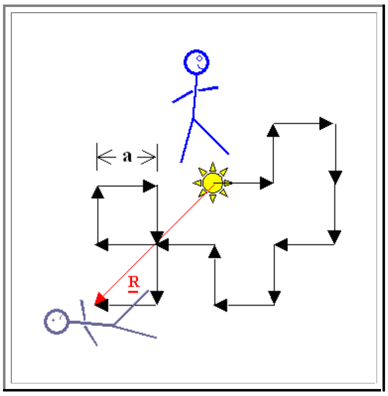
6.3 Random Walk

6.3.1 Prinzip und Grundformel

Die Fragestellung

Ein paradigmatischer Volltrunkener kommt aus einer Kneipe und torkelt durch die Gegend. Jeder Schritt führt mit gleicher Wahrscheinlickeit nach vorne oder hinten, nach rechts oder links. In welchem *mittleren Abstand* $<|\underline{r}|>$ von der Kneipe finden wir die hilflose Person nach ***N*** Schritten der (immer gleichen) Schrittlänge ***a***?

- Die Art der Fragestellung ist sehr wichtig. Wir können mehrere Fragen stellen, zum Beispiel:
  - In welchem *mittleren Abstand* $<|\underline{r}|> = <(x^2 + y^2)^{1/2}>$ finden wir die hilflose Person? (die Frage von oben)
  - *Wo*, d.h bei welchem *Ort* $\underline{r} = (x, y)$ finden wir die hilflose Person?
  - Bei welchem Abstand $|\underline{r}|_{wahr}$ ist es am *wahrscheinlichsten*, den Trunkenbold zu finden? [1)]



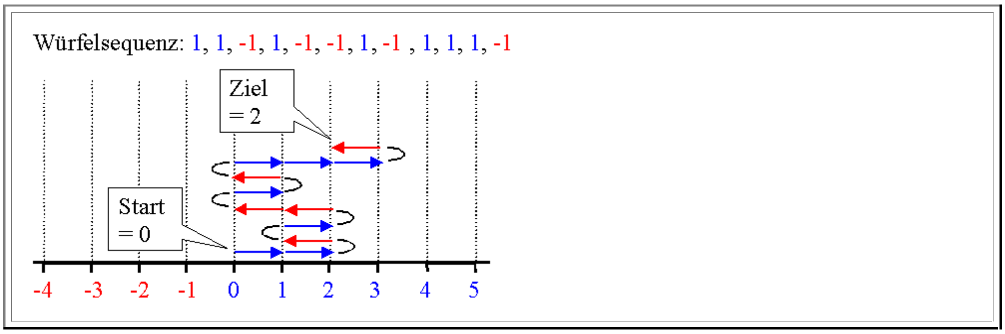
- Die Antworten auf diese drei Fragen können sehr verschieden ausfallen; mehr dazu im mehreren "advanced" Modulen.
- Wir interessieren uns hier primär für den *mittleren Abstand*. Offenbar hängt er von der Gesamtzahl der Schritte ab (im Bild sind es **16**).

In dem obigen Beispiel betrachten wir einen speziellen Fall des sogenannten **Random Walk**: *Zwei* Dimensionen, *feste* Schrittweite, *4 feste* Winkel. Auf deutsch heißt "*Random Walk*" "statistische Wanderung" oder **Zufallsbewegung**- aber nur der englische Ausdruck ist wirklich geläufig.

- Wir werden die noch zu findende Beziehung zwischen dem mittleren Abstand und der Zahl der Schritte noch öfters brauchen, es lohnt sich also etwas Zeit darauf zu verwenden. Da das Ergebnis aber recht einfach ist, wollen wir hier nur die *Andeutung* einer sauberen Ableitung geben, eine genaue (und unerwartet komplexe) Ausführung findet sich in einem Link.

Betrachten wir zunächst den allereinfachsten Fall der *ein*dimensionalen Zufallsbewegung. Unser Teilchen hat dann nur die Möglichkeit, einen Schritt nach links oder nach rechts auszuführen.

- Wir können ein einfaches Experiment durchführen, indem wir eine Münze werfen, und unser Teilchen bei "Zahl" nach rechts, bei "Kopf" nach links um eine Einheit (unsere Gitterkonstante) bewegen. Das sieht dann beispielsweise so aus:



- Das läßt sich auch relativ leicht simulieren, ein entsprechendes "Experiment" (bei dem der Computer per Zufallsgenerator würfelt) ist in einem Link dargestellt. Es lohnt sich, ein bißchen zu spielen.

Link
zum "Random Walk" Simulator

- Spielt man ein bißchen mit dem Simulator, oder wirft selbst eine Münze, fällt schnell auf, daß ein Teilchen nach einigen Würfen in der Regel nicht mehr beim Ausgangspunkt ist, obwohl die Wahrscheinlichkeiten für Schritte nach rechts oder nach links genau gleich groß sind.
  - Das kann man etwas genauer betrachten. Nehmen wir nicht eine Münze, sondern einen (fiktiven) Würfel mit nur zwei Zahlen **– 1** und **+ 1**, brauchen wir nur die Summe der Augen nach ***N*** Würfen zu betrachten. Ist sie **0**, dann ist das Teilchen wieder am Ausgangsort, ist sie beispielsweise **+ 5** oder **– 8**, dann ist das Teilchen **5** Schrittlängen nach rechts oder **8** Schrittlängen nach links gewandert. Ist die Summe **+*N*** oder **–*N***, ist der jeweilige Maximalwert erreicht; ein ziemlich *unwahrscheinliches* Ereignis.
  - Wir können offenkundig dasselbe Ergebnis erhalten, wenn wir nicht mit *einem* digitalen Würfel (Augenzahlen sind **+ 1** und **– 1**) ***N*** mal würfeln, sondern ***N*** digitale Würfel *gleichzeitig* werfen. Auch dann ist nur die Summe der Augenzahlen entscheidend für die Endposition.
- Die Wahrscheinlichkeit $\boldsymbol{w_N(x)}$, mit ***N*** Würfeln, die alle digital sind, d. h. nur **+ 1** oder **– 1** als Augenzahl haben, mit *einem* Wurf eine Summe ***x*** zwischen **– *N*** und **+ *N*** zu würfeln, ist dann in Prosa leicht zu definieren;
  - **$w_N(x)$ = (Zahl der Möglichkeiten *x* zu würfeln)/(Zahl aller möglichen Wurfergebnisse)**.
  - Das erinnert uns an die Definition der Entropie.
- Offensichtlich läßt sich unsere Eingangsfrage in ein Würfelspiel "übersetzen", und dann mit den Regeln der Kombinatorik und Wahrscheinlichkeitsrechnung beantworten. Wie angekündigt, wollen wir hier aber nicht weiter die mathematische Ableitung der Formel für $\boldsymbol{w_N(x)}$ verfolgen; das wird im Link getan.
  - Anmerken kann man aber, daß in der sauberen Ableitung der gesuchten Formel die **Gauss-Verteilung** auftaucht; und daß die korrekte Ableitung trotz der einfachen Ausgangsfragestellung zahlreiche Tücken hat (in allen Auflagen des "**Atkins**", der als eines der wenigen Bücher dies überhaupt tut, sind z.B. Fehler; siehe obigen Link).
  - Wir wollen deshalb zur Ableitung des *mittleren Abstands* zwischen Start und Ziel nach ***N*** Schritten mit der Schrittweite ***a*** in der *ein*dimensionalen Diffusion eine der trickreichen Schnellableitungen benutzen, die Richard **Feynman** für viele Formeln in seinen "Lectures" gegeben hat.

Schnellableitung des Ergebnisses

- Wir bezeichnen den Abstand zwischen Startpunkt und der jeweiligen Position mit dem (*ein*dimensionalen) Vektor $\underline{\boldsymbol{R}}$. Ein einzelner Schritt sei durch einen *ein*dimensionalen) Vektor $\underline{\boldsymbol{a}}$ gegeben; für *eindimensionalen* random walk in einem Gitter hätte $\underline{\boldsymbol{a}}$ dann nur die Werte **±|a|**.
  - Die Schlüsselfrage ist: Wie groß ist der *Betrag* von $\underline{\boldsymbol{R}} = |\underline{\boldsymbol{R}}| = \boldsymbol{R}$ nach ***N*** Schritten?
  - Gleichbedeutend und einfacher ausrechenbar ist die Frage nach dem *mittleren Abstandsquadrat*, $\langle \underline{\boldsymbol{R}}^2 \rangle$, das nach ***N*** Schritten vorliegt, da gilt

$$|\underline{R}| = +\{\langle R^2 \rangle\}^{1/2}$$

  - Dazu betrachten wir die Lage zu irgendeinem Zeitpunkt, z.B. nach ***N* – 1** Schritten; der Abstand ist dann $\underline{\boldsymbol{R}}_{N-1}$.
  - Der *nächste* Schritt wird den Vektor $\underline{\boldsymbol{a}}$ addieren; wir landen bei

$$\underline{R}_N = \underline{R}_{N-1} + \underline{a}$$

  - Wir bilden nun $\underline{\boldsymbol{R}}_N^2$:

$$\underline{R}_N^2 = |\underline{R}_N|^2 = \left(\underline{R}_{N-1} + \underline{a}\right)^2 = (R^2_{N-1}) + 2 \cdot \underline{a} \cdot \underline{R}_{N-1} + \underline{a}^2$$

  - Davon wollen wir den *Mittelwert*, d.h. wir müssen über viele $\boldsymbol{R}_N^2$ mitteln. Da dabei $\underline{\boldsymbol{a}}$ richtungsmäßig alle möglichen Werte haben kann; wird $+\underline{\boldsymbol{a}}$ genauso häufig vorkommen wie $-\underline{\boldsymbol{a}}$; der *Mittelwert* des gemischten Produktes ist .

$$\langle 2 \cdot \underline{a}\, \underline{R}_{N-1} \rangle = 0$$

- Damit haben wir für $\langle \boldsymbol{R}_N^2 \rangle$

$$\langle R^2_N \rangle = \langle R^2_{N-1} \rangle + a^2$$

- Das ist eine etwas ungewöhnlich Definition einer Funktion $<R_N^2>$ mit der diskreten Variablen N, nämlich eine *rekursiv* definierte Funktion. Wie löst man so eine Gleichung? Per *Induktion*: Schluß von n auf $n + 1$.
- Wir erhalten für die gesuchte Formel des *ein*dimensionalen "random walks":

$$< R_N^2> = N \cdot a^2$$

Wer's nicht glaubt, beweist das ganze mit vollständiger Induktion.

- Mit $N = 1$ anfangen; das Ergebnis für $N = 2$ verwenden, dann Schluß von N auf $N + 1$

Random walk in *drei* Dimensionen ergibt nichts grundsätzlich neues. Da die drei Richtungen unabhängig voneinander sind, wird unser besoffener *Vogel* (der Volltrunkene von oben schafft nur *zwei* Dimensionen) auf *jeder* Achse $i = x, y, z$ sich um

$$<R^2_{i,\,N}\ (\text{3-dim})> \;=\; N \cdot a^2$$

entfernt haben.

Das **mittlere Abstandsquadrat** - so heißt es ab jetzt immer - im *dreidimensionalen* ist damit .

$$<R^2_N\ (\text{3-dim})> \;=\; <R^2_{x,\,N}> + <R^2_{y,\,N}> + <R^2_{z,\,N}> \;=\; 3 \cdot N \cdot a^2$$

- Oft ist man aber bei der Behandlung derartiger Probleme "großzügig" und läßt den Faktor **3** unter den Tisch fallen - man bewegt sich sowieso fast immer im Bereich mehr oder weniger heftiger Näherungen.

Dieses simple Gesetz ist eine der *wichtigsten Formeln bei Diffusionsvorgängen*; wir werden es noch oft brauchen!

- Die Formel besagt, daß das mittlere Abstandsquadrat bei einem beliebigen Random Walk (wir haben *keine* Einschränkungen für $\underline{R}$ und $\underline{a}$ gemacht) proportional zur *Zahl der Sprünge* (und damit zur Zeit) und zum *Quadrat der (mittleren) Sprungweite* ist.
- Selbst im superallgemeinsten Fall, in dem $\underline{R}$ und $\underline{a}$ nicht mehr konstant sein müssen, gilt die Formel noch, falls wir die Mittelwerte dieser Größen nehmen

Die Verknüpfung zur echten Diffusion von Teilchen ist nun einfach, denn:

- Wir kennen die *Zahl* N der Sprünge, d.h. die *Sprungrate* r *mal Zeit* t, auch aus der Betrachtung der Leerstellenhüpferei: *Ein*dimensional und in *kubischen* Kristallen galt

$$D \;=\; \frac{r \cdot a_0^2}{6}$$

$$\Rightarrow \qquad r \;=\; \frac{6 \cdot D}{a_0^2}$$

- Dabei war a_0 die Gitterkonstante und D der Diffusionskoeffizient.
- Damit erhalten wir

$$N \;=\; r \cdot t \;=\; \frac{6 \cdot D \cdot t}{a^2}$$

$$<R_N^2> \;=\; N \cdot a^2 \;=\; \frac{6 \cdot D \cdot t \cdot a^2}{a_0^2}$$

Ziehen wir die Wurzel aus $<R_N^2>$ (und das ist *nicht* dasselbe wie die Wurzel aus R_N^2!), erhalten wir den die *mittlere* Entfernung vom Startpunkt, die wir die **Diffusionslänge** L nennen wollen. Es gilt:

$$L = \left(\langle R_N{}^2 \rangle\right)^{1/2} = \frac{a}{a_0} \cdot \left(6 \cdot D \cdot t\right)^{1/2}$$

- Für beliebige Kristalle erhalten wir mit dem Geometriefaktor ***g*** statt dem 1/6

$$L = \; = \frac{a}{a_0 \cdot g} \cdot \left(D \cdot t\right)^{1/2}$$

- Falls wir Atome mit einer Sprungweite von $|a| \approx a_0$, Kristalle mit $g = 1$, *und* das ganze *noch drei*dimensional betrachten, erhalten wir schließlich die sehr wichtige Endformel

$$L \approx (D \cdot t)^{1/2}$$

- Das **"≈"** berücksichtigt, daß die exakte Berücksichtigung der (gitterabhängigen) Sprungweite und der Dreidimensionalität den Vorfaktor i.a. dicht an **1** rückt.

Wir haben, allgemein gesprochen, eine Fornel erhalten, die uns das Ergebnis eines statistischen Prozesses an die Zeitdauer koppelt, für die der Prozess läuft.

- Das gilt für *jeden* solchen Vorgang, also auch für alle Diffusionsphämomene. Ob Leerstellen in einem Kristall wandern, Tintenmoleküle in Wasser, Elektronen in Halbleiter, oder was auch immer; solange sie es mit "Random Walk" tun, gelten die obigen Beziehungen.

Am Rande sei noch bemerkt, dass wir das Ergebnis natürlich auch über die Fickschen Gleichungen (plus atomare Deutung des Diffusionskoeffizienten) erhalten können:

- Wir lösen ein passendes Diffusionsproblem (es wird uns eine Gaussverteilung geben) und errechnen aus der Lösung den mittleren Abstand wie im Link angedeutet. Das ist aber nicht so allgemein wie die Betrachtung hier - und mathmatisch ziemlich anspruchsvoll.

---

1) Dass ein Mittelwert nicht gleichzeitig der wahrscheinlichste Wert sein muß, wird sofort an folgendem Beispiel klar. Im Einkaufszentrum tummeln sich **1000** Personen, von denen **990** über ein Einkommen von **€ 2.000.-** verfügen, während **10** Personen ein Einkommen von **€ 2.000.000.-** haben. Das *mittlere* Einkommen (**= € 21.980.-**) ist dann ganz bestimmt nicht das *wahrscheinlichste* Einkommen.