Статистический подход

- Микросостояние статистической системы
- Задача статистической физики
- Статистический ансамбль систем
- Основные понятия теории вероятностей
    - Функция плотности вероятности
    - Вероятность
    - Условие нормировки
    - Среднее значение
    - Дисперсия

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.

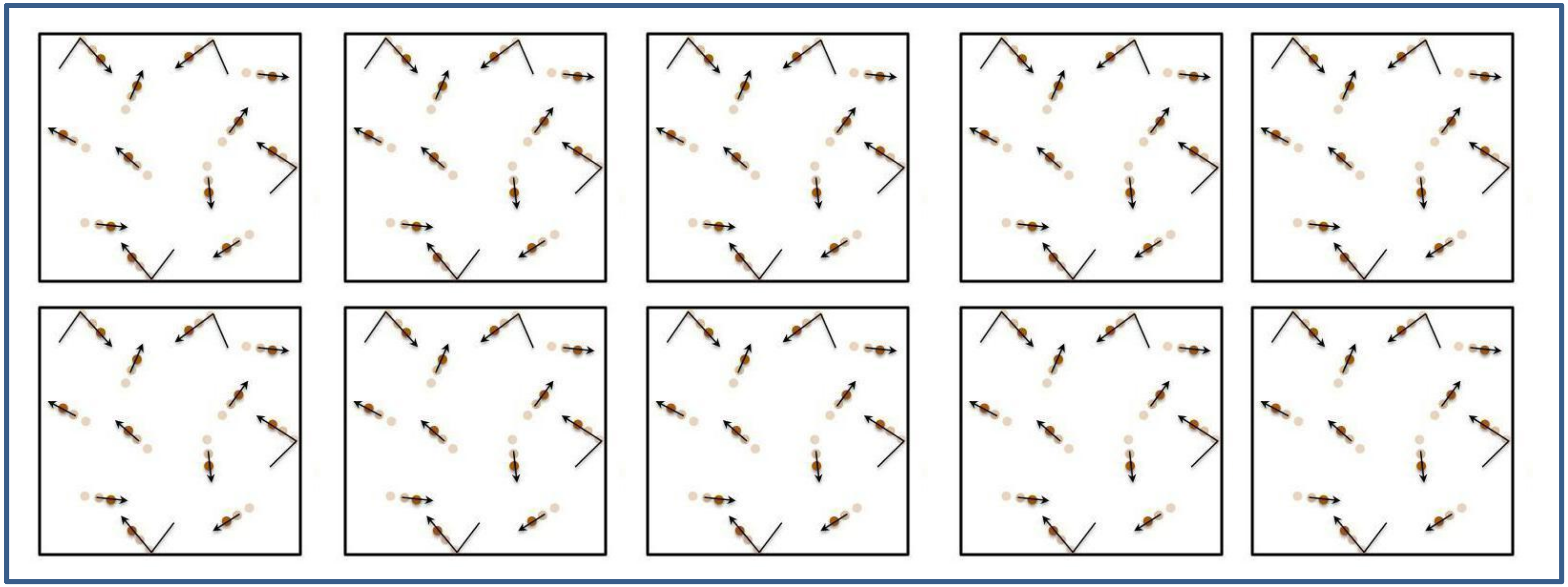
Задача статистической физики

- 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.

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 $P_s=1/Г_0$,

где $Г_0$ − полное число доступных микросостояний.

- **Термодинамическая вероятность** Г(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 Г(n,m) к полному числу $Г_0$ доступных микросостояний системы: $P(n,m) = Г(n,m)\,/Г_0$.

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)

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

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

Основные понятия теории вероятностей

- **Условие нормировки**

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

- **Математическое ожидание или среднее значение**

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

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.

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

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 $P(x_1,x_2)$ 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

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

Дисперсия

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

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

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

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