Annika Burkowitz, Sebastian Bange, Alexander Harnisch

Aufgabe 5

In dieser Aufgabe wird die MAXWELL'sche Geschwindigkeitsverteilung in der Form

$$f(v) = N4\pi v^2 \exp\left(-\frac{mv^2}{2k_{\rm B}T}\right) \tag{1}$$

betrachtet. Zuerst ist die Verteilung zu normieren. Dafür kann die Gammafunktion verwendet werden, es geht aber auch viel schöner ohne. Dafür definieren wir zuerst

$$I := \int_0^\infty \exp(-\alpha t x^2) \mathrm{d}x. \tag{2}$$

Um I auszuwerten wird quadriert und anschließend in Polarkoordinaten gewechselt:

$$I^{2} = \left(\int_{0}^{\infty} \exp(-\alpha t x^{2}) dx\right) \left(\int_{0}^{\infty} \exp(-\alpha t x^{2}) dx\right)$$
(3)

$$= \int_0^\infty \int_0^\infty \exp(-\alpha t(x^2 + y^2)) dx dy \tag{4}$$

$$= \int_0^{\pi/2} d\phi \int_0^\infty \exp(-\alpha t r^2) r dr \tag{5}$$

$$= \frac{\pi}{4} \int_0^\infty \exp(-\alpha t u) du \tag{6}$$

$$=\frac{\pi}{4\alpha t}.\tag{7}$$

Wegen I > 0 ergibt sich somit

$$I = \sqrt{I^2} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha t}} \,. \tag{8}$$

Das für die Normierung zu berechnende Integral lässt sich nun auswerten:

$$\int_0^\infty x^2 \exp(-\alpha x^2) = -\frac{1}{\alpha} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} I \Big|_{t=1} = \frac{1}{4} \sqrt{\pi} (\alpha t)^{-\frac{3}{2}} \Big|_{t=1} = \frac{\sqrt{\pi}}{4\alpha^{\frac{3}{2}}}.$$
 (9)

Damit erhalten wir

$$\int_0^\infty f(v) dv = N4\pi \frac{\sqrt{\pi}}{4} \left(\frac{2k_B T}{m}\right)^{\frac{3}{2}} \stackrel{!}{=} 1 \tag{10}$$

$$\Rightarrow N = \left(\frac{m}{2\pi k_{\rm B}T}\right)^{\frac{3}{2}}.$$
 (11)

a)

Die wahrscheinlichste Geschwindigkeit $v_{\rm m}$ ist die Stelle, an der f maximal wird. Daher bilden wir die Ableitung

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}v}f = 4\pi Nv \exp\left(-\frac{mv^2}{2k_{\mathrm{B}}T}\right) \left(2 - \frac{mv^2}{k_{\mathrm{B}}T}\right) \stackrel{!}{=} 0.$$
 (12)

Das Extremum bei 0 ist offenbar ein Tiefpunkt, da f keine negativen Werte annimmt und f(0) = 0. Daraus folgt, dass die beiden anderen Extrema Maxima sind, wobei das positive der beiden an der gesuchten Stelle

$$v_{\rm m} = \sqrt{\frac{2k_{\rm B}T}{m}} \tag{13}$$

liegt.

b)

Der Erwartungswert des Geschwindigkeitsbetrags lässt sich wie folgt berechnen:

$$\langle v \rangle_f = \int_0^\infty v f(v) dv = 4\pi N \int_0^\infty v^3 \exp\left(-\frac{mv^2}{2k_{\rm B}T}\right) dv$$
 (14)

$$=4\pi N \int_0^\infty \frac{u}{2} \exp\left(-\frac{mu}{2k_{\rm B}T}\right) du \tag{15}$$

$$=2\pi N\left(\left[-\frac{2uk_{\rm B}T}{m}\exp\left(-\frac{mu}{2k_{\rm B}T}\right)\right]_{u=0}^{u=\infty} + \frac{2k_{\rm B}T}{m}\int_{0}^{\infty}\exp\left(-\frac{mu}{2k_{\rm B}T}\right)\mathrm{d}u\right)$$
(16)

$$=2\pi N \left(\frac{k_{\rm B}T}{m}\right)^2 \stackrel{\text{(11)}}{=} 2\sqrt{\frac{2k_{\rm B}T}{\pi m}} = \frac{2}{\sqrt{\pi}}v_{\rm m}. \tag{17}$$

c)

Gesucht ist der Median $v_{0,5}$, für den gilt

$$\int_{0}^{v_{0,5}} f(v) dv = \frac{1}{2}.$$
 (18)

Es ist nicht möglich, eine analytische Lösung für $v_{0,5}$ zu finden, da für f(v) keine Stammfunktion gefunden werden kann. Daher lösen wir die Gleichung numerisch, dafür muss diese zuerst in eine dimensionslose Form gebracht werden. Mit dem vorherigen Ergebnis (13) gilt

$$N = \pi^{-\frac{3}{2}} v_{\rm m}^{-3} \Rightarrow f(v) = \frac{4}{\sqrt{\pi} v_{\rm m}} \frac{v^2}{v_{\rm m}^2} \exp\left(-\frac{v^2}{v_{\rm m}^2}\right). \tag{19}$$

Mit der Substitution $x=\frac{v}{v_{\rm m}}$ nimmt (18) die für numerische Integration geeignete Form

$$\int_0^{v_{0,5}} f(v) dv = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\frac{v_{0,5}}{v_{\rm m}}} x^2 e^{-x^2} dx \stackrel{!}{=} \frac{1}{2}$$
 (20)

an. Das Integral kann nun sukzessive mit einer beliebigen NEWTON-COTES-Formel berechnet werden, bis es den gewünschten Wert von $\frac{1}{2}$ überschreitet. Wir verwenden die Trapezregel. Um den Performance-Limitierungen des Python-Interpreters möglichst gut zu entgehen, verwenden wir außerdem die Pakete Numpy bzw. Numexpr. Es werden in einer Schleife immer N Funktionsauswertungen parallelisiert durchgeführt und die Teilsummen anschließend aufsummiert. Für optimale Performance sollte N so gewählt werden, dass der Hauptspeicher maximal ausgelastet wird. Außerdem ist die Lösung für umso stabiler, umso größer N gewählt wird, da seltener gerundet werden muss. Prinzipiell haben wir die Berechnung so implementiert, dass beliebige Genauigkeiten erreicht werden können. So haben wir den Median mit einer Genauigkeit von 10^{-10} als

$$v_{0.5} = 1,0876520285v_{\rm m} \tag{21}$$

bestimmt.

d)

Die volle Breite auf halber Höhe $v_{\rm FWHM}$ ergibt sich als Differenz der Lösungen von

$$f(v) - \frac{1}{2}f(v_{\rm m}) = x^2 \exp(-x^2) - \frac{1}{2e} \stackrel{!}{=} 0$$
 (22)

mit $x=\frac{v}{v_{\rm m}}$. Das Ergebnis lässt sich zwar unter Verwendung der Lambertschen-W-Funktion analytisch darstellen, diese besitzt aber bekanntlich selbst keine elementare Darstellung. Daher lösen wir erneut numerisch. Da (22) einfach analytisch abgeleitet werden kann, bietet sich die Verwendung des Newton-Verfahrens an. Die Ableitung lautet

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \left(f(v) - \frac{1}{2} f(v_{\rm m}) \right) = 2x \exp(-x^2) (1 - x^2). \tag{23}$$

Aufgrund der quadratischen Konvergenz des NEWTON-Verfahrens ergeben sich bereits nach wenigen Iterationen mit den Startwerten 0,8 und 1,2 die gesuchten Nullstellen

$$x_1 = 0.481623247971, \quad x_2 = 1.63656560822$$
 (24)

$$\Rightarrow v_{\text{FWHM}} = v_{\text{m}}(x_2 - x_1) = 1,15494236025v_{\text{m}}.$$
 (25)

 $\mathbf{e})$

Da wir den Mittelwert der Geschwindigkeit $\langle v \rangle$ bereits in b) bestimmt haben, bietet es sich an die Standardabweichung der Geschwindigkeit σ_v über die Form

$$\sigma_v^2 = \langle v^2 \rangle - \langle v \rangle^2 \tag{26}$$

zu bestimmen, denn damit muss nur noch

$$\langle v^2 \rangle = \int_0^\infty v^2 f(v) dv = 4\pi N \int_0^\infty v^4 \exp\left(-\frac{v^2}{v_{\rm m}^2}\right) dv \tag{27}$$

ausgewertet werden. Hierzu verwenden wir erneut die Definition (2):

$$\int_{0}^{\infty} x^{4} \exp(-\alpha x^{2}) dx = \frac{1}{\alpha^{2}} \frac{d^{2}}{dt^{2}} I \Big|_{t=1} \stackrel{(8)}{=} \frac{3\sqrt{\pi}}{8} \alpha^{-\frac{5}{2}}.$$
 (28)

Damit ergibt sich

$$\langle v^2 \rangle = 4\pi (\pi v_{\rm m}^2)^{-\frac{3}{2}} \frac{3\sqrt{\pi}}{8} v_{\rm m}^5 = \frac{3}{2} v_{\rm m}^2$$
 (29)

$$\Rightarrow \sigma_v = \sqrt{\langle v^2 \rangle - \langle v \rangle^2} = \sqrt{\frac{3}{2} - \frac{4}{\pi}} v_{\rm m} \,. \tag{30}$$

Aufgabe 6

In dieser Aufgabe werden die Wahrscheinlichkeiten für ausgewählte Ereignisse, die bei einem Wurf mit einem roten und einem blauen optimalen sechsseitigen Würfel auftreten können, betrachtet.

a)
$$P(W_{\text{rot}} + W_{\text{blau}} = 9) = \frac{4}{6} \cdot \frac{1}{6} = \frac{1}{9}$$

b) $P(W_{\text{rot}} + W_{\text{blau}} \ge 9) = \frac{1}{6} \cdot \frac{4}{6} + \frac{1}{6} \cdot \frac{3}{6} + \frac{1}{6} \cdot \frac{2}{6} + \frac{1}{6} \cdot \frac{1}{6} = \frac{10}{36}$
c) $P((W_{\text{rot}} = 4 \land W_{\text{blau}} = 5) \lor (W_{\text{rot}} = 5 \land W_{\text{blau}} = 4)) = \frac{2}{6} \cdot \frac{1}{6} = \frac{1}{18}$

d)
$$P(W_{\text{rot}} = 4 \land W_{\text{blau}} = 5) = \frac{1}{6} \cdot \frac{1}{6} = \frac{1}{36}$$

Der rote Würfel zeigt jetzt immer 4, danach wird das Ergebnis des blauen Würfels angeschaut.

e)
$$P(W_{\text{rot}} + W_{\text{blau}} = 9 | W_{\text{rot}} = 4) = 1 \cdot \frac{1}{6} = \frac{1}{6}$$

f)
$$P(W_{\text{rot}} + W_{\text{blau}} \ge 9 | W_{\text{rot}} = 4) = 1 \cdot \frac{2}{6} = \frac{1}{3}$$

g)
$$P(W_{\text{blau}} = 5 | W_{\text{rot}} = 4) = 1 \cdot \frac{1}{6} = \frac{1}{6}$$

Aufgabe 7

Die Rechnungen und dazugehörige Erklärung sind handschriftlich am Ende zu finden. Die zu Erstellende "Zeichnung" ist mit Abbildung 1 gegeben. Dazu ist noch anzumerken:

- c) Die gewünschte Ellipse ist die 1σ -Ellipse, und als solche gekennzeichnet. Die Erwartungswerte sind zusammen mit den Standardabweichungen als Fehlerbalken dargestellt.
- d) Die Größe der Werte $\sigma_{x'}$ und $\sigma_{y'}$ sind durch die (halbe) Länge der Hauptachsen dargestellt.
- e) Die Länge der Hauptachsen sind $2\sigma_{x'}$ und $2\sigma_{y'}$ (vgl. handschriftlicher Teil). Der Winkel zwischen Hauptachsen und Koordinatenachsen ist der negative Drehwinkel zur Diagonalisierung der Kovarianzmatrix (etwa 20°, vgl. handschriftlicher Teil).

- f) Die bedingten Wahrscheinlichkeitsdichten f(x|y) und f(y|x) lassen sich unmöglich noch in der selben Abbildung darstellen, da sie selbst zweidimensionale Verteilungen sind. Wir gehen davon aus, dass der Copy & Paste Satz in der Teilaufgabe eigentlich nicht dazugehört.
- e) Die bedingten Erwartungswerte E(x|y) und E(y|x) sind als durchgezogene Geraden dargestellt, ihre Standardabweichungen als dazu parallele, gepunktete Linien in der selben Farbe.

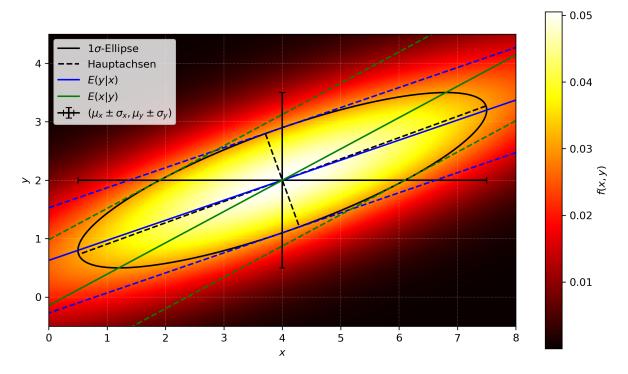


Abbildung 1: Graphische Darstellung der Ergebnisse von Aufgabe 7.

a) Der Korrelationskoeffizient 9 berechnet sich wie folgt:

$$g(x,y) = \frac{cov(x,y)}{\sigma(x) \cdot \sigma(y)} = \frac{4.2}{3.5.1,5} = 0.8$$

b) Die Wahrscheinlichkeitsdiche f(x,x) wird konstant gesetzt:

$$f(x_{1}) = k \exp \left[-\frac{1}{2}(\vec{x}-\vec{a})^{\dagger} B(\vec{x}-\vec{a})\right] = const$$

$$B = \frac{1}{\sigma_x^2 \sigma_y^2 - \cos^2(x, y)} \begin{pmatrix} \sigma_y^2 & -\cos(x, y) \\ -\cos(x, y) & \sigma_x^2 \end{pmatrix}$$

$$K = \left(\frac{det B}{(2\pi)^2}\right)^{1/2} = \left[\frac{1}{(2\pi)^2(\sigma_x^2 \sigma_y^2 - cov^2(x, y))}\right]^{\frac{1}{2}}$$

f(x,y)=: < (= const)

(=) -7
$$\left(n\left(\frac{c}{k}\right) = (\vec{x} - \vec{a})^{T} B_{\sigma}(\vec{x} - \vec{a})\right)$$

$$= \frac{1}{1-8^2} \left[u_x^2 + u_y^2 - 2 u_x u_y 8 \right] = E , u_i = \frac{i-\mu_i}{\sigma_i}$$

Dies entspricht nach Addition von 2(n(=)

der allgemeinen Ellipsenform:

$$ax^2+by^2+cxy+dx+ey+f=0$$

() Da die Amplitude von f(x, y) = k ist, mass, um f(x,y) da zu zeichnen, wo die Funktion auf das for-fache abgefallenist, die obere gleichung mit == e 1/2 geplottet werden. Das plotten geschiet mit der Funktion matplotlib.pyplot. contour(...), wobei die Schnittpunkte eines grids mit Punkton aus [0,8]x[-0,5x4,5] und E(x,y) geplottet werden. Da die linke Seite der Gleichung =1 ist, soll nur die Höhenlinie mit dem Wert o gezeichnet werden.

Diese Ellipse gibt die 1-o-Umgebung an.

um die Rotations matrix M zu bestimmen, wird die Kovarianz matrix zuerst mit einer allgemeinen Rotations matrix transformiert. Da die Nebendiagonalen einer Kovarian=matrix Null sind, wear die Variablen unkorellie-t sind, kann über diese Einträge der benötigte Drehwinkel & berechnet werden.

 $= \left(\frac{\cos \alpha}{\sin \alpha} - \sin \alpha\right) \left(\frac{\sigma_{\chi}^{2}}{\cos \alpha} + \cos \alpha\right) \left(\frac{\cos \alpha}{\cos \alpha} + \sin \alpha\right) \left(\frac{\cos \alpha}{\cos \alpha} + \sin \alpha\right)$ of / - sind cosul $= \begin{pmatrix} \sigma_{x}^{2} \cos \lambda - \cos(x,y) \sin \lambda & \cos(x,y) \cos \lambda - \sigma_{y}^{2} \sin \lambda \\ \sigma_{x}^{2} \sin \lambda + \cos(x,y) \cos \lambda & \cos(x,y) \sin \lambda + \sigma_{y}^{2} \cos \lambda \end{pmatrix} \cdot M^{T}$ $=\begin{pmatrix} \sigma_x^2 \cos^2 L - 2\cos v \sin u \cos u + \sigma_y^2 \sin^2 u \\ \sigma_x^2 \sin u \cos u + \cos v \cos^2 L - \cos v \sin^2 u - \sigma_y^2 \cos u \sin u \end{pmatrix}$ σ_x^2 sind (65 d - cov sin² + 1 cov cos d sind + σ_y^2 cos d sind + σ_y^2 cos d d

$$\stackrel{!}{=} \begin{pmatrix} \sigma_{x_1}^2 & o \\ o & \sigma_{y_1}^2 \end{pmatrix}$$

= $k_y \exp\left[-\frac{1}{2(1-g^2)}\left(u_y^2 + u_x^2 - 2u_xu_y - u_x^2(1-g^2)\right)\right]$

$$= \hat{k}, \exp\left[-\frac{1}{2(n-9^2)}\left(u_y^2 - 2u_xu_y + u_x^2 + u_x^2 - u_x^2\right)\right]$$

$$= \hat{k}, \exp\left[-\frac{1}{2(n-9^2)}\left(u_y - u_x + u_y^2\right)\right]$$

$$= \left(-\frac{1}{2(n-9^2)}\left(u_y - u_x + u_y^2\right)\right]$$

$$= -\frac{1}{2(n-9^2)}\left(u_y - u_x + u_y^2\right)$$

$$= -\frac{1}{2(n-9^2)}\left(\frac{y - u_y}{\sigma_y} - \frac{y - u_x}{\sigma_x}\right)^2$$

$$= -\frac{1}{2(n-9^2)}\left(\frac{y - u_y}{\sigma_y} - \frac{y - u_x}{\sigma_x}\right)^2$$

$$\Rightarrow 1 = \frac{1}{n-9^2}\left(\frac{y - u_y}{\sigma_y} - \frac{y - u_x}{\sigma_x}\right)^2$$

$$= \frac{1}{n-9^2}\left(\frac{y - u_y}{\sigma_y} - \frac{y - u_x}{\sigma_x}\right)^2$$

$$= \frac{1}{n-9^2}\left(\frac{y - u_y}{\sigma_y} - \frac{y - u_x}{\sigma_x}\right)^2$$

$$= \frac{1}{n-9^2}\left(\frac{1}{2(n-9^2)}\left(u_x^2 - u_x + u_y^2 - u_x + u_y^2\right)\right)^2$$

$$= \frac{1}{n-9^2}\left(\frac{1}{2(n-9^2)}\left(u_x^2 - u_x + u_y^2\right)^2\right)^2$$

$$= \frac{1}{n-9^2}\left(\frac{1}{2(n-9^2)}\left(u_x^2 - u_x + u_y^2\right)^2\right)^2$$

$$= \frac{1}{n-9^2}\left(\frac{1}{2(n-9^2)}\left(u_x^2 + u_y^2\right)^2\right)^2$$

$$= \frac{1}{n-9^2}\left(\frac{1}{2(n-9^2)}\left$$

$$f(x|y) \stackrel{!}{=} C ; \stackrel{\overset{\checkmark}{=}}{\stackrel{\checkmark}{=}} e^{y_{1}} \qquad (1-\sigma-Umg*bang)$$

$$\Rightarrow (n(e^{-y_{1}}) = -\frac{1}{2}$$

$$= -\frac{1}{2(n-s^{2})} (u_{1}-u_{1}y_{1})^{2}$$

$$\Leftrightarrow 1 = \frac{1}{n-s^{2}} (\frac{x-m_{1}}{\sigma_{x}} - \frac{y-m_{1}}{\sigma_{y}})^{2}$$

$$g) E(y|x) = \int_{-\infty}^{\infty} y f(y|x) dy, \quad u_{1} = \frac{y-m_{1}}{\sigma_{y}}, d_{1} = \sigma_{1}du_{1}$$

$$= k_{1}y_{1} \int_{-\infty}^{\infty} (\sigma_{1}u_{1}+\mu_{1}y) \exp[-\frac{1}{2(n-s^{2})}(u_{1}-u_{1}y_{1})] du_{1}$$

$$= k_{1}y_{1} \int_{-\infty}^{\infty} (\sigma_{1}u_{1}+\mu_{1}y_{1}) \exp[-\frac{1}{2(n-s^{2})}(u_{1}-u_{1}y_{1})] du_{1}$$

$$= \mu_{1}y + \sigma_{1}y_{1} \int_{-\infty}^{\infty} f(x|y) dx, \quad u_{2} = \frac{x-m_{1}}{\sigma_{x}}, \quad du_{2} = \frac{1}{\sigma_{x}}, dx = \sigma_{x} du_{x},$$

$$= \mu_{1}y + \sigma_{1}y_{1} \int_{-\infty}^{\infty} f(x|y) dx, \quad u_{2} = \frac{x-m_{1}}{\sigma_{x}}, \quad du_{3} = \frac{1}{\sigma_{x}}, dx = \sigma_{x} du_{x},$$

$$= k_{1}x_{1} \int_{-\infty}^{\infty} (\sigma_{x}u_{1}+\mu_{1}x_{1}) \exp[-\frac{1}{2(n-s^{2})}(u_{1}-u_{1}y_{1})^{2}] du_{1}$$

$$= \mu_{1}y_{1} + \sigma_{2}y_{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{y-m_{1}y}{\sigma_{2}}$$

$$= \mu_{1}y_{2} + \sigma_{2}y_{3} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{y-m_{1}y}{\sigma_{2}}$$

$$= \mu_{1}y_{2} + \sigma_{2}y_{3} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{y-m_{1}y}{\sigma_{2}}$$

$$= \mu_{1}y_{2} + \sigma_{2}y_{3} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{y-m_{1}y}{\sigma_{2}}$$