\partial x_i}$$

Prozkoumejme, co se stane s diferenciály.

$$dg = df - d\sum_i (x_i y_i)$$

Pro jednoduchost sledujme pouze i-té a j-té proměnné:

$$dg^{(i,j)} = \frac{\partial f}{\partial x_i} dx_i + \frac{\partial f}{\partial t_j} dt_j - x_i dy_i - y_i dx_i$$

$$dg^{(i,j)} = y_i dx_i + \frac{\partial f}{\partial t_j} dt_j - x_i dy_i - y_i dx_i = \frac{\partial f}{\partial t_j} dt_j - x_i dy_i$$

a zároveň

$$dg^{(i,j)} = \frac{\partial g}{\partial y_i} dy_i + \frac{\partial g}{\partial t_j} dt_j$$

Porovnáme-li koeficienty, pak vidíme, že

$$\frac{\partial f}{\partial t_j} = \frac{\partial g}{\partial t_j}$$

a tedy proměnné t_j mají stejný význam pro obě funkce, ovšem

$$x_i = -\frac{\partial g}{\partial y_i} \qquad a \qquad y_i = \frac{\partial f}{\partial x_i}$$

Provedeme-li transformaci ještě jednou, dostaneme opět původní funkci.

1.5. **Homogenní funkce.** Mějme funkci $f = f(x_1, x_2, \ldots, x_n)$ takovou, že platí

$$f(\lambda x_1, \ldots, \lambda x_n) = \lambda^k f(x_1, x_2, \ldots, x_n)$$

Takové funkci říkáme *homogenní funkce k-tého stupně*. Má zajímavé vlastnosti. Zderivujeme obě strany předchozí rovnice podle λ:

$$\sum_{i=1}^{n} \frac{\partial f}{\partial(\lambda x_i)} \frac{\partial(\lambda x_i)}{\partial \lambda} = k\lambda^{k-1} f(x_1, x_2, \ldots, x_n)$$

což platí pro libovolné λ. Zvolme tedy $\lambda = 1$ a dosaďme jej:

$$\sum_{i=1}^{n} \frac{\partial f}{\partial x_i} x_i = k f(x_1, x_2, \ldots, x_n)$$

Funkci se nám tedy podařilo vyjádřit pomocí nezávislých proměnných x_i a parciálních derivací podle nich. To se hodí například při vyjadřování termodynamických potenciálů v závislosti na látkovém množství (viz. str. **??**), neboť vnitřní energie U je homogenní funkcí prvního stupně.

1.6. **Gaussovy integrály.** *Gaussův* se nazývá každý integrál ve tvaru

$$I(n, a, b) = \int_{-\infty}^{+\infty} x^n e^{-ax^2 + bx}$$

Obecné řešení pro $I(n, a, b)$ není v principu nijak komplikované, ale velmi, velmi pracné. Naznačíme:

Vzorec $-ax^2 + bx$ upravme na čtverec:

$$-ax^2 + bx = -a\left[\left(x - \frac{b}{2a}\right)^2 - \frac{b^2}{4a^2}\right] = -a\left(x - \frac{b}{2a}\right)^2 + \frac{b^2}{4a}$$

Pro $n = 0$ proveďme v integrálu substituci $y = \sqrt{a}(x - \frac{b}{2a})$, $\sqrt{a}\, dx = dy$:

$$I(0, a, b) = \frac{1}{\sqrt{a}} e^{\frac{b^2}{4a}} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} e^{-y^2} dy = \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{\frac{b^2}{4a}}$$

a nyní, když známe vzorec pro $I(0, a, b)$, dopracujeme se k dalším pomocí věty o derivaci podle parametru:

$$\frac{d}{db} I(n, a, b) = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial}{\partial b} x^n e^{-ax^2+bx} dx = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} x^{n+1} e^{-ax^2+bx} dx = I(n+1, a, b)$$

$$\frac{d}{da} I(n, a, b) = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial}{\partial a} x^n e^{-ax^2+bx} dx = -\int\limits_{-\infty}^{+\infty} x^{n+2} e^{-ax^2+bx} dx = -I(n+2, a, b)$$

Potom tedy

$$I(1, a, b) = \frac{d}{db} I(0, a, b) = \frac{\partial}{\partial b} \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{\frac{b^2}{4a}} = \sqrt{\pi} \frac{b}{2a^{\frac{2}{3}}} e^{\frac{b^2}{4a}}$$

$$I(2, a, b) = \frac{d}{db} I(1, a, b) = \sqrt{\pi} \left[\frac{1}{2a^{\frac{2}{3}}} + \frac{b^2}{4a^{\frac{5}{2}}} \right] e^{\frac{b^2}{4a}}$$

$$I(2, a, b) = \frac{d}{da} I(0, a, b) = \frac{\partial}{\partial a} \left(\sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{\frac{b^2}{4a}} \right) = \sqrt{\pi} \left[\frac{1}{2a^{\frac{2}{3}}} + \frac{b^2}{4a^{\frac{5}{2}}} \right] e^{\frac{b^2}{4a}}$$

a tak dále. Pro naše „jednoduché“ potřeby si uveďme vzorce pro prvních několik n, je-li $b = 0$. Pro n liché je i integrand lichý, tedy integrál je nulový. Pro $n = 0$ platí:

$$\int\limits_{-\infty}^{+\infty} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

Pro vyšší n se integrál spočte derivací předchozího vzorce podle parametru a.

$$\int\limits_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-ax^2} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2a^{\frac{3}{2}}} \qquad \int\limits_{-\infty}^{+\infty} x^4 e^{-ax^2} dx = \frac{3\sqrt{\pi}}{4a^{\frac{5}{2}}}$$

Další možnost řešení je převod Gaussova integrálu na Eulerovu gama funkci pomocí substituce $ax^2 = t$. Je však potřeba nejprve integrál přepsat pomocí integrace od nuly do nekonečna, abychom po substituci neintegrovali od $+\infty$ do $+\infty$. Pro lichá n získáme okamžitě nulový výsledek ze stejného důvodu jako výše, zabývejme se tedy pouze sudými hodnotami.

$$\int\limits_{-\infty}^{+\infty} x^n e^{-ax^2} dx = a^{-\frac{n+1}{2}} \int\limits_{0}^{+\infty} t^{\frac{n+1}{2}-1} e^{-t} = a^{-\frac{n+1}{2}} \Gamma\left(\frac{n+1}{2}\right)$$