2.3. Биномиальное распределение

Мы достаточно подробно познакомились со статистическими методами, чтобы перейти к количественному рассмотрению некоторых физически важных задач. Рассмотрим, например, идеальную систему из N спинов, каждый из которых равен $^1/_2$. С каждым спином связан магнитный момент μ_0. Этот пример особенно интересен, так как здесь мы имеем дело с наиболее простой системой, описываемой законами квантовой механики. Ее часто используют в качестве модели более сложных систем. Для общности допустим, что система спинов находится во внешнем магнитном поле **B**. Каждый магнитный момент может быть направлен либо по полю («вверх», параллельно полю **B**), либо против поля («вниз», антипараллельно полю). Предположим, что система спинов находится в равновесии. Статистический ансамбль, состоящий из $\mathcal{N}$ таких систем, будет независим от времени. Рассмотрим какой-то спин и обозначим через p вероятность того, что магнитный момент направлен вверх, а через q — вероятность того, что он направлен вниз. Так как этими двумя ориентациями исчерпаны все возможности, то условие нормировки (3) дает

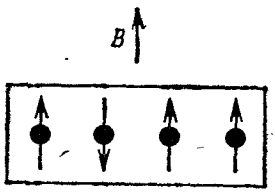

Рис. 2.5. Система из N спинов, равных $^1/_2$, в частном случае $N=4$. Каждая стрелка показывает направление магнитного момента спина. Внешнее магнитное поле обозначено стрелкой B.

$$p+q=1 \tag{6}$$

или $q=1-p$. Если поля нет, т. е. $\mathbf{B}=0$, то нет и выделенного направления в пространстве, так что $p=q={}^1/_2$. Но в присутствии магнитного поля магнитный момент чаще ориентирован по полю, чем против поля, поэтому $p>q$ *). Мы имеем дело с идеальной системой спинов. Это значит, что взаимодействием между спинами можно полностью пренебречь и ориентации спинов статистически совершенно независимы. Вероятность того, что любой из данных магнитных моментов направлен вверх, не зависит от ориентации любых других магнитных моментов системы.

Предположим, что n магнитных моментов нашей системы направлены вверх, а n' вниз. Так как полное число спинов в системе равно N, то

$$n+n'=N \tag{7}$$

или

$$n'=N-n.$$

Рассмотрим теперь ансамбль, состоящий из большого числа таких систем. Число n магнитных моментов, направленных

*) Здесь мы считаем p и q величинами, определяемыми на опыте. В главе 4 мы узнаем, как вычислить p и q для любого значения поля B, если система спинов находится при определенной температуре.

Таблица 2.1

1	2	3	4	n	n'	$C_N(n)$
U	U	U	U	4	0	1
U	U	U	D	3	1	4
U	U	D	U	3	1	
U	D	U	U	3	1	
D	U	U	U	3	1	
U	U	D	D	2	2	6
U	D	U	D	2	2	
U	D	D	U	2	2	
D	U	U	D	2	2	
D	U	D	U	2	2	
D	D	U	U	2	2	
U	D	D	D	1	3	4
D	U	D	D	1	3	
D	D	U	D	1	3	
D	D	D	U	1	3	
D	D	D	D	0	4	1

Таблица (T), в которой указаны все возможные ориентации N магнитных моментов для частного случая $N=4$. Буквой U обозначен момент, направленный вверх. Буквой D — момент, направленный вниз. Число моментов, направленных вверх и вниз, обозначено через n и n' соответственно. Число $C_N(n)$ возможных конфигураций, в которых n моментов из N направлены вверх, указано в последнем столбце. (Заметьте, что эта таблица аналогична табл. 1.1.)

вверх, не одинаково для каждой системы ансамбля и может принимать значения 0, 1, 2, ..., N. Нас интересует следующий вопрос: какова вероятность $P(n)$ того, что n из N магнитных моментов направлены вверх?

Эта задача легко решается с помощью следующих соображений. Вероятность того, что любой из магнитных моментов направлен вверх или вниз, равна соответственно p или q. Так как магнитные моменты статистически независимы, то с помощью формулы (5) легко получить вероятность такого состояния, когда n моментов направлены вверх, а остальные $N-n$ моментов направлены вниз:

$$\left.\begin{array}{l}\text{вероятность образования}\\ \text{одной конфигурации спи-}\\ \text{нов, в которой } n \text{ моменто-}\\ \text{в направлено вверх, а}\\ \text{остальные } N-n \text{ направ-}\\ \text{лены вниз}\end{array}\right\} = \underbrace{pp\ldots p}_{n}\ \underbrace{qq\ldots q}_{n'} = p^n q^{n'}. \qquad (8)$$

Но конфигурация, при которой n магнитных моментов направлены вверх, может быть осуществлена различными способами. Это показано в табл. 2.1. Обозначим поэтому:

$C_N(n) \equiv$ число различных конфигураций, при которых n магнитных моментов из общего числа N направлены вверх (а остальные $N-n=n'$ направлены вниз) *). (9)

Искомая вероятность $P(n)$ того, что n из N моментов направлены вверх, равна вероятности осуществления либо первой, либо второй,

*) Коэффициент $C_N(n)$ иногда называют числом комбинаций из N объектов по n.

..., либо, наконец, последней из $C_N(n)$ возможных конфигураций. В соответствии с общей теоремой (4), искомая вероятность $P(n)$ равна сумме вероятностей (8), взятой по всем таким возможным конфигурациям, когда n магнитных моментов направлены вверх. Эта сумма равна произведению вероятности (8) на коэффициент $C_N(n)$. Таким образом,

$$P(n) = C_N(n)\, p^n q^{N-n}, \tag{10}$$

где

$$n' = N - n.$$

Нам осталось подсчитать возможное число конфигураций в общем случае произвольных значений N и n. Предположим, что мы имеем таблицу T, аналогичную табл. 2.1, где обозначены все конфигурации, которые можно образовать из N магнитных моментов, причем символом U обозначен момент, направленный вверх, а символом D — вниз. В этом случае коэффициент $C_N(n)$ определяется числом рядов, в которых символ U повторяется n раз. Чтобы подсчитать число таких рядов, рассмотрим n различных направленных вверх моментов и обозначим их U_1, U_2, ..., U_n. Каким числом конфигураций мы можем осуществить эту ситуацию? В табл. 2.2 ответ на этот вопрос дан для частного случая $N=4$ и $n=2$.

Таблица 2.2

1	2	3	4		1	2	3	4	
U_1	U_2	D	D	a	U_2	D	U_1	D	b
U_1	D	U_2	D	b	D	U_2	U_1	D	d
U_1	D	D	U_2	c	D	D	U_1	U_2	f
U_2	U_1	D	D	a	U_2	D	D	U_1	c
D	U_1	U_2	D	d	D	U_2	D	U_1	e
D	U_1	D	U_2	e	D	D	U_2	U_1	f

Таблица (T'), в которой указаны все возможные конфигурации из $N=4$ идентичных моментов, два из которых направлены вверх. Эти моменты обозначены через U_1 и U_2, хотя физически они неразличимы. Поэтому конфигурации, отличающиеся только местами индексов 1 и 2, эквивалентны. Они обозначены одинаковыми буквами в последнем столбце. Таким образом, таблица содержит в $n!=2$ раза больше конфигураций, чем в том случае, если бы она содержала лишь физически различимые конфигурации.

Символ U_1 в строке таблицы может появиться на N различных местах.

При каждом возможном положении символа U_1 символ U_2 можно поставить на одно из $N-1$ оставшихся мест.

Для каждого возможного положения U_1 и U_2 символ U_3 можно поставить на любое из $N-2$ оставшихся мест.

. . . . . .

Для каждого возможного положения U_1, U_2, ..., U_{n-1} последний направленный вверх момент можно поместить на одно из $N-n+1$ оставшихся свободных мест.

Таким образом, возможное число $J_N(n)$ рядов в таблице равно произведению числа возможных положений символов U_1, U_2, ..., U_n, т. е.

$$J_N(n) = N(N-1)(N-2)\ldots(N-n+1). \tag{11}$$

Это можно записать короче с помощью факториалов. Например *),

$$J_N(n) = \frac{N(N-1)(N-2)\ldots(N-n+1)(N-n)\ldots 2\cdot 1}{(N-n)\ldots 2\cdot 1} = \frac{N!}{(N-n)!}. \tag{12}$$

Теперь мы должны ввести в этот расчет поправку. Все моменты, направленные вверх, эквивалентны, и поэтому те ряды таблицы T', которые отличаются только перестановкой индексов, отвечают физически неразличимым ситуациям (см., например, табл. 2.2). Число возможных перестановок из n индексов равно $n!$ и поэтому таблица T' содержит в $n!$ большее число рядов, чем их должно быть, если принимать во внимание только ряды, отвечающие физически неэквивалентным состояниям. Поэтому **) искомое число $C_N(n)$ различных конфигураций для n направленных вверх моментов мы получим, разделив $J_N(n)$ на $n!$, т. е.

$$C_N(n) = \frac{J_N(n)}{n!} = \frac{N!}{n!\,(N-n)!}. \tag{13}$$

Вычисляемая вероятность (10) теперь имеет вид

$$\boxed{P(n) = \frac{N!}{n!\,(N-n)!}\,p^n q^{N-n}.} \tag{14}$$

Более симметричный вид этого выражения:

$$P(n) = \frac{N!}{n!\,n'!}\,p^n q^{n'}, \tag{15}$$

где $n' \equiv N-n$. В частном случае,

$$\text{когда } p = q = 1/2,\ P(n) = \frac{N!}{n!\,n'!}\left(\frac{1}{2}\right)^N. \tag{16}$$

Для данного значения N вероятность $P(n)$ зависит от n. Функция $P(n)$ называется *биномиальным распределением*.

Замечание. При разложении бинома степени n, равного $(p+q)^N$, по степеням n мы замечаем, что коэффициент такого разложения при $p^n q^{N-n}$ равен числу членов, содержащих p в качестве множителя n раз и q в качестве множителя

*) По определению $N! \equiv N(N-1)\ldots 2\cdot 1$; кроме того, $0! \equiv 1$.

**) Первый индекс может принимать n возможных значений, второй индекс — любое из остальных $n-1$ значений, ..., и для n-го индекса остается одно значение. Поэтому индексы могут быть расположены $n(n-1)\ldots 2\cdot 1 = n!$ различными способами.

$N-n$ раз. Мы имеем, таким образом, чисто математическую *теорему разложения бинома*:

$$(p+q)^N=\sum_{n=0}^{N}\frac{N!}{n!\,(N-n)!}\,p^n q^{N-n}. \tag{17}$$

Сравнивая (17) с (14), мы видим, что каждый член справа равен вероятности $P(n)$. Это объясняет термин «биномиальное распределение». В нашем случае, когда сумма интересующих нас вероятностей равна единице: $p+q=1$, уравнение (17) эквивалентно следующему:

$$1=\sum_{n=0}^{N}P(n).$$

Тем самым мы показали, что сумма вероятностей для всех возможных значений n действительно равна 1, как это требует условие нормировки (3).

Обсуждение. Чтобы понять, как величина вероятности $P(n)$ зависит от n, рассмотрим прежде всего свойства коэффициентов $C_N(n)$, определенных выражением (13). Заметим, что они симметричны относительно замены n и $N-n=n'$. Таким образом,

$$C_N(n')=C_N(n). \tag{18}$$

Кроме того,

$$C_N(0)=C_N(N)=1. \tag{19}$$

Мы замечаем также, что

$$\frac{C_N(n+1)}{C_N(n)}=\frac{n!\,(N-n)!}{(n+1)!\,(N-n-1)!}=\frac{N-n}{n+1}. \tag{20}$$

Начиная с $n=0$, мы замечаем, что отношение соседних коэффициентов $C_N(n)$ сначала велико и имеет порядок N, затем оно монотонно уменьшается с увеличением n, оставаясь больше единицы (или равным ей), пока $n<{}^1/_2N$, а затем становится меньше единицы при $n\geqslant{}^1/_2N$. Отсюда, если еще принять во внимание формулу (19), следует, что $C_N(n)$ проходит через максимум вблизи $n={}^1/_2N$ и что значение $C_N(n)$ в этом максимуме очень велико по сравнению с единицей, если, разумеется, N велико.

Теперь мы можем понять поведение вероятности $P(n)$. Из (16) следует, что

$$\text{если } p=q=1/2, \text{ то } P(n')=P(n). \tag{21}$$

Этот результат следует также и из соображений симметрии, так как при $p=q=1/2$ (т. е. в отсутствие магнитного поля B) не может быть преимущественной пространственной ориентации магнитных моментов. В этом случае вероятность $P(n)$ имеет максимум *) вблизи $n={}^1/_2N$. С другой стороны, если $p>q$, то максимум все равно существует, но он теперь смещен к значениям $n>{}^1/_2N$. Рисунки 2.6 и 2.7 иллюстрируют поведение вероятности $P(n)$ для нескольких простых случаев.

---

*) Максимум приходится на ${}^1/_2N$ при четном N, а при нечетном N имеются два наибольших и равных значения по обе стороны от ${}^1/_2N$.

Полный магнитный момент системы спинов в направлении поля *) (т. е. в направлении «вверх») является величиной, которую можно измерить на опыте. Обозначим его через M. Так как M просто равно алгебраической сумме магнитных моментов, направленных «вверх» и «вниз», мы получаем $M = n\mu_0 - n'\mu_0 = (n - n')\mu_0$, или

$$M = m\mu_0, \tag{22}$$

где

$$m \equiv n - n' \tag{23}$$

и через μ_0 обозначена величина магнитного момента, связанного со спином $^1/_2$. Из (22) следует, что величина $m = M/\mu_0$ представляет собой полный магнитный момент, измеренный в единицах μ_0. Выражение (23) можно записать в виде

$$m = n - n' = n - (N - n) = 2n - N. \tag{24}$$

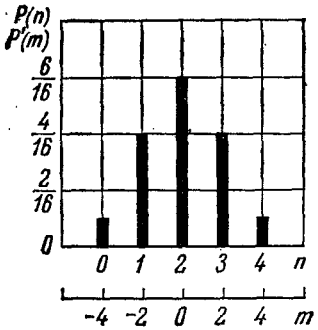

Рис. 2.6. Биномиальное распределение для $N=4$ магнитных моментов при $p=q={}^1/_2$. На графике показана вероятность $P(n)$ того, что n магнитных моментов направлено вверх, или, что эквивалентно, вероятность $P'(m)$ того, что полный магнитный момент, направленный вверх, равен m (если измерять его в единицах μ_0).

Отсюда следует, в частности, что возможные значения m будут

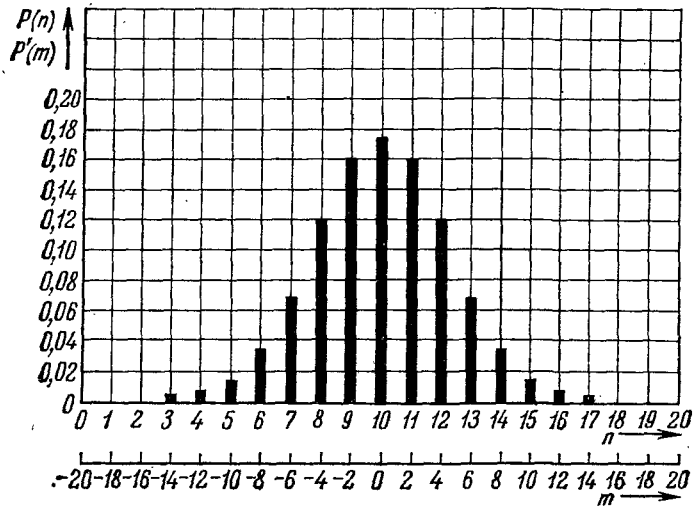

Рис. 2.7. Биномиальное распределение для $N=20$ магнитных моментов при $p=q={}^1/_2$. На графике показана вероятность $P(n)$ того, что n магнитных моментов направлены вверх, или, что эквивалентно, вероятность $P'(m)$ того, что полный магнитный момент, направленный вверх, равен m (если измерять его в единицах μ_0).

четными при четном N и нечетными, если N нечетно. Согласно (24)

*) В дальнейшем для краткости иногда будем называть M полным магнитным моментом.

определенному значению n отвечает единственное значение m, и наоборот,

$$n=\frac{1}{2}(N+m). \tag{25}$$

Вероятность $P'(m)$ того, что m принимает определенное значение, должна поэтому совпадать с вероятностью $P(n)$ того, что n принимает значение, следующее из (25). Итак,

$$P'(m)=P\left(\frac{N+m}{2}\right). \tag{26}$$

Это выражение дает вероятность появления любого возможного значения полного магнитного момента системы спинов. В частном случае $p=q={}^1/_2$ из формул (16) и (26) следует

$$P'(m)=\frac{N!}{\left(\frac{N+m}{2}\right)!\left(\frac{N-m}{2}\right)!}\left(\frac{1}{2}\right)^n.$$

Наиболее вероятная ситуация соответствует $m=0$, когда $M=0$.

Обобщение биномиального распределения. Наше рассмотрение касалось частной задачи о системе, состоящей из спинов. Ей можно, однако, придать более общее значение. Действительно, нами была решена следующая задача. Имеем N статистически независимых случаев. Предположим, что вероятность возникновения каждого такого случая равна p; тогда вероятность того, что этот случай не возникнет, будет $q=1-p$. Какова вероятность $P(n)$ возникновения n таких случаев (остальные $N-n$ случаев не возникают)? Биномиальное распределение (14) дает немедленный ответ на этот вопрос. Действительно, в нашем частном примере системы, состоящей из N независимых спинов, возникновение случая отвечает спину, направленному вверх, тогда как отсутствие случая отвечает спину, направленному не вверх, а вниз.

Мы рассмотрим еще несколько примеров, когда биномиальное распределение дает непосредственное решение задачи.

Идеальный газ из N молекул. Рассмотрим идеальный газ из N молекул, находящихся в сосуде объемом V_0. Для идеального газа взаимодействием молекул можно пренебречь и их движение можно считать статистически независимым. Предположим, что ящик мысленно разделен на две части с объемами V и V', так что

$$V+V'=V_0. \tag{27}$$

Рассмотрим ансамбль из большого числа таких сосудов с газом. Пусть p — вероятность того, что некоторая молекула находится в объеме V, а q — вероятность ее нахождения в объеме V'. Если газ находится в равновесии, то молекулы равномерно распределены по объему и

$$p=\frac{V}{V_0}, \quad \text{а} \quad q=\frac{V'}{V_0}. \tag{28}$$

При этом $p+q=1$, как требует условие нормировки. Какова вероятность $P(n)$ того, что в ансамбле из N молекул в объеме V окажутся n молекул (при этом остальные $n'=N-n$ молекулы будут находиться в объеме V')? Ответ заключен в

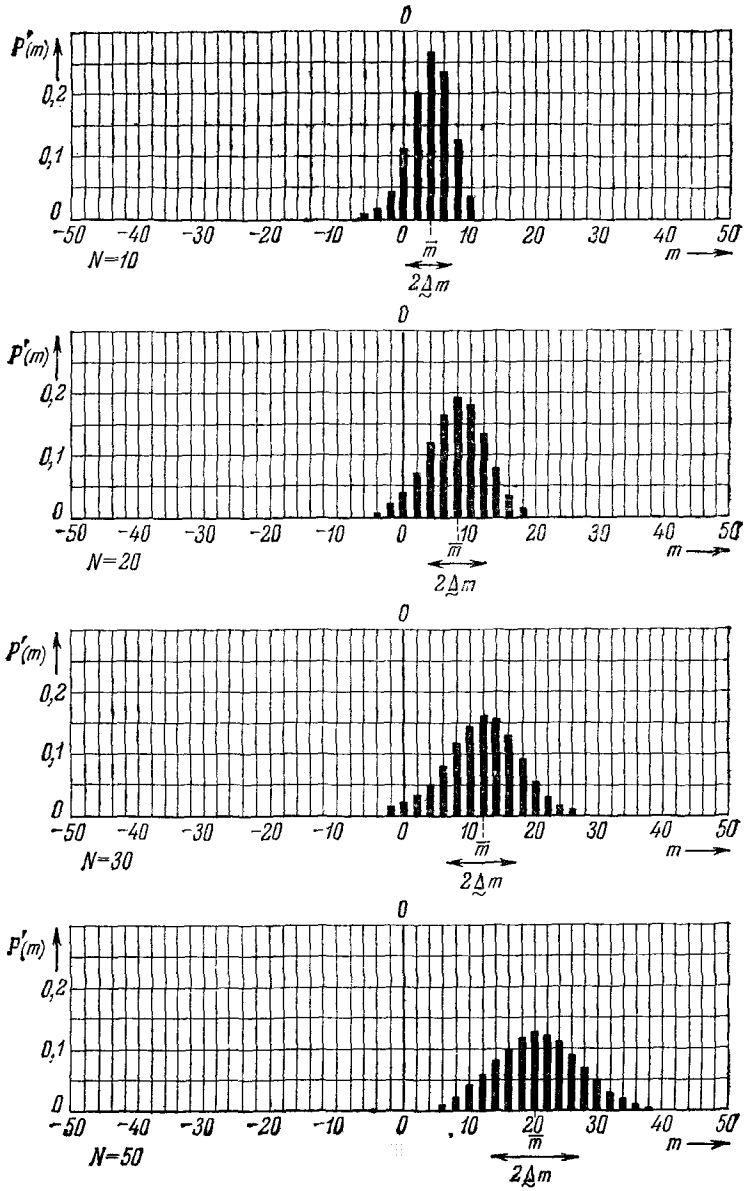

Рис. 2.8. Вероятность $P'(m)$ того, что полный магнитный момент системы из N спинов $^1/_2$ равен m (если его измерять в единицах μ_0). Из-за наличия магнитного поля $p=0,7$ и $q=0,3$. Графики дают значение $P'(m)$ для четырех различных случаев, соответствующих $N=10$, 20, 30 и 50.

биномиальном распределении (14). В частности, если $V = V'$, так что $p = q = 1/2$, то решение этой задачи получено в п. 1.1, где нужно было найти вероятность того, что n из N молекул находятся в левой половине сосуда.

Бросание монет или игральных костей. Рассмотрим бросание N монет, поведение которых будем считать статистически независимым. Пусть p есть вероятность того, что любая данная монета выпадет «орлом», а q есть вероятность выпадания «решки». Из соображений симметрии мы можем считать $p = q = 1/2$. Какова вероятность того, что n из N брошенных монет выпадут «орлом»?

Бросание N игральных костей представляет собой аналогичную задачу. Их поведение опять можно считать статистически независимым. Предположим, p есть вероятность того, что любая кость выпадет стороной «6» вверх, тогда $q = 1 - p$ есть вероятность того, что это не произойдет. У игральной кости шесть сторон и из соображений симметрии следует, что $p = 1/6$, а $q = 1 - p = 5/6$. Какова вероятность $P(n)$ того, что n из N костей выпадут стороной «6»? Биномиальное распределение (14) отвечает и на этот вопрос.

2.4. Средние значения

Предположим, что переменная u, характеризующая некоторую систему, принимает α возможных дискретных значений:

$$u_1, \ u_2, \ \ldots, \ u_\alpha,$$

которым соответствуют вероятности

$$P_1, \ P_2, \ \ldots, \ P_\alpha.$$

Это значит, что в ансамбле из $\mathcal{N}$ аналогичных систем (где $\mathcal{N} \to \infty$) переменная u имеет значение r для следующего числа систем: $\mathcal{N}_r = \mathcal{N} P_r$.

Указание вероятности наблюдения P_r для всех α возможных значений является наиболее полным статистическим описанием системы. Удобно, однако, иметь некоторые параметры, которые характеризуют распределение возможных значений u в ансамбле менее детальным образом. Такими параметрами являются, например, *средние* значения. Их смысл весьма прост. Например, результат экзамена группы студентов можно описать наиболее полным образом (если нам не интересны фамилии студентов), указав, сколько студентов получили каждую из возможных оценок. Менее подробно результат экзамена можно представить указанием среднего балла. Для этого каждый возможный балл следует умножить на число заслуживших его студентов, результаты сложить и сумму разделить на число экзаменовавшихся. Аналогично, чтобы получить среднее значение величины u в ансамбле, мы должны умножить каждое значение u_r на число систем $\mathcal{N}_r$, в которых это значение осуществилось, сложить эти произведения для всех возможных значений r и результат разделить на полное число $\mathcal{N}$ систем в ансамбле. *Среднее значение* величины (или *усредненное по ансамблю*), которое мы обозначим $\bar{u}$, равно, таким образом:

$$\bar{u} = \frac{\mathcal{N}_1 u_1 + \mathcal{N}_2 u_2 + \ldots + \mathcal{N}_\alpha u_\alpha}{\mathcal{N}} = \frac{\sum_{r=1}^{\alpha} \mathcal{N}_r u_r}{\mathcal{N}}. \tag{29}$$