Übungen zur Nichtgleichgewichtsthermodynamik – Blatt 2

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

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

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

$$\langle x^n \rangle = \frac{1}{\mathrm{i}^n} \left. \frac{\mathrm{d}^n \Phi(k)}{\mathrm{d}k^n} \right|_{k=0} \tag{3}$$

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

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

$$K(k) = \ln[\Phi(k)] \tag{4}$$

gegeben. Bestimmen Sie alle nichtverschwindenden Kumulanten

$$\varkappa_n = \frac{1}{\mathrm{i}^n} \left. \frac{\mathrm{d}^n K(k)}{\mathrm{d}k^n} \right|_{k=0}. \tag{5}$$

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

$$P(\vec{x}) = \sqrt{\frac{\det \hat{A}}{(2\pi)^n}} \exp\left(-\frac{1}{2} \vec{x}^{\mathrm{T}} \hat{A} \vec{x}\right) \tag{6}$$

mit der positiv definiten symmetrischen Matrix $\hat{A}$ und zeigen Sie, daß die charakteristische Funktion durch

$$\Phi(\vec{k}) = \exp\left(-\frac{1}{2} \vec{k}^{\mathrm{T}} \hat{A}^{-1} \vec{k}\right) \tag{7}$$

gegeben ist.

Zeigen Sie mit Hilfe der entsprechenden kumulantenerzeugenden Funktion, daß für die Kovarianzmatrix

$$\sigma_{jk} = \left\langle x_j x_k \right\rangle = (\hat{A}^{-1})_{jk} \tag{8}$$

gilt.

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

(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

$$\left\langle x_{j_1} \cdots x_{j_{2n}} \right\rangle = \sum_{k=1}^{P(2n,2)} \prod_{(a,b)\in S_{k,l}(2n,2), a<b} \left\langle x_{j_a} x_{j_b} \right\rangle \tag{9}$$

gilt. Dabei durchläuft k alle Partitionen der Menge $\{1,\ldots,2n\}$ in n zweielementige disjunkte Teilmengen. 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 (9) geben wir als Beispiel den Fall $n=2$ an:

$$\left\langle x_{j_1} x_{j_2} x_{j_3} x_{j_4} \right\rangle = \left\langle x_{j_1} x_{j_2} \right\rangle \left\langle x_{j_3} x_{j_4} \right\rangle + \left\langle x_{j_1} x_{j_3} \right\rangle \left\langle x_{j_2} x_{j_4} \right\rangle + \left\langle x_{j_1} x_{j_4} \right\rangle \left\langle x_{j_2} x_{j_3} \right\rangle. \tag{10}$$

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,

$$P_N(k) = \binom{n}{k} p^k q^{N-k} \tag{11}$$

beträgt (Binomialverteilung).

(b) Berechnen Sie die charakteristische und kumulantenerzeugende Funktion

$$\Phi_N(x) = \sum_{k=0}^{N} P_N(k) \exp(\mathrm{i}kx), \quad K_N(x) = \ln[\Phi_N(x)]. \tag{12}$$

(c) Berechnen Sie Erwartungswert und Kovarianz von k.

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