

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

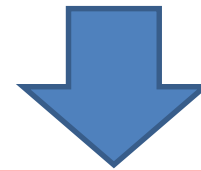
Методы описания молекулярной физики

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 непрерывно 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.

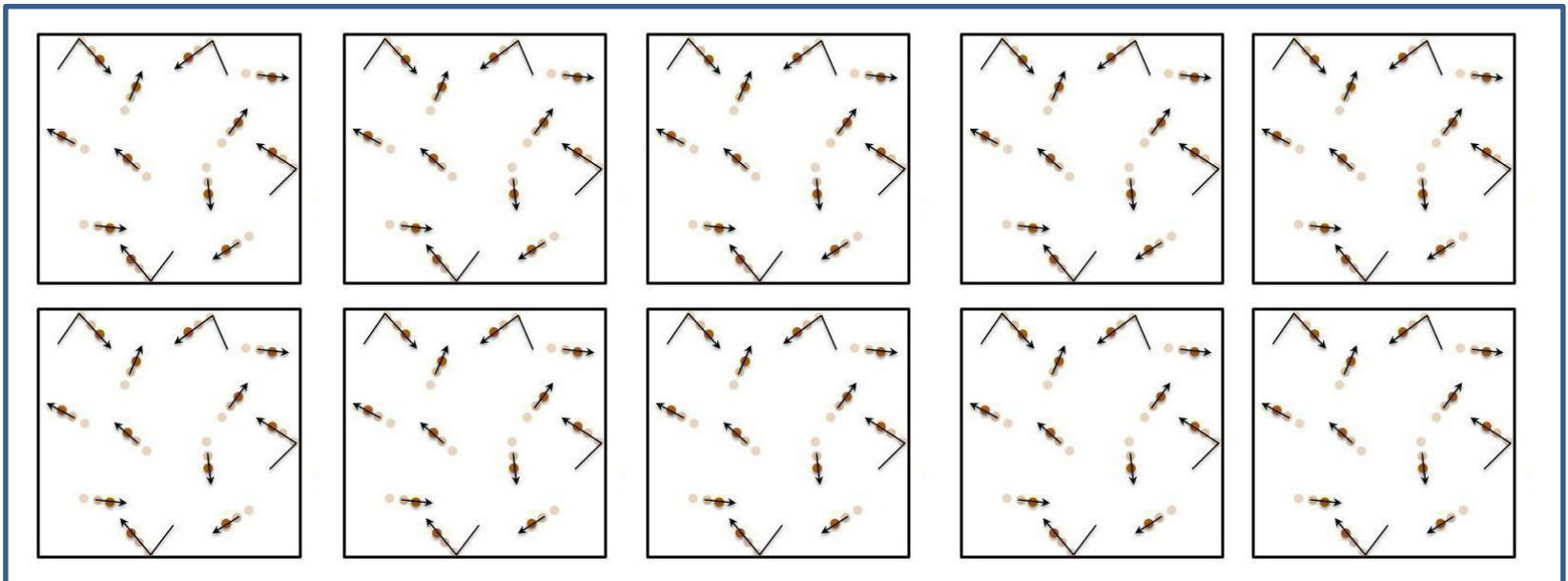
Задача статистической физики состоит в исследовании связи между микро- и макроскопическими состояниями систем.

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: $P(n,m) = \Gamma(n,m) / \Gamma_0$.

Основные понятия теории вероятностей

- Условие нормировки

$$\sum_{i=1}^n P_i = 1$$

- Математическое ожидание или среднее значение

$$\langle \xi \rangle = \sum_{i=1}^n \xi_i P_i$$



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_n^m) – 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_n^m) – число способов, которыми можно выбрать m элементов из данного множества, содержащего n одинаковых (неразличимых) элементов.

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

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	$\Gamma(4, 4) = C_4^4 = 1$	$1/16 = 0,0625$



Простейшие математические операции с вероятностями. Сложение вероятностей.

Пусть происходят два события A и B с вероятностями $P(A)$ и $P(B)$ соответственно. Определим событие $C=A+B$ как событие, наступающее при появлении **либо** события A , **либо** события B .

- Если события A и B **взаимоисключающие**

$$P(C) = P(A + B) = P(A) + P(B)$$

- Если события A и B **не взаимно исключающие**

$$P(A + B) = P(A) + P(B) - P(AB)$$

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:

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

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

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

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.

$$P(AB) = P(A/B) \cdot P(B)$$

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:

$$P(AB) = P(A) \cdot P(B)$$

Дисперсия

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

$$\begin{aligned}\sigma^2 &= \langle (\xi - \langle \xi \rangle)^2 \rangle = \\ &= \langle \xi^2 - 2\xi \langle \xi \rangle + \langle \xi \rangle^2 \rangle = \langle \xi^2 \rangle - \langle \xi \rangle^2\end{aligned}$$

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

Для дисперсии дискретной случайной величины:

$$\sigma^2 = \langle (\xi - \langle \xi \rangle)^2 \rangle = \sum_{i=1}^n (\xi_i - \langle \xi \rangle)^2 P_i$$

Биномиальное распределение

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

- **$P_n(m)$** – 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

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

Предельные формы биномиального распределения

Распределение Пуассона

- 1) число частиц (случайных величин) $n \gg 1$ (в пределе $n \rightarrow \infty$);
- 2) вероятность p реализации благоприятного события для одной случайной величины очень мала: $p \ll 1$;
- 3) $np = \text{const}$ ($\langle m \rangle = np$)

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

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

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

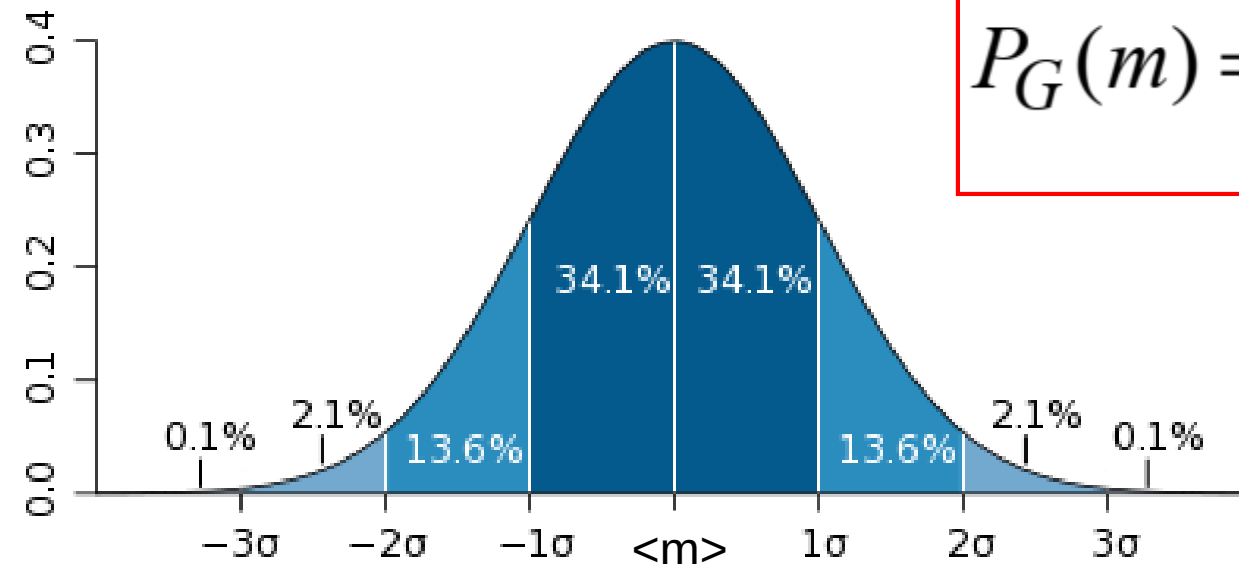
$$P(2) = \left(\langle 2 \rangle^2 / 2! \right) e^{-\langle 2 \rangle} = 0,27.$$

Предельные формы биномиального распределения

Распределение Гаусса

- 1) число частиц (случайных величин) $n \gg 1$ (в пределе $n \rightarrow \infty$);
- 2) для значений m , близких к $\langle m \rangle$, 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 – микросостояния равновесной изолированной системы равновероятны и равны $P_s = 1/\Gamma_0$,

Эргодическая гипотеза

Эргодическая гипотеза в статистической физике, состоит в предположении, что средние по ансамблю равно среднему по времени.

(из эргодической гипотезы следует постулат равновероятности)

$$\overline{N}_1 = \langle N_1 \rangle$$

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