$$\frac{m}{2}\frac{d^2}{dt^2}\langle x^2\rangle + \frac{\gamma}{2}\frac{d}{dt}\langle x^2\rangle = k_B T \qquad (8.6)$$

$$\longrightarrow \quad \langle x^2\rangle = \underbrace{x_\infty^2\left(1-e^{-t/\tau}\right)}_{\text{Lsg. der homog. Gl.}} + \underbrace{\frac{2k_BT}{\gamma}\,t}_{\text{partikuläre Lsg. von (8.6)}} \qquad (8.7)$$

$$\langle x^2\rangle = \begin{cases} 0, & t=0 \\ x_\infty^2, & t\to\infty \end{cases}$$

„Bewegung durch Impuls-relaxation"

$$t \gg \tau \longrightarrow \quad \boxed{\langle x^2\rangle = 2Dt} \quad (8.8) \qquad \text{mit} \quad \boxed{D = \frac{k_BT}{\gamma}} \qquad (8.9)$$

... diffusive Bewegung!

... Einstein relation

Bsp: für Fluktuations (D) - Dissipations (γ) - Theorem

- Abschätzung:

(1) Teilchen: Radius $a = 1\,\mu m$, $\varrho = 10^3 \frac{kg}{m^3} = \frac{kg}{\ell}$, in H_2O: $\eta = 10^{-3}\frac{kg}{ms}$

$$\longrightarrow \left.\begin{array}{l} m = 4\cdot 10^{-15}\,kg \\ \gamma = 6\pi\eta a = 2\cdot 10^{-8}\,\frac{kg}{s} \end{array}\right\} \longrightarrow \tau = \frac{m}{\gamma} \approx 2\cdot 10^{-7}\,s$$

(2) $$D = \frac{k_BT}{\gamma} = \frac{4\cdot 10^{-21}}{2\cdot 10^{-8}} = 2\cdot 10^{-13}\,\frac{m^2}{s} = 0.2\,\frac{\mu m^2}{s}$$

$$t = 100\,s \longrightarrow \sqrt{\langle x^2+y^2+z^2\rangle} = 10\,\mu m\,!$$

8.3 Einstein's Zugang

- Betrachte *viele* voneinander unabhängige Teilchen:

Führe ein: (1D-Behandlung)

$$\boxed{f(x,t)\,dx \;\ldots\; \text{Zahl der Teilchen im Bereich } [x, x+dx]} \qquad (8.10)$$

- Zeitliche Entwicklung zur Zeit $t+\tau$?

(i) Führe ein:

$$\boxed{\begin{array}{l} \phi(\Delta)\,d\Delta \;\ldots\; \text{Wahrscheinlichkeit für Schritt der Länge} \\ \qquad\qquad \text{aus } [\Delta, \Delta+d\Delta] \text{ im Zeitintervall} \\ \text{mit Normierung: } \int_{-\infty}^{\infty} \phi(\Delta)\,d\Delta = 1 \\ \qquad \text{Symmetrie: } \phi(\Delta) = \phi(-\Delta) \end{array}} \qquad (8.11)$$

Damit

$$\boxed{f(x,t+\tau)\,dx = dx \underbrace{\int f(x-\Delta,t)\,\phi(\Delta)\,d\Delta}_{\substack{\text{Zahl der Teilchen (pro Längeneinheit),} \\ \text{die in Zeit } \tau \text{ von } x-\Delta \text{ nach } x \text{ schreiten!}}}} \qquad (8.12)$$

__Bem__: (i) Markov-Annahme

$f(x,t+\tau)$ hängt *nur* von unmittelbaren Vergangenheit zur Zeit t ab, *kein* Gedächtnis für gesamten Zeitverlauf von f

(ii) (8.12) ... spezielle Form der Chapman-Kolmogorov-Gl. [s. Kap. 9]

(ii) verwende:

$$\left.\begin{array}{l} f(x,t+\tau) \underset{\text{klein}}{\overset{\tau}{=}} f(x,t) + \tau \dfrac{\partial f}{\partial t} + \ldots \\ f(x-\Delta,t) = f(x,t) - \Delta \dfrac{\partial f}{\partial x} + \dfrac{\Delta^2}{2!} \dfrac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \ldots \end{array}\right\} \text{ in } (8.12)$$

(8.13)

$$\rightarrow \boxed{f + \frac{\partial f}{\partial t}\tau = f \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \phi(\Delta)\,d\Delta}_{(8.11)=1} - \frac{\partial f}{\partial x} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \Delta\,\phi(\Delta)\,d\Delta}_{(8.11)=0} + \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\Delta^2}{2}\,\phi(\Delta)\,d\Delta + \ldots}$$

... Beispiel einer Kramers-Moyal-Entw. [s. Kap. 11]

(iii) $\longrightarrow$

$$\boxed{\frac{\partial f}{\partial t} = D\,\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \quad \text{mit} \quad D = \frac{1}{\tau}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\Delta^2}{2}\,\phi(\Delta)\,d\Delta} \qquad (8.14)$$

... Diffusionsgl.
= spezielle Form der Fokker-Planck-Gl. [s. Kap. 11]
" " " Smoluchowski-Gl. [s. Kap. 10]

(iv) Zusammenhang mit Langevin-Zugang?

Lösung für $f(x,0) = n\,\delta(x)$: (n... Gesamt-Teilchenzahl)

$$\boxed{f(x,t) = \frac{n}{\sqrt{4\pi D t}}\, e^{-\frac{x^2}{4Dt}} \quad \text{mit 2. Moment:} \quad \langle x^2 \rangle = \frac{1}{n}\int x^2 f(x,t) = 2Dt}$$

wie in Gl. (8.8) $\longrightarrow$ $D = \dfrac{k_B T}{\gamma}$

9. Einige Elemente der Wahrscheinlichkeitstheorie

- Details für Kap. 9.1 / 9.2 : s. Stat Physik WS12/13, Kap. 3

9.1 Wahrscheinlichkeitsverteilung $P(x)$

- Def.:

stochastische / Zufalls- Variable x gegeben durch (i) Wertebereich (ii) Wahrscheinlichkeitsverteilung	(9.1)

- kontinuierliche Verteilung:

$$\boxed{\begin{array}{l} x \in S = [x_1, x_2] \\ P(x)\,dx \ \ldots \text{ Wahrscheinlichkeit für } [x, x+dx] \\ \quad P(x) \ \ldots \quad \text{" Zeitsdichte (funktion)} \\ \int_{x_1}^{x_2} P(x)\,dx = 1 \ \ldots \text{ Normierung} \end{array}} \quad (9.2)$$

- Mittel-/Erwartungswert einer Observablen $f(x)$:

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

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

$$\boxed{\langle x^n \rangle = \int x^n P(x)\,dx} \quad (9.4)$$

insbes.:

$$\boxed{\begin{array}{l} \text{(i) Mittelwert: } \langle x \rangle \\ \text{(ii) Varianz von } x \\ \quad = \text{Schwankungsquadrat} \\ \quad = \text{mittlere quadratische Abweichung} \\ \quad (\Delta x)^2 = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = \mathrm{Var}(x) \end{array}} \quad (9.5)$$

$$\boxed{\text{Standardabweichung: } \Delta x \ \ldots \ \text{„Breite von } P(x)\text{"} \ \text{Schwankungsbreite}} \quad (9.6)$$

- Bsp: Gaußsche Normalverteilung

$$P(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\,\sigma} e^{-(x-x_0)^2/2\sigma^2} \quad (9.7)$$

Momente:

$$\left.\begin{array}{l} n \text{ gerade } \langle (x-x_0)^n \rangle = (n-1)!!\,\sigma^n \\ \qquad\qquad \text{insbes.: } \langle (x-x_0)^2 \rangle = \sigma^2 \\ n \text{ ungerade: } \langle (x-x_0)^n \rangle = 0, \\ \qquad\qquad \text{insbes. } \langle x \rangle = x_0 \end{array}\right\} \quad (9.8)$$

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

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

• mehrdimensionale Verteilungen: $\underline{x} = (x_1, \dots, x_n)$ ... stochast. Variable

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

(i) unabhängige stochast. Variable x, y:

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

... Multiplikationsregel

(ii) Korrelationsfktn.:

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

... Kovarianzmatrix

stochast. unabh. Variable $\longrightarrow C_{ij} = 0$!

(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:

$$P(x_1 \dots x_k \,|\, x_{k+1} \dots x_n) = \frac{P(x_1, \dots, x_n)}{P(x_{k+1}, \dots, x_n)} \quad (9.12)$$

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

9.2 Zentraler Grenzwertsatz

Seien $x_1, x_2, \ldots, x_n$ voneinander unabhängige Zufallsvariable 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 $y = x_1 + x_2 + \ldots + x_N$ im Grenzfall $N \to \infty$ der Gaußschen Wahrscheinlichkeitsverteilung

$$P(y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi (\Delta y)^2}} \, e^{-\frac{(y - \langle y \rangle)^2}{2 (\Delta y)^2}} \qquad (9.13)$$

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 12/13 Kap. 3.5

9.3 Zeitabhängige Zufallsvariablen

- Behandlung in 1D: $x = x(t)$ ... zeitabhängige Zufallsvariable
- Führe ein:

$$P(x_n, t_n; \ldots\ldots x_1, t_1)\, dx_1 \ldots dx_n \quad \text{mit } t_1 < t_2 \ldots < t_n \qquad (9.14)$$

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

" " t_2 " $[x_2, x_2 + dx_2]$

$\vdots$

t_n in $[x_n, x_n + dx_n]$

vorzufinden

Bem.: (i) für $n = 1, 2, \ldots \longrightarrow$ Hierarchie von Wahrscheinlichkeitsdichten

(ii) insbesondere:

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

- Berechnung von Zeitkorrelationsfkt.:

Bsp: $$\boxed{\langle x(t_2)\, x(t_1) \rangle = \iint x_2\, x_1\, P(x_2, t_2; x_1, t_1)\, dx_1\, dx_2} \quad (9.16)$$

a) <u>Klassifizierung Stochastischer Prozesse</u>:

- Bedingte Wahrscheinlichkeitsdichte: [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