Zeitschrift: Helvetica Physica Acta
Band: 48 (1975)
Heft: 1

Artikel: Berechnung der Zustandsdichte einer ungeordneten linearen Kette

Autor: Tellenbach, U.

DOI: https://doi.org/10.5169/seals-114663

Helvetica Physica Acta
Vol. 48, 1975. Birkhäuser Verlag Basel

Berechnung der Zustandsdichte einer ungeordneten linearen Kette

von **U. Tellenbach**

Delegation für Ausbildung und Hochschulforschung am Eidg. Institut für Reaktorforschung CH-5303 Würenlingen, Schweiz

(29. X. 74)

Zusammenfassung. Ausgehend von bekannten Resultaten aus der Theorie der Jacobi-Matrizen wird die Zustandsdichte einer ungeordneten, linearen Kette mit einer neuen Methode berechnet.

I. Einführung

Betrachte eine Kette aus N Massen, die durch Federn verbunden sind. Die Federkonstanten f_j und die Massen m_j seien Zufallsgrössen, deren Verteilungsfunktionen vorgegeben sind. Wir studieren die longitudinalen Schwingungen der Kette, und stellen uns die Aufgabe, die Verteilung der Eigenfrequenzen zu bestimmen.

Dieses Problem wurde erstmals von F. J. Dyson gelöst [1]. Dyson bemerkt in einer Fussnote, dass man eventuell durch Anwendung bekannter Resultate aus der Theorie der Jacobi-Matrizen zu einer einfacheren Lösung geführt würde. Wir zeigen nun in dieser Arbeit, dass dies tatsächlich der Fall ist.

II. Definitionen

Der Massenpunkt j in der Kette habe die Masse m_j, seine Auslenkung sei x_j, und die Federkonstante zwischen den Teilchen j und $j+1$ werde mit f_j bezeichnet. Die Bewegungsgleichungen lauten dann:

$$m_j \ddot{x}_j = f_j(x_{j+1} - x_j) + f_{j-1}(x_{j-1} - x_j) \tag{1}$$

Nach einigen elementaren Umformungen [1] ergibt sich, dass die Frequenzen die Eigenwerte einer $(2N-1) \times (2N-1)$ Jacobi-Matrix $M = (M_{ij})$ sind:

$$\sum_j M_{ij} u_j = \lambda u_i \tag{2}$$

Unterstützung dieser Arbeit durch den Schweizerischen Nationalfonds zur Förderung der Wissenschaftlichen Forschung.

wobei

$$M_{j+1,j} = -M_{j,j+1} = i \left(\frac{f_j}{m_j}\right)^{1/2}$$

$$M_{i,i} = 0 \quad \text{und} \quad M_{i,j} = 0 \quad \text{für} \quad |i-j| > 1. \tag{3}$$

Aus (3) folgt, dass die Elemente der Matrix M Zufallsgrössen sind. Wir schreiben deshalb

$$M = M(\omega) = (M_{ij}(\omega)),$$

wobei ω einem abstrakten Wahrscheinlichkeitsraum Ω angehört.

Die charakteristische Gleichung (2) lautet nun:

$$M_n(\omega)\, U(\omega) = \lambda(\omega)\, U(\omega) \quad U(\omega) \in \mathbb{R}^n.$$

Folglich müssen wir die asymtotische ($n \to \infty$) Verteilung der Eigenwerte der zufälligen Matrix M_n bestimmen. Sei $F_n(x)$ die Verteilungsfunktion der Eigenwerte von M, d.h.

$$F_n(x) = \Pr(\lambda \leqq x) \quad (\Pr = \text{Probability}).$$

Es ist zweckmässig, die Stieltjes-Transformierte $f_n(z)$ der Verteilungsfunktion zu studieren:

$$f_n(z) = \int (x-z)^{-1}\, dF_n(x).$$

III. Bestimmung der Verteilungsfunktion einer Jacobi-Matrix

Sei M_n eine Jacobi-Matrix,

$$M_n = \begin{vmatrix} a_1 & -b_1 & & & 0 \\ -\bar{b}_1 & a_2 & -b_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & -b_{n-1} \\ 0 & & & -\bar{b}_{n-1} & a_n \end{vmatrix} \quad \begin{array}{l} \text{d.h. } a_{i,i+1} = -b_i;\ a_{i,i} = a_i \\ \text{und } a_{i,j} = 0 \text{ für } |i-j| > 1. \end{array}$$

Wir betrachten ferner eine Familie M_{n-k} von Untermatrizen von M_n:

$$M_{n-k} = \begin{vmatrix} a_{k+1} & -b_{k+1} & & & 0 \\ -\bar{b}_{k+1} & a_{k+2} & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & -b_{n-1} \\ 0 & & & -\bar{b}_{n-1} & a_n \end{vmatrix}.$$

Daraus ergibt sich unmittelbar die Darstellung

$$M_n = \begin{array}{|c|c|} a_1 & v_1' \\ \hline v_1 & M_{n-1} \end{array} \quad \begin{array}{l} v_1' = (-\bar{b}_1, 0, \ldots 0) \\ ' = \text{Transponiert-Komplexe} \end{array} \tag{4}$$

Aus (4) ergibt sich, dass man M_{n-1} als „Störung" von M_n betrachten kann. Aus der Definition der Resolvente einer Matrix,

$$R(z, M) = (M - zI)^{-1} \tag{5}$$

und aus (4) ergibt sich das folgende Resultat [2]:

$$\operatorname{tr} R(z, M_n) = \operatorname{tr} R(z, M_{n-1}) + \frac{1 + v_1' R(z, M_{n-1})^2 v_1}{a_1 - z - v_1' R(z, M_{n-1}) v_1} \tag{6}$$

Aus (5) folgt unmittelbar

$$f_n(z) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} (\lambda_i - z)^{-1} = \frac{1}{n} \operatorname{tr} R(z, M_n). \tag{7}$$

Somit ergibt sich durch mehrmalige Anwendung von (6) und (7) die folgende Darstellung für die Stieltjes-Transformierte der Verteilungsfunktion:

$$f_n(z) = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n} \frac{1 + v_k' R(z, M_{n-k})^2 v_k}{a_k - z - v_k' R(z, M_{n-k}) v_k} = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n} \frac{-X_{k,n}'(z)}{X_{k,n}(z)} \tag{8}$$

mit

$$X_{k,n}(z) = a_k - z - v_k' R(z, M_{n-k}) \quad v_k = a_k - z - |b_k|^2 R_{1,1}(z, M_{n-k}).$$

Da die Matrix M_n von Jacobi'scher Form ist, kann man $R_{1,1}(z, M_{n-k})$ relativ einfach berechnen. Betrachte dazu die Gleichung

$$\|zI - M_{n-k}\| \begin{vmatrix} x_{k+1} \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ x_n \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 1 \\ 0 \\ \cdot \\ \cdot \\ 0 \end{vmatrix} \tag{9}$$

Explizit:

$$\begin{aligned} &(z - a_{k+1}) x_{k+1} + b_{k+1} x_{k+2} = 1 \\ &\bar{b}_{k+1} x_{k+1} + (z - a_{k+2}) x_{k+2} + b_{k+2} x_{k+3} = 0 \\ &\bar{b}_{k+2} x_{k+2} + (z - a_{k+3} x_{k+3} + b_{k+3} x_{k+4} = 0 \\ &\qquad \ddots \\ &\bar{b}_{n-1} x_{n-1} + (z - a_n) x_n = 0 \end{aligned} \tag{10}$$

Das Gleichungssystem (10) kann explizit gelöst werden:

$$-x_{k+1} = \frac{1}{a_{k+1} - z - b_{k+1}\dfrac{x_{k+2}}{x_{k+1}}}; \quad \frac{x_{k+2}}{x_{k+1}} = \frac{\bar{b}_{k+1}}{a_{k+2} - z - b_{k+2}\dfrac{x_{k+1}}{x_{k+2}}}; \ldots;$$

$$\frac{x_{n-1}}{x_{n-2}} = \frac{\bar{b}_{n-2}}{a_{n-1} - z - b_{n-1}\dfrac{x_n}{x_{n-1}}}; \quad \frac{x_n}{x_{n-1}} = \frac{\bar{b}_{n-1}}{a_n - z}.$$

Sukzessives Einsetzen ergibt die Kettenbruchentwicklung:

$$-x_{k+1} = 1/(a_{k+1} - z - |b_{k+1}|^2/(a_{k+2} - z - |b_{k+2}|^2/(\cdots - |b_{n-1}|^2/(a_n - z).$$

Andererseits folgt aus (9)

$$R_{1,1}(z, M_{n-k}) = -x_{k+1} = 1/(a_{k+1} - z - |b_{k+1}|^2/(\cdots) \tag{11}$$

Die Formeln (8) und (11) stellen die explizite Lösung des Problems dar.

IV. Berechnung der Zustandsdichte einer geordneten Kette

Es gelte

$$a_k = 0 \quad \text{und} \quad b_k = b = i\left(\frac{f}{m}\right)^{1/2} \quad \text{für alle } k.$$

Definieren wir $v_{k,n} = -|b|^2 R_{11}(z, M_{n-k})$, so folgt aus (11), dass im Limes $n \to \infty$ gilt:

$$v_{k,n} = v = -|b|^2/(-z + v) \tag{12}$$

d.h.

$$v = \tfrac{1}{2}(z - \{z^2 - 4\,|b|^2\}^{1/2})$$

und aus (8) ergibt sich

$$f(z) = \lim_{n\to\infty} f_n(z) = \lim_{n\to\infty}\left(\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}\frac{1 - \dfrac{dv_{k,n}}{dz}}{-z + v_{k,n}}\right)$$

$$= \frac{-\tfrac{1}{2} + \dfrac{z}{2}\{z^2 - 4|b|^2\}^{1/2}}{-\dfrac{z}{2} - \tfrac{1}{2}\{z^2 - 4|b|^2\}^{1/2}} = -(z^2 - 4|b|^2)^{-1/2}.$$

Unter der (richtigen) Annahme, dass die Verteilungsfunktion $F(x)$ absolut stetig ist, vereinfacht sich die Stieltjes' Umkehrformel zu

$$F'(x) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\substack{\eta > 0 \\ \eta \to 0}} \operatorname{Im} f(x + i\eta) = \frac{1}{\pi}(4|b|^2 - x^2)^{-1/2} \quad (|x| < 2|b|).$$

V. Ungeordnete Ketten

Annahme: Die Parameter $|b_j|^2$ sind unabhängige Zufallsgrössen mit der Verteilungsfunktion $G(|b|^2)$.

Aus (11) und (12) ergibt sich die Rekursionsformel

$$v_k = -|b|^2/(-z + v_{k+1}). \tag{13}$$

Es ist vernünftig znzunehmen, dass v_{k+1} und v_k im Limes $n \to \infty$ dieselbe Wahrscheinlichkeitsdichte besitzen. Sie $A(v)$ diese Verteilung. Indem wir die Wahrscheinlichkeiten der linken und rechten Seiten von (13) einander gleichsetzen, erhalten wir:

$$A(v) = \int_{-\infty}^{z} A(v') \cdot G(v(z - v')) \cdot (z - v')\, dv' \quad (v > 0) \tag{14}$$

Eine entsprechende Gleichung gilt für $v < 0$.

Wenn wir die Lösung von (14) gefunden und normalisiert haben,

$$\int_{-\infty}^{\infty} A(v)\, dv = 1$$

so ergibt sich die Stieltjes-Transformierte als

$$f(z) = -\frac{d}{dz} \lim_{n \to \infty} \frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n} \log|z - v(k)| = -\frac{d}{dz} \int_{-\infty}^{z} \log|z - v| A(v)\, dv \tag{15}$$

Beachte, dass durch (15) $f(z)$ nur für $z > 0$ bestimmt wird, d.h. es stellt sich nun noch das Problem der analytischen Fortsetzung. Ein ähnliches Problem wurde von Dyson gelöst ([1], Seite 1334), und seine Resultate können ohne wesentliche Modifikation übernommen werden.

Verdankungen

Der Autor dankt Harrn Prof. W. Hälg und Herrn Dr. A. Furrer für wertvolle Diskussionen und für die kritische Durchsicht des Manuskripts.

Referenzen

[1] F. J. Dyson, Phys. Rev. *92*, 1331 (1953).
[2] L. Arnold, *Zur asymtotischen Verteilung der Eigenwerte zufälliger Matrizen*, Habilitationsschrift der Universität Stuttgart (1969).