S-Theorem

Projekt 2: Entropieabsenkung als Maß für den Ordnungsgrad von Nichtgleichgewichtszuständen

Projekt zur Statistischen Physik des Nichtgleichgewichts SoSe 18

Kang Chen	357642
Dinghe Dai	398461
David Hering	363643

Abstract: Die folgende Ausarbeitung befasst sich im Zuge der Frage nach (Un)ordnung und Selbstorganisation in Nichtgleichgewichtssystemen und der Rolle der Entropie hierbei mit Klimontovich's S-Theorem am Beispiel der Brown'schen Bewegung nichtlinear dissipativer Poincaré-Oszillatoren.

Inhaltsverzeichnis

1. Motivation

Entropie ist den meisten bekannt als ein Maß für Ordnung beziehungsweise Unordnung.
Das erste Problem ergibt sich bei der Frage „*was ist Unordnung?*“.
Gerade bei Systemen im Nichtgleichgewicht ist diese Frage keineswegs trivial. Man nehme nur ein Beispiel aus der Hydrodynamik - eine laminare Strömung, die bei Erhöhung der Strömungsgeschwindigkeit und Überschreiten eines kritischen Schwellwertes eines Bifurkationsparameters (beispielsweise der Reynoldszahl) das turbulente Verhalten einer Kármán'schen Wirbelstraße zeigt.
Welcher der beiden Zustände ist nun geordneter? Im Gegensatz zur laminaren Strömung zeigt der turbulente Zustand etwas, das man als makroskopische Struktur identifizieren kann.

Die Frage nach Unordnung oder Ordnung kann auch auf andere Art und Weise gestellt werden - *was ist Selbstorganisation?* (vgl. Klimontovich, Z.Phys. B - Condensed Matter 66, 125-127 (1987))
Diese Fragestellung führt zum S-Theorem. Klimontovich fasst die Beschreibung hierzu bereits im Abstract sehr treffend zusammen: „*If, as the value of the control parameter is increased and the system recedes from the 'equilibrium' state, the Boltzmann-Gibbs entropy* **renormalized to a given value of mean energy** *decreases, then the process of self-organization is under way.*“ An dieser Stelle ist der markierte Teil wichtig, da sich die Zustände aufgrund verschiedener Energien nicht sinnvoll vergleichen ließen - sie müssen entsprechend normiert werden.

Die folgenden Ausarbeitung behandelt die Entropieabsenkung als Maß für den Ordnungsgrad von Nichtgleichgewichtszuständen am Beispiel der Brown'schen Bewegung nichtlinear dissipativer Oszillatoren anhand des Poincaré-Oszillator-Modells.
Abschließendes Ziel der Ausarbeitung ist zu zeigen, dass

$$\left(\frac{\partial S}{\partial \delta}\right)_{\langle H\rangle} < 0$$

gilt, wobei S die Entropie, δ die Anregungsstärke der Oszillatoren und H die (mittlere) Energie ist.

2. Stationäre Wahrscheinlichkeitsdichte P^0

Die selbsterregten Schwingungen werden für den Poincaré- und den van der Pol-Oszillator untersucht. Ausgang ist die Langevin-Gleichung

$$\frac{d^2q}{dt^2} + \gamma\left(q, \frac{dq}{dt}\right)\frac{dq}{dt} + a \cdot q = \sqrt{D}\zeta(t)$$

wobei gilt:

Poincaré-Oszillator

- $\gamma(H) = \frac{1}{2}\left[(\gamma_0 - \delta) + 2uH\right]$
- $a = 1$
- $\gamma_0, \delta, u > 0$
- $H = \frac{1}{2}(p^2 + q^2)$, $p := \frac{dq}{dt}$

van der Pol-Oszillator

- $\gamma(H) = \frac{1}{2}\left[\gamma_0 - \left(\delta - \frac{4}{3}u\dot{q}^2\right)\right]$
- $a = \omega_0^2$
- $\gamma_0, \delta, u > 0$
- $H = \frac{1}{2}p^2 + V(q)$, $p := \frac{dq}{dt}$
- geringe Dissipation $\gamma_0, \delta, u \sim \varepsilon \ll 1$
- schwaches Rauschen $D \sim \varepsilon$
- langsame Änderungen in Amplitude, Phase etc. $\sim \frac{1}{\varepsilon}$

In beiden Fällen ist ζ Gauß'sches weißes Rauschen, also

$$\langle \zeta(t) \rangle = 0,\ \langle \zeta(t+\tau)\zeta(t) \rangle = \delta(\tau)$$

Im Folgenden wird nur die Herleitung für P^0 des Poincaré-Oszillators betrachtet. Mit obigen Näherungen ergibt sich selbiges P_0 auch für den van der Pol-Oszillator (vgl. Ebeling, Engel, Herzel; „*Selbstorganisation in der Zeit*“; Berlin, Akademie Verlag 1990; Wissenschaftliche Taschenbücher 309)

Es ist

$$\frac{dq}{dt} = \dot{q} = p$$

und aus der Langevin-Gleichung

$$\dot{p} = -\gamma p - q + \sqrt{D}\zeta(t)$$

mit γ und H s.o.
Definiere Folgendes, sodass durch Erhöhung der Dimension der Gleichung die Ordnung sinkt:

$$\underline{u} = \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix},\ \underline{\gamma} = \begin{pmatrix} p \\ -p-q \end{pmatrix},\ \underline{\zeta} = \begin{pmatrix} 0 \\ \sqrt{D}\zeta \end{pmatrix},\ \underline{g} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & D \end{pmatrix}$$

Es gilt

$$\frac{\partial}{\partial t} p(\underline{u}, t) = -\frac{\partial}{\partial \underline{u}}(\gamma(\underline{u})P(\underline{u}, t)) + \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial \underline{u}} \cdot \underline{g} \cdot \frac{\partial}{\partial \underline{u}} P(\underline{u}, t)$$
$$\Leftrightarrow \dot{p} = -\partial_q(pP) + \partial_p[(\gamma p + q)P] + D\partial^2_{p^2}P$$

Für die stationäre Lösung muss $\dot{p} \overset{!}{=} 0$ gelten, also

$$0 = -\partial_q(pP) + \partial_p[(\gamma p + q)P] + D\partial^2_{p^2}P$$

mit

$$p = \frac{\partial H}{\partial p}, q = \frac{\partial H}{\partial q} \quad \text{und}$$

$$P = f(H) \ \wedge \ \frac{\partial^2 H}{\partial q \partial p} = 0 \Rightarrow \partial_q \left(\frac{\partial H}{\partial p} P \right) = \partial_p \left(\frac{\partial H}{\partial q} P \right)$$

$$\Rightarrow \gamma \frac{\partial H}{\partial p} P^0 + D \frac{\partial H}{\partial p} P^0 = 0$$

Dann ist

$$\begin{aligned} P^0(H) &= C \cdot \exp\left(-\frac{1}{D} \int \gamma dH \right) \\ &= C \cdot \exp\left(-\frac{1}{D}\frac{1}{2} \left[(\gamma_0 - \delta)H + uH^2 \right] \right) \\ &= \frac{1}{Z} \exp\left(-\frac{1}{D} \left[(\gamma_0 - \delta)H + uH^2 \right] \right) \end{aligned}$$

3. Entropie

Um Schreibarbeit zu sparen, definiere α, β und $\Phi(x)$ folgendermaßen:

$$P^0(H) = \frac{1}{Z} \exp(-\beta H - \alpha H^2) \quad \text{mit} \quad \beta = \frac{\gamma_0 - \delta}{D}, \alpha = \frac{u}{D}$$

$$Z = \int_0^\infty \exp(-\beta H - \alpha H^2) = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \Phi(\frac{\beta}{2\sqrt{\alpha}})$$

$$\Phi(y) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} e^{y^2} \int_y^\infty e^{-t^2} dt = e^{y^2} \operatorname{erfc}(y)$$

$$\frac{d}{dx} \operatorname{erfc}(x) = -\frac{2}{\sqrt{\pi}} e^{-x^2}$$

Berechne nun die Entropie in Abhängigkeit von der stationären Wahrscheinlichkeitsdichte

$$S = -\int_0^\infty dH P^0(H) \ln P^0(H) = \ln Z + \beta \langle H \rangle + \alpha \langle H^2 \rangle$$

Mit den n-ten Momenten von H

$$\langle H^n \rangle = \int_0^\infty dH H^n P^0(H) = \frac{(-1)^n}{2Z}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}\frac{\partial^n}{\partial\beta^n}\Phi\left(\frac{\beta}{2\sqrt{\alpha}}\right)$$

erhalten wir

$$S = \frac{1}{2} - \frac{\beta^2}{4\alpha} + \frac{\beta}{2\sqrt{\pi\alpha}\Phi(\frac{\beta}{2\sqrt{\alpha}})} + \ln\left(\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}\Phi(\frac{\beta}{2\sqrt{\alpha}})\right)$$

Allerdings ist dies nicht besonders praktikabel - durch das Ausdruck von S mittels $\Phi(x)$ erhält man beim Ableiten durch Beachtung der Kettenregel sich verdoppelnde Terme.
Nutze daher die Zustandssumme Z, da

$$\frac{\partial}{\partial\beta}Z = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}\left(\frac{\beta}{2\alpha}\Phi\left(\frac{\beta}{2\sqrt{\alpha}}\right) - \frac{1}{\sqrt{\pi\alpha}}\right) = \frac{\beta}{2\alpha}Z - \frac{1}{2\alpha}$$

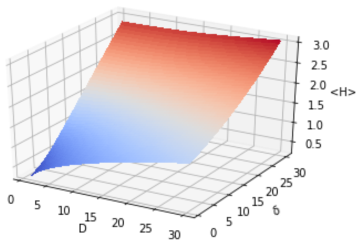
rekursiv ist. Mit obiger Relation folgt

$$\langle H^n \rangle = \frac{(-1)^n}{Z}\frac{\partial^n}{\partial\beta^n}Z$$

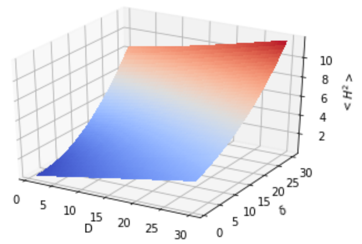
und damit explizit

$$\begin{aligned}
\langle H \rangle &= \frac{(-1)}{Z}\frac{\partial}{\partial\beta}Z = -\frac{1}{2\alpha} + \frac{\beta}{2\alpha Z} \\
\langle H^2 \rangle &= \frac{1}{Z}\frac{\partial^2}{\partial\beta^2}Z = \frac{1}{2\alpha} + \frac{\beta^2}{4\alpha} - \frac{\beta}{4\alpha^2 Z} \\
\langle H^3 \rangle &= \frac{-1}{Z}\frac{\partial^3}{\partial\beta^3}Z = -\frac{3\beta}{4\alpha^2} - \frac{\beta^3}{8\alpha^3} + \left(\frac{1}{2\alpha^2} + \frac{\beta^2}{8\alpha^3}\right)\frac{1}{Z} \\
\langle H^4 \rangle &= \frac{1}{Z}\frac{\partial^4}{\partial\beta^4}Z = \left(\frac{3}{4\alpha^2} - \frac{3\beta^2}{4\alpha^3} + \frac{\beta^4}{16\alpha^4}\right) - \left(\frac{5\beta}{8\alpha^3} + \frac{\beta^3}{16\alpha^4}\right)\frac{1}{Z}
\end{aligned}$$

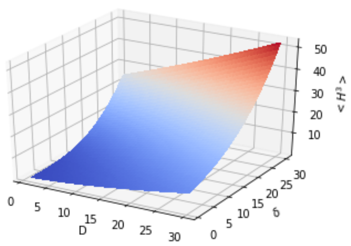
Die folgenden Abbildungen stellen diese ersten vier Momente graphisch dar, wobei $\gamma_0 = 1$ und $u = 5$ gewählt wurde.



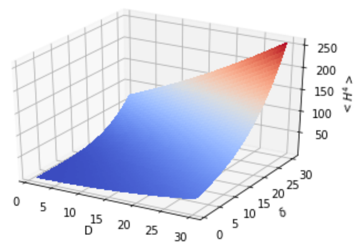
(a) $D - \delta - \langle H \rangle$



(b) $D - \delta - \langle H^2 \rangle$



(c) $D - \delta - \langle H^3 \rangle$



(d) $D - \delta - \langle H^4 \rangle$

Abbildung 1: Die ersten vier Momente von H, mit $\gamma_0 = 1$, $u = 5$. Die einzelnen Bildunterschriften sind in der Form $x - y - z$ (Bildachsen).

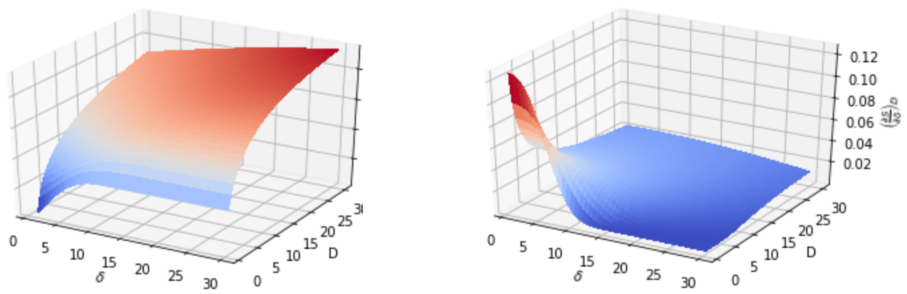
Nun können diese Momente genutzt werden, um die Entropie S auszudrücken als

$$S = \frac{1}{2} - \frac{\beta^2}{4\alpha} + \frac{\beta}{4\alpha Z} + \ln Z \tag{I}$$

Die partielle Ableitung nach δ von I liefert

$$D\left(\frac{\partial S}{\partial \delta}\right)_D = \frac{\langle H^2 \rangle}{2Z} > 0 \tag{II}$$

Auch diese beiden Relationen können in einem 3D-Plot visualisiert werden, siehe Abb. 2.



(a) $\delta - D - S$

(b) $\delta - D - \left(\frac{\partial S}{\partial \delta}\right)_D$

Abbildung 2: Entropie und der zugehörige Anstieg

Hieraus würde zunächst folgen, dass die Entropie bei Erhöhung der Anregungsstärke δ anwächst. Jedoch wurde hierbei außer Acht gelassen, dass $\langle H \rangle$ konstant sein muss, Abbildung 1a zeigt hingegen, dass die gemittelte Energie $\langle H \rangle$ mit der Anregungsstärke δ bei $D = \text{const}$ ansteigt.
Dies berücksichtigend muss die partielle Ableitung der Entropie nach δ unter konstantem $\langle H \rangle$ erfolgen:

$$\left(\frac{\partial S}{\partial \delta}\right)_{\langle H \rangle} = \left(\frac{\partial S}{\partial \delta}\right)_D + \left(\frac{\partial S}{\partial D}\right)_\delta \left(\frac{\partial D}{\partial \delta}\right)_{\langle H \rangle} \tag{III}$$

Da D auch eine Funktion von δ ist, folgt mithilfe des totalen Differentials,

$$d\langle H \rangle = \left(\frac{\partial \langle H \rangle}{\partial D}\right)_\delta dD + \left(\frac{\partial \langle H \rangle}{\partial \delta}\right)_D d\delta \stackrel{!}{=} 0 \tag{IV}$$

und der Bedienung, dass $\langle H \rangle = \text{const}$ gilt, dass die Gleichung IV gleich null sein muss. Daraus folgt,

$$\left(\frac{\partial D}{\partial \delta}\right)_{<H>} = -\frac{\left(\frac{\partial \langle H \rangle}{\partial \delta}\right)_D}{\left(\frac{\partial \langle H \rangle}{\partial D}\right)_\delta} \tag{V}$$

Wir setzen V in III ein und erhalten

$$\left(\frac{\partial S}{\partial \delta}\right)_{\langle H \rangle} = \left(\frac{\partial S}{\partial \delta}\right)_D + \frac{\langle H \rangle - Z}{2\alpha D} \left(\frac{1}{\langle H^2 \rangle} + \frac{\beta}{2Z}\right) \tag{VI}$$

Um nun das Vorzeichen von $\left(\frac{\partial S}{\partial \delta}\right)_{\langle H \rangle}$ zu untersuchen, multipliziere Glg. VI mit Glg. II:

$$\begin{aligned} D^2 \left(\frac{\partial S}{\partial \delta}\right)_{\langle H \rangle} \left(\frac{\partial S}{\partial \delta}\right)_D = \alpha^2 \Big(&\big\langle (H - \langle H \rangle)(H^2 - \langle H^2 \rangle) \big\rangle^2 \\ &- \left\langle (H - \langle H \rangle)^2 \right\rangle \left\langle \left(H^2 - \langle H^2 \rangle\right)^2 \right\rangle \Big) \end{aligned} \tag{VII}$$

Mithilfe der Schwarzschen Ungleichung folgt, dass die rechte Seite kleiner gleich null ist. Da D größer gleich null ist und

$$D\left(\frac{\partial S}{\partial \delta}\right)_D = \frac{\langle H^2\rangle}{2Z} > 0$$

gilt, ergibt sich

$$\left(\frac{\partial S}{\partial \delta}\right)_{\langle H\rangle} \leq 0$$

Man multipliziere die Gleichung VII aus und stelle $\left(\frac{\partial S}{\partial \delta}\right)_{\langle H\rangle}$ auf:

$$\begin{aligned}\left(\frac{\partial S}{\partial \delta}\right)_{\langle H\rangle} = \frac{\alpha^2}{D^2\left(\frac{\partial S}{\partial \delta}\right)_D}&\Big(\left(\langle H^3\rangle - \langle H\rangle\langle H^2\rangle\right)^2 \\ &- \left(\langle H^2\rangle - \langle H\rangle^2\right)\left(\langle H^4\rangle - \langle H^2\rangle^2\right)\Big)\end{aligned} \tag{VIII}$$

Abbildung 3 zeigt Plots der Gleichungen VIII und VI.

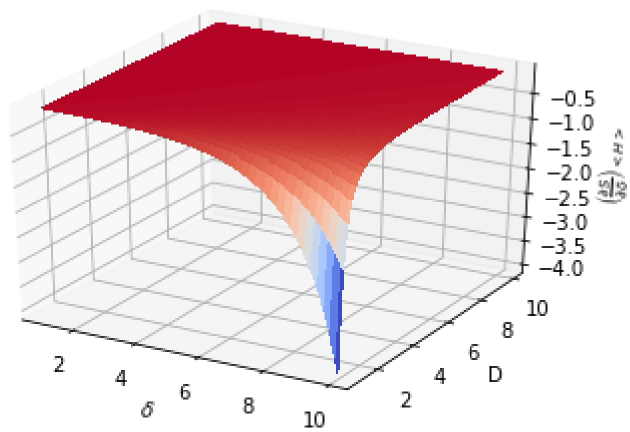


Abbildung 3: $\delta - D - \left(\frac{\partial S}{\partial \delta}\right)_{\langle H\rangle}$, die Änderung der Entropie $\left(\frac{\partial S}{\partial \delta}\right)_{\langle H\rangle}$ ist hierbei stets negativ.

Der Plotbereich reicht in δ und D von 1 bis 10 bei einer Anzahl von etwa 900 Stützpunkten und einem quadratischen Fehler von annähernd 10^{-11}. Darauf basierend können wir mit recht hoher Sicherheit schlussfolgern, dass die Gleichungen VI und VIII äquivalent und stets negativ sind.

4. Fazit

Es konnte gezeigt werden, dass

$$\left(\frac{\partial S}{\partial \delta}\right)_{\langle H \rangle} < 0$$

gilt. Die Änderung (Erhöhung) des Bifurkationsparameters (hier δ) bei konstanter Energie $\langle H \rangle$ und die damit verbundenen selbsterregten Schwingungen gehen folglich mit einer Absenkung der (renormierten) Entropie ein.

Literatur

[1] Ebeling, W., Engel, H., Herzel, H.: „*Selbstorganisation in der Zeit*"; Berlin, Akademie Verlag 1990; Wissenschaftliche Taschenbücher 309, 101-122

[2] Engel- Herbert, H., Ebeling, W.: „*The behaviour of the entropy during transitions far from thermodynamic equilibrium: I. Sustained oscillations*". Physica A 149 (1–2) (1988) 182–194.