Fundamentals of

statistical and thermal physics

Federick Rief Professor of Physics University of California, Berkeley

제1장 통계적 방법

- ⊙ 고전역학 : 주어진 조건에서 개별 입자의 운동을 기술
- ⊙ 다입자계 연구 : 통계역학, 고에너지물리 영역 밖에서 가장 활발한 현대물리 연구 분야.(?!)
  - 다입자계 : 기체, 액체, 고체, 전자기복사(photons), 플라스마
  - 원자, 분자들로 이루어진 다 입자계. 양자역학의 세계
  - 전자기력이 지배하는 세계 : 중력, 핵력 등은 고려의 대상이 아님
- ⊙ 다입자계의 기술에 고전역학은 적절한가?
  - 입자의 성질과 입자간의 상호작용을 모두 알면 원칙적으로 가능
  - 운동방정식은 시간반전($t \to -t$)에 대해 동일한 형태

    $$F = m\frac{d^2}{dt^2}x = m\left(\frac{d}{-dt}\right)^2 x$$

  - 다입자계에는 시간반전에 대해 대칭적이지 않은 현상이 무수히 많음

    보기 : 기체의 확산, 엎질러진 물,...
  - 또한 많은 입자가 특정한 규칙으로 계를 이룸으로써 전혀 예상치 못한 새로운 현상이 나타나기도 함

    보기 : 특정분자의 결합은 성장, 분열의 생명현상을 일으킴
  - 다입자계를 이해하고 기술하며 예측하는 새로운 물리법칙이 필요
- ⊙ 고전적 열역학(classical thermodynamics)
  - 평형상태 : 거시적 변수(체적, 온도, 압력, 열전도도)들이 시간에 따라 변하지 않는 상태
  - 거시적 변수간의 현상학적 관계
  - 최소한의 가설로부터 법칙을 이끌어 냄
  - 적용범위, 이해의 폭이 제한적
- ⊙ 통계역학
  - 평형상태
  - 계를 구성하는 입자들의 미시적 성질과 상호작용으로부터 법칙을 유도
  - 열역학 법칙을 설명
  - 이해의 폭과 범위를 확장
- ⊙ 열역학의 역사
  - Rumford(1798)와 Davy(1799) : 열은 역학적 에너지의 한 형태임을 제안
  - Mayer(1842) : 위의 제안을 과학적으로 논의
  - Joule(1843-1849) : 위의 주장을 실험적으로 입증
  - Carnot(1824) : 최초로 열기관을 분석
  - Clausius and Kelvin(1850), Gibbs(1876-1878) : 열역학 이론을 창시하고 발전시킴
- ⊙ 거시적 문제에 대한 미시적 접근의 발전
  - 희박한 기체에 대한 운동이론(kinetic theory)의 연구로부터
  - Clausius, Maxwell, Boltzmann
  - Maxwell(1859) ; 기체분자의 속도분포
  - Boltzmann(1872) ; Boltzmann 방정식
  - Chapman, Enskog(1916-1917) : 기체운동론의 현대적 형태를 완성

⊙ 통계역학

- Boltzmann(1872) : 기본적인 미시적 해석을 통해 비가역과정으로부터 평형상태로의 접근을 증명하여 통계역학을 더욱 일반적인 수준으로 끌어올림
- Gibbs((1902) : 통계역학 이론의 보편성과 강력함을 배가시킴
- 양자역학의 등장으로 양자통계역학으로 발전

1.1 통계의 기본 개념과 보기

Ensemble : 많은 수의 동일한 조건을 갖춘 계의 집합

보기 : 아주 여러 번 주사위 던지기 = 많은 수의 주사위를 한꺼번에 던지기(Ensemble)

멋대로 걷기(1차원)

l : 한 걸음의 거리

p : 오른쪽으로 갈 확률

$q(=1-p)$: 왼쪽으로 갈 확률

문제 : N걸음 후 위치가 ml일 확률은?

- 유사한 물리적 상황 : N개의 원자의 스핀과 물체의 알짜 자기모멘트, 주어진 기체분자의 N번 충돌후의 위치, N개의 비 간섭성 광원에 의한 빛의 세기

1.2 1차원 멋대로 걷기

$$x = ml$$

$$-N \le m \le N$$

$P_N(m)$: N걸음 후 입자의 위치가 ml일 확률

n_1 : 오른쪽 걸음 횟수

n_2 : 왼 걸음 횟수

$$N = n_1 + n_2$$

$$m = n_1 - n_2 = n_1 - (N - n_1) = 2n_1 - N$$

$W_N(n_1)$: N걸음에서 오른 걸음이 n_1번일 확률

각각의 걸음이 독립적이면 각 시행의 확률은 곱해짐

(보충설명)

오른 걸음 다음 오른 걸음일 확률=$p \cdot p = p^2$

한 걸음에서 오른 걸음이거나 왼 걸음일 확률 = $p+q$

$$W_N(n_1) \propto p^{n_1} q^{n_2}$$

N번에서 n_1을 선택하는 방법의 수 $= \dfrac{N!}{n_1! n_2!}$

(보기) $N=3$

$n_1 = 3, n_2 = 0$인 경우 ; $+ + + = 1$

$n_1 = 2, n_2 = 1$인 경우 ; $\left.\begin{matrix} + - + \\ + + - \\ - + + \end{matrix}\right) = 3$

$n_1 = 1, n_2 = 2$인 경우 ; $\left.\begin{matrix} + - - \\ - + - \\ - - + \end{matrix}\right) = 3$

$n_1 = 0,\ n_2 = 3$인 경우 ; − − − $= 1$

따라서 $W_N(n_1) = \dfrac{N!}{n_1!n_2!}p^{n_1}q^{n_2}$

$$(p+q)^N = \sum_{n=0}^{N}\frac{N!}{n!(N-n)!}p^n q^{N-n} \quad \text{(binomial expansion)}$$

$$P_N(m) = W_N(n_1)$$

$n_1 = \dfrac{1}{2}(N+m),\ n_2 = \dfrac{1}{2}(N-m)$이므로

$$P_N(m) = \frac{N!}{[(N+m)/2]!\,[(N-m)/2]!}p^{(N+m)/2}q^{(N-m)/2}$$

$p = q = \dfrac{1}{2}$이면

$$P_N(m) = \frac{N!}{[(N+m)/2]!\,[(N-m)/2]!}\left(\frac{1}{2}\right)^N$$

[Example]

- $p = q = \dfrac{1}{2}$ and $N = 3$

  $n_1 = 0, 1, 2, 3 \qquad m = -3, -1, 1,$ or 3

  $W_3(n_1) = P_3(m) = \dfrac{1}{8}, \dfrac{3}{8}, \dfrac{3}{8}, \dfrac{1}{8}$

- $p = q = \dfrac{1}{2}$ and $N = 20$

  $P_N(m)$: $m = 0$을 중심인 종 모양의 곡선, [Fig 1.2.3]

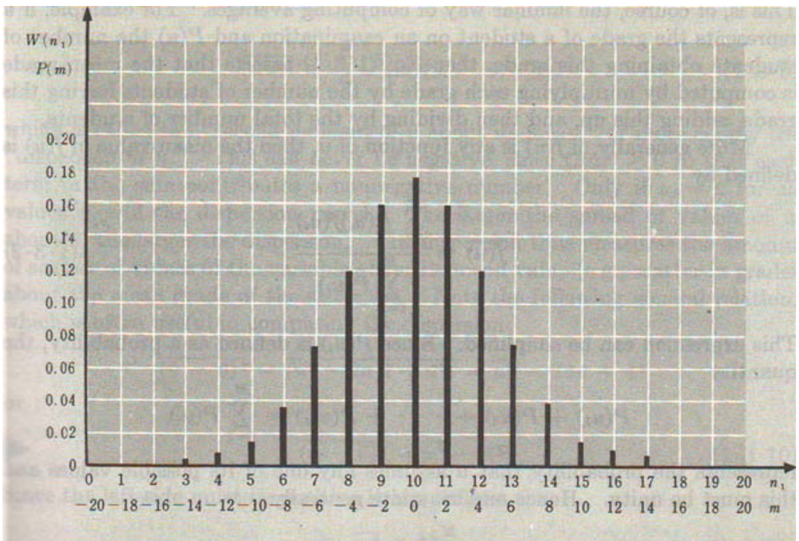

Fig. 1·2·3 Binomial probability distribution for $p = q = \frac{1}{2}$ when $N = 20$ steps. The graph shows the probability $W_N(n_1)$ of n_1 right steps, or equivalently the probability $P_N(m)$ of a net displacement of m units to the right.

nificance of this is obvious. After N random steps, the probability of the particle being a distance of N steps away from the origin is very small, while the probability of its being located in the vicinity of the origin is largest.

- N이 매우 크면 : 원점에서 벗어날 확률은 매우 적고 원점 근방의 확률이 거의 대부분이다.

1.3 평균값

u : M개의 서로 다른 값을 갖는 변수 $(u_1, u_2, \cdots, u_M)$

각 값을 가질 확률 : $P(u_1), P(u_2), \cdots, P(u_M)$

$$\text{평균값 } \overline{u} \equiv \frac{\sum_{i=1}^{M} u_i P(u_i)}{\sum_{i=1}^{M} P(u_i)}$$

보다 일반적으로 $f = f(u_i)$일 때

$$\overline{f(u)} \equiv \frac{\sum_{i=1}^{M} P(u_i) f(u_i)}{\sum_{i=1}^{M} P(u_i)}$$

⊙ 확률의 규격화

$$\sum_{i=1}^{M} P(u_i) = 1 \qquad : \text{normalization condition}$$

⊙ 평균

$$\overline{f(u)} = \sum_{i=1}^{M} P(u_i) f(u_i)$$

$$\overline{f(u) + g(u)} = \sum_{i=1}^{M} P(u_i)[f(u_i) + g(u_i)] = \sum_{i=1}^{M} P(u_i) f(u_i) + \sum_{i=1}^{M} P(u_i) g(u_i)$$

혹은

$$\overline{f(u) + g(u)} = \overline{f(u)} + \overline{g(u)}$$

$c = \text{const}$ 이면

$$\overline{cf(u)} = c\overline{f(u)}$$

⊙ 분산

$$\Delta u \equiv u - \overline{u}$$

$$\overline{\Delta u} = \overline{(u - \overline{u})} = \overline{u} - \overline{u} = 0$$

- 평균에 대한 u의 2차 모멘트(second moment of u about its mean)

$$\overline{(\Delta u)^2} = \overline{(u - \overline{u})^2} = \overline{(u^2 - 2u\overline{u} + \overline{u}^2)}$$
$$= \overline{u^2} - 2\overline{u}\,\overline{u} + \overline{u}^2$$
$$= \overline{u^2} - \overline{u}^2$$

☞ 변수가 평균값으로부터 벗어나는 정도의 척도

$$\overline{u^2} \geq \overline{u}^2$$

- 표준편차(standard deviation)

$$\sigma = \sqrt{\overline{(u - \overline{u})^2}} = \sqrt{\overline{u^2} - \overline{u}^2}$$

1.4 멋대로 걷기의 평균

$$W(n_1) = \frac{N!}{n_1!(N-n_1)!} p^{n_1} q^{N-n_1}$$

규격화

$$\sum_{n=0}^{N} W(n) = \sum_{n=0}^{N} \frac{N!}{n!(N-n)!} p^n q^{N-n}$$
$$= (p+q)^N = 1 \qquad (\because p+q=1)$$

⊙ n의 평균값

$$\overline{n} = \sum_{n=0}^{N} n W(n) = \sum_{n=0}^{N} n \cdot \frac{N!}{n!(N-n)!} p^n q^{N-n}$$

$np^n = p\frac{\partial}{\partial p} p^n$을 이용하여

$$\overline{n} = \sum_{n=0}^{N} \frac{N!}{n!(N-n)!} p \frac{\partial}{\partial p} p^n q^{N-n}$$
$$= p\frac{\partial}{\partial p} \sum_{n=0}^{N} \frac{N!}{n!(N-n)!} p^n q^{N-n}$$
$$= p\frac{\partial}{\partial p}(p+q)^N = pN \cdot (p+q)^{N-1}$$
$$= pN \qquad (\because p+q=1)$$
$$\overline{n_2} = Nq$$
$$m = n_1 - n_2$$
$$\overline{m} = \overline{n_1 - n_2} = \overline{n_1} - \overline{n_2} = N(p-q)$$

if $p=q$, then $\overline{m} = 0$

⊙ 분산의 계산

$$\overline{(\Delta n)^2} = \overline{n^2} - \overline{n}^2$$
$$\overline{n^2} = \sum_{n=0}^{N} W(n) n^2 = \sum_{n=0}^{N} n^2 \frac{N!}{n!(N-n)!} p^n q^{N-n}$$

$n^2 p^n = p\frac{\partial}{\partial p}\left(p\frac{\partial}{\partial p}p^n\right) = \left(p\frac{\partial}{\partial p}\right)^2 (p^n)$이므로

$$\overline{n^2} = \sum_{n=0}^{N} \frac{N!}{n!(N-n)!} \left(p\frac{\partial}{\partial p}\right)^2 p^n q^{N-n}$$
$$= \left(p\frac{\partial}{\partial p}\right)^2 \sum_{n=0}^{N} \frac{N!}{n!(N-n)!} p^n q^{N-n}$$
$$= \left(p\frac{\partial}{\partial p}\right)^2 (p+q)^N$$
$$= \left(p\frac{\partial}{\partial p}\right)[pN(p+q)^{N-1}]$$
$$= p[N(p+q)^{N-1} + pN(N-1)(p+q)^{N-2}]$$

- $p+q=1$인 경우

$\rightarrow \quad \overline{n^2} = p\frac{\partial}{\partial p}p\frac{\partial}{\partial p}(p+q)^N$
$\quad = p^2N(N-1) + pN$

$\rightarrow \quad \overline{(\Delta n)^2} = p^2N^2 - p^2N + pN - p^2N^2$
$\quad = Np(1-p) = Npq$

$\therefore \quad \overline{(\Delta n)^2} = Npq \qquad$ (1-4-9)

$\Delta^* n = \left[\overline{(\Delta n)^2}\right]^{\frac{1}{2}}$: 표준편차

$\frac{\Delta^* n}{\overline{n}} = \frac{\sqrt{Npq}}{Np} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sqrt{\frac{q}{p}}$: 분포의 상대적 폭(relative width of distribution)

$\frac{\Delta^* n}{\overline{n}} = \frac{1}{\sqrt{N}}$ for $p = q = \frac{1}{2}$

☞ N이 클수록 상대적인 편차는 감소

$\overline{(\Delta m)^2}$의 계산

$m = 2n - N$

$\Delta m = m - \overline{m} = (2n - N) - (2\overline{n} - N)$
$\quad = 2(n - \overline{n}) = 2\Delta n$

$\overline{(\Delta m)^2} = 4\overline{(\Delta n)^2} = 4Npq$

$p = q = 1/2$이면

$\overline{(\Delta m)^2} = N$

[Example] $N = 100,\ p = q = \frac{1}{2}$

$\overline{n} = 50,\ \overline{m} = 0,\ [\overline{(\Delta m^2)}]^{\frac{1}{2}} = 10$

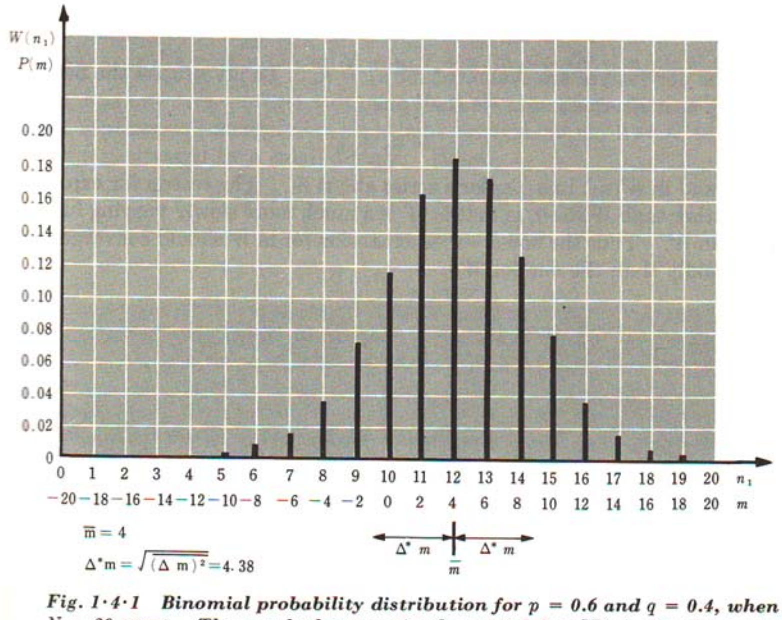

Fig. 1·4·1 Binomial probability distribution for $p = 0.6$ and $q = 0.4$, when $N = 20$ steps. The graph shows again the probability $W(n_1)$ of n_1 right steps, or equivalently, the probability $P(m)$ of a net displacement of m units to the right. The mean values $\overline{m}$ and $\overline{(\Delta m)^2}$ are also indicated.

1.5 N이 큰 경우의 확률분포

$\widetilde{n_1}$: $W(n_1)$ 분포가 최대인 n_1인 값

$\widetilde{n_1}$ 근처에서 $W(n_1) \gg |W(n_1+1) - W(n_1)|$이면

→ W는 연속변수 n_1(연속 변수로 간주 가능)의 연속함수로 간주할 수 있다.

$n_1 = \tilde{n}$: W가 최대인 위치의 조건은

$$\frac{d}{dn_1} W \Big|_{\widetilde{n_1}} = 0 \quad \text{or} \quad \frac{d}{dn_1} \ln W \Big|_{\widetilde{n_1}} = 0$$

☞ $\ln W$를 고려하는 이유 ; $\ln W$가 W보다 느리게 변하는 함수이므로 멱급수전개에서 W의 경우보다 적은 항의 고려만으로 충분하기 때문

Taylor 전개

$n_1 = \widetilde{n_1} + \eta$; $\widetilde{n_1}$ 근처에서 η에 대한 전개

$$\ln W(n_1) = \ln W(\widetilde{n_1}) + B_1 \eta + \frac{1}{2} B_2 \eta^2 + \cdots$$

☞ $B_1 = \dfrac{d}{dn_1} \ln W = \dfrac{1}{W} \dfrac{d}{dn_1} W \Big|_{\widetilde{n_1}} = 0$; (최대의 조건에 의해)

☞ $B_2 = \dfrac{d^2}{dn_1^2} \ln W(n_1) \Big|_{\widetilde{n_1}}$

최대에서 $B_2 < 0$ 이므로

$$\ln W(n_1) \simeq \ln W(\widetilde{n_1}) - \frac{1}{2} |B_2| \eta^2$$

$$W(n_1) \simeq W(\widetilde{n_1}) e^{-\frac{1}{2}|B_2|\eta^2} = \widetilde{W} e^{-\frac{1}{2}|B_2|\eta^2} \qquad \text{Gaussian} \qquad (1\cdot5\cdot7)$$

상수의 결정

※$\widetilde{n_1}$

$$W(n_1) = \frac{N!}{(N-n_1)! n_1!} p^{n_1} q^{N-n_1}$$

$$\ln W(n_1) = \ln N! - \ln n_1! - \ln (N-n_1)! + n_1 \ln p + (N-n_1) \ln q$$

if $n_1 \gg 1$ then $dn_1 = 1 \ll n_1$ thus n_1의 변화는 연속적

$$\frac{d}{dn} \ln n! \simeq \frac{\ln (n+1)! - \ln n!}{1} = \ln \frac{(n+1)!}{n!} = \ln (n+1) \simeq \ln n$$

※Stirling Formula

if $n \gg 1$ then $\ln n! \simeq n \ln n - n$

$$\frac{d}{dn} \ln n! \simeq \frac{d}{dn}(n \ln n - n) = \ln n + 1 - 1 = \ln n$$

$$\frac{d}{dn_1} \ln W = -\ln n_1 + \ln (N-n_1) + \ln p - \ln q$$

$$= \ln \frac{(N-n_1)p}{n_1 q}$$

$$\ln\frac{(N-\widetilde{n_1})p}{\widetilde{n_1}q}=0$$ 이므로

$$\frac{(N-\widetilde{n_1})p}{\widetilde{n_1}q}=1 \quad \rightarrow \quad Np-\widetilde{n_1}p=\widetilde{n_1}q$$

$$\widetilde{n_1}=Np(=\overline{n_1})$$

※ B_2

$$\frac{d}{dn_1}\ln W=-\ln n_1+\ln(N-n_1)+\ln p-\ln q$$

$$B_2=\frac{d^2}{dn_1^2}\ln W=-\frac{1}{n_1}-\frac{1}{N-n_1}$$

$$B_2=-\frac{N-\widetilde{n_1}+\widetilde{n_1}}{\widetilde{n_1}(N-\widetilde{n_1})}=-\frac{N}{Np(N-Np)}$$
$$=-\frac{1}{Npq}$$

따라서 $W(n_1)$은

$$W(n_1)=\widetilde{W}e^{-\frac{1}{2}\frac{1}{Npq}\eta^2} \qquad (\widetilde{W}=W(\widetilde{n_1}),\ \text{i.e.}\quad \eta=0)$$

※ $\widetilde{W}$

W의 규격화

$$\sum_{n_1}^{N}W(n_1)=1$$

W가 $\widetilde{n_1}$ 근처에서만 유한한 값을 갖고 이외의 값에서는 0이라면

$$\sum_{n_1=0}^{N}W(n_1)\simeq\int_{-\infty}^{\infty}W(\widetilde{n_1}+\eta)d\eta$$

☞ $\eta\rightarrow\pm\infty$는 실질적인 기여가 없음

$$\int_{-\infty}^{\infty}Wd\eta=\int_{-\infty}^{\infty}\widetilde{W}e^{-\frac{1}{2}\frac{1}{Npq}\eta^2}d\eta$$
$$=\widetilde{W}\sqrt{2\pi Npq}=1$$

$$\therefore\quad \widetilde{W}=\frac{1}{\sqrt{2\pi Npq}}$$

결과적으로

$$W(n_1)=(2\pi Npq)^{-\frac{1}{2}}\exp\left[-\frac{(n_1-Np)^2}{2Npq}\right]$$
$$=[2\pi\overline{(\Delta n_1)^2}]^{-\frac{1}{2}}\exp\left[-\frac{(n_1-\overline{n_1})^2}{2\overline{(\Delta n_1)^2}}\right]$$

1.6 가우스 확률분포

$$P(m) = W\left(\frac{N+m}{2}\right) = (2\pi Npq)^{-\frac{1}{2}}\exp\left\{-\frac{[m-N(p-q)]^2}{8Npq}\right\} \quad (1.6.1)$$

$$n_1 - Np = \frac{1}{2}[N+m] - Np = \frac{1}{2}[m+N-2Np]$$
$$= \frac{1}{2}[m+N(q-p)]$$

$m = 2n_1 - N$ 　이므로　 $\Delta m = 2\Delta n_1 = 2$

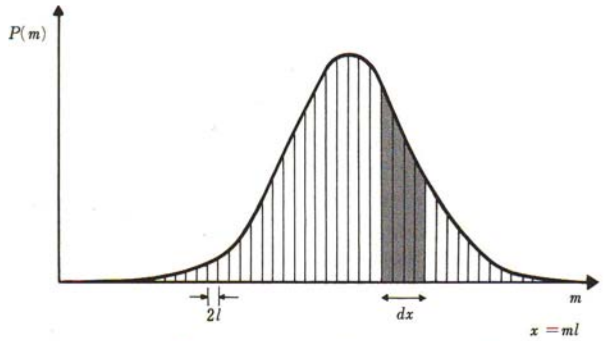

Fig. 1·6·1 The probability $P(m)$ of a net displacement of m units when the total number N of steps is very large and the step length l is very small.

※확률의 위치 x에 대한 함수

$x = ml$

☞ m이 매우 크면 $\Delta x = 2l$은 매우 작으므로 x를 연속변수로 간주할 수 있음

☞ 고체내의 원자의 확산 : $l \sim 10^{-8}\text{cm}$

☞ 실험실 측정의 거시적 scale : $\sim 1\mu\text{m} = 10^{-4}\text{cm}$

N걸음 후 입자의 위치가 $x \sim x+dx$에 있을 확률은?

dx 구간에 있는 m의 가지수 ; $dx/2l$ $(2l = \Delta m)$

dx가 크지 않으면 dx 구간에 있을 확률은 $p(m)$ 으로 근사 가능

따라서 $x \sim dx$ 구간에 입자가 있을 확률 $\sim$ $p(m)\dfrac{dx}{2l}$; dx에 비례

$$\mathscr{P}(x)dx \equiv p(m)\frac{dx}{2l}$$

☞ $\mathscr{P}(x)$; 확률밀도 ($\mathscr{P}(x)dx$ 가 확률이므로 $\mathscr{P}(x)$의 단위는 $(dx)^{-1}$

확률밀도

식(1.6.1)을 x의 함수로 쓰면

$$\mathscr{P}(x)dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\,\sigma}e^{-(x-\mu)^2/2\sigma^2}dx$$; $\mathscr{P}(x)$는 가우스형태의 확률분포

$\mu \equiv (p-q)Nl$

$\sigma \equiv 2\sqrt{Npq}\,l$

규격화

$$\int_{-\infty}^{\infty}\mathscr{P}(x)dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\,\sigma}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-(x-\mu)^2/2\sigma^2}dx$$
$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}\,\sigma}\sqrt{2\sigma^2\pi} = 1$$

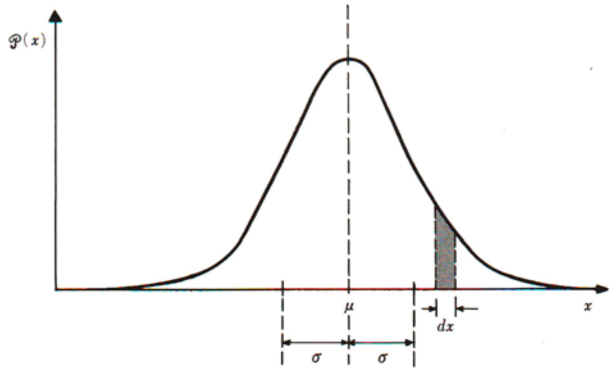

Fig. 1·6·2 The Gaussian distribution. Here $\mathcal{P}(x)\,dx$ is the area under the curve in the interval between x and $x+dx$ and is thus the probability that the variable x lies in this range.

x의 평균값

$$\overline{x} = \int_{-\infty}^{\infty} x\mathscr{P}(x)dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\,\sigma}\int_{-\infty}^{\infty} xe^{-(x-\mu)^2/2\sigma^2}dx \quad (\, y = x-\mu \;\rightarrow\; dx = dy\,)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}\,\sigma}\int_{-\infty}^{\infty}(y+\mu)e^{-\frac{y^2}{2\sigma^2}}dy = \mu = Nl(p-q)$$

분산

$$\overline{(\Delta x^2)} = \overline{(x-\overline{x})^2} = \overline{x^2} - \overline{x}^2 = \overline{x^2} - \mu^2$$

$$\overline{(x-\mu)^2} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\,\sigma}\int (x-\mu)^2 e^{-(x-\mu)^2/2\sigma^2}dx$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}\,\sigma}\int y^2 e^{-\frac{y^2}{2\sigma^2}}dy$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}\,\sigma}\left[\frac{\sqrt{\pi}}{2}(2\sigma^2)^{\frac{3}{2}}\right]$$

$$= \sigma^2 = 4Nl^2pq$$

$$\overline{(\Delta x)^2} = \overline{(x-\mu)^2} = \sigma^2$$

☞ $\overline{x} = (p-q)Nl$

☞ $\overline{(\Delta x)^2} = 4Npql^2$

1.7 다변수의 확률분포

2변수의 경우

$$u_i(i = 1,\cdots,M), \quad v_j(j = 1,\cdots,N)$$

$P(u_i, v_j)$; $u = u_i$, $v = v_j$일 확률

규격화 ; $$\sum_{i=1}^{M}\sum_{j=1}^{N} P(u_i, v_j) = 1$$

$$P_u(u_i) = \sum_{j=1}^{N} P(u_i, v_j)$$

$$P_v(v_j) = \sum_{i=1}^{M} P(u_i, v_j)$$

$$\sum_{i=1}^{M} P_u(u_i) = \sum_{i=1}^{M}\left[\sum_{j=1}^{N} P(u_i,v_j)\right] = 1$$

확률적 독립

u와 v가 서로에게 영향을 미치지 않는 경우

(u_i가 어떤 값을 갖는가가 v_j와 상관이 없음)

두 변수가 독립일 때

$$P(u_i, v_j) = P_u(u_i)P_v(v_j)$$

<평균값>

$$\overline{F(u,v)} = \sum_{j}^{N}\sum_{i}^{M} F(u_i,v_j)P(u_i,v_j)$$

$$\overline{f(u)} = \sum_i\sum_j P(u_i,v_j)f(u_i) = \sum_i f(u_i)P_u(u_i)$$

$$\overline{F+G} = \overline{F} + \overline{G}$$

$$\overline{f(u)g(v)} = \sum_i\sum_j f(u_i)g(v_j)P_u(u_i)P_v(v_j)$$
$$= \overline{f(u)}\;\overline{g(v)}$$

1.8 연속확률분포에 대한 제언

u ; 구간 $a_1 < u < a_2$에서의 연속변수

변수가 $u \sim u+du$에 있을 확률

du ; 매우 작으나 크기가 정해지지 않으면, 확률 $\propto du$

$\rightarrow$ 확률 = $\mathscr{P}(u)du$; $\mathscr{P}(u)$는 확률밀도

불연속 변수로 기술

구간 $a_1 < u < a_2$를 매우 작은 등간격 δu로 분할 ($\delta u \ll du$)

각각의 구간에서 u 값에 번호를 매겨 u_i로 표시

$$u_{i+1} - u_i = \delta u$$

$P(u_i)$; 변수가 $u_i \sim u_i + \delta u$에 있을 확률

$$P(u) = \mathscr{P}(u)\delta u$$

$$\sum_i P(u_i) = 1$$

$\mathscr{P}(u)du$; 변수가 $u \sim u + du$에 있을 확률

규격화 조건 $\int_{a_1}^{a_2}\mathscr{P}(u)du = 1$

⊙ 함수의 평균

$f(u)$; u 의 연속함수

함수 $u \sim u+du$ 구간의 평균값 기여분 = $f(u)\mathscr{P}(u)du$

함수 전체의 구간 평균값 $\overline{f(u)} = \int_{a_1}^{a_2} f(u)\mathscr{P}(u)du$

다변수일 때 (편의상 2 변수 고려)

$\mathscr{P}(u,v)dudv$; 변수가 $u \sim u+du,\ v \sim v+dv$일 확률

규격화

$$\int_{a_1}^{a_2}\int_{b_1}^{b_2}\mathscr{P}(u,v)dudv = 1 \qquad (a_1 < u < a_2,\ b_1 < v < b_2)$$

함수 $F(u,v)$의 평균

$$\overline{F(u,v)} = \int_{a_1}^{a_2}\int_{b_1}^{b_2} dudvF(u.v)\mathscr{P}(u,v)$$

⊙ 변수의 변환

$\phi(u)$; u의 연속함수

문제 ; $\mathscr{P}(u)du$가 $u \sim u+du$일 확률일 때 이에 대응되는 ϕ가
$\phi \sim \phi + d\phi$일 확률 $W(\phi)d\phi$는 $\mathscr{P}(u)du$와 어떤 관계인가?

$W(\phi)d\phi$; $\phi \sim \phi + d\phi$값을 갖는 $\mathscr{P}(u)du$의 합

$$W(\phi)d\phi = \int_{d\phi}\mathscr{P}(u)du$$
$$= \int_{\phi}^{\phi + d\phi}\mathscr{P}(u)\left|\frac{du}{d\phi}\right|d\phi$$
$$= \mathscr{P}(u)\left|\frac{du}{d\phi}\right|d\phi$$

☞ 주어진 ϕ에 대해 $u(\phi)$는 유일한 값을 가짐을 가정

아닐 경우

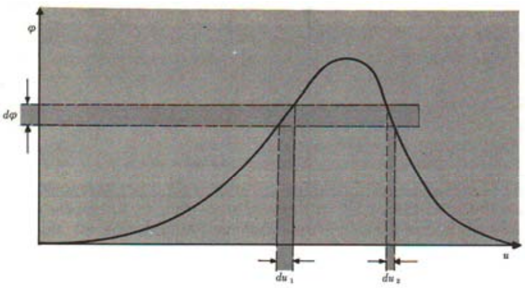

Fig. 1·8·3 Illustration showing a function φ(u) which is such that u(φ) is a double-valued function of φ. Here the range dφ corresponds to u being either in the range du₁ or in the range du₂.

1.9 멋대로 걷기 평균값의 일반적 계산

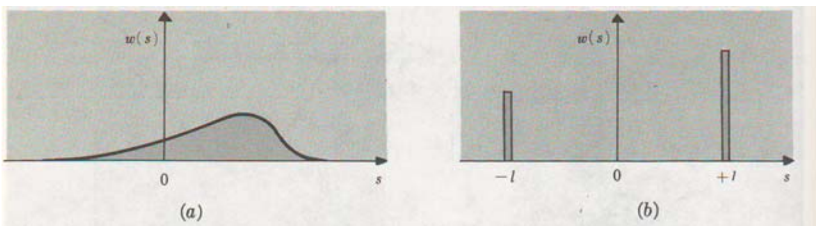

Fig. 1·9·1 Some examples of probability distributions giving, for any one step, the probability w(s) ds that the displacement is between s and s + ds. (a) A rather general case, displacements to the right being more probable than those to the left. (b) The special case discussed in Sec. 1·2. Here the peaks, centered about +l and −l, respectively, are very narrow; the area under the right peak is p, that under the left one is q. (The curves (a) and (b) are not drawn to the same scale; the total area under each should be unity.)

s_i ; i 번째 걸음의 변위(양수 혹은 음수)

$w(s_i)ds_i$; i번째 걸음에서 변위가 $s_i \sim s_i + ds_i$일 확률, 보폭이 일정하지 않음

가정 ; 1. 각 걸음의 확률은 독립

2. 모든 걸음에서 w는 동일한 값

$\mathscr{P}(x)dx$; N걸음후 위치가 $x \sim x+dx$일 확률

$\mathscr{P}(x)$의 형태는?

$\overline{x}$는?

$\overline{(\Delta x)^2}$는?

- $\overline{x}$의 표현

$$x = s_1 + s_2 + \cdots + s_N = \sum_{i=1}^{N} s_i$$

$$\overline{x} = \overline{s_1} + \overline{s_2} + \cdots + \overline{s_N} = \sum_{i=1}^{N} \overline{s_i}$$

$\overline{s_i} = \int s_i w(s_i) ds_i$; $w(s_i)$는 모든 s_i에 대해 동일하므로

$$\overline{s_i} = \int s\, w(s) ds \equiv \overline{s}$$

$$\Rightarrow\ \overline{x} = N\overline{s}$$

- $\overline{(\Delta x)^2}$의 표현

$$\Delta x = x - \overline{x} = \sum_i s_i - \sum_i \overline{s_i} = \sum_i (s_i - \overline{s})$$

$$= \sum_i \Delta s_i \qquad (\Delta s_i \equiv s_i - \overline{s})$$

$$(\Delta x)^2 = \left(\sum_i \Delta s_i\right)\left(\sum_j \Delta s_j\right) = \sum_i (\Delta s_i)^2 + \sum_{i \neq j} \Delta s_i \Delta s_j$$

$$\overline{(\Delta x)^2} = \sum_i \overline{(\Delta s_i)^2} + \sum_{i \neq j} \overline{\Delta s_i \Delta s_j}$$

각각의 걸음은 독립적이므로 $i \neq j$ 이면

$$\overline{\Delta s_i \Delta s_j} = \overline{\Delta s_i}\ \overline{\Delta s_j} = 0$$

☞ $\overline{\Delta s_i} = \overline{s_i} - \overline{s} = 0$

$$\overline{(\Delta x)^2} = \sum_i \overline{(\Delta s_i)^2}$$

$$\overline{(\Delta s_i)^2} = \int ds_i w(s_i)(s_i - \overline{s})^2 = \int ds w(s)(s - \overline{s})^2 \equiv \overline{(\Delta s)^2} \qquad (\Delta s = s - \overline{s})$$

$$\overline{(\Delta x)^2} = N\overline{(\Delta s)^2} \qquad \text{(분산)}$$

$$\Delta^* x = [\overline{(\Delta x)^2}]^{\frac{1}{2}} \propto \sqrt{N} \qquad \text{(표준편차)}$$

$$\overline{x} \propto N$$

☞ N이 증가하면 $\Delta^* x$, $\overline{x}$ 모두 증가하지만
상대적인 표준편차 $\Delta^* x / \overline{x} \propto N^{1/2}$ 이 되어

☞ N이 매우 크면 x의 분포가 $\overline{x}$로부터 벗어나는 정도는 아주 작아진다

☞ 큰 분포를 포함하는 통계적 분포의 전형적 특징

1.10※ 확률분포의 계산

N걸음 후 위치가 $x \sim x+dx$일 확률 $\mathscr{P}(x)dx$구하기

$w(s_i)ds_i$; N번째 걸음에서 변위가 $s_i \sim s_i ds_i$ 일 확률

N번 시행할 때, 각각의 걸음은 독립이므로

$$\mathscr{P}(x)dx \propto w(s_1)ds_1 w(s_2)ds_2 \cdots w(s_N)ds_N$$

위치가 $x \sim x+dx$가 되는 $\sum_i s_i$의 경우를 모두 고려해야 하므로

$$\mathscr{P}(x)dx = \int \cdots \int_{dx} ds_1 w(s_1) ds_2 w(s_2) \cdots ds_N w(s_N) \quad (1.10.2)$$

$$x < \sum_i s_i < x+dx \quad (1.10.3)$$

식(1.10.3)을 만족하는 경우를 모두 구하는 것은 어려운 문제

※ Dirac delta 함수의 도입

$\delta(x-x_0)dx = 1$이면

$$\delta(x-x_0) = \begin{cases} (dx)^{-1} & (x_0 - \frac{1}{2}dx < x < x_0 + \frac{1}{2}dx) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases}$$

$$\mathscr{P}(x)dx = \int \cdots \int ds_1 \cdots ds_N w(s_1) \cdots w(s_N) \delta(x - \sum_i s_i) dx \quad (1.10.4)$$

☞ 식(1.10.3)을 만족하는 s_i의 경우를 찾을 필요가 없음

$$\delta(x - \sum_i s_i) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{i(\sum_i s_i - x)k}$$; 식(1.10.4)에 대입

☞ 수리물리교재 $f(x) = \frac{1}{2\pi} \int g(\alpha) e^{i\alpha x} d\alpha$

$$\mathscr{P}(x) = \int \int \cdots \int \Pi_i ds_i w(s_i) \frac{1}{2\pi} \int dk e^{ik(s_1 + \cdots + s_N - x)}$$
$$= \frac{1}{2\pi} \int dk e^{-ikx} \int ds_1 e^{iks_1} w(s_1) \cdots \int ds_N e^{iks_N} w(s_N)$$

$$Q(k) = \int_{-\infty}^{\infty} ds e^{iks} w(s) \quad (1.10.7)$$

☞ 모든 s_i에 대해 $w(s_i)$ 는 동일하다는 가정

$$\mathscr{P}(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{ikx} Q^N(k)$$

(보기) 멋대로 걷기 ; $w(s)$, $Q(k)$, $\mathscr{P}(x)$의 계산

l : 한 걸음 거리, p : 오른 걸음 확률, q : 왼 걸음 확률

$$w(s) = p\delta(s-l) + q\delta(s+l)$$

$$Q(k) = \int_{-\infty}^{\infty} ds e^{iks} [p\delta(s-l) + q\delta(s+l)]$$
$$= pe^{ikl} + qe^{-ikl}$$

$$Q^N(k) = (pe^{ikl} + qe^{-ikl})^N$$
$$= \sum_{n=0}^{N} \frac{N!}{n!(N-n)!}(pe^{ikl})^n \cdot (qe^{-ikl})^{N-n}$$
$$= \sum_{n=0}^{N} \frac{N!}{n!(N-n)!} p^n q^{N-n} e^{ikl(2n-N)}$$
$$\mathscr{P}(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dke^{-ikx} \sum_n \frac{N!}{n!(N-n)!} p^n q^{N-n} e^{ikl(2n-N)}$$
$$= \sum_{n=0}^{N} \frac{N!}{n!(N-n)!} p^n q^{N-n} \delta[l(2n-N)-x]$$
$$\mathscr{P}(x) = 0 \quad \text{when} \quad x \neq (2n-N)l, \quad where\ n = 0,1,2,\cdots,N$$

- 확률 $P(2n-N)$

$$P(2n-N) = \int_{(2n-N)l-\epsilon}^{(2n-N)l+\epsilon} \mathscr{P}(x)dx = \frac{N!}{n!(N-n)!} p^n q^{N-n}$$

1.11※ N이 클 때의 확률분포

식(1.10.7)의 e^{iks} ; k가 큰 값일수록 s에 대해 빠르게 진동

Q^N에서 N이 증가할 수록 $Q^N(k)$ 는 큰 k값에 대해 빠르게 감소

(보충설명)

$Q(k) = \int dse^{iks}w(s)$; $a < s < b$에서 $w(s)$는 완만히 변화

$$Q(k) = \int_a^b dse^{iks}w(s) \approx w(a)\int dse^{iks}$$

k가 큰 값이면 e^{iks}는 빠르게 진동하므로 $\frac{1}{k} \ll |b-a|$ 이면

$\int dse^{iks} \simeq 0$ (설명 끝)

k가 큰 값 영역의 기여도가 작으므로 주된 기여는 작은 k 영역이 담당

Taylor 전개

$$Q(k) = \int_{-\infty}^{\infty} dsw(s)e^{iks} = \int_{-\infty}^{\infty} dsw(s)(1 + iks - \frac{1}{2}k^2s^2 + \cdots)$$
$$= 1 + ik\overline{s} - \frac{1}{2}k^2\overline{s^2} + \cdots$$
$$\overline{s^n} = \int dsw(s)s^n$$
$$\ln Q^N(k) = N\ln Q(k) = N\ln[1 + i\overline{s}k - \frac{1}{2}\overline{s^2}k^2 + \cdots]$$
$$= N[i\overline{s}k - \frac{1}{2}\overline{s^2}k^2 - \frac{1}{2}(i\overline{s}k)^2 + \cdots]$$
$$= N[i\overline{s}k - \frac{1}{2}k^2(\overline{s^2} - \overline{s}^2) + \cdots]$$
$$= N[i\overline{s}k - \frac{1}{2}\overline{(\Delta s)^2}k^2 + \cdots]$$
$$Q^N(k) \simeq e^{iN\overline{s}k - \frac{1}{2}N\overline{(\Delta s)^2}k^2}$$

$$\begin{aligned}\mathscr{P}(x) &= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dk e^{-ikx} Q^N(k) \\ &= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dk e^{ik(N\bar{s}-x)-\frac{1}{2}N\overline{(\Delta s)^2}k^2} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-(x-\mu)^2/2\sigma^2}\end{aligned}$$

☞ $\mu \equiv N\bar{s}, \quad \sigma^2 \equiv N\overline{(\Delta s)^2}$

$w(s)$가 어떤 꼴이든

① 각 걸음이 독립이고 ② s가 증가하면 $w(s)$는 충분히 빠르게 감소하며

③ N이 매우 큰 수이면 확률분포는 Gaussian으로 주어짐

④ 자연에서 다입자로 이루어진 무수히 많은 현상은 Gaussian distribution을 따름

$$\bar{x} = \int \mathscr{P}(x) \cdot x dx = \mu$$

$$\overline{(\Delta x)^2} = \int \mathscr{P}(x)(x^2 - \bar{x}^2) dx = \sigma^2$$