Статистический подход

- Микросостояние статистической системы
- Задача статистической физики
- Статистический ансамбль систем
- Основные понятия теории вероятностей
  - Функция плотности вероятности
  - Вероятность
  - Условие нормировки
  - Среднее значение
  - Дисперсия
- Биномиальное распределение
- Предельные формы биномиального распределения
  - Распределение Пуассона
  - Распределение Гаусса

Методы описания молекулярной физики

Предмет молекулярной физики является изучение молекулярной формы движения, т.е. движения больших совокупностей молекул.

Термодинамический

Не интересуются движением отдельных частиц, а для описания используются усредненными свойствами и характеристиками: V, P, T, m, μ, которые определяют экспериментально.

Статистический

Подход основан на применении статистических законов, дает возможность получить предсказания, которые носят не достоверный, а лишь вероятностный характер.

Динамический

Микросостояние статистической системы

Статистический метод описания базируется на знании «микроскопического строения» системы. Поэтому статистическая теория является микроскопической.

- **Микросостояние статистической системы** – это состояние системы, охарактеризованное настолько подробно, что заданы состояния всех образующих систему частиц.
- **Микропараметры**– характеристики одной частицы статистической системы, определяющие ее состояние в этой системе.

Если рассмотреть 1 моль газа, то микросостояние $N=6{,}02214129(27)\cdot 10^{23}$ частиц характеризуется его координатами и скоростями. Все эти 6N чисел следует рассматривать как случайные величины, они будут характеризовать микросостояние системы.

Макросостояние

- **Макросостояние** – состояние системы, описанное с помощью макроскопически измеряемых параметров – макропараметров.
- **Макропараметр** – величина, которая может быть определена с помощью макроскопических измерений, ее значение зависит от суммарного действия всех частиц системы.

Если рассмотреть 1 моль газа, то состояние характеризуется тремя макропараметрами: p, V, T, которые в стационарном состоянии постоянны.

Задача статистической физики

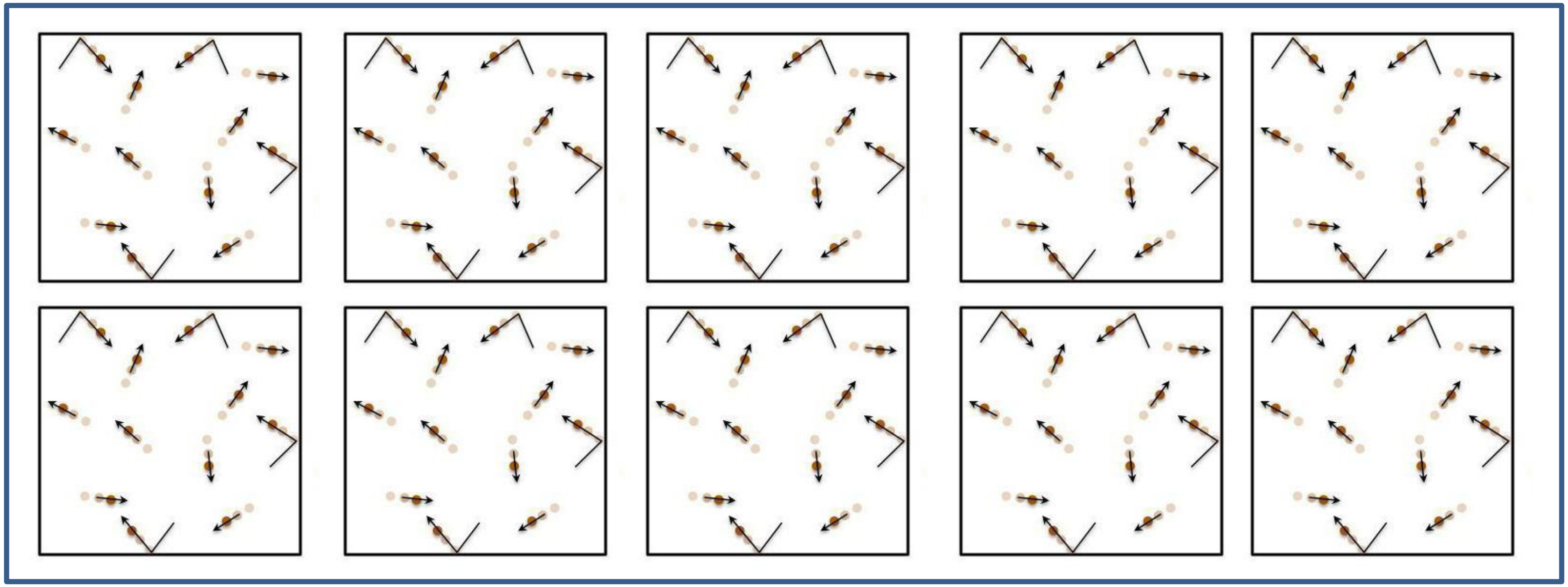
- Однако частицы газа в стационарном состоянии движутся и, следовательно, его микроскопические состояния беспрерывно изменяются. Таким образом, одному и тому же макроскопическому состоянию соответствует **очень большое** множество микроскопических состояний.
- Иначе можно сказать, что данное макроскопическое состояние осуществляется посредством **очень большого** числа микроскопических состояний.

Задача статистической физики состоит в исследовании связи между микро- и макроскопическими состояниями систем.

Микроскопическое описание		m (число «решек»)	$\Gamma(n,m)$	$P(n,m)$
№ микросостояния s	Доступные микросостояния			
1	0 0 0 0	0	$\Gamma(4,0)=C_4^0=1$	$1/16=0{,}0625$
2	r 0 0 0	1	$\Gamma(4,1)=C_4^1=4$	$4/16=0{,}25$
3	0 r 0 0			
4	0 0 r 0			
5	0 0 0 r			
6	r r 0 0	2	$\Gamma(4,2)=C_4^2=6$	$6/16=0{,}375$
7	r 0 r 0			
8	r 0 0 r			
9	0 r r 0			
10	0 r 0 r			
11	0 0 r r			
12	r r r 0	3	$\Gamma(4,3)=C_4^3=4$	$4/16=0{,}25$
13	r r 0 r			
14	r 0 r r			
15	0 r r r			
16	r r r r	4	$\Gamma(4,4)=C_4^4=1$	$1/16=0{,}0625$

Статистический ансамбль систем

- Возьмем очень большое число M совершенно одинаковых сосудов, каждый из которых имеет объем V. В каждом из сосудов находится одинаковое число N одинаковых частиц. Сосуд с заключенными в нем частицами называется **статистической системой**
- Совокупность одинаковых статистических систем называется **статистическим ансамблем**.



Основные понятия теории вероятностей

- **Случайное событие –** это такое событие, которое в результате испытаний может произойти.
- **Случайная величина –** это величина, значение которой не может быть заранее предсказано. Существует вероятность, с которой случайная величина принимает одно из возможных значений.
- **Статистическое описание микроскопической случайной величины** включает в себя определение всех возможных (доступных) состояний этой величины и вероятностей, с которыми она их принимает, т. е определение закона распределения случайной величины.
- **Вероятность –** количественная характеристика наступления события.

Основные понятия теории вероятностей

- **Основной постулат статистической физики** – если изолированная система находится в равновесии, то ее можно обнаружить с равной вероятностью $P_s = 1/\Gamma_0$,

где Γ_0 – полное число доступных микросостояний.

- **Термодинамическая вероятность** $\Gamma(n,m)$ макросостояния системы, состоящей из n частиц и имеющей значение макропараметра m, – число микросостояний, которыми осуществляется данное макросостояние.
- **Математическая вероятность** макросостояния $P(n,m)$ равна отношению термодинамической вероятности $\Gamma(n,m)$ к полному числу Γ_0 доступных микросостояний системы: $P(n,m) = \Gamma(n,m) / \Gamma_0$.

Микроскопическое описание		m (число «решек»)	$\Gamma(n,m)$	$P(n,m)$
№ микросостояния s	Доступные микросостояния			
1	0 0 0 0	0	$\Gamma(4,0)=C_4^0=1$	$1/16=0,0625$
2	r 0 0 0	1	$\Gamma(4,1)=C_4^1=4$	$4/16=0,25$
3	0 r 0 0			
4	0 0 r 0			
5	0 0 0 r			
6	r r 0 0	2	$\Gamma(4,2)=C_4^2=6$	$6/16=0,375$
7	r 0 r 0			
8	r 0 0 r			
9	0 r r 0			
10	0 r 0 r			
11	0 0 r r			
12	r r r 0	3	$\Gamma(4,3)=C_4^3=4$	$4/16=0,25$
13	r r 0 r			
14	r 0 r r			
15	0 r r r			
16	r r r r	4	$\Gamma(4,4)=C_4^4=1$	$1/16=0,0625$

Основные понятия теории вероятностей

- **Условие нормировки**

$$\sum_{i=1}^{n} \mathrm{P}_i = 1$$

- **Математическое ожидание или среднее значение**

$$\langle \xi \rangle = \sum_{i=1}^{n} \xi_i \mathrm{P}_i$$

Простейшие математические операции с вероятностями. Сложение вероятностей.

Пусть происходят два события А и В с вероятностями Р(А) и Р(В) соответственно. Определим событие С=А+В как событие, наступающее при появлении **либо** события А, **либо** события В.

- **Если события А и В взаимоисключающие**

$$\mathrm{P}(C) = \mathrm{P}(A + B) = \mathrm{P}(A) + \mathrm{P}(B)$$

- **Если события А и В не взаимно исключающие**

$$\mathrm{P}(A + B) = \mathrm{P}(A) + \mathrm{P}(B) - \mathrm{P}(AB)$$

Простейшие математические операции с вероятностями. Умножение вероятностей.

Рассмотрим теперь, как рассчитывается вероятность P(AB) одновременного наступления событий. Если есть два события A и B, то можно ввести условную вероятность P(A/B) наступления события A при условии, что событие B наступило.

$$\mathrm{P}(AB) = \mathrm{P}(A/B) \cdot \mathrm{P}(B)$$

Если условная вероятность события A не зависит от события B, то P(A/B)= P(A), а события называются **статистически независимыми**. В этом случае формула умножения вероятностей приобретает наиболее простой вид:

$$\mathrm{P}(AB) = \mathrm{P}(A) \cdot \mathrm{P}(B)$$

Непрерывная случайная величина Функция плотности вероятности

Вероятность того, что значение случайной величины *x*, принимающей непрерывный ряд значений, находится в бесконечно малом интервале значений *(x,x+dx)* пропорциональна ширине *dx* этого интервала:

$$dP(x, x+dx) = f(x)dx$$

Функция *f(x)* описывает распределение случайной величины и называется **функцией плотности вероятности**. Она равна отношению вероятности *dP(x,x+dx)* к величине dx :

$$f(x) = \frac{P(x, x+dx)}{dx}$$

Условие нормировки для функции плотности вероятности

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)dx = 1$$

Непрерывная случайная величина
Функция плотности вероятности

Вероятность $P(x_1,x_2)$ того, что значение случайной величины x находится в интервале от x_1 до x_2, равна

$$P(x_1, x_2) = \int_{x_1}^{x_2} f(x)dx$$

Вычисление средних значений:

$$\langle \varphi(x) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(x) f(x)dx$$

Дисперсия

Дисперсия характеризует разброс случайной величины около среднего значения. Она определяется как среднее значение квадрата отклонения величины от ее среднего значения:

$$\sigma^2 = \left\langle (\xi - \langle\xi\rangle)^2 \right\rangle =$$

$$= \left\langle \xi^2 - 2\xi\langle\xi\rangle + \langle\xi\rangle^2 \right\rangle = \langle\xi^2\rangle - \langle\xi\rangle^2$$

Корень квадратный из дисперсии называется **стандартным**, или **среднеквадратичным отклонением**.

Для дисперсии дискретной случайной величины:

$$\sigma^2 = \left\langle (\xi - \langle\xi\rangle)^2 \right\rangle = \sum_{i=1}^{n} (\xi_i - \langle\xi\rangle)^2 \mathrm{P}_i$$

Элементы комбинаторики

- **Число перестановок** из n элементов (P_n) – число способов, которыми можно расположить в ряд n элементов:

$$P_n = n!$$

- **Число размещений** из n элементов по m (A^m_n) – число способов, которыми можно выбрать и расположить в ряд m элементов из данного множества, содержащего n различных элементов

$$A_n^m = \frac{P_n}{P_{n-m}} = \frac{n!}{(n-m)!}.$$

Элементы комбинаторики

- **Число сочетаний** из n элементов по m (C^m_n) – число способов, которыми можно выбрать m элементов из данного множества, содержащего n одинаковых (неразличимых) элементов.

$$C_n^m = \frac{A_n^m}{P_m} = \frac{n!}{m!(n-m)!}.$$

Биномиальное распределение

$$\mathrm{P}_n(m) = \frac{n!}{m!(n-m)!} p^m q^{n-m}$$

- **$\mathbf{P_n(m)}$** – вероятность состояния, в котором из n частиц системы m частиц находятся в благоприятных микросостояниях;
- **p** – вероятность, с которой каждая частица находится в благоприятном состоянии;
- **q=1−p** – вероятность, с которой каждая частица находится в неблагоприятном состоянии (с которой частица не находится в благоприятном состоянии);
- **Среднее значение** $\langle m \rangle = np$
- **Дисперсия** $\sigma_m = \sqrt{npq}$

Биномиальное распределение

$$P_n(m) = \frac{n!}{m!(n-m)!} p^m q^{n-m}$$

Например, при бросании монеты вероятность выпадения решки p=1/2, а при бросании n=10 раз вероятность того, что выпадут две решки (m=2), равна

$$P_{10}(2) = \frac{10!}{2!(10-2)!} \left(\frac{1}{2}\right)^2 \left(\frac{1}{2}\right)^{10-2} = 0{,}043$$

Микроскопическое описание		m (число «решек»)	$\Gamma(n,m)$	$P(n,m)$
№ микросостояния s	Доступные микросостояния			
1	0 0 0 0	0	$\Gamma(4,0)=C_4^0=1$	$1/16=0{,}0625$
2	r 0 0 0	1	$\Gamma(4,1)=C_4^1=4$	$4/16=0{,}25$
3	0 r 0 0			
4	0 0 r 0			
5	0 0 0 r			
6	r r 0 0	2	$\Gamma(4,2)=C_4^2=6$	$6/16=0{,}375$
7	r 0 r 0			
8	r 0 0 r			
9	0 r r 0			
10	0 r 0 r			
11	0 0 r r			
12	r r r 0	3	$\Gamma(4,3)=C_4^3=4$	$4/16=0{,}25$
13	r r 0 r			
14	r 0 r r			
15	0 r r r			
16	r r r r	4	$\Gamma(4,4)=C_4^4=1$	$1/16=0{,}0625$

Предельные формы биномиального распределения Распределение Пуассона

1) число частиц (случайных величин) n >>1 (в пределе $n \to \infty$);
2) вероятность p реализации благоприятного события для одной случайной величины очень мала: p <<1;
3) np=const (<m>=np)

$$(p+q)^n = \sum_{m=0}^{n} C_n(m) p^m q^{n-m}$$

$$\boxed{\mathrm{P}(m) = \frac{\langle m \rangle^m}{m!} e^{-\langle m \rangle}}$$

Пример 1. Представим себе, что на 100 монет приходится одна юбилейными. Какова вероятность того, что если взять 200 монет две из них окажутся юбилейными?

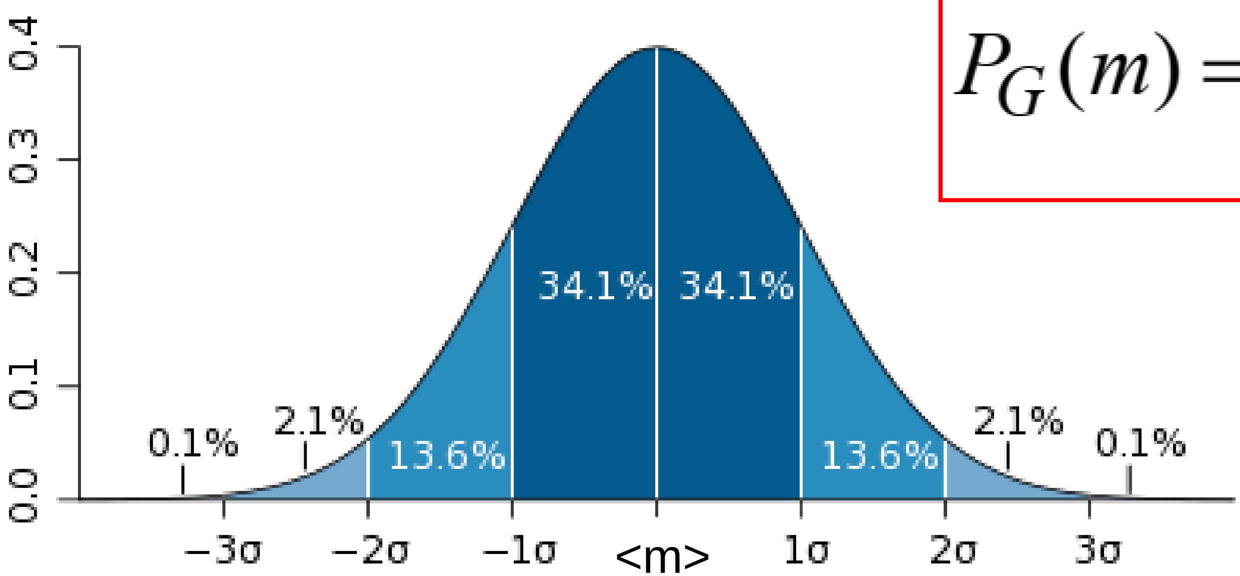
$$\mathrm{P}(2) = \left(\langle 2 \rangle^2 / 2!\right) e^{-\langle 2 \rangle} = 0{,}27$$

Предельные формы биномиального распределения Распределение Гаусса

1) число частиц (случайных величин) n >>1 (в пределе $n \to \infty$);

2) для значений m, близких к <m>, т.е. при отклонении от среднего значения на величину порядка стандартного отклонения.

$$P_G(m) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(m-\langle m\rangle)^2}{2\sigma^2}}$$



$$\frac{d \ln m!}{dm} \approx \ln m$$

Постулат равновероятности

Основной постулат статистической физики – если изолированная система находится в равновесии, то ее можно обнаружить с равной вероятностью $P_s=1/\Gamma_0$,
где Γ_0 – полное число доступных микросостояний.
ИЛИ микросостояния равновесной изолированной системы равновероятны

Эргодическая гипотеза

Эргодическая гипотеза в статистической физике, состоит в предположении, что средние по ансамблю равно среднему по времени.
(из эргодической гипотезы следует постулат равновероятности)

$$\overline{N}_1 = \langle N_1 \rangle \qquad \overline{N}_1 = \lim_{T\to\infty} \frac{1}{T}\int_0^T N_1(t)\cdot dt.$$