9. Einige Elemente der Wahrscheinlichkeitstheorie

- Details für Kap 9.1/9.2: s. Stat Phys WS 16/17, Kap 3
  [Vorlesung vom 25/10, 27/10]

9.1 Wahrscheinlichkeitsverteilung $P(x)$

- Def: stochastische / Zufalls- } Variable x gegeben durch
  (i) Wertebereich
  (ii) Wahrscheinlichkeitsverteilung $P(x)$ (9.1)

- kontinuierliche Verteilung:
  $x \in S = [x_1, x_2]$
  $P(x)dx$ ... Wahrscheinlichkeit für $x \in [x, x+dx]$
  $P(x)$ ... — " — dichte (funktion) (9.2)

wichtig: Normierung $\int_{x_1}^{x_2} P(x)dx = 1$

- Mittel-/Erwartungswert der Observabel $f(x)$:

$$\langle f \rangle = \int f(x) \underbrace{P(x) dx}_{\text{Wahrscheinlichkeit mit der } f(x) \text{ vorkommt}} \quad (9.3)$$

- n-te Moment von $P(x)$:

$$\langle x^n \rangle = \int x^n P(x) dx \quad (9.4)$$

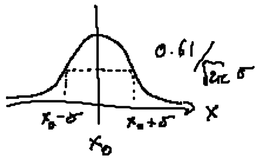
insbes.: (i) Mittelwert $\langle x \rangle$ (9.5)
(ii) Varianz von x
= Schwankungsquadrat
= mittlere quadratische Abweichung

$$(\Delta x)^2 = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = Var(x)$$

Standardabweichung Δx: "Breite von $P(x)$"
Schwankungsbreite (9.6)

• Bsp.: Gaußsche / Normalverteilung:

$$P(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\,\sigma} \exp\left[- \frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2} \right] \qquad (9.7)$$



Momente

$$\langle (x-x_0)^n \rangle = (n-1)!!\,\sigma^n \qquad n \text{ gerade}$$

$$\langle (x-x_0)^n \rangle = 0 \qquad n \text{ ungerade}$$

$$\langle x \rangle = x_0$$

wobei $(n-1)!! = (n-1)(n-3)(n-5)\dots$

• $\boxed{\text{Kenntnis aller } \langle x^n \rangle \longleftrightarrow P(x)}$ (9.9)

Beweis über charakt. Funktion: $G(k) = \langle e^{-ikx} \rangle$

mehrdimensionale Verteilungen $\underline{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ ... stoch. Variable

$P(\underline{x})\, d^n x$ ... Wahrscheinlichkeit für $\underline{x} \in [x_1 + dx_1, \dots, x_n + dx_n]$

(i) unabhängige stochastische Variablen x, y:

$$\boxed{P(x,y) = P(x)\,P(y)} \qquad (9.10)$$

... Multiplikationsregel

(ii) Korrelationsfunktion

$$\boxed{\begin{aligned} C_{ij} &= \langle (x_i - \langle x_i \rangle)(x_j - \langle x_j \rangle) \rangle \\ &= \langle x_i x_j \rangle - \langle x_i \rangle \langle x_j \rangle \end{aligned}} \qquad (9.11)$$

... Kovarianzmatrix

stochastisch unabhängige Variablen $\longrightarrow C_{ij} = 0$

(iii) Bedingte Wahrscheinlichkeitsdichte $P(x_1 \dots x_k \,|\, x_{k+1} \dots x_n)$ für $x_1, \dots, x_k$, wenn $x_{k+1}, \dots, x_n$ mit Sicherheit vorliegen (9.12)

$$P(x_1 \dots x_k \,|\, x_{k+1}, \dots, x_n) = \frac{P(x_1 \dots x_n)}{P(x_{k+1}, \dots, x_n)}$$

wobei $P(x_{k+1}, \dots, x_n) = \int P(x_1, \dots, x_n)\, dx_1 \dots dx_k$

[Beweis: $P(x_1, \dots, x_n) = P(x_1, \dots, x_k \,|\, x_{k+1} \dots x_n)\, P(x_{k+1} \dots x_n)$]

9.2 Zentraler Grenzwertsatz

Seien $x_1, x_2, \dots, x_n$ voneinander unabhängige Zufalls-variable mit derselben Wahrscheinlichkeitsverteilung $w(x)$, also insbesondere ist $\langle x_i\rangle = \langle x\rangle$ und $\Delta x_i = \Delta x$ dann genügt die Zufallsvariable $y = x_1 + \dots + x_n$ im Grenzfall $N \to \infty$ der Gaußschen Wahrscheinlichkeitsverteilung (9.13)

$$P(y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi (\Delta y)^2}} e^{-\frac{(y-\langle y\rangle)^2}{2(\Delta y)^2}}$$

mit $\langle y\rangle = N\langle x\rangle$ und $\Delta y^2 = N\Delta x^2$ Insbesondere gilt $\frac{\Delta y}{\langle y\rangle} = \frac{\Delta x}{\langle x\rangle}\frac{1}{\sqrt{N}}$

also Aussagen über y sind für große N scharf.

- Beweis: Stat Phys WS 16/17 Kap 3.5 Vorlesung vom 1/11

9.3 Zeitabhängige Zufallsvariablen

- Behandlung in 1D: $x = x(t)$ zeitabh. Zufalls-Variable
  - Führe ein: (9.14)

$P(x_n, t_n; \dots; x_1 t_1)\, dx_1 \dots dx_n$ mit $t_1 < t_2 < \dots < t_n$

... Wahrscheinlichkeit x zur Zeit t_1 in $[x_1, x_1+dx_1]$

t_2 in $[x_2, x_2+dx_2]$

$\vdots$

t_n in $[x_n, x_n+dx_n]$

vorzufinden

Bem: (i) für $n = 1, 2, \dots \to$ Hierachie von Wahrscheinlichkeitsdichten

(ii) insbesondere

$$P(x_{n-1}, t_{n-1}; \dots; x_1 t_1) = \int P(x_n t_n; x_{n-1} t_{n-1}; \dots; x_1 t_1)\, dx_n \qquad (9.15)$$

- Zeitkorrelationsfunktion:

Bsp

$$\langle x(t_2)x(t_1)\rangle = \int\int x_2 x_1\, P(x_2, t_2; x_1, t_1)\, dx_2\, dx_1 \qquad (9.16)$$

a) Klassifizierung stochastischer Prozesse:

- Bedingte Wahr.-dichte [vgl. Gl (9.12)]

$$\boxed{P(x_n t_n | x_{n-1} t_{n-1}, \dots, x_1 t_1) = \frac{P(x_n t_n ; \dots ; x_1 t_1)}{P(x_{n-1} t_{n-1} ; \dots ; x_1 t_1)}} \quad (9.17)$$

... für $x_n t_n$ wenn $x_{n-1} t_{n-1}, \dots x_1 t_1$ mit Sicherheit vorliegen

- reiner Zufallsprozess:

$$\boxed{\begin{aligned} &P(x_n t_n | x_{n-1} t_{n-1} ; \dots ; x_1 t_1) = P(x_n t_n) \\ &\overset{(9.17)}{\longleftrightarrow} P(x_n t_n ; \dots ; x_1 t_1) = P(x_n, t_n) \dots P(x_1 t_1) \end{aligned}} \quad (9.18)$$

keine Korrelation zwischen verschiedenen Zeiten
$\rightarrow$ nicht möglich in physikalischen Systemen mit $x = x(t)$
da irgendeine Dynamik wird $x_{n-1}(t_{n-1}) \rightarrow x_n(t_n)$

- Markov-Prozess

$$\boxed{\begin{aligned} &P(x_n t_n | x_{n-1} t_{n-1} ; \dots ; x_1 t_1) = P(x_n t_n | x_{n-1} t_{n-1}) \\ &\overset{(9.17)}{\longleftrightarrow} P(x_n t_n ; \dots ; x_1 t_1) = P(x_n t_n | x_{n-1} t_{n-1}) P(x_{n-1} t_{n-1} | x_{n-2} t_{n-2}) \dots \\ &\qquad \dots P(x_2 t_2 | x_1 t_1) P(x_1 t_1) \end{aligned}} \quad (9.19)$$

$\rightarrow$ nur Gedächtnis für vorigen Zeitpunkt!

[wenn er zu weit zurück liegt $\Rightarrow$ keine Korrelationen
erst wenn er nahe genug an t_n liegt $\Rightarrow$ Korrelation $\Leftrightarrow$ $t_n - t_{n-1} \leq \tau$]

Übergangswahrscheinlichkeiten $\boxed{P(x_2 t_2 | x_1 t_1) = \frac{P(x_2 t_2 ; x_1 t_1)}{P(x_1, t_1)}}$

$\rightarrow$ $P(x_2 t_2 ; x_1 t_1)$ bestimmt den Markov-Prozess vollständig!

- insbesondere gilt: $\boxed{P(x_3 t_3 | x_1 t_1) = \int P(x_3 t_3 | x_2 t_2) P(x_2 t_2 | x_1 t_1) \, dx_2}$

... Chapman-Kolmogorov-Gl

"bedingte Wahrscheinlichkeit, egal welcher Wert x_2 angenommen wird"

10. Stochastische Beschreibung der Kolloiddynamik

• Motivation:

(i) Langevin-Gl für Kolloid-Suspensionen [s. Kap 10.2]

→ stochastische Kraft ist Ihrem Ursprungs bestimmt durch Fluktuations-Dissipations-Theorem [s. Kap. 10.1]

[ausführliche Behandlung Stat Phys WS 16/17 Kap. 7 Vorlesung von 07/02]

(ii) Brownsche-Dynamik-Simulationen [s. Kap 10.4]

= numerischen Lösungen der Langevin-Gl

(iii) Smoluchowski-Gl [s. Kap 10.5] = Gl für $P(\underline{r}, t)$

• allgemeine stoch. Prozessen [stochastische Kräfte ohne Fluktuations-Dissipations-Theorem] s. Kap 11

10.1 Fluktuations-Dissipations-Thm.

• Zwei Situationen:

(i) Dynamik eines Systems in linearer Antwort

$$\underline{x}(t) = \underline{x}(\omega) e^{-i\omega t} \quad \text{... dynamische Variable}$$
$$\underline{F}(t) = \underline{F}(\omega) e^{-i\omega t} \quad \text{... externe Kraft} \qquad (10.1)$$

$$\boxed{\underline{x}(\omega) = \underbrace{\underline{\underline{\chi}}(\omega)}_{\text{Antwort-Funktion}} \underline{F}(\omega)} \quad (10.2)$$

Green-Funktion

$$\underline{x}(t) = \int \underline{\underline{\chi}}(t-t') \underline{F}(t') \, dt' \quad (10.3)$$

NB: (1) Dynamik eines Systems im Nichtgleichgewicht, aber nahe dran

(2) Einheiten $[\underline{F}\, \underline{x}]$ = Energie

Bsp: gedämpfter Oszillator

$$\left(m \frac{d^2}{dt^2} + 2\gamma m \frac{d}{dt} + m\omega_0^2\right) x(t) = F(t) \quad (10.4)$$

$$\xrightarrow{(10.1)} \left(-m\omega^2 - i\omega 2\gamma m + m\omega_0^2\right) x(\omega) \cancel{e^{-i\omega t}} = F(\omega) \cancel{e^{-i\omega t}}$$

$$\longrightarrow \chi(\omega) = \frac{1}{m(\omega_0^2 - \omega^2 - 2i\gamma\omega)} \stackrel{!}{=} \chi'(\omega) + i\chi''(\omega) \quad (10.5)$$