1. Zufallsbewegung und Binomialverteilung

Statistische Betrachtungsweise bezieht sich stets auf ein **Ensemble**.

Ensemble: Gesamtheit einer sehr großen Zahl *N* identischer Systeme.

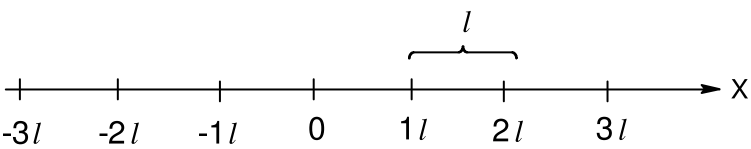
Wahrscheinlichkeit für das Eintreten eines Ereignisses *A*: Bruchteil der Systeme, die durch das Eintreten dieses Ereignisses charakterisiert sind.

$$P_A = \frac{N_A}{N}$$

Eine statistische Beschreibung kann sich auch auf eine Situation beziehen, bei der ein Experiment an ein und demselben System sehr oft wiederholt wird.

Beispiel: Würfe (gleichzeitig) mit sehr vielen Würfeln oder wiederholte Würfe mit ein und demselben Würfel.

Eindimensionale Zufallsbewegung



$t = 0$: Teilchen befindet sich bei $x = 0$.
$t > 0$: Das Teilchen bewegt sich in jeweils gleichen Zeitintervallen Δt jeweils einen Schritt nach rechts $(\Delta x = l)$ oder nach links $(\Delta x = -l)$.

Wahrscheinlichkeit für einen Schritt nach rechts: p
Wahrscheinlichkeit für einen Schritt nach links: q

wobei i.a. $p \neq q$. Da nach jedem Zeitintervall ein Schritt erfolgt, gilt $p + q = 1$.

Ensemble: Viele Teilchen *N*, die sich in ihrer Bewegung nicht stören.

Frage: Welcher Bruchteil der Teilchen befindet sich nach n Schritten bei $x = m \cdot l$ mit $-n \le m \le n$
Die Schritte erfolgen unabhängig voneinander.

n_1: Zahl der Schritte nach rechts $\qquad$ n_2: Zahl der Schritte nach links

Es gilt: $n = n_1 + n_2$ und $m = n_1 - n_2$

Wahrscheinlichkeit für eine bestimmte Realisierung (zeitliche Aufeinanderfolge) von n_1 Schritten nach rechts und n_2 Schritten nach links:

$$w(n_1, n_2) = \underbrace{p \cdot p \cdot p \ldots p}_{n_1 \text{ Faktoren}} \cdot \underbrace{q \cdot q \cdot q \ldots q}_{n_2 \text{ Faktoren}} = p^{n_1} q^{n_2}$$

Die n_1 Schritte nach rechts und n_2 Schritte nach links können in unterschiedlicher Reihenfolge erfolgen, ohne daß das Endergebnis verändert wird, z. B. zunächst alle Schritte nur nach rechts, danach nur nach links:

Schritte:	1.	2.	3.	...	n_1.		(n_1+1).	...	(n_1+n_2).
	|	|	|		|		|		|
Wahrscheinlichkeit:	p	p	p	...	p	⋮	q	...	q

Eine andere Realisierung (wie oben, aber zweiter Schritt nach links, (n_1+1). Schritt nach rechts) :

Schritte:	1.	(n_1+1).	3.	...	n_1.		2.	(n_1+2).	...	(n_1+n_2).
	|	|	|		|		|	|		|
Wahrscheinlichkeit:	p	p	p	...	p	⋮	q	q	...	q

Die Zahl der möglichen Realisierungen Z hängt von n_1 und n_2 ab. Damit ist die Wahrscheinlichkeit dafür, daß sich ein Teilchen nach n Schritten bei $m{\cdot}l$ befindet:

$$P(n_1, n_2) = Z(n_1, n_2) p^{n_1} q^{n_2}$$

Mit dem noch unbekannten Ausdruck für $Z(n_1, n_2)$.

1. Beispiel: $n_1 = 3,\ \ n_2 = 0,\ \ n = 3$

Es gibt nur eine mögliche Realisierung: $\xrightarrow{p}\xrightarrow{p}\xrightarrow{p}$

Beispiel: $n_1 = 2,\ \ n_2 = 1,\ \ n = 3$

$pp\vdots q$:	1. 2. 3.	$n! = 3! = 6$
	<u>2. 1. 3.</u>	Möglichkeiten,
	1. 3. 2.	aber jeweils 2
	<u>3. 1. 2.</u>	sind identisch
	2. 3. 1.	
	<u>3. 2. 1.</u>	

Es bleiben effektiv nur 3 Möglichkeiten:

$$\xrightarrow{p}\xrightarrow{p}\xleftarrow{q}$$
$$\xrightarrow{p}\xleftarrow{q}\xrightarrow{p}$$
$$\xleftarrow{q}\xrightarrow{p}\xrightarrow{p}$$

Allgemein: Es gibt $n!$ verschiedene Möglichkeiten (Permutationen), die Schrittnummern auf die Sequenz $pp\ldots p\vdots qqq\ldots q$ zu verteilen. Alle $n_1!$ Permutationen innerhalb der Klasse p und alle $n_2!$ innerhalb der Klasse q sind nicht zu unterscheiden. Damit ergibt sich:

$$Z(n_1, n_2) = \frac{n!}{n_1!n_2!} = \frac{n!}{n_1!\,(n-n_1)!} \equiv \binom{n}{n_1}$$

$Z(n_1, n_2)$ sind die sog. Binomialkoeffizienten. Im obigen Beispiel: $Z(2,1) = \frac{3!}{2!\cdot 1!} = \frac{6}{2\cdot 1} = 3$

Vgl. dazu den Binomischen Satz: $(a+b)^n = \sum_{n_1=0}^{n} \binom{n}{n_1} a^{n_1} b^{n-n_1}$

Mit der obigen Formel für Z ergibt sich die gesuchte Wahrscheinlichkeit zu

$$P(n_1, n_2) = \frac{n!}{n_1! n_2!} p^{n_1} q^{n_2}$$

Wegen $n_1 + n_2 = n =$ konst. wird diese Wahrscheinlichkeitsverteilung bei vorgegebenem n nur durch die Variable n_1 (oder äquivalenterweise n_2 charakterisiert):

$$P(n_1) = \frac{n!}{n_1!(n-n_1)!} p^{n_1} q^{(n-n_1)}$$

Dies nennt man die Binomialverteilung. Im obigen Beispiel gibt sie die Wahrscheinlichkeit dafür an, daß sich ein Teilchen nach n Schritten genau n_1 Schritte nach rechts und $n_2 = n - n_1$ nach links bewegt hat, und sich daher an der Position $m = n_1 - n_2 = n_1 - (n - n_1) = 2n_1 - n$ befindet.

Für ein Ensemble gibt P den Bruchteil der Teilchen an, für den dies gilt.

Anstelle von n_1 (oder n_2) kann man auch $m = n_1 - n_2$ verwenden:

$$\left.\begin{array}{l} n_1 + n_2 = n \\ n_1 - n_2 = m \end{array}\right\} \Rightarrow \quad n_1 = \frac{n+m}{2} \quad , \quad n_2 = \frac{n-m}{2}$$

$$P(m) = \frac{n!}{\left(\frac{n+m}{2}\right)! \left(\frac{n-m}{2}\right)!} \overbrace{p^{\left(\frac{n+m}{2}\right)} q^{\left(\frac{n-m}{2}\right)}}^{=\left(\frac{1}{2}\right)^n \textit{ falls } p=q=\frac{1}{2}}$$

Mittelwerte und Streuungen

u sei eine Variable, die M diskrete Werte annehmen kann: $u_1, u_2 \ldots, u_M$, mit den Wahrscheinlichkeiten: $P(u_1), P(u_2) \ldots, P(u_M)$, $\quad \sum_{i=1}^{M} P_i = 1$.

Mittelwert: $\overline{u} = P(u_1)u_1 + P(u_2)u_2 + \dots + P(u_M)u_M$

$$\overline{u} = \sum_{i=1}^{M} P_i(u_i)u_i$$

oder für Funktionen $f(u)$: $\bar{f} = \sum_{i=1}^{M} P_i(u_i)f(u_i)$

Einige Regeln:

Für 2 Funktionen $f(u)$ und $g(u)$ gilt

$$\overline{f(u)+g(u)} = \sum P(u_i)[f(u_i)+g(u_i)]$$

$$= \sum P(u_i)f(u_i) + \sum P(u_i)g(u_i)$$

$$= \overline{f(u)} + \overline{g(u)}$$

Ist c eine Konstante gilt: $\overline{c} = c$ und $\overline{cf(u)} = c\overline{f(u)}$

Abweichung des Wertes u_i von Mittelwert: $\Delta u_i = u_i - \overline{u}$

$$\overline{\Delta u} = \sum P(u_i)(u_i - \overline{u}) = \sum P(u_i)u_i - \overline{u}\underbrace{\sum P(u_i)}_{=1}$$

$\overline{\Delta u} = \overline{u} - \overline{u} = 0$; Mittelwert der Abweichung von Mittelwert verschwindet.

Mittlere quadratische Abweichung von Mittelwert (Mittlere quadratische Abweichung, Schwankungsquadrat):

$$\overline{(\Delta u)^2} = \sigma_u^2 = \sum P(u_i)(u_i - \overline{u})^2 \geq 0$$

Maß für die Streuung der von u angenommenen Werte um den Mittelwert.

$$\sigma_u^2 = \overline{(u-\overline{u})^2} = \overline{\left(u^2 - 2u\overline{u} + \overline{u}^2\right)} = \overline{u^2} - 2\overline{u}\cdot\overline{u} + \overline{u}^2 = \overline{u^2} - \overline{u}^2$$

Ausführlich: $\sigma_u^2 = \sum_{i=1}^{M} P(u_i)u_i^2 - \left(\sum_{i=1}^{M} P(u_i)u_i\right)^2$

$\sigma = \sqrt{\sigma^2}$: Standardabweichung

Mittelwertberechnungen für die 1-dimensionale Zufallsbewegung

$$P(n_1) = \frac{n!}{n_1!(n-n_1)!}\; p^{n_1} q^{n-n_1}$$

1. Wegen $\sum P(n_1) = \sum \frac{n!}{n_1!(n-n_1)!} p^{n_1} q^{n-n_1} = (p+q)^n = 1^n = 1$, ist die Normierungsbedingung erfüllt.

2. $\overline{n}_1 = \sum P(n_1)n_1 = \sum \binom{n}{n_1} p^{n_1} q^{n-n_1} \cdot n_1$

   Einfaches Verfahren zur Berechnung der Summe:

   wegen $\frac{\partial}{\partial p}\left(p^{n_1}\right) = n_1 p^{n_1-1}$ gilt $p\frac{\partial}{\partial p}\left(p^{n_1}\right) = n_1 p^{n_1}$

   $$\overline{n}_1 = \sum \binom{n}{n_1}\left\{p\frac{\partial}{\partial p}\left(p^{n_1}\right)\right\} q^{n-n_1}$$

   $$\overline{n}_1 = p\frac{\partial}{\partial p}\sum \binom{n}{n_1} p^{n_1} q^{n-n_1} = p\frac{\partial}{\partial p}(p+q)^n$$

   $\overline{n}_1 = pn(p+q)^{n-1} = n \cdot p$, wegen $p+q=1$

   Plausibles Resultat: $\overline{n}_1$ = Gesamtzahl der Schritte $\times$ Wahrscheinlichkeit, daß Schritte nach rechts.

   Wegen $\overline{n} = n = \overline{n}_1 + \overline{n}_2 = np + \overline{n}_2$ gilt $\overline{n}_2 = n - np = n(1-p) = n \cdot q$

3. Mittlere quadratische Abweichung, Berechnung etwas aufwendiger

$$\sigma_{n_1}^2 = \overline{n_1^2} - \underbrace{\overline{n}_1^2}_{\substack{bereits\\bekannt}}$$

$$\overline{n_1{}^2} = \sum \binom{n}{n_1} n_1^2 p^{n_1} q^{n-n_1}$$

$$n_1 p^{n_1} = p\frac{\partial}{\partial p}\left(p^{n_1}\right); \qquad n_1^2 p^{n_1} = \left(p\frac{\partial}{\partial p}\right)\left(p\frac{\partial}{\partial p}\right)\left(p^{n_1}\right)$$

$$n_1^2 p^{n_1} = \underbrace{\left(p\frac{\partial}{\partial p}\right)^2}_{\substack{Differential-\\operator}} p^{n_1}$$

$$\overline{n_1^2} = \left(p\frac{\partial}{\partial p}\right)^2 \sum \binom{n}{n_1} p^{n_1} q^{n-n_1} = \left(p\frac{\partial}{\partial p}\right)^2 (p+q)^n$$

$$= p\frac{\partial}{\partial p}\left[pn(p+q)^{n-1}\right]$$
$$= p\left[n(p+q)^{n-1} + p\cdot n(n-1)(p+q)^{n-2}\right]$$

An der uns interessierenden Stelle $p+q=1$ gilt:

$$\overline{n_1{}^2} = p[n + pn(n-1)]$$

$$\sigma_{n_1}^2 = pn + p^2 n(n-1) - (pn)^2$$

$$\sigma_{n_1}^2 = p\cdot n - p^2 n = pn(1-p) = npq$$

$$\sigma_{n_1}^2 = npq$$

Relative Standardabweichung: $\dfrac{\sigma_{n_1}}{\overline{n}_1} = \dfrac{\sqrt{npq}}{np} = \sqrt{\dfrac{q}{p}} \cdot \dfrac{1}{\sqrt{n}}$

Insbesondere gilt für $p = q = \dfrac{1}{2}$: $\dfrac{\sigma_{n_1}}{\overline{n}_1} = \dfrac{1}{\sqrt{n}}$

Für $n \cong 6 \cdot 10^{23} \cong 10^{24} \Rightarrow \sqrt{n} = 10^{12}$, $\dfrac{\sigma_{n_1}}{\overline{n}_1} \cong 10^{-12}$

$\dfrac{\sigma}{n} = \dfrac{1}{\sqrt{n}}$, diese Gleichung ist von zentraler Bedeutung für die gesamte statistische Physik.

Sie besagt, daß die relative Bedeutung der Fluktuationen bei makroskopischen Systemen verschwindend gering ist.

Berechnungen für Variable *m*:

$$m = n_1 - n_2 = 2n_1 - n$$

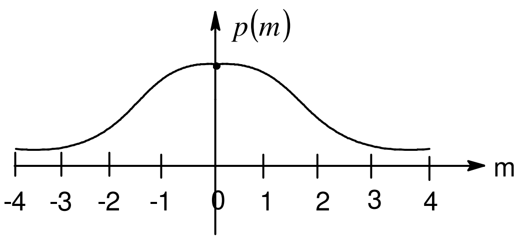
$$\overline{m}^2 = (2\overline{n}_1 - n)^2 = 4\overline{n}_1^2 - 4\overline{n}_1 \cdot n + n^2$$

$$\overline{m^2} = 4\overline{n_1^2} - 4\overline{n}_1 \, n + n^2$$

$$\sigma_m^2 = \overline{m^2} - \overline{m}^2 = \underbrace{4\overline{n_1^2} - 4\overline{n}_1 n + n^2}_{\overline{m^2}} \underbrace{- 4\overline{n}_1^2 + 4\overline{n}_1 n - n^2}_{\overline{m}^2} = 4\left(\overline{n_1^2} - \overline{n}_1^2\right) = 4npq$$

Für $p = q = \dfrac{1}{2} \Rightarrow \sigma_m^2 = n$

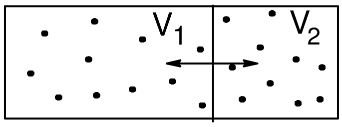
Breite der Verteilung wird charakterisiert durch $\dfrac{\sigma_m}{n} = \dfrac{1}{\sqrt{n}}$



Ein anderes Beispiel für die Binomialverteilung

Problem der Zufallsbewegung ist mathematisch identisch zu dem folgenden Problem:
Unabhängige Aufteilung von insgesamt *n* Teilchen auf zwei Teilvolumina V_1 und V_2 mit

$V_1 + V_2 = V$



Wahrscheinlichkeit, ein bestimmtes Teilchen in V_1 bzw. V_2 anzutreffen:

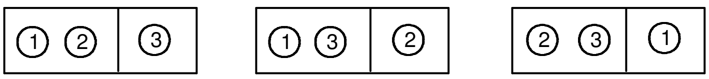
$$p = \frac{V_1}{V} \leq 1\,, \quad q = \frac{V_2}{V} \leq 1 \qquad \text{mit} \qquad p + q = \frac{V_1 + V_2}{V} = 1$$

Wahrscheinlichkeit, n_1 **bestimmte** Teilchen (Numerierung!) in V_1, die restlichen in V_2 zu finden:

$$w(n_1, n_2) = p^{n_1} q^{n-n_1}$$

Mikroskopische Verteilung: Welche Teilchen befinden sich in welchem Volumen?
Makroskopische Verteilung: Wieviel Teilchen (unabhängig von Numerierung) befinden sich wo?

$n = 3$:



Gleiche *Makrozustände*, aber 3 unterschiedliche *Mikrozustände*. Das kombinatorische Problem der Berechnung der Zahl der Mikrozustände für gegebenen Makrozustand ist das gleiche wie bei der eindimensionalen Zufallsbewegung. Man erhält auf analoge Weise:

$$P(n_1, n_2) = \binom{n}{n_1} p^{n_1} q^{n-n_1}$$