Recap]

Warum Momentenerzeugende?

Antwort: Taylorentwicklung
→ Koeffizienten sind Momente

$$Z(\alpha) = \langle e^{\alpha x} \rangle = \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{\alpha^\nu \langle x^\nu \rangle}{\nu!}$$

Warum Kumulantenerzeugende?

Antwort: Hätten gern Funktion, bei der Koeffizienten der Taylor-Entwicklung additiv sind falls unkorreliert.

$$\Gamma(\alpha) = \ln Z(\alpha)$$

$$\overset{\text{Taylor um } \alpha=0}{=} \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{\alpha^\nu}{\nu!} \underbrace{\frac{\partial^\nu}{\partial \alpha^\nu} \Gamma(\alpha) \Big|_{\alpha=0}}_{\text{nenne ich Kumulanten } \langle x^\nu \rangle_c} \quad (*)$$

Bem: Berechnung nicht direkt sondern über (*) möglich.

z.B. (1. Kumulante)

$$\frac{\partial}{\partial \alpha} \Gamma(\alpha) \Big|_{\alpha=0} = \frac{\frac{\partial}{\partial \alpha} Z(\alpha)}{\Gamma(0)} \Big|_{\alpha=0} = \langle x \rangle$$

$\Gamma(0) \overset{!}{=} 1$

Informationsgewinn (Fortsetzung)

$$K(p, p') = \sum_i p_i \ln \frac{p_i}{p_i'}$$

Kullback-Leibler Entropie

Eigenschaften:

(Minimum: $p_i = p_i'$)

(vi) $K(p, p')$ ist konvexe Funktion von p, da

$$\frac{\partial^2 K}{\partial p_i \partial p_j} = \frac{\partial}{\partial p_j} \left(\ln \frac{p_i}{p_i'} + 1 \right) = \frac{1}{p_i} \delta_{ij} \geq 0$$

somit ist auch $I(p) = K(p, \frac{1}{N}) - \ln N$ konvex!

- Kontinuierliche Ereignismenge ($x \in \mathbb{R}^d$, $\varrho(x)$)

$$p_i = \varrho(x^i) \Delta^d x$$

$$K(p, p') = \sum_i \Delta^d x \, \varrho(x^i) \ln \frac{\varrho(x^i)}{\varrho'(x^i)}$$

- kein Problem beim Übergang $\Delta^d x \to 0$
- invariant gegenüber Trafo $x \to \tilde{x}$
  $\tilde{\varrho}(\tilde{x}) = \varrho(x) \, \mathrm{Det}\left(\frac{\partial x}{\partial \tilde{x}}\right)$

$\Delta^d x \to 0$: $\boxed{K(\rho,\rho') = \int d^d x\, \rho \ln \frac{\rho}{\rho'}}$ ($I(P)$ ist nicht invariant!)

[Bemerkung: • Interpretation von $-k\dot{K}(\rho,\rho')$ in der Thermodynamik als Entropieproduktion
$kT \cdot K(\rho,\rho')$ als Exergie]

1.3. Verallgemeinerte kanonische Verteilung

Motivation: Makroskop. thermodyn. Zustand ist gegeben durch Mittelwerte $\langle M(x) \rangle$ von Mikroobservablen $M(x)$

Zufallsvariable

Rückschlüsse auf $\rho(X)$ möglich?

Methode: - vorurteilsfreie Schätzung (Jaynes 1957)
(unbiased guess)
- maximales Unwissen

Nebenbedingungen: (1) Normierung von P_i
(2) Mittelwerte $\langle M^\nu \rangle = \sum_{i=1}^{N} P_i M_i^\nu$

$\nu = 1, 2, \ldots m$
$(m \ll N)$

Annahme: Jedes Elementarereignis A_i hat gleiche a-priori Wahrscheinlichkeit wenn keine Kenntnis über $\langle M^\nu \rangle$ vorliegt.

Informationstheoretische Prinzip (Jaynes):

Suche Minimum von $I(P) = \sum_{i=1}^{N} P_i \ln P_i$ $\overset{!}{\cdot}$

Variation: $\delta I(P) = \sum_{i=1}^{N} (\ln P_i + 1)\, \delta P_i$

(von den N Variationen δP_i sind nur $N-m-1$ unabhängig voneinander!)

$\sum_i \delta P_i = 0$ $\rightarrow \lambda = -(\psi+1)$

$\sum_i M_i^\nu \delta P_i = 0$

$\rightarrow$ jeweils ein Lagrange Parameter λ_ν wählen wir so dass restl. δP_i unabhängig

$$\overset{!}{\Rightarrow} \sum_i \Big(\ln P_i - \psi + \underbrace{\lambda_\nu M_i^\nu}_{\text{Summationskonvention über } \nu \; \sum_\nu \lambda_\nu M_i^\nu} \Big)\, \delta P_i \overset{!}{=} 0$$

$$\Rightarrow \boxed{P_i = e^{\psi - \lambda_\nu M_i^\nu}}$$

verallgemeinerte kan. Verteilung

Die Lagrange-Multiplikatoren ψ, λ_ν sind durch $m+1$ Nebenbedingungen bestimmt.

(1) Normierung $\sum_i P_i = 1 \longrightarrow \boxed{e^{-\psi} = \sum_i e^{-\lambda_\nu M_i^\nu}}$

$\hat{=}$ Zustandssumme $Z = e^{-\psi}$

- Abhängigkeiten von ψ

$\psi(\lambda_1, \dots \lambda_m)$ $\longrightarrow$ P_i ist durch $\lambda_1, \dots \lambda_m$ vollständig parametriert.

Kontinuierliche Ereignismenge

$$I(\rho) = \int d^d x\, \rho(x) \ln \rho(x) \overset{!}{=} \text{Minimum}$$

NB: $\int d^d x\, \rho(x) = 1$

$\int d^d x\, \rho(x) M^\nu(x) = \langle M^\nu \rangle$

Funktionalvariation $\delta\rho(x)$:

$$\delta I = \int d^d x (\ln \rho + 1)\, \delta\rho$$

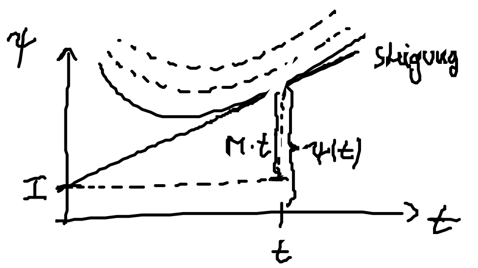
$\int d^d x\, \delta\rho = 0$

$\int d^d x\, M^\nu(x) \delta\rho = 0$

$$\rightarrow \int d^d x \left(\ln \rho - \psi + \lambda_\nu M^\nu \right) \delta\rho \overset{!}{=} 0$$

$$\rightarrow \boxed{\rho(x) = e^{\psi - \lambda_\nu M^\nu(x)}}$$

Einschub: Legendre Transformation:



neue Variable $M = \frac{d\psi}{dt}$

Sei $\psi(t)$ eine Bahn, dann ist $M := \frac{d\psi}{dt}$ die Geschwindigkeit.
Aus $\psi(M)$ lässt sich die Bahn $\psi(t)$ rekonstruieren
wenn $I(M) = \psi(t) - M t$

$$\frac{dI}{dM} = \frac{d\psi}{dt} \cdot \frac{dt}{dM} - \underbrace{M}_{\frac{d\psi}{dt}} \frac{dt}{dM} - t \cdot 1 = -t$$

$$\boxed{-t = \frac{dI}{dM}}$$

$I(M)$ heißt Legendre-Transformierte von $\psi(t)$.

Shannon-Information der verallgem. kan. Verteilung

$$I(p) = \sum_i p_i \ln p_i = \sum_i p_i \left(\psi - \lambda_\nu M_i^\nu\right)$$

$$= \psi \sum_i p_i - \lambda_\nu \sum_i p_i M_i^\nu = \psi - \lambda_\nu \langle M^\nu \rangle$$

$$\boxed{I(p) = \psi(\lambda_1, \ldots \lambda_m) - \lambda_\nu \langle M^\nu \rangle}$$

$$\psi = -\ln\left(\sum_i e^{-\lambda_\nu M_i^\nu}\right)$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial \lambda_\nu} = -\frac{\sum_i (-M_i^\nu) e^{-\lambda_\nu M_i^\nu}}{\underbrace{\sum_i e^{-\lambda_\nu M_i^\nu}}_{e^{-\psi}}} = \sum_i \underbrace{\left(e^{\psi - \lambda_\nu M_i^\nu}\right)}_{p_i} M_i^\nu = \langle M^\nu \rangle$$

$$\boxed{\frac{\partial \psi}{\partial \lambda_\nu} = \langle M^\nu \rangle}$$

Damit können wir eine Legendre-Transformation identifizieren

$$\psi(t) \longrightarrow \psi(\lambda_1, \ldots, \lambda_m)$$

$$M \longrightarrow \langle M^\nu \rangle = \frac{\partial \psi}{\partial \lambda_\nu} \quad \text{neue Variable}$$

$$I(M) \longrightarrow I = \psi - \lambda_\nu \langle M^\nu \rangle \quad \text{Legendre Transformierte}$$

$\Rightarrow$ es folgt $\boxed{\dfrac{\partial I}{\partial \langle M^\nu \rangle} = -\lambda_\nu}$

Zusammengefasst $\boxed{dI(\langle M^\nu \rangle) = -\lambda_\nu \, d\langle M^\nu \rangle}$

(Thermodyn.: Gibbs'sche Fundamentalrelation

$$\left(\text{"} \; dU = \delta Q + \delta W \text{"} \quad \text{1. Hauptsatz "} \right)$$
$$= TdS - pdV$$