Institut für Theoretische Physik
Universität zu Köln

Prof. Dr. S. Trebst
Christoph Berke

Statistische Physik

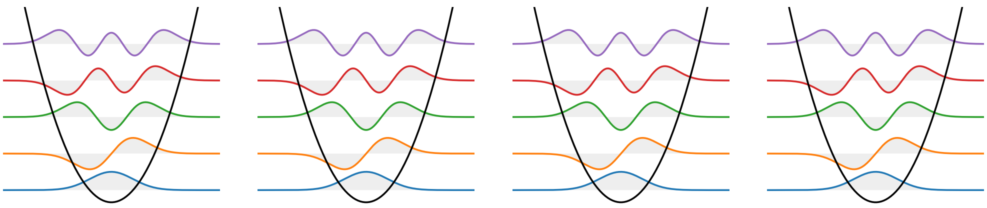
Blatt 5

Wintersemester 2023/24

Abgabe: Montag, **13.11.2023**, 10:00 Uhr **Besprechung**: Dienstag, 14.11.2023
Webseite: https://www.thp.uni-koeln.de/trebst/Lectures/2023-StatPhys.shtml

Aufgabe 17: Harmonische Oszillatoren, (mikro)kanonisch (12 Punkte)

In dieser Aufgabe vergleichen wir die Resultate der mikrokanonischen und der kanonischen Beschreibung eines Systems aus N nicht-wechselwirkenden, quantenmechanischen Oszillatoren, die alle durch dieselbe Frequenz ω charakterisiert sind. Ziel ist es, die *Äquivalenz der Ensembles* im thermodynamischen Limes zu verstehen.



Zunächst betrachten wir das System im *mikrokanonischen* Ensemble:

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

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 M. Bringen Sie das Ergebnis in die Form $S = k_B N f(\tilde{m})$, wobei $\tilde{m} = \frac{M}{N}$. *Hinweis:* Verwenden Sie die Stirling-Formel $\ln k! = k \ln k - k$. Für die Umformungen kann es nützlich sein, zur Entropie den Ausdruck $M \ln (N-1)$ zu addieren und wieder abzuziehen.

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

Wir betrachten das System nun im *kanonischen* Ensemble für ein festes, vorgegebenes $\beta = \frac{1}{k_B T}$:

e) Berechnen Sie die Zustandssumme

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

Machen Sie sich zunächst klar, warum die kanonische Zustandssumme die Form (2) hat. *Hinweis:* Verwenden Sie für die Berechnung $E(\{n_i\}) \equiv \sum_i E_i(n_i) = \hbar\omega \sum_i (n_i + \frac{1}{2})$ und identifizieren Sie die Zustandssumme eines *einzelnen* harmonischen Oszillators, die Sie in Aufgabe 16 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 $\frac{\Delta E}{E}$ berechnen. Berechnen Sie $(\Delta E)^2 = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2$ und zeigen Sie, dass $\lim_{N\to\infty} \frac{\Delta E}{E} = 0$. *Hinweis:* In der Vorlesung (Skript, S. 39) wurde der Zusammenhang zwischen $(\Delta E)^2$ und der Zustandssumme diskutiert.

h) Diskutieren Sie Ihre Ergebnisse hinsichtlich des Unterschiedes zwischen der mikrokanonischen und kanonischen Beschreibung des Systems. Ist die Äquivalenz der Ensembles bereits durch d) und f) gezeigt? Welche Annahmen wurden bei d) gemacht? Welche Bedeutung hat g) für den Vergleich der Ensembles?

Aufgabe 18: Shannon-Entropie, Datenkompression (8 Punkte + 4 Bonuspunkte)

Von Neumann told me, ‘You should call it entropy, for two reasons: In the first place your uncertainty function has been used in statistical mechanics under that name, so it already has a name. In the second place, and more important, nobody knows what entropy really is, so in a debate you will always have the advantage.’

Claude Shannon über seine Motivation, seinem Unwissenheitsmaß den Namen Entropie zu geben.[1]

Die Entropie ist das einflussreichste Konzept, dass die statistische Physik hervorgebracht hat. Leider ist sie auch ein unanschauliches Konzept, dessen Bedeutung schwerer zu erfassen ist, als die von Größen wie Druck oder Volumen. Das liegt auch an den unterschiedlichen Interpretationen: (i) Die Entropie misst die *irreversiblen Änderungen* in einem System, (ii) sie ist ein Maß für die *Unordnung* in einem System, und (iii) ein Maß für unsere *Unwissenheit* über ein System. In Teil C der Vorlesung beschäftigen wir uns mit Interpretation (i), im kommenden Freitagsquiz mit (ii). Hier untersuchen wir die Entropie als Maß für die Unwissenheit in einem informationstheoretischen Kontext.

In der Vorlesung haben Sie die *Gibbs-Entropie* als Verallgemeinerung der Boltzmann-Entropie kennengelernt. In der Informationstheorie definiert man die *Shannon-Entropie* für ein Alphabet Z als

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

Die Summe läuft über alle Zeichen z des Alphabets Z, z.B. $Z = \{a, b, c, d\}$, und p_z ist die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten des Zeichens z. Die so definierte Entropie ist ein Maß für den mittleren *Informationsgehalt* pro Zeichen. Der Faktor k_B taucht in der Shannon-Entropie nicht auf, da wir H nicht mit thermodynamischen Größen in Verbindung bringen wollen. Weiterhin ist es angenehmer, mit dem Logarithmus zur Basis 2 zu rechnen.

[1] Zitiert nach M. Tribus, E.C. McIrvine, “Energy and information”, Scientific American, 224 (September 1971).

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

1. $Z = \{a, b, c, d\},\ p_a = \frac{1}{2},\ p_b = \frac{1}{4},\ p_c = p_d = \frac{1}{8}$.
2. $Z = \{a, b, c, d\},\ p_a = \frac{1}{2},\ p_b = p_c = p_d = \frac{1}{6}$.
3. $Z = \{a, \ldots, h\},\ p_a = \frac{1}{2},\ p_b = \frac{1}{4},\ p_c = \frac{1}{8},\ p_d = \frac{1}{16},\ p_e = \frac{1}{32},\ p_f = \frac{1}{64},\ p_g = p_h = \frac{1}{128}$.
4. $Z = \{a, \ldots, e\},\ p_a = \frac{1}{2},\ p_b = p_c = p_d = p_e = \frac{1}{8}$.

b) Verdeutlichen Sie sich, warum H ein sinnvolles Maß für den Informationsgehalt pro Zeichen ist. Fassen Sie ihre Erkenntnisse kurz zusammen. Hier ein paar nützliche Anregungen:

1. Wieviel Information können Sie mit einem Alphabet, das nur aus einem Zeichen x mit $p_x = 1$ besteht übertragen?
2. 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 empfangen eine Nachricht und berechnen aus den bereits an Sie übermittelten Daten die Shannon-Entropie. Warum lässt sich diese Entropie auch als *Maß für Ihre Unwissenheit* bezüglich der noch nicht empfangenden Nachricht deuten?

c) Jetzt wollen wir die Alphabete aus a) in Bits, also Nullen und Einsen, übersetzen. 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?

d) Alphabet (i) werde wie folgt kodiert: $a \to 0,\ b \to 10,\ c \to 110,\ d \to 111$. Begründen Sie, warum hierdurch ein *eineindeutiger* Zusammenhang zwischen einer Nachricht, etwa '*adbddbca*' und der zugeordneten binären Zeichenkette, etwa '*0111...1100*' gegeben ist.

e) Berechnen Sie die durchschnittliche Länge einer mit obiger Kodierung übersetzten Nachricht aus N Buchstaben. Stellen Sie den Bezug zur Shannon-Entropie her. *Hinweis:* Für lange Nachrichten ($N \gg 1$) können Sie annehmen, dass jeder Buchstabe entsprechend seiner Wahrscheinlichkeit in der Nachricht auftaucht.

f) Für ein Alphabet aus zwei Zeichen gilt H ≤ 1. Es kann also höchstens eine 'Informationseinheit' pro Bit übermittelt werden. Ein beliebiges Alphabet soll binär kodiert werden. Welche hierfür wichtige Information liefert die Shannon-Entropie dieses Alphabets?

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

Die hier angewandte *Entropiekodierung*, bei der Zeichen je nach Auftrittswahrscheinlichkeit durch Codes unterschiedlicher Länge ersetzt werden, ist ein Prinzip, das beim verlustfreien Komprimieren von Daten angewendet wird. So verwenden etwa die Dateiformate zip und png die Huffman-Kodierung als Teil ihrer Kompressionsalgorithmen.