Übungen zur Nichtgleichgewichtsthermodynamik – Blatt 2 – Lösungen

Aufgabe 1: Gauß-Verteilungen

Es sei x eine kontinuierliche Gauß-verteilte Zufallsvariable, d.h. die Zufallsverteilung ist

$$P(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}\right). \tag{1}$$

(a) Berechnen Sie die charakteristische Funktion

$$\Phi(k) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \exp(\mathrm{i}kx) P(x). \tag{2}$$

Lösung: Zuerst substituieren wir im zu berechnenden Fourier-Integral $y = x - x_0$. Mittels quadratischer Ergänzung können wir dann das Fourier-Integral auf ein einfaches Integral über eine Gauß-Funktion zurückführen:

$$\begin{aligned}
\Phi(k) &= \frac{\exp(\mathrm{i}kx_0)}{\sqrt{2\pi}\sigma} \int_{\mathbb{R}} \mathrm{d}y \exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma^2} + \mathrm{i}kx\right) \\
&= \frac{\exp(\mathrm{i}kx_0)}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{k^2\sigma^2}{2}\right) \int_{\mathbb{R}} \mathrm{d}y \exp\left(-\frac{(y-\mathrm{i}k\sigma^2)}{2\sigma^2}\right) \\
&= \exp\left(-\frac{k^2\sigma^2}{2} + \mathrm{i}kx_0\right).
\end{aligned} \tag{3}$$

(b) Zeigen Sie, daß die Momente der Verteilung durch

$$\langle x^n \rangle = \frac{1}{\mathrm{i}^n} \frac{\mathrm{d}^n \Phi(k)}{\mathrm{d}k^n}\bigg|_{k=0} \tag{4}$$

gegeben sind und berechnen Sie die Momente der Gauß-Verteilung für $n = 1$ und $n = 2$.

Lösung: Aus der Definition der charakteristischen Funktion gemäß (2) finden wir durch Ableiten unter dem Integral

$$\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}k^n}\Phi(k) = \int_{\mathbb{R}} \mathrm{d}x P(x)(\mathrm{i}x)^n \exp(\mathrm{i}kx). \tag{5}$$

Division durch i^n ergibt für $k = 0$ also in der Tat

$$\frac{1}{\mathrm{i}^n} \frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}k^n}\Phi(k)\bigg|_{k=0} = \int_{\mathbb{R}} \mathrm{d}x P(x) x^n = \langle x^n \rangle, \tag{6}$$

und das war zu zeigen.

Mit (3) folgt daraus

$$\langle x \rangle = \frac{1}{\mathrm{i}} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}k}\Phi(k)\bigg|_{k=0} = \frac{1}{\mathrm{i}}(-k\sigma^2 + \mathrm{i}x_0) \exp\left(-\frac{k^2\sigma^2}{2} + \mathrm{i}kx_0\right)\bigg|_{k=0} = x_0, \tag{7}$$

$$\left\langle x^2 \right\rangle = \frac{1}{\mathrm{i}^2} \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}k^2}\Phi(k)\bigg|_{k=0} = -[-\sigma^2 + (-k\sigma^2 + \mathrm{i}x_0)^2] \exp\left(-\frac{k^2\sigma^2}{2} + \mathrm{i}kx_0\right)\bigg|_{k=0} = \sigma^2 + x_0^2. \tag{8}$$

(c) Die Erzeugende Funktion für die Kumulanten einer Wahrscheinlichkeitsverteilung ist durch

$$K(k) = \ln[\Phi(k)] \tag{9}$$

gegeben. Bestimmen Sie alle nichtverschwindenden Kumulanten

$$\varkappa_n = \frac{1}{\mathrm{i}^n} \left. \frac{\mathrm{d}^n K(k)}{\mathrm{d}k^n} \right|_{k=0}. \tag{10}$$

Lösung: Es folgt als (3)

$$K(k) = \ln[\Phi(k)] = -\frac{k^2\sigma^2}{2} + \mathrm{i}k x_0 \tag{11}$$

Offensichtlich sind nur die ersten beiden Kumulanten von 0 verschieden:

$$\varkappa_1 = \langle x \rangle = \frac{1}{\mathrm{i}} \left. \frac{\mathrm{d}K(k)}{\mathrm{d}k} \right|_{k=0} = x_0, \quad \varkappa_2 = \left\langle x^2 \right\rangle - \langle x \rangle^2 = - \left. \frac{\mathrm{d}^2 K(k)}{\mathrm{d}k^2} \right|_{k=0} = \sigma^2. \tag{12}$$

(d) (**Knolbelaufgabe**) Betrachten Sie nun die Gauß-Verteilung für mehrere Zufallsvariablen $\vec{x} = (x_1, x_2, \ldots, x_n)$[1]

$$P(\vec{x}) = \sqrt{\frac{\det \hat{A}}{(2\pi)^n}} \exp\left(-\frac{1}{2} \vec{x}^{\mathrm{T}} \hat{A} \vec{x}\right) \tag{13}$$

mit der positiv definiten symmetrischen Matrix $\hat{A}$ und berechnen Sie die charakteristische Funktion und daraus die kumulantenerzeugende Funktion. Zeigen Sie damit, daß für die Kovarianzmatrix

$$\sigma_{jk} = \left\langle x_j x_k \right\rangle = (\hat{A}^{-1})_{jk} \tag{14}$$

gilt.

Lösung: Als erstes zeigen wir, daß die Matrix $\hat{A}$ eine Quadratwurzel besitzt. Da diese Matrix voraussetzungsgemäß symmetrisch ist, können wir eine orthogonale Transformation $\hat{O}$ („Hauptachsentransformation einer Bilinearform") finden, so daß

$$\hat{A} = \hat{O} \hat{A}' \hat{O}^\dagger, \quad \hat{A}' = \mathrm{diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_n), \tag{15}$$

wobei $\lambda_j > 0$ für alle $j \in \{1, 2, \ldots, n\}$. Definieren wir dann

$$\sqrt{\hat{A}} = \hat{O} \mathrm{diag}(\sqrt{\lambda_1}, \ldots, \sqrt{\lambda_n}) \hat{O}^\dagger = \hat{O} \sqrt{\hat{A}'} \hat{O}^\dagger, \tag{16}$$

so ist in der Tat

$$\left(\sqrt{\hat{A}}\right)^2 = \hat{O} \sqrt{\hat{A}'} \hat{O}^\dagger \hat{O} \sqrt{\hat{A}'} \hat{O}^\dagger \hat{O} = \hat{O} \sqrt{\hat{A}'}^2 \hat{O}^\dagger = \hat{O} \hat{A}' \hat{O} = \hat{A}. \tag{17}$$

Offensichtlich ist auch $\sqrt{\hat{A}}$ symmetrisch und positiv definit (insbesondere also auch invertierbar). Zur Berechnung des Fourier-Integrals für die charakteristische Funktion bietet sich die Subsitution

$$\vec{y} = \sqrt{\hat{A}} \vec{x}, \quad \vec{x} = \sqrt{\hat{A}}^{-1} \vec{y}, \quad \vec{x}^{\mathrm{T}} = \vec{y}^{\mathrm{T}} \sqrt{\hat{A}^{-1}}, \quad \det \frac{\partial \vec{x}}{\partial \vec{y}} = \det\left(\sqrt{\hat{A}}^{-1}\right) = \frac{1}{\sqrt{\det \hat{A}}} \tag{18}$$

[1] Wir haben zur Vereinfachung angenommen, daß $\langle \vec{x} \rangle = 0$ ist.

an, mit der sich

$$\begin{aligned}\Phi(k) &= \sqrt{\frac{\det\hat{A}}{(2\pi)^n}} \int_{\mathbb{R}^n} \mathrm{d}^n\vec{x}\exp\left(-\frac{1}{2}\vec{x}^{\mathrm{T}}\hat{A}\vec{x}+\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{x}\right)\\ &= \sqrt{\frac{1}{(2\pi)^n}} \int_{\mathbb{R}^n} \mathrm{d}^n\vec{y}\exp\left[-\frac{1}{2}\left(\vec{y}-\mathrm{i}\sqrt{\hat{A}}^{-1}\vec{k}\right)^2-\frac{1}{2}\vec{k}^{\mathrm{T}}\hat{A}^{-1}\vec{k}\right]\\ &= \exp\left(-\frac{1}{2}\vec{k}^{\mathrm{T}}\hat{A}^{-1}\vec{k}\right),\end{aligned} \tag{19}$$

und die kumulantenerzeugende Funktion

$$K(\vec{k}) = \ln\Phi(\vec{k}) = -\frac{1}{2}\vec{k}^{\mathrm{T}}\hat{A}^{-1}\vec{k} \tag{20}$$

ergeben. Durch Ableiten finden wir sofort die Kumulanten

$$x_j^{(1)} = \left\langle x_j\right\rangle = \frac{1}{\mathrm{i}}\left.\frac{\partial K(k)}{\partial k_j}\right|_{k=0} = -(\hat{A}^{-1}\vec{k})_j\Big|_{k=0} = 0, \tag{21}$$

$$x_{jk}^{(2)} = \left\langle (x_j-\left\langle x_j\right\rangle)(x_k-\langle x_k\rangle)\right\rangle = \sigma_{jk} = -\left.\frac{\partial^2 K(k)}{\partial k_j\partial k_k}\right|_{k=0} = \left(\hat{A}^{-1}\right)_{jk}. \tag{22}$$

(e) (**Wick-Theorem**) Drücken Sie die charakteristische Funktion mittels der kumulantenerzeugenden Funktion aus und zeigen Sie durch vollständige Induktion, daß die ungeraden Momente der Verteilung allesamt verschwinden und für die geraden die Gleichung

$$\left\langle x_{j_1}\cdots x_{j_{2n}}\right\rangle = \sum_{k=1}^{P(2n,2)} \prod_{(a,b)\in S_{k,l}(2n,2),a<b} \left\langle x_{j_a}x_{j_b}\right\rangle \tag{23}$$

gilt. Dabei durchläuft k alle Partitionen der Menge $(1,\ldots,2n)$ in n zweielementige Mengen. Die Anzahl der Partitionen ist $P(2n,2)=(2n)!/(2^n n!)$ (warum?), und zu jedem k durchläuft $S_{k,l}$ die Menge der Zweiermengen in der k Partition.

Hinweis: Zur Verdeutlichung des komplizierten kombinatorischen Ausdrucks in (23) geben wir als Beispiel den Fall $n=4$ an:

$$\left\langle x_{j_1}x_{j_2}x_{j_3}x_{j_4}\right\rangle = \left\langle x_{j_1}x_{j_2}\right\rangle\left\langle x_{j_3}x_{j_4}\right\rangle + \left\langle x_{j_1}x_{j_3}\right\rangle\left\langle x_{j_2}x_{j_4}\right\rangle + \left\langle x_{j_1}x_{j_4}\right\rangle\left\langle x_{j_2}x_{j_3}\right\rangle. \tag{24}$$

Lösung: Die charakteristische Funktion läßt sich in der Form

$$\Phi(\vec{k}) = \exp[K(\vec{k})] = \sum_{j=0}^{\infty}\frac{1}{j!}K^j(\vec{k}). \tag{25}$$

durch die kumulantenerzeugende Funktion

$$K(\vec{k}) = -\frac{1}{2}\vec{k}^{\mathrm{T}}\hat{\sigma}\vec{k} \tag{26}$$

ausdrücken. Es gilt

$$\left\langle x_{j_1} \cdots x_{j_l} \right\rangle = \frac{1}{\mathrm{i}^l} \prod_{i=1}^{l} \frac{\partial}{\partial k_{j_i}} \Phi(\vec{k}) \bigg|_{\vec{k}=0}. \tag{27}$$

Da $K(\vec{k})$ eine quadratische Form in $\vec{k}$ ist, kann nur etwas von 0 verschiedenes übrig bleiben, wenn l gerade ist, denn in (25) enthält der j-te Term in der Taylor-Entwicklung eine $(2j)$, also eine gerade Anzahl, $\vec{k}$-Faktoren.

Für $l = 2n$ trägt demnach zu (27) genau der Term mit $j = n$ bei, d.h. wir haben

$$\left\langle x_{j_1} \cdots x_{j_{2n}} \right\rangle = \frac{1}{\mathrm{i}^{2n}} \frac{1}{n!} \frac{(-1)^n}{2^n} \prod_{i=1}^{2n} \frac{\partial}{\partial k_{j_i}} \left(\vec{k}^{\mathrm{T}} \hat{\sigma} \vec{k}\right)^n = \frac{1}{2^n n!} \prod_{i=1}^{2n} \frac{\partial}{\partial k_{j_i}} \left(\vec{k}^{\mathrm{T}} \hat{\sigma} \vec{k}\right)^n \tag{28}$$

Nun können wir die Behauptung durch vollständige Induktion nach n beweisen. Für $n = 1$ ist

$$\left\langle x_{j_1} x_{j_2} \right\rangle = \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial k_{j_1} \partial k_{j_2}} (\vec{k}^{\mathrm{T}} \hat{\sigma} \vec{k}) = \sigma_{j_1 j_2}. \tag{29}$$

Nehmen wir nun an, die Behauptung sei für $n \leq N$ wahr. Betrachten wir nun die Behauptung für $n = N + 1$. Gemäß (29) ist

$$\left\langle x_{j_1} \cdots x_{j_{2N}} x_{j_{2N+1}} x_{j_{2N+2}} \right\rangle = \frac{1}{2^{N+1}(N+1)!} \sum_{i=1}^{2N+2} \frac{\partial}{\partial k_{j_i}} (\vec{k}^{\mathrm{T}} \hat{\sigma} \vec{k})^{N+1}. \tag{30}$$

Dies können wir wie folgt umschreiben

$$\left\langle x_{j_1} \cdots x_{j_{2N}} x_{j_{2N+1}} x_{j_{2N+2}} \right\rangle = \frac{1}{2^{N+1}(N+1)!} \prod_{i=1}^{2N} \frac{\partial}{\partial k_{j_i}} \frac{\partial^2}{\partial k_{j_{2N+1}} \partial k_{j_{2N+2}}} \left[(\vec{k}^{\mathrm{T}} \hat{\sigma} \vec{k})^{N+1}\right]. \tag{31}$$

Jetzt führen wir die beiden Ableitungen nach $k_{j_{2N+1}}$ und $k_{j_{2N+2}}$ aus (wobei wir die Einsteinsche Summationskonvention für Tensoren verwenden):

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial k_{j_{2N+1}} \partial k_{j_{2N+2}}} \left[(\vec{k}^{\mathrm{T}} \hat{\sigma} \vec{k})^{N+1}\right] &= \frac{\partial}{\partial k_{j_{2N+1}}} 2(N+1) \sigma_{j_{2N-2}a} k_a (\vec{k}^{\mathrm{T}} \hat{\sigma} \vec{k})^N \\ &= \left[2(N+1) \sigma_{j_{2N+1} j_{2N+2}} (\vec{k}^{\mathrm{T}} \hat{\sigma} \vec{k}) + 4(N+1) N \sigma_{j_{2N+1}a} \sigma_{j_{2N+1}b} k_a k_b (\vec{k}^{\mathrm{T}} \hat{\sigma} \vec{k})^{N-1}\right]. \end{aligned} \tag{32}$$

Läßt man auf diesen Ausdruck nun den verbliebenen Differentialoperator $\prod_{i=1}^{2N} \partial / \partial k_{j_i}$ wirken, ergibt der erste Term den Ausdruck

$$\left\langle x_{j_1} \ldots x_{j_{2N}} \right\rangle \left\langle x_{j_{2N+1}} x_{j_{2N+2}} \right\rangle \tag{33}$$

Nach Induktionsvoraussetzung gilt für den ersten Faktor das Wicksche Theorem, d.h. man summiert die entsprechenden Produkte von Kovarianzmatrizen über alle Partitionen der Menge $\{1, \ldots, 2N\}$ in disjunkte Zweiermengen. Demnach entspricht der Beitrag (33) denjenigen Partitionen der Menge $\{1, \ldots, 2N+2\}$, die dadurch entsteht, daß man zu jeder Partitionierung der Menge $\{1, \ldots, 2N\}$ einfach die Zweiermenge mit den beiden zusätzlichen Indizes, also $\{i_{2N+1}, i_{2N+2}\}$ hinzufügt.

Beim zweiten Ausdruck werden nun die Faktoren k_a und k_b durch irgendwelche zwei Ableitungen nach den k_{j_i} mit $i \in \{1, \ldots, 2N\}$ beseitigt, was entsprechend auf einen Term mit dem Faktor

$\sigma_{j_{2N+1}j_a}\sigma_{j_{2N+2}j_b}$ und einen mit $\sigma_{j_{2N+1}j_b}\sigma_{j_{2N+2}j_a}$ führt. Die übrigen $2N-2$ Ableitungen führen dann auf das Moment $2N-2$-ter Ordnung $\left\langle x_1\cdots\widehat{x_{j_a}}\cdots\widehat{x_{j_b}}\cdots x_{j_{2N}}\right\rangle$, wobei die „Dächer" über den beiden x-Faktoren andeuten, daß man diese Faktoren weglassen soll. Für dieses Moment gilt nach Induktionsvoraussetzung das Wicksche Theorem. Diese Beiträge entsprechen aber nun genau denjenigen Partitionierungen der Menge $\{1,\ldots,2N+2\}$ die aus den Partitionierungen der Menge $\{1,\ldots,2N\}$ hervorgehen, indem man aus den zweielementigen Mengen $\{a,a'\}$ und $\{b,b'\}$ die Mengen $\{a,j_{2N+1}\}$ und b,j_{2N+2} (oder $\{a,j_{2N+2}\}$ und $\{b,j_{2N+1}\}$) und die herausgenommenen Elemente zu $\{a',b'\}$ zusammenfügt. Damit erhält man aber zusammen mit den Beiträgen der Gestalt (33) alle gewünschten Partitionen der Menge $\{1,\ldots,2N+2\}$ und die enstprechenden Ausdrücke gemäß dem Wick-Theorem für $n=N+1$, womit das Wicktheorem durch vollständige Induktion bewiesen ist.

Aufgabe 2: Eindimensionaler diskreter Random Walk

Ein Teilchen kann sich auf der x-Achse and den Punkten $x=n\in\mathbb{Z}$ befinden. Unabhängig von seiner Position und unabhängig von seiner vorherigen Bewegung bewegt sich das Teilchen bei jedem Zeitschritt mit der Wahrscheinlichkeit p um einen Schritt nach rechts und entsprechend mit der Wahrscheintlichkeit $q=1-p$ nach links. Das Teilchen durchlaufe nun N Zeitschritte.

(a) Begründen Sie, daß die Wahrscheinlichkeit, daß sich das Teilchen in k ($0\leq k\leq N$) der N Zeitschritte nach rechts bewegt,

$$P_N(k)=\binom{n}{k}p^k q^{N-k} \tag{34}$$

beträgt (Binomialverteilung).

Lösung: Wir können den Zufallsprozeß auch als „Urnenproblem" formulieren. Dabei haben wir N Urnen mit jeweils zwei Kugeln, die mit R und L beschriftet sind. Wir ziehen N mal eine Kugel, wobei wir jedesmal mit der Wahrscheinlichkeit p die mit R beschriftete und mit der Wahrscheinlichkeit $q=1-p$ die mit L beschriftete Kugel ziehen. Unter Berücksichtigung der Reihenfolge, in der wir diese Kugeln ziehen, hätten wir wegen der angenommenen stochastischen Unabhängigkeit der Zufallsziehungen eine Wahrscheinlichkeit $p^k q^{N-k}$. Nun ist aber die Reihenfolge der jeweils erhaltenen Kugeln irrelevant, da wir uns nur dafür interessieren, wievielmal wir die R-Kugel ziehen. Es gibt nun $N!$ Reihenfolgen von Ziehungen. Dabei ist es unerheblich in welcher Reihenfolge man genau k-mal die R-Kugel und dann entsprechend $N-k$-mal die L-Kugel zieht. Demnach ist die Wahrscheinlichkeit, genau k R-Kugeln zu ziehen durch die Binomialverteilung

$$P_N(k)=\frac{N!}{k!(N-k)!}p^k q^{N-k}=\binom{N}{k}p^k q^{N-k} \tag{35}$$

gegeben.

(b) Berechnen Sie die charakteristische und kumulantenerzeugende Funktion

$$\Phi_N(x)=\sum_{k=0}^{N}P_N(k)\exp(\mathrm{i}kx),\quad K_N(x)=\ln[\Phi_N(x)]. \tag{36}$$

Lösung: Aus dem Binomialsatz folgt

$$\Phi_N(x)=\sum_{k=0}^{N}\binom{N}{k}[p\exp(\mathrm{i}x)]^k q^{N-k}=[p\exp(\mathrm{i}x)+q]^N. \tag{37}$$

(c) Berechnen Sie Erwartungswert und Kovarianz von k.

Lösung: Die kumulantenerzeugende Funktion ist

$$K_N(x) = \ln[\Phi_N(k)] = N \ln[p \exp(\mathrm{i}x) + q], \tag{38}$$

und damit ergeben sich Mittelwert und Kovarianz zu

$$\begin{aligned} \varkappa_1 = \langle k \rangle = \frac{1}{\mathrm{i}} \left. \frac{\mathrm{d}K_N(x)}{\mathrm{d}x} \right|_{x=0} = N p \left. \frac{\exp(\mathrm{i}x)}{p \exp(\mathrm{i}x) + q} \right|_{x=0} = N p, \\ \varkappa_2 = \sigma_k^2 = -\frac{\mathrm{d}^2 K_N(x)}{\mathrm{d}x^2} = N p \left. \frac{\exp(\mathrm{i}x)\{p[\exp(\mathrm{i}x) - 1] + q\}}{[p \exp(\mathrm{i}x) + q]^2} \right|_{x=0} = N p q, \end{aligned} \tag{39}$$

wobei wir beachtet haben, daß $p + q = 1$ ist.

Homepage zu Vorlesung und Übungen:
`http://fias.uni-frankfurt.de/~hees/neq-therm-WS15/`