

8.2 Langevin-Gleichung

$$m \ddot{x} = -\gamma \dot{x} + T(t) \quad \langle T \rangle = 0$$
$$\frac{m}{2} \langle \dot{x}^2 \rangle = \frac{k_B T}{2} \quad \langle x^2 \rangle = 2Dt \quad (8.9)$$

mit $D = \frac{k_B T}{\gamma}$

... Einsteinrelation

• Abschätzung:

(1) Teilchen: Radius $a = 1 \mu\text{m}$, $\rho = 10^3 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3} = \frac{\text{kg}}{\text{l}}$, in H_2O : $\eta = 10^{-3} \frac{\text{kg}}{\text{m} \cdot \text{s}}$

$$\left. \begin{aligned} \rightarrow m &= 4 \cdot 10^{-15} \text{ kg} \\ \gamma &= 6\pi\eta a = 2 \cdot 10^{-8} \frac{\text{kg}}{\text{s}} \end{aligned} \right\} \rightarrow \tau = \frac{m}{\gamma} \approx 2 \cdot 10^{-7} \text{ s}$$

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

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

8.3 Einstein's Zugang

• Betrachte viele voneinander unabhängige Teilchen:

Führe ein: (1D- Behandlung)

$$f(x,t) dx \dots \text{Zahl der Teilchen im Bereich } [x, x+dx] \quad (8.10)$$

Zeitliche Entwicklung zur Zeit $t+\tau$?

(i) Führe ein:

$$\phi(\Delta) d\Delta \dots \text{Wahrscheinlichkeit für Schritt der Länge} \\ \text{aus } [\Delta, \Delta+d\Delta] \text{ im Zeitintervall } \tau \quad (8.11)$$

mit Normierung: $\int_{-\infty}^{\infty} \phi(\Delta) d\Delta = 1$

Symmetrie: $\phi(\Delta) = \phi(-\Delta)$

Dann: $f(x, t+\tau) dx = dx \int_{-\infty}^{\infty} f(x-\Delta, t) \phi(\Delta) d\Delta \quad (8.12)$

Zahl der Teilchen (pro Länge dx), die in Zeit τ von $x-\Delta$ nach x schieben!

Bem: (i) Markov - Annahme:

$f(x, t+\tau)$ hängt nur von unmittelbarer Vergangenheit zur Zeit t ab, keine Gedächtnis für gesamte Zeitverlauf von f

(ii) (8.12) ... spezielle Form der Chapman - Kolmogorov. Gl.

(ii) Verwende:

$$\left. \begin{aligned} f(x, t+\tau) &\stackrel{\text{4. Bin}}{=} f(x, t) + \tau \frac{\partial f}{\partial t} + \dots \\ f(x-\Delta, t) &= f(x, t) - \Delta \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\Delta^2}{2!} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \dots \end{aligned} \right\} \text{ in (8.12)} \quad (8.13)$$

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

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

(iii) $\rightarrow \frac{\partial f}{\partial t} = D \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \quad (8.14)$

mit $D = \frac{1}{\tau} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\Delta^2}{2} \phi(\Delta) d\Delta$

... Diffusionsgl.

= spezielle Form der Fokker-Planck-Gl. [s. Kap. 11]

" " " Smoludowski-Gl. [s. Kap. 10]

(iv) Zusammenhang mit Langevin-Zugang?

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

$$f(x, t) = \frac{n}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-x^2/4Dt}$$

$$\text{mit 2. Momt: } \langle x^2 \rangle = \frac{1}{n} \int x^2 f(x, t) dx = 2Dt$$

$$\text{wie in Gl. (8.8)} \rightarrow D = \frac{kT}{\gamma}$$

(8.15)

9. Einige Elemente der Wahrscheinlichkeitslehre

• Details für Kap. 9.1/9.2: s. Stat. Phys. WS12/13, Kap. 3

9.1 Wahrscheinlichkeitsverteilung $P(x)$

(9.1)

• Def:

stochastische Variable x gegeben durch
Zufalls-

(i) Wertebereich

(ii) Wahrscheinlichkeitsverteilung $P(x)$

• kontinuierliche Verteilung:

$$x \in S = [x_1, x_2]$$

$P(x) dx$... Wahrscheinlichkeit für $[x, x+dx]$

$P(x)$... " ... Keittdichte (funktion)

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

(9.2)

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

$$\langle f \rangle = \int f(x) P(x) dx \quad (9.3)$$

Wahrscheinl. mit der $f(x)$ verknüpft!

• n-tes Moment von $P(x)$

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

insbes.:

(i) Mittelwert: $\langle x \rangle$

(ii) Varianz von x

= Schwankungsquadrat

= mittlere quadratische Abweichung

$$(\Delta x)^2 = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = \text{Var}(x) \quad (9.5)$$

Standardabweichung Δx ... „Breite von $P(x)$ “
Schwankungsbreite (9.6)

• Bsp: Gaußsche / Normalverteilung:

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

Momente:

n gerade: $\langle (x-x_0)^n \rangle = (n-1)!! \sigma^n$

insbes.: $\langle (x-x_0)^2 \rangle = \sigma^2$

n ungerade: $\langle (x-x_0)^n \rangle = 0$

insbes. $\langle x \rangle = x_0$

• **Kennkreis aller $\langle x^n \rangle \leftrightarrow P(x)$** (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 :

$$P(x, y) = P(x) P(y) \quad (9.10)$$

... Multiplikationsregel

(ii) Korrelationsfktn:

$$C_{ij} = \langle (x_i - \langle x_i \rangle)(x_j - \langle x_j \rangle) \rangle \quad (9.11)$$
$$= \langle x_i x_j \rangle - \langle x_i \rangle \langle x_j \rangle$$

... Kovarianzmatrix

stoch. unabh. Variable $\rightarrow C_{ij} = 0$

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

[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 [wichtig für Stat. Med.]

Seien x_1, x_2, \dots, 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 geht die Zufallsvariable $y = x_1 + x_2 + \dots + x_n$
im Grenzfall $N \rightarrow \infty$ der Gaußschen Wahrscheinlichkeits-
verteilung

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

mit $\langle y \rangle = N \langle x \rangle$ und $\Delta y^2 = N \Delta x^2$

Insbesondere gilt: $\frac{\Delta y}{\langle y \rangle} = \frac{\Delta x}{\langle x \rangle \sqrt{N}}$ also

Aussagen über y sind für große N scharf.

• Beweis: Stat. Phys. WS12/13 Kap. 3.5

9.3 Zeitabhängige Zufallsvariablen

• Behandlung in 1D: $x = x(t)$.. zeitabhängige Zufallsvariable

• Führe ein:

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

... Wahrscheinlichkeit x zur Zeit t_1 in $[x_1, x_1 + dx_1]$
 " " t_2 in $[x_2, x_2 + dx_2]$
 " " t_3 in $[x_3, x_3 + dx_3]$
 " " t_n in $[x_n, x_n + dx_n]$

vorgefunden

(9.14)

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

(ii) insbesondere:

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

• Bedingung von Zeitkorrelationsfkt.:

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

a) Klassifizierung Stochastische Prozesse

• Bedingte Wahrscheinlichkeitsdichte: [vgl. Gl. (9.12)]

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

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

• reiner Zufallsprozess:

$$P(x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1}; \dots; x_1, t_1) = P(x_n, t_n) \quad (9.18)$$

$$\stackrel{(9.17)}{\iff} P(x_n, t_n; \dots; x_1, t_1) = P(x_n, t_n) \dots P(x_1, t_1)$$

... keine Korrelationen zwischen verschiedenen Zeiten,
 nicht möglich in physikal. Systemen mit $x = x(t)$