Theoretische Biophysik
-
Statistische Physik

2. Vorlesung

Pawel Romanczuk
Wintersemester 2018

http://lab.romanczuk.de/teaching/

Zusammenfassung letzte VL

- Einleitung, Motivation und Einordnung
- Statistische Beschreibung in der Physik und Biophysik
- Quellen der Zufälligkeit in Vielteilchensystemen
- Stochastische Prozesse: Zwei äquivalente Betrachtungsweisen: stochastische Trajektorien versus Wahrscheinlichkeitsdichten

Wahrscheinlichkeitstheorie (Stochastik)

- Ein Teilgebiet der Mathematik, das von grundlegender Bedeutung für eine Vielzahl von Anwendungen ist, von der wissenschaftlichen Statistik bis hin zur Risikoabschätzung in der Finanz- und Versicherungsbranche.
- Die Ursprünge der modernen Wahrscheinlichkeitstheorie im 16. und 17. Jhd sind mit Namen von Mathematikern wie Cardano, Fermat, Pascal, Huygens, Bernoulli, u.a. verbunden.

- Anfängliche Motivation: Berechnung von Gewinnchancen beim Glücksspiel (Würfel, Roulette, …)
- Häufig Angriffe bzw. Skepsis seitens andere Wissenschaften, z.B. Physik die nach deterministischen Naturgesetzen suchte, wie auch seitens der Religion.

Wahrscheinlichkeitstheorie (Stochastik)

- Ursprüngliche Formulierung für diskrete Wahrscheinlichkeiten: Münzwurf, Würfel, Roulette...

- Anfänglich „pragmatische“ Definition über Ereignis-frequenzen.

Beispiel: N Würfe mit zwei Münzen:

K - Kopf
L - Zahl

$$P(\{K,K\}) = \frac{N_{\{KK\}}}{N} = \frac{N_{\{KK\}}}{N_{\{KL\}} + N_{\{LK\}} + N_{\{LL\}} + N_{\{KK\}}}$$

Alles auf der rechten Seite ist nur über das Experiment bestimmt.
Konvergenz für $N \to \infty$

Dies war im 16 Jhd. eine ziemlich revolutionäre Einsicht, da vor allem das Glücksspiel stark vom Aberglauben geprägt war.

Stochastische Paradoxien

Oft führt eine pragmatische Herangehensweise zu Wiedersprüchen und Problemen, da unsere Intuition für

- Wahrscheinlichkeiten,
- komplexe Mengen (Mengen von Mengen)
- überabzählbare Mengen
- große Zahlen

versagt.

Dies führt dazu, dass wir oft vermeintliche Wiedersprüchen oder Paradoxien begegnen.

Eine axiomatische Formulierung der mathematischen Grundlagen bietet da einen Ausweg.

St. Petersburger Paradoxon

- Für die sogenannte St. Petersburg-Lotterie bezahlt man eine Teilnahmegebühr
- Gespielt wird mit einer fairen Münze
- die Münze wird geworfen bis zum ersten mal Kopf fällt
- der Gewinn entspricht der Anzahl der Würfe: Kopf bei erstem Wurf → 1 €, Kopf bei zweitem Wurf → 2 €, etc.

Wahrscheinlichkeit dass Kopf erst beim n-ten Wurf fällt:

$$P_n = P(Z_1) \cdot P(Z_2) \cdot \ldots P(Z_n) = \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2} \cdot \ldots \cdot \frac{1}{2} = \frac{1}{2^n}$$

Erwarteter Gewinn:

$$E_n = \frac{1}{2}1 + \frac{1}{4}2 + \cdots + \frac{1}{2^n}2^{n-1} = \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{2} \Rightarrow \lim_{n\to\infty} E_n = \infty$$

Egal wie teuer die Lotterie ist, es lohnt sich immer zu spielen!

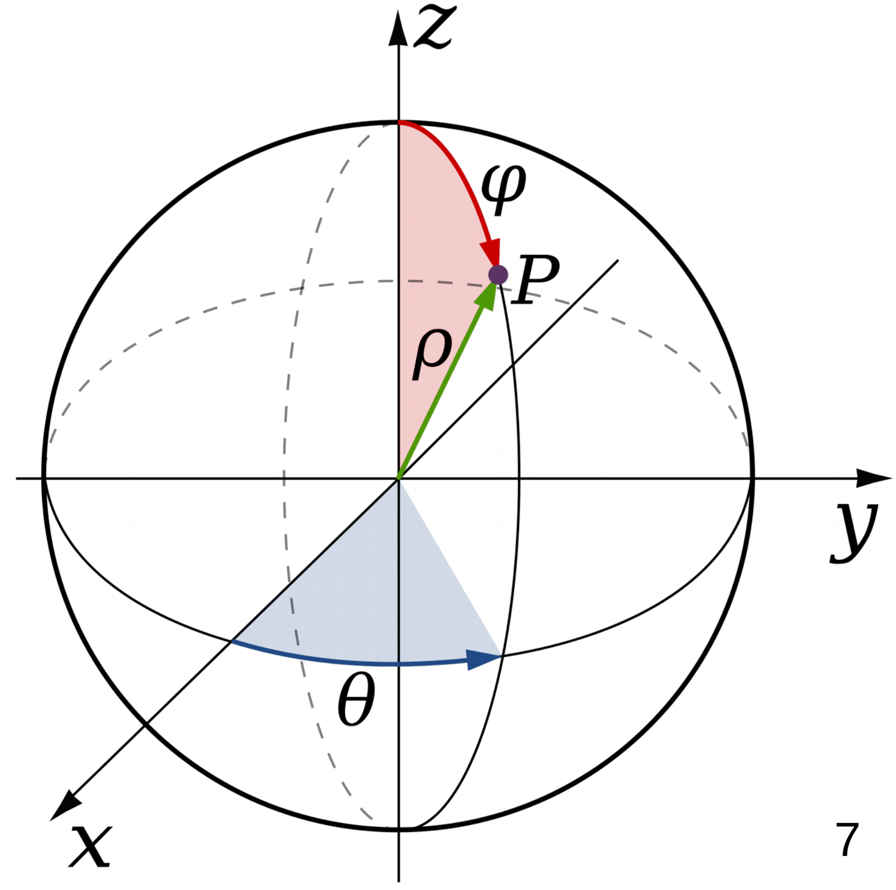
Borel-Kolmogorov Paradoxon

- Betrachte eine konstante Wahrscheinlichkeitsdichte auf einer Einheitskugel:

$$p(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi} \qquad \mathbf{r} = \begin{pmatrix} \cos(\varphi)\sin(\theta) \\ \cos(\varphi)\cos(\theta) \\ \sin(\varphi) \end{pmatrix}$$

- Wenn wir nur auf dem Äquator sind $\varphi = \pi/2$ sagt unsere Intuition, dass die Wahrscheinlichkeit über θ ebenfalls gleichmässig verteit ist:

$$p(\theta|\varphi = \frac{\pi}{2}) = \frac{1}{2\pi} \qquad \theta \in [0, 2\pi]$$



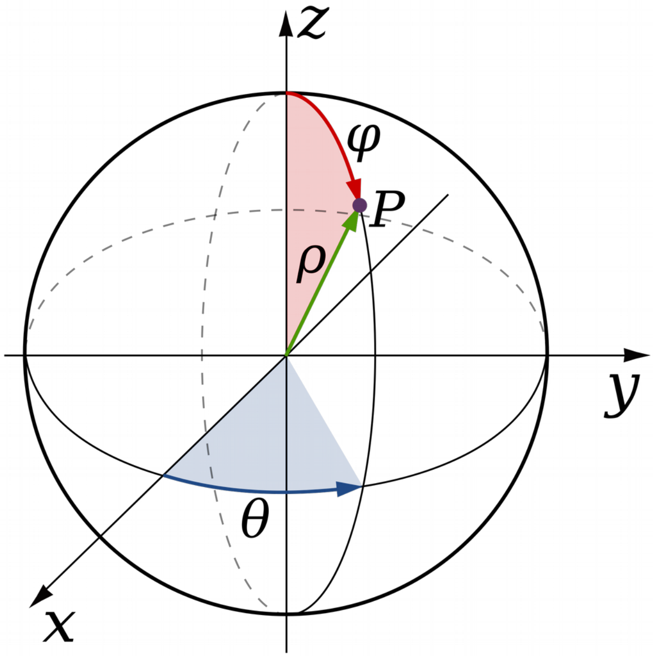
Borel-Kolmogorov Paradoxon

- Da der Äquator ein beliebiger Großkreis ist, muss die Wahrscheinlichkeitsdichte auch entlang eines Meridians (vom Nordpol zum Südpol) konstant sein:

$$\boxed{p(\varphi|\theta = 0) = \frac{1}{\pi}}$$

$$\varphi \in [0, \pi]$$

$$\neq$$



- Lass es uns es explizit berechnen:

$$\int_A \mathrm{d}\mathbf{A}\, p(\mathbf{r}) = 1 \ = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\theta \int_0^{\pi} \mathrm{d}\varphi \sin\varphi$$

$$p(\varphi, \theta) = \frac{1}{2} \sin\varphi \cdot \frac{1}{2\pi}$$

mit $\quad p(\varphi|\theta) = \dfrac{p(\varphi, \theta)}{p(\theta)}$

$$\boxed{p(\varphi|\theta = 0) = \frac{1}{2} \sin\varphi}$$

Bayesches Theorem

Axiomatische Formulierung der Wahrscheinlichkeitstheorie - Definitionen

Grundlegend für die WT ist das Konzept der **Ereignisse** eines Zufallsexperiments.

Folgende mathematische Objekte werden definiert:

- **Ergebnismenge Ω**: Menge aller möglichen **Ergebnisse ω** eines Zufallsexperiments. Häufig interessieren uns aber nicht spezifische Ergebnisse sondern ob eine bestimmte Teilmenge der Ergebismenge vorliegt.
- **Ereignis {ω}**: Teilmenge von Ergebnissen. Enthält ein Ergebnis genau ein Ereignis dass spicht man von einem Elementarereignis
- **σ-Algebra** (Ereignisalgebra, Ereignisystem): Eine Menge von Teilmengen von Ω.
- **Wahrscheinlichkeitsmass μ**: eine Abbildung des Ereignisraums in das Intervall [0,1]. Wahrscheinlichkeiten sind also die Bilder von μ.

Axiomatische Formulierung der Wahrscheinlichkeitstheorie - Definitionen

Des weiteren definieren wir noch die

Zufallsvariable:

$$X(\omega) : \Omega \to \mathbb{R}^n$$

Als eine Funktion vom Ergebnisraum in einen weiteren (meßbaren) Raum, den Zustandsraum. Oft kann der Zustandsraum einfach als $\mathbb{R}^n$ angenommen werden.

Das Tripel:

$$\mathcal{P} = (\Omega, \sigma, \mu)$$

definiert den Wahrscheinlichkeitsraum.

Ich kann nur sinnvoll WT betreiben wenn alle drei Komponenten klar definiert sind. Sie müssen zudem weitere Bedingungen erfüllen.

σ-Algebra

Für das Ereignissystem σ muss gelten:

1) Das Ereignissystem muss neben den Teilmengen von Ω, auch Ω selbst enthalten: $\Omega \in \sigma$

2) σ ist stabil bezüglich Komplementbildung. Falls Menge (Ereignis) $\mathcal{A} \in \sigma$ dann muss $\mathcal{A}^c = \Omega \setminus \mathcal{A}$ ebenfalls in σ enthalten sein: $\mathcal{A}^c \in \sigma$.

3) σ ist stabil bezüglich abzählbarer Vereinigungen: Gilt

$$\mathcal{A}_1, \mathcal{A}_2, \ldots, \mathcal{A}_n \in \sigma$$

so muss auch die Vereinigung dieser Ereignisse in σ enthalten sein:

$$\bigcup_n A_n \in \sigma$$

Beispiel σ-Algebra

Die sogenannte Potenzmenge von Ω ist die Menge aller möglichen Teilmengen von Ω (inklusive der Komplemente!). Es erfüllt alle Bedingungen und ist somit eine σ-Algebra.

Für das Beispiel des Wurfs mit Zwei Münzen, besteht die Potenzmenge aus 16 Elementen:

$$
\begin{aligned}
\sigma = [\ & \Omega, \emptyset, \{KK\}, \{LL\}, \{KL\}, \{LK\}, \\
& \{KK, LL\}\{KK, KL\}, \{KK, LK\}, \\
& \{LL, KL\}, \{LL, LK\}, \{LK, KL\}, \\
& \{KK, LL, KL\}, \{KK, LL, LK\}, \\
& \{KK, LK, KL\}, \{LL, KL, LK\}\ ]
\end{aligned}
$$

Beispiel σ-Algebra

Die Ergebnisse ω sind Beobachtungen von Elementar-ereignissen, d.h. sie zeigen an ob Ereignisse ineerhalb der σ-Algebra eingetreten sind, wenn

$$\omega \in \mathcal{A} \in \sigma$$

dann ist Ereignis $\mathcal{A}$ eingetreten. Zum Beispiel bei $\omega \in \{KK\}$

1) $\mathcal{A}_1 = \Omega$ → irgendetwas is passiert
2) $\mathcal{A}_2 = \{KK\}$ → das Elementarereignis selbst
3) $\mathcal{A}_3 = \{KK, LL\}$ → beide zeigen die gleiche Seite
4) $\mathcal{A}_4 = \{KK, KL\}$ → erste Münze zeigt Kopf
5) $\mathcal{A}_5 = \{KK, LK\}$ → zweite Münze zeigt Kopf
6) $\mathcal{A}_6 = \{KK, LK, KL\}$ → wenigstens eine Münze zeigt Kopf
7) $\mathcal{A}_7 = \{KK, LL, LK\}$ → erste Münze Kopf, zweite Münze Zahl ist **nicht** eingetreten

Zwei Münzen - Andere σ-Algebren

- Kleinste (triviale) σ-Algebra:

$$\sigma = [\Omega, \emptyset]$$

- Betrachte den Fall bei dem Beobachter nur erkennen kann ob beide Münzen Kopf zeigen. Die entsprechende σ-Algebra:

$$\sigma = [\Omega, \emptyset, \{KK\}, \{LL, LK, KL\}]$$

- Für den Fall, dass der Beobachter nur erkennen kann ob beide Münzen die gleiche Seite zeigen, lautet die σ-Algebra:

$$\sigma = [\Omega, \emptyset, \{KK, LL\}, \{LK, KL\}]$$

Wahrscheinlichkeitsmaß μ – Kolmogorov Axiome

- Abbildung von den Elementen der σ-Algebra (Ereignisse) auf das Intervall [0,1]:

$$\mu : \sigma \to [0,1]$$

$$\mathcal{A} \to p = \mu(\mathcal{A})$$

- Es muss folgende Axiome erfüllen:

1) $\mu(\mathcal{A}) \geq 0 \quad \forall \quad \mathcal{A} \in \sigma$

2) $\mu(\Omega) = 1$

3) Wenn $\mathcal{A}_n$ mit (n=1,2,….) ist eine abzählbre Menge von nicht überlappenden Ereignissen $\mathcal{A}_n \cap \mathcal{A}_m = \emptyset \quad \forall \quad n \neq m$ dann:

$$\mu\left(\bigcup_n \mathcal{A}_n\right) = \sum_n \mu(\mathcal{A}_n)$$

daraus folgt dann auch:

$$\mu(\mathcal{A}^c) = 1 - \mu(\mathcal{A})$$

Wichtige Anmerkungen

Von den vorhergehenden Axiomen für das Wahrscheinlichkeits-maß ist der dritte der Wichtigste.

Wenn wir zwei nichtüberlappende Ereignisse haben $A \cap B = \emptyset$ und ein Ergebnis $\omega \in \Omega$, dann kann Ereignis $C = A \cup B$ nur dann eintreten wenn $\omega \in A$ oder $\omega \in B$, daher gilt:

$$\mu(A \cup B) = \mu(A) + \mu(B)$$

Eine Einschr‘nkung für das 3. Axiom ist, dass es nur auf abzählbare Vereinigungen beschränkt ist.

Für endliche oder abzählbare Mengen Ω, hat man kein Problem und man kann bequem mit der Potenzmenge arbeiten.

Für überabzählbare Ergebnismengen Ω, z.B. kontinuirliche reele Zahlen wird es kompliziert und man muss zusätzliche axiomatische Schritte einbauen → **Borel Algebra.**

Bedingte Wahrscheinlichkeiten

Bedingte Wahrscheinlichkeit: Wahrscheinlichkeit für das Eintreten von A unter der Voraussetzung, dass des gleichzeitigen Eintreten eines anderen Ereignisses B.

$$\mu(A|B) = \frac{\mu(A \cap B)}{\mu(B)} \qquad *$$

Überprüfung der Kolmogorov Axiome:

1. $0 \leq \mu(A|B) \leq 1$
2. $\mu(B|B) = 1$
3. Wenn $A_1, \ldots A_n$ paarweise disjukt, dann gilt

$$\mu(A_1 \cup \cdots \cup A_n|B) = \mu(A_1|B) + \cdots + \mu(A_n|B)$$

Verbundwahrscheinlichkeiten und Satz von Bayes

Das gleichzeitige Eintreten zweier Ereignisse A und B enspricht dem eintreten des Verbund-Ereignisses $A \cap B$. Die entsprechende Wahrscheinlichkeit ist die Verbundwahrscheinlichkeit:

$$\mu(A \cap B) = \mu(A) \cdot \mu(B|A) = \mu(B)\mu(A|B)$$

Beweis der obigen Gleichung aus der Definition der bedingten Wahrscheinlichkeit.

Satz von Bayes:

Falls wir die Wahrscheinlichkeiten μ(A) und μ(B) kennen ergibt sich dann:

$$\mu(A|B) = \frac{\mu(B|A)\mu(A)}{\mu(B)}$$

Unabhängige Ereignisse

Manchmal sind Ereignisse abhängig. Zum Beispiel wenn *A* eine Untermenge von *B* ist, dass heisst immer wenn *A* eintritt so tritt auf *B* ein. In dem Fall gilt:

$$\mu(A \cap B) = \mu(A)$$

also

$$\mu(B|A) = 1$$

Das ist das Gegenteil von Unabhängigkeit. Unabhängigkeit zweier Ereignisse A und B ist definiert als:

$$\mu(A|B) = \mu(A) \qquad\qquad \mu(B|A) = \mu(B)$$

Für die Verbundwahrscheinlichkeit folgt also aus *

$$\mu(A \cap B) = \mu(A)\mu(B)$$

Mehr als zwei unabhängige Ereignisse

Bei mehr als zwei Variablen muss man vorsichtig sein. Nehmen wir an wir haben Ereignis A, welches unabhängig ist von B, welches wiederrum unabhängig ist von C:

$$\mu(A \cap B) = \mu(A)\mu(B)$$

$$\mu(B \cap C) = \mu(B)\mu(C)$$

$$\mu(C \cap A) = \mu(C)\mu(A)$$

„Naive“ Unabhängigkeit würde implizieren:

$$\mu(A \cap B \cap C) = \mu(A)\mu(B)\mu(C)$$

Allerdings ist es auch möchlich, dass z.B. Folgendes gilt:

$$A \cap B = B \cap C = C \cap A$$

und somit

$$\mu(A \cap B \cap C) = \mu(B \cap C \cap C) = \mu(B \cap C) = \mu(B)\mu(C)$$

Beispiel

Wir betrachten wieder den Wurf mit zwei Münzen und drei Ereignisse:

1. Beide Münzen zeigen die gleiche Seite: $A = \{KK, LL\} \quad \mu(A) = 1/2$
2. Eine Münze zeigt Kopf: $B = \{KK, KL\} \quad \mu(B) = 1/2$
3. Eine Münze zeigt Zahl: $C = \{LL, KL\} \quad \mu(C) = 1/2$

Jedes Ereignispaar ist unabhängig, da

$$\mu(A \cap B) = \mu([KK]) = 1/4 = \mu(A)\mu(B)$$
$$\mu(B \cap C) = \mu([KL]) = 1/4 = \mu(B)\mu(C)$$
$$\mu(C \cap A) = \mu([LL]) = 1/4 = \mu(C)\mu(A)$$

Allerdings können die drei Ereignisse nicht gleichzeitig eintreten:

$$\mu(A \cap B \cap C) = \mu(\emptyset) = 0 \neq 1/8$$

Zufallsvariablen

Eine eindimensionale Zufallsvariable X ist eine Funktion die die abstrakten Ereignisse auf reele Zahlen abbildet:

$$X : \Omega \to \mathbb{R}$$

$$\omega \to X(\omega)$$

so dass

$$A = \{\omega | X(\omega) \leq x\}$$

ein Ereignis in σ ist, für beliebige Werte von x.

Für einen einfachen Münzwurf:

$$\Omega = \{K, L\}$$

$$\sigma = [\Omega, \emptyset, K, L]$$

wäre eine mögliche Zufallsvariable:

$$X(K) = 1$$

$$X(L) = 0$$

Zufallsvariablen

Somit wären verschiedene Ereignisse definiert:

- $x < 0$ entspricht dann $A = \emptyset$
- $0 \leq x < 1$ entspricht dann $A = \{L\}$
- $x \geq 1$ entspricht dann $A = \Omega$

Wir haben jetzt ein Wahrscheinlichkeitsmaß für jede Untermenge von σ definiert (K → Komplement von L !).

Das heisst $\mu(A)$ entspricht der Wahrscheinlichkeit, dass $X(\omega)$ kleiner als x ist.

$$P_X(x) = P(X \leq x) = \mu(A) \quad \text{wobei} \quad A = \{\omega | X(\omega) \leq x\}$$

$P_X(x)$ kumulative Wahrscheinlichkeitsverteilung der Zufallsvariable X.

Zufallsvariablen

Mit Zufallsvariablen zu arbeiten hat den großen Vorteil gegenüber den abstrakten Wahrscheinlichkeitsraum

$$\mathcal{P} = (\Omega, \sigma, \mu)$$

dass man viel einfacher mit Funktionen von Zufallsvariablen wie zum Beispiel

$$F(X) = X^2 \qquad G(X) = \exp(X)$$

umgehen kann.

Die kumulative Verteilung $P_X(x)$ ist eine monoton steigende Funktion von x mit:

$$P_X(-\infty) = \mu(\emptyset) = 0 \qquad P_X(\infty) = \mu(\Omega) = 1$$

Wahrscheinlichkeitsdichte

Formell wenn eine nichtnegative Funktion $p_X(x)$ existiert so dass

$$P_X(x) = \int_{-\infty}^{x} p_X(y)dy$$

dann ist $p_X(x)$ eine Wahrscheinlichkeitsdichte.

Die Wahrscheinlichkeit, dass X in einem bestimmten Intervall ist, ist gegeben durch

$$P_X(a \leq x \leq b) = \int_a^b p_X(y)dy$$

bzw.

$$P_X(a \leq x \leq b) = P_X(b) - P_X(a)$$

Operativer oder Pragmatischer Zugang zur Wahrscheinlichkeitstheorie

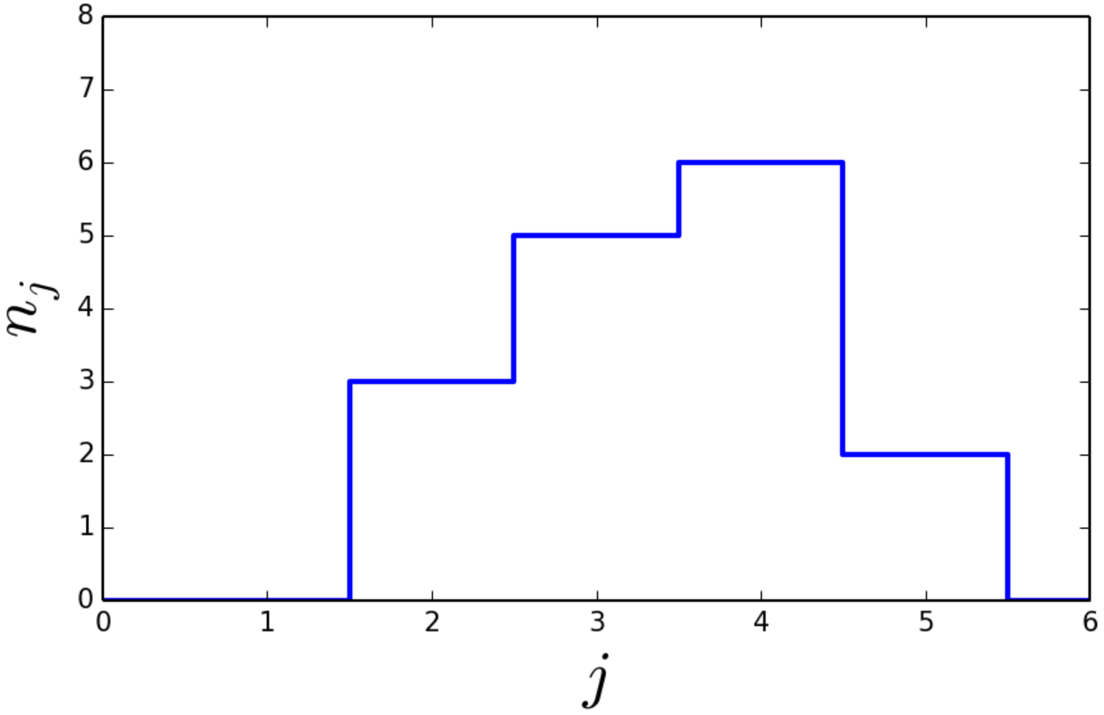
Der bisher besprochene axiomatische Zugang unterscheidet sich stark von dem Zugang dem man praktisch (erfahrungsbasiert) wählt, bei dem alles über ensprechende Beobachtungen von Zufallsexperimenten definiert wird, und z.B. die Wahrscheinlichkeit von Ereignissen über deren Frequenzen bestimmt wird:

$$P_X(K) = \lim_{n\to\infty} \frac{n_K}{n} = \frac{1}{2}$$

Der axiomatische Ansatz entbehrt aber nicht einer fundamentalen Eleganz und falls ein Modell für μ existiert, kann mann ganz systematisch vorgehen und auch vermeintliche Wiedersprüche auflösen.

Diskrete Variable

Wahrscheinlichkeit Wert j zu beobachten: $$p_j = \frac{n_j}{n} \;\rightarrow \sum_j p_j = 1$$



$$\langle j \rangle = \sum_j j p_j$$

$$\langle j^2 \rangle = \sum_j j^2 p_j$$

$$\langle f(j) \rangle = \sum_j f(j) p_j$$

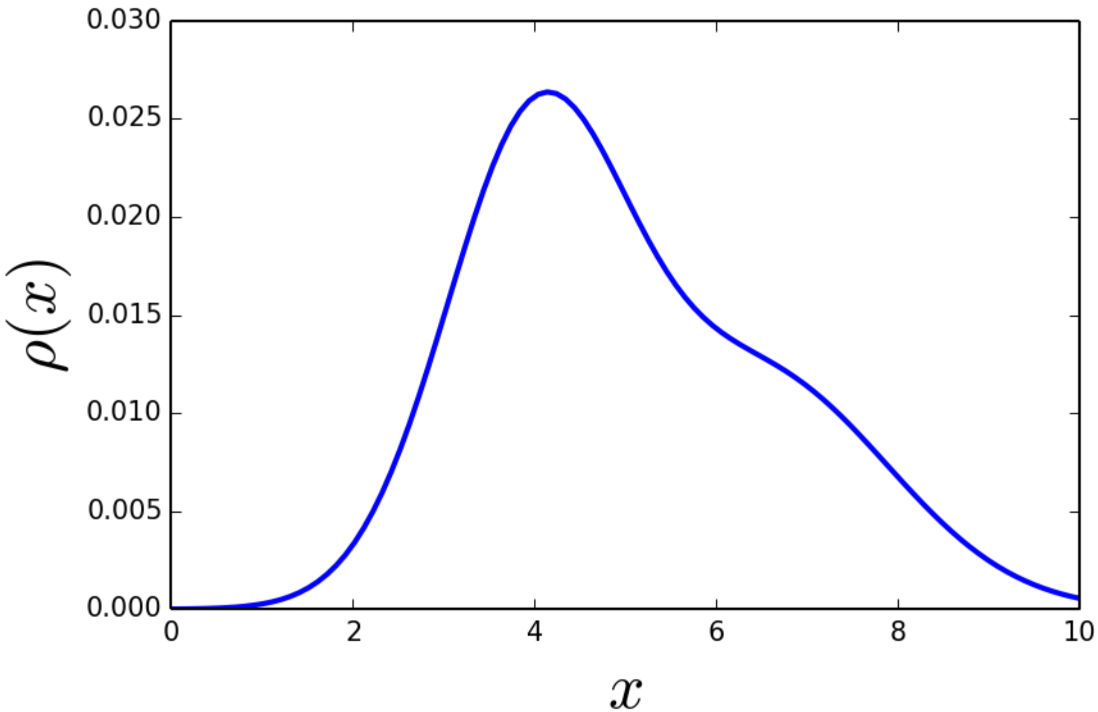
$$\tilde{j} = 4 \qquad \langle j \rangle \approx 3.44$$

$$\sigma \approx 0.93$$

$$\sigma^2 = \langle j^2 \rangle - \langle j \rangle^2$$

Kontinuierliche Variable

Wahrscheinlichkeitsdichte: $\rho(x)$



$$\tilde{x} \approx 4.14 \quad \langle x \rangle \approx 5.02$$

$$\sigma \approx 1.69$$

$$p_{ab} = \int_a^b \rho(x) dx$$

$$\rightarrow \int_{\mathbb{R}} \rho(x) dx = 1$$

$$\langle x \rangle \ = \int_{-\infty}^{+\infty} x \rho(x) dx$$

$$\langle x^2 \rangle \ = \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 \rho(x) dx$$

$$\langle f(x) \rangle \ = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \rho(x) dx$$

$$\sigma^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$$