

2 Elementare Wahrscheinlichkeitstheorie

2.1 Wahrscheinlichkeit, Zufallsvariable

Wichtige Begriffe

Ereignisse (events), Elementarereignis (atom), Wahrscheinlichkeit (probability), Bayes-Gesetz (Bayesian law)

In der Statistik spricht man von Ereignissen (engl. events) und Wahrscheinlichkeiten (engl. probabilities) für das Auftreten dieser Ereignisse. Ereignisse sind Mengen, und unter einem Elementarereignis (engl. atom) versteht man eine Teilmenge, die nicht leer ist und nicht weiter zerlegt werden kann. Für Elementarereignisse a_i gilt

$$a_i \cap a_j = \emptyset \quad . \quad (2.1)$$

Es sei \mathcal{E} die Menge aller Elementarereignisse. In der statistischen Physik verstehen wir Mikrozustände als Elementarereignisse. Diese sind vollständig charakterisierte physikalische Zustände. In der klassischen Physik von N Teilchen in 3 Dimensionen sind sie durch Angabe aller Orte $q_1 \cdots q_{3N}$ und Impulse $p_1 \cdots p_{3N}$ gegeben. Den $6N$ -dimensionalen Raum bezeichnet man als Phasenraum (engl. phase space) und damit entspricht einem Mikrozustand ein Punkt im Phasenraum. In der Quanten-statistischen Mechanik ist ein Mikrozustand durch Angabe eines vollständigen Satzes von Quantenzahlen gegeben. Betrachtet man etwa Teilchen in einem Volumen der Lineardimension L , sind hierfür die Komponenten der Wellenvektoren aller Teilchen $k_i = 2\pi n_{i,\alpha}/L$ und deren Spins s_i geeignet. Dabei sind $n_{i,\alpha}$ ganze Zahlen und $i = 1 \cdots N$, $\alpha = 1 \cdots 3$.

Es seien \mathcal{A} und \mathcal{B} Teilmengen von \mathcal{E} , nicht notwendigerweise elementar. Falls

$$\mathcal{A} \cap \mathcal{B} = \emptyset \quad , \quad (2.2)$$

nennt man \mathcal{A} und \mathcal{B} unvereinbar. $\bar{\mathcal{A}}$ ist komplementär zu \mathcal{A} , falls

$$\mathcal{A} \cap \bar{\mathcal{A}} = \emptyset \quad \text{und} \quad \mathcal{A} \cup \bar{\mathcal{A}} = \mathcal{E} \quad . \quad (2.3)$$

Die Vereinigung (Summe) ist $\mathcal{A} \cup \mathcal{B}$.

In der statistischen Physik werden wir Makrozustände einführen, die unvereinbare Teilmengen aus Mikrozuständen darstellen. Beispielsweise kann man alle Mikrozustände mit einer Energie in einem Intervall $E - \frac{1}{2} \leq E \cdots E + \frac{1}{2} \leq E$ zu einem Makrozustand der Energie E zusammenfassen.

In der Quantenmechanik sind die Energiewerte von Mikrozuständen, für N Teilchen in einem Volumen der Größe $V = L^3$, diskret. Der typische Abstand benachbarter Energieniveaus ist $\sim L^{-1}$, wogegen die typische Energie $E \sim N$ ist. Im thermodynamischen Grenzfall $N \rightarrow \infty$, $V \rightarrow \infty$ kann also ΔE sehr klein gewählt werden und die Energie kann als kontinuierliche Variable aufgefasst werden.

In der Statistik wird einem Ereignis \mathcal{A} eine Wahrscheinlichkeit $P(\mathcal{A})$ für das Auftreten von \mathcal{A} zugeordnet und es soll gelten:

1. $0 \leq P(\mathcal{A}) \leq 1$ reell
2. $P(\mathcal{E}) = 1$ (das sichere Ereignis)
3. Für zwei Ereignisse \mathcal{A} und \mathcal{B} gilt

$$\begin{aligned} P(\mathcal{A} \cup \mathcal{B}) &= P(\mathcal{A}) + P(\mathcal{B}) && \text{falls } \mathcal{A} \cap \mathcal{B} = \emptyset \text{ oder } P(\mathcal{A} \cap \mathcal{B}) = 0 \\ P(\mathcal{A} \cup \mathcal{B}) &< P(\mathcal{A}) + P(\mathcal{B}) && \text{sonst} \end{aligned} \quad (2.4)$$

Hieraus leitet man leicht ab:

- $P(\bar{\mathcal{A}}) = 1 - P(\mathcal{A})$
- $P(\bar{\mathcal{A}} \cup \mathcal{A}) = 1$

Dies lässt sich einfach auf mehr als zwei Ereignisse erweitern.

Für $P(\mathcal{B}) > 0$ definiert man eine bedingte Wahrscheinlichkeit für das Auftreten von \mathcal{A} , falls sich \mathcal{B} ereignet hat (Bayes-Gesetz)

$$P(\mathcal{A}|\mathcal{B}) = \frac{P(\mathcal{A} \cap \mathcal{B})}{P(\mathcal{B})}. \quad (2.5)$$

Falls diese nicht vom Eintreffen von \mathcal{B} abhängt, also $P(\mathcal{A}|\mathcal{B}) = P(\mathcal{A})$, bezeichnet man \mathcal{A} und \mathcal{B} als unabhängig und dann gilt $P(\mathcal{A} \cap \mathcal{B}) = P(\mathcal{A})P(\mathcal{B})$.

2.2 Grundgesamtheit, Verteilungen

Wichtige Begriffe

Wahrscheinlichkeitsmaß (probability measure), Maßraum (measure space), stochastische Variable (stochastic or random variable), Verteilung einer stochastischen Variablen (probability distribution), Momente einer Verteilung (moments of a distribution), Gleichverteilung (uniform distribution), Binomial-Verteilung (binomial distribution), Gauss-Verteilung (gaussian distribution), Hypergeometrische-Verteilung (hypergeometric distribution), Korrelation (correlation), Korrelationslänge (correlation length)

Die Grundmenge, auf die wir uns beziehen, kann sowohl abzählbar, als auch überabzählbar sein. So ist

$$\Omega = \{s_1, \dots, s_N | s_i = \pm 1\}, \quad |\Omega| = 2^N$$

abzählbar. Weiter für ein System von N Teilchen mit der Hamiltonfunktion

$$H = \sum_{i=1}^N p_i^2 / 2m + \sum_{i < j} U(\mathbf{r}_{ij}) \quad (2.6)$$

ist $\Omega = \mathbb{R}^{6N}$, also überabzählbar. Gewöhnlich ist Ω der Phasenraum.

Das primäre Maß (siehe Anhang), an dem wir interessiert sind, ist das Gibbs-Maß (engl. Gibbs measure)

$$e^{-H(\mathbf{s})/k_B T} d\mathbf{s} \quad , \quad (2.7)$$

jedoch lohnt es sich, allgemeiner vorzugehen.

Eine **Zufallsvariable** (engl. random variable) ist eine Funktion

$$X : \Omega \longrightarrow \mathbb{R} \quad (2.8)$$

mit der Eigenschaft

$$\forall x \in \mathbb{R} : \{\omega \in \Omega | X(\omega) \leq x\} \in \Sigma \quad (2.9)$$

also eine messbare Funktion von einem Wahrscheinlichkeitsraum in einen Messraum (Σ ist die Ereignisalgebra (siehe Anhang)). Eine **Verteilungsfunktion** (engl. distribution function) einer Zufallsvariable X ist die Funktion

$$F : \mathbb{R} \longrightarrow [0, 1] \quad (2.10)$$

gegeben durch

$$F(x) = P(X \leq x) \quad (2.11)$$

d.h. $F(x) = P(A(x))$ mit $A(x) \subseteq \Omega$ mit $A(x) = \{\omega \in \Omega | X(\omega) \leq x\}$ und P ist ein Wahrscheinlichkeitsmaß (siehe Anhang).

BEISPIEL 2.0 (Zufallsvariable)

Angenommen, wir hätten einen Spin \uparrow und \downarrow . Der Zustandsraum ist

$$\Omega = \{\uparrow, \downarrow\} \quad .$$

Ein Wahrscheinlichkeitsmaß P ist durch

$$P(\emptyset) = 0, \quad P(\uparrow) = p, \quad P(\downarrow) = 1 - p, \quad P(\Omega) = 1$$

gegeben mit p fest aus $[0, 1]$. Sei $X : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ durch

$$X(\uparrow) = 1, \quad X(\downarrow) = 0$$

gegeben (**Bernoulli-Variable**). Die Verteilungsfunktion F ist durch

$$F(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ 1 - p & 0 \leq x < 1 \\ 1 & x \geq 1 \end{cases}$$

Man sagt, X habe eine **Bernoulli-Verteilung** (engl. Bernoulli distribution).

Eine Zufallsvariable ist stetig, wenn wir die Verteilungsfunktion als

$$F(x) = \int_{-\infty}^x f(u) du \quad , \quad x \in \mathbb{R} \quad (2.12)$$

für eine integrierbare Funktion $f : \mathbb{R} \rightarrow [0, 1]$ ausdrücken können. f heißt **Wahrscheinlichkeitsdichte** (engl. probability density).

BEISPIEL 2.0 (Gleichverteilung)

Die Zufallsvariable X ist **gleichverteilt** (engl. uniformly distributed) auf $[a, b]$, wenn

$$F(x) = \begin{cases} 0 & x \leq a \\ \frac{x-a}{b-a} & a < x \leq b \\ 1 & x > b \end{cases} \quad (2.13)$$

Wir wollen nun praktisch Zahlen erzeugen, die einer **Gleichverteilung** (engl. uniform distribution), d.h. einer Wahrscheinlichkeitsverteilung, bei der für jeden möglichen Zustand die gleiche Wahrscheinlichkeit bzw. Wahrscheinlichkeitsdichte des Zutreffens besteht, genügen. Diese generieren wir mit Hilfe einer Rekursion

$$x_{i+1} = G(x_i), \quad x_0 = \text{Anfangswert} \quad . \quad (2.14)$$

Da die Zahlen rekursiv erzeugt werden, sind sie zwar korreliert, aber man kann zeigen, dass sie statistische Eigenschaften besitzen, die der gewünschten sehr nahe kommen. Typisch ist die folgende Form der Rekursion

$$G(x) = (xa + b) \bmod M \quad , \quad (2.15)$$

wobei es eine Vielzahl von verschiedenen Parametern gibt. So wählt man etwa $a = 16807$, 630360016 oder 397204094 zusammen mit $M = 2^{31} - 1$.

R 2.2.1

```
RANDU <- function() {
  seed <- ((2^16 + 3) * seed) %% (2^31)
  seed/(2^31)
}
```

```
y<-rep(0,300000)
seed<-45813
for (i in 1:300000){
  y[i]<-RANDU()
}
```

```
x<-cbind(y[1:299999],y[2:300000])
plot(x)
```

```
y<-matrix(y,ncol=3,byrow=T)
z<-y[(0.5<y[,2])&(y[,2]<0.51),c(1,3)]
plot(z[,1],z[,2])
```

Nehmen wir an, dass wir ein Computerprogramm geschrieben hätten und nun testen möchten, ob die Zahlen auch gleichverteilt sind. Dazu berechnen wir die **Momente der Verteilung** (engl. moments of a distribution) . Das k -te **Moment** einer Verteilung $P(x)$ bzw. das k -te **zentrale Moment** ist

$$\langle x^k \rangle = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i^k F(x_i) \quad (2.16)$$

$$\langle (x - \langle x \rangle)^k \rangle = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_i - \langle x \rangle)^k F(x_i) \quad k = 2, \dots \quad (2.17)$$

Wenn die Verteilung also gleichmäßig im Definitionsbereich sein soll, dann darf sie nicht schief sein. Dies messen wir durch Schiefe (engl. skew)

$$S = \frac{\langle (x - \langle x \rangle)^3 \rangle}{[\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle]^{3/2}} \quad (2.18)$$

Für spätere Betrachtungen ist noch der **Exzess** von Interesse

$$e = \frac{\langle (x - \langle x \rangle)^4 \rangle}{[\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle]^2 - 3} \quad (2.19)$$

Er berechnet die Abweichung der Verteilung von einer Gauss-Verteilung.

Sei X eine stetige Zufallsvariable und $k \in \mathbb{N}$. Das k -te **Moment der Zufallsvariablen** definieren wir als

$$\langle X^k \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x^k dF_X(x) = \int_{-\infty}^{\infty} x^k f_X(x) dx \quad (2.20)$$

(Analog definieren wir die zentralen Momente). Die **Momenterzeugende Funktion** (engl. moment generating function) $M_X(t)$ ist definiert durch

$$M_X(t) = \langle e^{tX} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} e^{tx} f(x) dx \quad (2.21)$$

BEISPIEL 2.0 (Verteilung)

Wir befassen uns nun mit einigen praktischen Verteilungen von Zufallsvariablen. Als ers-

tes widmen wir uns der **Binomial-Verteilung** (engl. binomial distribution)

$$P_n(x) = \binom{n}{x} p^x (1-p)^{n-x} \quad (2.22)$$

Die Binomialverteilung (siehe Figure 2.2) gibt die Wahrscheinlichkeit an, dass ein bestimmtes Ereignis bei n unabhängigen Ausführungen eines Experimentes genau x -mal eintritt, wenn es bei einer Einzelausführung die Wahrscheinlichkeit p besitzt. Die Varianz ergibt sich zu

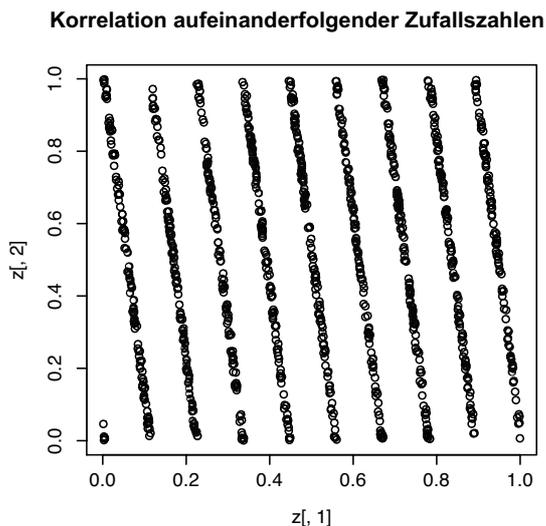


Abbildung 2.1: Test der Gleichverteilung des Zufallszahlengenerators RANDU. Geplotet sind jeweils aufeinanderfolgende Paare von Zufallszahlen. Klar zu erkennen ist die erwartete Streifenbildung.

$$np(1 - p) \quad .$$

Der Erwartungswert ist

$$np \quad .$$

MAPLE 2.2.1

```
> restart;
> with(stats);
> n:=100;
> p:=0.4;
> binom:=(x)->statevalf[pf,binomiald[n,p]](x);
> pts:=seq([i,binom(i)],i=1..100);
> plot([pts],x=1..100,style=point,symbol=circle);
```

Wir betrachten nun die Approximation der Binomial-Verteilung durch die Gauss-Verteilung (siehe Figure 2.3)

$$P(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x-\langle x \rangle)^2}{2\sigma^2}} \quad (2.23)$$

wobei σ die Standardabweichung ist.

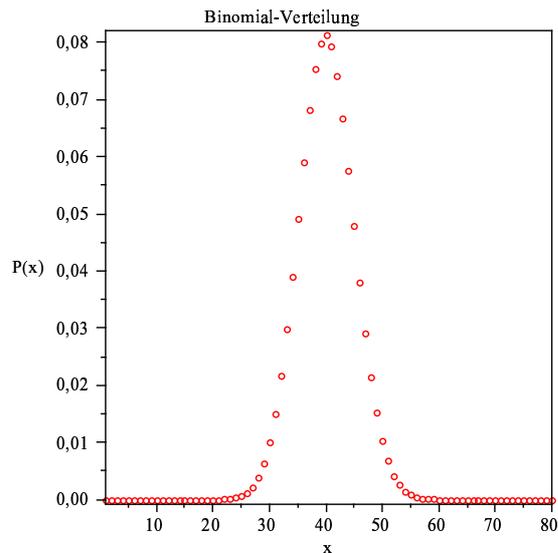


Abbildung 2.2: Binomial-Verteilung

MAPLE 2.2.2

```

> restart;
> with(plots, display):
> n := 6;
> binomials := n -> [seq([m, 2^(-n)*n!/(m! * (n-m)!)], m = 0..n)];
> Gaussian_approx := x -> exp(-(x-n/2)^2/(n/2)) / sqrt(Pi*n/2);
> plot({binomials(n), Gaussian_approx}, 0..n);

```

Als letztes Beispiel noch die **Hypergeometrische-Verteilung** (engl. hypergeometric distribution). Die Hypergeometrische-Verteilung beschreibt die Wahrscheinlichkeit dafür, dass bei N gegebenen Elementen, d.h. einer Grundgesamtheit vom Umfang N , von denen M die gewünschte Eigenschaft besitzt, beim Herausgreifen von n Probestücken, d.h. einer Stichprobe mit Umfang n , genau x Treffer erzielt werden.

$$f(x) = \frac{\binom{M}{x} \binom{N-M}{n-x}}{\binom{N}{n}} \quad (2.24)$$

MAPLE 2.2.3

```

> restart;
> with(stats);
> n:=20;
> a:=5;

```

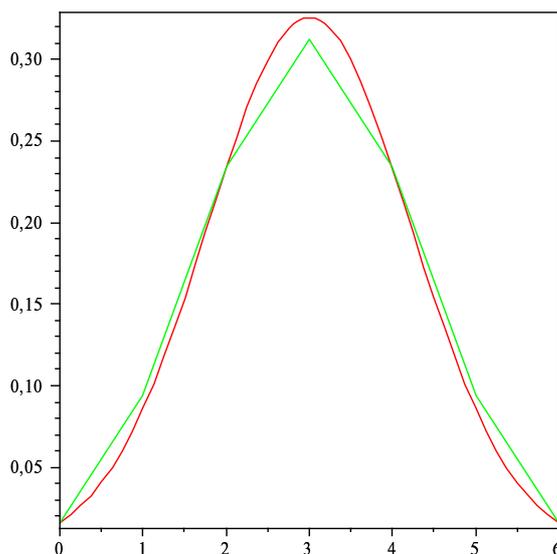


Abbildung 2.3: Approximation der Binomial-Verteilung durch eine Gauss-Verteilung

```
> N:=100;
> pts:=seq([i,hypgeo(i)],i=0..5);
> plot([pts],x=0..5,style=point,symbol=circle);
```

BEISPIEL 2.0 (Wigner-Verteilung)

Die Wigner-Verteilung (siehe Figur 2.5) für die Eigenwerte von Gauss-verteilten Zufallsmatrizen (d.h. die a_{ij} sind Gauss-verteilt mit Varianz σ für $i < j$ und mit 2σ für a_{ii} und $a_{ij} = a_{ji}$)

$$f(\lambda) = \frac{2}{\pi R^2} \sqrt{R^2 - \lambda^2} \quad (2.25)$$

für $-R < \lambda < R$ und $f(\lambda) = 0$ sonst spielt eine große Rolle in der Festkörperphysik ungeordneter Systeme, der Kernphysik, der Biophysik, der Quantengravitation und der Zahlentheorie.

X und Y sind stetig mit gemeinsamer Dichtefunktion $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow [0, \infty)$, wenn für alle $x, y \in \mathbb{R}$ gilt:

$$F(x, y) = \int_{-\infty}^y \int_{-\infty}^x f(u, v) du dv \quad . \quad (2.26)$$

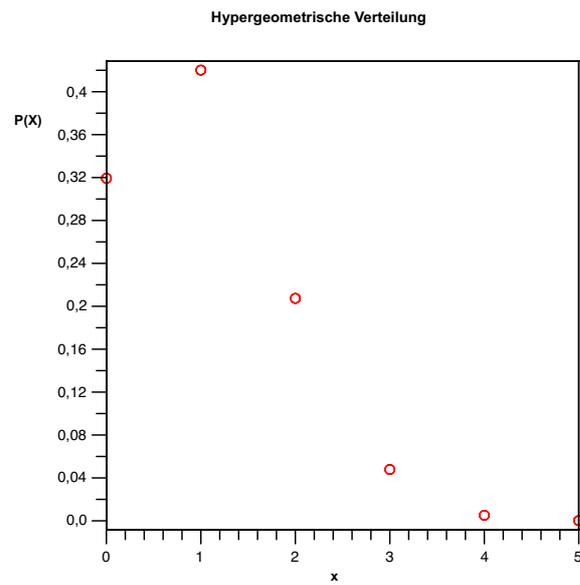


Abbildung 2.4: Hypergeometrische-Verteilung

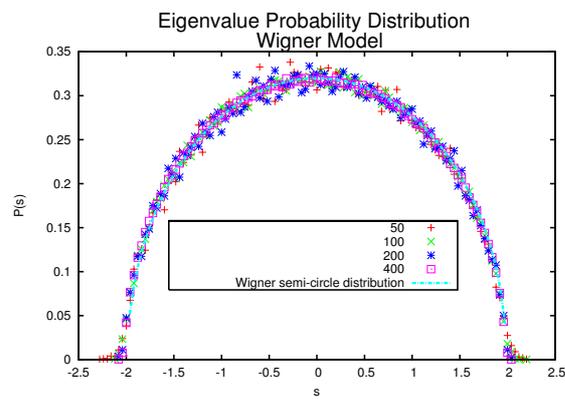


Abbildung 2.5: Wigner-Verteilung

Die **marginale Verteilungsfunktion** (engl. marginal distribution) von X und Y ist jeweils durch

$$F_X(x) = P(X \leq x) = F(x, \infty) \quad (2.27)$$

$$F_Y(y) = P(Y \leq y) = F(\infty, y) \quad (2.28)$$

gegeben (die marginale Dichtefunktion ist $f_X(x) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x, y) dy$).

Die **bedingte Verteilungsfunktion** (engl. conditional distribution) von Y bei gegebenem $X = x$ ist durch

$$F_{Y|X}(x, y) = \int_{v=-\infty}^y \frac{f(x, v)}{f_X(x)} dv \quad (2.29)$$

für x , so dass $f_X(x) > 0$ (analog Dichte).

Betrachten wir noch einmal das Bayes-Gesetz unter den nun entwickelten Aspekten, dann haben wir zunächst

$$P(A|B) = \frac{P(A \cap B)}{P(B)} \quad (2.30)$$

und damit

$$P(A|B) P(B) = P(A \cap B) = P(B|A) P(A) \quad (2.31)$$

Bzw. mit Wahrscheinlichkeitsdichten

$$f(x|y) f(y) = f(y|x) f(x) \quad (2.32)$$

D.h., wir erwarten eine Symmetrie in Form von Wahrscheinlichkeiten. Auf diesen Punkt werden wir im nächsten Kapitel noch einmal im Zusammenhang mit der Bedingung des Gleichgewichts eingehen.

Kommen wir zurück zur Physik. Für ein, wenigstens im Mittel, räumlich homogenes System hängt der Erwartungswert einer Dichte nicht vom Ort ab und damit wird

$$\langle \hat{A} \rangle = V \langle \hat{n}_A(r) \rangle. \quad (2.33)$$

Beobachtet man etwa zwei Dichten $\hat{n}_A(r)$ und $\hat{n}_B(r')$, so findet man im Regelfall, dass deren **Korrelation** (engl. correlation)

$$C_{AB}(r, r') = C_{AB}(|r - r'|) = \langle \hat{n}_A(r) \hat{n}_B(r') \rangle - \langle \hat{n}_A(r) \rangle \langle \hat{n}_B(r') \rangle \quad (2.34)$$

als Funktion des Abstandes der Punkte r und r' rasch abfallen. Für große Abstände findet man typischerweise

$$C_{AB}(r) \sim e^{-r/\xi} \quad , \quad (2.35)$$

wobei die **Korrelationslänge** (engl. correlation length) ξ auch im thermodynamischen Grenzfall endlich bleibt und von der Größenordnung der Reichweite der Wechselwirkung oder der mittleren freien Weglänge der Teilchen ist. Nur in unmittelbarer Nähe von kontinuierlichen Phasenübergängen kann ξ stark anwachsen.

Für die Korrelation der extensiven Observablen findet man

$$\langle \hat{A}\hat{B} \rangle - \langle \hat{A} \rangle \langle \hat{B} \rangle = \int d^3r d^3\bar{r} \langle \hat{n}_A(r + \bar{r}) \hat{n}_B(r) \rangle^c \sim V \xi^3 \quad , \quad (2.36)$$

wobei zu beachten ist, dass die beiden Terme auf der linken Seite jeweils von der Größenordnung V^2 sind. Speziell für die Varianz der Observablen \hat{A} erhält man

$$\Delta A = \sqrt{\langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2} \sim \sqrt{V \xi^3} \quad , \quad (2.37)$$

und damit verschwinden die relativen Schwankungen $\Delta A / \langle \hat{A} \rangle$ einer extensiven Variablen im thermodynamischen Grenzfall

$$\Delta A / \langle \hat{A} \rangle \sim \sqrt{\xi^3 / V} \xrightarrow{V \rightarrow \infty} 0. \quad (2.38)$$

Als intensive Variablen bezeichnet man Größen, die auch im thermodynamischen Grenzwert endlich bleiben. Dazu gehören die Erwartungswerte von Dichten, Stromdichten aber auch Größen wie Temperatur, Druck oder chemisches Potential, die wir im weiteren Verlauf diskutieren werden.

Im Fall der Quantenmechanik, falls die Operatoren \hat{A} und \hat{B} nicht kommutieren, hängt eine simultane Bestimmung der Erwartungswerte von der Reihenfolge ab, also $\langle \hat{A}\hat{B} \rangle \neq \langle \hat{B}\hat{A} \rangle$. Konstruiert man die zugehörigen Dichten, findet man jedoch im Regelfall

$$[\hat{n}_A(r), \hat{n}_B(r')] \xrightarrow{|r-r'| \gg \zeta} 0 \quad , \quad (2.39)$$

wobei auch ζ im thermodynamischen Grenzfall endlich bleibt. Beispielsweise findet man

$$[\hat{j}(r), \hat{n}_{E_{pot}}(r')] = 2i\hbar \hat{n}(r) \nabla' W(2r - 2r') \hat{n}(2r' - r) \quad (2.40)$$

und man erhält für die **Kohärenzlänge** ζ die Reichweite der Wechselwirkung.

Damit ist für endliche ζ

$$\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle = \int d^3r d^3r' \langle [\hat{n}_A(r), \hat{n}_B(r')] \rangle \sim V \xi^3 \quad (2.41)$$

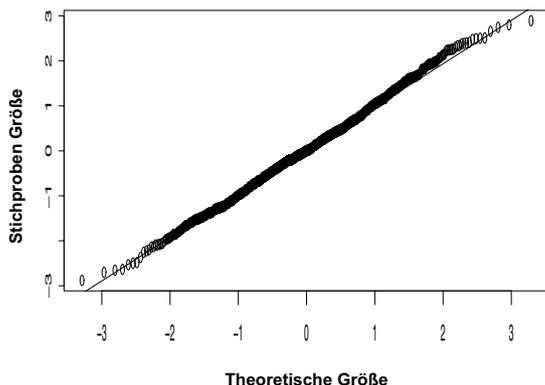


Abbildung 2.6: Vergleich zwischen der theoretischen Normaverteilung und der durch die Summe unabhängiger gleichverteilter Zufallszahlen erzeugten.

und folglich können Operatoren, die extensiven Variablen entsprechen, im thermodynamischen Grenzfall als vertauschbar und damit simultan messbar angesehen werden.

2.3 Gesetz der großen Zahlen

Eine Summe von sehr vielen unabhängigen Zufallsvariablen ist unter der Voraussetzung, dass jede der unabhängigen Zufallsvariablen nur einen geringen Einfluss auf die Summe hat, angenähert normalverteilt (siehe Anhang). Gegeben seien n voneinander unabhängige Zufallsvariablen X_1, X_2, \dots, X_n , die nur den Wert 1 (mit Wahrscheinlichkeit p) und den Wert 0 (mit Wahrscheinlichkeit q) annehmen können. Wie groß ist dann die Wahrscheinlichkeit, dass die Summe $X := X_1 + X_2 + \dots + X_n$ den Wert x annimmt? Dies ist die Wahrscheinlichkeit, dass das Ereignis "Wert 1 annehmen" genau x -mal von n -mal eintreten muß. Die Wahrscheinlichkeit dafür ist eben $P_n(x)$. Nach dem zentralen Grenzwertsatz ist X angenähert normalverteilt.

BEISPIEL 2.0 (Normalverteilung)

Wir zeigen nun numerisch, dass bei hinreichend großer Stichprobe die Variablen normalverteilt sind. Hierzu ziehen wir Stichproben aus einer Gleichverteilung und normieren die Summe. Die so gewonnene Variable ist normalverteilt, wie man durch den Vergleich mit der Normalverteilung sieht (vgl. Abbildung).

R 2.3.1

```
numcases = 10000
```

```

min = 0
max = 1
samples = 1000
sigma = sqrt(1/12)
mu = 0.5
x = 0
for (i in 1:samples) {
  t = runif(numcases,min,max)
  x[i] = (mean(t) - mu) / (sigma/sqrt(numcases))
}
hist(x,prob=T)
qqnorm(x,main='normal(0,1)')
qqline(x)

```

2.4 Überprüfen Sie Ihr Wissen

Überprüfen Sie die folgenden Aussagen und Fragen:

- Wie sind der Erwartungswert $\langle X \rangle$ und das n -te Moment einer stochastischen Variable X definiert?
- Wie erhält man den Erwartungswert eines Operators A aus dem Dichteoperator ρ ?

2.5 Übungen

1. Erzeugen gleichverteilter Zufallszahlen

Eine einfache und häufig benutzte Methode zur Erzeugung von gleichverteilten Zufallszahlen besteht in der Verwendung linearer Kongruenz. Hierbei wird eine Sequenz von natürlichen Zahlen I_1, I_2, I_3, \dots ($I_n \in [0, m - 1]$, m sehr groß) durch die Rekursion

$$I_{j+1} = aI_j + c \bmod m \quad a > 0, c \geq 0$$

erzeugt. Der Startwert I_0 , der sog. seed, ist ein beliebiges ungerades Element aus $[0, m - 1]$. Bei geeigneter Wahl von a , m und c erhält man die maximale Periodenlänge $m - 1$, andernfalls wiederholt sich die Sequenz bereits nach $p < m - 1$

Schritten. Für eine mögliche Wahl der Parameter a , m und c mit maximaler Periodenlänge siehe z.B. Numerical Recipes, herausgegeben von W.H. Press, B.P. Flannery, B.A. Teukolsky und W. T. Vetterling.

Um eine möglichst große Periodenlänge zu erhalten, wählt man für m häufig die auf dem Computer größte darstellbare natürliche Zahl I_{max} . Werden Integer-Zahlen z.B. mit 32 Bits dargestellt, so ist $I_{max} = 2^{31} - 1$ (wieso?).

Gleichverteilte reelle Zufallszahlen X_j aus $[0, 1)$ erhält man dann durch Division durch m , $X_{j+1} = I_{j+1}/m$. Die so erzeugten Zufallszahlen sind natürlich nicht völlig zufällig, da man bei gegebenem seed I_0 immer die gleiche Sequenz erhält, man bezeichnet die so generierten Zufallszahlen deshalb häufig als pseudo-random.

- a) Erzeuge nach der oben beschriebenen Methode (z.B. $c = 0$, $a = 16807$ bzw. 65539 und $m = 2^{31} - 1$) gleichverteilte Zufallszahlen im Intervall $[0, 1)$. Hinweis: Um bei der obigen Rekursion einen Überlauf zu vermeiden, dividiert man durch m , d.h. man iteriert in der Form ($c = 0$), $X_{j+1} = aX_j \bmod 1$. Um bei dieser reellen Arithmetik nicht zu viele signifikante Stellen zu verlieren, empfiehlt sich hier doppelgenaue Rechnung.
- b) Vergleichen Sie Mittelwert und Varianz der so erzeugten Zufallszahlen mit den theoretischen Werten für im Intervall $[0, 1)$ gleichverteilte Zufallszahlen.

2. Zeige: Eine Gaussverteilung $P(x) = \exp(-x^2)$ hat nur die Momente $k = 1, 2$

3. Autokorrelationsfunktion

Folgende sich periodisch ändernde Größe sei gegeben:

$$m(t) = m \cos(\omega t) \quad .$$

- a) Berechne die Autokorrelationsfunktion.
- a) Zeige, dass die Autokorrelationsfunktion unabhängig von der Phase von $m(t)$ ist.
($m'(t) = m \cos(\omega t + \phi)$)

4. Ein bestimmter Prozess habe die Eigenschaft, dass unabhängig davon, was sich im Intervall $[0, t]$ ereignet hat, die Wahrscheinlichkeit für ein Ereignis im Intervall $[t, t + h]$ durch λh gegeben sei. Die Wahrscheinlichkeit für mehr als ein Ereignis sei höherer Ordnung in h .

- a) Bestimme die Wahrscheinlichkeit, dass zur Zeit t , n Ereignisse stattgefunden haben, für den Grenzfall $h \rightarrow 0$.

b) Bestimme die Mittelwerte von n und n^2 für die Verteilung.

5. Folgende Verteilung sei gegeben:

$$n(e)dE = \frac{2\pi(N/V)}{(\pi\beta)^{3/2}} E^{1/2} \exp\left(-\frac{E}{\beta}\right) dE \quad .$$

- Was ist der wahrscheinlichste Wert von E ?
- Bestimme den Mittelwert $\langle E \rangle$.
- Bestimme den Mittelwert $\langle E^2 \rangle$.

Die Größen N , V und β seien konstant.

6. Optimierte Gaussverteilungen

Gegeben seien N unabhängig und identisch verteilte Zufallsvariablen r_1, \dots, r_N . Die Wahrscheinlichkeitsdichte jedes einzelnen r_i sei $p_1(r)$. Die zugehörige Verteilungsfunktion ist $F_1(r) = \int_{-\infty}^r p_1(\tilde{r}) d\tilde{r}$. Wir wollen nun folgende Zufallsvariable betrachten

$$X = \max\{r_1, r_2, \dots, r_N\}$$

welche den größten Wert der N Zufallsvariablen r_i darstellt.

- Berechne die Verteilungsfunktion $F_N(x)$ der Zufallsvariable X in Abhängigkeit von $F_1(r)$.
- Zeige, dass der wahrscheinlichste Wert x^* der Zufallsvariable X für $N \gg 1$ gegeben ist durch die Gleichung

$$p_1'(x^*) + Np_1(x^*)^2 = 0$$

- In der Physik kommen oft Verteilungen vor, die für große Werte schneller als ein Potenzgesetz abfallen. Betrachte eine Verteilungsfunktion der r_i , bei der für große r gilt: $\bar{F}_1(r) = 1 - F_1(r) \simeq c \exp(-(r/a)^p)$. Berechne x^* für $N \gg 1$.

7. Poisson-Verteilung

In einem Behälter mit Volumen V_0 befindet sich ein Gas, das aus $N_0 \gg 1$ (nicht wechselwirkenden) Molekülen besteht. Bei einem Experiment wird eine Probe des Volumens $V < V_0$ aus dem Behälter entnommen.

- Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit $P_{N_0}(N)$ dafür, N Moleküle im Volumen V zu finden?

- b) Wie kann man die obige Verteilung im Falle $V \ll V_0$ approximieren? Plotten Sie beide Verteilungen für die Fälle $V_1 = V_0/2$, $V_2 = V_0/10$ und $V_3 = V_0/100$ bei festem N_0 .
- c) Nun sollen viele Proben des gleichen Volumens aus identischen Behältern V_0 entnommen werden. Wie groß ist die mittlere Anzahl $\langle N \rangle$ von Molekülen in $V \ll V_0$ und deren Varianz ΔN ? Benutzen Sie für Ihre Berechnung die approximierte Verteilung aus Teil b)

8. Diskrete Wahrscheinlichkeitsverteilungen

- a) Die Poisson-Verteilung ist für $k = 0, 1, \dots$ definiert durch

$$P_\lambda(k) = e^{-\lambda} \frac{\lambda^k}{k!}, \quad \lambda > 0$$

Zeige, dass P_λ normiert ist und bestimme den Erwartungswert von k bezüglich der Poissonverteilung.

- b) Gegeben seien zwei Zufallsvariablen X_1 und X_2 . Es gilt:

$$P(X_1 = x_1) = \frac{e^{-\lambda} \lambda^{x_1}}{x_1!} \quad x_1 = 0, 1, 2, \dots$$

$$P(X_2 = k | X_1 = x_1) = \binom{x_1}{k} p^k (1-p)^{x_1-k} \quad k = 0, 1, \dots, x_1$$

Zeige, dass $P(X_2 = k) = \frac{e^{-\lambda p} (\lambda p)^k}{k!}$

9. Maxwell-Verteilung

Die Geschwindigkeitsverteilung der Atome eines klassischen idealen Gases ist durch folgende Wahrscheinlichkeitsdichte gegeben:

$$f(\vec{v}) = \text{const} \cdot \exp\left(-\frac{m\vec{v}^2}{2k_B T}\right)$$

- a) Berechne die Normierungskonstante.
- b) Berechne die Mittelwerte $\langle v_x^2 \rangle$ und $\langle \vec{v}^2 \rangle$.
- c) Wie groß ist die mittlere Energie eines Atoms?
- d) Bestimme die Wahrscheinlichkeit $\rho(E)dE$ dafür, ein Atom im Energieintervall $[E, E + dE]$ zu finden.

10. Maxwell-Boltzmann-Verteilung

Gegeben sei ein Gas bei einer Temperatur T bestehend aus Partikeln der Masse m . Nehmen Sie an, dass die Geschwindigkeiten v_x , v_y und v_z der Teilchen Gaußverteilt sind und begründen sie diese Annahme:

$$p(v_i) = N e^{-\frac{1}{2} \frac{m v_i^2}{kT}}, \quad \forall i \in \{x, y, z\}.$$

Berechnen Sie die Normierungskonstante N und bestimmen Sie die Wahrscheinlichkeitsverteilung $p(v)$ des Geschwindigkeitsbetrags v , wobei $v = \|\mathbf{v}\| = \|(v_x, v_y, v_z)^t\|$ ist. Was ist der Erwartungswert $\langle v \rangle$ von v und welchen Effekt hat eine Temperaturerhöhung $\Delta T = T$ auf diesen?

11. Gammaverteilung

Die Gammaverteilung ist definiert als

$$f(x, k, b) = \frac{1}{b^k \Gamma(k)} x^{k-1} e^{-x/b} \quad x > 0, \quad k > 0, \quad b > 0$$

wobei $\Gamma(k) = \int_0^\infty t^{k-1} e^{-t} dt$ die Gammafunktion ist.

- k ist ein Parameter, der die Form der Verteilung bestimmt. Zeichne die Dichtefunktion $f(x, k, b)$ für $b = 1$ und $k = 0.5, 1$ und 2 (z.B. mit gnuplot, maple oder per Hand). Wie ändert sich die Verteilung?
- b ist ein Skalenparameter. Was passiert mit der Verteilung, wenn k konstant ist und b sich ändert? Zeichne die Funktion f für ein $k > 1$ und drei verschiedene Werte von b .
- Berechne die Momenterzeugende Funktion, welche definiert ist durch $M(t) = \langle e^{tx} \rangle$.
- Berechne mit Hilfe der Momenterzeugenden Funktion $M(t)$ den Mittelwert $\langle x \rangle$ und die Varianz σ^2 der Verteilung.

12. Ein Kristall besitze eine Zahl N an ungepaarten Elektronen, die auf dessen Gitter angeordnet seien. Die Elektronen können ihren Spin völlig unabhängig voneinander einstellen. In einem äußeren Magnetfeld $\mathbf{B} = B e_x$, $B > 0$, kann die x -Komponente des Spins nur die Werte $\pm \hbar/2$ annehmen. Diese beiden Spineinstellungen erfolgen mit den Wahrscheinlichkeiten $p_+ = \mathcal{N} \exp(\mu_B B/k_B T)$ und $p_- = \mathcal{N} \exp(-\mu_B B/k_B T)$, mit $p_+ + p_- = 1$.

- Bestimmen Sie die Verteilung $P(m)$ dafür, dass m Spins mehr parallel zum B -Feld sind als antiparallel.
- Bestimmen Sie das mittlere magnetische Moment der Elektronen $\langle \mu \rangle = \mu_B \langle m \rangle$ und dessen Varianz $\Delta \mu = \mu_B \Delta m$.

13. Betrachten Sie ein Gas aus $N = 10^{23}$ Atomen. Jedes dieser Atome habe eine Energie E_i mit der Wahrscheinlichkeit $p(E_i) = N \exp(-E_i/k_B T)$. Bestimmen Sie zunächst den Mittelwert $\langle E_i \rangle$ und dessen Schwankung ΔE_i . Zeigen Sie dabei, dass beide von der Größenordnung $\mathcal{O}(k_B T)$ sind und damit $\Delta E_i / \langle E_i \rangle$ von der Größenordnung 1 ist. Bestimmen sie anschließend mit Hilfe des Gesetzes der großen Zahlen daraus die relative Unbestimmtheit $\Delta E / \langle E \rangle$, für die Gesamtenergie $E = \sum_i E_i$.
14. Gegeben seien N Atome, die sich in unterschiedlichen Energiezuständen E_1, \dots, E_n befinden können.
- Wie viele Möglichkeiten gibt es, die Atome so zu verteilen, dass genau n_i Atome im Zustand E_i sind. ($\sum n_i = N$)? Die Atome seien unterscheidbar.
 - Wie viele Möglichkeiten gibt es insgesamt, die Atome auf die Energiezustände E_i zu verteilen, wenn die Atome ununterscheidbar sind?
 - Wie viele Möglichkeiten gibt es insgesamt, die Atome auf Energiezustände E_i zu verteilen, wenn die Atome unterscheidbar sind?

