Глава 2. СТАТИСТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА РАВНОВЕСНЫХ СИСТЕМ

§6. Некоторые вероятностные представления

Краткие теоретические сведения

В рамках данного пособия невозможно дать строгое определение математической вероятности и связанных с ней понятий. Необходимые сведения в полном объеме читатель может найти в соответствующих учебниках по математике. Ниже приведены лишь те понятия и формулы, которые будут активно использоваться в этом пособии. Требование краткости изложения заставило опустить в приводимых формулировках некоторые аспекты, обсуждение которых не принципиально для решения физических задач.

Вероятностью события A называют отношение числа m, соответствующих этому событию реализаций, к полному числу n возможных попарно несовместных равновероятных реализаций: $P(A) = m/n$. Если в результате некоторого события величина x может принимать несколько различных значений, то она называется случайной. В дальнейшем будем рассматривать два типа таких величин.

Дискретная случайная величина может принимать конечное или бесконечное, но счетное число значений x_1, x_2, ..., x_n, каждое из которых характеризуется своей вероятностью $P(x_i)$. Зависимость $P(x)$ в этом случае называется функцией распределения вероятностей дискретной случайной величины. При этом суммарная вероятность, как вероятность достоверного события, равна единице: $\sum\limits_{i=1}^{n} P(x_i) = 1$.

Непрерывная случайная величина x может принимать бесконечное и несчетное число значений из некоторого интервала (a, b). Для неё вводят плотность вероятности (или плотность распределения вероятностей) $w^{(1)}(x)$

случайной величины x, определяемую из условия, что $w^{(1)}(x)dx$ есть вероятность того, что x попадает в интервал значений $(x, x+dx)$.

В отличие от вероятности, являющейся безразмерной величиной, плотность распределения вероятностей имеет размерность, обратную x, а также удовлетворяет условию нормировки: $\int\limits_a^b w^{(1)}(x)dx = 1$. Зависимость

$$F_1(\tilde{x}) = \int\limits_a^{\tilde{x}} w^{(1)}(x)dx \tag{6.1}$$

называют функцией распределения непрерывной случайной величины. При каждом $\tilde{x}$ она принимает значение, равное вероятности того, что x попадает в интервал $(a, \tilde{x})$. Математическим ожиданием, или средним значением дискретной или непрерывной случайной величины x называют соответственно выражения:

$$\bar{x} = \sum_{i=1}^{n} x_i P(x_i), \qquad \bar{x} = \int\limits_a^b x\, w^{(1)}(x)dx. \tag{6.2}$$

Среднее значение функции $f(x)$ определяется с помощью соотношений:

$$\overline{f(x)} = \sum_{i=1}^{n} f(x_i)P(x_i), \qquad \overline{f(x)} = \int\limits_a^b f(x)w^{(1)}(x)dx. \tag{6.3}$$

Дисперсия $\sigma^2(x)$ дискретной или непрерывной случайной величины x определяется формулами:

$$\sigma^2(x) = \sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})^2 P(x_i), \qquad \sigma^2(x) = \int\limits_a^b (x-\bar{x})^2 w^{(1)}(x)dx. \tag{6.4}$$

Величину $\sigma(x)$ называют средним квадратичным, или стандартным отклонением. Она показывает меру разброса x относительно $\bar{x}$. Относительную флуктуацию случайной величины x определим как $\delta(x) = \sigma(x)/\bar{x}$. Если задана функция $y = y(x)$ и существует обратная функция $x(y)$, а также известна плотность распределения вероятностей $w^{(1)}(x)$ случайной величины x, то $w^{(1)}(y) = w^{(1)}(x(y))\,|dx/dy|$.

Совместная плотность распределения вероятностей (или совместная плотность вероятностей) $w^{(n)}(x_1, x_2, ..., x_n)$ одновременно реализуемых случайных величин $x_1, x_2, ..., x_n$ находится из условия, что $w^{(n)}(x_1, x_2, ..., x_n)\, dx_1\, dx_2 ... dx_n$ — вероятность того, что x_1 попадет в интервал значений $(x_1, x_1 + dx_1)$, x_2 — в $(x_2, x_2 + dx_2)$ и т.д. Среднее значение функции $f(x_1, x_2, ..., x_n)$ в этом случае определяется выражением

$$\overline{f(x_1, x_2, ..., x_n)} = \int ... \int w^{(n)}(x_1, x_2, ..., x_n) f(x_1, x_2, ..., x_n)\, dx_1 dx_2 ... dx_n. \quad (6.5)$$

Здесь интегрирование проводится по всей области допустимых значений случайных величин $x_1, x_2, ..., x_n$. Плотность распределения вероятностей одной из величин, например $w^{(1)}(x_m)$, легко найти, зная $w^{(n)}(x_1, x_2, ..., x_n)$:

$$w^{(1)}(x_m) = \int ... \int w^{(n)}(x_1, x_2, ..., x_m, ..., x_n)\, dx_1 dx_2 ... dx_{m-1} dx_{m+1} ... dx_n . \quad (6.6)$$

Зависимость

$$F_n(\widetilde{x}_1, \widetilde{x}_2, ..., \widetilde{x}_n) = \int_{a_1}^{\widetilde{x}_1} \int_{a_2}^{\widetilde{x}_2} ... \int_{a_n}^{\widetilde{x}_n} w^{(n)}(x_1, x_2, ..., x_n) dx_1 dx_2 ... dx_n$$

называется совместной функцией распределения n непрерывных случайных величин. При любых $\widetilde{x}_1, \widetilde{x}_2, ..., \widetilde{x}_n$ она принимает значение, равное вероятности того, что одновременно x_1 попадает в интервал $(a_1, \widetilde{x}_1)$, x_2 в интервал $(a_2, \widetilde{x}_2)$ и т.д.

Пусть n случайных величин $x_1, x_2, ..., x_n$ однозначно связаны с n другими случайными величинами $y_1, y_2, ..., y_n$ формулами: $y_i = y_i(x_1, x_2, ..., x_n)$, где $i = 1, 2, ..., n$. Если известна совместная плотность распределения вероятностей $w^{(n)}(x_1, x_2, ..., x_n)$, а также существуют обратные функции $x_i = x_i(y_1, y_2, ..., y_n)$, то

$$w^{(n)}(y_1, y_2, ..., y_n) = w^{(n)}(x_1(y_1, y_2, ..., y_n), ..., x_n(y_1, y_2, ..., y_n)) \times \times \left| \frac{\partial(x_1, x_2, ..., x_n)}{\partial(y_1, y_2, ..., y_n)} \right|. \quad (6.7)$$

Последний множитель в (6.7) — якобиан преобразования от переменных $x_1, x_2, ..., x_n$ к переменным $y_1, y_2, ..., y_n$.

Пусть событие A может наступить при условии появления одного из n попарно несовместных событий $B_1, B_2, ..., B_n$, образующих полную группу возможных событий. Тогда вероятность появления события A задается формулой полной вероятности

$$P(A) = P(B_1)P(A \mid B_1) + P(B_2)P(A \mid B_2) + ... + P(B_n)P(A \mid B_n), \quad (6.8)$$

где $P(A \mid B_i)$ — вероятность наступления события A при реализации события B_i. Условной плотностью распределения вероятностей $w(y \mid x)$ случайной величины y при фиксированном значении x называют функцию, удовлетворяющую равенству $w^{(1)}(x) w(y \mid x) = w^{(2)}(x, y)$. Если $w(y \mid x)$ не зависит от x, то x и y статистически независимы. В общем случае случайные величины $x_1, x_2, ..., x_n$ называются независимыми, если совместная плотность распределения вероятностей равна произведению плотностей вероятности каждой из них

$$w^{(n)}(x_1, x_2, ..., x_n) = w^{(1)}(x_1)\, w^{(1)}(x_2) ... w^{(1)}(x_n) . \quad (6.9)$$

Из (6.9) легко получить, что для двух независимых случайных величин x_1 и x_2 справедливо равенство $\overline{x_1 x_2} = \overline{x_1} \cdot \overline{x_2}$.

Примеры решения задач

Пример 6.1. Плотность вероятности попадания частицы в любую точку плоскости, находящуюся внутри некоторой области, имеющей площадь S, является постоянной величиной. Вычислить условную вероятность того, что частица окажется внутри прямоугольного треугольника с углом α при вершине, если известно, что она находится внутри описанной вокруг него окружности, полностью лежащей внутри вышеупомянутой области.

Решение. Назовем событием A попадание частицы в круг, радиус которого R, а событием B — в область, ограниченную вписанным в него треугольником. Их вероятности $P(A) = \pi R^2 / S$ и $P(B) = 2R^2 \cos\alpha \sin\alpha / S$. В соответствии с формулой (6.8) $P(B) = P(A)P(B \mid A)$, откуда $P(B \mid A) = P(B)/P(A) = \sin 2\alpha / \pi$.

Пример 6.2. В начальный момент $t = 0$ в области пространства, имеющей форму параллелепипеда, одно из ребер которого равно a, находится N_0 одинаковых частиц, летящих с постоянной скоростью $\vec{v}$, направленной параллельно упомянутому ребру (см. рис. 6.1). При $t = 0$ плотность распределения вероятностей нахождения частиц имеет вид: $w^{(3)}(x, y, z) = w^{(1)}(x)w^{(2)}(y, z)$. Здесь

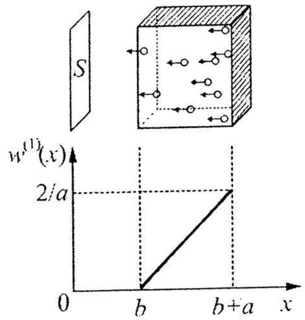

Рис. 6.1

$$w^{(2)}(y, z) = \begin{cases} 1/S, & y, z \in S \\ 0, & y, z \notin S, \end{cases}$$

$$w^{(1)}(x) = \begin{cases} 0, & x < b \\ 2(x - b)/a^2, & b + a \geq x \geq b, \end{cases} \tag{6.10}$$

S — площадь боковой грани параллелепипеда, перпендикулярной вектору $\vec{v}$. Ось $0x$ декартовой системы координат направлена вдоль ребра, имеющего длину a. График зависимости $w^{(1)}(x)$ изображен на рис. 6.1. В точке $x = 0$ расположена перпендикулярная оси $0x$ стенка, расстояние от которой до ближайшей грани параллелепипеда в начальный момент времени равно b. Найти зависимости от времени числа частиц $N(t)$, ударившихся в стенку, а также давления $p(t)$, которое они на нее оказывают. Удар считать абсолютно упругим. Соударения между частицами происходят крайне редко. Масса одной частицы m_0.

Решение. Удовлетворяющая условию нормировки плотность вероятности того, что в момент времени τ частица облака долетела до стенки, легко находится из (6.10)

$$\widetilde{w}^{(1)}(\tau) = \begin{cases} 0, & \tau < b/v \\ 2v(v\tau - b)/a^2, & (b + a)/v \geq \tau \geq b/v. \end{cases}$$

За время $d\tau$ о стенку ударяется $N_0 \widetilde{w}^{(1)}(\tau) d\tau$ частиц. Полное число частиц, ударившихся о стенку за время t,

$$N(t) = N_0 \int_0^t \widetilde{w}^{(1)}(\tau) d\tau = \begin{cases} 0, & t < b/v \\ N_0 (vt - b)^2 / a^2, & (b + a)/v \geq t \geq b/v. \end{cases}$$

График зависимости $N(t)$ приведен на рис. 6.2.

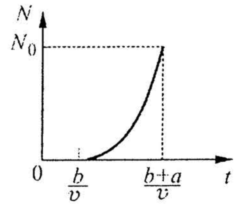

Рис. 6.2

По условию задачи удар о стенку абсолютно упругий. Передаваемый частицами за время $d\tau$ импульс $2m_0 v N_0 \widetilde{w}^{(1)}(\tau) d\tau$ равен импульсу силы $p(\tau) S d\tau$, откуда $p(\tau) = 2m_0 v N_0 \widetilde{w}^{(1)}(\tau) / S$.

Будет полезно самостоятельно решить эту задачу, если, например,

$$w^{(1)}(x) = \begin{cases} 0, & x < b \\ (x - b)/a^2, & b + a \geq x \geq b \\ (2a + b - x)/a^2, & b + 2a \geq x \geq b + a \\ 0, & x > b + 2a \end{cases}.$$

Пример 6.3. Нормальный закон распределения (закон Гаусса) случайной величины x задается плотностью вероятности

$$w^{(1)}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{(x - x_0)^2}{2\sigma^2} \right). \tag{6.11}$$

Определить наиболее вероятное значение x^*, среднее значение $\bar{x}$ и относительную флуктуацию $\delta(x)$ случайной величины x.

Решение. Наиболее вероятное значение случайной величины находим из условия $(\partial w^{(1)} / \partial x)|_{x = x^*} = 0$, откуда $x^* = x_0$. В соответствии с (6.2), (6.4) получим:

$$\bar{x} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} x \exp(-(x - x_0)^2 / 2\sigma^2)\, dx = x_0, \tag{6.12}$$

$$\sigma^2(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}\int_{-\infty}^{\infty}(x-x_0)^2 \exp(-(x-x_0)^2/2\sigma^2)dx = \sigma^2 . \qquad (6.13)$$

Относительная флуктуация $\delta(x) = \sigma(x)/\bar{x} = \sigma/x_0$.

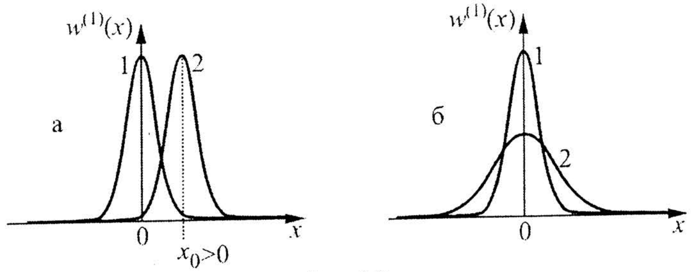

Рис. 6.3

На рис. 6.3.а изображены графики зависимостей $w^{(1)}(x)$ при фиксированном значении σ. Кривые 1, 2 соответствуют $x_0 = 0$ и $x_0 > 0$. На рис. 6.3.б приведены графики зависимостей $w^{(1)}(x)$ при $x_0 = 0$. Дисперсия распределения, показанного кривой 2, в два раза больше, чем дисперсия распределения, которому соответствует кривая 1. Видно, что увеличение дисперсии приводит к уширению графика $w^{(1)}(x)$ и уменьшению максимального значения функции. При этом площадь под кривой $w^{(1)}(x)$ остается равной единице в соответствии с условием нормировки.

Пример 6.4. N молекул газа находятся в сосуде объемом V. Найти функцию распределения вероятностей $P_N(n)$ случайного события, когда n частиц оказываются в малой части сосуда объемом $v << V$. Вычислить среднее значение, дисперсию и относительную флуктуацию n.

Решение. Вероятность молекуле попасть в объем v равна v/V. Вероятность того, что в этот объем попадет n молекул, равна $(v/V)^n$. Вероятность всем остальным молекулам не оказаться в объеме v равна $(1-v/V)^{N-n}$. Учитывая возможность перестановок между одинаковыми частицами, окончательно получим

$$P_N(n) = C_N^n (v/V)^n (1-v/V)^{N-n} = N!(v/V)^n(1-v/V)^{N-n}/n!(N-n)!, \qquad (6.14)$$

где $n = 0, 1, 2, ..., N$. Пользуясь формулой (6.3) получим среднее значение n

$$\bar{n} = \sum_{n=0}^{N}\frac{nN!}{(N-n)!\,n!}(v/V)^n(1-v/V)^{N-n} =$$

$$= (Nv/V)\sum_{n=1}^{N}\frac{(N-1)!}{(n-1)!(N-n)!}(v/V)^{n-1}(1-v/V)^{N-n} =$$

$$= (Nv/V)\sum_{k=0}^{N-1}C_{N-1}^k(v/V)^k(1-v/V)^{N-1-k} = Nv/V.$$

При записи последнего равенства мы учли, что распределение $P_N(n)$ удовлетворяет условию нормировки

$$\sum_{k=0}^{N}P_N(n) = \sum_{k=0}^{N}C_N^k(v/V)^k(1-v/V)^{N-k} = 1 .$$

Таким образом, молекулы идеального газа равномерно распределены по всему объему. Пользуясь (6.4), найдем дисперсию случайной величины n

$$\sigma^2(n) = \sum_{n=0}^{N}(n-Nv/V)^2P(n) =$$

$$= \sum_{n=0}^{N}n(n-1)P(n) + (1-2Nv/V)\sum_{n=0}^{N}nP(n) + (Nv/V)^2\sum_{n=0}^{N}P_n .$$

При записи последней формулы n^2 было представлено в виде $n(n-1)+n$. Заменив, как и ранее, индекс суммирования, окончательно получим

$$\begin{aligned}\sigma^2(n) &= (v/V)^2N(N-1) + \\ &+ (N-2N^2v/V)v/V + N^2(v/V)^2 = (1-v/V)Nv/V.\end{aligned} \qquad (6.15)$$

Наконец, относительная флуктуация числа частиц в объеме v будет иметь вид: $\delta = \sqrt{V/v-1}/\sqrt{N}$. Таким образом, с ростом N среднее число частиц в объеме v увеличивается пропорционально N, дисперсия возрастает как N, а δ уменьшается пропорционально $1/\sqrt{N}$. График функции распределения вероятностей $P_N(n)$ изображен на рис. 6.4

($v/V = 0{,}5$) и рис. 6.5 ($v/V = 0{,}1$) при $N = 8$ (а) и $N = 100$ (б). Дисперсия относительного числа частиц уменьшается с ростом v/V. Это иллюстрирует рис. 6.6, где приведена зависимость P_{100} от относительного числа частиц $n/\bar{n}$ при $v/V = 0{,}5$ и $v/V = 0{,}1$.

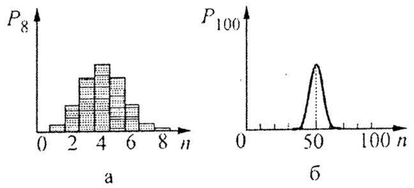

Рис. 6.4

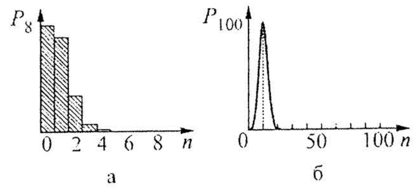

Рис. 6.5

Если $N >> 1$, а $v << V$, то $P_N(n)$ стремится к распределению Пуассона: $P_N(n) = ((Nv/V)^n / n!) \cdot \exp(-Nv/V)$. В окрестности максимума последнюю формулу можно с высокой точностью аппроксимировать распределением Гаусса

$$P_N(n) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\sqrt{(1 - v/V)Nv/V}} \exp\left[-\frac{(n - Nv/V)^2}{2(1 - v/V)Nv/V}\right]. \qquad (6.16)$$

Это хорошо видно на рис. 6.7, где показаны зависимости $P_N(n)$ при $N = 100$ и $v/V = 0{,}045$ (а) и $v/V = 0{,}25$ (б).

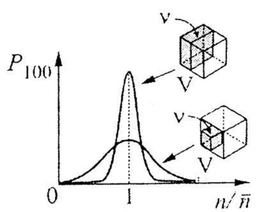

Рис. 6.6

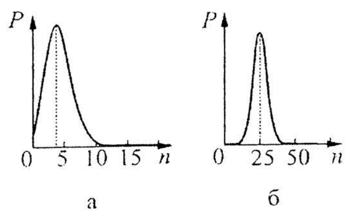

Рис. 6.7

Задание для самостоятельной работы

6.5. Случайная величина x может принимать только два значения: x_1 и x_2, причем вероятность первого события равна p. Найти $\sigma^2(x)$.

6.6. Модуль скорости частицы v является случайной величиной, подчиняющейся закону распределения с плотностью вероятности $w^{(1)}(v) = 4v^2\alpha\sqrt{\alpha/\pi}\exp(-\alpha \cdot v^2)$. Найти ее наивероятнейшее v^*, среднее $\bar{v}$ и среднеквадратичное $\sqrt{\overline{v^2}}$ значения, а также дисперсию $\sigma^2(v)$ и относительную флуктуацию $\delta(v)$.

6.7. Одинаковые частицы массой m_0 каждая могут двигаться только вдоль оси $0x$ и с равной вероятностью иметь любую проекцию скорости v_x в интервале $(-v_0 < v_x < v_0)$. Чему равна плотность вероятности того, что частица будет иметь кинетическую энергию E? Найти $\overline{v_x}$, $\overline{|v_x|}$, $\overline{v_x^2}$ и $\bar{E}$.

6.8. Вероятность распада одного ядра за время dt не зависит от «возраста» ядра и равна λdt, где $\lambda = \mathrm{const}$. Составьте дифференциальное уравнение для количества радиоактивных ядер $N(t)$ в момент времени t и решите его при начальном условии $N(0) = N_0$.

6.9. Частицы хаотически двигаются по плоскости внутри достаточно большой прямоугольной области с равными по модулю скоростями v. Среднее число частиц на единице площади равно n. Сколько частиц в среднем отражается за время t от участка границы области, длина которого l намного меньше стороны прямоугольника?

6.10. Частицы двигаются с одинаковой скоростью v вдоль прямой в одну сторону так, что расстояние между ними является случайной величиной. Найти среднее число частиц, долетающих за время t до любой фиксированной точки на этой прямой, если среднее расстояние между ними равно l.

6.11. В сосуде объемом V находятся N молекул идеального газа. Две случайные величины n_1 и n_2, равные соответственно количеству молекул в фиксированных неперекрывающихся объемах v_1 и v_2, статистически независимы и подчинены функции распределения вероятностей Пуассона. Найти функцию распределения вероятностей случайного события, при котором n_1+n_2 молекул окажется в объеме v_1+v_2, если $v_{1,2} << V$.

6.12. По данным предыдущей задачи найти вероятность того, что в объеме v_1 находится n_1 молекул при условии, что число молекул в объеме v_1+v_2 равно n.

§7. Распределения Гиббса

Краткие теоретические сведения

В момент времени t состояние термодинамической системы, состоящей из N одинаковых бесструктурных частиц, подчиняющихся законам классической механики, определяется заданием значений радиус-векторов $\vec{r}_1(t)$, $\vec{r}_2(t)$,..., $\vec{r}_N(t)$ и импульсов $\vec{p}_1(t)$, $\vec{p}_2(t)$,..., $\vec{p}_N(t)$ всех частиц системы. Для краткости будем использовать обозначение $x_i=(\vec{r}_i,\vec{p}_i)$, где $i=1,2,\ldots,N$, для совокупности значений координат и компонент импульса отдельной частицы. Совокупность значений координат и компонент импульсов всех частиц, определяющих микросостояние системы, обозначим X, т.е. $X=(x_1,x_2,\ldots,x_N)=(\vec{r}_1,\vec{r}_2,\ldots,\vec{r}_N,\vec{p}_1,\vec{p}_2,\ldots,\vec{p}_N)$. Зависимость $X=X(X_0,t,t_0)$, где X_0 — состояние системы в начальный момент времени t_0, описывает временную эволюцию системы. Для нахождения $X=X(X_0,t,t_0)$ используют уравнения движения. Запишем их в форме уравнений Гамильтона:

$$d\vec{r}_i/dt=\partial H(X)/\partial\vec{p}_i\,,\qquad d\vec{p}_i/dt=-\partial H(X)/\partial\vec{r}_i\,,\tag{7.1}$$

где функция Гамильтона имеет вид:

$$H(X)=\sum_{1\le i\le N}\frac{\vec{p}_i^{\,2}}{2m}+U(\vec{r}_1,\ldots,\vec{r}_N)=\sum_{1\le i\le N}\left(\frac{\vec{p}_i^{\,2}}{2m}+U_0(\vec{r}_i)\right)+\sum_{1\le i<j\le N}\Phi(|\vec{r}_i-\vec{r}_j|)\,.\tag{7.2}$$

В (7.2) m — масса частицы, U_0 — потенциальная энергия частицы во внешнем поле, $\Phi(|\vec{r}_i-\vec{r}_j|)$ — потенциальная энергия взаимодействия частиц с номерами i и j.

При исследовании движения частиц в макроскопических системах, задаваемых совокупностью внешних параметров $a=(a_1,a_2,\ldots a_n)$, нет возможности задать начальные условия для всех частиц, а, следовательно, и решить систему (7.1). Однако можно считать, что в каждый момент времени $x_1,x_2,\ldots,x_N$ являются случайными величинами, и интересоваться функцией распределения возможных значений X. Будем рассматривать только такие случаи задания термодинамической системы, когда плотность