

## Minek kell a matematika? (bevezetés)

**Osváth Szabolcs**

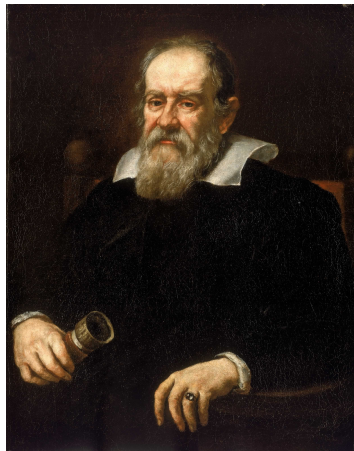
Semmelweis Egyetem

### Matematika

„ ... Ez a könyv a matematika nyelvén íródott...ami nélkül az ember csak hiába bolyong egy sötét labirintusban.”

A matematika alkalmazásának előnyei:

- precíz jóslatok (összevetés egyre kifinomultabb mérésekkel)
- szigorú levezetések
- absztrakt gondolkodás



Galileo Galilei (1564 – 1642)

### Tudomány

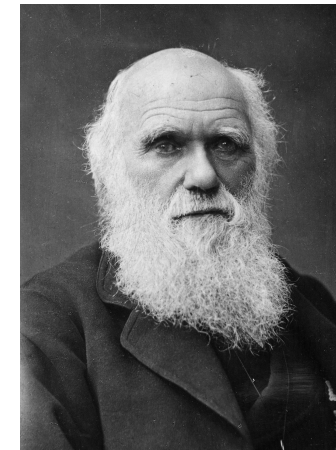
a tudomány az emberiségnek a világ megismerésére és megértésére irányuló vállalkozása



a székesfehérvári hétszáz éves tölgy

### Matematika szerepe

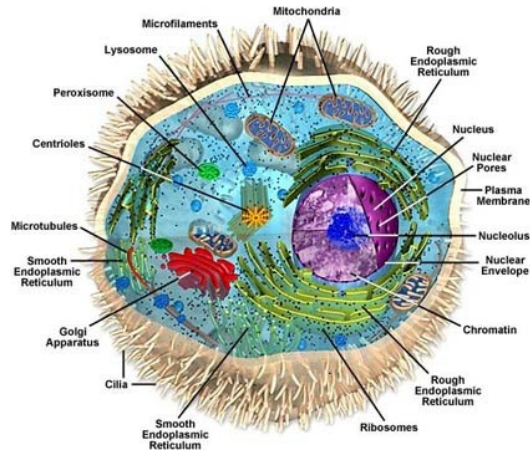
„... in after years I have deeply regretted that I did not proceed far enough at least to understand something of the great leading principles of mathematics, for men thus endowed seem to have an extra sense.”



Charles Darwin (1809 –1882)

## Matematika szerepe

a sejtbiológia nagy sikereket ért el matematika alkalmazása nélkül



## Matematika szerepe

nagy mennyiségű, csillagokra és bolygókra vonatkozó megfigyelést halmozott fel



Tycho Brahe (1546 – 1601)

## Matematika szerepe

felismerte a bolygó mozgások törvényszerűségeit – matematikai modellt alkotott



Johannes Kepler (1571 – 1630)

**A mechanika, termodinamika és statisztikus fizika kapcsolata (ismétlés / bevezetés)**

***Osváth Szabolcs***

Semmelweis Egyetem

## Mechanika

**mechanika:** a fizikának az az ága, ami a testek mozgásának leírásával, az erők hatásának vizsgálatával foglalkozik



Sir Isaac Newton (1642 – 1727)

## Mechanika rendszerek leírása

**determinizmus:** a rendszer kezdeti állapota egyértelműen meghatározza a rendszer jövőbeli fejlődését

**a rendszer állapota:**

$$q, \dot{q}$$

$$q, p$$

**időbeli fejlődés:**

$$q, \dot{q}, \ddot{q}, L$$

$$q, p, \dot{q}, \dot{p}, H$$



Sir William Rowan Hamilton  
(1805 – 1865)

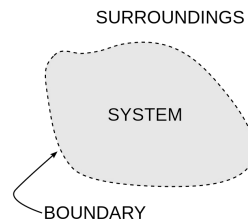
## Termodinamika

**termodinamika (hőtan):** a fizika energiaátalakulásokkal foglalkozó tudományterülete

**termodinamikai rendszer:** az univerzum egy jól meghatározott makroszkopikus része

**környezet:** az univerzumnak a termodinamikai rendszeren kívüli része, amely körülveszi a termodinamikai rendszert

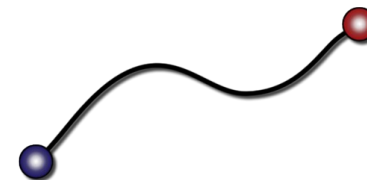
A termodinamikai rendszert és a környezetét egy valós, vagy képzeletbeli fal határolja. A falak csak meghatározott típusú kölcsönhatást engednek meg a környezettel (pl. anyagcsere, munka, hőcsere).



## Termodinamikai átalakulások

**kvázisztatikus átalakulás:** az állapot olyan lassan változik, hogy a rendszert minden pillanatban egyensúlyban lévőnek tekintjük

**reverzibilis átalakulás:** a kezdeti állapotából valamilyen közbülső állapotokon keresztül a végállapotba mozdított termodinamikai rendszer a végállapotból a kezdeti állapotba ugyanazonakon a közbeeső egyensúlyi állapotokon keresztül jut vissza



## Termodinamikai állapothatározók

**állapothatározók:** a termodinamikai rendszer állapotát leíró makroszkopikusan mérhető mennyiségek

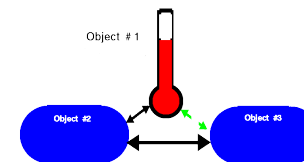
**extenzív mennyiségek:** tartományon értelmezett mennyiségek, termodinamikai rendszerek egyesítésekor összeadódnak (térfogat  $V$ , tömeg  $m$ , belső energia)

**intenzív mennyiségek:** pontban értelmezettek termodinamikai rendszerek egyesítésekor kiegyenlítődnek (nyomás  $p$ , hőmérséklet  $T$ )

**állapotegyenletek:** az egyensúlyban lévő rendszer állapotfüggvényei között teremtenek kapcsolatot

## A termodinamika 0. főtétele

- magára hagyott termodinamikai rendszer egy idő után egyensúlyi állapotba kerül
- egyensúlyban levő termodinamikai rendszer szabadsági foka egyenlő a környezettel lehetséges kölcsönhatások számával
- két termodinamikai rendszer egyensúlyban van, ha a kölcsönhatásukat jellemző intenzív állapothatározók egyenlők
- a termodinamikai egyensúly tranzitív

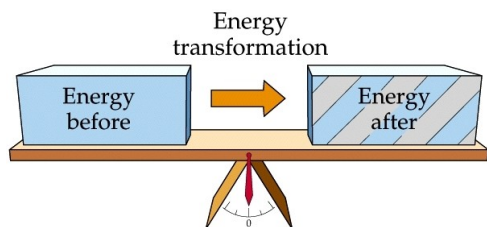


## A termodinamika 1. főtétele

az energiamegmaradás törvénye

zárt termodinamikai rendszer belső energiáját kétféleképpen lehet megváltoztatni: munkavégzéssel és hőközléssel

$$\Delta U = Q + W$$

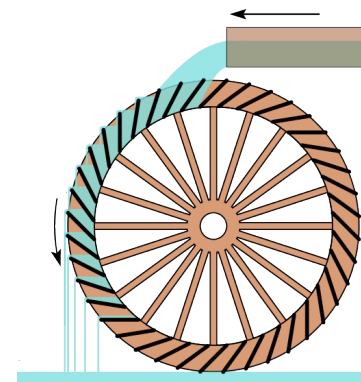


## A termodinamika 2. főtétele

a spontán folyamatok iránya

Nincs olyan folyamat, amelynek egyetlen eredménye, hogy hő megy át hidegebb testről melegebbre.

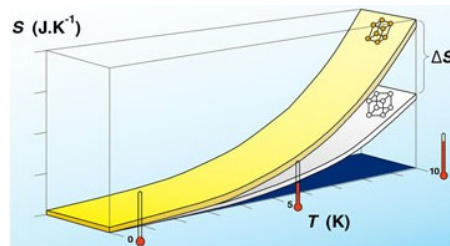
Monotermikus körfolyamat nem végezhet munkát.



### A termodinamika 3. főtétele

Az abszolút tiszta kristályos anyagok entrópiája nulla kelvin hőmérsékleten zérus.

Nem lehet a 0K hőmérsékletet véges számú lépésben elérni.



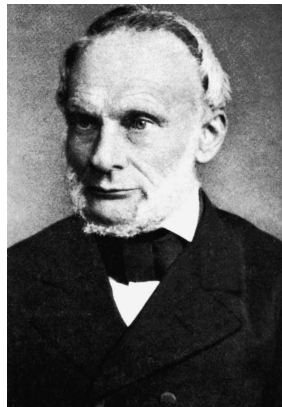
### Állapotfüggvények

**állapotfüggvények:** az állapot-határozók olyan többváltozós függvénye, amelyeknek értéke csak az adott állapottól, megváltozása pedig csakis a kezdeti és végállapottól függ (termodinamikai potenciálok)

### Termodinamikai entrópia

$$dS = \frac{\delta Q}{T}$$

állapotfüggvény  
nem megmaradó mennyiség

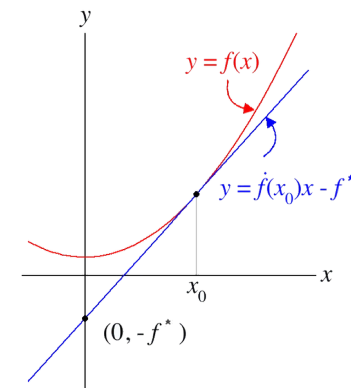


Rudolf Julius Emanuel Clausius  
(1822 – 1888)

### Legendre transzformáció

$$f^*(p) = \sup_x (px - f(x))$$

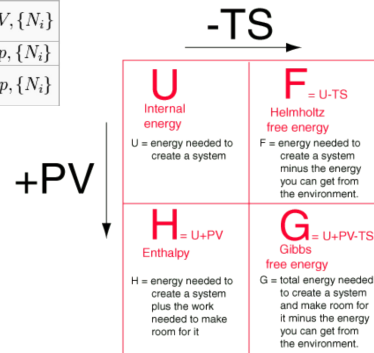
Ha  $f$  deriválható, akkor  $f^*(p)$  a  $p$  meredekségű érintő  $y$  tengellyel való metszetnek negatív értéke.





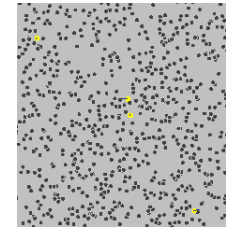
## Termodinamikai potenciálok

Name	Symbol	Formula	Natural variables
Internal energy	$U$	$\int (TdS - pdV + \sum_i \mu_i dN_i)$	$S, V, \{N_i\}$
Helmholtz free energy	$F$	$U - TS$	$T, V, \{N_i\}$
Enthalpy	$H$	$U + pV$	$S, p, \{N_i\}$
Gibbs free energy	$G$	$U + pV - TS$	$T, p, \{N_i\}$



## Brown mozgás

Az anyag nem folytonos, hanem részecskékből áll.



## Statisztikus mechanika

**statisztikus mechanika:**  
a makroszkopikus rendszerek tulajdonságait értelmezi a valószínűségi számítás és mechanikai eszközöket alkalmazva a mikrovilágra (atomok, molekulák)



Ludwig Eduard Boltzmann  
(1844 – 1906)

## A mechanika mozgásegyenletei

$$\dot{p}_j = -\frac{\partial H}{\partial q_j}$$

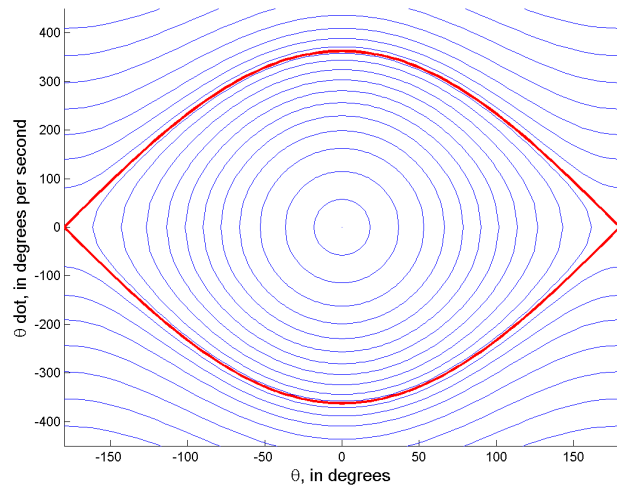
$$H = K + V$$

$$\dot{q}_j = \frac{\partial H}{\partial p_j}$$

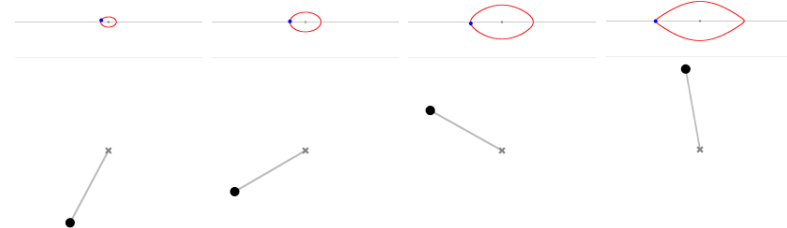
$$K = \frac{p^2}{2m}$$

$$V = V(q)$$

## Fázistér



## Fázistér



## Sokatomos rendszer fázistere

$N$  részecskéből álló rendszer állapotát megadja egy pont a  $6N$ -dimenziós fázistérben  $q_i$  koordinátákkal,  $p_i$  momentumokkal kifejezve.

Feltéve, hogy az energia ( $E$ ) állandó, a jellemző pont a fázistérben egy pályát ír le az  $E(q_i, p_i) = \text{állandó}$  felszínen.

## Liouville egyenlet

$\rho(q, p)$  valószínűség sűrűség függvény a fázistérben

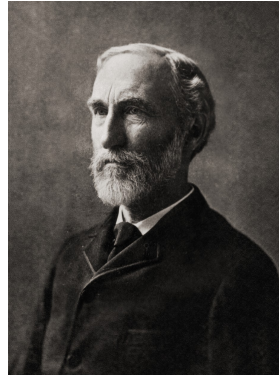
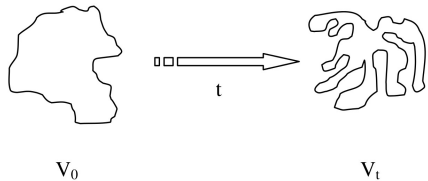
$\rho(q, p) d^n q d^n p$  annak a valószínűsége, hogy a rendszert a  $(q, p)$  körüli infinitézimálisan kicsi  $d^n q d^n p$  térfogatban találjuk

$\rho(q, p; t)$ -nek a  $t$  időbeli fejlődését a Liouville egyenlet adja meg

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \sum \left( \frac{\partial \rho}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial \rho}{\partial p_i} \dot{p}_i \right) = 0$$

## Liouville tétele

Ha a fázistér egy tetszőleges  $V_0$  tartományát, mint kezdeti feltételek halmazát tekintjük, akkor a trajektóriák bármely  $t$  pillanatban egy ugyanilyen térfogatú  $V_t$  halmazt alkotnak



Josiah Willard Gibbs  
(1839 –1903)

## Ergodikus hipotézis

Ergodikus hipotézis: a rendszert jellemző pont pályája a fázistérben az  $E(q_i, p_i) = \text{állandó}$  felszínen mozogva végül a felszín minden pontján keresztül megy.

Kvázi ergodikus hipotézis: a rendszert jellemző pont pályája a fázistérben végül is közel kerül a felszín minden pontjához.

## Ergodikus hipotézis

Az ergodikus hipotézis a sokaságra és az időre vett átlagolás ekvivalenciáját jelenti. (Egyedi molekula vonatkozások.)

$$\langle f \rangle = \int f d\mu$$

$$\bar{f} = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T f(x(t)) dt$$

$$\bar{f} = \langle f \rangle$$

## Poincaré visszatérési tétel

Zárt konzervatív rendszerek majdnem minden trajektóriája végtelen sokszor visszatér a kezdőfeltétel tetszőleges  $\varepsilon$  sugarú környezetébe a fázistérben.



Jules Henri Poincaré  
(1854–1912)



## Termodinamikai hőmérséklet

hőtranszfer iránya a két hőkontaktusba hozott rendszer között



$$P(t_0 + \Delta t) > P(t_0)$$

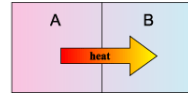
$$\ln(P(t_0 + \Delta t)) > \ln(P(t_0)); P \sim \Omega; \Omega_{AUB} = \Omega_A \cdot \Omega_B$$

$$\ln(\Omega_A(t_0 + \Delta t) \cdot \Omega_B(t_0 + \Delta t)) > \ln(\Omega_A(t_0) \cdot \Omega_B(t_0))$$

$$\ln(\Omega_A(t_0 + \Delta t)) + \ln(\Omega_B(t_0 + \Delta t)) > \ln(\Omega_A(t_0)) + \ln(\Omega_B(t_0))$$

$$\ln(\Omega_A(t_0 + \Delta t)) - \ln(\Omega_B(t_0)) + \ln(\Omega_B(t_0 + \Delta t)) - \ln(\Omega_A(t_0)) > 0$$

$$d \ln(\Omega_A) + d \ln(\Omega_B) > 0$$



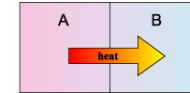
## Termodinamikai hőmérséklet

$$\frac{\partial \ln(\Omega_A)}{\partial E} (-dE) + \frac{\partial \ln(\Omega_B)}{\partial E} dE > 0$$

$$\frac{\partial \ln(\Omega_B)}{\partial E} > \frac{\partial \ln(\Omega_A)}{\partial E}$$

$$\beta = \frac{\partial \ln(\Omega)}{\partial E}$$

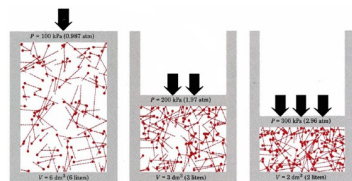
$$\frac{1}{k_B T} \equiv \beta$$



## Nyomás

Nyomás: a tartály falával ütköző molekulák, a falra erőt fejtenek ki

Az ütközésben a részecske sebességének a fállal párhuzamos összetevője változatlan marad, a falra merőleges összetevő iránya ellenkezőjére változik, miközben nagysága ugyanakkora marad.



## Statisztikus sokaságok

Summary of ensembles	Ensembles		
	Microcanonical	Canonical	Grand canonical
Variables (suppressed constant for ensemble)	$E, N, V$	$T, N, V$	$T, \mu, V$
Microscopic features	Number of microstates $\Omega$	Canonical partition function $Z = \sum_k e^{-\beta E_k}$	Grand canonical partition function $\Xi = \sum_k e^{-\beta(E_k - \mu N_k)}$
Macroscopic function	$S = k_B \ln \Omega$	$F = -k_B T \ln Z$	$F - \mu N = -k_B T \ln \Xi$

## Termodinamikai mennyiségek származtatása a kanonikus eloszlásból

<b>Helmholtz free energy:</b>	$F = -\frac{\ln Z}{\beta}$
<b>Internal energy:</b>	$U = -\left(\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}\right)_{N,V}$
<b>Pressure:</b>	$P = -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_{N,T} = \frac{1}{\beta} \left(\frac{\partial \ln Z}{\partial V}\right)_{N,T}$
<b>Entropy:</b>	$S = k(\ln Z + \beta U)$
<b>Gibbs free energy:</b>	$G = F + PV = -\frac{\ln Z}{\beta} + \frac{V}{\beta} \left(\frac{\partial \ln Z}{\partial V}\right)_{N,T}$
<b>Enthalpy:</b>	$H = U + PV$
<b>Constant volume heat capacity:</b>	$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_{N,V}$
<b>Constant pressure heat capacity:</b>	$C_P = \left(\frac{\partial H}{\partial T}\right)_{N,P}$
<b>Chemical potential:</b>	$\mu_i = -\frac{1}{\beta} \left(\frac{\partial \ln Z}{\partial N_i}\right)_{T,V,N}$

## Termodinamikai mennyiségek származtatása a nagykanonikus eloszlásból

<b>Grand potential:</b>	$\Phi_G = -\frac{\ln \Xi}{\beta}$
<b>Internal energy:</b>	$U = -\left(\frac{\partial \ln \Xi}{\partial \beta}\right)_{\mu} + \sum_i \frac{\mu_i}{\beta} \left(\frac{\partial \ln \Xi}{\partial \mu_i}\right)_{\beta}$
<b>Particle number:</b>	$N_i = \frac{1}{\beta} \left(\frac{\partial \ln \Xi}{\partial \mu_i}\right)_{\beta}$
<b>Entropy:</b>	$S = k(\ln \Xi + \beta U - \beta \sum_i \mu_i N_i)$
<b>Helmholtz free energy:</b>	$F = \Phi_G + \sum_i \mu_i N_i = -\frac{\ln \Xi}{\beta} + \sum_i \frac{\mu_i}{\beta} \left(\frac{\partial \ln \Xi}{\partial \mu_i}\right)_{\beta}$