

Probabilistische Physik: Die Entstehung von Determinismus aus Indeterminismus

Tagebuch

Modellierungswoche 2020

Sebastian Andritsch

Mike Jesernik

Nik Kummert

Valentin Posch

Johannes Gregor Trinkaus

Florian Wedenig

Stephen Keeling

Themenvorstellung

Literatur: Skripten über

Grundlagen der Statistik

Grundlagen der Mathematik

Grundlagen der Numerik

Probabilistische Physik

Inhaltsverzeichnis I

Grundlagen

Programmieren

Wahrscheinlichkeiten

Geleebohnen im Glasgefäß

Münzwurfspiel

Würfelfwurfspiel

Teilchen Zerfallen

Stationäre Teilchen in einem Behälter

Energetische Teilchen in einem Behälter

Brownsche Bewegung

Von Quanten- bis zur klassischen Materie

Grundlagen

- ▶ Was sind die Folgenden?
Determinismus, Indeterminismus,
Zufall, Gesetzmäßigkeit,
Ursache, Wirkung,
Zustand, Wahrscheinlichkeit.
- ▶ Was ist mit “Natürliches Gesetz” gemeint?
- ▶ Was ist ein Zufallsgenerator?
- ▶ Was ist ein Experiment, in dem ein Ergebnis sich aus Zufällen ergibt, aber es ist so hoch wahrscheinlich, dass es als gewiss verkannt werden kann?
- ▶ Welches Beispiel interessiert Dich am stärksten?
Verteilung von Teilchen im Gleichgewicht?
Verteilung von diffundierenden Teilchen?
Übergang vom unscharfen bis zum scharfen Teilchen?

Grundlagen

- ▶ Determinismus ist die Auffassung, dass ausgehend von einer vollständigen Feststellung des gegenwärtigen Zustands eines Systems, alle zukünftigen und alle vorherigen Zustände des Systems laut strengen Gesetzmäßigkeiten bestimmt werden.
- ▶ Die übliche Metapher des Determinismus ist eine Uhr, die nach mechanischen Regeln läuft.



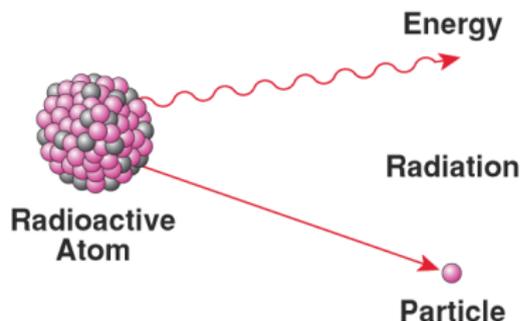
- ▶ Das Konzept des Determinismus hängt offenbar von einem Konzept des Zustands eines Systems ab.

Grundlagen

- ▶ Für eine Uhr gelten die Zahnräder und die Folge ihrer Schritte vielleicht selbstverständlich als die Zustände bzw. die Regeln des Systems.
- ▶ Jedoch führt eine nähere Betrachtung zu der Erkenntnis, wie uneindeutig diese Vorstellung ist:
 - ▶ Bestehen die Zahnräder aus Teilchen, Wellen, verknoteten Saiten oder noch etwas?
 - ▶ Was genau ist die Kette von Ursache und Wirkung, die hinter den Schritten der Zahnräder zu finden ist?
 - ▶ Was bedeuten Ursache und Wirkung, wenn die Zustände und die Gesetzmäßigkeiten unklar sind?
- ▶ Indeterminismus ist die Auffassung, dass nicht alle Zustände eines Systems aus einer vollständigen Charakterisierung des gegenwärtigen Zustands bestimmt sind.
- ▶ Das Konzept des Indeterminismus hängt mit dem Konzept eines Zufalls zusammen.

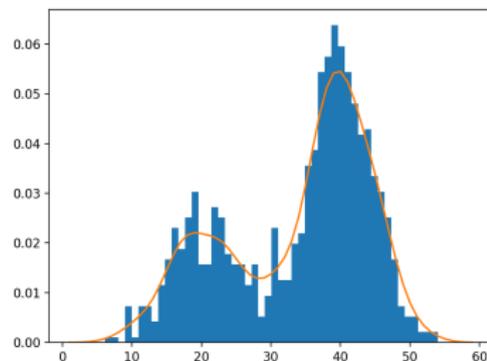
Grundlagen

- ▶ Wenn in gewissen alltäglichen Kontexten über Zufälle gesprochen wird, wird mindestens implizit auf einen Mangel an Wissen hingewiesen, als ob ein Ereignis wie z.B. eine Begegnung voraussehbar gewesen wäre, wenn ausreichend Information über Rahmenbedingungen vorgegeben worden wäre.
- ▶ Eine tiefere Vorstellung eines Zufalls beschreibt ein Ereignis, das nicht einmal im Prinzip eindeutig bestimmt werden kann, egal wie viel Information aus Perspektiven zur Verfügung steht, die in Raum und Zeit vom Ereignis getrennt sind.



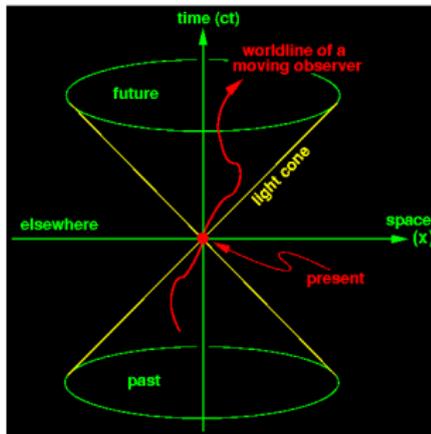
Grundlagen

- ▶ Mit der Verwendung von Wahrscheinlichkeiten wird versucht, über solche Zufälligkeiten genauer zu sprechen, aber was genau wird damit gemeint?
- ▶ In einem deterministischen Kontext wird eine Wahrscheinlichkeit als der Anteil der Rahmenbedingungen beschrieben, die zu einem Ereignis führen.
- ▶ Jedoch ist diese Vorstellung nicht sinnvoll, wenn ausgewählte Rahmenbedingungen nicht eindeutig zu einem Ereignis führen.
- ▶ Eine robustere Vorstellung basiert auf Häufigkeit, wobei die Wahrscheinlichkeit darstellt, wie oft ein Ereignis sich ergeben würde, wenn gewisse Bedingungen wiederholt gerahmt werden.



Grundlagen

- ▶ Implizit bei allen diesen Konzepten sind Vorstellungen von Raum und Zeit.
- ▶ Ausgehend von Newton gibt es eine übliche Prägung, dass Raum und Zeit mit einem Achsensystem versehen sind, wobei die räumlichen Achsen senkrecht auf einander stehen, die Zeitachse in die Zukunft zeigt und der kürzeste Weg zwischen zwei Raumzeitpunkten geradlinig ist.
- ▶ Weiters soll dieses Achsensystem gelten, unabhängig davon an welcher Stelle in Raum und Zeit es gewurzelt wird und unabhängig davon ob es Materie oder Bewegung geben sollte.



Grundlagen

- ▶ Ausgehend von Einstein gibt es eine Aktualisierung dieser Prägung, wobei das Achsensystem eine Krümmung besitzt, die anders ist an verschiedenen Stellen in Raum und Zeit, und der kürzeste Weg zwischen zwei Raumzeitpunkten ist nicht mehr geradlinig.
- ▶ Weiters gibt es laut der Relativitätstheorie kein universales Jetzt, das von allen Perspektiven in Raum und Zeit gelten kann.
- ▶ Wegen der aktuellsten Herausforderungen in der theoretischen Physik hat sich die Intuition entwickelt, dass Raum und Zeit aus grundlegenderen Aspekten der Realität entstehen.
- ▶ Minimalistisch zeitlich spricht man über eine Folge von Ereignissen, die hier hinter einander ablaufen.
- ▶ Minimalistisch räumlich spricht man über eine Trennung von Orten, die kein gemeinsames hier teilen.

Programmieren

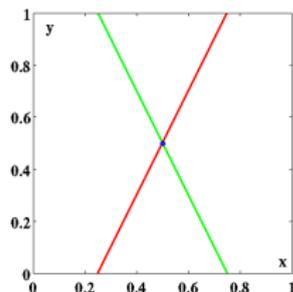
- ▶ Ein `Matlab` Code für die Grafik ist

```
n = 2;  
x = linspace(0,1,n); xP = 0.5;  
yN = (3-4*x)/2; yA = (-1+4*x)/2; yP = 0.5;  
plot(x,yN,'g',x,yA,'r',xP,yP,'bo');
```

- ▶ Die 2 Geraden sind gegeben durch

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b} \quad \begin{cases} 4x + 2y = 3 \\ -4x + 2y = -1 \end{cases}$$

$$A = \begin{bmatrix} 4 & 2 \\ -4 & 2 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} 3 \\ -1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{x} = \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}$$



- ▶ Ein `Matlab` Code zur Seite 184 Lösung dieses Gleichungssystems:

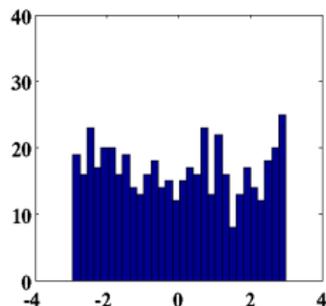
```
A = [4,2;-4,2];  
b = [3;-1];  
x = A\b;
```

Programmieren

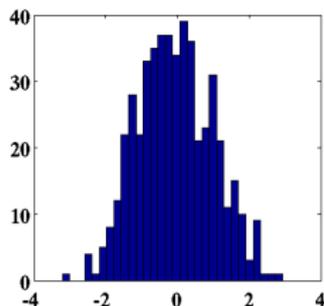
- ▶ Seien $\{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ geprobte Daten.
- ▶ Der Mittelwert μ und die Standardabweichung σ sind

$$\mu = \frac{1}{n}(x_1 + \dots + x_n) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i, \quad \sigma = \left[\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_i - \mu)^2 \right]^{\frac{1}{2}}$$

- ▶ Beispiele: gleichmäßig und normal verteilte Daten sind



$$\mu = -0.0214, \\ \sigma^2 = 3.1860$$



$$\mu = -0.0626, \\ \sigma^2 = 1.0834$$

- ▶ Histogramm: Auf der senkrechten Achse ist die Anzahl der Werte $\{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ in einem Bin mit Randwerten auf der waagerechten Achse.

Programmieren

- ▶ MATLAB Code für diese Grafiken:

```
n = 501;
x = rand(1,n);      % gleichmaessig in [0,1]
x = 6*(x-0.5);     % gleichmaessig in [-3,3]}
disp(['Mittelwert=', num2str(mean(x))])
disp(['Standardabweichung=', num2str(std(x))])
subplot(1,2,1);
histogram(x,30);   % x-Histogramm mit 30 bins
axis([-4 4 0 40]);
y = randn(1,n);    % Gauss (normal)
disp(['Mittelwert=', num2str(mean(y))])
disp(['Standardabweichung=', num2str(std(y))])
subplot(1,2,2);
histogram(y,30);   % y-Histogramm mit 30 bins
axis([-4 4 0 40]);
```

- ▶ Was sind z.B. `rand(2,3)` und `randn(4,3)` ?
- ▶ Wie ändert man μ und σ ?

Programmieren

► Skalierung von Gauss Verteilung

```
n = 501;
x = randn(1,n); % Gauss, mu=1, sigma=1
x = 0.5*(x - 3); % Skalierung, mu=3, sigma=0.5
disp(['Mittelwert=', num2str(mean(x))])
disp(['Standardabweichung=', num2str(std(x))])
subplot(1,2,1);
histogram(x,30); % x-Histogramm mit 30 bins
axis([-4 4 0 100]);
y = (x-mean(x))/std(x); % Normalisierung von x
disp(['Mittelwert=', num2str(mean(y))])
disp(['Standardabweichung=', num2str(std(y))])
subplot(1,2,2);
histogram(y,30); % y-Histogramm mit 30 bins
axis([-4 4 0 100]);
```

► Wie ist y bei einer anderen Skalierung für x ? z.B.

```
x = randn(1,n); x = 0.1*(x + 2);
```

Programmieren

- ▶ Schleifen:

```
n = 101;  
x = 0;  
for i=1:n  
    x = x + randi(10);  
end  
x = x/n;  
y = sum(randi(10,1,n))/n;  
z = mean(randi(10,1,n));
```

- ▶ Was sind z.B.

`randi(10)`, `randi(6,2,3)` und `randi(2,4,3)`?

- ▶ Was ist der Unterschied zwischen `x`, `y` und `z`?

- ▶ Was ist der Einfluss von `n` auf den Unterschieden zwischen `x`, `y` und `z`?

Wahrscheinlichkeiten

- ▶ Siehe das [Statistik Skriptum](#).
- ▶ Was sind die Folgenden?
Kombination, Variation, Permutation, Zahlprinzip.
- ▶ Was ist Wahrscheinlichkeit überhaupt?
- ▶ Was ist eine Zufallsvariable?
ihr Erwartungswert? ihre Varianz?
- ▶ Was sind Unabhängigkeit und Korrelation? Wann sind Zufallsvariablen unkorreliert aber nicht unabhängig?
- ▶ Was sind die Bernoullische, Binomiale, Multinomiale, gleichmäßige und Gaußsche oder normale Verteilungen?
- ▶ Was ist der Zentrale Grenzwertsatz (ZGS)? Was ist ein Beispiel der Anwendung dieses Satzes?
- ▶ Siehe das [Video](#). Was ist die Differenz zwischen dem Mittelwert der Schätzungen und der Anzahl der Geleebohnen, wenn die Anzahl der Schätzungen unendlich groß wird?

Wahrscheinlichkeiten

- ▶ Für ein Münzwurfspiel sei X die Zufallsvariable,

$$X(K) = \text{€}0, \quad X(Z) = \text{€}1$$

mit

$$P(X = \text{€}0) = \frac{1}{2}, \quad P(X = \text{€}1) = \frac{1}{2}.$$

- ▶ Der Erwartungswert ist

$$\mu_X = \mathbb{E}(X) = P(X = \text{€}0)\text{€}0 + P(X = \text{€}1)\text{€}1 = \text{€}0.50$$

und die Varianz ist

$$\begin{aligned} \sigma_X^2 = \mathbb{V}(X) = \mathbb{E}((X - \mu_X)^2) &= P(X = \text{€}0)(\text{€}0 - \text{€}0.5)^2 \\ &+ P(X = \text{€}1)(\text{€}1 - \text{€}0.5)^2 = \text{€}0.25 \end{aligned}$$

- ▶ Für das zweimal Spielen seien X_1 und X_2 die Zufallsvariablen für das 1. Spiel bzw. das 2. Spiel.
- ▶ Diese seien gleich verteilt wie X ,

$$\begin{aligned} P(X_1 = \text{€}0) &= P(X_2 = \text{€}0) = P(X = \text{€}0) = \frac{1}{2} \\ P(X_1 = \text{€}1) &= P(X_2 = \text{€}1) = P(X = \text{€}1) = \frac{1}{2} \end{aligned}$$

Wahrscheinlichkeiten

mit

$$\begin{aligned}\mu_{X_1} &= \mu_{X_2} = \mu_X = \text{€}0.50 \\ \sigma_{X_1}^2 &= \sigma_{X_2}^2 = \sigma_X^2 = \text{€}0.25\end{aligned}$$

- ▶ Weiters seien sie von einander unabhängig,

$$P(X_1 = n \ \& \ X_2 = m) = P(X_1 = n) \cdot P(X_2 = m), \quad n, m \in \{\text{€}0, \text{€}1\}$$

- ▶ Deswegen gelten für $Y^{(2)} = X_1 + X_2$, (Siehe [Rechenregeln](#))

$$\begin{aligned}\mathbb{E}(Y^{(2)}) &= \mathbb{E}(X_1) + \mathbb{E}(X_2) = 2\mu_X \\ \mathbb{V}(Y^{(2)}) &= \mathbb{V}(X_1) + \mathbb{V}(X_2) = 2\sigma_X^2\end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned}\mathbb{E}(Y^{(2)}/2) &= \mathbb{E}(X_1/2) + \mathbb{E}(X_2/2) = \mu_X/2 + \mu_X/2 = \mu_X \\ \mathbb{V}(Y^{(2)}/2) &= \mathbb{V}(X_1/2) + \mathbb{V}(X_2/2) = \sigma_X^2/4 + \sigma_X^2/4 = \sigma_X^2/2.\end{aligned}$$

- ▶ Weiters gelten (Siehe [Rechenregeln](#))

$$\begin{aligned}\mathbb{E}\left(\frac{Y^{(2)}/2 - \mu_{Y^{(2)}}}{\sigma_{Y^{(2)}}}\right) &= \mathbb{E}\left(\frac{Y^{(2)}/2}{\sigma_{Y^{(2)}}}\right) - \mathbb{E}\left(\frac{\mu_{Y^{(2)}}}{\sigma_{Y^{(2)}}}\right) = \frac{\mu_X}{\sigma_X/\sqrt{2}} - \frac{\mu_X}{\sigma_X/\sqrt{2}} = 0 \\ \mathbb{V}\left(\frac{Y^{(2)}/2 - \mu_{Y^{(2)}}}{\sigma_{Y^{(2)}}}\right) &= \frac{1}{\sigma_{Y^{(2)}}^2} \mathbb{V}(Y^{(2)}/2) = \frac{\sigma_X^2/2}{\sigma_X^2/2} = 1.\end{aligned}$$

Geleebohnen im Glasgefäß

- ▶ Siehe das [Video](#).
- ▶ Sei X eine Zufallsvariable für eine beliebige Schätzung der Anzahl der Geleebohnen.
- ▶ Für eine beliebige Person in einer Menge Ω sei

$$X : \Omega \rightarrow (0, \infty).$$

- ▶ Ω und $M = (0, \infty)$ heißen Ergebnisraum bzw. Messraum.
- ▶ Sei $\mu_X = 4510$, d.h. der Erwartungswert ist die tatsächliche Anzahl der Geleebohnen im Glasgefäß. **Muss es so sein?**
- ▶ Sei σ_X^2 die Varianz von X mit $\sigma_X > 0$. (Voraussetzung, ZGS)
- ▶ Es gelten $|\mu_X|, \sigma_X < \infty$. (Voraussetzungen, ZGS)
- ▶ Seien $\{X_1, X_2, \dots\}$ unabhängige Zufallsproben, alle gleich verteilt wie X . (Voraussetzungen, ZGS)
- ▶ Die Zufallsvariable $Y^{(n)} = X_1 + X_2 + \dots + X_n$ erfüllt:

$$\mu_{Y^{(n)}} = n\mu_X, \quad \sigma_{Y^{(n)}}^2 = n\sigma_X^2.$$

Warum?



Geleebohnen im Glasgefäß

- Die Zufallsvariable

$$Z_n = \frac{Y^{(n)}/n - \mu_X}{\sigma_X/\sqrt{n}}$$

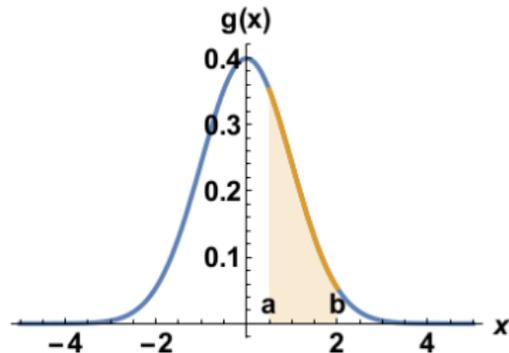
erfüllt:

Warum?

$$\mu_{Z_n} = 0, \quad \sigma_{Z_n}^2 = 1.$$

- Die Zufallsvariable $Z \sim N(0, 1)$ sei normal verteilt mit

$$\mu_Z = 0, \quad \sigma_Z^2 = 1.$$



$$P(Z \in [a, b]) = \int_a^b g(x) dx$$

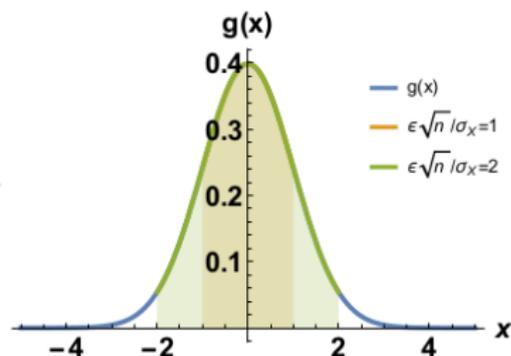
$$g(x) = e^{-x^2/2} / \sqrt{2\pi}$$

Seite 89

- Laut dem **Zentralen Grenzwertsatz** (ZGS) nähert sich die Verteilung von Z_n der Verteilung von Z an, wenn $n \rightarrow \infty$.

Geleebohnen im Glasgefäß

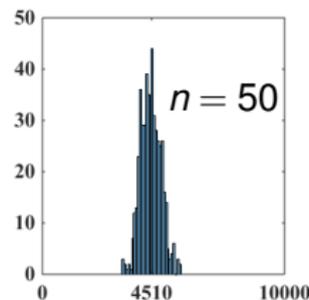
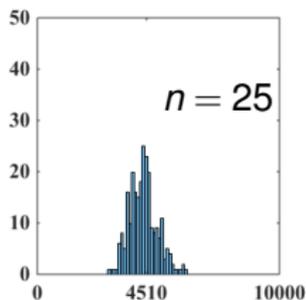
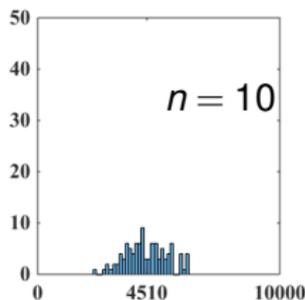
- ▶ Es folgt für jede beliebig kleine Zahl $\epsilon > 0$, (Wie?)



$$P\left(\left|\frac{Y^{(n)}}{n} - \mu_X\right| \leq \epsilon\right) = P\left(|Z_n| \leq \frac{\epsilon\sqrt{n}}{\sigma_X}\right)$$

$$\xrightarrow{n \rightarrow \infty} P\left(|Z| \leq \frac{\epsilon\sqrt{n}}{\sigma_X}\right) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 1.$$

- ▶ Für fixiertes n wird $Y^{(n)}/n$ mehrmals geprobt und alle Proben mit Histogramm dargestellt. Für $n \rightarrow \infty$ sehen diese so aus:

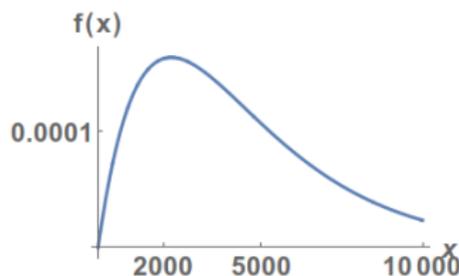


d.h. $\forall \epsilon > 0, P(|Y^{(n)}/n - \mu_X| > \epsilon) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0.$

Geleebohnen im Glasgefäß

- ▶ Sei die Zufallsvariable X modelliert mit der Wahrscheinlichkeitsdichte f ,

$$P(X \in [a, b]) = \int_a^b f(x) dx, \quad f(x) = \begin{cases} (x/a^2)e^{-x/a}, & x \geq 0 \\ 0, & x < 0 \end{cases}$$



wobei $a = 4510/2$ wegen der Seite 150 [Integrale](#),

$$\mu_X = \int_0^{\infty} xf(x) dx = 2a, \quad \sigma_X^2 = \int_0^{\infty} (x-2a)^2 f(x) dx = 2a^2.$$

- ▶ Man merkt, f wird in μ_X nicht maximiert!

Geleebohnen im Glasgefäß

- ▶ Es gilt für $Y^{(2)} = X_1 + X_2$,

$$\begin{aligned} P(a < X_1 + X_2 < b) &= \int_0^\infty P(a < x_1 + X_2 < b) f(x_1) dx_1 = \\ \int_0^\infty P(a - x_1 < X_2 < b - x_1) f(x_1) dx_1 &= \int_0^\infty \left[\int_{a-x_1}^{b-x_1} f(x_2) dx_2 \right] f(x_1) dx_1 \\ \int_0^\infty P(a - x_1 < X_2 < b - x_1) f(x_1) dx_1 &= \int_0^\infty \left[\int_a^b f(x-y) dx \right] f(y) dy = \int_a^b \left[\int_0^\infty f(x-y) f(y) dy \right] dx \\ \begin{matrix} y = x_1 \\ x = x_2 + x_1 \end{matrix} & \end{aligned}$$

- ▶ Da $f(x-y) = 0$ für $x-y < 0$ d.h. für $y > x$, folgt

$$P(a < X_1 + X_2 < b) = \int_a^b \underbrace{\left[\int_0^x f(x-y) f(y) dy \right]}_{=f^{(2)}(x)} dx$$

und daher ist die Dichte für $Y^{(2)}$ gegeben durch

$$f^{(2)}(x) = \int_0^x f(x-y) f(y) dy = \frac{x^3 e^{-x/a}}{3! a^4}.$$

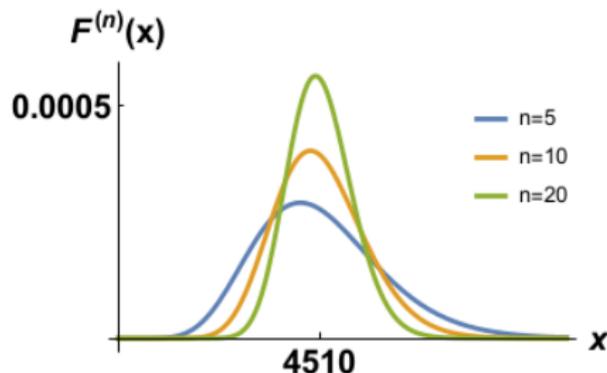
Geleebohnen im Glasgefäß

- ▶ Ähnlich gilt für $Y^{(n)} = X_1 + X_2 + \dots + X_n$

$$P(a < Y^{(n)} < b) = \int_a^b f^{(n)}(x) dx, \quad f^{(n)}(x) = \frac{x^{2n-1} e^{-x/a}}{(2n-1)! a^{2n}}$$

- ▶ Weiters gilt für $Y^{(n)}/n$

$$P(a < Y^{(n)}/n < b) = \int_{an}^{bn} f^{(n)}(x) dx \stackrel{x=nt}{=} \int_a^b \underbrace{nf^{(n)}(nt)}_{=F^{(n)}(t)} dt$$
$$P(an < Y^{(n)} < bn) = \int_{an}^{bn} f^{(n)}(x) dx$$



$$F^{(n)}(x) = \frac{n(nx)^{2n-1} e^{-nx/a}}{(2n-1)! a^{2n}}$$

und $P(|Y^{(n)}/n - 4510| > \epsilon) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0, \forall \epsilon > 0.$

Geleebohnen im Glasgefäß

- ▶ Im [Video](#) sind Schätzungen $\{x_1, \dots, x_n\}$ von $n = 160$ Probanden gesammelt worden, und zwar mit dem Mittelwert $(x_1 + \dots + x_n)/n \approx 4515$.
- ▶ Laut dem Modell mit der Dichte f ist die Wahrscheinlichkeit dieses Ergebnisses gegeben durch:

$$P\left(\left|\frac{Y^{(160)}}{160} - 4510\right| \leq 5\right) = \int_{4505}^{4515} F^{(160)}(x) dx \approx \text{0.015819} \quad \text{Details}$$

- ▶ Für die Dichte f gelten $\mu_X = 2a = 4510$, $\sigma_X = \sqrt{2}a \approx 3189$.
- ▶ Laut dem [Zentralen Grenzwertsatz](#) Seiten 89-91 wird diese Wahrscheinlichkeit so approximiert,

$$P\left(\left|\frac{Y^{(160)}}{160} - 4510\right| \leq 5\right) \approx P\left(|Z| \leq \overbrace{\frac{5\sqrt{160}}{3189}}^{\approx 0.0198}\right) = \int_{-0.0198}^{+0.0198} \frac{e^{-x^2/2}}{\sqrt{2\pi}} dx$$

- ▶ War das Ergebnis ein ziemlicher Glücksfall?

$\approx \text{0.015823}$
Details

Geleebohnen im Glasgefäß

- Berechnung der oben stehenden Funktionen mit Mathematica:

```
f[x_, a_] = Exp[-x/a] x/a^2
Plot[f[x, 4510/2], {x, 0, 10000}]
muX = Integrate[x f[x, a],
               {x, -Infinity, +Infinity}]
sigX = Integrate[(x-muX)^2 f[x, a],
               {x, -Infinity, +Infinity}]
f2[s_, a_] = Integrate[f[s-x, a]f[x, a], {x, 0, s}]
f3[s_, a_] = Integrate[f2[s-x, a]f[x, a], {x, 0, s}]
f[x_, a_, n_] = Exp[-x/a] x^(2n-1)/((2n-1)! a^(2n))
F[x_, a_, n_] = n f[n x, a, n]
Plot[
  {F[x, 4510/2, 5],
   F[x, 4510/2, 10],
   F[x, 4510/2, 20]}, {x, 0, 10000},
  PlotLegends -> {"n=5", "n=10", "n=20"}
]
```

Geleebohnen im Glasgefäß

- Berechnung der oben dargestellten Verteilung für $Y^{(n)}/n$ mittels Zufallsproben:

```
a = 4510/2;
x = linspace(0,round(6*a),round(6*a));
f = (x/a^2).*exp(-x/a);           % F'(x) = f(x)
F = 1 - (1 + x/a).*exp(-x/a);     % F1(F(x)) = x
F1 = @(z) x(find(abs(F-z) == min(abs(F-z)),1));
n = 100; imax = 10*n;
y = zeros(1,imax);
for i=1:imax
    u = rand(1,n);                 % gleichmaessig [0,1]
    yr = zeros(1,n);
    for j=1:n
        yr(j) = F1(u(j));         % yr verteilt fuer
    end                             %   Geleebohnen
    y(i) = mean(yr);
end
histogram(y,30)
```

Ganz viele Münzen werfen

- ▶ Wie konzipiert man ein Experiment mit ganz vielen Münzen, das zu einer Folge von solchen Histogrammen führt, wie für Geleebohnen gesehen?



- ▶ Was ist eine geeignete Zufallsvariable $X : \Omega \rightarrow M$?
Was ist der Ergebnisraum Ω ? der Messraum M ?
- ▶ Was sind μ_X und σ_X ?

Ganz viele Münzen werfen

- ▶ Was sind die unabhängigen Zufallsproben $\{X_1, X_2, \dots\}$, alle gleich verteilt wie X ?
- ▶ Was ist die Verteilung von $Y^{(n)} = X_1 + X_2 + \dots + X_n$?
- ▶ Bei welchem m^* wird $P(Y^{(n)} = m)$ maximiert?
- ▶ Konvergiert $P(Y^{(n)} = m^*)$ zu 1, wenn $n \rightarrow \infty$?
- ▶ Wird die Verteilung von $Y^{(n)}$ immer enger für $n \rightarrow \infty$?
- ▶ Wird die Verteilung von $Y^{(n)}/n$ immer enger für $n \rightarrow \infty$?
- ▶ Was sind $\mu_{Y^{(n)}}$ und $\sigma_{Y^{(n)}}$?
- ▶ Was ist die Differenz zwischen $Y^{(n)}/n$ und μ_X für $n \rightarrow \infty$?
- ▶ Wie kann man das Experiment mit `Matlab` simulieren und mit Histogrammen darstellen?

Ganz viele Münzen werfen

- ▶ Wie schon vorher für die Einführung in Wahrscheinlichkeiten verwendet, sei X eine Zufallsvariable mit

$$X(K) = 0, \quad X(Z) = 1$$

und

$$P(X = 0) = 1 - q, \quad P(X = 1) = q.$$

- ▶ Der Erwartungswert ist

$$\mu_X = \mathbb{E}(X) = P(X = 0) \cdot 0 + P(X = 1) \cdot 1 = q$$

und die Varianz ist

$$\begin{aligned} \sigma_X^2 = \mathbb{V}(X) = \mathbb{E}((X - \mu_X)^2) &= P(X = 0)(0 - q)^2 \\ &+ P(X = 1)(1 - q)^2 = q(1 - q) \end{aligned}$$

- ▶ Für das mehrmalige Spielen seien $\{X_1, X_2, \dots\}$ Zufallsvariablen für das 1. Spiel, das 2. Spiel, usw.
- ▶ Diese seien gleich verteilt wie X ,

$$i = 1, 2, \dots \quad \begin{cases} P(X_i = 0) = P(X = 0) = 1 - q \\ P(X_i = 1) = P(X = 1) = q \end{cases}$$

Ganz viele Münzen werfen

mit

$$i = 1, 2, \dots \quad \begin{cases} \mu_{X_i} = \mu_X = q \\ \sigma_{X_i}^2 = \sigma_X^2 = q(1-q) \end{cases}$$

- ▶ Weiters seien sie von einander unabhängig,

$$P(X_i = n \ \& \ X_j = m) = P(X_i = n) \cdot P(X_j = m), \quad n, m \in \{0, 1\}, \quad i \neq j$$

- ▶ Deswegen gelten für $Y^{(n)} = X_1 + X_2 + \dots + X_n$,

$$\begin{aligned} \mathbb{E}(Y^{(n)}) &= \mathbb{E}(X_1) + \dots + \mathbb{E}(X_n) = n\mu_X \\ \mathbb{V}(Y^{(n)}) &= \mathbb{V}(X_1) + \dots + \mathbb{V}(X_n) = n\sigma_X^2 \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} \mathbb{E}(Y^{(n)}/n) &= \mathbb{E}(X_1/n) + \dots + \mathbb{E}(X_n/n) = \mu_X \\ \mathbb{V}(Y^{(n)}/n) &= \mathbb{V}(X_1/n) + \dots + \mathbb{V}(X_n/n) = \sigma_X^2/n. \end{aligned}$$

- ▶ Weiters gelten (Siehe [Rechenregeln](#))

$$\begin{aligned} \mathbb{E}\left(\frac{Y^{(n)}/n - \mu_{Y^{(n)}}}{\sigma_{Y^{(n)}}}\right) &= \mathbb{E}\left(\frac{Y^{(n)}/n}{\sigma_{Y^{(n)}}}\right) - \mathbb{E}\left(\frac{\mu_{Y^{(n)}}}{\sigma_{Y^{(n)}}}\right) = \frac{\mu_X}{\sigma_X/\sqrt{n}} - \frac{\mu_X}{\sigma_X/\sqrt{n}} = 0 \\ \mathbb{V}\left(\frac{Y^{(n)}/n - \mu_{Y^{(n)}}}{\sigma_{Y^{(n)}}}\right) &= \frac{1}{\sigma_{Y^{(n)}}^2} \mathbb{V}(Y^{(n)}/n) = \frac{\sigma_X^2/n}{\sigma_X^2/n} = 1. \end{aligned}$$

Ganz viele Münzen werfen

- Die Zufallsvariable

$$Z_n = \frac{Y^{(n)}/n - \mu_X}{\sigma_X/\sqrt{n}}$$

erfüllt:

Warum?

$$\mu_{Z_n} = 0, \quad \sigma_{Z_n}^2 = 1.$$

- Die Zufallsvariable $Z \sim N(0, 1)$ sei normal verteilt mit

$$P(Z \in [a, b]) = \int_a^b g(x) dx, \quad g(x) = e^{-x^2/2} / \sqrt{2\pi}$$

$$\mu_Z = 0, \quad \sigma_Z^2 = 1.$$

- Laut dem Seite 89 **Zentralen Grenzwertsatz** nähert sich die Verteilung von Z_n der Verteilung von Z an, wenn $n \rightarrow \infty$.
- Es folgt für jede beliebig kleine Zahl $\epsilon > 0$,

Wie?

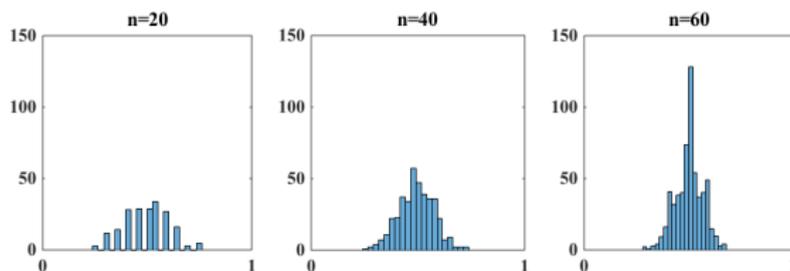
$$P\left(\left|\frac{Y^{(n)}}{n} - \mu_X\right| \leq \epsilon\right) = P\left(|Z_n| \leq \frac{\epsilon\sqrt{n}}{\sigma_X}\right) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} P\left(|Z| \leq \frac{\epsilon\sqrt{n}}{\sigma_X}\right) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 1.$$

Ganz viele Münzen werfen

- Das Münzwurfspiel wird durch Zufallsproben so simuliert.

```
n = 50; % Anzahl der Muenzen
q = 0.5; % P(Z) = P(X=1)
imax = 10*n;
y = zeros(1,imax);
for i=1:imax % n Zahlen, gleichmaessig
    u = rand(1,n); % verteilt in [0,1]
    y(i) = mean(u<q); % Mittelwert der Anzahl
end % mit u<q
histogram(y)
```

- Je größer n ist, desto weniger ist die Streuung.



Ganz viele Münzen werfen

- ▶ Da die Zufallsvariable X die **Bernoulli Verteilung** hat, hat $Y^{(n)} = X_1 + \dots + X_n$ die **Binomial Verteilung**

$$P(Y^{(n)} = m) = \binom{n}{m} q^m (1-q)^{n-m}, \quad \binom{n}{m} = \frac{n!}{m!(n-m)!}$$

- ▶ Siehe Seite 5 **Herleitung**.
- ▶ Mit $q = 1/2$ wird diese Verteilung in $m = n/2$ maximiert.
- ▶ Die entsprechende maximale Wahrscheinlichkeit ergibt sich aus dem **Dreieck von Pascal**, aber
- ▶ mit der **Formel von Stirling**,

$$n! \approx \sqrt{2\pi n} \left(\frac{n}{e}\right)^n, \quad n \rightarrow \infty$$

folgt nach Vereinfachung

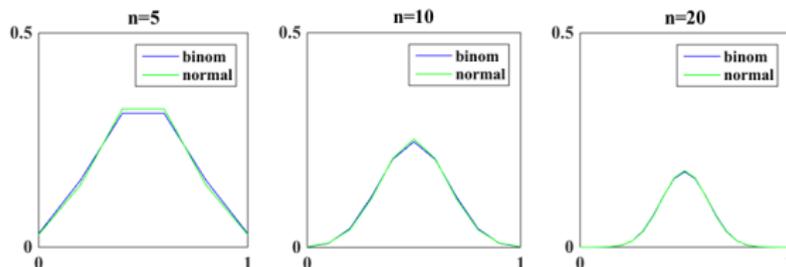
$$P(Y^{(n)} = n/2) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{n}{2\pi(n/2)(n-n/2)}} \frac{n^n}{(n/2)^{n/2} (n-n/2)^{n-n/2}} 2^{-n} = \sqrt{\frac{2}{\pi n}} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0.$$

Ganz viele Münzen werfen

- Vergleich zwischen binomial und normal:

```
n = 50; % Anzahl der Muenzen
q = 0.5; % P(Z) = P(X=1)
Y = zeros(1,n+1); % Y(m) = P(Summe = m)
for m=0:n
    Y(m+1) = nchoosek(n,m)*q^m*(1-q)^(n-m);
end
mu = q; % Erwartungswert von Y^(n)/n
s2 = q*(1-q)/n; % Varianz von Y^(n)/n
m = linspace(0,1,n+1); dm = m(2)-m(1);
Z = dm*normpdf(m,mu,sqrt(s2)); % normal verteilt
plot(m,Y,'b',m,Z,'g') % binom vs. normal
```

- Je größer n ist, desto ähnlicher sind die Verteilungen.



Ganz viele Wurfel werfen

- ▶ Wie konzipiert man ein Experiment mit ganz vielen Wurfeln, das zu einer Folge von Histogrammen fuhrt, wie schon bei den Geleebohnen und den Munzen gesehen?



- ▶ Was ist eine geeignete Zufallsvariable $X : \Omega \rightarrow R$?
Was ist der Ergebnisraum Ω ? der Messraum R ?
- ▶ Es stellen sich wieder die selben Fragen ber Verteilungen, die fr Munzen gestellt worden sind . . .
- ▶ Wie kann man das Experiment mit `Matlab` simulieren und mit Histogrammen darstellen?

Ganz viele Wurfel werfen

- ▶ Seien S_1, \dots, S_6 die Augenzahlen $1, \dots, 6$ fur eine Wurfel.
- ▶ Sei X eine Zufallsvariable mit

$$X(S_1) = 1, \quad \dots, \quad X(S_6) = 6$$

und

$$P(X = 1) = \dots = P(X = 6) = \frac{1}{6}, \quad P(X \notin \{1, \dots, 6\}) = 0$$

- ▶ Der Erwartungswert ist

$$\mu_X = \mathbb{E}(X) = P(X = 1) \cdot 1 + \dots + P(X = 6) \cdot 6 = \frac{7}{2}$$

und die Varianz ist

$$\sigma_X^2 = \mathbb{V}(X) = P(X = 1) \cdot \left(\frac{7}{2} - 1\right)^2 + \dots + P(X = 6) \cdot \left(\frac{7}{2} - 6\right)^2 = \frac{35}{12}$$

- ▶ Fur das mehrmalige Spielen seien $\{X_1, X_2, \dots\}$ Zufallsvariablen fur die 1. Wurfel, die 2. Wurfel, usw.
- ▶ Diese seien gleich verteilt wie X ,

$$P(X_i = m) = P(X = m) = \frac{1}{6}, \quad m \in \{1, \dots, 6\}, \quad i = 1, 2, \dots$$

Ganz viele Wurfel werfen

mit

$$i = 1, 2, \dots \quad \begin{cases} \mu_{X_i} = \mu_X = \frac{7}{2} \\ \sigma_{X_i}^2 = \sigma_X^2 = \frac{35}{12} \end{cases}$$

- ▶ Weiters seien sie von einander unabhangig,

$$P(X_i = n \ \& \ X_j = m) = P(X_i = n) \cdot P(X_j = m), \quad n, m \in \{1, \dots, 6\}, \quad i \neq j$$

- ▶ Deswegen gelten fur $Y^{(n)} = X_1 + X_2 + \dots + X_n$,

$$\begin{aligned} \mathbb{E}(Y^{(n)}) &= \mathbb{E}(X_1) + \dots + \mathbb{E}(X_n) = n\mu_X \\ \mathbb{V}(Y^{(n)}) &= \mathbb{V}(X_1) + \dots + \mathbb{V}(X_n) = n\sigma_X^2 \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} \mathbb{E}(Y^{(n)}/n) &= \mathbb{E}(X_1/n) + \dots + \mathbb{E}(X_n/n) = \mu_X \\ \mathbb{V}(Y^{(n)}/n) &= \mathbb{V}(X_1/n) + \dots + \mathbb{V}(X_n/n) = \sigma_X^2/n. \end{aligned}$$

- ▶ Weiters gelten (Siehe [Rechenregeln](#))

$$\begin{aligned} \mathbb{E}\left(\frac{Y^{(n)}/n - \mu_{Y^{(n)}}}{\sigma_{Y^{(n)}}}\right) &= \mathbb{E}\left(\frac{Y^{(n)}/n}{\sigma_{Y^{(n)}}}\right) - \mathbb{E}\left(\frac{\mu_{Y^{(n)}}}{\sigma_{Y^{(n)}}}\right) = \frac{\mu_X}{\sigma_X/\sqrt{n}} - \frac{\mu_X}{\sigma_X/\sqrt{n}} = 0 \\ \mathbb{V}\left(\frac{Y^{(n)}/n - \mu_{Y^{(n)}}}{\sigma_{Y^{(n)}}}\right) &= \frac{1}{\sigma_{Y^{(n)}}^2} \mathbb{V}(Y^{(n)}/n) = \frac{\sigma_X^2/n}{\sigma_X^2/n} = 1. \end{aligned}$$

Ganz viele Würfeln werfen

- Die Zufallsvariable

$$Z_n = \frac{Y^{(n)}/n - \mu_X}{\sigma_X/\sqrt{n}}$$

erfüllt:

Warum?

$$\mu_{Z_n} = 0, \quad \sigma_{Z_n}^2 = 1.$$

- Die Zufallsvariable $Z \sim N(0, 1)$ sei normal verteilt mit

$$P(Z \in [a, b]) = \int_a^b g(x) dx, \quad g(x) = e^{-x^2/2} / \sqrt{2\pi}$$

$$\mu_Z = 0, \quad \sigma_Z^2 = 1.$$

- Laut dem Seite 89 **Zentralen Grenzwertsatz** nähert sich die Verteilung von Z_n der Verteilung von Z an, wenn $n \rightarrow \infty$.
- Es folgt für jede beliebig kleine Zahl $\epsilon > 0$,

Wie?

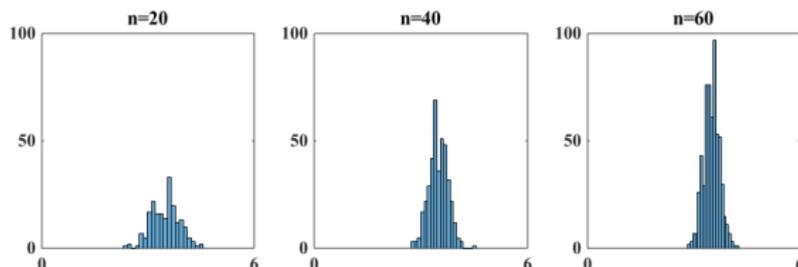
$$P\left(\left|\frac{Y^{(n)}}{n} - \mu_X\right| \leq \epsilon\right) = P\left(|Z_n| \leq \frac{\epsilon\sqrt{n}}{\sigma_X}\right) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} P\left(|Z| \leq \frac{\epsilon\sqrt{n}}{\sigma_X}\right) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 1.$$

Ganz viele Wurfel werfen

- ▶ Das Wurfelspiel wird durch Zufallsproben so simuliert:

```
n = 50;  
imax = 10*n;  
y = zeros(1, imax);  
for i=1:imax  
    y(i) = mean(randi(6, 1, n));  
end  
histogram(y, 30)
```

- ▶ Je groer n ist, desto weniger ist die Streuung.



Ganz viele Wurfel werfen

- Das Ergebnis $(Y^{(2)} = m)$ lasst sich so darstellen,

$$\begin{aligned}(Y^{(2)} = m) &= (Y^{(1)} = m - 1 \text{ und } X_2 = 1) \\ &\text{oder } (Y^{(1)} = m - 2 \text{ und } X_2 = 2) \\ &\text{oder } \dots \\ &\text{oder } (Y^{(1)} = m - 6 \text{ und } X_2 = 6).\end{aligned}$$

- Da die Ereignisse $(X_2 = i)$, $i = 1, \dots, 6$, disjunkt sind, gilt

$$\begin{aligned}P(Y^{(2)} = m) &= P(Y^{(1)} = m - 1 \text{ und } X_2 = 1) \\ &+ P(Y^{(1)} = m - 2 \text{ und } X_2 = 2) \\ &+ \dots \\ &+ P(Y^{(1)} = m - 6 \text{ und } X_2 = 6).\end{aligned}$$

- Da die Wurfe unabhangig sind, gilt

$$\begin{aligned}P(Y^{(2)} = m) &= P(Y^{(1)} = m - 1) \cdot P(X_2 = 1) \\ &+ P(Y^{(1)} = m - 2) \cdot P(X_2 = 2) \\ &+ \dots \\ &+ P(Y^{(1)} = m - 6) \cdot P(X_2 = 6)\end{aligned}$$

Ganz viele Wurfel werfen

- ▶ Daher gilt fur $2 \leq m \leq 6 \cdot 2$,

$$P(Y^{(2)} = m) = [P(Y^{(1)} = m-1) + \dots + P(Y^{(1)} = m-6)]/6.$$

- ▶ **Ähnlich** fur jedes n gilt fur $n \leq m \leq 6n$,

$$P(Y^{(n+1)} = m) = [P(Y^{(n)} = m-1) + \dots + P(Y^{(n)} = m-6)]/6.$$

- ▶ $P(Y^{(n)} = m)$ wird in $m^* = \lfloor 7n/2 \rfloor$ maximiert. Es **gelten**

Seiten 9-11

$$P(Y^{(n)} = m) = 0, \quad m = 1, \dots, n-1$$

$$P(Y^{(n)} = m) > 0, \quad m = n, \dots, 6n$$

$$P(Y^{(n)} = m) = P(Y^{(n)} = 7n - m), \quad m = n, \dots, m^*$$

$$P(Y^{(n)} = m) \text{ ist } \begin{cases} \text{steigend,} & m = n-1, \dots, m^* \\ \text{fallend,} & m = \begin{cases} m^*, & n \text{ gerade} \\ m^* + 1, & n \text{ ungerade} \end{cases}, \dots, 6n \end{cases}$$

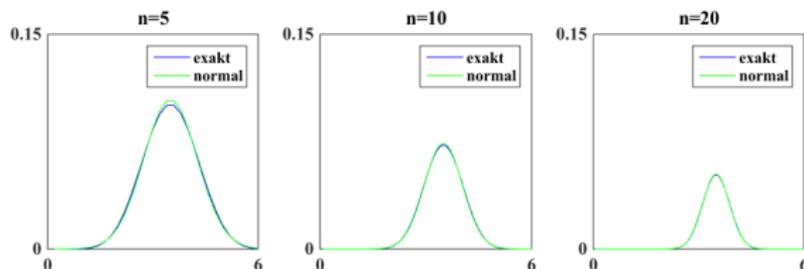
$$\text{und } P(Y^{(n)} = m^*) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0.$$

Ganz viele Würfeln werfen

- Vergleich zwischen der Verteilung und normaler Approximation:

```
n = 50; p = zeros(n,6*n); p(1,1:6) = 1/6;
for j=2:n
    for m=j:(6*j)
        m1 = max(1,m-6); % Rekursions-
        m2 = max(1,m-1); % formel,
        p(j,m) = sum(p(j-1,m1:m2))/6; % oben
    end
end
m = (1:6*n)/n; dm = m(2)-m(1);
mu = 7/2; s2 = 35/(12*n); % normal
z = dm*norpdf(m,mu,sqrt(s2)); % verteilt
plot(m,p(n,:), 'b', m, z, 'g')
```

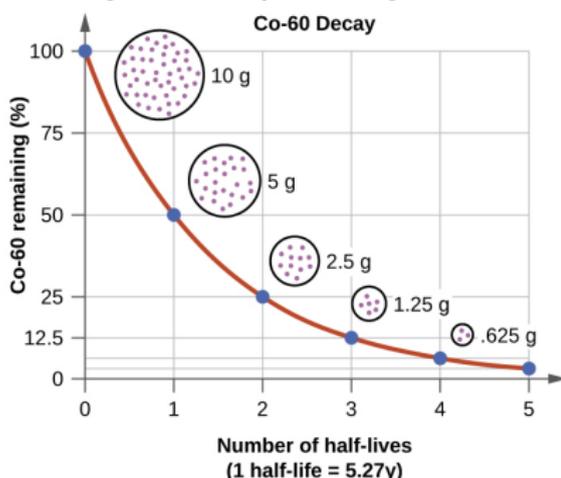
- Je größer n ist, desto ähnlicher sind die Verteilungen.



Ganz viele Teilchen zerfallen

- ▶ Wie konzipiert man ein Experiment mit ganz vielen zerfallenden Teilchen, das zu einer Folge von Histogrammen führt, wie bei den bisherigen Beispielen gesehen?

Siehe das [Video](#).



- ▶ Was ist eine geeignete Zufallsvariable $X(t) : \Omega \rightarrow R$?
Was ist der Ergebnisraum Ω ? der Messraum R ?
- ▶ Es stellen sich die selben Fragen über Verteilungen . . .
- ▶ Wie kann man das Experiment mit [Matlab](#) simulieren und mit Histogrammen darstellen?

Ganz viele Teilchen zerfallen

- ▶ Überlege den Zerfall eines zufälligen Teilchens im Zeitintervall $[0, t]$. Siehe Seite 11 Herleitung. Sei $X(t)$ eine Zufallsvariable mit

keinen Zerfall in $[0, t]$: $X(t) = 0$

Zerfall in $[0, t]$: $X(t) = 1$

$$P(X(t) = 0) = 1 - e^{-\lambda t}, \quad P(X(t) = 1) = e^{-\lambda t}.$$

- ▶ Der Erwartungswert ist

$$\mu_{X(t)} = \mathbb{E}(X(t)) = P(X(t) = 0) \cdot 0 + P(X(t) = 1) \cdot 1 = e^{-\lambda t}$$

und die Varianz ist $\mathbb{V}(X(t)) = \mathbb{E}((X(t) - \mu_{X(t)})^2) =$

$$\begin{aligned} \sigma_{X(t)}^2 &= P(X(t) = 0)(0 - e^{-\lambda t})^2 \\ &+ P(X(t) = 1)(1 - e^{-\lambda t})^2 = e^{-\lambda t}(1 - e^{-\lambda t}) \end{aligned}$$

- ▶ Für mehrere Teilchen seien $\{X_1(t), X_2(t), \dots\}$ Zufallsvariablen für das 1. Teilchen, das 2. Teilchen, usw.
- ▶ Diese seien gleich verteilt wie $X(t)$,

$$i = 1, 2, \dots \quad \begin{cases} P(X_i(t) = 0) = P(X(t) = 0) = e^{-\lambda t} \\ P(X_i(t) = 1) = P(X(t) = 1) = 1 - e^{-\lambda t} \end{cases}$$

Ganz viele Teilchen zerfallen

mit

$$i = 1, 2, \dots \quad \begin{cases} \mu_{X_i(t)} = \mu_{X(t)} = e^{-\lambda t} \\ \sigma_{X_i(t)}^2 = \sigma_{X(t)}^2 = e^{-\lambda t}(1 - e^{-\lambda t}) \end{cases}$$

- ▶ Weiters seien sie von einander unabhängig, d.h. für $i \neq j$,

$$P(X_i(t) = n \ \& \ X_j(t) = m) = P(X_i(t) = n) \cdot P(X_j(t) = m), \quad n, m \in \{0, 1\}.$$

- ▶ Deswegen gelten für $Y^{(n)}(t) = X_1(t) + X_2(t) + \dots + X_n(t)$,

$$\mathbb{E}(Y^{(n)}(t)) = \mathbb{E}(X_1(t)) + \dots + \mathbb{E}(X_n(t)) = n\mu_{X(t)}$$

$$\mathbb{V}(Y^{(n)}(t)) = \mathbb{V}(X_1(t)) + \dots + \mathbb{V}(X_n(t)) = n\sigma_{X(t)}^2$$

$$\mathbb{E}(Y^{(n)}(t)/n) = \mathbb{E}(X_1(t)/n) + \dots + \mathbb{E}(X_n(t)/n) = \mu_{X(t)}$$

$$\mathbb{V}(Y^{(n)}(t)/n) = \mathbb{V}(X_1(t)/n) + \dots + \mathbb{V}(X_n(t)/n) = \sigma_{X(t)}^2/n.$$

- ▶ Weiters gelten (Siehe [Rechenregeln](#))

$$\mathbb{E}\left(\frac{Y^{(n)}(t)/n - \mu_{Y^{(n)}(t)}}{\sigma_{Y^{(n)}(t)}}\right) = \mathbb{E}\left(\frac{Y^{(n)}(t)/n}{\sigma_{Y^{(n)}(t)}}\right) - \mathbb{E}\left(\frac{\mu_{Y^{(n)}(t)}}{\sigma_{Y^{(n)}(t)}}\right) = \frac{\mu_{X(t)}}{\sigma_{X(t)}/\sqrt{n}} - \frac{\mu_{X(t)}}{\sigma_{X(t)}/\sqrt{n}} = 0$$

$$\mathbb{V}\left(\frac{Y^{(n)}(t)/n - \mu_{Y^{(n)}(t)}}{\sigma_{Y^{(n)}(t)}}\right) = \frac{1}{\sigma_{Y^{(n)}(t)}^2} \mathbb{V}(Y^{(n)}(t)/n) = \frac{\sigma_{X(t)}^2/n}{\sigma_{X(t)}^2/n} = 1.$$

Ganz viele Teilchen zerfallen

- Die Zufallsvariable

$$Z_n(t) = \frac{Y^{(n)}(t)/n - \mu_{X(t)}}{\sigma_{X(t)}/\sqrt{n}}$$

erfüllt:

$$\mu_{Z_n(t)} = 0, \quad \sigma_{Z_n(t)}^2 = 1.$$

- Die Zufallsvariable $Z \sim N(0, 1)$ sei normal verteilt mit

$$P(Z \in [a, b]) = \int_a^b g(x) dx, \quad g(x) = e^{-x^2/2} / \sqrt{2\pi}$$

$$\mu_Z = 0, \quad \sigma_Z^2 = 1.$$

- Laut dem Seite 89 **Zentralen Grenzwertsatz** nähert sich die Verteilung von $Z_n(t)$ der Verteilung von Z an, wenn $n \rightarrow \infty$.
- Es folgt für jede beliebig kleine Zahl $\epsilon > 0$,

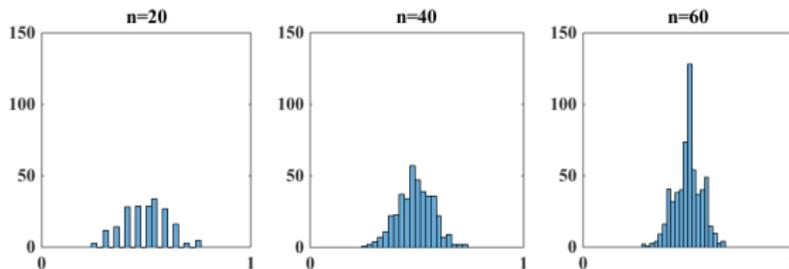
$$P\left(\left|\frac{Y^{(n)}(t)}{n} - \mu_{X(t)}\right| \leq \epsilon\right) = P\left(|Z_n(t)| \leq \frac{\epsilon\sqrt{n}}{\sigma_{X(t)}}\right) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} P\left(|Z| \leq \frac{\epsilon\sqrt{n}}{\sigma_{X(t)}}\right) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 1.$$

Ganz viele Teilchen zerfallen

► Zerfall der Teilchen durch Zufallsproben:

```
n = 50; % Anzahl der Teilchen
t = 1; % Zeitintervall ist [0,t]
lam = log(2); % Halbwertszeit = log(2)/lam
q = exp(-lam*t); % P(Ueberleben in [0,t])
imax = 10*n;
y = zeros(1,imax);
for i=1:imax % n Zahlen, gleichmaessig
    u = rand(1,n); % verteilt in [0,1]
    y(i) = mean(u<q); % Mittelwert der Anzahl
end % mit u<q
histogram(y)
```

► Je größer n ist, desto weniger ist die Streuung.



Ganz viele Teilchen zerfallen

- ▶ Da die Zufallsvariable $X(t)$ die **Bernoulli Verteilung** hat, hat $Y^{(n)}(t) = X_1(t) + \dots + X_n(t)$ die **Binomial Verteilung**

$$P(Y^{(n)}(t) = m) = \binom{n}{m} (1 - e^{-\lambda t})^m (e^{-\lambda t})^{n-m}$$

- ▶ Bei der **Halbwertszeit** $\hat{t} = \log(2)/\lambda$ wird diese Verteilung in $m = n/2$ maximiert.
- ▶ Die entsprechende maximale Wahrscheinlichkeit ergibt sich aus dem **Dreieck von Pascal**, aber
- ▶ mit der **Formel von Stirling**,

$$n! \approx \sqrt{2\pi n} \left(\frac{n}{e}\right)^n, \quad n \rightarrow \infty.$$

folgt nach Vereinfachung

$$P(Y^{(n)}(\hat{t}) = n/2) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{n}{2\pi(n/2)(n-n/2)}} \frac{n^n}{(n/2)^{n/2} (n-n/2)^{n-n/2}} 2^{-n} = \sqrt{\frac{2}{\pi n}} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0.$$

Ganz viele Teilchen zerfallen

- ▶ Zerfall der Teilchen in Abhängigkeit der Zeit. Exakte Wahrscheinlichkeiten vs. normale Approximation:

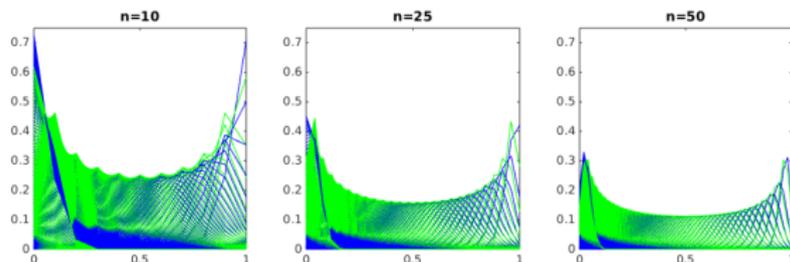
```
n = 50; % Anzahl der Teilchen
lam = log(2); % Halbwertszeit = log(2)/lam
T = 5*log(2)/lam; % Endzeit
imax = 100; % Anzahl der Zeitschritte
for i=1:imax
    t = T*i/imax; % Zeitintervall ist [0,t]
    q = exp(-lam*t); % P(Ueberleben in [0,t])
    Y = zeros(1,n+1); % Y(m) = P(Summe = m)
    for m=0:n
        Y(m+1) = nchoosek(n,m)*q^m*(1-q)^(n-m);
    end
    mu = q; % Erwartungswert von Y^(n)/n
    s2 = q*(1-q)/n; % Varianz von Y^(n)/n
```

Ganz viele Teilchen zerfallen

```
m = linspace(0,1,n+1);  
dm = m(2)-m(1); % normale  
Z = dm*normpdf(m,mu,sqrt(s2)); % Verteilung  
plot(m,Y,'b',m,Z,'g') % binom vs.  
axis([0 1 0 0.5]) % normal  
drawnow;
```

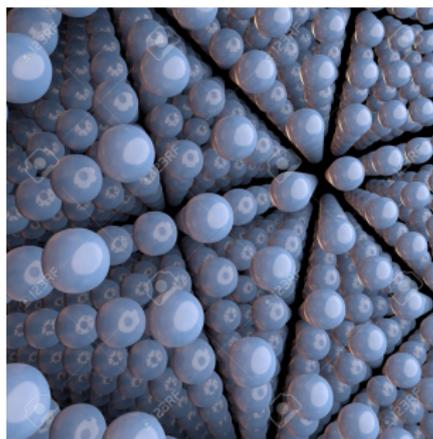
end

- ▶ Je größer n ist, desto ähnlicher sind die Verteilungen: unten **Binomial** und **Normal**, für $t = 0$ (rechts), ..., T (links).
- ▶ Da die Wahrscheinlichkeit des Zerfallens später höher wird, liegen die Maxima anfänglich rechts, und sie bewegen sich nach links.



Viele stationäre Teilchen in einem Behälter

- ▶ Seien ganz viele Teilchen und ein Behälter gegeben, wobei der Behälter in ganz vielen Bins unterteilt ist.
- ▶ Siehe das [Video](#) mit der derzeitigen Vorstellungen, dass alle Teilchen auf den Boden fallen. Im nächsten Abschnitt bleiben sie im energetischen Gleichgewicht.
- ▶ Sei es gleich wahrscheinlich, dass ein beliebiges Bin mit einem beliebigen Teilchen besetzt wird.
- ▶ Finde die Verteilung von n Teilchen in k Bins, die am wahrscheinlichsten ist.
- ▶ Weiters finde die Erwartungsverteilung.
- ▶ Bei einem Zufallsexperiment mit n immer größer nähern sich die Durchschnittsverteilungen einer Verteilung an?



Viele stationäre Teilchen in einem Behälter

- ▶ Sei $\Omega = \{B_1, B_2, \dots, B_k\}$ das Ergebnisraum mit den möglichen Orten der Teilchen.
- ▶ Seien die Teilchen mit $\{T_1, T_2, \dots, T_n\}$ markiert.
- ▶ Für ein beliebiges Teilchen T sei $X_i : \Omega \rightarrow \{0, 1\}$ eine Zufallsvariable mit $X_i(T \text{ in } B_l) = \delta_{i,l}$.
- ▶ $\{X_1, \dots, X_k\}$ sind Seite 82 **korreliert**, vgl. $k = 2$ und Münzspiel.
- ▶ Für das j te Teilchen sei $X_{i,j} : \Omega \rightarrow \{0, 1\}$ eine Zufallsvariable mit $X_{i,j}(T_j \text{ in } B_l) = \delta_{i,l}$.
- ▶ Weil die Teilchen unabhängig von einander Platz finden, sind $\{X_{i,1}, \dots, X_{i,n}\}$ für fixiertes i unabhängig.
- ▶ Sei die Zufallsvariable $Y_i^{(n)} = X_{i,1} + \dots + X_{i,n}$ die Anzahl der n Teilchen im i ten Bin.
- ▶ Gilt $P(|Y_i^{(n)}/n - 1/k| \leq \epsilon) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 1$ für jedes $\epsilon > 0$? Wie?
- ▶ Wie kann man das Experiment mit **Matlab** simulieren und mit Histogrammen darstellen?

Viele stationäre Teilchen in einem Behälter

- ▶ Für ein beliebiges Teilchen sei X_i eine Zufallsvariable mit

$$\text{Teilchen im Bin } i: X_i = 1$$

$$\text{Teilchen nicht im Bin } i: X_i = 0$$

$$P(X_i = 0) = 1 - q_i, \quad P(X_i = 1) = q_i, \quad q_1 + \dots + q_k = 1.$$

- ▶ Der Erwartungsvektor des Zufallsvektors $\mathbf{X} = \{X_1, \dots, X_k\}$ ist

$$\boldsymbol{\mu}_X = \mathbb{E}(\mathbf{X}) = \mathbf{q} = \{q_1, \dots, q_k\}$$

und die Kovarianzmatrix ist

$$\boldsymbol{\Sigma}_X^2 = \mathbb{V}(\mathbf{X}) = \mathbb{E}((\mathbf{X} - \boldsymbol{\mu}_X)(\mathbf{X} - \boldsymbol{\mu}_X)^T) = \text{diag}(\mathbf{q}) - \mathbf{q}\mathbf{q}^T$$

- ▶ Für das j te Teilchen sei $X_{i,j}$ eine Zufallsvariable mit

$$\text{das } j\text{te Teilchen im Bin } i: X_{i,j} = 1$$

$$\text{das } j\text{te Teilchen nicht im Bin } i: X_{i,j} = 0$$

wobei $X_{i,j}$ gleich verteilt ist wie X_i .

- ▶ Da die Teilchen von einander unabhängig sind, sind $\{X_{i,1}, \dots, X_{i,n}\}$ für fixiertes i unabhängig.

Viele stationäre Teilchen in einem Behälter

- ▶ Sei die Zufallsvariable $Y_i^{(n)} = X_{i,1} + \dots + X_{i,n}$ die Anzahl der Teilchen im i ten Bin.
- ▶ Mit m_i Teilchen im i ten Bin und $\mathbf{m} = \{m_1, \dots, m_k\}$ hat der Zufallsvektor $\mathbf{Y}^{(n)} = \{Y_1^{(n)}, \dots, Y_k^{(n)}\}$ die Seite 15 **Multinomial-Verteilung** (siehe **Herleitung**),

$$P(\mathbf{Y}^{(n)} = \mathbf{m}) = \left(\frac{n!}{m_1! m_2! \dots m_k!} \right) q_1^{m_1} \dots q_k^{m_k}, \quad \begin{cases} q_1 + \dots + q_k = 1 \\ m_1 + \dots + m_k = n \end{cases}$$

- ▶ Da die Zufallsvektoren $\mathbf{X}_j = \{X_{1,j}, \dots, X_{k,j}\}$ unabhängig sind, gelten

$$\mathbb{E}(\mathbf{Y}^{(n)}) = \mathbb{E}(\mathbf{X}_1) + \dots + \mathbb{E}(\mathbf{X}_n)$$

$$\mathbb{V}(\mathbf{Y}^{(n)}) = \mathbb{V}(\mathbf{X}_1) + \dots + \mathbb{V}(\mathbf{X}_n)$$

- ▶ Mit $\mathbf{1} = \{1, \dots, 1\}$ und $\mathbf{q} = \mathbf{1}/k$ gelten

$$\mathbb{E}(\mathbf{Y}^{(n)}) = \mathbf{1}/k, \quad \mathbb{V}(\mathbf{Y}^{(n)}) = (k \cdot \text{diag}(\mathbf{1}) - \mathbf{1}\mathbf{1}^T)/k^2$$

Viele stationäre Teilchen in einem Behälter

- ▶ Laut dem Seite 89 Zentralen Grenzwertsatz gilt

$$P\left(\left|\mathbf{Y}^{(n)}/n - \mathbf{1}/k\right| \leq \epsilon\right) = P\left(\frac{\left|\mathbf{Y}^{(n)}/n - \mathbf{1}/k\right|}{1/\sqrt{n}} \leq \epsilon\sqrt{n}\right)$$
$$\xrightarrow{n \rightarrow \infty} P\left(|\mathbf{Z}| \leq \epsilon\sqrt{n}\right) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 1.$$

wobei \mathbf{Z} die normale Verteilung $\mathbf{N}(\mathbf{0}, \Sigma_{\mathbf{X}}^2)$ mit Erwartungsvektor $\mathbf{0}$ und Kovarianzmatrix $\Sigma_{\mathbf{X}}^2$ hat.

- ▶ Mit der Seiten 177-180 Formel von Stirling und Lagrange-Multiplikatoren kann man zeigen, dass der Erwartungsvektor

$$\mathbb{E}(\mathbf{Y}^{(n)}) = \mathbf{1}/k$$

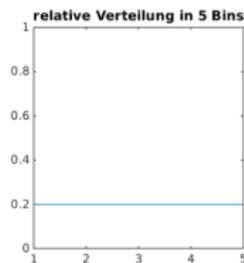
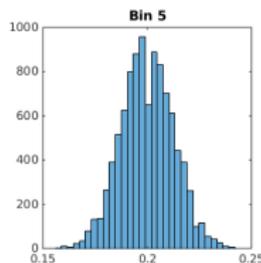
die Funktion $P(\mathbf{Y}^{(n)} = \mathbf{m})$ bezüglich \mathbf{m} Seiten 16 maximiert.

- ▶ **Aufgabe:** Dies mindestens für einfachere Fälle zeigen.

Viele stationäre Teilchen in einem Behälter

- Berechnung der Verteilung durch Zufallsproben:

```
n = 1000; k = 5; imax = 10*n; y = zeros(k,imax);
for i=1:imax
    u = randi(k,1,n); v = zeros(k,n);
    for j=1:n
        v(u(j),j) = 1;
    end
    y(:,i) = mean(v,2);
end
subplot(1,2,1);
for i=1:k
    histogram(y(i,:),30);
    title(['Bin ',num2str(i)])
    disp(['mean=',num2str(mean(y(i,:)))]);
    disp(['std=',num2str(std(y(i,:)))]);
    pause;
end
subplot(1,2,2); plot(mean(y,2)); axis([1 k 0 1]);
title(['relative Verteilung in ',num2str(k),' Bins']);
```



- Je höher n ist, desto weniger ist die Streuung.

Viele energetische Teilchen in einem Behälter

- ▶ Seien ganz viele energetische Teilchen in einem Behälter gegeben.
- ▶ Alle Teilchen besitzen nur kinetische Energie, und die gesamte Energie im Behälter ist fixiert.
- ▶ Analog zur Position im letzten Abschnitt seien nun die Energien der Teilchen in vielen Bins unterteilt.
- ▶ Man sucht die Verteilung von n Teilchen in k Bins, die am wahrscheinlichsten ist.
- ▶ Weiters sucht man die Erwartungsverteilung.
- ▶ Bei einem Zufallsexperiment mit n immer größer nähern sich die Durchschnittsverteilungen einer Verteilung an?



Viele energetische Teilchen in einem Behälter

- ▶ Sei $\Omega = \{B_1, B_2, \dots, B_k\}$ das Ergebnisraum mit den möglichen Energien der Teilchen.
- ▶ Ein Teilchen im i ten Bin hat Energie E_i , wobei
$$E_k > E_{k-1} > \dots > E_2 > E_1 \geq 0.$$
- ▶ Seien die Teilchen mit $\{T_1, T_2, \dots, T_n\}$ markiert.
- ▶ Für ein zufälliges Teilchen T sei $X_i: \Omega \rightarrow \{0, 1\}$ eine Zufallsvariable mit $X_i(T \text{ in } B_l) = \delta_{i,l}$.
- ▶ Für das j te Teilchen sei $X_{i,j}: \Omega \rightarrow \{0, 1\}$ eine Zufallsvariable mit $X_{i,j}(T_j \text{ in } B_l) = \delta_{i,l}$.
- ▶ Sei die Zufallsvariable $Y_i^{(n)} = X_{i,1} + \dots + X_{i,n}$ die Anzahl der n Teilchen, die im i ten Bin zu finden sind.
- ▶ Wegen der fixierten gesamten Energie E ist das Platzfinden für ein Teilchen im Allgemeinen abhängig von den anderen, aber es wird gesehen, für $E = \mathcal{O}(n)$ immer größer sind $X_{i,j}$ und $X_{i',j'}$ annäherungsweise unabhängig.
- ▶ Für $\mathbf{X} = \{X_1, \dots, X_k\}$ und $\mathbf{Y}^{(n)} = \{Y_1^{(n)}, \dots, Y_k^{(n)}\}$ gilt
$$P(|\mathbf{Y}^{(n)}/n - \boldsymbol{\mu}_{\mathbf{X}}| \leq \epsilon) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 1, \forall \epsilon > 0?$$

Viele energetische Teilchen in einem Behälter

- ▶ Mit m_i Teilchen im i ten Bin der Energie E_i seien

$$\mathbf{1} = \{1, \dots, 1\}, \quad \mathbf{m} = \{m_1, \dots, m_k\}, \quad \mathbf{E} = \{E_1, \dots, E_k\}.$$

- ▶ Sei $\hat{E} = E/n$ die durchschnittliche Energie mit

$$E_1 < \hat{E} < \mathbf{1}^T \mathbf{E}/k$$

- ▶ Mikrozustände sind Verteilungen von $\{T_1, T_2, \dots, T_n\}$.
- ▶ Makrozustände sind Verteilungen von $\{m_1, \dots, m_k\}$.
- ▶ Alle möglichen Mikrozustände seien gleich wahrscheinlich.
- ▶ Der Zufallsvektor $\mathbf{Y}^{(n)} = \{Y_1^{(n)}, \dots, Y_k^{(n)}\}$ sei so Seite 18 verteilt,

$$P(\mathbf{Y}^{(n)} = \mathbf{m}) = \begin{cases} \frac{1}{N} \binom{n!}{\mathbf{m}!} & \mathbf{1}^T \mathbf{m} = n \\ & \mathbf{m}^T \mathbf{E} = E, \\ 0, & \text{sonst,} \end{cases} \quad N = \sum_{\mathbf{1}^T \mathbf{m} = n, \mathbf{m}^T \mathbf{E} = E} \binom{n!}{\mathbf{m}!}.$$

- ▶ Mit dem Multinomialkoeffizienten werden mögliche Mikrozustand-Permutationen für einen gegebenen Makrozustand berücksichtigt.

Viele energetische Teilchen in einem Behälter

- Diese Verteilung wird mit den folgenden Größen untersucht.

Makrozustände	$\mathbf{E} = \{E_j\}_{j=1}^k$	# Mikrozustände
$\{M = i\}_{i=1}^N$:	$\{\mathbf{m}_i\}_{i=1}^N = \{m_{i,j}\}_{i=1, j=1}^N, k$	$\{K_i\}_{i=1}^N, K_i = \binom{n!}{m_i!}$
Erwartungen:	$\bar{\mathbf{m}} = \sum_{i=1}^N \mathbf{m}_i K_i / N$	N

- Z.B. seien $\mathbf{E} = \{(i-1)\Delta E\}_{i=1}^k, \Delta E = \frac{n}{k-1}, E = n$ und $n, k = 5$.

Makrozustände	E_1	E_2	E_3	E_4	E_5	# Mikrozustände
$M = 1$:	1	4	0	0	0	5
2:	4	0	0	0	1	5
⋮ 3:	3	0	2	0	0	10
4:	3	1	0	1	0	20
am wahr- scheinlichsten $M = 5$:	2	2	1	0	0	30
Erwartungen:	2.50	1.43	0.71	0.29	0.07	Gesamt: 70

- Mit Wahrscheinlichkeit 30/70 ist Makrozustand $\mathbf{m}^* = \mathbf{m}_5$ am wahrscheinlichsten, und die Erwartungen $\bar{\mathbf{m}}$ sind ähnlich.

Viele energetische Teilchen in einem Behälter

- ▶ Sei M eine Zufallsvariable für den Makrozustand.
- ▶ Beispielsweise wird $\mathbb{E}[X_1] = 0 \cdot P(X_1 = 0) + 1 \cdot P(X_1 = 1)$ durch die Bayesche Regel gegeben,

$$\begin{aligned}P(X_1 = 1) &= \sum_{i=1}^N P(X_1 = 1 \mid M = i)P(M = i) = \sum_{i=1}^N \frac{m_{i,1}}{n} \frac{K_i}{N} \\ &= \frac{1}{5} \frac{5}{70} + \frac{4}{5} \frac{5}{70} + \frac{3}{5} \frac{10}{70} + \frac{3}{5} \frac{20}{70} + \frac{2}{5} \frac{30}{70} = 0.5\end{aligned}$$

- ▶ Analog ergeben sich die Erwartungswerte:

$$\boldsymbol{\mu}_X = \mathbb{E}[\mathbf{X}] = \mathbb{E}[\mathbf{X}_j] = \bar{m}/n, \quad \mathbb{E}[\mathbf{Y}^{(n)}] = \mathbb{E}[\mathbf{X}_1] + \dots + \mathbb{E}[\mathbf{X}_n] = \bar{m}.$$

- ▶ Unabhängigkeit wird mit der Bayeschen Regel so kontrolliert,

$$\begin{aligned}P(X_{2,j} = 1 \ \& \ X_{1,j'} = 1) &= \sum_{i=1}^N P(X_{2,j} = 1 \ \& \ X_{1,j'} = 1 \mid M = i)P(M = i) \\ &= \sum_{i=1}^N P(X_{2,j} = 1 \mid X_{1,j'} = 1 \ \& \ M = i)P(X_{1,j'} = 1 \mid M = i)P(M = i) \\ &= \frac{4}{4} \frac{1}{5} \frac{5}{70} + \frac{0}{4} \frac{4}{5} \frac{5}{70} + \frac{0}{4} \frac{3}{5} \frac{10}{70} + \frac{1}{4} \frac{3}{5} \frac{20}{70} + \frac{2}{4} \frac{2}{5} \frac{30}{70} = \frac{1}{7} = P(X_{2,j} = 1) \cdot P(X_{1,j'} = 1)\end{aligned}$$

- ▶ Hier ist Unabhängigkeit genau. Im Allgemeinen gilt die Übereinstimmung annäherungsweise für $\hat{E} = E/n = \text{fix}$ und $n \rightarrow \infty$.

Viele energetische Teilchen in einem Behälter

- ▶ Mit der Abhängigkeit von $\{\mathbf{X}_j\}_{j=1}^n$ folgt mit dem Zentralen Grenzwertsatz, $\forall \epsilon > 0$

$$P\left(\left|\mathbf{Y}^{(n)}/n - \boldsymbol{\mu}_X\right| \leq \epsilon\right) = P\left(\frac{|\mathbf{Y}^{(n)}/n - \boldsymbol{\mu}_X|}{1/\sqrt{n}} \leq \epsilon\sqrt{n}\right) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} P(|\mathbf{Z}| \leq \epsilon\sqrt{n}) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 1.$$

wobei $\mathbf{Z} \sim \mathbf{N}(\mathbf{0}, \Sigma_{\mathbf{X}}^2)$ mit Erwartungsvektor $\mathbf{0}$ und Kovarianzmatrix $\Sigma_{\mathbf{X}}^2$.

- ▶ Daher ist $\boldsymbol{\mu}_X$ annäherungsweise auch die Makrozustand-Verteilung, die am wahrscheinlichsten ist.
- ▶ Trotzdem sind Unterschiede zwischen dem wahrscheinlichsten Zustand m^* und dem Erwartungszustand \bar{m} in der obigen Tabelle mit $n = k = 5$ nicht trivial.
- ▶ Die Methode von Boltzmann wird nun verwendet, um den Makrozustand zu bestimmen, der annäherungsweise für n sehr groß am wahrscheinlichsten ist.
- ▶ Dieser Zustand wird durch das Maximum des Multinomialkoeffizienten unter Einschränkungen mit Seiten 177-180 **Lagrange-Multiplikatoren** bestimmt.

Viele energetische Teilchen in einem Behälter

- ▶ Dafür soll der Multinomialkoeffizienten in der Zielfunktion $P(\mathbf{Y}^{(n)} = \mathbf{m})$ bezüglich \mathbf{m} unter den Einschränkungen $\mathbf{1}^\top \mathbf{m} = n$ und $\mathbf{m}^\top \mathbf{E} = E$ maximiert werden.
- ▶ Die gröbere **Formel von Stirling** $\ln(n!) \approx n \ln(n) - n$ wird in der transformierten Zielfunktion $\ln(P(\mathbf{Y}^{(n)} = \mathbf{m}))$ verwendet.
- ▶ Der gesuchte Zustand ist stationär für die Lagrange-Funktion

$$L(\mathbf{m}, \lambda, \mu) = \mathbf{m}^\top (1 - \ln(\mathbf{m})) - \lambda(\mathbf{1}^\top \mathbf{m} - n) - \mu(\mathbf{m}^\top \mathbf{E} - E)$$

- ▶ Für die entstehenden Rechnungen seien definiert

$$Z(\mu) = \sum_{i=1}^k e^{-\mu E_i}, \quad \phi(\mu) = e^{\mu \hat{E}} [Z'(\mu) + \hat{E} Z(\mu)]$$

wobei $Z(\mu)$ die sogenannten **Partitionsfunktion** ist.

- ▶ Die Stationaritätsbedingungen der Lagrange-Funktion sind

$$\mathbf{m} = e^{-\lambda - \mu \mathbf{E}}, \quad n e^\lambda = Z(\mu) \quad \text{und} \quad \phi(\mu) = 0.$$

Viele energetische Teilchen in einem Behälter

- ▶ Unter der Annahme $E_1 < \hat{E} < \mathbf{1}^T \mathbf{E}/k$ gelten

$$\phi(0) = \sum_{i=1}^k (\hat{E} - E_i) < 0, \quad \phi'(\mu) = \sum_{i=1}^k (\hat{E} - E_i)^2 e^{\mu(\hat{E} - E_i)} > 0$$

$$\lim_{\mu \rightarrow \infty} \phi(\mu) = \underbrace{\lim_{\mu \rightarrow \infty} \sum_{E_i \geq \hat{E}} (\hat{E} - E_i) e^{\mu(\hat{E} - E_i)}}_{=0} + \underbrace{\lim_{\mu \rightarrow \infty} \sum_{E_i < \hat{E}} (\hat{E} - E_i) e^{\mu(\hat{E} - E_i)}}_{=\infty} = \infty.$$

- ▶ Daher existiert genau ein $\mu^* \in (0, \infty)$, mit dem die Stationaritätsbedingungen erfüllt sind.
- ▶ Laut dem Boltzmann Modell gilt $1/\mu^* = \kappa T$, wobei κ die Boltzmann Konstante und T die Temperatur sind.
- ▶ Mit $\nabla_{\mathbf{m}}^2 L = \text{diag}(-1/\mathbf{m})$ ist L konkav in \mathbf{m} über $(0, n)^k$.
- ▶ Daher mit der Boltzmann Verteilung wird die Wahrscheinlichkeit $P(\mathbf{Y}^{(n)} = \mathbf{m})$ bezüglich \mathbf{m} unter Erhaltungseinschränkungen Seiten 19-20 maximiert,

$$\mathbf{m}^* = n e^{-\mu^* \mathbf{E}} / Z(\mu^*).$$

Viele energetische Teilchen in einem Behälter

Vergleich der Verteilungen mit

$$E = \{(i-1)\Delta E\}_{i=1}^k$$

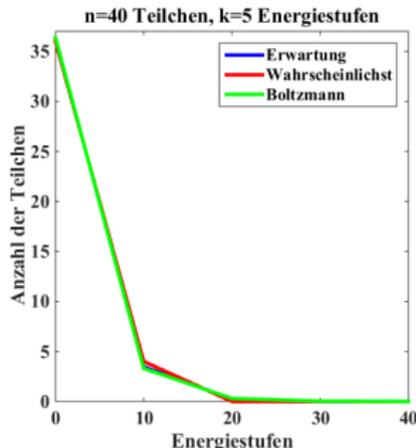
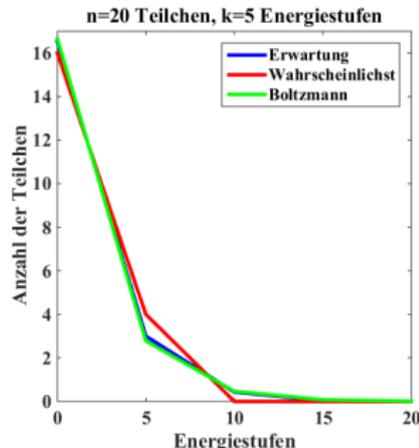
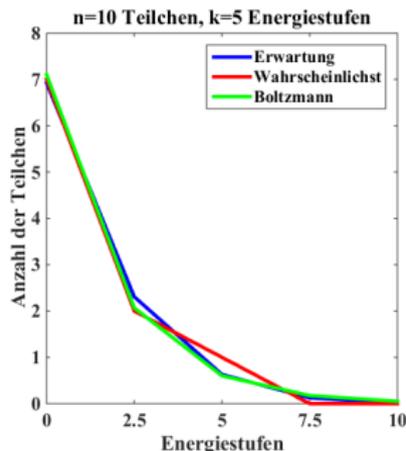
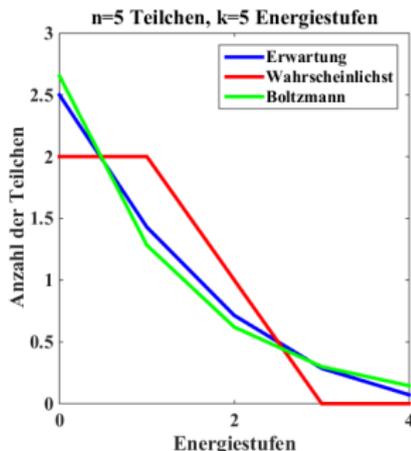
$$\Delta E = \frac{n}{k-1}$$

$$E = n, k = 5,$$

$$n = 5, 10,$$

$$20, 40.$$

Konvergenz der Differenzen zu Null ist augenscheinlich.



Viele energetische Teilchen in einem Behälter

- Diese Verteilungen werden so berechnet:

```
function boltz global n k M K E Etot
n=5; k=5; % # Teilchen, Stufen
E = (0:k-1); % Energiezustände
Etot = (k-1); % Gesamtenergie
Ehat = Etot/n; % Durchschnittsenergie
mu1 = 0; mu2 = 1; % Bisektionsverfahren
pmu1 = sum((Ehat-E).*exp(mu1*(Ehat-E)));
pmu2 = sum((Ehat-E).*exp(mu2*(Ehat-E)));
for i=1:1000 % mu in [mu1,mu2]
    mu = (mu1+mu2)/2; % mitteln
    pmu = sum((Ehat-E).*exp(mu*(Ehat-E)));
    if (pmu*pmu1 > 0)
        mu1 = mu;
    else % neues Intervall
        mu2 = mu;
    end
end
if (abs(mu2-mu1)<1.0e-6*abs(mu))
```

Viele energetische Teilchen in einem Behälter

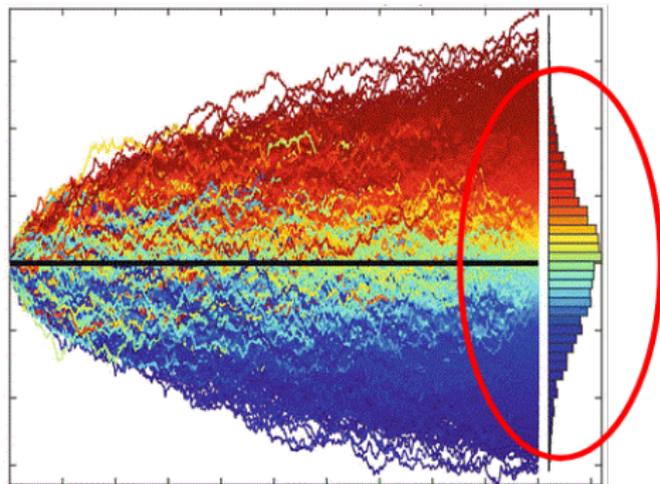
```
        break;
    end
end
end % Boltzmann:
Mb = n*exp(-mu*E) / sum(exp(-mu*E));
M = []; K = []; % Tabelle [M|K]
Mi = zeros(1,k); % 1. Zeile
tabelle(1,Mi); % rekursiv, Mi->[M|K]
N = sum(K); % Anzahl der Mikros
p = K/N; % Wkten der Mikros
Ma = p' *M; % Durchschnitt
i = find(p == max(p));
Mp = mean(M(i,:),1); % wahrscheinlichst
end
function tabelle(j,Mi) global n k M K E Etot
    if ((sum(Mi) > n) || (dot(Mi,E) > Etot))
        return;
    end
    for i=0:n
```

Viele energetische Teilchen in einem Behälter

```
Mi(j) = i;
if ((sum(Mi) > n) || (dot(Mi,E) > Etot))
    return;
end
if (j <= k-1)
    new_column(j+1,Mi); % neue Spalte, rekursiv
else % neue Zeile:
    if ((sum(Mi) == n) && (dot(Mi,E) == Etot))
        M = [M;Mi]; K = [K;multcoef(Mi)];
    end
end
end
end
function c = multcoef(k)
    c = 1; for i=1:length(k)
        c = c*nchoosek(sum(k(1:i)),k(i));
    end
end
68 end
```

Brownsche Bewegung

- ▶ ^{Seite 33} [Brown](#) hat 1826-27 die unregelmäßige Bewegung von im Wasser schwebenden Blütenstaubteilchen beobachtet. Er und andere haben gemerkt, der Pfad eines gegebenen Teilchens ist so unregelmäßig dass es zu keiner Zeit eine Tangente hat, und die Pfade von zwei Teilchen sind unabhängig von einander.



Bell shaped curve
i.e. Normal distribution

Siehe das [Video](#).

Brownsche Bewegung

- ▶ Die zufällige Bewegung von Teilchen in einem dünnen Rohr wird hier betrachtet.
- ▶ Ein beliebiges Teilchen bewegt sich zufällig nach links oder nach rechts mit gleicher Wahrscheinlichkeit.
- ▶ Sei δ eine Zufallsvariable mit

$$P(\delta = -1) = \frac{1}{2} = P(\delta = +1)$$

wobei $\delta = -1$ und $\delta = +1$ Verschiebungen eines Teilchens nach links bzw. nach rechts darstellen.

- ▶ Seien $\{\delta_1, \delta_2, \dots\}$ unabhängig und gleich verteilt wie δ .
- ▶ Dargestellt sei die Position eines beliebigen Teilchens zur Zeit t in Zeitschritten von Δt durch die Zufallsvariable

$$X(t; \Delta t).$$

- ▶ Zur Zeit $t = 0$ gilt $X(0, \Delta t) = 0$.
- ▶ Zur Zeit $t = 1 \cdot \Delta t$ gilt

$$X(1 \cdot \Delta t; \Delta t) = \sqrt{2D\Delta t} \cdot \delta_1$$

wobei $D > 0$ eine Diffusivität darstellt.

Brownsche Bewegung

- ▶ Zur Zeit $t = 2 \cdot \Delta t$ gilt

$$X(2 \cdot \Delta t; \Delta t) = X(1 \cdot \Delta t; \Delta t) + \sqrt{2D\Delta t} \cdot \delta_2$$

- ▶ Zur Zeit $t = k\Delta t$ gilt für $k = 1, 2, \dots$

$$X(k \cdot \Delta t; \Delta t) = X((k-1) \cdot \Delta t; \Delta t) + \sqrt{2D\Delta t} \cdot \delta_k$$

- ▶ Analog seien $\{X_1(t; \Delta t), X_2(t; \Delta t), \dots\}$ Zufallsvariablen, die die Position von Teilchen darstellen, die sich gleichartig aber unabhängig von einander bewegen, d.h. $k = 1, 2, \dots$

$$X_i(k \cdot \Delta t; \Delta t) = X_i((k-1) \cdot \Delta t; \Delta t) + \sqrt{2D\Delta t} \cdot \delta_{i,k}$$

wobei $\{\delta_{i,k}\}$ unabhängig und gleich verteilt wie δ sind.

- ▶ Man simuliert diese Bewegung von Teilchen durch Zufallsproben und erstellt Histogramme für die Teilchendichte.
- ▶ Wie kann man das Histogramm der Teilchen-Verteilung voraussagen?

Brownsche Bewegung

- Die Verschiebungs-Zufallsvariable δ erfüllt

$$\mu_\delta = \mathbb{E}(\delta) = P(\delta = -1)(-1) + P(\delta = +1)(+1) = 0$$

$$\sigma_\delta^2 = \mathbb{V}(\delta) = P(\delta = -1)(-1 - 0)^2 + P(\delta = +1)(+1 - 0)^2 = 1$$

- Die Positions-Zufallsvariable erfüllt

$$X(t; \Delta t) = X(t - \Delta t; \Delta t) + \sqrt{2D\Delta t} \cdot \delta_{\lfloor t/\Delta t \rfloor} = \dots = \sqrt{2D\Delta t} \sum_{i=1}^{\lfloor t/\Delta t \rfloor} \delta_i$$

mit

$$\mu_{X(t; \Delta t)} = \mathbb{E}(X(t; \Delta t)) = \sqrt{2D\Delta t} \sum_{i=1}^{\lfloor t/\Delta t \rfloor} \mu_{\delta_i} = 0$$

und

$$\sigma_{X(t; \Delta t)}^2 = \mathbb{E}(X(t; \Delta t)^2) = 2D\Delta t \sum_{i=1}^{\lfloor t/\Delta t \rfloor} \sigma_{\delta_i}^2 = \frac{\lfloor t/\Delta t \rfloor}{t/\Delta t} 2Dt.$$

Brownsche Bewegung

Seite 89

- ▶ Laut dem **Zentralen Grenzwertsatz**

$$P(a \leq X(t; \Delta t) \leq b) = P\left(\sqrt{\frac{t/\Delta t}{\lfloor t/\Delta t \rfloor}} \frac{a}{\sqrt{2Dt}} \leq \frac{X(t; \Delta t) - \mu_{X(t; \Delta t)}}{\sigma_{X(t; \Delta t)}} \leq \sqrt{\frac{t/\Delta t}{\lfloor t/\Delta t \rfloor}} \frac{b}{\sqrt{2Dt}}\right)$$

$$\xrightarrow{\Delta t \rightarrow 0} P\left(\frac{a}{\sqrt{2Dt}} \leq Z \leq \frac{b}{\sqrt{2Dt}}\right), \quad Z \sim N(0, 1), \quad a < b, \quad a, b \in \mathbb{R}.$$

- ▶ Daher gilt

$$P(a \leq X(t; \Delta t) \leq b) \xrightarrow{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{a/\sqrt{2Dt}}^{b/\sqrt{2Dt}} e^{-z^2/2} dz$$
$$\stackrel{x=z\sqrt{2Dt}}{=} \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \int_a^b e^{-x^2/(4Dt)} dx.$$

- ▶ **Aufgabe:** Für $\alpha \in (0, \frac{1}{2}]$ entwickle das Modell mit

$$P(\delta = -1) = \alpha, \quad P(\delta = 0) = 1 - 2\alpha, \quad P(\delta = +1) = \alpha.$$

Brownsche Bewegung

- Brownsche Bewegung von einzelnen Teilchen:

```
n = 1000; imax = 1000; X = zeros(1,n);
D = 5; dt = 0.01; al = 0.1;
a = -10; b = +10; m = 29;
xi = linspace(a,b,m+1); dx = xi(2)-xi(1);
xc = xi(1:m)+dx/2;
t = 0;
for i=1:imax
    t = t+dt;
    z = rand(1,n);
    de = -(z < al) + (z > 1-al);
    X = X + sqrt(2*D*(dt/(2*al)))*de;
    [N,yi] = histcounts(X,xi); R = N/n;
    r = (erf(xi(2:m+1)/(2*sqrt(D*t))) ...
        - erf(xi(1:m)/(2*sqrt(D*t))))/2;
    plot(xc,r,'b',xc,R,'g'); drawnow;
end
```

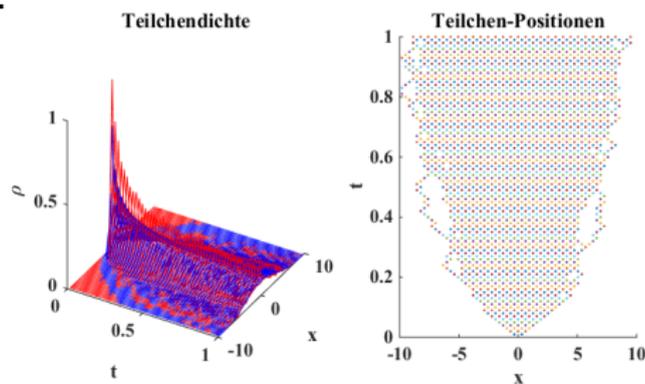
Bei $\alpha = 0.1$
anstatt $\alpha = 0.5$ wird
die Bewegung schön
gedämpft.

Brownsche Bewegung

Vergleich der Ergebnisse von diesem Code:

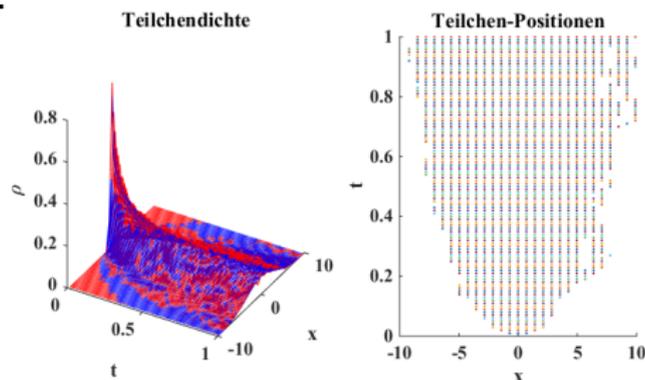
- ▶ Für $a = -10$, $b = +10$.
 $m = 29$, $D = 5$,
 $dt = 0.01$
und $\alpha = 0.5$:

Mehr Abstand
zwischen
Zufall vs. **Normal**



- ▶ Für $a = -10$, $b = +10$.
 $m = 29$, $D = 5$,
 $dt = 0.01$
und $\alpha = 0.1$:

Weniger Abstand
zwischen
Zufall vs. **Normal**



Brownsche Bewegung

- ▶ Sei $X(t)$ eine Zufallsvariable für die Position eines beliebigen Teilchens in einem dünnen Rohr zur Zeit t .
- ▶ Sei $\rho(x, t)$ die Wahrscheinlichkeitsdichte für $X(t)$,

$$P(a \leq X(t) \leq b) = \int_a^b \rho(x, t) dx$$

- ▶ Angenommen gilt $\rho(x, 0) = \rho_0(x)$ anfänglich.
- ▶ Laut einem [Argument](#) von Einstein (siehe [Herleitung](#))
ist ρ eine Lösung von Seite 24

$$\rho_t(x, t) = D\rho_{xx}(x, t), \quad \rho(x, 0) = \rho_0(x)$$

und ist gegeben durch

$$\rho(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \rho_0(x-y) \frac{e^{-y^2/(4Dt)}}{\sqrt{4\pi Dt}} dy$$

- ▶ Mit den Methoden im [Numerik Skriptum](#) wird das Anfangswertproblem auf einem Intervall so gelöst:
ab Seite 226

Brownsche Bewegung

- Evolution der Wahrscheinlichkeitsdichte in einem Intervall:

```
Nx = 101; xi = linspace(0,1,Nx+1);
hx = xi(2)-xi(1);
xc = xi(1:Nx)' + hx/2;
Nt = 1001; T = 0.1; dt = T/Nt; D = 1;
Dx = spdiags(ones(Nx,1),1,Nx-1,Nx) ...
    - spdiags(ones(Nx,1),0,Nx-1,Nx);
Dx = Dx/hx;
A = speye(Nx) + dt*D*Dx'*Dx;
r = double((xc > 0.5-1/Nx) & (xc < 0.5+1/Nx));
r = r/(hx*sum(r));
plot(xc,r); axis([0 1 0 10]); drawnow;
for k=1:Nt
    r = A\r;
    plot(xc,r);
    axis([0 1 0 10]); drawnow;
end
```

Je höher D ist, desto
schneller ist Diffusion

Diffusionsoperator

$\rho = r$ anfänglich konzentriert!

Zeitschritte
Rückwärts-Euler
Verfahren

Brownsche Bewegung

Vergleich der Ergebnisse vom Code:

- Für $N_x = 101$, $N_t = 1001$,
 $t \in [0, \frac{1}{10}]$, $x \in [0, 1]$,
und $D = 1$:

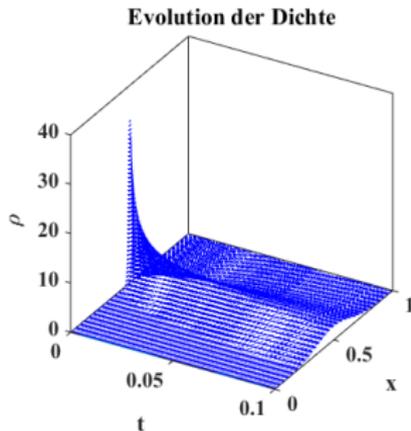
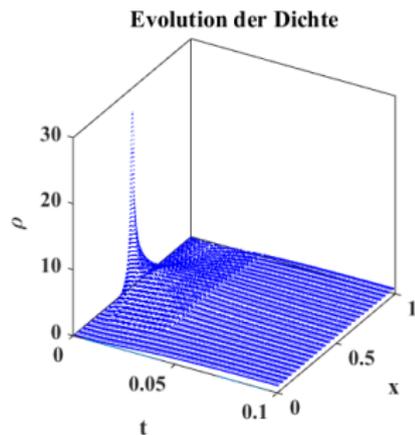
Es bleibt

$$\int_0^1 \rho(x, t) dx = 1$$

Also $\rho(x, t) \xrightarrow{t \rightarrow \infty} 1$.

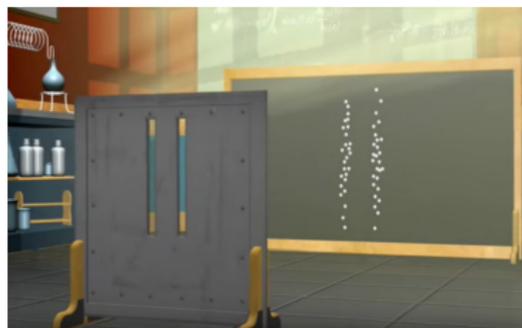
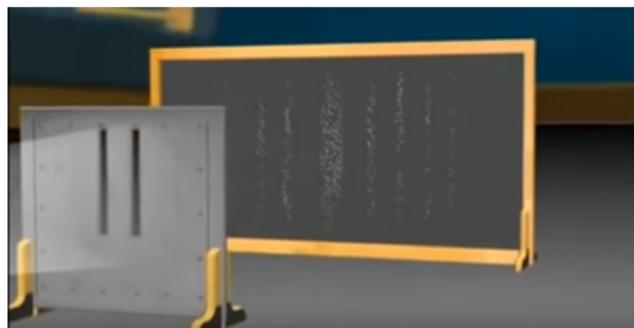
- Für $N_x = 101$, $N_t = 1001$,
 $t \in [0, \frac{1}{10}]$, $x \in [0, 1]$,
und $D = \frac{1}{10}$:

Die Evolution
ist langsamer.
mit D kleiner.



Von Quanten- bis zur klassischen Materie

- ▶ Siehe das [Doppelspalt-Experiment](#).



- ▶ Im 20. Jahrhundert ist entdeckt worden, dass Licht und Materie beide einen Wellen- und einen Teilchen-Charakter besitzen.
- ▶ Um den Wellencharakter zu verdeutlichen, soll die mathematische Beschreibung von Wellen hervorgehoben werden, wie sie für Elektromagnetismus und Strömungsmechanik bekannt sind.

Von Quanten- bis zur klassischen Materie

- Seiten 28,64
▶ Sei eine **komplexe** Welle mit der Wellenfunktion

$$w(x, t) = u(x, t) + i \cdot v(x, t) = \rho(x, t) \exp[i \cdot \theta(x, t)]$$

$$\rho(x, t) = \sqrt{u^2(x, t) + v^2(x, t)}, \quad \tan(\theta(x, t)) = v(x, t)/u(x, t)$$

$$u(x, t) = \rho(x, t) \cos(\theta(x, t)), \quad v(x, t) = \rho(x, t) \sin(\theta(x, t))$$

dargestellt, wobei nur die Intensität

$$|w(x, t)| = \rho(x, t)$$

messbar ist.

- ▶ Falls es zwei Wellen $w_1(x, t)$ und $w_2(x, t)$ gibt, folgt aus der Superposition für die Gesamtamplitude

$$w(x, t) = w_1(x, t) + w_2(x, t)$$

$$w_1(x, t) = u_1(x, t) + i \cdot v_1(x, t) = \rho_1(x, t) \exp[i \cdot \theta_1(x, t)]$$

$$w_2(x, t) = u_2(x, t) + i \cdot v_2(x, t) = \rho_2(x, t) \exp[i \cdot \theta_2(x, t)]$$

Von Quanten- bis zur klassischen Materie

Seite 29

(Lösung)

- ▶ **Aufgabe:** Zeige

$$|w(x, t)|^2 = (u_1(x, t) + i \cdot v_1(x, t)) \cdot (u_1(x, t) - i \cdot v_1(x, t)) = \rho_1^2(x, t) + \rho_2^2(x, t) + 2\rho_1(x, t)\rho_2(x, t) \cos[\theta_1(x, t) - \theta_2(x, t)].$$

- ▶ Der letzte Term ist der sogenannte Interferenzterm.
- ▶ Der klassische Transport von Masse wird bezüglich der Materie-Dichte mit der **Konvektionsgleichung** modelliert,

$$\rho_t(x, t) + [v(x, t)\rho(x, t)]_x = 0$$

wobei $v(x, t)$ die lokale Geschwindigkeit ist.

- ▶ Beispielsweise ist die Seite 11 **Lösung** dieser Gleichung gegeben durch die reisende Welle, Zeige dies!

$$\rho(x, t) = \rho_0(x - vt)$$

wenn $\rho(x, 0) = \rho_0(x)$ anfänglich gilt und die Geschwindigkeit $v(x, t) = v$ eine Konstante ist.

Von Quanten- bis zur klassischen Materie

- ▶ Mit diesem Modell kann aber keine Interferenz entstehen.
- ▶ Deswegen wird eine Materie-Welle mit der **Wellenfunktion**

Seite 3

$$\psi(x, t) = \sqrt{\rho(x, t)} \exp[i\theta(x, t)/\hbar],$$

$$\rho(x, t) = |\psi(x, t)|, \quad \theta(x, t) = \arg[\psi(x, t)]$$

allgemeiner modelliert, wobei die Phase θ für die beobachteten Interferenzmuster notwendig ist.

- ▶ Die Phase ist hier mit der Planck-Konstante \hbar skaliert.
- ▶ Für eine Materie-Welle wird die Wellenfunktion so interpretiert, dass

$$|\psi(x, t)|^2 = \rho(x, t)$$

die Wahrscheinlichkeitsdichte für die Position eines Teilchens darstellt.

- ▶ Daher muss erfüllt werden,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x, t)|^2 dx = 1, \quad \forall t \geq 0.$$

Von Quanten- bis zur klassischen Materie

- ▶ Weiters gibt es die Beziehung $\theta_x(x, t) = mv(x, t)$ zwischen der Phase θ und der Geschwindigkeit v , wobei m die Masse eines Teilchens darstellt.
- ▶ Die Konvektionsgleichung für ρ wird mit einer Seite 3 **zweiten Gleichung** für die Phase θ gekoppelt.
- ▶ Diese Seiten 29,31 **zwei Gleichungen** für ρ und θ bilden ein System, das sich von der einfacheren Schrödinger Gleichung ergibt, die folgendermaßen formuliert werden kann.
- ▶ Für die geradlinige Bewegung eines einzigen Teilchens sei die **Wellenfunktion** gegeben durch

Seiten 64, 227

$$\psi(x, t) = Ae^{i(\omega x/v - \omega t)} = Ae^{2\pi i(x/\lambda - \nu t)}$$

wobei A die Amplitude der Schwingungen, $\omega = 2\pi\nu$ die Drehfrequenz und $v = \nu\lambda$ die Geschwindigkeit sind.

- ▶ Mit der Frequenz der Schwingungen ν , ist die Energie E gegeben durch die **Planck-Einstein Formel**,

$$E = 2\pi\hbar\nu.$$

Von Quanten- bis zur klassischen Materie

- ▶ Mit der Wellenlänge λ ist der Impuls p durch die de-Broglie-Einstein Hypothese gegeben

$$p = \frac{2\pi\hbar}{\lambda}.$$

- ▶ Folglich ist die Wellenfunktion gegeben durch

$$\psi(x, t) = Ae^{i(xp - Et)/\hbar}.$$

- ▶ Es gelten

$$\frac{\partial\psi}{\partial x}(x, t) = \frac{ip}{\hbar} Ae^{i(xp - Et)/\hbar}, \quad \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}(x, t) = -\frac{p^2}{\hbar^2} Ae^{i(xp - Et)/\hbar} = -\frac{p^2}{\hbar^2} \psi(x, t)$$

und

$$\frac{\partial\psi}{\partial t}(x, t) = -\frac{iE}{\hbar} Ae^{i(xp - Et)/\hbar} = -\frac{iE}{\hbar} \psi(x, t).$$

Von Quanten- bis zur klassischen Materie

- ▶ Sei V das lokale Potential, dem das Teilchen ausgesetzt wird.
- ▶ Die Gesamtenergie E ist gegeben durch die Summe der kinetischen ($\frac{1}{2}mv^2$) und der potentiellen (V) Energie,

$$E = \frac{1}{2}mv^2 + V = \frac{p^2}{2m} + V.$$

- ▶ Aus

$$E\psi(x, t) = \frac{p^2}{2m}\psi(x, t) + V(x)\psi(x, t)$$

folgt

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - V\psi.$$

- ▶ Diese ist die **Schrödinger-Gleichung** in 1D.
- ▶ In 2D oder 3D mit $\Delta\psi = \psi_{xx} + \psi_{yy}$ bzw. $\Delta\psi = \psi_{xx} + \psi_{yy} + \psi_{zz}$ ist die Schrödinger Gleichung analog gegeben durch

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m} \Delta\psi - V\psi$$

Von Quanten- bis zur klassischen Materie

- ▶ Im letzten Abschnitt sind Formeln und Methoden entwickelt worden, die für die Lösung der Schrödinger Gleichung angepasst werden können.
- ▶ Analog zur Brownschen Bewegung ist eine Lösungsformel für das Anfangswertproblem $(V = 0)$

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}, \quad \psi(x_0) = \psi_0(x)$$

gegeben durch $(D = i\hbar/(2m))$

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\psi_0(x-y)}{\sqrt{4\pi \left(\frac{i\hbar}{2m}\right) t}} \exp\left(-\frac{y^2}{4 \left(\frac{i\hbar}{2m}\right) t}\right) dy.$$

- ▶ Analog zur Brownschen Bewegung kann das Anfangswertproblem auf einem Intervall mit den numerischen Methoden im ab Seite 226 [Numerik Skriptum](#) so gelöst werden, wie im unten stehenden Code gesehen.

Von Quanten- bis zur klassischen Materie

- ▶ **Aufgabe:** Verwende die oben stehende Lösungsformel, um die Lösungen auf der [Wiki-Seite](#) zu kontrollieren.
- ▶ Laut der Arbeit von [Heisenberg](#) können die Position und der Impuls eines Teilchens nicht gleichzeitig bestimmt werden. Die Unschärfe des Ortes x und des Impulses p werden jeweils durch deren statistische Streuung σ_x und σ_p definiert, und die Unschärferelation besagt

$$\sigma_x \cdot \sigma_p \geq \hbar/2.$$

- ▶ [Dirac](#) hat gemeint, die klassische Mechanik kann als Grenzfall der Quantenmechanik angesehen werden, wenn \hbar gegen Null strebt. Dies soll heißen, Newtonsche Gesetze sollen sich von der Schrödinger Gleichung ergeben, wenn $\hbar \rightarrow 0$.
- ▶ In dieser [Arbeit](#) wird über den Grenzübergang im Detail erklärt.

Von Quanten- bis zur klassischen Materie

- ▶ **Aufgabe:** Für eine Pakete-Breite σ und mit $\lambda = \hbar/m$ stelle die Lösung (d.h. $|\psi|^2$, $\Re(\psi)$, $\Im(\psi)$) dynamisch grafisch dar,

$$\psi(x, t) = \sqrt{\frac{\sigma\sqrt{2/\pi}}{\sigma^2 + 2i\hbar t/m}} \exp\left(\frac{2\pi i}{\lambda} \left(x - \frac{\pi t \hbar}{\lambda m}\right) - \frac{\pi^2 \sigma^2}{\lambda^2} - \frac{(x - 2\pi t \hbar / (\lambda m) - i\pi \sigma^2 / \lambda)^2}{\sigma^2 + 2i\hbar t/m}\right).$$

für \hbar groß ($\hbar \approx 1$, quantum) und für \hbar klein ($\hbar \approx 0.1$, klassisch), bzw. m klein (quantum) und für m groß (klassisch).

- ▶ Mit $\lambda = 4\pi\hbar/(mv)$ erfüllt diese Lösung

$$\rho(x, t) = |\psi(x, t)|^2 = \frac{\sigma\sqrt{2/\pi}}{\sqrt{\sigma^4 + 4\hbar^2 t^2/m^2}} \exp\left(-\frac{2\sigma^2(x - vt)^2}{\sigma^4 + 4\hbar^2 t^2/m^2}\right)$$

- ▶ Mit $\hbar \rightarrow 0$ oder $m \rightarrow \infty$ hat die Lösung die Form

$$\rho(x, t) = \sqrt{\frac{2}{\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(x - vt)^2}{\sigma^2/2}\right)$$

die einer reisenden Welle mit Geschwindigkeit v entspricht.

- ▶ **Aufgabe:** Stelle diese dynamisch grafisch dar. Siehe [Video](#).

Von Quanten- bis zur klassischen Materie

- Evolution der Wellenfunktion in einem Intervall:

```
hbar = 1; sig = 0.5; lam = 1; m = 1; i1 = sqrt(-1);
```

$$\lambda = \hbar/m$$

```
Nt = 10000; T = 10; dt = T/Nt;
```

```
Nx = 1024; xi = linspace(-5,+5,Nx+1)';
```

```
dx = xi(2)-xi(1); xc = xi(1:Nx) + 0.5*dx;
```

```
Dx = spdiags(ones(Nx-1,1),1,Nx-1,Nx) ...
```

```
    - spdiags(ones(Nx-1,1),0,Nx-1,Nx);
```

```
Dx = Dx/dx; L = Dx'*Dx;
```

```
% L(1,:) = 0; L(Nx,:) = 0;
```

Diffusionsoperator

```
I = speye(Nx);
```

```
A = -i1*hbar*L/(2*m);
```

```
th = 0.5;
```

```
B1 = (I - th*dt*A);
```

```
B2 = (I + (1-th)*dt*A);
```

Crank-Nicholson
Verfahren

Von Quanten- bis zur klassischen Materie

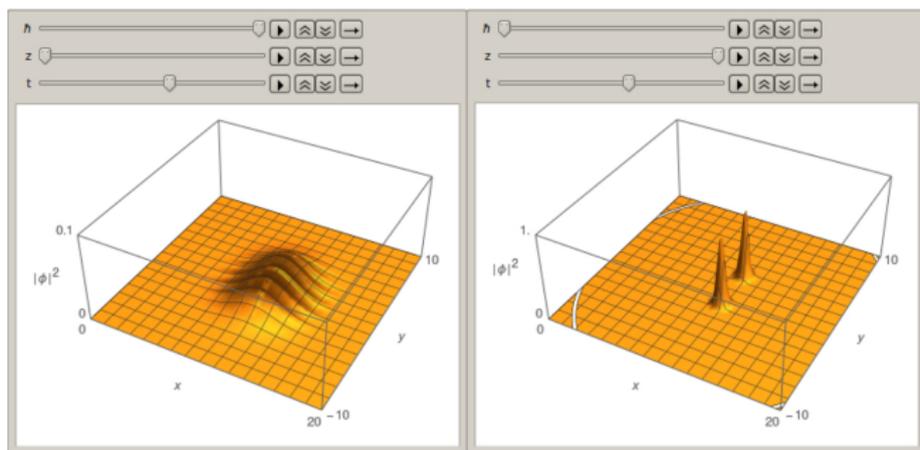
```
t=0;
psi = exp(-pi^2*sig^2/lam^2 ...
          - (xc - il*pi*sig^2/lam).^2/sig^2 ...
          + 2*pi*il*xc/lam);
psi = psi*sqrt(sqrt(2/pi)/sig);
plot(xc,real(psi),'r:', ...
      xc,imag(psi),'g:', ...
      xc,abs(psi).^2,'b')
axis([-5 +5 -2 2]); drawnow;
for k=1:Nt
    t = k*dt;
    psi = B1\ (B2*psi);
    plot(xc,real(psi),'r:', ...
          xc,imag(psi),'g:', ...
          xc,abs(psi).^2,'b')
    axis([-5 +5 -2 2]); drawnow;
end
```

Anfangsbedingungen,
 $\psi(x, 0)$ oben

Zeitschritte

Von Quanten- bis zur klassischen Materie

- ▶ Führe den oben stehenden Code mit den Einstellungen aus: $\lambda = \hbar/m$ mit (a) \hbar groß (oder m klein) und mit (b) \hbar klein (oder m groß). Erkenntnisse?
- ▶ **Aufgabe:** Wiederhole diese Überlegungen in 2D und für zwei Teilchenwellen, um das Doppelspalt-Experiment zu simulieren. Siehe [Video](#).



$$\frac{e^{-\frac{\pi^2 \sigma^2}{\lambda^2} - \frac{(y-y')^2}{\sigma^2 + \frac{2it\hbar}{m}} - \frac{(x - \frac{i\pi\sigma^2 - 2it\hbar}{\hbar\lambda})^2}{\sigma^2 + \frac{2it\hbar}{m}} + \frac{2i\pi(x - \frac{i\pi\sigma^2 - 2it\hbar}{\hbar\lambda})}{\lambda}}{\sqrt{1 + e^{-\frac{2y^2}{\sigma^2}}} \sqrt{\pi} (\sigma^2 + \frac{2it\hbar}{m})} \sigma + \frac{e^{-\frac{\pi^2 \sigma^2}{\lambda^2} - \frac{(y+y')^2}{\sigma^2 + \frac{2it\hbar}{m}} - \frac{(x - \frac{i\pi\sigma^2 - 2it\hbar}{\hbar\lambda})^2}{\sigma^2 + \frac{2it\hbar}{m}} + \frac{2i\pi(x - \frac{i\pi\sigma^2 - 2it\hbar}{\hbar\lambda})}{\lambda}}{\sqrt{1 + e^{-\frac{2y^2}{\sigma^2}}} \sqrt{\pi} (\sigma^2 + \frac{2it\hbar}{m})} \sigma$$