Theoretische Physik IV (Statistische Physik)

Vorlesung: Prof. Dr. Albrecht Klemm
Übungsleitung: M. Sc. Fabian Fischbach
http://www.th.physik.uni-bonn.de/people/fischbach/ws1920/tp4/index.php

–Anwesenheitsaufgaben–

Bearbeitung und Besprechung der Anwesenheitsaufgaben:
Di./Mi. 15./16.10.2019 (in den Übungen)

A.2.1 Die Stirlingsche Näherung (unbepunktet)

In dieser Aufgabe möchten wir im Falle großer N eine systematische Näherung für die Fakultätsfunktion $N!$ entwickeln. Diese ist als *Stirlingsche Näherung* bekannt und beinhaltet auch Korrekturterme.

a) Zunächst möchten wir eine erste Näherung der Fakultät berechnen, welche noch keine Korrekturen beinhaltet. Hierzu verwenden wir die sogenannte *Laplace-Methode*, mit deren Hilfe man schnell um ein Maximum oszillierende Integrale berechnen kann.

   i) Zeigen Sie, dass die Fakultät durch folgendes Integral ausgedrückt werden kann

$$N! = \int_0^\infty x^N \ \mathrm{e}^{-x} \ \mathrm{d}x \ . \tag{1}$$

   ii) Entwickeln Sie die Funktion $\log x - x$ um ihr Maximum. Zeigen Sie damit, dass in erster Näherung Folgendes gilt

$$N! \approx \sqrt{2\pi N} \left(\frac{N}{\mathrm{e}}\right)^N \ . \tag{2}$$

Gleichung (2) stellt eine erste Näherung für die Fakultät bei großen N dar. Jedoch können wir hieraus keine Abschätzung der Korrekturen bzw. des Fehlers gewinnen. Um eine systematische Entwicklung der Fakultät zu bekommen, können wir die *Euler-Maclaurin*-Formel zur asymptotischen Berechnung von endlichen Summen verwenden. Zunächst beginnen wir mit der Herleitung der *Euler-Maclaurin*-Formel.

b) Hierfür definieren wir die *Bernoulli-Polynome* mittels der erzeugenden Funktion

$$g(x,z) := \sum_{n=0}^\infty B_n(x) \frac{z^n}{n!} := \frac{z\mathrm{e}^{xz}}{\mathrm{e}^z - 1} \ , \quad |z| < 2\pi \ . \tag{3}$$

   Des Weiteren definieren wir *Bernoulli-Zahlen* durch $B_n := B_n(0)$.

   i) Zeigen Sie, dass gilt: $B_n(1-x) = (-1)^n B_n(x)$ für $n \in \mathbb{N}_0$.
   <u>*Hinweis*</u>: Zeige zunächst: $g(1-x,z) = g(x,-z)$.

ii) Zeigen Sie, dass für die Ableitung gilt: $B_n'(x) = nB_{n-1}(x)$ und $B_0'(x) = 0$.
<u>*Hinweis:*</u> Starten Sie mit $g'(x,z)$.

iii) Zeigen Sie folgende Relation: $(-1)^n B_n(-x) - B_n(x) = n\ x^{n-1}$.
<u>*Hinweis:*</u> Betrachten Sie: $g(-x,-z) - g(x,z) = z\mathrm{e}^{xz}$.

iv) Berechnen Sie die ersten *Bernoulli-Zahlen* bis B_4. Zeigen Sie ferner, dass $B_{2n+1} = 0$ für $n \in \mathbb{N}$.

c) Zeigen Sie mit Hilfe vollständiger Induktion

$$\begin{aligned}\int_0^1 f(x)\ \mathrm{d}x = \frac{1}{2}\left(f(1)+f(0)\right) - \sum_{p=1}^{q} \frac{B_{2p}}{(2p)!}\left(f^{(2p-1)}(1) - f^{(2p-1)}(0)\right)& \\ + \frac{1}{(2q)!}\int_0^1 f^{(2q)}(x) B_{2q}(x)\ \mathrm{d}x\ .&\end{aligned} \tag{4}$$

<u>*Hinweis:*</u> Beginnen Sie die Induktion mit den Relationen

$$\begin{aligned}\int_0^1 f(x)\ \mathrm{d}x = \int_0^1 f(x)B_0(x)\ \mathrm{d}x &= \int_0^1 f(x)B_1'(x)\ \mathrm{d}x \\ &= \frac{1}{2}\left(f(1)+f(0)\right) - \int_0^1 f'(x)B_1(x)\ \mathrm{d}x\ .\end{aligned} \tag{5}$$

d) Zeigen Sie weiter die Relation

$$\int_m^{m+1} f(x)\ \mathrm{d}x = \int_0^1 f(x+m)\ \mathrm{d}x\ . \tag{6}$$

e) Beweisen Sie mit Hilfe von b) – d) die *Euler-Maclaurin*-Formel

$$\begin{aligned}\sum_{m=a}^{b} f(m) &= \frac{1}{2}\left(f(a)+f(b)\right) + \int_a^b f(x)\ \mathrm{d}x + \sum_{p=1}^{q}\frac{B_{2p}}{(2p)!}\left(f^{(2p-1)}(b) - f^{(2p-1)}(a)\right) + \text{Rest} \\ \text{Rest} &= -\frac{1}{(2q)!}\int_0^1 \sum_{m=a}^{b-1} B_{2q}(x) f^{(2q)}(x+m)\ \mathrm{d}x\ .\end{aligned} \tag{7}$$

Mit Hilfe der *Euler-Maclaurin*-Formel (7) können wir nun systematisch die Korrekturen zur Relation (2) bestimmen.

f) Nutzen Sie (7), um zu zeigen:

$$\log N! = \sum_{m=1}^{N} \log m = \frac{1}{2}\log N + N\log\left(\frac{N}{\mathrm{e}}\right) + 1 + \sum_{p=2}^{2q}\frac{(-1)^p B_p}{p(p-1)}\left(\frac{1}{N^{p-1}} - 1\right) + \text{Rest}\ . \tag{8}$$

g) Bisher hat der Restterm in (8) noch Anteile, welche für große N nicht verschwinden, d.h.

$$\text{Rest} = \lim_{N\to\infty} \text{Rest} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{N^q}\right) \ . \tag{9}$$

Deshalb parametrisieren wir alle endlichen Terme durch α, also

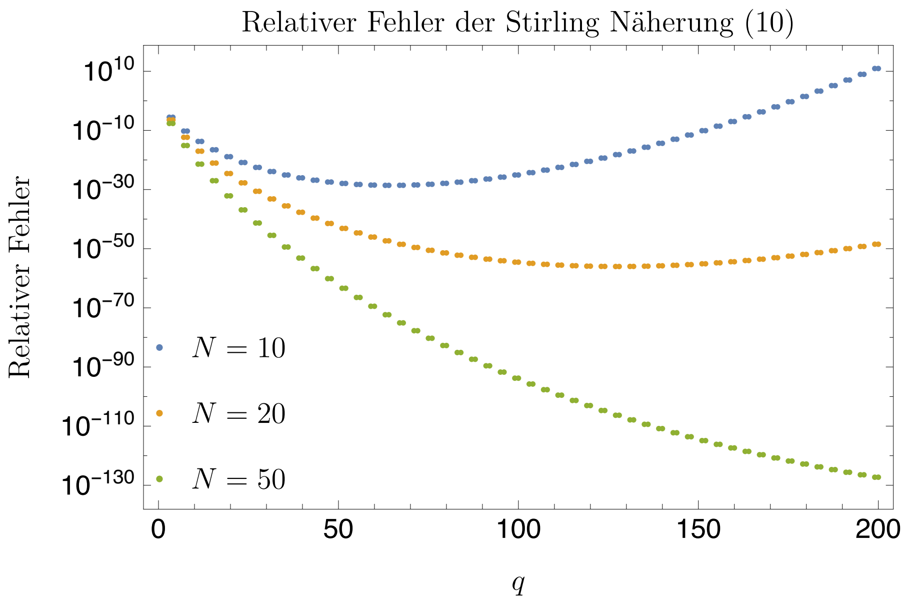
$$\log N! = N \log\left(\frac{N}{\mathrm{e}}\right) + \frac{1}{2}\log N + \alpha + \sum_{p=2}^{2q} \frac{(-1)^p B_p}{p(p-1)} \, \frac{1}{N^{p-1}} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{N^q}\right) \ . \tag{10}$$

Bestimmen Sie die Konstante α durch Vergleich mit (2).

Durch Exponenzieren von (10) erhalten wir eine asymptotische Entwicklung der Fakultät für große N. Die ersten Terme sind gegeben durch

$$N! = \sqrt{2\pi N}\left(\frac{N}{\mathrm{e}}\right)^N \left(1 + \frac{1}{12N} + \frac{1}{288N^2} - \frac{139}{51840N^3} - \frac{571}{2488320N^4}\right) + \mathcal{O}\left(\frac{1}{N^5}\right) \ . \tag{11}$$

Die Reihenentwicklung (11) ist keine konvergente Darstellung der Fakultät, da sie für festes N ab einer gewissen Ordnung in $\frac{1}{N}$ schlechter wird. Eine solche Reihe wird asymptotische Entwicklung genannt. In der unten angegebenen Abbildung ist der relative Fehler zwischen der Stirlingschen Näherung und der Fakultät für verschiedene Werte von N dargestellt. Man kann erkennen, dass die Berücksichtigung weiterer Terme (d.h. größeres q) ab einem bestimmmt Wert q_{optimal} zu einer *Zunahme* des relativen Fehlers führt.



–HAUSAUFGABEN–

Abgabe der Hausaufgaben: Di./Mi. 22./23.10.2019 (in den Übungen)
Besprechung der Hausaufgaben: Di./Mi. 29./30.10.2019 (in den Übungen)

H.2.1 Random Walk in einer Dimension (9 Punkte)

Ein Partikel bewege sich bei jedem Schritt mit je gleicher Wahrscheinlichkeit um eine Einheitsdistanz entweder nach rechts (positive Richtung) oder nach links (negative Richtung).

a) Berechnen Sie

  i) den Erwartungswert $\langle Y \rangle$

  ii) sowie das Moment $\langle Y^2 \rangle$

der Distanz $Y := N_+ - N_-$ zur Startposition. Hierbei ist N_+ die erfolgte Schrittzahl in positiver Richtung nach $N = N_+ + N_-$ erfolgten Schritten insgesamt. (*2 Punkte*)

Wir wollen nun unter Zuhilfenahme der Stirlingschen Näherung in der Form

$$\log(n!) \approx \frac{1}{2}\log(2\pi) + \left(n + \frac{1}{2}\right)\log(n) - n \tag{12}$$

bestätigen, dass die zu Y gehörende Wahrscheinlichkeitsverteilung $w(y)$ im Falle großer Schrittzahl $N \gg 1$ durch eine Gauß-Verteilung approximiert wird. Hierzu entwickeln wir $\log w(y)$ um sein Maximum bis zur (und einschließlich der) quadratischen Ordnung in y.

b) i) Zeigen Sie zunächst die Identität

$$g(y) := \log(w(y)) = \log\left[\binom{N}{(N+y)/2}\right] - N\log(2)\ . \tag{13}$$

  ii) Nutzen Sie die Stirlingsche Näherung (und vereinfachen Sie).

  iii) Zeigen Sie, dass $y = 0$ ein lokales Maximum von g ist.

  iv) Folgern Sie nun für den Grenzfall $N \gg 1$

$$w(y) \propto \exp\left[-\frac{y^2}{2N}\right]. \tag{14}$$

<u>*Hinweis:*</u> Der Proportionalitätsfaktor wird hier nicht bestimmt. Machen Sie sich dennoch klar, wie dieser zu wählen ist, um aus (14) eine korrekt normierte Wahrscheinlichkeitsverteilung zu erhalten. (*5 Punkte*)

Zuletzt vergleichen wir mit der Berechnung über den zentralen Grenzwertsatz.[1].

c) i) Begründen Sie kurz, warum der zitierte Satz hier greift.

  ii) Welchen Erwartungswert $\langle Y \rangle$ und welche Schwankungsbreite Δy erhalten Sie hieraus? Vergleichen Sie. (*2 Punkte*)

[1] Sie dürfen dabei auf die entsprechenden Resultate im Lehrbuch von Schwabl zurückgreifen, nachdem Sie ihre Herleitung verstanden haben.

H.2.2 Die Poisson-Verteilung (10 Punkte)

In dieser Aufgabe möchten wir uns die *Poisson*-Verteilung anschauen. Wir möchten diese aus der *Binomial*verteilung, welche wir bereits in H.1.1 kennen gelernt haben, herleiten.
Zur Erinnerung: die *Binomial*verteilung ist gegeben durch

$$B(k; p, N) = \binom{N}{k} p^k \, (1-p)^{N-k} \; . \tag{15}$$

a) Als erstes möchten wir zeigen, dass im Grenzfall

$$p \longrightarrow 0 \; , \quad N \longrightarrow \infty \quad \text{und} \quad \bar{k} := pN = \text{const.} \tag{16}$$

die *Binomial*verteilung (15) in die nachstehende *Poission*-Verteilung übergeht:

$$P(k; \bar{k}) = \frac{\bar{k}^k}{k!} \, \mathrm{e}^{-\bar{k}} \; . \tag{17}$$

i) Zeigen Sie hierfür zunächst

$$B(k; p, N) = \frac{\bar{k}^k}{k!} \left(1 - \frac{\bar{k}}{N}\right)^N \frac{1 \cdot \left(1 - \frac{1}{N}\right) \cdots \left(1 - \frac{k-1}{N}\right)}{(1-p)^k} \; . \tag{18}$$

(*2 Punkte*)

ii) Zeigen Sie nun mit Hilfe von (18), dass im Grenzfall (16) aus der *Binomial*verteilung die *Poisson*-Verteilung wird. (*1 Punkt*)

b) Im zweiten Teil dieser Aufgabe möchten wir nun einige Kenngrößen der *Poisson*-Verteilung bestimmen.

i) Zeigen Sie, dass (17) normiert ist. Ferner berechnen sie den Erwartungswer $\langle k \rangle$ und das Schwankungsquadrat $(\Delta k)^2$. (*2 Punkte*)

ii) Machen Sie sich klar, dass dies auch unmittelbar aus den für die *Binomial*verteilung berechneten Größen im Grenzfall (16) folgt. (*1 Punkt*)

iii) Berechnen Sie $\langle k^3 \rangle$ und $\langle k^4 \rangle$. Hieraus berechnen Sie $v(k) := \frac{\langle (k-\bar{k})^3 \rangle}{(\Delta k)^3}$ und $\beta_2 := \frac{\langle (k-\bar{k})^4 \rangle}{(\Delta k)^4}$. Hierbei handelt es sich um die Schiefe bzw. die Wölbung einer Wahrscheinlichkeitsverteilung. Die Schiefe einer Verteilung gibt an, wie asymmetrisch die Verteilung ist. Die Wölbung hingegen gibt an, wie steil die Verteilung ist, d.h. wie gewichtig extreme Ereignisse sind. (*3 Punkte*)

iv) Bestimmen Sie die charakteristische Funktion der *Poisson*-Verteilung. Diese ist definiert durch $\chi(m) = \langle \mathrm{e}^{-imk} \rangle$. (*1 Punkt*)