

Statistische Physik

Blatt 8

WS 2020/21

Abgabe: Montag, 11.01.2021, 10:00 Uhr

Besprechung: Dienstag, 12.01.2021

Webseite: www.thp.uni-koeln.de/trebst/Lectures/2020-StatPhys.shtml

Aufgabe 26: Kullback-Leibler-Divergenz (7 Punkte)

Wir betrachten die beiden Alphabete

- $Z_1 = \{a, b, c, d, e\}$ mit der Wahrscheinlichkeitsverteilung $P_1: p_a = \frac{1}{2}, p_b = p_c = p_d = p_e = \frac{1}{8}$,
- $Z_2 = \{a, b, c, d, e\}$ mit der Wahrscheinlichkeitsverteilung $P_2: p_a = \frac{1}{16}, p_b = \frac{1}{2}, p_c = \frac{1}{4}, p_d = \frac{1}{8}, p_e = \frac{1}{16}$.

- a) Berechnen Sie für die Alphabete Z_1 und Z_2 die Shannon-Entropie $H = -\sum_z p_z \log_2 p_z$. Finden Sie anschließend mit der Huffman-Kodierung (siehe Blatt 5, A19g) eine optimale binäre Kodierung für beide Alphabete. Berechnen Sie die mittlere Länge einer kodierten Nachricht aus N Buchstaben. Wird das durch H vorgegebene Kompressionslimit erreicht?
- b) Wie lang wird eine Nachricht aus N Buchstaben aus Z_1 , wenn anstelle der optimalen Kodierung für Z_1 die optimale Kodierung für Z_2 benutzt wird? Wieviele Bits pro Buchstabe werden dann zusätzlich benötigt und ‘verschwendet’? Was ergibt sich, wenn Z_2 mit der für Z_1 optimierten Kodierung in Bits übersetzt wird?
- c) Wir betrachten eine weitere binäre Kodierung des Alphabetes $\{a, \dots, e\}$, die für die Wahrscheinlichkeitsverteilung P_3 mit $p_a = \frac{1}{16}, p_b = \frac{1}{2}, p_c = \frac{1}{4}, p_d = \frac{1}{16}, p_e = \frac{1}{8}$ optimiert ist. Wir wollen wieder Z_2 in Bits übersetzen. Würden Sie erwarten, dass die auf P_3 basierende Kodierung effizienter ist, als die auf Z_1/P_1 basierende? Begründen Sie ihre Einschätzung (ohne Rechnung).

In Aufgabenteil (c) haben Sie vielleicht über die ‘Unterschiedlichkeit’ von Verteilungen argumentiert. Eine Möglichkeit, diesen ‘Abstand’ zwischen zwei Verteilungen genauer zu quantifizieren stellt die **Kullback-Leibler-Divergenz** oder **relative Entropie** dar. Für zwei (diskrete) Wahrscheinlichkeitsverteilungen $P(x)$ und $Q(x)$ definieren wir diese als

$$D(P||Q) = \sum_x P(x) \cdot \log_2 \frac{P(x)}{Q(x)}. \quad (1)$$

Die KL Divergenz misst, wie sehr die Verteilungen $P(x)$ und $Q(x)$ voneinander abweichen.

d) Zeigen Sie, dass $D(P||Q) \geq 0$. *Hinweis: Benutzen Sie die Jensensche Ungleichung*

$$f\left(\sum_{i=1}^n \lambda_i x_i\right) \leq \sum_{i=1}^n \lambda_i f(x_i) \quad (2)$$

für konvexe Funktionen f mit $x_i = P(i)/Q(i)$ und $\lambda_i = P(i)$.

Wann gilt $D(P||Q) = 0$?

- e) Berechnen Sie die Kullback-Leibler-Divergenzen $D(P_1||P_2)$ und $D(P_2||P_1)$. Erfüllt die Kullback-Leibler-Divergenz die mathematischen Anforderungen an eine Abstandsfunktion (Metrik)?
- f) Vergleichen Sie Ihre Ergebnisse aus dem Aufgabenteil (b) und (e). Was fällt Ihnen auf? Benutzen Sie die Kullback-Leibler-Divergenz, um Ihre Vermutung aus (c) zu bestätigen oder zu widerlegen.

Die Kullback-Leibler-Divergenz wurde bei der Analyse von Verschlüsselungsalgorithmen entwickelt (ihre beiden Namensgeber, [Solomon Kullback](#) und [Richard Leibler](#), arbeiteten als Kryptoanalytiker bei der NSA). Die Anwendbarkeit geht aber weit über die Kryptographie, bzw. Informationstheorie hinaus. So findet die Kullback-Leibler-Divergenz u.a. Anwendungen bei der Erforschung [turbulenter Strömungen](#), in der [Astrophysik](#), in der [Kryptographie](#), aber auch bei [Spielanalysen der NBA](#) und im [Bereich von Sportwetten](#). Außerdem hat Sie unzählige Anwendungen im Bereich des [maschinellen Lernens](#).

Aufgabe 27: Zweiatomiges Molekül (8 Punkte)

Wir betrachten ein ideales Gas aus zweiatomigen Molekülen. Ein zweiatomiges Molekül besitzt Translations-, Vibrations-, und Rotationsfreiheitsgrade. Jeder dieser Freiheitsgrade trägt zur spezifischen Wärme $C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_V$ bei. Insgesamt ergibt sich als Funktion der Temperatur der in [Abbildung 1](#) schematisch skizzierte Verlauf, den wir in dieser Aufgabe näher untersuchen wollen.

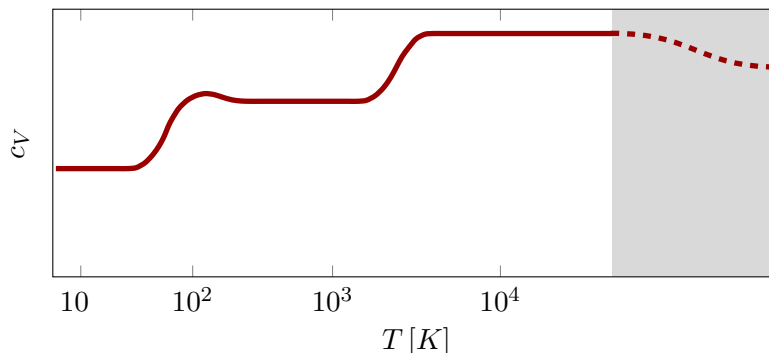


Abbildung 1: Temperaturabhängigkeit der spezifischen Wärme $c_V = C_V/N$ für ein Gas aus zweiatomigen Molekülen. In dieser Aufgabe soll der charakteristische Verlauf hergeleitet werden.

- a) Der Beitrag der Translationsbewegung, C_V^{tr} kann klassisch behandelt werden. Bestimmen Sie C_V^{tr} aus dem Gleichverteilungssatz der klassischen statistischen Physik.
- b) Die möglichen Energien der Vibrationszustände sind

$$E_n^{\text{vib}} = \hbar\omega_0 \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (3)$$

wobei sich ω_0 in harmonischer Näherung des Morsepotentials, das die Molekülbindung beschreibt, ergibt. Bestimmen Sie aus der kanonischen Zustandssumme Z den Vibrationsanteil zur spezifischen Wärme C_V^{vib} . Wir definieren für die Vibration eine charakteristische Temperatur über die Relation $k_B T_{\text{vib}} = \hbar\omega_0$. Erläutern Sie kurz die Bedeutung von T_{vib} . Diskutieren Sie die Grenzfälle hoher ($T \gg T_{\text{vib}}$) und tiefer Temperaturen ($T \ll T_{\text{vib}}$).

Hinweis: Sie können Teile der Rechnung aus A15 und A17 übernehmen.

c) Die möglichen Energien der Rotationszustände sind

$$E_l^{\text{rot}} = \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2I}, \quad l = 0, 1, 2, \dots, \quad (4)$$

wobei I das Trägheitsmoment ist. Der Entartungsgrad ist $2\ell+1$. Analog zur Vibration ordnen wir auch der Rotationsbewegung eine charakteristische Temperatur zu: $k_B T_{\text{rot}} = \hbar^2/I$. Erläutern Sie kurz die Bedeutung von T_{rot} . Bestimmen Sie die Zustandssumme. Werten Sie die resultierende Summe für tiefe Temperaturen $T \ll T_{\text{rot}}$ aus, indem Sie nur die zwei Beiträge mit der niedrigsten Energie berücksichtigen. Berechnen Sie daraus den Rotationsbeitrag zur spezifische Wärme C_V^{rot} für tiefe Temperaturen. Für hohe Temperaturen $T \gg T_{\text{rot}}$ können Sie die Zustandssumme mit der Euler-Maclaurin-Formel approximieren:

$$\sum_{n=0}^{\infty} f(n) \approx \int_0^{\infty} dx f(x) + \frac{1}{2}f(0) - \frac{1}{12}f'(0) + \frac{1}{720}f'''(0) \pm \dots \quad (5)$$

Geben Sie auch hier den Beitrag zur spezifische Wärme C_V^{rot} an.

d) Für ein Gas aus Wasserstoffmolekülen ergeben sich die Temperaturen $T_{\text{vib}} \approx 6000\text{K}$ und $T_{\text{rot}} \approx 85\text{K}$. Der Siedepunkt molekularen Wasserstoffs liegt bei $T_s \approx 20\text{K}$. Beschriften Sie in Abbildung 1 die x - und y -Achse. Bei welchen Werten von c_V liegen die Plateaus? Was passiert in dem grau unterlegten Hochtemperaturbereich? Im Experiment beobachtet man für Wasserstoffmoleküle tatsächlich einen zu Abbildung 1 ähnlichen Verlauf. Was würde man für Kohlenmonoxid erwarten, mit $T_{\text{rot}} \approx 5.54\text{K}$ und $T_s \approx 80\text{K}$?