Elemente der Stochastik

Die Beschreibung des Zustandes eines makroskopischen Systems erfordert eine statistische Betrachtung, da die Wahrscheinlichkeiten für das Auftreten einzelner Mikrozustände berücksichtigt werden müssen.

Hier sollen Grundlagen der Statistik und Wahrscheinlichkeitstheorie wiederholt / eingeführt werden.

Binomialkoeffizienten

Definition: $$\binom{m}{n} := \frac{m(m-1)\dots(m-n+1)}{n!}$$

Eigenschaften:

- Addition, $\binom{m}{n} + \binom{m}{n+1} = \binom{m+1}{n+1}$
- Symmetrie, $\binom{m}{m-n} = \binom{m}{n}$

  $\longrightarrow$ Symmetrie des Pascal'schen Dreiecks
- Darstellung durch Fakultäten,

  $$\binom{m}{n} = \frac{m!}{n!\,(m-n)!}$$
- Spezialfälle, $\binom{m}{0} = 1$,

  $\binom{m}{1} = m$,

  $\binom{m}{m} = 1$

Additionstheorem: $$\sum_{k=0}^{p} \binom{n}{k}\binom{m}{p-k} = \binom{n+m}{p}$$

Kombinatorik

1. Die Anzahl aller möglichen Permutationen n verschiedener Objekte beträgt $n!$.

   <u>Beweis:</u> Das erste Objekt kann auf n Plätze verteilt werden, das zweite auf $n-1$, das dritte auf $n-2$, ..., das n-te auf einen.
   $\longrightarrow$ $\#$Möglichkeiten $= n(n-1)\ldots 2\cdot 1 = n!$ $\square$

Sind n_1 Elemente der Sorte 1, n_2 Elemente der Sorte 2, ..., n_k Elemente der Sorte k, jeweils ununterscheidbar, dann reduziert sich die Zahl der Möglichkeiten entsprechend auf

$$\frac{n!}{n_1!n_2!\ldots n_k!}.$$

2. Die Anzahl Möglichkeiten, aus n Objekten m auszuwählen, beträgt $\binom{n}{m}$.

   <u>Beweis:</u> Das Auswählen von m Objekten entspricht der Aufteilung in m Elemente der Sorte 1 und $(n-m)$ Elemente der Sorte 2. Nach 1. folgt $\#$Möglichkeiten $= \frac{n!}{m!\,(n-k)!} = \binom{n}{m}$. $\square$

3. Die Anzahl Möglichkeiten, m ununterscheidbare Objekte auf n Boxen zu verteilen $(m \leq n)$, beträgt $\binom{n+m-1}{m}$.

   <u>Beweis:</u> Mindestens eine Box muss Elemente enthalten, höchstens m der Boxen können belegt sein.

Es seien k Boxen belegt. Diese aus den n Boxen auszuwählen, gibt es gem. 2. $\binom{n}{k}$ Möglichkeiten. Die Anzahl Möglichkeiten, die m Objekte auf k Boxen zu verteilen, ist gleich der Anzahl Möglichkeiten, m als Summe von k natürlichen Zahlen zu schreiben, $m_1 + m_2 + \ldots + m_k = m$. Anschaulich:

$$\overbrace{\underbrace{1 + 1}_{m_1} + \underbrace{1 + 1 + 1}_{m_2} + \underbrace{\ldots + 1}_{\ldots}}^{m} = m$$

Das entspricht der Anzahl Möglichkeiten, aus $m-1$ Pluszeichen $k-1$ Trennlinien (gestrichelt) herauszugreifen, also nach 2.: $\binom{m-1}{k-1}$.

Das ergibt insgesamt

$$\#\text{Möglichkeiten} = \sum_{k=1}^{m} \binom{n}{k}\binom{m-1}{k-1} = \sum_{k=0}^{m} \binom{n}{k}\binom{m-1}{m-k}$$

$$= \binom{n+m-1}{m}. \qquad \square$$

4. Die Anzahl Möglichkeiten, m unterscheidbare Objekte auf n Boxen zu verteilen, beträgt n^m.

<u>Beweis:</u> Für die Platzierung jedes der m Elemente gibt es n Möglichkeiten. $\square$

Wahrscheinlichkeitstheorie

Eine Zufallsvariable X ist eine Größe, die jedem Ereignis (Ergebnis eines Zufallexperimentes) einen Wert x zuordnet. Sind die Werte x kontinuierlich, dann kann der Zufallsvariablen eine Wahrscheinlichkeitsdichte $w(x)$ zugeordnet werden. Dann gibt $w(x)\,dx$ die Wahrscheinlichkeit, dass X einen Wert im Intervall $[x, x+dx)$ annimmt.

Normierung (für $x \in \mathbb{R}$): $$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, w(x) = 1$$

(Die Wahrscheinlichkeit, dass irgendein Wert angenommen wird, ist 1.)

Bem.: Normiertheit und Positivität, $w(x) \geq 0 \;\forall x$, machen $w(x)\,dx$ zu einem Wahrscheinlichkeitsmaß. Hier handelt es sich um ein Riemann-Integral; im Allgemeinen existieren W-Maße auch für Lebesgue-Integrale.

Eine Funktion $f(X)$ einer Zufallsvariable heißt Zufallsfunktion.

Def.: Der Mittelwert $\langle f(X) \rangle$ einer Zufallsfunktion ist definiert als
$$\langle f(X) \rangle := \int dx\; w(x)\, f(x) .$$

Speziell folgt für $f(X) = X$ der Mittelwert der Zufallsvariable selbst,
$$\langle X \rangle = \int dx\; w(x)\, x .$$

Def.: Das n-te Moment einer Zufallsvariable ist definiert als
$$\mu_n := \langle X^n \rangle = \int dx \; w(x)\, x^n .$$

Def.: Die charakteristische Funktion einer Wahrscheinlichkeitsverteilung ist definiert als
$$C(\xi) := \int dx \; e^{i\xi x}\, w(x) .$$

Gemäß der letzten beiden Definitionen lässt sich $C(\xi)$ als Reihe der Momente schreiben,
$$C(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(i\xi)^k}{k!}\, \mu_k .$$

Spezialfall: Ist das Wahrscheinlichkeitsspektrum von X diskret, d.h. x kann nur abzählbar viele Werte $x_1, \dots, x_n$ annehmen, dann ist die Wahrscheinlichkeitsdichte von der Form
$$w(x) = w_1\, \delta(x-x_1) + w_2\, \delta(x-x_2) + \dots + w_n\, \delta(x-x_n).$$

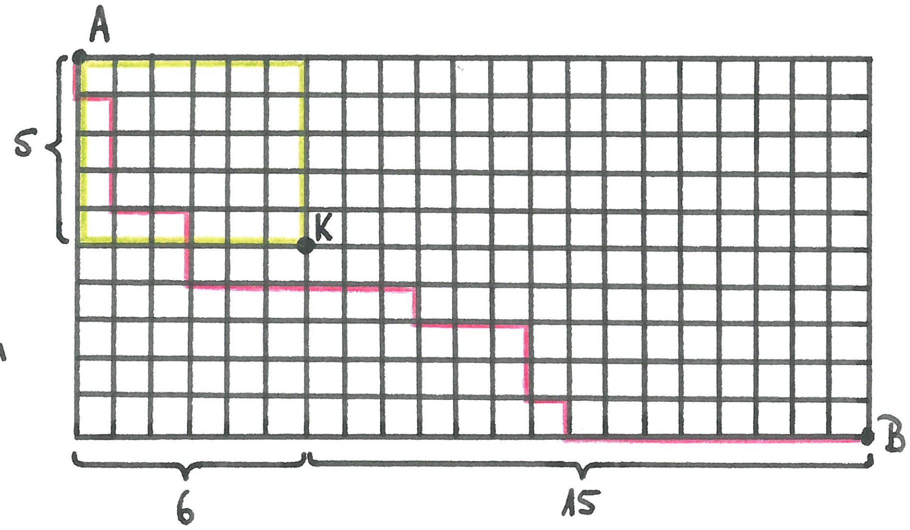
Entsprechend gehen dann alle Integrale in Summen über, z.B. der Mittelwert:
$$\langle X \rangle = \int dx \left(w_1\, \delta(x-x_1) + \dots + w_n\, \delta(x-x_n) \right) x$$
$$= w_1 x_1 + w_2 x_2 + \dots + w_n x_n .$$

Bem.: Das macht $w(x)\,dx$ zu einem reinen Punktmaß im Sinne der Maßtheorie.

Anwendungsbeispiele

1. „Nicht alle Wege führen nach Rom."

Wir betrachten nebenstehendes (10×21)-Gitter. Eine Maus möchte von A nach B gelangen, ohne den Punkt K zu passieren, an dem eine Katze sitzt. Es seien nur Schritte nach rechts und unten erlaubt. Gesucht ist die Anzahl katzenfreier Wege.



Betrachte zunächst die Möglichkeiten, von A nach K zu gelangen: Im grünen Rechteck müssten insgesamt 11 Schritte gemacht werden, 5 davon nach unten, 6 nach rechts. Die Anzahl Wege entspricht damit der Anzahl Möglichkeiten, 5 aus 11 zu ziehen (oder 6 aus 11):

$$\#(\text{Wege } A \to K) = \binom{11}{5} = \binom{11}{6} = \frac{11!}{5!\ 6!} = 462.$$

Entsprechend gilt für die Zahl der Möglichkeiten, diese Wege von K nach B im (5×15)-Rechteck fortzuführen:

$$\#(\text{Wege } K \to B) = \binom{20}{5} = \binom{20}{15} = \frac{20!}{5!\ 15!} = 15\,504.$$

Die Gesamtzahl aller Wege, die über K führen, ist damit

$$N_K = 462 \cdot 15\,504 = 7\,162\,848.$$

Die Gesamtzahl aller Wege im (10×21)-Rechteck ist

$$N = \binom{31}{10} = 44\ 352\ 165$$

und damit sind $N - N_K = 37\ 189\ 317$ Wege von A nach B nicht Katzen-behaftet. Das entspricht 83,9 %.

2. Quantenmechanische Oszillatoren

Wir betrachten ein System aus N identischen Oszillatoren, wobei $\varepsilon_{n_i} = \hbar\omega(n_i + \frac{1}{2})$ die Energieniveaus des i-ten Oszillators gibt, $i = 1, 2, \ldots, N$ und $n_i = 0, 1, 2, \ldots$.

Die Gesamtenergie des Systems beträgt

$$E = \sum_{i=1}^{N} \varepsilon_{n_i} = \frac{\hbar\omega}{2} N + \hbar\omega \underbrace{\sum_{i=1}^{N} n_i}_{M} .$$

M ist die Anzahl Energiequanten im System, die auf die N Oszillatoren verteilt sind. Jeder möglichen Verteilung der Quanten entspricht eine Realisierungsmöglichkeit des Systems. Die Gesamtzahl W aller Realisierungen ist also gleich der Anzahl Möglichkeiten, M Objekte auf N Boxen zu verteilen, also

$$W = \binom{N + M - 1}{M} .$$

Mit Hilfe der Boltzmann-Formel erhält man daraus sofort die Entropie des Systems,

$$S = k \ln(W).$$

3. Zweiniveau-System

Ein System bestehe aus N identischen Einzelsystemen, von denen jedes nur die Energie 0 oder ε annehmen kann. Ist die Gesamtenergie E des Systems bekannt, befinden sich offenbar $n_1 = E/\varepsilon$ Einzelsysteme im angeregten und $n_0 = N - n_1$ im nicht angeregten Zustand.

Die Anzahl Realisierungsmöglichkeiten entspricht der Anzahl Möglichkeiten, n_1 Objekte aus N auszuwählen, also

$$W = \binom{N}{n_1} = \frac{N!}{(E/\varepsilon)!\,(N - E/\varepsilon)!}$$

und wieder kann die Entropie nach $S = k \ln(W)$ bestimmt werden.