

Kurzfassung der Ableitung der Gauss Verteilung

Random Walk, Gauß Verteilung und die Einstein - Smoluchowski Beziehung -

Vom Würfeln zur Gaußverteilung

Advanced

In diesem Modul werden wesentliche statistische Funktionen unmittelbar vom Würfeln abgeleitet - und zwar *in Kurzform*, ohne ausführliche Herleitung der Formeln.

- Die ausführliche Herleitung mit einer eingehenden Diskussion aller Herleitungen, Tricks und Fallstricke, findet sich in einem [anderen Modul](#).
- Aus Gründen der Schreibökonomie (und der besseren Lesbarkeit) wird hier auf die *Kursiv*schreibung der Variablen verzichtet.

Wir betrachten die Wahrscheinlichkeit $w_N(x)$, mit N Würfeln, die alle binär sind, d. h. nur $+1$ oder -1 als Augenzahl haben, mit einem Wurf eine Summe x zwischen $-N$ und $+N$ zu würfeln. Die Definition dieser Wahrscheinlichkeit ist

- $w_N(x) = (\text{Zahl der Möglichkeiten } x \text{ zu würfeln}) / (\text{Zahl aller Möglichkeiten in einem Wurf}) = P_x / P_N$.
- Nach relativ länglichen Überlegungen bei denen man sich [mit Leichtigkeit vertut](#), erhält man

$$w_N(x) = \frac{N!}{2^N \cdot \{1/2 \cdot (x + N)\}! \cdot \{1/2 \cdot (N - x)\}!}$$

- Diese Formel liefert, und das ist wichtig, nur Antworten falls N und x beide geradzahlig *oder* beide ungeradzahlig sind.

Mit der Langversion der [Stirlingschen Formel](#) für Fakultäten

$$\ln N! \approx (N + 1/2) \ln N - N + \ln(2\pi)^{1/2}$$

- [erhält man](#) als Antwort (und als Näherung) die **Gaußsche Normalverteilung**

$$w_N(x) \approx \left(\frac{1}{2N\pi} \right)^{1/2} \cdot \exp - \frac{x^2}{2N}$$

Dabei hat sich aber eine subtile qualitative Änderung eingeschlichen:

- In der ursprünglichen Frage waren nur *ganzzahlige positive* N und ganzzahlige x zugelassen (es gibt keine $N = -3,7$ Würfel, und man kann auch nicht $x = 2,8$ würfeln); alle möglichen Antworten $w_N(x)$ waren unmittelbare **absolute Wahrscheinlichkeiten** (d.h. eine Zahl zwischen 0 und 1).
- Das $w_N(x)$ in der Gaußsche Normalverteilung ist aber auch für *beliebige* N und x eine wohldefinierte Funktion!
- $w_N(x)$ ist damit keine *absolute* Wahrscheinlichkeit mehr, sondern eine **Wahrscheinlichkeitsdichte** (und deswegen jetzt kleingeschrieben).

Die absolute Wahrscheinlichkeit für das Auftreten eines Ereignisses, erhält man indem man $w_N(x)$ über das betrachtete Intervall integriert. Für $w_N(x = 7)$ erhält man zum Beispiel

$$w_N(x = 7) \approx \int_{6,5}^{7,5} \left(\frac{1}{2N\pi} \right)^{1/2} \cdot \exp - \frac{x^2}{2N} dx$$

- Für kleine Intervalle Δx , in denen sich $w_N(x)$ nicht nennenswert ändert, gilt dann für die *absolute* Wahrscheinlichkeit $W_N(x)$ des Auftretens des gesuchten Ereignisses

$$W_N(x) = w(x) \cdot \Delta x$$

Die Gaussverteilung liefert im übrigen auch Werte für beliebige Kombination für N und x , z.B. N geradzahlig und x ungeradzahlig - was die Ausgangsformel nicht tut.

Das muß bei der Herleitung gebührend berücksichtigt werden.

Der Bezug vom Würfeln zur *ein*dimensionalen Diffusion ist einfach:

Für $+1$ rücken wir a cm nach rechts, für -1 , a cm nach links. a ist die Schrittweite, und wir müssen in den obigen Formel nur x durch $x-a$ ersetzen um sofort die Lösung des *ein*dimensionalen Diffusionsproblems zu haben

Zwei- und *drei*dimensionale Diffusion erhält man durch Kombination, da die Bewegung auf jeder Achse unabhängig von den anderen ist. Wir haben

- *Zwei*dimensional: $w_N(x, y) = w_N(x) \cdot w_N(y)$
- *Drei*dimensional: $w_N(x, y, z) = w_N(x) \cdot w_N(y) \cdot w_N(z)$

Die ausgeschriebenen Gaußverteilungen finden sich im Link

Wir sind nun in der Lage einige Fragen zu stellen und zu beantworten

Gaußverteilung und Diffusionsparameter

Erste Frage: Was ist der Mittelwert $\langle r \rangle$ aller *Abstände* $\underline{r} = (x, y, z)$ die wir (bei punktförmiger Quelle) nach N Schritten finden?

Das heißt wir fragen nach dem *Mittelwert der Vektoren*, die den Startpunkt $(= (0, 0, 0))$ mit dem Endpunkt (x, y, z) verbinden, wenn wir ein "Würfel diffusionsexperiment" genügend oft wiederholen um einen sinnvollen Mittelwert definieren zu können.

Die Antwort ist einfach:

$$\langle \underline{r} \rangle = \mathbf{0},$$

denn für jeden beliebigen Vektor \underline{r} der irgendwo endet werden wir mit gleicher Wahrscheinlichkeit auch den entgegengesetzten Vektor $-\underline{r}$ finden - die *Summe aller Vektoren* wird damit $= \mathbf{0}$.

Zweite Frage: Was ist der Mittelwert $\langle |\underline{r}| \rangle$ der *Beträge* aller Abstandsvektoren, die wir nach genügend viel Versuchen finden. Diesen Mittelwert nennen wir die *Diffusionslänge* L . Ein feiner, aber *essentieller* Unterschied zur ersten Frage.

Die Frage ist gleichbedeutend zu der Frage nach dem *mittleren Verschiebungsquadrat*

$$\langle r^2 \rangle = \langle |\underline{r}|^2 \rangle = \langle r^2 \rangle = L^2,$$

da wir aus diesem Ergebnis nur die (positive) Wurzel ziehen müssen um unsere Frage zu beantworten

Die Antwort folgt aus den Gaußverteilungen für die diversen Dimensionen; wir haben Integrale der Form

$$\langle r^2 \rangle = L^2 = \int_0^\infty \left(\frac{1}{2\pi N} \right)^{1/2} \cdot \exp - \frac{x^2}{2N} dV$$

zu lösen; dV ist dabei das betrachtete *Volumenelement*.

Dieses Volumenelement hat es in sich. Da wir für den Betrag des Vektors \underline{r} immer schreiben können $\underline{r} = (x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}$, werden die Volumenelemente

- *Ein*dimensional: $dV = dr = 2dx$ - der Abstand nach links *und* nach rechts.
- *Zwei*dimensional: $dV = 2\pi r \cdot dr$ - das Kreissegment der Dicke dr im Abstand r .
- *Drei*dimensional: $dV = 4\pi r^2 \cdot dr$ - die "Zwiebelschale" der Dicke dr im Abstand r .

Multipliziert man die *Wahrscheinlichkeitsdichte* $w_N(x)$ mit diesen Volumenelementen, erhält man eine neue *radiale Wahrscheinlichkeitsdichte* $W'(r)$, die nur noch $|\underline{r}| = r$ als Variable hat, über $w_N(x, y, z) \cdot dV = W'(r) \cdot dr$

Die Integrale werden etwas anstrengend, das Ergebnis aber ist einfach:

- *Ein*dimensional: $L = a \cdot (N)^{1/2}$
- *Zwei*dimensional: $L = a \cdot (2N)^{1/2}$
- *Drei*dimensional: $L = a \cdot (3N)^{1/2}$

▶ **Dritte Frage:** Was ist der *wahrscheinlichste* Wert $|r|_{\text{wahr}}$ den wir nach genügend viel Versuchen finden werden - in welchem Abstand $|r|_{\text{wahr}}$ finden wir die meisten Teilchen? Das ist die Frage nach dem *Maximum* der radialen Wahrscheinlichkeitsdichte (und eine ganz andere Frage als die Frage nach dem Mittelwert).

- Wir müssen dazu das Maximum der radialen Wahrscheinlichkeitsdichte $W'(r)$ bestimmen, d.h. die Gleichung $dW'(r)/dr = 0$ lösen.
- Das Ergebnis ist
 - *Eindimensional:* $|r|_{\text{wahr}} = 0$
 - *Zweidimensional:* $|r|_{\text{wahr}} = a \cdot (N)^{1/2}$
 - *Dreidimensional:* $|r|_{\text{wahr}} = a \cdot (2N)^{1/2}$

▶ Man sollte also L und $|r|_{\text{wahr}}$ bei eindimensionaler Diffusion nicht verwechseln, während es bei dreidimensionaler Diffusion fast egal ist.

Diffusionskoeffizient und Random Walk

▶ Die Betrachtung des Random walks als Diffusionsproblem führt auf eine Konzentrationsverteilung der diffundierenden Teilchen als Funktion der Schrittzahl N und Schrittweite a für den Fall einer in einen homogenen Körper eingeschlossenen Punktquelle.

- Diese Konzentrationsverteilung muß identisch sein zu der Konzentrationsverteilung die sich aus der entsprechenden Lösung der Fickschen Gesetze ergibt. Der Vergleich führt sofort auf
 - *Eindimensional:* $D = L^2/2t$
 - *Zweidimensional:* $D = L^2/4t$
 - *Dreidimensional:* $D = L^2/6t$
- Vorausgesetzt, der Diffusionskoeffizient D ist ein Skalar, und nicht wie im allgemeinsten Fall, ein *Tensor 2 Stufe*.

▶ Hier kann eine kleine Konfusion auftreten: Die obigen Gleichungen gelten völlig losgelöst von den Hüpfmechanismen - wir setzen nur isotropes Verhalten voraus, aber nicht wie viele Möglichkeiten eine Leerstelle tatsächlich hat, um von ihrer Position aus auf eine Nachbarposition zu springen.

- Aber aus so einer Betrachtung heraus haben wir auch schon, und ganz unabhängig von Random walk Betrachtungen, den Diffusionskoeffizienten abgeleitet - in [Kapitel 6.2.3](#). Ist hier etwas überbestimmt?
- *Nein* - nicht solange die Hüpferei isotrop erfolgt. Und fall sie das *nicht* tut - z.B. in nicht-kubischen Kristallen, ist D kein Skalar mehr und die Kristallgeometrie gibt die Vorgabe für die differenzierte Betrachtung