

Everybody believes in the exponential law of errors; the experimenters, because they think it can be proved by mathematics; and the mathematicians, because they believe it has been established by observation,

Lippman

in a letter to Poincaré

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

In diesem Modul sollen wesentliche statistische Funktionen unmittelbar vom Würfeln abgeleitet werden. Überraschenderweise - auch für mich - ist das weitaus aufwendiger und fehleranfälliger als zunächst gedacht.

- Das Ziel *war* lange Zeit noch nicht ganz erreicht - irgendwo steckt noch ein Fehler der Größe "Wurzel 2". Meine frühere Aufforderung an die Leser, aufzupassen und richtige Lösungen einzuschicken, hat nach vielen Jahren Früchte getragen. Herr **Dr. Felix Scheliga** aus Hamburg hat den Fehler gefunden. Dazu mehr im Text.
- Da hier auf alle Details und Fallstricke ausführlich eingegangen wird, wurde der Modul ziemlich lang und unübersichtlich. Eine Kurzfassung ohne genaue Ableitung der kombinatorischen Formeln usw. findet sich in einem [zweiten Modul](#).
- Aus Gründen der Schreibökonomie und besseren Lesbarkeit wird in diesem Modul auf die *Kursivschreibweise* der Variablen verzichtet.

### Die absolute Wahrscheinlichkeit, eine bestimmte Zahl zu würfeln

Wir betrachten die Wahrscheinlichkeit  $W_N(x)$ , mit  $N$  Würfeln, die alle *binär* sind, d. h. nur Zahl oder Wappen, rot oder grün, oder wie wir es hier verwenden, die Zahl  $+1$  oder  $-1$  als Augenzahl haben können. Nach einem Wurf addieren wir (vorzeichenrichtig) und bekommen als Ergebnis eine Zahl  $x$  die zwischen  $-N$  und  $+N$  liegen muss. Die Definition dieser Wahrscheinlichkeit ist

$$W_N(x) = \frac{\text{Zahl der Möglichkeiten } x \text{ zu würfeln}}{\text{Zahl aller Möglichkeiten in einem Wurf}} = \frac{P_x}{P_N}$$

Wie groß ist  $P_x$  und  $P_N$ ?

- $P_N$ , die Anzahl *aller* Möglichkeiten des Ausgangs des Würfels, ist leicht zu konstruieren:  
Mit  $N = 1$  gibt es 2 Möglichkeiten ( $+1$  und  $-1$ );  $P_N = 2$   
Mit  $N = 2$  gibt es 4 Möglichkeiten ( $+1/+1$  und  $+1/-1$  und  $-1/+1$  und  $-1/-1$ );  $P_N = 4$   
Mit  $N = 3$  gibt es 8 Möglichkeiten ( $+1/+1/+1$  und  $+1/+1/-1$  und ....);  $P_N = 8$ .
- Eine Tabelle der Möglichkeiten zeigt dies graphisch; die gelben Spalten in den einzelnen Tabellen zeigen die möglich Ergebnisse  $x$

N = Zahl der Würfel	Mögliche Würfe und Summe (gelb)	P <sub>N</sub> = Zahl der möglichen Würfe																				
1	<table border="1"><tr><td>+1</td><td>+1</td><td>-1</td><td>-1</td></tr></table>	+1	+1	-1	-1	2																
+1	+1	-1	-1																			
2	<table border="1"><tr><td>+1/+1</td><td>+2</td><td>-1/+1</td><td>0</td></tr><tr><td>+1/-1</td><td>0</td><td>-1/-1</td><td>-2</td></tr></table>	+1/+1	+2	-1/+1	0	+1/-1	0	-1/-1	-2	4												
+1/+1	+2	-1/+1	0																			
+1/-1	0	-1/-1	-2																			
3	<table border="1"><tr><td>+1/+1/+1</td><td>+3</td><td>-1/+1/+1</td><td>+1</td></tr><tr><td>+1/+1/-1</td><td>+1</td><td>-1/+1/-1</td><td>-1</td></tr><tr><td>+1/-1/+1</td><td>+1</td><td>-1/-1/+1</td><td>-1</td></tr><tr><td>+1/-1/-1</td><td>-1</td><td>-1/-1/-1</td><td>-3</td></tr></table>	+1/+1/+1	+3	-1/+1/+1	+1	+1/+1/-1	+1	-1/+1/-1	-1	+1/-1/+1	+1	-1/-1/+1	-1	+1/-1/-1	-1	-1/-1/-1	-3	8				
+1/+1/+1	+3	-1/+1/+1	+1																			
+1/+1/-1	+1	-1/+1/-1	-1																			
+1/-1/+1	+1	-1/-1/+1	-1																			
+1/-1/-1	-1	-1/-1/-1	-3																			
4	<table border="1"><tr><td>+1/+1/+1/+1</td><td>+4</td><td>-1/+1/+1/+1</td><td>+2</td></tr><tr><td>+1/+1/+1/-1</td><td>+2</td><td>-1/+1/+1/-1</td><td>0</td></tr><tr><td>...</td><td>...</td><td>...</td><td>...</td></tr><tr><td>+1/-1/-1/+1</td><td>0</td><td>-1/-1/-1/+1</td><td>-2</td></tr><tr><td>+1/-1/-1/-1</td><td>-2</td><td>-1/-1/-1/-1</td><td>-4</td></tr></table>	+1/+1/+1/+1	+4	-1/+1/+1/+1	+2	+1/+1/+1/-1	+2	-1/+1/+1/-1	0	...	...	...	...	+1/-1/-1/+1	0	-1/-1/-1/+1	-2	+1/-1/-1/-1	-2	-1/-1/-1/-1	-4	16
+1/+1/+1/+1	+4	-1/+1/+1/+1	+2																			
+1/+1/+1/-1	+2	-1/+1/+1/-1	0																			
...	...	...	...																			
+1/-1/-1/+1	0	-1/-1/-1/+1	-2																			
+1/-1/-1/-1	-2	-1/-1/-1/-1	-4																			

Das Bildungsgesetz ist klar:

$$P_N = 2^N$$

Dabei haben wir aber unausgesprochen eine *sehr wichtige* Annahme gemacht: .

**Die Würfel sind unterscheidbar!**

In den obigen Tabellen ist die *erste* Zahl immer der 1. Würfel, die 2. Zahl immer der 2. Würfel usw., d.h. die Würfel tragen fiktive Nummern oder Farben als Unterscheidungsmerkmal. In anderen Worten: wir können für ein- und dasselbe Ergebnis unterscheiden auf wie viel verschiedene Arten wir es bekommen können. Falls wir "Würfel" mit mehr als 2 "Augen" betrachten, bekommen wir, leicht einzusehen, für den allgemeinen Fall eines Würfels mit A Augen die nachfolgende Formel. Wer's nicht leicht einsieht betätigt [diesen Link](#).

$$P_N = A^N$$

Es bleibt, P<sub>x</sub> (= Zahl der Möglichkeiten x zu würfeln) zu bestimmen. Auch das lässt sich durch nachdenken und probieren ermitteln; allerdings müssen wir mehr Aufwand treiben und *sehr sorgfältig* überlegen, was genau ermittelt werden soll.

Betrachten wir dazu ein Beispiel. Wir haben 10 unterscheidbare *digitale* Würfel (N = 10), und fragen nach der *Zahl der Möglichkeiten*, für die *Summe x* eine +2, eine +3 oder eine -8 zu würfeln.

Wie auch immer die Würfel fallen, es werden N<sup>+</sup> Würfel die +1 zeigen und N<sup>-</sup> Würfel die -1. Für unser Beispiel gelten die Gleichungen

Summe x = +2	Summe x = +3	Summe x = -8
N <sup>+</sup> + N <sup>-</sup> = 10	N <sup>+</sup> + N <sup>-</sup> = 10	N <sup>+</sup> + N <sup>-</sup> = 10
N <sup>+</sup> - N <sup>-</sup> = 2	N <sup>+</sup> - N <sup>-</sup> = 3	N <sup>+</sup> - N <sup>-</sup> = -8
oder	oder	oder
2 + N <sup>-</sup> + N <sup>-</sup> = 10	3 + N <sup>-</sup> + N <sup>-</sup> = 10	N <sup>-</sup> - 8 + N <sup>-</sup> = 10
N <sup>-</sup> = 4	N <sup>-</sup> = 7/3	N <sup>-</sup> = 9
N <sup>+</sup> = 6	????	N <sup>+</sup> = 1

**Erste wichtige Erkenntnis:** Es gibt *keine* Möglichkeit, eine **3** oder verallgemeinert, eine *ungerade* ganze Zahl zu würfeln, da die allgemeine Gleichung  $N^- = (10 - x)/2$  für ungerade  $x$  keine ganzzahligen Werte für  $N^-$  hergibt.

Man kann das auch anders ausdrücken, indem man die gesamte Augenzahl  $x$  über die Zahl der  $N^+$  oder  $N^-$  Würfe koppelt, es gilt

$$x = N^+ - (N - N^+) = 2N^+ - N$$

$$N^+ = \frac{1}{2} \cdot (x + N)$$

Dabei sind aber immer nur *ganzzahlige* Werte für die  $N$  und  $x$  zugelassen!

Wir können  $P_x$  damit auch über  $P_{N^+}$ , die Zahl der Möglichkeiten  $N^+$  mal eine **+1** zu würfeln, berechnen. Das ist einfacher.  $P_x$  würden wir dann erhalten, indem wir in der abzuleitenden Formel  $N^+$  durch  $\frac{1}{2} \cdot (x + N)$  ersetzen.

Dabei haben wir aber ein mögliches Problem - hier liegt ein erster großer Fallstrick der Kombinatorik. Denn bei **geradzahligem** Würfelanzahl  $N$  können wir nur **geradzahlige** Augenzahlen  $x$  erzielen, und bei **ungeradzahligem** Würfelanzahl  $N$  werden wir **ungerade**  $x$  haben.

Da wir aber eine Formel suchen, die für *alle*  $N$  gilt, wir aber für jedes gegebene  $N$  immer nur *die Hälfte* der insgesamt vorhandenen Möglichkeiten sehen, müssen wir bei der Berechnung von  $P_x$  später etwas vorsichtig sein.

Aber nun zu  $P_x$  oder  $P_{N^+}$ . Natürlich ist die Formel *dazu bekannt*, wir wollen sie hier aber ausführlich ableiten. Um Bildungsgesetze in der Kombinatorik zu erkennen oder zu überprüfen, empfiehlt es sich zunächst immer, eine Tabelle zu machen. Bleiben wir also bei  $N = 10$  Würfeln und betrachten die erzielbaren Ergebnisse für die **10** Möglichkeiten für  $N^+$ . Dabei bedenken wir, daß die Würfel *unterscheidbar* sind. Man kann das so ausdrücken:

Würfeln wir mit **10** roten, grünen, blauen, ... Würfel, sind auch die *Kombinationen*

**-1, +1, +1, ...**

**+1, -1, +1, ...**

usw. alle unterscheidbar - obwohl das Ergebnis immer **+9** ist.

Hier versteckt sich schon die nächst wichtige Lehre: Wir müssen nicht nur aufpassen, ob die *Würfel* unterscheidbar oder ununterscheidbar sind, sondern diese Frage auch auf *Kombinationen* anwenden. Selbst wenn die obigen Würfel alle rot und damit ununterscheidbar wären, könnten wir dennoch evtl. die *Kombinationen* noch unterscheiden. Wir werden das gleich näher kennenlernen.

Jetzt noch schnell ein weiterer Punkt. Falls wir mit *einem* Würfel **10** mal würfeln, statt mit **10** Würfeln **1** mal, erwarten wir - statistisch - dasselbe Ergebnis. Das ist die *"Zeitmittel = Scharmittel" Hypothese*, die uns schon früher begegnet ist. Das scheint zwar selbstverständlich zu sein, aber bei genauem Hinsehen kann es hier durchaus Probleme geben.

Falls wir mit *einem* Würfel **3** mal hintereinander würfeln würden, drückt sich die jetzt sinnlose Unterscheidbarkeit des Würfels in der *Unterscheidbarkeit des Wegs* zum Ziel aus: Die Sequenz **+1, +1, -1** ist ein *anderer* Weg zum Endpunkt **+2** als die Sequenz **-1, +1, +1**.

Hier ist die entsprechende Tabelle

N <sup>+</sup>	N <sup>-</sup>	Σ	Zahl Möglichkeiten	Kommentar	Formel P <sub>N<sup>+</sup></sub> =																																																		
0	10	-10	1 <div style="border: 1px solid black; padding: 5px; margin: 5px auto; width: fit-content;"> <div style="text-align: center; color: red; font-weight: bold; margin-bottom: 5px;">Würfelnummer</div> <table style="width: 100%; border-collapse: collapse; font-size: small;"> <tr><td style="border: 1px solid black; padding: 2px;">1</td><td style="border: 1px solid black; padding: 2px;">2</td><td style="border: 1px solid black; padding: 2px;">3</td><td style="border: 1px solid black; padding: 2px;">4</td><td style="border: 1px solid black; padding: 2px;">5</td><td style="border: 1px solid black; padding: 2px;">6</td><td style="border: 1px solid black; padding: 2px;">7</td><td style="border: 1px solid black; padding: 2px;">8</td><td style="border: 1px solid black; padding: 2px;">9</td><td style="border: 1px solid black; padding: 2px;">10</td></tr> <tr><td style="border: 1px solid black; padding: 2px;">-1</td><td style="border: 1px solid black; padding: 2px;">-1</td><td style="border: 1px solid black; padding: 2px;">-1</td><td style="border: 1px solid black; padding: 2px;">-1</td><td style="border: 1px solid black; padding: 2px;">-1</td><td style="border: 1px solid black; padding: 2px;">-1</td><td style="border: 1px solid black; padding: 2px;">-1</td><td style="border: 1px solid black; padding: 2px;">-1</td><td style="border: 1px solid black; padding: 2px;">-1</td><td style="border: 1px solid black; padding: 2px;">-1</td></tr> </table> </div>	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1		?																														
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10																																														
-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1																																														
1	9	-8	10 <div style="border: 1px solid black; padding: 5px; margin: 5px auto; width: fit-content;"> <div style="text-align: center; color: red; font-weight: bold; margin-bottom: 5px;">Würfelnummer</div> <table style="width: 100%; border-collapse: collapse; font-size: small;"> <tr><td style="border: 1px solid black; padding: 2px;">1</td><td style="border: 1px solid black; padding: 2px;">2</td><td style="border: 1px solid black; padding: 2px;">3</td><td style="border: 1px solid black; padding: 2px;">4</td><td style="border: 1px solid black; padding: 2px;">5</td><td style="border: 1px solid black; padding: 2px;">6</td><td style="border: 1px solid black; padding: 2px;">7</td><td style="border: 1px solid black; padding: 2px;">8</td><td style="border: 1px solid black; padding: 2px;">9</td><td style="border: 1px solid black; padding: 2px;">10</td></tr> <tr><td style="border: 1px solid black; padding: 2px;">+1</td><td style="border: 1px solid black; padding: 2px;">-1</td><td style="border: 1px solid black; padding: 2px;">-1</td><td style="border: 1px solid black; padding: 2px;">-1</td><td style="border: 1px solid black; padding: 2px;">-1</td><td style="border: 1px solid black; padding: 2px;">-1</td><td style="border: 1px solid black; padding: 2px;">-1</td><td style="border: 1px solid black; padding: 2px;">-1</td><td style="border: 1px solid black; padding: 2px;">-1</td><td style="border: 1px solid black; padding: 2px;">-1</td></tr> <tr><td style="border: 1px solid black; padding: 2px;">-1</td><td style="border: 1px solid black; padding: 2px;">+1</td><td style="border: 1px solid black; padding: 2px;">-1</td><td style="border: 1px solid black; padding: 2px;">-1</td><td style="border: 1px solid black; padding: 2px;">-1</td><td style="border: 1px solid black; padding: 2px;">-1</td><td style="border: 1px solid black; padding: 2px;">-1</td><td style="border: 1px solid black; padding: 2px;">-1</td><td style="border: 1px solid black; padding: 2px;">-1</td><td style="border: 1px solid black; padding: 2px;">-1</td></tr> <tr><td colspan="10" style="border: 1px solid black; padding: 2px; text-align: center;">10 Zeilen.....</td></tr> <tr><td style="border: 1px solid black; padding: 2px;">-1</td><td style="border: 1px solid black; padding: 2px;">-1</td><td style="border: 1px solid black; padding: 2px;">-1</td><td style="border: 1px solid black; padding: 2px;">-1</td><td style="border: 1px solid black; padding: 2px;">-1</td><td style="border: 1px solid black; padding: 2px;">-1</td><td style="border: 1px solid black; padding: 2px;">-1</td><td style="border: 1px solid black; padding: 2px;">-1</td><td style="border: 1px solid black; padding: 2px;">-1</td><td style="border: 1px solid black; padding: 2px;">+1</td></tr> </table> </div>	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	+1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	+1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	10 Zeilen.....										-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	+1	<p>Nicht nur die <i>Würfel</i>, auch alle ihre <i>Anordnungen</i> sind <i>unterscheidbar</i>.</p> <p>Dies bedeutet: Wenn man einen bestimmten Würfel auf <b>+1</b> setzt und dann die Möglichkeiten für die anderen Würfel "durchdekliniert", wird keine der auftretenden Kombinationen identisch sein mit den Kombinationen, die man erhält wenn man diese "Deklinationsübungen" mit einem anderen auf <b>+1</b> gesetzten Würfel durchführt.</p>	N (?)
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10																																														
+1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1																																														
-1	+1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1																																														
10 Zeilen.....																																																							
-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	+1																																														

2	8	-6	<p><b>45</b></p> <p>Wir bräuchten jetzt eine <i>dreidimensionale</i> Tabelle - ersatzweise machen wir <i>mehrere</i> Tabellen</p> <p><b>1. Tabelle: 1. Würfel immer +1</b></p> <table border="1" style="margin: 5px auto;"> <thead> <tr> <th colspan="10" style="text-align: center; color: red;">Würfelnummer</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td style="text-align: center;">1</td><td style="text-align: center;">2</td><td style="text-align: center;">3</td><td style="text-align: center;">4</td><td style="text-align: center;">5</td><td style="text-align: center;">6</td><td style="text-align: center;">7</td><td style="text-align: center;">8</td><td style="text-align: center;">9</td><td style="text-align: center;">10</td> </tr> <tr> <td style="text-align: center; color: blue;">+1</td><td style="text-align: center; color: blue;">+1</td><td style="text-align: center; color: pink;">-1</td><td style="text-align: center;">-1</td><td style="text-align: center;">-1</td><td style="text-align: center;">-1</td><td style="text-align: center;">-1</td><td style="text-align: center;">-1</td><td style="text-align: center;">-1</td><td style="text-align: center;">-1</td> </tr> <tr> <td style="text-align: center; color: blue;">+1</td><td style="text-align: center;">-1</td><td style="text-align: center; color: blue;">+1</td><td style="text-align: center;">-1</td><td style="text-align: center;">-1</td><td style="text-align: center;">-1</td><td style="text-align: center;">-1</td><td style="text-align: center;">-1</td><td style="text-align: center;">-1</td><td style="text-align: center;">-1</td> </tr> <tr> <td colspan="10" style="text-align: center;">9 Zeilen.....</td> </tr> <tr> <td style="text-align: center; color: blue;">+1</td><td style="text-align: center;">-1</td><td style="text-align: center;">-1</td><td style="text-align: center;">-1</td><td style="text-align: center;">-1</td><td style="text-align: center;">-1</td><td style="text-align: center;">-1</td><td style="text-align: center;">-1</td><td style="text-align: center;">-1</td><td style="text-align: center; color: blue;">+1</td> </tr> </tbody> </table> <p><b>2. Tabelle: 2. Würfel immer +1</b></p> <table border="1" style="margin: 5px auto;"> <thead> <tr> <th colspan="10" style="text-align: center; color: red;">Würfelnummer</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td style="text-align: center;">1</td><td style="text-align: center;">2</td><td style="text-align: center;">3</td><td style="text-align: center;">4</td><td style="text-align: center;">5</td><td style="text-align: center;">6</td><td style="text-align: center;">7</td><td style="text-align: center;">8</td><td style="text-align: center;">9</td><td style="text-align: center;">10</td> </tr> <tr> <td style="text-align: center;">+1</td><td style="text-align: center; color: blue;">+1</td><td style="text-align: center; color: pink;">-1</td><td style="text-align: center;">-1</td><td style="text-align: center;">-1</td><td style="text-align: center;">-1</td><td style="text-align: center;">-1</td><td style="text-align: center;">-1</td><td style="text-align: center;">-1</td><td style="text-align: center;">-1</td> </tr> <tr> <td style="text-align: center;">-1</td><td style="text-align: center; color: blue;">+1</td><td style="text-align: center; color: blue;">+1</td><td style="text-align: center;">-1</td><td style="text-align: center;">-1</td><td style="text-align: center;">-1</td><td style="text-align: center;">-1</td><td style="text-align: center;">-1</td><td style="text-align: center;">-1</td><td style="text-align: center;">-1</td> </tr> <tr> <td colspan="10" style="text-align: center;">9 Zeilen.....</td> </tr> <tr> <td style="text-align: center;">-1</td><td style="text-align: center; color: blue;">+1</td><td style="text-align: center;">-1</td><td style="text-align: center;">-1</td><td style="text-align: center;">-1</td><td style="text-align: center;">-1</td><td style="text-align: center;">-1</td><td style="text-align: center;">-1</td><td style="text-align: center;">-1</td><td style="text-align: center; color: blue;">+1</td> </tr> </tbody> </table> <p><b>3. Tabelle: 3. Würfel +1; 9 Möglichkeiten für den Rest.</b></p> <p style="text-align: center;">.....</p> <p style="text-align: center;">Und so weiter - Insgesamt <b>10</b> Tabellen</p>	Würfelnummer										1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	+1	+1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	+1	-1	+1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	9 Zeilen.....										+1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	+1	Würfelnummer										1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	+1	+1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	+1	+1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	9 Zeilen.....										-1	+1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	+1	<p>Es gibt <b>9</b> Möglichkeiten falls der 1. Würfel <b>+1</b> zeigt.</p> <p>Es gibt <b>9</b> Möglichkeiten falls der 2. Würfel <b>+1</b> zeigt.</p> <p>usw.; das Ganze <b>N</b> mal.</p> <p><b>Aber:</b> Es gibt trotz <i>unterscheidbarer</i> Würfel jetzt <b>ununterscheidbare Anordnungen:</b></p> <p>Ob der <b>m</b>-te Würfel auf <b>+1</b> gesetzt ist und der <b>k</b>-te Würfel bei der "Durchdeklinatation" <b>+1</b> zeigt ist <i>un</i>unterscheidbar von der Anordnung, in der der <b>k</b>-te Würfel auf <b>+1</b> gesetzt ist und der <b>m</b>-te Würfel beim "Durchdeklinieren" <b>+1</b> zeigt.</p> <p>Bei allen Kombinationen gibt es zwei dieser <i>un</i>unterscheidbaren <i>Anordnungen</i>. In den beiden ausgeführten Tabellen sind sie rosa markiert! Nur die <i>Hälfte</i> aller Möglichkeiten darf also berücksichtigt werden - wir müssen durch <b>2</b> dividieren. Insgesamt erhalten wir <math>(9 \cdot 10)/2 = 45</math> Möglichkeiten eine <b>8</b> zu würfeln.</p>	$(N \cdot (N - 1))/2$ (?)
Würfelnummer																																																																																																																													
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10																																																																																																																				
+1	+1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1																																																																																																																				
+1	-1	+1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1																																																																																																																				
9 Zeilen.....																																																																																																																													
+1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	+1																																																																																																																				
Würfelnummer																																																																																																																													
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10																																																																																																																				
+1	+1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1																																																																																																																				
-1	+1	+1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1																																																																																																																				
9 Zeilen.....																																																																																																																													
-1	+1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	+1																																																																																																																				

3	7	-4	<p><b>120</b></p> <p style="color: red;"><i>Siehe nebenstehenden Text</i></p>	<p>Wir setzen einen 1. Würfel auf <b>+1</b>: Dann haben wir <math>(N - 1)</math> Möglichkeiten für einen weiteren Würfel mit <b>+1</b> und <math>(N - 2)</math> Möglichkeiten für den letzten Würfel, der <b>+1</b> zeigen muß.</p> <p>Insgesamt gibt es <math>N(N - 1)(N - 2)</math> Möglichkeiten der "Durchdeklinatation"</p> <p>Darunter sind aber jeweils <b>6</b> <i>un</i>unterscheidbare Anordnungen. Dies wird klar, wenn wir beispielsweise die Anordnungsmatrix betrachten, bei der die Würfel Nr. 1, Nr. 4 und Nr. 8 die <b>+1</b> zeigen. Alle diese Anordnungen sind <i>un</i>unterscheidbar!</p> <p>Die Farbcodierung bedeutet:</p> <p style="color: red;">rot = primär "gesetzt"</p> <p style="color: blue;">blau = sekundär gesetzt</p> <p style="color: green;">grün = verbeibende Möglichkeit</p>	$(N(N - 1)(N - 2))/1 \cdot 2 \cdot 3$ (?)
---	---	----	---	--	---

+	-	-	+	-	-	+	-	-
+	-	-	+	-	-	-	+	-
+	-	-	+	-	-	+	-	-
+	-	-	+	-	-	-	+	-
+	-	-	+	-	-	+	-	-
+	-	-	+	-	-	+	-	-

**Allgemein**

			...	(Zahl der möglichen "Deklinationen")/(Zahl der ununterscheidbaren Anordnungen) Das Bildungsgesetz ist offenbar
x	10 - x	-10 ... +10		$P_{N^+} = \frac{N \cdot (N - 1) \cdot (N - 2) \cdot \dots \cdot (N - N^+ + 1)}{1 \cdot 2 \cdot 3 \cdot \dots \cdot N^+}$

Das ist dieselbe Formel wie bei der [Zahl der Anordnungen von Leerstellen](#). Bevor wir die obige Formel weiterentwickeln, aber noch einige Anmerkungen zu den **Fallstricken der Kombinatorik**.

- Man muß sorgfältig trennen zwischen unterscheidbaren oder *un*unterscheidbaren **Würfeln** (oder Teilchen) und **Anordnungen**. Die *Würfel* in obiger Tabelle sind *unterscheidbar* (durch ihre Nummer bzw. Spalte in der Tabelle), einige ihrer *Anordnungen* in der obigen Systematik aber *nicht*. Man müßte ein *zweites* Merkmal einführen (in der Tabelle ist das die Farbe für die Nummer der "Setzung"), um auch alle Anordnungen unterscheiden zu können.
- Die unterscheidbaren Anordnungen sind oft leichter zu sehen, wenn man nicht mit **N** Würfeln gleichzeitig wirft, sondern mit *einem* Würfel **N** mal - das Ergebnis wird *dasselbe* sein, aber man wird identische Anordnungen nicht doppelt zählen. Dies ist am einfachsten in einer [Graphik](#) darstellbar.

Die Sprache ist manchmal zu begrenzt, um die Feinheiten eindeutig darzustellen oder gibt Anlaß zu Mißverständnissen. Betrachten wir einen [Satz aus obiger](#) Tabelle:

- Wir setzen einen 1. Würfel auf +1: Dann haben wir (N - 1) Möglichkeiten für einen weiteren Würfel mit +1 und (N - 2) Möglichkeiten für den letzten Würfel, der +1 zeigen muß.*
- Man hätte auch schreiben können:  
Wir setzen *die* 1. Münze auf +1: Dann haben wir (N - 1) Möglichkeiten für *die* 2. Münze mit +1 und (N - 2) Möglichkeiten für *die* 3. Münze die +1 zeigen muß.
- Oder vielleicht:  
Wir setzen *den* 1. Würfel auf +1: Dann haben wir (N - 1) Möglichkeiten für *den* 2. Würfel mit +1 und (N - 2) Möglichkeiten für *den* 3. Würfel, der +1 zeigen muß.
- Das wäre nicht falsch gewesen, aber möglicherweise mißdeutig. Denn mit den Bezeichnungen 1., 2. und 3. Würfel meinen wir in diesem Zusammenhang nicht die Würfel mit den *Nummern* 1, 2 und 3 (das Unterscheidungsmerkmal der Würfel), sondern die *Reihenfolge*, in der wir die Werte "setzen".

Das größte Problem ist vielleicht, daß normale Menschen kein Gefühl für das ungefähre Ergebnis einer kombinatorischen Aufgabe haben. Wieviele fünfstellige Zahlen kann man mit den Ziffern **0, 3, 5, 9** bilden? Wenn die **0** nicht am Anfang stehen darf? Wenn keine Ziffer mehr als **2** mal vorkommen darf? Wenn jede Ziffer mindestens **1** mal vorkommen muß?

- Wenige Menschen werden bei dieser simplen Aufgabe ein Gefühle für die Größenordnung der Antwort und die Reihenfolge der Lösungen geordnet nach Größe haben - es hilft nichts, man muß rechnen.

Jetzt aber zu unserer Formel für  $P_{N^+}$ . Wie bei der Berechnung der Leerstellenkonzentration, erweitern wir erst mit **(N - x)!** um eine besserer Darstellung zu bekommen. Die Ausgangsformel ist

$$P_+ = \frac{N(N - 1)(N - 2) \cdot \dots \cdot (N - N^+ + 1)}{1 \cdot 2 \cdot 3 \cdot \dots \cdot N^+} = \frac{N(N - 1)(N - 2) \cdot \dots \cdot (N - N^+ + 1)}{N^!}$$

- Multiplizieren mit  $(N - N^+)!/(N - N^+)!$  ergibt **N!** im Zähler und  $N^! \cdot (N - N^+)!$  im Nenner, wir erhalten

$$P_{N^+} = \frac{N!}{N^! \cdot (N - N^+)!} = \binom{N}{N^+}$$

Diese Formel hat einen eigenen Namen: Es ist der **Binominalkoeffizient** von **N** und **N<sup>+</sup>**; geschrieben in Klammern ohne Bruchstrich wie oben gezeigt.

- Der Binominalkoeffizient ist die Lösung einer Standardaufgabe der [Kombinatorik](#), die in verschiedenster Gestalt immer wieder vorkommt: *Wieviele Möglichkeiten gibt es, aus N Elementen N<sup>+</sup> auszuwählen, wobei wir zwar die Elemente, nicht aber die Anordnungen unterscheiden.*

In unserer ursprünglichen Fragestellung wollten wir aber nicht **N<sup>+</sup>** ausrechnen, d.h. die Zahl der Möglichkeiten, daß **N<sup>+</sup>** von **N** Würfeln **+1** zeigen (oder nach **N** mal würfeln mit einem Würfel **N<sup>+</sup>** mal die **+1** kam), sondern **P(x)**, die Zahl der Möglichkeiten die Zahl **x** zu würfeln. Wie [weiter oben](#) schon festgehalten, müssen wir dazu **N<sup>+</sup>** durch **1/2 · (x + N)** substitutionieren. Wir erhalten dann für **P<sub>x</sub>**

$$P_x = \frac{N!}{\{1/2 \cdot (x + N)\}! \cdot \{N - [1/2 \cdot (x + N)]\}!}$$

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

Damit können wir unsere ursprüngliche Fragestellung beantworten. Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit  $W_N(x)$ , 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. Die Definition dieser Wahrscheinlichkeit war

- $W_N(x) = (\text{Zahl der Möglichkeiten } x \text{ zu würfeln}) / (\text{Zahl aller Möglichkeiten in einem Wurf}) = P_x / P_N$ . Somit ergibt sich mit den jetzt bekannten Formeln für  $P_x$  und  $P_N = 2^N$

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

Diese Formel ist noch exakt richtig.

- Sie gibt jedoch *nur* sinnvolle Antworten, falls  $N$  und  $x$  *beide* geradzahlig, *oder beide* ungeradzahlig sind.
- Das ist leicht zu sehen: Setzen wir z.B.  $N = 8$  und  $x = 3$ , bekommen wir im Nenner die Ausdrücke  $5,5!$  und  $2,5!$  - und das gibt es nicht (zumindest nicht in der Kombinatorik).

In anderen Worten: Unsere obige Formel deckt nur *die Hälfte* aller Möglichkeiten ab, die wir im allgemeinen Fall haben werden. Bei der jetzt erfolgenden Verallgemeinerung müssen wir deshalb schreiben:

$$W_N(x) = 0,5 \cdot \frac{N!}{2^N \cdot \{1/2 \cdot (N + x)\}! \cdot \{1/2 \cdot (N - x)\}!}$$

### Die genäherte Wahrscheinlichkeitsdichte

Da man mit Fakultäten nicht allzuviel anfangen kann, wird jetzt mit Hilfe der Stirlingsche Formel *mathematisch genähert*. Aus Gründen, die wir später noch genauer diskutieren, verwenden wir hier aber die "bessere" Version der Stirlingschen Formel, nämlich den Ausdruck

- Stirlingsche Formel:

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

Es bleibt noch die reine Rechenaufgabe, aus  $W_N(x)$  mit Hilfe der obigen Stirlingschen Formel und evtl. weiteren sinnvoller Näherungen eine passende *analytische* Gleichung zu machen. Da der Umgang mit der Stirlingschen Formel geübt sein will, wollen wir das in einer Übungsaufgabe tun.

- Dabei gibt es noch einige weitere Überraschungen mathematischer Art; es lohnt sich unbedingt hier zu üben oder zumindest die Lösung der Aufgabe anzuschauen.

## Übung 6-5

Umgang mit Fakultäten und der Stirlingformel

Als **Ergebnis** erhalten wir unter der Bedingung  $x/N \ll 1$ , mit der von **Dr. Felix Scheliga** beigesteuerten richtigen Rechnung, und nur für Fälle weit weg von den maximal (bzw. minimalen) möglichen Würfelergebnissen (im Beispiel  $\pm 10$ ):

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

Das sollte eigentlich die Gaußsche Normalverteilung sein, die sich in der Normalform für den (hier vorliegenden) eindimensionalen Fall allgemein **so schreibt**

$$w_G(x) = \left( \frac{1}{2\sigma^2 \cdot \pi} \right)^{1/2} \cdot \exp - \frac{x^2}{2\sigma^2}$$

● Offenbar ist also  $N = 2\sigma^2$  zu setzen.

Die obige Formel oder Gauss Verteilung gibt jetzt auch **sinnvolle** Antworten auf Fragen, die unsere Ausgangsformel verweigert hätte. Wir erhalten jetzt auch Zahlenwerte falls wir  $x$  **ungeradzahlig** wählen und  $N$  **geradzahlig** (und umgekehrt). Besteht hier ein Zusammenhang?

Ja! Denn wir suchen ja eine Formel, die für **alle**  $N$  gilt, bisher erhalten wir aber für jedes gegebene  $N$  immer nur die **die Hälfte** der insgesamt vorhandenen Möglichkeiten aus der Menge der  $N$ . In anderen Worten: Wenn ich nicht **weiß**, ob  $N$  geradzahlig oder ungeradzahlig ist, wird eine Wahrscheinlichkeit z.B eine geradzahlige Zahl  $x$  zu würfeln nur halb so hoch sein wie für geradzahlige  $N$  errechnet, denn die Wahrscheinlichkeit für ein geradzahliges  $N$  ist natürlich  $\frac{1}{2}$ .

Die Gaussverteilung (wie auch unsere analytische Formel) ist keine **absolute** Wahrscheinlichkeit mehr, sondern eine **Wahrscheinlichkeitsdichte** (das wird **gleich** im Detail erläutert).

● Sie gibt uns **auch** einen Zahlenwert für die Wahrscheinlichkeits**dichte**, die Zahl **6,5** oder auch die Zahl  $\pi$  zu würfeln. Sogas gibt es nicht, und damit kann es auch keine **absolute** Wahrscheinlichkeit dafür geben. Zu **absoluten** Wahrscheinlichkeiten für die Fälle, die es gegen kann, kommt man, indem man den (Mittel)wert der Gaussverteilung in dem Intervall zwischen den wirklich erreichbaren Werten mit dem Wert des Intervalls multipliziert - und in unserem Fall wäre dieses Intervall = **2**, da wir ja immer nur von geraden zu geraden oder ungeraden zu ungeraden Zahlen "materialisieren" dürfen.

In der Ableitung der Gauss-Verteilung im "**Atkins**", an der sich dieser Modul ausrichtet, sind im übrigen ebenfalls Fehler zu verzeichnen; das Endergebnis aber ist richtig.

Nach viel Mühen erhalten wir also tatsächlich als Ergebnis die berühmte **Gaußverteilung**, die **Normalverteilung** oder die **Gaußsche Glockenkurve**, benannt nach dem berühmten Mathematiker **Gauß**, eine der wichtigsten Funktionen der Statistik.

### Einige Eigenschaften und Besonderheiten

Mit der Herleitung der Gaußschen Glockenkurve für ein Münzwürfelspiel haben wir unsere **eigentliche Aufgabe** noch nicht gelöst. Wir wollten wissen, wie **weit** im Mittel bei einem "**Random Walk**" ein Teilchen sich nach  $N$  Sprüngen von seinem Ausgangspunkt entfernt hat.

● Mit der zugehörigen Gaußverteilung kennen wir erstmal die **Wahrscheinlichkeit**, ein Teilchen bei **eindimensionaler** Diffusion nach  $N$  Schritten  $x$  Einheiten vom Ursprung entfernt zu finden.

● Dazu verschieben wir einfach unser Teilchen um eine Einheit nach rechts (**+x**) oder links (**-x**) je nachdem ob wir **+1** oder **-1** würfeln. Oder, falls wir mit  $N$  Würfeln auf einmal würfeln, verschieben wir es eben um den Wert  $x$  der sich ergibt.

Wir müssen nun, um zum Ziel zu kommen, erstmal die entsprechenden Wahrscheinlichkeiten für die **dreidimensionale** Diffusion betrachten und daraus dann die entsprechenden Schlüsse ziehen.

● Das kann man auf verschiedene Weisen tun. **Ein** Weg ist sicherlich, die obige Betrachtung auf die normalen Würfel mit **6** Augen auszudehnen, mit einer Konvention für die Zuordnung der Augenzahlen zu den Bewegungen, z.B. **1 = +x, 2 = -x, 3 = +y**, usw..

● Man kann aber auch **3 Sätze** von digitalen Würfeln (= Münzen) nehmen, z.B. **1-**, **2-** und **5 DM** Münzen (so man sie nach Einführung des Euro noch hat), und **eine** Münzsorte für die Bewegung in **einer** Koordinatenachse verwenden. Wiederum ist es egal, ob wir  $N$  (unterscheidbare; z.B. numerierte) Münzen jeder Münzsorte gleichzeitig werfen oder sequentiell, d.h. erst für die **x**-Achse, dann für die **y**-Achse, schließlich für die **z**-Achse (in dieser Vorgehensweise genügte auch schon eine Münzsorte, wir müssen aber immer wissen für welche Achse wir werfen).

- Die Vorgehensweise ist deswegen egal, weil die Bewegungen in den drei Achsen **vollständig unabhängig** voneinander sind. Was auf der **y**- Achse geschieht wird in keinsten Weise davon beeinflusst, was auf den beiden anderen Achsen vor sich geht.

Das hat eine wichtige Konsequenz, die uns die Rechnung sehr erleichtert: Die Einzelwahrscheinlichkeiten für die einzelnen Koordinaten sind **alle identisch**, unabhängig voneinander und gehorchen der bereits abgeleiteten Formel. Die Gesamtwahrscheinlichkeit  $w_N(\mathbf{x},\mathbf{y},\mathbf{z})$ , das Teilchen bei den Koordinaten  $(\mathbf{x},\mathbf{y},\mathbf{z})$  zu finden, ist damit das **Produkt der Einzelwahrscheinlichkeiten**:

- $w_N(\mathbf{x},\mathbf{y},\mathbf{z}) = w_N(x) \cdot w_N(y) \cdot w_N(z)$

Wenn man die Gauss-Verteilung einsetzt (mir Koordinaten oder Ortsvektor  $\underline{r}$ ) erhält man

$$w_N(\mathbf{x},\mathbf{y},\mathbf{z}) = \left( \frac{1}{2\pi N} \right)^{3/2} \cdot \exp - \left( \frac{\mathbf{x}^2 + \mathbf{y}^2 + \mathbf{z}^2}{2N} \right)$$

$$= \left( \frac{1}{2\pi N} \right)^{3/2} \cdot \exp - \left( \frac{r^2}{2N} \right)$$

Das war recht einfach und schmerzlos. Das Ergebnis zeigt Kugelsymmetrie, wie es auch sein muß, d. h. die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen irgendwo bei  $(\mathbf{x},\mathbf{y},\mathbf{z})$  zu finden, hängt nur vom Abstand  $|\underline{r}| = r = (\mathbf{x}^2 + \mathbf{y}^2 + \mathbf{z}^2)^{1/2}$  des Teilchens vom Ursprung ab. Grundsätzlich aber ist  $\underline{r}$  ein Vektor; das muß immer berücksichtigt werden (auch wenn wir jetzt den Unterstrich wieder weglassen).

Haben wir damit unsere Aufgabe gelöst? Wir haben jetzt schließlich eine Formel für die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen bei jeder beliebigen Koordinate  $\mathbf{r} = (\mathbf{x},\mathbf{y},\mathbf{z})$  zu finden.

Aber die Antwort ist trotzdem: **Nein!**

Unserer Formel ist mit **zwei** Besonderheiten behaftet, die wir berücksichtigen müssen!

- Die Gaußschen Glockenkurve ist zunächst eine **Näherungsformel**. Wir haben zwei **Näherungen** gemacht: eine mathematische (**Stirlingsche Formel**) und eine physikalische ( $x/N \ll 1$ ). Über die damit verbundenen Konsequenzen sind wir uns halbwegs klar: Die Gaußsche Glockenkurve ist aber für große **N** schon gut genug, und hier liegt nicht das Problem.
- Die Gaußsche Glockenkurve hat aber eine ganz andere **Qualität**, als die **Ausgangsformel** mit den Fakultäten! Sie ist nicht mehr **diskret** wie die Ausgangsformel, sondern eine **Kontinuumsformel**, d.h. sie ist auch für nicht-ganzzahlige **x** definiert.
- Damit haben wir eine subtile Änderung der **Bedeutung des Begriffs Wahrscheinlichkeit** durchgeführt. Wir haben einen Übergang von einer **absoluten Wahrscheinlichkeit** zu einer **Wahrscheinlichkeitsdichte** gemacht.

Was das bedeutet, kann man sich auf mehrere Arten verdeutlichen:

- In unserem Beispiel (und in jedem beliebigen anderen Beispiel), ist die **absolute** Wahrscheinlichkeit **W** (zur Unterscheidung jetzt groß geschrieben) nur für **diskrete** Werte von  $(\mathbf{X},\mathbf{Y},\mathbf{Z})$  definiert. Um diese Werte aus der kontinuierlichen Formel zu erhalten, müssen wir den Raum in Zellen einteilen mit Zellabstand = Abstand zwischen den diskreten Werten und die Wahrscheinlichkeitsdichte in der gewünschten Zelle aufintegrieren. Wir erhalten  $\mathbf{W}(\mathbf{X},\mathbf{Y},\mathbf{Z}) = \int \mathbf{w}(\mathbf{x},\mathbf{y},\mathbf{z})dV$  wobei die Integration über die Zelle führt. Ist die Zelle so klein, daß in ihr  $\mathbf{w}(\mathbf{x},\mathbf{y},\mathbf{z}) \approx \text{const.}$  gilt, erhalten wir direkt  $\mathbf{W}(\mathbf{X},\mathbf{Y},\mathbf{Z}) \approx \mathbf{w}(\mathbf{x},\mathbf{y},\mathbf{z}) \cdot V$
- Daß man  $\mathbf{w}(\mathbf{x},\mathbf{y},\mathbf{z})$  nicht mit  $\mathbf{W}(\mathbf{X},\mathbf{Y},\mathbf{Z})$  verwechseln darf, ergibt sich auch rein logisch aus der Definition einer absoluten Wahrscheinlichkeit. Denn jedes beliebige Volumen enthält  $\infty$  viele Punkte  $(\mathbf{x},\mathbf{y},\mathbf{z})$ , so daß die **absolute** Wahrscheinlichkeit, eine endliche Zahl von Teilchen oder Vorgängen bei irgendeinem von  $\infty$  vielen Punkten zu finden immer  $\mathbf{W}(\mathbf{x},\mathbf{y},\mathbf{z}) = 0$  sein muß.  $\mathbf{w}(\mathbf{x},\mathbf{y},\mathbf{z})$  ist aber nicht = 0 für beliebige Koordinaten; es kann also **nicht** eine absolute Wahrscheinlichkeit ausdrücken.
- Wir hatten exakt die gleich Situation bereits bei der **Interpretation der Wellenfunktion**  $\psi(\mathbf{x},\mathbf{y},\mathbf{z})$  kennengelernt. Auch dort war nur  $\psi(\mathbf{x},\mathbf{y},\mathbf{z}) \cdot dV$ , und nicht  $\psi(\mathbf{x},\mathbf{y},\mathbf{z})$  selbst ein Maß für die **absolute** Wahrscheinlichkeit.

Das bringt uns auf eine Übungsaufgabe: Da die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen irgendwo zu finden = 1 sein muß, gilt für Wahrscheinlichkeitsdichten immer die Normierungsbedingung

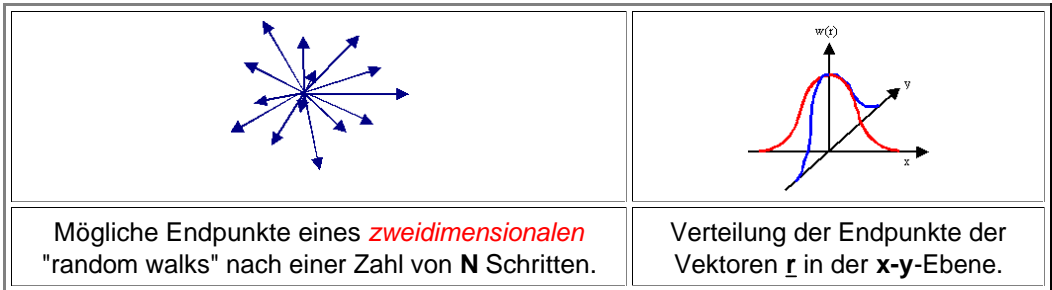
$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathbf{w}(\mathbf{x},\mathbf{y},\mathbf{z})dxdydz = 1$$

- Da wir bei der Herleitung der Glockenkurve keine freien Parameter haben, sollte diese Bedingung eigentlich erfüllt sein (allerdings möglicherweise nur ungefähr, da wir bei der Herleitung der Gaußverteilung genähert haben?) Das läßt sich überprüfen - auf zur Normierung Gaußverteilung, aber bitte mal selbst machen.

Mit der Gaußverteilung als Wahrscheinlichkeitsdichte, das Teilchen in einem gegebenen Volumenelement zu finden, kann man nun eine Vielzahl von Fragen stellen und lösen, jeweils noch getrennt nach ein- zwei- und dreidimensionalem "Random Walk". Wir stellen uns einigen der möglichen Fragen und illustrieren was gemeint ist für den **zweidimensionalen** Fall

1. Was ist der **Mittelwert** aller möglichen **Vektoren**  $\underline{r}$  vom Startpunkt bis zum Endpunkt nach **N** Sprüngen?

- Die Antwort darauf ist trivial: Da für jeden beliebigen Vektor  $\underline{r}$ , der einen Endpunkt charakterisiert, mit gleicher Wahrscheinlichkeit auch der Vektor  $-\underline{r}$  vorkommen wird, gilt für den Mittelwert von  $\underline{r}$  - wir schreiben  $\langle \underline{r} \rangle$  - immer  $\langle \underline{r} \rangle = \mathbf{0}$ .

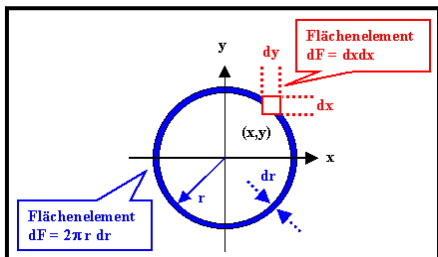


- Diese Frage ist also bei einem echten "random walk" nicht spannend - das Ergebnis ist immer  $\langle \underline{r} \rangle = \mathbf{0}$ . Man kann das Ganze aber auch "rückwärts" betrachten: Falls wir  $\langle \underline{r} \rangle \neq \mathbf{0}$  finden - zum Beispiel als experimenteller Befund - haben wir **keinen** "random walk".

2. Eine viel bessere Frage ist die nach dem **Mittelwert der Beträge** von  $\underline{r}$ .

- Das läßt sich am einfachsten machen, indem wir  $\underline{r}$  quadrieren und für den Betrag  $|\underline{r}| = r = (\underline{r}^2)^{1/2}$  schreiben. Das bedeutet, wir fragen jetzt primär nach dem Mittelwert von  $(\underline{r}^2)^{1/2}$ .
- Dazu müssen wir die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten des Wertes  $|\underline{r}|$  kennen, oder - wir behandeln den **zweidimensionalen** Fall - die Wahrscheinlichkeit dafür, daß  $r$  zwischen  $|r|$  und  $|r| + \Delta|r|$  liegt.

Wir fragen - **und das ist sehr wichtig** - jetzt nur noch nach der Wahrscheinlichkeit für das Auftreten einer bestimmten Länge von  $\underline{r}$ , eben  $|r|$ , und nicht mehr danach in welchem (cartesischen) Flächenelement  $\Delta \mathbf{F}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \Delta \mathbf{x} \Delta \mathbf{y}$  der Vektor  $\underline{r}$  endet.

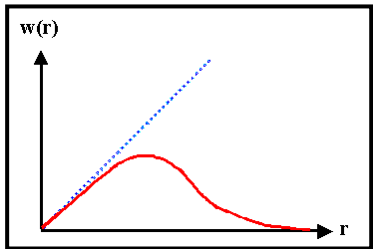


Das Flächenelement  $\Delta \mathbf{x} \cdot \Delta \mathbf{y}$  muß jetzt (im **zweidimensionalen**) durch die Fläche des **Rings** der Breite  $\Delta r$  im Abstand  $r$  ersetzt werden, d.h. das Flächenelement heißt jetzt  $\Delta \mathbf{F}(\mathbf{r}) = 2\pi \cdot r \cdot \Delta r$  (= Umfang der Kreises mit Radius  $r$  mal "Höhe" - gut genug für differentiell kleine  $\Delta r$ ). Dies ist unten graphisch dargestellt (wobei wir  $\Delta = "d"$ ) um anzudeuten daß wir immer differentiell kleine Änderungen meinen).

- Dreidimensional** fragen wir nur noch nach der Wahrscheinlichkeit, daß  $\underline{r}$  irgendwo in der Kugelschale zwischen  $|r|$  und  $|r| + \Delta|r|$  endet. Das cartesische Volumenelement  $\Delta \mathbf{V}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}) = \Delta \mathbf{x} \Delta \mathbf{y} \Delta \mathbf{z}$  wird zu  $\Delta \mathbf{V}(\mathbf{r}) = 4\pi \cdot r^2 \cdot \Delta r$ . Für die Wahrscheinlichkeit,  $r$  irgendwo zwischen  $r$  und  $r + \Delta r$  zu finden gilt entsprechend der **obigen Ableitung** für den **zweidimensionalen** Fall

$$w_N(\mathbf{r}) \cdot \pi r \cdot \Delta r = W_N(\mathbf{r}) = \left( \frac{1}{2\pi N} \right)^1 \cdot \exp - \left( \frac{x^2 + y^2}{2N} \right) \cdot 2\pi r \cdot \Delta r = \frac{r \cdot \Delta r}{2N} \cdot \exp - \frac{r^2}{2N}$$

- Wir haben ein Produkt einer ansteigenden Geraden mit einer abfallenden Exponentialfunktion
- Das sieht ungefähr so aus -
- Wiederum ist die Verteilungskurve nur für positive Werte von  $r$  definiert, und wenn alles stimmt, muß das Integral über die Kurve = 1 sein



Damit haben wir jetzt die Wahrscheinlichkeitsverteilung für das Auftreten gewisser Abstände  $r$  vom Ursprung - für den **ein- und zweidimensionalen Fall** siehe den [Link](#).

- Die Formel zur Berechnung des **Mittelwerts** von  $r^2$  bei gegebener Verteilung  $w(r)$  lautet in der bekannten Integralformel für Mittelwerte:

$$\langle r^2 \rangle = \frac{\int r^2 w(r) dr}{\int w(r) dr} = \int_{-\infty}^{+\infty} r^2 w(r) dr$$

- Dabei ist mitgenommen, dass der Wert des Nenners per Definition = 1 sein muß. Die Integrationen laufen selbstverständlich alle von  $-\infty$  bis  $+\infty$

Diese Größe hat zentrale Bedeutung und deshalb einen eigenen Namen, sie heißt "**Mittleres Verschiebungsquadrat**".

- Damit ist die Frage nach den **Mittelwerten** im Prinzip gelöst; die entsprechenden Formeln finden sich in einer [gesonderten Tabelle](#).

3. Wir können aber auch fragen: In welchem Abstand  $|r|_{\text{wahr}}$  (wieder nur Betrag bei  $r$ ; wir lassen die Betragsstriche aber zukünftig weg!) ist die **Wahrscheinlichkeit**, das Teilchen zu finden am höchsten? Wir fragen nach dem **wahrscheinlichsten Abstand**.

- Das ist die Frage nach dem **Maximum** der Funktion  $w(r)$ . Die obige Figur zeigt, daß ein Maximum vorhanden ist; die Frage ist also sinnvoll.
- Daß **wahrscheinlichste Werte** und **Mittelwerte** ganz verschieden sein können, sieht man sofort ein, wenn man sich fragt, was das **wahrscheinlichste** und das **mittlere** Gehalt einer Gruppe von 100 Personen ist, in der 95 Personen € 2.000.- pro Monat verdienen, und 5 Personen € 20.000.000.- pro Monat bekommen.
- Eine Antwort findet sich in einem [eigenen Modul](#) und in der [großen Tabelle](#).

4. Wir können weiterhin fragen, bei welchem  $r$  die Wahrscheinlichkeitsverteilung eine **bestimmte Breite** hat, oder andersherum, wie groß die **Halbwertsbreite**, d.h. die Breite (ausgedrückt in  $r$ ) in halber Höhe ist? Oder ganz allgemein, wie die Breite der Verteilung von den Parametern (hier  $N$ ) abhängt.

Alle diese Fragen sind sinnvoll und haben wichtige Bedeutungen. Sie sind in weiteren Modulen behandelt. Der [wahrscheinlichste Abstand beim dreidimensionalen "Random Walk"](#) ist ausführlich dargestellt, die Gesamtheit der Fragen und Antworten [tabellarisch](#).

### Random Walk und Diffusion

Die letzte Frage ist jetzt: Wie hängen der **Diffusionskoeffizient** und die oben betrachteten Größen  $\langle r^2 \rangle$  oder  $r_{\text{wahr}}$  zusammen? Ein Zusammenhang **muß** existieren, da wir letztlich mit dem "Random Walk" und den Diffusionsgleichungen der Fickschen Gesetze sehr ähnliche Abläufe beschreiben.

- Um diesen Zusammenhang zu erhalten müssen wir uns nur klar machen, daß wir mit der Herleitung der obigen Formeln für den "Random Walk" ein sehr allgemeines Diffusionsproblem gelöst haben. Wir haben betrachtet, wie sich eine Konzentration an Teilchen, die zum Zeitpunkt  $t = 0$  **alle** bei  $(x, y, z) = 0$  zu finden waren, im Laufe der Zeit im gesamten Volumen einstellt, d.h. wir haben eigentlich das 2 Ficksche Gesetz für die Randbedingung einer Anfangsverteilung in Form einer  $\delta$ -Funktion gelöst **ohne es zu kennen oder vorauszusetzen**. Mit den in der [tabellarische Darstellung](#) gegebenen Funktionen kennen wir jetzt die Konzentrationsverteilung für **alle** Dimensionen.
- Wir müssen jetzt nur noch das 2 Ficksche Gesetz für diese Bedingungen **formal** lösen, und diese Lösung mit der hier gegebenen vergleichen. Dabei rechnen wir die Konzentration  $c$ , die im Fickschen Gesetz auftritt, über folgende Beziehung auf die Wahrscheinlichkeiten um, die wir hier abgeleitet haben:
- $w(r, t)$  = Wahrscheinlichkeit ein Teilchen zur Zeit  $t$  im Intervall  $r, r + dr$  zu finden = Zahl der Teilchen bei  $(r, t)$  / Zahl aller Teilchen, oder

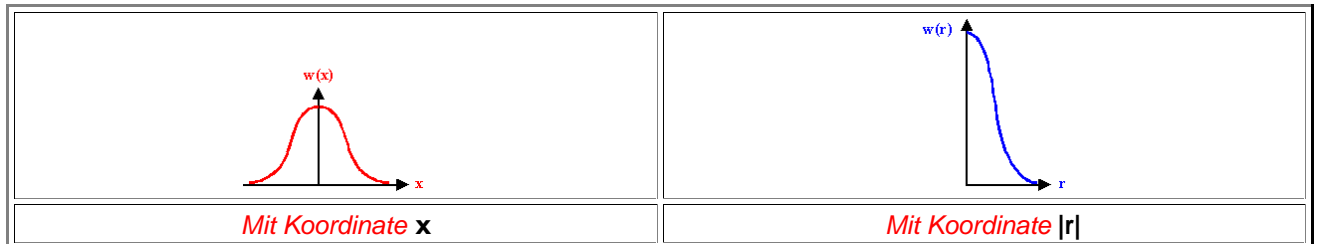
$$w(r, t) = \frac{c(r, t)}{\int c(r, t) dr}$$

Es genügt der eindimensionale Fall. Welcher Randbedingung entspricht unser Würfelexperiment? Da  $\int w(\mathbf{r})$  immer = 1 ist, haben wir offenbar eine bestimmte Anzahl von Teilchen, die bei  $t = 0$  alle bei  $\mathbf{r} = \mathbf{0}$  waren; d.h. eine durch eine  $\delta$ -Funktion symbolisierte Quelle im Inneren eines Körpers.

- Die entsprechende Lösung des *eindimensionalen* 2. Fickschen Gesetzes geben wir sowohl mit  $\mathbf{x}$  als Koordinate, als auch mit  $|\mathbf{r}|$  als Koordinate an - dies ist sehr lehrreich und hilft, die oft vorliegende Konfusion zu vermeiden.

$w_N(\mathbf{x})d\mathbf{x}  _{2.FG} = \left( \frac{1}{\pi 4D \cdot t} \right)^{1/2} \cdot \exp - \left( \frac{\mathbf{x}^2}{4D \cdot t} \right)$	$w_N(r)dr  _{2.FG} = \left( \frac{1}{\pi D \cdot t} \right)^{1/2} \cdot \exp - \left( \frac{r^2}{4D \cdot t} \right)$
<i>Mit Koordinate <math>\mathbf{x}</math></i>	<i>Mit Koordinate <math> \mathbf{r} </math></i>

- Graphisch sieht das so aus (immer bedenken: Es gibt keine negativen  $|\mathbf{r}|$ ; daher der Faktor 2 im eindimensionalen Volumenelement  $d\mathbf{r}$ )



- Aus der Betrachtung des *eindimensionalen* "Random Walks" erhielten wir für  $|\mathbf{r}|$ :

$w_N(r)dr  _{RW} = \left( \frac{2}{a_0^2 \pi N} \right)^{1/2} \cdot \exp - \left( \frac{r^2}{2Na_0^2} \right)$
--

- Aus einem Vergleich des Exponentens *oder* des Vorfaktors erhalten wir sofort:

$2Dt = N \cdot a_0^2$ <p style="text-align: center;">oder</p> $D = \frac{v \cdot a_0^2}{2}$ <p style="text-align: center;">(<math>v = \text{Sprungrate} = N/t</math>)</p>
---

- Das ist die bereits abgeleitete Beziehung für den **rein eindimensionalen** Fall (d.h. ohne Sprünge in  $\mathbf{y}$ - oder  $\mathbf{z}$ -Richtung; so daß nicht  $1/6$  sondern  $1/2$  der Sprünge in die betrachtete  $\mathbf{x}$ -Richtung führen).

Das ist zwar erfreulich, aber *noch nicht was wir wollten*. Um einen Zusammenhang zwischen dem Mittelwert  $\langle r^2 \rangle^{1/2}$  von  $r$ , oder dem wahrscheinlichsten Wert ( $r_{\text{wahr}}$ ) von  $r$  und dem Diffusionskoeffizienten zu bekommen, müssen wir jetzt aber *nur noch* die gewünschte Größe aus der Lösung des 2. Fickschen Gesetzes berechnen, da wir soeben gezeigt haben, daß diese Lösung vollständig äquivalent zur Betrachtung mit Hilfe der reinen Statistik, des "Random Walks" ist.

- Wir müssen

$$\langle x^2 \rangle = \int x^2 \cdot w(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$$

(von  $\mathbf{0}$  bis  $\infty$ ). berechnen. Dieses Integral ist im Tabellenmodul gelöst, das Ergebnis ist

$\langle r^2 \rangle = Na_0^2 = 2Dt$
$\langle r \rangle = L = (2Dt)^{1/2}$

- Für  $r_{\text{wahr}}$  bekommen wir, mit den Wert aus der Tabelle für *eindimensionale* Diffusion schlicht und ergreifend

$$r_{\text{wahr}} = 0$$

Es ist an wahrscheinlichsten, ein Teilchen am Ursprung zu finden. Daran ändert sich auch nichts mit fortschreitender Zeit - obwohl der mittlere Abstand der Teilchen vom Ursprung immer größer wird.

Damit ist die *eindimensionale* Diffusion erledigt. Aber damit haben wir noch *nicht* - auch nicht *im Prinzip* - die *zwei* und *drei*dimensionale Diffusion erledigt!

- Im Gegensatz zu vielen anderen physikalischen Phänomenen, bei den die Dimensionalität für das *Prinzip* dessen was passiert *keine* große Rolle spielt, gilt das *nicht* für die Diffusion:
- In der *eindimensionalen* Diffusion ist  $r_{\text{wahr}} = 0$  - die Teilchen kommen nicht so recht vom Fleck. Das gilt nicht für höhere Dimensionen. Die Teilchen sind nicht mehr mit größter Wahrscheinlichkeit an der Quelle zu finden, und  $r_{\text{wahr}}$  ist nicht mehr Null sondern wächst mit der Wurzel aus der Zeit bzw. Sprungzahl - siehe die [Tabelle](#)

Den Zusammenhang zwischen Diffusionskoeffizient  $D$  und Diffusionslänge  $L$  für *zwei*- und *drei*dimensionale Diffusion bekommt man sofort aus der Überlagerung der eindimensionalen Lösungen. Dabei setzen wir aber voraus, daß die Diffusion isotrop erfolgt, oder anders ausgedrückt, das  $D$  ein Skalar und kein Tensor zweiter Stufe ist.

- Wir erhalten damit
  - *Ein*dimensional:  $D = L^2/2t$
  - *Zwei*dimensional:  $D = L^2/4t$
  - *Drei*dimensional:  $D = L^2/6t$