Theoretische Biophysik
-
Statistische Physik

5. Vorlesung

Pawel Romanczuk
Wintersemester 2018

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

Zusammenfassung letzte VL

- Stirling‘sche Formel
- Poisson-Verteilung, Poisson-Prozess
- Exponential-Verteilung
- Charakteristische Funktion

Charakteristische Funktion versus Momenten-generierende Funktion

$$\text{Wahrscheinlichkeitsdichte } p(x)$$

charakteristische Funktion

$$\Phi(\varphi) = \langle e^{i\varphi x} \rangle = \int dx \; e^{i\varphi x} p(x)$$

$$\langle x^n \rangle = \frac{1}{i^n} \frac{d^n \Phi(\varphi)}{d\varphi^n}\bigg|_{\varphi=0}$$

existiert immer!

Mom.-gen. Funktion

$$M(\phi) = \langle e^{\phi x} \rangle = \int dx \; e^{\phi x} p(x)$$

$$\langle x^n \rangle = \frac{\partial^n}{\partial \phi^n} M(\phi)\bigg|_{\phi=0}$$

existiert nicht immer!

Falls $M(\phi)$ existiert, dann gilt: $M(i\phi) = \Phi(\varphi)$

Kumulanten

Zufallsprozess X → Wahrscheinlichkeitsverteilung $p(x) = p_X(x)$

Momente: $$\langle x^n \rangle = m_n = \frac{1}{i^n} \frac{d^n}{d\varphi^n} \Phi(\varphi) \Big|_{\varphi=0}$$

Kumulanten: $$\kappa_n = \frac{1}{i^n} \frac{d^n}{d\varphi^n} \ln(\Phi(\varphi)) \Big|_{\varphi=0}$$

Kumulanten haben praktische Eigenschaften:

Konstante: $c \in \mathbb{R}$

1) Verschiebungsinvarianz: $$\kappa_1(X + c) = \kappa_1(X) + c$$
$$\kappa_n(X + c) = \kappa_n(X) \quad \text{für} \quad n > 1$$

2) Homogenität (Grad *n*): $$\kappa_n(cX) = c^n \kappa_n(X)$$

3) Additivität: $X_1, X_2, \ldots, X_N$ → N unabhängige Zufallsprozesse mit verschiedenen W.-Verteilungen

Für Summe aus N Zuffalsvariablen $Y = \sum_{i=1}^{N} X_i$ gilt $\kappa_n(Y) = \sum_{i=1}^{N} \kappa_i(X_i)$

Momente, zentrale Momente und Kumulanten

Mittelwert: $\mu = m_1 = \langle x \rangle$ ➡ zentralen Momente: $\mu_n = \langle (x-\mu)^n \rangle$

Kumulanten	als Funktion der $m_n = \langle x^n \rangle$	als Fkt. der μ_n
κ_1	$= m_1$	$= \mu_1$
κ_2	$= m_2 - m_1^2$	$= \mu_2 \; = \sigma^2$
κ_3	$= m_3 - 3m_2m_1 + 2m_1^3$	$= \mu_3$
κ_4	$= m_4 - 4m_3m_1 - 3m_2^2 + 12m_2m_1^2 - 6m_1^4$	$= \mu_4 - 3\mu_2^2$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$

- Alle drei: $m_n,\ \mu_n,\ \kappa_n$ sind Kenngrößen der Wahrscheinlichkeitsverteilung.
- Zentrale Momente beziehen sich immer auf den Erwarungswert.
- Kumulanten haben günstige Eigenschaften, und es gilt

  entweder alle Kumulanten ausser den ersten beiden verschwinden:

  $\kappa_n = 0 \quad \text{für} \quad n \geq 2$ → **Normalverteilung!**

  oder unendlich viele nichtverschwindende Kumulanten existieren.

Fourier Transformation

Fourier-“Hin“
-Transformation

$$\tilde{f}(\varphi) = \int dx \; e^{i\varphi x} f(x)$$

$$f(x) \longrightarrow \tilde{f}(\varphi)$$

$$\tilde{f}(\varphi) \longrightarrow f(x)$$

Fourier-“Rück“
-Transformation

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \int dx \; e^{-i\varphi x} \tilde{f}(\varphi)$$

Zeit t	$\longleftrightarrow$	Frequenz ω
Ort r		Wellenzahl $k = 1/\lambda$
Zufallszahl x		kompl. Variable φ

Fourier Transformation

Fourier-“Hin“ und „Rück“ -Transformation

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \int d\varphi\ e^{-i\varphi x} \int dy\ e^{i\varphi y} f(y)$$

Zusammenziehen der beiden Exp.-Fkt. und Vertauchung der Reihenfolge der Integration

$$f(x) = \int dy \left[\underbrace{\frac{1}{2\pi} \int d\varphi\ e^{i\varphi(y-x)}}_{} \right] f(y)$$

$$\boxed{\frac{1}{2\pi} \int dk\ e^{i\varphi(y-x)} = \delta(x-y)}$$

Das „innere“ Integral ist die Definition der so genannten δ-Funktion

$x = y$ → das Integral divergiert!

$$x \neq y \qquad \frac{1}{2\pi} \int d\varphi\ e^{i\varphi(y-x)} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left[\int d\varphi\ \cos(\varphi(x-y)) + i \int dk\ \sin(\varphi(x-y)) \right] = 0$$

Euler Formel: $e^{i\alpha} = \cos\alpha + i \sin\alpha$

δ-Distribution (Dirac δ-Funktion)

Es gilt also:

$$\delta(x) = \begin{cases} 0 & \text{for} \quad x \neq 0 \\ \infty & \text{for} \quad x = 0 \end{cases}$$

mit:

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\varphi \; e^{i\varphi x}$$

Gleichzeitig gilt:

$$\int_{-a}^{+a} dx \; \delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\varphi \frac{1}{i\varphi} \left[\; e^{i\varphi a} - e^{-i\varphi a} \right]$$

$$= \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\varphi \frac{\sin \varphi a}{\varphi}$$

$$\sin \alpha = \frac{1}{2i} (e^{i\alpha} - e^{-i\alpha})$$

$$= 1$$

δ-Distribution (Dirac δ-Funktion)

Eigenschaften von $\delta(x)$:

- überall Null ausser bei $x=0$
- unendlich am Ursprung $x=0$
- allerdings ist die „Fläche“ unter der Kurve immer 1.

Es gilt für eine beliebige Funktion:

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dy \delta(x-y) f(y)$$

Erwartungswert einer δ-Distribution

Es gilt:

$$\langle f(x) \rangle = \lim_{N \to \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} f(x_i)$$

$$= \int dx \; f(x) p(x)$$

Somit erhalten wir für den Erwartungswert:

$$\langle \delta(z - x) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \; \delta(z - x) p(x)$$

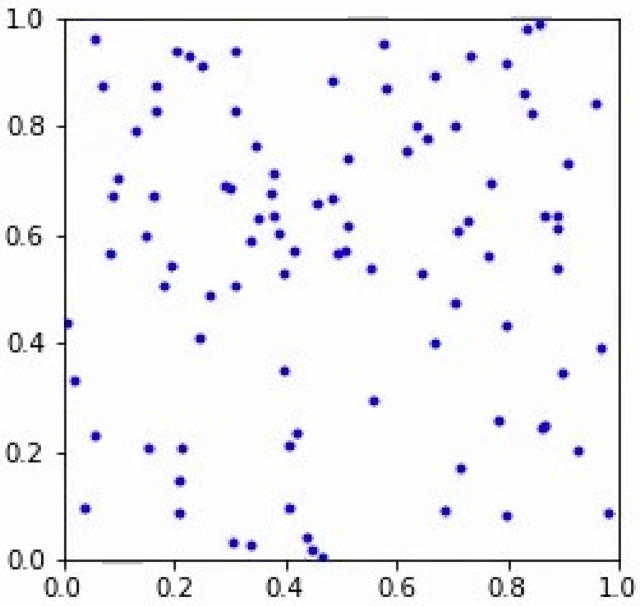
$$= p(z)$$

Das erlaubt eine formale Definition von kontinuierlichen Wahrscheinlichkeitsdichten für Sets von diskreten Ereignisse oder diskreten Objekten z.B. eine Wahrscheinlichkeitsdichte für perfekten 6-seitigen Würfel:

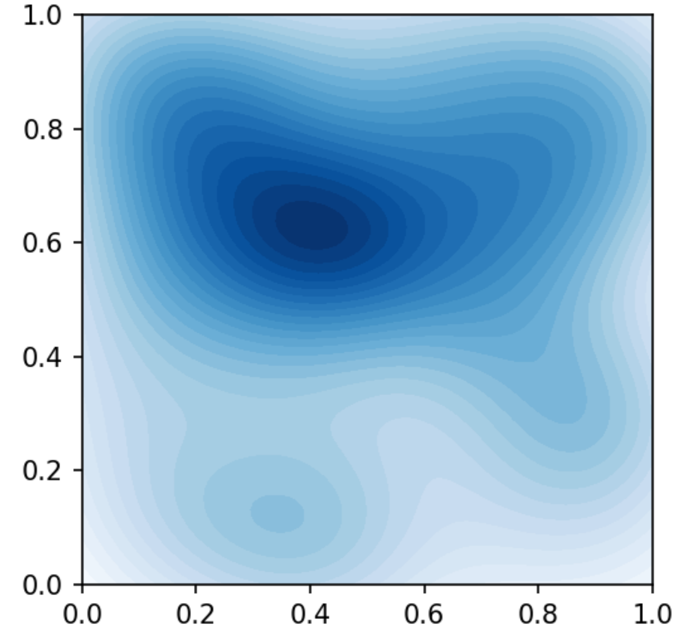
$$p(x) = \frac{1}{6} \sum_{y=1}^{6} \delta(x - y)$$

Von Teilchenpositionen zu Wahrscheinlichkeitsdichten

Ein-Teilchen Wahrscheinlichkeitsdichte: $$p(\mathbf{r},t) = \left\langle \frac{1}{N} \sum_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i(t)) \right\rangle$$



$$p(\mathbf{r},t)$$



Teilchendichte: $$\rho(\mathbf{r},t) = N p(\mathbf{r},t)$$

Transformationen von Zufallsvariablen

Wir nehmen an wir haben ein Zufallsprozess X mit möglichen Werten x, und der entsprechenden Wahrscheinlichkeitsdichte $p(x)$.

Nun haben wir einen anderen Prozess Y der uns interessiert der einer Funktion der Zufallsvariable X entspricht:

$$Y = g(X)$$

Mit Hilfe der δ-Funktion gilt für die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Werte y, des Prozesses Y:

$$p_Y(y) = \langle \delta(y - Y) \rangle = \langle \delta(y - g(X)) \rangle$$

$$= \int dx \; \delta(y - g(x)) p_X(x)$$

Transformationen von Zufallsvariablen

Nun nehmen wir es existiert die Inversefunktion der Transformation:

$$g^{-1}(y) = h(y) \qquad\qquad h(g(x)) = x$$

Bei einer Variablentransformation des Integrals $\displaystyle\int dx\ \delta(y - g(x))p_X(x)$
in dem wir x durch h(z) ersetzen, gilt für das infinitesimale Element:

$$dx = \underbrace{\left|\frac{dh(z)}{dz}\right|}_{\text{J - Jacobi-Determinante}} dz$$

Es gilt also:

$$\int dx\ \delta(y - g(x))p_X(x) = \int dz\ \left|\frac{dh(z)}{dz}\right| \delta(y - z)p_X(h(z))$$

bzw. mit der Eigenschaft der δ-Funktion folgt:

$$\boxed{p_Y(y) = \left|\frac{dh(y)}{dy}\right| p_X(h(y))}$$

Transformationen von Zufallsvariablen – Beispiel 1

Nehmen wir erst mal ein einfaches Beispiel:

$$p_X(x) = e^{-x} \qquad (x \in [0, \infty]) \qquad g(X) = X^2$$

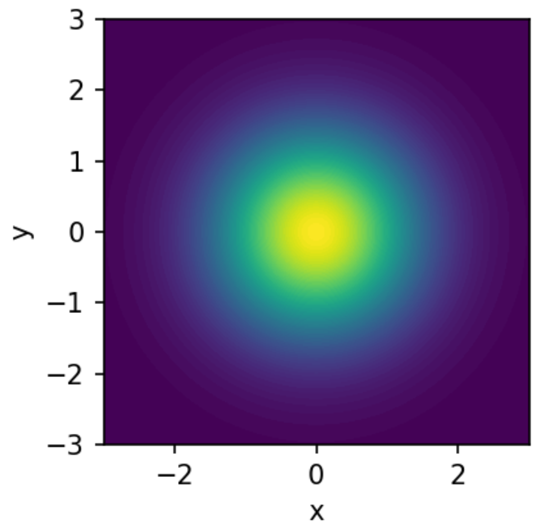
Inversefunktion: $h(y) = \sqrt{y}$ $\rightarrow$ $\left| \dfrac{dh(y)}{dy} \right| = \dfrac{1}{2} \dfrac{1}{y^{1/2}}$

$$\Rightarrow \quad p_Y(y) = \frac{1}{2} \frac{1}{y^{1/2}} e^{-\sqrt{y}}$$

Transformationen von Zufallsvariablen – Beispiel 2

Ein Beispiel für eine zwei-dimensionale Normalverteilung:

$$p_c(x,y) = \frac{1}{2\pi} e^{-(x^2+y^2)/2}$$



Koordinatenwechsel von kartesischen Koordinaten zu Polarkoordinaten:

$$x = r\cos\varphi$$
$$y = r\sin\varphi$$

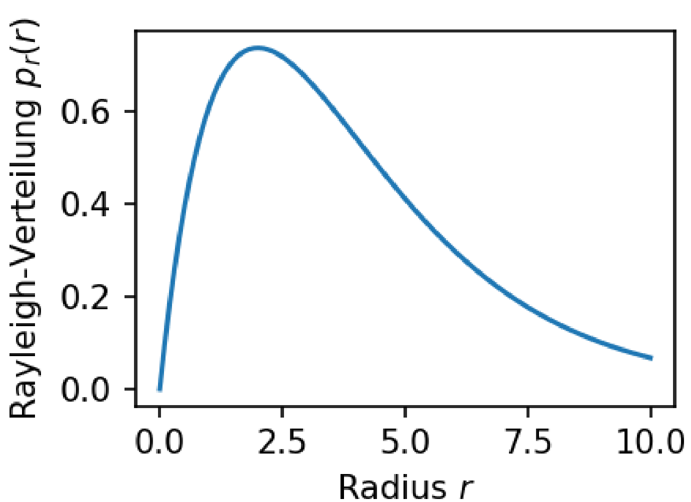
$$J = \begin{vmatrix} \frac{\partial x}{\partial r} & \frac{\partial x}{\partial \varphi} \\ \frac{\partial y}{\partial r} & \frac{\partial y}{\partial \varphi} \end{vmatrix} = r$$

$$p_p(r,\varphi) = \frac{1}{2\pi} r e^{-r^2/2} = p_\varphi(\varphi) p_r(r)$$

$$p_\varphi(\varphi) = \frac{1}{2\pi} = const.$$

$$\boxed{p_r(r) = r e^{-r^2/2}}$$

Rayleigh-Verteilung



Gesetz von großen Zahlen

Nehmen wir an wir haben ein Zufallsprozess, bei dem wir die Summe aus N unabhängigen, gleich verteilten Zufallszahlen bilden:

$$Y_N = \sum_{i=1}^{N} X_i$$

X_i wird aus $p(x)$ gezogen

Der Einfachheit halber nehmen wir eine symmetrische Verteilung an:

$$p(x) = p(-x)$$

$$\langle X \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \; xp(x) = \int_{-\infty}^{0} dx \; xp(x) + \int_{0}^{\infty} dx \; xp(x)$$

$$= -\int_{0}^{\infty} dx \; xp(-x) + \int_{0}^{\infty} dx \; xp(x)$$

$$\Rightarrow \langle X \rangle = 0 \quad \Rightarrow \quad \langle Y_N \rangle = \sum_{i=1}^{N} \langle X_i \rangle = 0$$

Gesetz von großen Zahlen

Für das zweite Moment gilt:

$$\langle Y_N^2 \rangle = \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} \langle X_i X_j \rangle \; = \sum_{i=1}^{N} \langle X_i \rangle + \sum_{i=1}^{N} \sum_{j \neq i} \langle X_i X_j \rangle$$

$$= N\sigma^2 + \sum_{i=1}^{N} \sum_{j \neq i} \langle X_i \rangle \langle X_j \rangle \; = N\sigma^2$$

Wir erhalten allgemein das Ergebnis was wir bereits wiederholt in ähnlicher Form erhalten haben (siehe z.B. VL zu Binomialverteilung):

$$\sqrt{\langle Y_N^2 \rangle} = \sigma \sqrt{N}$$

Grenzverteilung bei großem N

Was ist nun die Verteilung von Y_n?

Wir wissen dass die Varianz mit $\sqrt{N}$ wächst, somit wird die Verteilung immer breiter für $N \to \infty$, aber wie sieht es für den Zufallsprozess

$$Z = \frac{Y_N}{\sqrt{N}}$$

aus?

Es gilt:

$$Z = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=1}^{N} X_i$$

also:

$$p_Z(z) = \langle \delta(z - Z) \rangle = \left\langle \delta \left(z - \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=1}^{N} X_i \right) \right\rangle$$

$$p_Z(z) = \int dx_1 \dots dx_N \; \delta \left(z - \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=1}^{N} X_i \right) p_X(x_1) \dots p(x_N)$$

Grenzverteilung bei großem N

$$p_Z(z) = \int dx_1 \dots dx_N \; \delta\left(z - \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=1}^{N} X_i\right) p_X(x_1) \dots p(x_N)$$

Nun benutzen wir die Definition der δ-Funktion:

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\varphi \; e^{i\varphi x}$$

und erhalten:

$$p_Z(z) = \frac{1}{2\pi} \int d\varphi \; e^{-i\varphi x} \left[\int dx e^{i\varphi x/\sqrt{N}} p_X(x)\right]^N$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int d\varphi \; e^{-i\varphi x} \underbrace{\left[\Phi_X(\varphi/\sqrt{N})\right]^N}_{\Phi_Z(\varphi)}$$

Jetzt benutzen wir die Taylorserien Entwicklung der charakteristischen Funktion:

$$\Phi_X(\varphi/\sqrt{N}) \approx 1 + i\frac{\varphi}{\sqrt{N}}\langle X\rangle - \frac{1}{2}\left(\frac{\varphi}{\sqrt{N}}\right)^2 \langle X^2\rangle + \mathcal{O}\left(\frac{1}{N^2}\right)$$

Grenzverteilung bei großem N

Alle ungeraden Momente verschwinden wegen der Symmetrie und somit erhalten wir mit der Taylorserie:

$$\left[\Phi_X(\varphi/\sqrt{N})\right]^N \approx \left[1 - \frac{1}{2}\left(\frac{\varphi}{\sqrt{N}}\right)^2 \langle X^2 \rangle + \mathcal{O}\left(\frac{1}{N^2}\right)\right]^N$$

$$\approx \left[1 - \frac{1}{2}\frac{\varphi^2}{N}\sigma^2 + \mathcal{O}\left(\frac{1}{N^2}\right)\right]^N$$

$$\lim_{N\to\infty}\left(1 + \frac{x}{N}\right)^N = e^x$$

für $N \to \infty$

$$= e^{-\varphi^2\sigma^2/2} = \Phi_Z(\varphi)$$

$$p(z) = \frac{1}{2\pi}\int d\varphi \; e^{-i\varphi x}\Phi_Z(\varphi)$$

Normalverteilung als Grenzverteilung bei großem N

Aus

$$p(z) = \frac{1}{2\pi} \int d\varphi \; e^{-i\varphi x} \Phi_Z(\varphi)$$

erhalten wir:

$$\boxed{p(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-z^2/2\sigma^2}}$$

Normalverteilung

Für eine beliebige Verteilung $p_X(x)$ der einzelnen Summanden X_i, folgt die Summe geteilt durch $\sqrt{N}$, für große N, einer Normal-verteilung mit der Standardabweichung σ.

Einschränkung!

Gesetz der großen Zahlen gilt nur für Verteilungen *p(x)* mit endlichen zweiten Moment!

Es gibt aber Ausnahmen, z.B. sogenannte „Power-law“-Verteilungen:

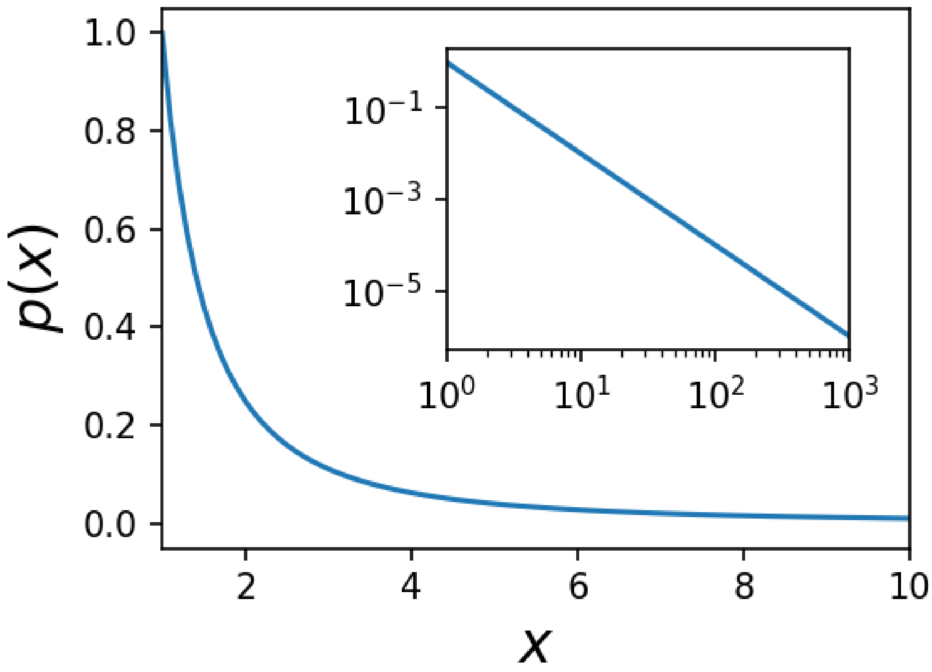
$$p(x) = \frac{\alpha - 1}{x_{\min}} \left(\frac{x}{x_{\min}} \right)^{\alpha} \qquad \text{für } x \in [x_{\min}, \infty] \text{ und } \alpha > 1$$

Für die Momente gilt:

$$\langle X^n \rangle = \int_{x_{\min}}^{\infty} dx\ x^n p(x)$$

$$= \frac{\alpha - 1}{x_{\min}^{\alpha - 1}} \int_{x_{\min}}^{\infty} dx\ x^{-\alpha + n}$$

$$= x_{\min}^n \left(\frac{\alpha - 1}{\alpha - 1 - n} \right)$$



$\Rightarrow$ für $1 < \alpha < 3$ existiert kein $\langle X^2 \rangle$