Institut für Theoretische Physik
Universität zu Köln

Prof. Dr. S. Trebst
Christoph Berke

Statistische Physik

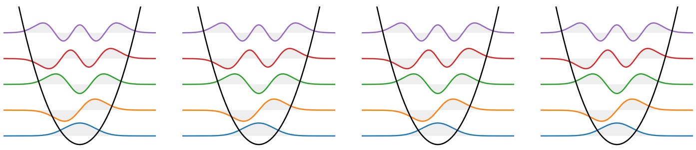
Blatt 5

WS 2020/21

Abgabe: Montag, **7.12.2020**, 10:00 Uhr **Besprechung**: Dienstag, 8.12.2020
Webseite: www.thp.uni-koeln.de/trebst/Lectures/2020-StatPhys.shtml

Aufgabe 17: Harmonische Oszillatoren, mikrokanonisch & kanonisch (6 Punkte)

In dieser Aufgabe vergleichen wir die Resultate der mikrokanonischen und der kanonischen Beschreibung eines Systems N nicht-wechselwirkender quantenmechanischer Oszillatoren, die alle durch dieselbe Frequenz ω charakterisiert sind.



Zunächst betrachten wir das System im *mikrokanonischen Ensemble*:

a) Was sind die möglichen Energiewerte des Systems? Drücken Sie ihr Ergebnis durch $M = \sum_i n_i$ aus, wobei n_i die Besetzungszahl des i-ten Oszillators ist.

b) Zeigen Sie, dass sich für die Anzahl der möglichen Zustände zu einer gegebenen Gesamtenergie E_M der folgende Ausdruck ergibt:

$$\Omega(E_M) = \binom{M+N-1}{N-1}. \tag{1}$$

c) Berechnen Sie die Entropie $S = k_B \ln \Omega(E_M)$ des Systems für große N und große M. Verwenden Sie die Stirling-Formel $\ln k! = k \ln k - k$. Bringen Sie das Ergebnis in die Form $S = k_B N f(\tilde{m})$, wobei $\tilde{m} = M/N$.

d) Berechnen Sie die zu einer Energie E zugehörige Temperatur $T(E)$.

Wir betrachten nun das gleiche System im *kanonischen Ensemble*:

e) Berechnen Sie die Zustandssumme

$$Z = \sum_{n_1=0}^{\infty} \cdots \sum_{n_N=0}^{\infty} e^{-\beta E(\{n_i\})} \tag{2}$$

für ein festes $\beta = 1/k_B T$.
Hinweis: Verwenden Sie $E(\{n_i\}) \equiv \sum_i E_i(n_i) = \hbar\omega \sum_i (n_i + \frac{1}{2})$ und identifizieren Sie die Zustandssumme eines einzelnen harmonischen Oszillators, die Sie in Aufgabe 15 berechnet haben.

f) Berechnen Sie $\langle E(T) \rangle$ und vergleichen Sie das Ergebnis mit dem Zusammenhang zwischen Energie und Temperatur aus der mikrokanonischen Berechnung in d).

g) Wir wollen nun die relativen Energiefluktuationen $\Delta E/E$ berechnen. Berechnen Sie $(\Delta E)^2 = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2$ und zeigen Sie, dass $\lim_{N\to\infty} \Delta E/E = 0$. Interpretieren Sie das Ergebnis mit Blick auf einen Vergleich der mikrokanonischen und kanonischen Beschreibung des Systems.

Aufgabe 18: Maxwell-Boltzmann-Verteilung (4 Punkte)

In der Vorlesung (Skript S.41/42, Video B6) haben Sie gelernt, dass die statistische Verteilung des Betrags der Geschwindigkeiten, $v = |\vec{v}|$, in einem idealen Gas durch die **Maxwell-Boltzmann-Verteilung** oder **maxwellsche Geschwindigkeitsverteilung** beschrieben ist. In dieser Aufgabe sollen Sie visualisieren, wie sich durch Stöße nach kurzer Zeit tatsächlich die besagte Verteilung einstellt, unabhängig von den Anfangsbedingungen. Dazu haben wir für Sie die Simulation des 2D Gases erweitert. Laden Sie das **Notebook** herunter und beschäftigen Sie sich zunächst mit den neu dazugekommenen Code-Fragmenten. Bearbeiten Sie anschließend die Aufgabenteile a) bis c).

Aufgabe 19: Shannon-Entropie und Datenkompression (5 + 2 Punkte)

Die **Entropie** lässt sich auf drei (miteinander zusammenhängende) Arten interpretieren: Sie misst die *irreversiblen Änderungen* in einem System, ist ein Maß für die *Unordnung* in einem System, und außerdem ein Maß für unsere *Unwissenheit* über ein System. Hier beschäftigen wir uns mit der letzten Interpretation in einem informationstheoretischen Kontext. Zunächst versuchen wir, uns die Definition anschaulicher zu machen und wenden uns dann Anwendungen des Entropiekonzept bei der Kompression von Daten zu.

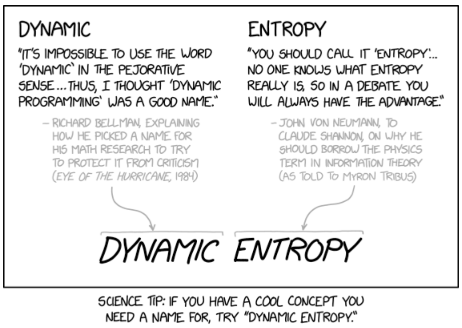


Abbildung 1: Die Entropie ist offenbar auch für Menschen, die als die genialsten Wissenschaftler ihrer Zeit in gleich mehreren Disziplinen galten, eine nicht sonderlich anschauliche Größe. In dieser Aufgabe versuchen wir, etwas Klarheit in das Entropiekonzept zu bringen.

In der Vorlesung haben Sie die Gibbs-Entropie als Verallgemeinerung der Boltzmann-Entropie kennengelernt (S. 46/47). Da man in der Informationstheorie nicht an dem Anschluss an die Thermodynamik interessiert ist, lässt man den Faktor k_B weg, und ersetzt den natürlichen Logarithmus durch den Logarithmus zur Basis 2. So gelangt man zur Shannon-Entropie:

$$\mathrm{H}\left(\{p_i\}\right) = -\sum_{z\in Z} p_z \log_2 p_z. \tag{3}$$

Die Summe läuft hier über alle Zeichen z eines Alphabets Z, z.B. $Z = \{a, b, c, d\}$, und p_z ist die Wahrscheinlichkeits für das Auftreten des Zeichens z. Die so definierte Entropie ist **ein Maß für den mittleren Informationsgehalt pro Zeichen**.

a) Berechnen Sie die Shannon-Entropie für die folgenden Alphabete:

(i) $Z = \{a, b, c, d\}, p_a = \frac{1}{2}, p_b = \frac{1}{4}, p_c = p_d = \frac{1}{8}$.

(ii) $Z = \{a, b, c, d\}, p_a = \frac{1}{2}, p_b = p_c = p_d = \frac{1}{6}$.

(iii) $Z = \{a, \ldots, h\}, p_a = \frac{1}{2}, p_b = \frac{1}{4}, p_c = \frac{1}{8}, p_d = \frac{1}{16}, p_e = \frac{1}{32}, p_f = \frac{1}{64}, p_g = p_h = \frac{1}{128}$.

(iv) $Z = \{a, \ldots, e\}, p_a = \frac{1}{2}, p_b = p_c = p_d = p_e = \frac{1}{8}$.

b) Machen Sie sich klar, warum die Interpretation als Maß des Informationsgehalts pro Zeichen sinnvoll. Hier ein paar Anregungen, die nützlich sein könnten:

(i) Wieviel Information können Sie mit einem Alphabet, das nur aus einem Zeichen x mit $p_x = 1$ besteht übertragen?

(ii) Der **Informationsgehalt** eines Zeichens ist definiert als $I(z) = -\log_2 p_z$. Wir können z.B. alle *Wörter* der deutschen Sprache als unsere Zeichenmenge Z auffassen. Sortiert nach Häufigkeit liegt das Wort *'und'* an Position 3, das Wort *'Atlantik'* an Position 9992 (Stand 2001). Wie passt das mit der Definition von $I(z)$ zusammen? Wie hängen H und I zusammen?

Sie sind Empfänger einer Nachricht, und berechnen aus den bereits empfangenen Daten die Shannon-Entropie. Warum lässt sich diese Entropie auch als **Maß für Ihre Unwissenheit** bezüglich der noch nicht empfangenden Nachricht deuten?

Wir wollen uns jetzt Gedanken darüber machen, wie wir die Alphabete aus a) in Bits, also Nullen und Einsen, übersetzen können.

c) Wie viele Bits pro Buchstabe benötigt man, um das Alphabet (i) aus Aufgabenteil a) binär ohne Komprimierung (d.h. gleiche Anzahl an Bits für jedes Zeichen) zu kodieren? Berechnen Sie die durchschnittliche Länge einer kodierten Nachricht aus N Buchstaben. Wieviele Bits pro Buchstabe braucht man für ein Alphabet der Länge L?

Wir betrachten jetzt die folgende Kodierung des Alphabets (i): $a \to 0, b \to 10, c \to 110, d \to 111$.

d) Begründen Sie, warum der durch obige Kodierung gegebene Zusammenhang zwischen einer Nachricht, etwa '*adbddbca* und der zugeordneten binären Zeichenkette, etwa '*0111...1100*' eineindeutig ist.

e) Berechnen Sie die durchschnittliche Länge einer kodierten Nachricht aus N Buchstaben. Stellen Sie den Bezug zur Shannon-Entropie her.

f) Die Shannon-Entropie für ein Alphabet aus zwei Zeichen ist maximal 1, es kann also höchstens eine 'Informationseinheit' pro Bit übermittelt werden. Ein beliebiges Alphabet soll binär kodiert werden. Welche für die binäre Kodierung wichtige Information liefert die Shannon-Entropie dieses Alphabets?

g) Bonusaufgabe: Finden Sie auch für die Alphabete (ii)-(iv) eine ideale Kodierung. Ist es immer möglich, das durch die Shannon-Entropie gegebene Kompressionslimit zu erreichen? *Hinweis: Solche Kodierungen lassen sich mit der **Huffman-Kodierung** finden.*

Die hier angewandte Entropiekodierung, bei der Zeichen je nach Auftrittswahrscheinlichkeit durch Codes unterschiedlicher Länge ersetzt werden, ist das Prinzip, nach dem verlustfreies Komprimieren von Daten funktioniert, so verwenden u.a. die Dateiformate zip und png die Huffman-Kodierung als Teil ihrer Kompressionsalgorithmen.