4. Vorurteilsfreie Schätzung des statistischen Operators

<u>Ziel</u>: $\rho(t)$ zu einem festen Zeitpunkt t_0 festlegen mit Hilfe der Messgrößen die im Experiment gewählt werden

<u>führt zu</u>: a) Festlegung der Anfangsbedingg. $\rho(t_0)$ vor einer feldinduzierten Dynamik $h_x(t)$, $t \geq t_0$

b) Bestimmung stationärer $\rho(t_0) \equiv \rho \quad \forall t$

soll möglichst vorurteilsfreie Bestimmg. von ρ erfolgen basierend auf wenigen gemessenen Observablen.

4.1. Unschärfemaß f. statistische Operatoren

Mangel an Informationen $\Rightarrow$ wird begegnet mit Mangel an Fragen

Beschreibung d. sehr wenige Observablen:

<u>Beispiele</u>: Energiemessg. $E = \langle H \rangle$

Teilchenzahl $N = \langle \underline{N} \rangle$

wählt ein Satz von Observablen $\{ \xi_\nu \}$
ν numeriert die Observablen im System die gemessen werden sollen

„gemessen:" $\hat{=}$ werden im <u>Mittel</u> festgelegt

$\longrightarrow$ die größte Schwankung, das ist der Preis f.
Reduktion der Information

- welches ρ muß man wählen um unter diesen Nebenbedingg. $(\langle \xi_\nu \rangle)$ nicht zu viel Info zu fordern ?

- dazu Def. Unordnungsmaße $\eta(\rho)$

$$\eta(\rho) = -k \, sp(\rho \ln \rho)$$

η: Maß für Nichtwissen, muß maximiert werden unter den gegeb. NB $\{ \langle \xi_\nu \rangle \}$ festgelegten Mittelwerte

k: Boltzmann Konstante $1{,}38 \cdot 10^{-23} \frac{J}{K}$
legt die exp. Temperatur Skala fest

analog zur Informationstheorie:
Informationsmaß nach C. Shannon

<u>Zeige, daß Maß sinnvoll ist:</u>

a/ $\eta(\rho)$ als Information soll positiv sein

wisse: $\rho = \sum_n r_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n|$: Entw. in Eigenfunktionen

und $\rho|\psi_n\rangle = r_n|\psi_n\rangle$

$$\eta(\rho) = -k\, sp(\rho \ln \rho) = -k \sum_n \langle\psi_n| \rho \underbrace{\ln \rho |\psi_n\rangle}_{\ln r_n |\psi_n\rangle}$$

$$= -k \sum_n \langle\psi_n| r_n \ln r_n |\psi_n\rangle$$

$$= -k\, r_n \ln r_n$$

wisse $r_n > 0$, $\ln r_n < 0$

$\eta(\rho) \geq 0$ f. beliebige statist. Operatoren

b) für ein rein Zustand sollte $\eta \to 0$ gehen,
denn unser Nichtwissen $\to 0$

$$\eta(\rho) = -k \sum_n r_n \ln r_n$$

d.h.: rein Zustand $\to$ nur $1\ r_n = 1 = r_0$, alle and. $r_{n\neq 0} = 0$

einsetzen $\eta(\rho) = -k\, r_0 \ln r_0 = (r_0 = 1) = 0$

für ein rein Zustand gilt $\eta(\rho) = 0$.

c/ bei völlig unbestimmter Zustand (höchst ungl. Mischung) sollte $\eta(\rho) \to \infty$ gehen:

- Dimension d. Hilbertraum sei d
- Wahrscheinlichkeit ein Ensemblemitglied in $|\psi_m\rangle$ ($m: 1-d$)

  ist dann $r_m = \frac{1}{d}$ (auch Würfel $d=6$, $r_m = \frac{1}{6}$ $\forall r_m$
  m: Augenzahl)

$$\Rightarrow \eta(\rho) = -k \sum_{m=1}^{d} r_m \ln r_m = -k \underbrace{\sum_{m=1}^{d}}_{d} \frac{1}{d} \ln\left(\frac{1}{d}\right)$$

$$= -k \ln \frac{1}{d} = k \ln d$$

für Dimension $d \to \infty$ (große System) folgt

$$\eta(\rho) \to \infty$$

$\Rightarrow$ damit ist $\eta(\rho)$ ein plausibles Unordnungsmaß

4.2. Generalisierter kanonischer statistischer Operator

Abkürzung: GKSO

- Satz v. Observablen $\{G_\nu\}$ $\nu = 1, 2, 3, \dots$

$\{ \xi_\nu \}$ bildet Beobachtungsebene

- es muß gelten

$$\left.\begin{aligned} \langle \xi_\nu \rangle &= sp(\rho\, \xi_\nu) \\ sp(\rho) &= 1 \end{aligned}\right\}$$

Nebenbedingungen unter denen die Maximierung d. Unwissenheitsmaßes erfolgt

Jaynesches Prinzip d. maximalen Unwissenheit

Resultat d. η-Maximierung:

$$\rho \xrightarrow{\{\xi_\nu\}} \underbrace{R_{\{\xi_\nu\}}}_{\substack{\text{GKSO zur} \\ \text{Beobachtungsebene} \\ \{\xi_\nu\}}} = \underbrace{\frac{1}{Z_{\{\xi_\nu\}}}}_{\text{Normierung}} \underbrace{e^{-\sum_\nu \lambda_\nu \xi_\nu}}$$

λ_ν : Lagrangemultiplikatoren (Zahlen)

ξ_ν : Observable (Operatoren)

Bemerkungen:

a) R ist der GKSO zur Beobachtungsebene $\{\xi_\nu\}$

b) λ_ν Lagrangemultiplikatoren die die NB sicherstellen (Analogie zur Mechanik)

c) Z ist die Zustandssumme $Z = sp\left(e^{-\sum_\nu \lambda_\nu \xi_\nu}\right)$ (Zahl)

d) nach der Beobachtungsebene werden verschiedene Ensembles benannt:

$\{\xi_\nu\} : \xi_1 = H$ kanonisches Ensemble, $\lambda_1 = \frac{1}{kT}$

$\{\varrho\,v\} : \varrho_{1,2} = H, N$ großkanonisches Ensemble, $\lambda_1 = \frac{1}{kT}$, $\lambda_2 = \frac{\mu}{kT}$

e/ λ_ν sind d. Umgebung festgelegt,

aber über $\langle \varrho_\nu \rangle = sp(R\,\varrho_\nu)$

kann immer über $\langle \varrho_\nu \rangle = f(\lambda_\nu)$ bekommen

$$\lambda_\nu = g(\langle \varrho_\nu \rangle)$$

$\rightarrow \exists$ gewisse Willkür bei Einstellung von $\lambda_\nu, \langle \varrho_\nu \rangle$.

f/ Hoffng., daß auch $\langle F_\nu \rangle$ gut beschrieben die nicht zur Beobachtungsebene gehören.

Beisp. f. Form GK SO an Ende

4.3. Entropie

Das zu einer Beobachtungsebene gehörige maximale Unwissenheitsmaß wird Entropie S genannt.

$$S \equiv -k\, sp(R \ln R)$$

explizite Form d. Entropie:

$$S = -k\, sp\left(\frac{1}{Z} e^{-\sum_\nu \lambda_\nu \zeta_\nu} \ln\left(\frac{1}{Z} e^{-\sum_\nu \lambda_\nu \zeta_\nu}\right)\right)$$

$$= -k\, sp\left(\underline{\frac{1}{Z} e^{-\sum_\nu \lambda_\nu \zeta_\nu}} \left(-\ln Z - \sum_\nu \lambda_\nu \zeta_\nu\right)\right)$$

$$\boxed{S = k \sum_\nu \lambda_\nu \langle \zeta_\nu \rangle + k \ln Z}$$

mit $sp(R) = 1$

$sp(\underline{R}\, \zeta_\nu) = \langle \zeta_\nu \rangle$

Später wird Entropie als Potential zur Bestimmung der thermodynamischen Größen verwendet.

4.4. Gibbs - Fundamentalrelation

$$dS = k \sum_\nu \lambda_\nu \left(d\langle \zeta_\nu \rangle - \sum_\alpha \left\langle \frac{\partial}{\partial h_\alpha} \zeta_\nu \right\rangle dh_\alpha \right)$$

(Beweis gleich)

Bemerkungen:

a) legt die Variablen der Entropie fest: $S = S(\langle \zeta_\nu \rangle, h_\alpha)$

b) Zustandsgleichung: $\frac{\partial S}{\partial \langle \zeta_\nu \rangle} = k \lambda_\nu$

c) Gleichg. f. Lagrange multiplikator

$$\frac{\partial S}{\partial h_\alpha} = -\langle \partial_{h_\alpha} g_\nu \rangle$$

Programm:

1. S aus R berechnen $R = R(H, N \dots)$
2. λ_ν interpretieren nach (c)
   was sind die λ_ν f. physikal. Größe?
3. nach (b) Zustandsgleichungen bestimmen

Herleitung der Gibbsrelation:

wissen: $S = k \sum_\nu \lambda_\nu \langle g_\nu \rangle + k \ln Z$

dS bilden, aber Achtung:

$\langle g_\nu \rangle, \lambda_\nu, Z(g_\nu(h_\alpha), \lambda_\nu)$

sind nicht unabhängig voneinander

dS muß aber in unabhängigen Variablen ausgedrückt werden, beachten:

$\lambda_\nu = \lambda_\nu(\langle g_\nu \rangle)$ bzw. $Z = Z(h_\alpha, \lambda_\nu)$

$$dS = k \sum_\nu d\lambda_\nu \langle g_\nu \rangle + \lambda_\nu \, d\langle g_\nu \rangle + k \frac{dZ}{Z}$$

<u>verwende</u> a) $\boxed{\langle \rho_\nu \rangle = -\frac{\partial Z}{\partial \lambda_\nu} \frac{1}{Z}}$ und $Z = sp\left(e^{-\sum_\nu \lambda_\nu \rho_\nu}\right)$

b) $Z = Z(h_\alpha, \lambda_\nu)$

$$dZ = \sum_\nu \frac{\partial Z}{\partial \lambda_\nu} d\lambda_\nu + \sum_\alpha \frac{\partial Z}{\partial h_\alpha} dh_\alpha$$

$$dS \underset{(a)}{=} k \sum_\nu d\lambda_\nu \left(-\frac{\partial Z}{\partial \lambda_\nu} \frac{1}{Z}\right) + \lambda_\nu \, d\langle \rho_\nu \rangle + k \frac{dZ}{Z}$$

$$dS \underset{(b)}{=} k \sum_\nu d\lambda_\nu \left(-\frac{\partial Z}{\partial \lambda_\nu} \frac{1}{Z}\right) + \lambda_\nu \, d\langle \rho_\nu \rangle$$

$$+ k\left(\sum_\nu \frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \lambda_\nu} d\lambda_\nu + \sum_\alpha \frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial h_\alpha} dh_\alpha\right)$$

$$dS = k \sum_\nu \lambda_\nu \, d\langle \rho_\nu \rangle + \underbrace{k \sum_\alpha \frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial h_\alpha} dh_\alpha}$$

$$\sum_\alpha \frac{1}{Z} sp\left(\frac{\partial}{\partial h_\alpha} e^{-\sum_\nu \lambda_\nu \rho_\nu(h_\alpha)}\right) dh_\alpha$$

$$= \sum_\alpha \frac{1}{Z} sp\left(e^{-\sum_\nu \lambda_\nu \rho_\nu} \left(-\sum_\nu \lambda_\nu \partial_{h_\alpha} \rho_\nu(h_\alpha)\right)\right) dh_\alpha$$

$$R$$

$$= \sum_{\alpha\nu} \lambda_\nu \langle \partial_{h_\alpha} \xi_\nu \rangle \, dh_\alpha$$

Gibbs-Fundamentalrelation

$$dS = k \sum_\nu \lambda_\nu \left(d\langle \xi_\nu \rangle - \sum_\alpha \langle \partial_{h_\alpha} \xi_\nu \rangle \, dh_\alpha \right)$$

Bemerkungen:

a) $S = S(\langle \xi_\nu \rangle, h_\alpha)$

b) verallgemeinerte Kraft $-\langle \partial_{h_\alpha} \xi_\nu \rangle \equiv M_{\nu,\alpha}$

später physikalisch interpretieren

c) Zustandsgleichungen: $k\lambda_\nu = \partial_{\langle \xi_\nu \rangle} S$

Lagrangefaktoren: $k \sum_\nu \lambda_\nu M_{\nu,\alpha} = \partial_{h_\alpha} S$

$$\boxed{\text{Ziel später: } \xi_\nu \to R \to S \to \text{Zustandsgl.}}$$

4.5. Beweis der Form v. R

Unschärfe f. R bestimmen

$$R = \frac{1}{Z} e^{-\sum_\nu \lambda_\nu \xi_\nu} \rightarrow \eta(R) = k \sum_\nu \lambda_\nu \, sp(R \xi_\nu) + k \ln Z$$

Idee: nehme irgendein statistischen Operator $\rho \neq R$ an und zeige daß der immer ein kleineres Unschärfemaß hat als R

zu zeigen: $\eta(R) \geq \eta(\rho)$

$\longrightarrow$ R ist ordentlich gewählt

(i) $sp(\rho \ln R) = -\sum_\nu \lambda_\nu \, sp(\rho \xi_\nu) - \ln Z$

$sp(R \ln R) = -\sum_\nu \lambda_\nu \, sp(R \xi_\nu) - \ln Z$

(*) $sp(\rho \ln R) = sp(R \ln R)$, weil (Vorbedingung)

$sp(\rho \xi_\nu) = sp(R \xi_\nu)$

(ii) wirklicher Beweis $\eta(R) \geq \eta(\rho)$

behaupte $\underbrace{sp(\rho \ln \rho) - sp(R \ln R)}_{\text{mittels } *} \geq 0$ ist zu zeigen

$= sp(\rho \ln \rho) - sp(\rho \ln R)$

(Annahme: kenne die Eigendarstellung

$\rho |r_n\rangle = r_n |r_n\rangle$

$$R|w_n\rangle = w_n|w_n\rangle \quad)$$

$$= \sum_m r_m\left(\ln r_m - \langle r_m|\ln R|r_m\rangle\right)$$ Spur in $|r_m\rangle$ ausgeführt

$$= \sum_m \sum_n \Big(\langle r_m|w_n\rangle\langle w_n|r_m\rangle r_m \ln r_m$$
$$- r_m \langle r_m|\ln R|w_n\rangle\langle w_n|r_m\rangle \Big)$$

$$= \sum_{m,n} |\langle r_m|w_n\rangle|^2 r_m \left(\ln r_m - \ln w_n\right)$$

$$= \sum_{m,n} |\langle r_m|w_n\rangle|^2 \left(-r_m \ln \frac{w_n}{r_m}\right)$$, mit $\ln x \le x-1$

$$\ge \sum_{m,n} |\langle r_m|w_n\rangle|^2 \, (-r_m) \left(\frac{w_n}{r_m} - 1\right)$$

$$= \sum_m |\langle r_m|w_n\rangle|^2 \left(r_m - w_n\right)$$

$$= \sum_m r_m - \sum_n w_n = 1 - 1 = 0$$

$$\longrightarrow \quad \mathrm{sp}(\rho \ln \rho) - \mathrm{sp}(R \ln R) \ge 0$$