Entropie und Maß der Unbestimmtheit

Betrachte ein System mit N diskreten Zuständen oder Ereignisse $k = 1, .., N$ mit Wahrscheinlichkeiten p_k ; $\sum_{k=1}^{N} p_k = 1$

Die Entropie

$$S = -\text{const.} \sum_{k=1}^{N} p_k \ln p_k = S(p_1, .., p_N)$$

ist ein Maß der Unbestimmtheit. Bis auf die positive Proportionalitätskonstante ist es eindeutig durch folgende Eigenschaften bestimmt:

a) $S(p_1, .., p_N)$ ist stetig in allen p_k

b) $S\left(\frac{1}{N}, .., \frac{1}{N}\right)$ ist monoton wachsend mit N

c) Kompositionsregel: S ist invariant unter Zusammenfassung von Zuständen/Ereignissen zu Teilmengen: Seien z.B. die Zustände $1 \leq k \leq j$ zu $\mathcal{M}_1$ und die Zustände $j+1 \leq k \leq N$ zu $\mathcal{M}_2$ zusammengefaßt. Mit

$$w_1 := \sum_{k=1}^{j} p_k \; ; \quad w_2 = \sum_{k=j+1}^{N} p_k = 1 - w_1$$

Gesamtwahrscheinlichkeiten von $\mathcal{M}_1$ bzw. $\mathcal{M}_2$

$p_k^{(1)} := \dfrac{p_k}{w_1}$ "Wahrscheinlichkeit innerhalb $\mathcal{M}_1$" $1 \leq k \leq j$

$p_k^{(2)} := \dfrac{p_k}{w_2}$ " " $\mathcal{M}_2$ $j+1 \leq k \leq N$

gilt dann

$$S(p_1 .., p_N) = S(w_1, w_2) + w_1 S(p_1^{(1)}, .., p_j^{(1)}) + w_2 S(p_{j+1}^{(2)}, .., p_N^{(2)})$$

Eigenschaften der Entropie

a) $S \geq 0$ da $0 \leq p_k \leq 1$ $\ln p_k \leq 0$

$S = 0 \Leftrightarrow \exists k \quad p_k = 1$ → nur ein sicheres Ereignis
Informationsgewinn $= 0$

b) Für zwei beliebige Wahrscheinlichkeitverteilungen $\{p_1, .., p_N\}$, $\{p_1', .., p_N'\}$ gilt:

$$\sum_{k=1}^{N} p_k' \ln \frac{p_k'}{p_k} \geq 0$$

und Gleichheitszeichen genau dann wenn $p_k = p_k' \ \forall k$

Beweis: Es gilt $\ln x \geq 1 - \frac{1}{x} \quad \forall x > 0$

da $\ln 1 = 1 - \frac{1}{1} = 0$ und $\frac{d \ln x}{dx} = \frac{1}{x} \geq \frac{1}{x^2} = \frac{d}{dx}\left(1 - \frac{1}{x}\right)$; $x \geq 1$

und $\frac{d \ln x}{dx} = \frac{1}{x} \leq \frac{1}{x^2} = \frac{d}{dx}\left(1 - \frac{1}{x}\right)$; $x \leq 1$

$$\Rightarrow \ln \frac{p_k'}{p_k} \geq 1 - \frac{p_k}{p_k'}$$

multipliziere mit p_k' und summiere über k

$$\Rightarrow \sum_{k=1}^{N} p_k' \ln \frac{p_k'}{p_k} \geq \sum_{k=1}^{N} (p_k' - p_k) = 0$$

$$\Rightarrow S\left(\tfrac{1}{N}, .., \tfrac{1}{N}\right) = -\sum_{k=1}^{N} \frac{1}{N} \ln \frac{1}{N} + \underbrace{\sum_{k=1}^{N} p_k' \ln p_k' + S(p_1', .. p_N')}_{=0}$$

$$= -\ln \frac{1}{N} \sum_{k=1}^{N} p_k' + \sum_{k=1}^{N} p_k' \ln p_k' + S(p_1', .., p_N')$$

$$= \sum_{k=1}^{N} p_k' \ln \frac{p_k'}{(1/N)} + S(p_1', .. p_N') \geq S(p_1', .. p_N')$$

c) $\Rightarrow$ Gleichverteilung hat maximale Entropie

$$S\left(\tfrac{1}{N}, .., \tfrac{1}{N}\right) = \ln N$$

d) Die Information die man erhält wenn man ein Ereignis der Wahrscheinlichkeit p_k beobachtet ist

$$I(p_k) = -\ln p_k \qquad \text{(je größer, je kleiner Wahrscheinlichkeit)}$$

$$\Rightarrow S = \sum_{k=1}^{N} p_k I(p_k) \quad \rightarrow \text{mittlere Information der Verteilung } \{p_1 \ldots, p_N\}$$

Erweiterungen auf unendliche Systeme:

$$S(p_1, \ldots, p_n, \ldots) = -\sum_{k=1}^{\infty} p_k \ln p_k$$

$$S(p) = -\int_{-\infty}^{+\infty} p(x) \ln p(x)\, dx$$

Bestimmung der Wahrscheinlichkeiten für die Zustände eines Systems

Prinzip: maximale Unbestimmtheit oder Entropie

Betrachte N Zustände mit Energien

$$\varepsilon_1 \leq \varepsilon_2 \leq \ldots \varepsilon_N \qquad N \gg 1$$

Wir kennen lediglich den Mittelwert der Energie

$$E = \overline{E} = \sum_k \varepsilon_k p_k$$

z.B. ideales Gas $N \simeq 10^{23}$ Moleküle

Maximiere $S = -\sum_k p_k \ln p_k$ unter den Nebenbedingungen $\sum_k p_k = 1$

$\sum_k \varepsilon_k p_k = E$

Methode der Langrange-Multiplikatoren: Suche Extremum der neuen Funktion

$$f(p_1, \ldots, \lambda, \beta) = -\sum_k p_k \ln p_k + \lambda\left(1 - \sum_k p_k\right) + \beta\left(E - \sum_k \varepsilon_k p_k\right)$$