

---

# **Untersuchung des Starkkopplungsverhaltens der Fokker-Planck-Gleichung mit anharmonischer Drift**

---

**Diplomarbeit**

**Jens Dreger**

**Hauptgutachter: Prof. Dr. Bodo Hamprecht**



**vorgelegt dem Fachbereich Physik  
der Freien Universität Berlin  
im Februar 2002**

# Inhaltsverzeichnis

|                                                                           |           |
|---------------------------------------------------------------------------|-----------|
| <b>Einleitung</b>                                                         | <b>vi</b> |
| <b>1 Motivation und Grundlagen</b>                                        | <b>1</b>  |
| 1.1 Brownsche Bewegung . . . . .                                          | 1         |
| 1.2 Fokker-Planck-Gleichung . . . . .                                     | 4         |
| 1.2.1 Definition . . . . .                                                | 4         |
| 1.2.2 Normierung . . . . .                                                | 5         |
| 1.2.3 Stationäre Lösung . . . . .                                         | 6         |
| 1.3 FP-Gleichung für das Brownsche Teilchen . . . . .                     | 7         |
| 1.4 Das anharmonische Potential . . . . .                                 | 11        |
| <b>2 Variationsstörungsrechnung für die Normierungskonstante</b>          | <b>15</b> |
| 2.1 Schwachkopplungsentwicklung . . . . .                                 | 15        |
| 2.2 Starkkopplungsentwicklung . . . . .                                   | 16        |
| 2.3 Variationsstörungsreihe für die Normierung . . . . .                  | 17        |
| 2.3.1 Die Idee . . . . .                                                  | 18        |
| 2.3.2 Ableitung der Variationsstörungsreihe . . . . .                     | 20        |
| 2.3.3 Bestimmung des Variationsparameters . . . . .                       | 21        |
| 2.4 Variationsrechnung erster Ordnung . . . . .                           | 22        |
| 2.5 Variationsrechnung zweiter Ordnung . . . . .                          | 25        |
| 2.6 Variationsrechnung für die Starkkopplungskoeffizienten . . . . .      | 27        |
| <b>3 Variationsstörungsrechnung für die Wahrscheinlichkeitsverteilung</b> | <b>35</b> |
| 3.1 Schwachkopplungsreihe . . . . .                                       | 35        |
| 3.1.1 Transformation der Zeitskala . . . . .                              | 36        |
| 3.1.2 Fläche und kumulative Störungsreihe . . . . .                       | 37        |
| 3.1.3 Bestimmung der Schwachkopplungskoeffizienten . . . . .              | 38        |
| 3.1.4 Koeffizienten der Kumulantenentwicklung . . . . .                   | 42        |

---

|          |                                                                         |           |
|----------|-------------------------------------------------------------------------|-----------|
| 3.1.5    | Normierung der flachen Störungsreihe . . . . .                          | 47        |
| 3.1.6    | Normierung der Kumulantenentwicklung . . . . .                          | 47        |
| 3.1.7    | Ergebnisse für die Störungsreihen . . . . .                             | 49        |
| 3.2      | Variationsstörungsreihe für die Wahrscheinlichkeitsverteilung . . . . . | 54        |
| 3.3      | Bestimmung des Variationsparameters . . . . .                           | 57        |
| 3.4      | Normierung der Variationsstörungsreihe . . . . .                        | 60        |
| 3.5      | Numerische Lösung . . . . .                                             | 61        |
| 3.6      | Variationsstörungsrechnung für die Verteilungsfunktion . . . . .        | 66        |
| 3.7      | Das Doppelmulden-Potential . . . . .                                    | 69        |
| 3.8      | Höhere Ordnungen . . . . .                                              | 74        |
|          | <b>Zusammenfassung und Ausblick</b>                                     | <b>77</b> |
|          | <b>Danksagung</b>                                                       | <b>78</b> |
| <b>A</b> | <b>Numerische Langevin-Simulation</b>                                   | <b>80</b> |
| <b>B</b> | <b>Entwicklung des FP-Operators in Eigenfunktionen</b>                  | <b>81</b> |
| <b>C</b> | <b>Exakte Lösung der FP-Gleichung für das Brownsche Teilchen</b>        | <b>83</b> |
| <b>D</b> | <b><i>Mathematica</i> Programme</b>                                     | <b>86</b> |
| D.1      | Berechnung der Störungskoeffizienten . . . . .                          | 86        |
| D.2      | Schwach- und Starkkopplungskoeffizienten . . . . .                      | 87        |
| D.3      | Störungsreihe für die Verteilungsfunktion . . . . .                     | 87        |

# Abbildungsverzeichnis

|      |                                                                                                                                                                                                                                                        |    |
|------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| 1    | Struktur der Arbeit als Flußdiagramm . . . . .                                                                                                                                                                                                         | ix |
| 1.1  | Trajektorien von zehn Brownschen Teilchen . . . . .                                                                                                                                                                                                    | 3  |
| 1.2  | Numerische Simulation zur Zeitentwicklung der Wahrscheinlichkeitsverteilung . .                                                                                                                                                                        | 4  |
| 1.3  | Sich aufweitende Wahrscheinlichkeitsverteilung für $\delta$ -Anfangsbedingung . . . . .                                                                                                                                                                | 8  |
| 1.4  | Zeitliche Entwicklung der Wahrscheinlichkeitsdichte für Anfangsverteilungen der Form $P(x, 0) = H(x)P_N(x; \mu, \sigma^2)$ ( <i>Polynom <math>\times</math> Normalverteilung</i> ) . . . . .                                                           | 10 |
| 1.5  | Wandernde/kontrahierende Wahrscheinlichkeitsdichte für $P(x, 0) = P_N(x; \mu, \sigma^2)$ .                                                                                                                                                             | 11 |
| 1.6  | Stationäre Verteilung $P_{\text{stat}}(x)$ für unterschiedliche Werte von $g$ . . . . .                                                                                                                                                                | 12 |
| 1.7  | Singularität der Normierungskonstante bei $g = 0$ . . . . .                                                                                                                                                                                            | 13 |
| 2.1  | Schwachkopplungsreihe und Schwachkopplungskoeffizienten . . . . .                                                                                                                                                                                      | 16 |
| 2.2  | Starkkopplungsreihe und Starkkopplungskoeffizienten . . . . .                                                                                                                                                                                          | 17 |
| 2.3  | Kompensation des Störpotentials durch ein angepaßtes harmonisches Potential .                                                                                                                                                                          | 18 |
| 2.4  | Variationsstörungsreihe erster Ordnung für die Normierung und ihre Ableitung bei $g = 10$ und optimierter Variationsparameter in Abhängigkeit von $g$ . . . . .                                                                                        | 22 |
| 2.5  | Variationsstörungsreihe erster Ordnung mit optimiertem Variationsparameter $\omega_{\text{opt}}$ und relativer Fehler der Variationsstörungslösung . . . . .                                                                                           | 23 |
| 2.6  | Variationsstörungsreihe zweiter Ordnung für die Normierung und ihre Ableitung bei $g = 10$ und optimierter Variationsparameter in Abhängigkeit von $g$ . . . . .                                                                                       | 25 |
| 2.7  | Variationsstörungsreihe zweiter Ordnung mit optimiertem Variationsparameter $\omega_{\text{opt}}$ und relativer Fehler der Variationsstörungslösung . . . . .                                                                                          | 26 |
| 2.8  | Variationsstörungsreihe für den Starkkopplungskoeffizienten $b_0^N(\omega)$ . . . . .                                                                                                                                                                  | 28 |
| 2.9  | Nullstellen von $\partial b_0^N(\omega)/\partial\omega$ in der komplexen $\omega$ -Ebene . . . . .                                                                                                                                                     | 30 |
| 2.10 | Starkkopplungskoeffizient $b_0^N(\omega)$ für verschiedene $N$ aufgetragen über $\omega$ . Nullstellen der ersten Ableitung und relativer Fehler der Variationslösung bei Verwendung dieser Nullstellen als Wert für den Variationsparameter . . . . . | 30 |
| 2.11 | Wendepunkt/Extremum für gerade/ungerade $N$ und Ausreißer bei $N = 1$ . . . . .                                                                                                                                                                        | 31 |
| 2.12 | Relativer Fehler der Variationslösung bei Verwendung der positiven reellen Nullstellen der $k$ -ten Ableitung als Wert für den Variationsparameter in $N$ -ter Ordnung.                                                                                | 32 |
| 2.13 | Variationsstörungsreihe für $b_0^N(\omega)$ aufgetragen über $\omega$ und die Ergebnisse für die Nullstellen der ersten drei Ableitungen. . . . .                                                                                                      | 33 |

|      |                                                                                                                                                                                                      |    |
|------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| 3.1  | Kopplung der Entwicklungskoeffizienten der flache Störungsreihe für die Wahrscheinlichkeitsverteilung bei der rekursiven Berechnung . . . . .                                                        | 40 |
| 3.2  | Rechenzeitverbrauch für die ersten drei Ordnungen der Störungskoeffizienten . .                                                                                                                      | 45 |
| 3.3  | Speicherplatzverbrauch für die ersten fünf Ordnungen der Störungskoeffizienten .                                                                                                                     | 45 |
| 3.4  | Koeffizienten $\beta_{n,k,l}$ der ersten Ordnung für die Kumulantenentwicklung . . . . .                                                                                                             | 46 |
| 3.5  | Zeitabhängigkeit der Normierung der Kumulantenentwicklung . . . . .                                                                                                                                  | 48 |
| 3.6  | Zeitabhängigkeit der Störungskoeffizienten der Kumulantenentwicklung für die ersten vier Ordnungen . . . . .                                                                                         | 49 |
| 3.7  | Zeitentwicklung der Kumulantenentwicklung erster Ordnung für $\gamma = \{0.1, 1, 10\}$ und $g = \{0.1, 1, 10\}$ . . . . .                                                                            | 51 |
| 3.8  | Problematische Fälle bei $g = \gamma = 1$ . . . . .                                                                                                                                                  | 52 |
| 3.9  | Wahrscheinlichkeitsdichte $\mathcal{P}(x, t, \omega)$ und deren Ableitung nach $\omega$ in Abhängigkeit des Variationsparameters $\omega$ zum festen Zeitpunkt $t = 0.5$ für $x = 0$ und $x = 1$ . . | 58 |
| 3.10 | Nullstellen der ersten drei Ableitungen der Variationsstörungsreihe für die Kumulante in der $\omega$ - $x$ -Ebene. . . . .                                                                          | 59 |
| 3.11 | Numerische Lösung des Anfangswertproblems mit Hilfe der <i>Method of Lines</i> . . .                                                                                                                 | 63 |
| 3.12 | Numerische Lösung für unterschiedlich große $x$ -Intervalle . . . . .                                                                                                                                | 64 |
| 3.13 | Stabile und instabile numerische Lösung . . . . .                                                                                                                                                    | 65 |
| 3.14 | Optimierung der zeitlichen Entwicklung der Wahrscheinlichkeitsverteilung . . . .                                                                                                                     | 67 |
| 3.15 | Variationsstörungsrechnung für die Zeitentwicklung der Wahrscheinlichkeitsverteilung für drei Größenordnung des Verhältnisses $\gamma/g$ . . . . .                                                   | 68 |
| 3.16 | Potential des Doppelmulden-Systems . . . . .                                                                                                                                                         | 70 |
| 3.17 | Ergebnisse der Variationsstörungsrechnung für das Doppelmulden-System mit starker Anharmonizität . . . . .                                                                                           | 71 |
| 3.18 | Zerfallen der Nullstellenkurve für den kritischen Fall schwacher Anharmonizität .                                                                                                                    | 72 |
| 3.19 | Ergebnisse der Variationsstörungsrechnung für das Doppelmulden-System mit schwacher Anharmonizität . . . . .                                                                                         | 73 |
| 3.20 | Variationsstörungsrechnung 1. und 2.Ordnung für das Doppelmulden-System . .                                                                                                                          | 75 |
| 3.21 | Variationsstörungsrechnung 3. und 4.Ordnung für das Doppelmulden-System . .                                                                                                                          | 76 |
| C.1  | Charakteristiken der Fouriertransformierten der Wahrscheinlichkeitsverteilung . .                                                                                                                    | 84 |

# Einleitung

In vielen Problemen der Physik, Chemie, Biologie und anderen Naturwissenschaften spielen mikroskopische Einflüsse eine wichtige Rolle. Diese können jedoch häufig nicht exakt behandelt werden, weil entweder genaue Kenntnisse über die mikroskopischen Strukturen fehlen oder einfach deshalb, weil die Anzahl der beteiligten Freiheitsgrade für praktische Anwendungen viel zu groß ist. Ist man letzten Endes nur an makroskopischen Ergebnissen interessiert, so ist eine exakte Behandlung der mikroskopischen Effekte mitunter auch gar nicht notwendig.

In solchen Fällen bietet sich die Behandlung des Problems mit stochastischen Methoden an [Gar85], bei denen die Gesamtheit der mikroskopischen Einflüsse als *Fluktuationen* oder *Rauschen* zusammengefaßt wird. Ein klassisches Beispiel für ein solches System ist mit dem Brownschen Teilchen gegeben, das wegen seiner großen Anschaulichkeit im Anschluß an diese Einleitung eingehender untersucht werden soll, um einige Grundbegriffe der Theorie stochastischer Prozesse zu verdeutlichen.

Der Botaniker Robert Brown untersuchte bereits 1827 die scheinbar chaotische Bewegung von winzigen Pollenkörnchen in Flüssigkeiten. Zwar konnte er zeigen, daß diese nicht organischen Ursprungs sein kann, doch ließ eine befriedigende Erklärung des Verhaltens noch lange auf sich warten: erst im Jahre 1905 liefert Einstein mit seiner Veröffentlichung „Über die von der molekularkinetische Theorie der Wärme geforderte Bewegung von in ruhenden Flüssigkeiten suspendierten Teilchen“ [Ein05] eine befriedigende Erklärung des Phänomens.

Das zwar kleine aber dennoch im Vergleich zu den Wassermolekülen makroskopische Pollenteilchen ist fortwährend Kollisionen mit den Wassermolekülen ausgesetzt und ändert dadurch in unvorhersagbarer Weise seinen Bewegungszustand. Es ist daher im allgemeinen vollkommen unmöglich, den Aufenthaltsort des Brownschen Teilchens zu einem gegebenen Zeitpunkt vorherzusagen. Wiederholt man das Experiment bei gleichen Anfangsbedingungen, wird immer ein anderes Ergebnis herauskommen.

Dennoch kann man fragen, wie groß die *Wahrscheinlichkeit* ist, dass sich das Teilchen zum Zeitpunkt  $t$  in einem bestimmten Raumgebiet um  $x$  befindet. Alternativ könnte bei  $N$ -facher Durchführung des gleichen Experiments abgezählt werden, in wie vielen Fällen  $n(x, t)$  das Teilchen zum Zeitpunkt  $t$  im Raumgebiet um  $x$  angekommen ist. So läßt

sich eine Wahrscheinlichkeitsdichte  $W(x, t)$  definieren, für die der Quotient  $n(x, t)/N$  den experimentellen Schätzwert darstellt.

Für diese Wahrscheinlichkeitsdichte läßt sich nun eine Bewegungsgleichung, die *Fokker-Planck-Gleichung* [Ris84] angeben, welche Gegenstand dieser Arbeit sein wird. Da es nur in sehr wenigen Fällen möglich ist, die Fokker-Planck-Gleichung analytisch zu lösen, besteht großes Interesse an geeigneten Näherungs- und Lösungsmethoden.

Löst man die Fokker-Planck-Gleichung störungstheoretisch als Entwicklung in einer Kopplungskonstanten, so erhält man für die Wahrscheinlichkeitsdichte im allgemeinen eine divergente Reihe mit verschwindendem Konvergenzradius. Typischerweise wachsen die Koeffizienten der Reihe in  $n$ -ter Ordnung mit  $n!$  an, alternieren aber im Vorzeichen.

Solche divergenten Schwachkopplungsreihen sind auch in anderen Bereichen der theoretischen Physik bekannt und von Interesse, wie z.B. in der Quantenstatistik oder in der Theorie kritischer Phänomene. Dort wurden verschiedene Resummationsverfahren entwickelt, um aus den divergenten Reihen endliche Resultate für alle Werte der Kopplungskonstanten zu extrahieren. Eine gute Übersicht befindet sich in Kapitel 16 der Monographie [KSF01]. Besonders erfolgreich ist die von *Kleinert* entwickelte Variationsstörungstheorie [Kle95], die eine systematische Erweiterung des Variationsverfahrens von *Feynman* und *Kleinert* darstellt [FK86]. Dort wird ein anharmonisches Quantensystem durch ein harmonisches Vergleichssystem angenähert. Die Stärke seiner Ankopplung ist durch einen Variationsparameter gegeben, dessen Wert nach einem Prinzip minimaler Sensitivität [Ste81] zu bestimmen ist. Das führt zu einer Resummation der Schwachkopplungsreihe mit konvergentem Ergebnis. Dieses Verfahren wurde am Beispiel der Grundzustandsenergie des anharmonischen Oszillators bis zur 200. Ordnung mit sehr gutem Resultat getestet [JK95, KJ95]. Es zeigte sich, dass die Variationslösungen schnell und gleichförmig gegen den exakten Wert konvergieren. Außerdem ermöglichte dieses Verfahren, in der  $\Phi^4$ -Theorie kritische Exponenten mit hoher Genauigkeit in  $D = 4 - \epsilon$  bzw.  $D = 3$  Dimensionen abzuleiten [KSF01].

In der vorliegenden Arbeit wird die Variationsstörungstheorie auf divergente Reihen angewandt, die bei der Lösung der Fokker-Planck-Gleichung auftreten. Dabei soll ein nichtlinearer stochastischer Prozeß durch ein effektives Brownsches Teilchen angenähert werden, dessen Dämpfungskonstante als Variationsparameter aufgefaßt wird. Erst kürzlich wurde in zwei Arbeiten [KPP01, Oke01] die erste Ordnung eines solchen Variationsverfahrens erfolgreich auf die Wahrscheinlichkeitsdichten angewandt. Die vorliegende Untersuchung wurde unabhängig und gleichzeitig mit diesen Arbeiten begonnen und liefert eine systematische Untersuchung der Variationsstörungstheorie und ihrer Konvergenz auch in höheren Ordnungen für die Fokker-Planck-Gleichung.

# Aufbau der Arbeit

Zur besseren Orientierung sei an dieser Stelle das Grundgerüst der vorliegenden Arbeit kurz erläutert. Abbildung 1 stellt dies in einer Art Ablaufplan dar. Kapitel 1 beginnt mit einer anschaulichen Darstellung des Problems der Brownschen Bewegung. Es werden einige Begriffe der zugrunde liegenden Theorie stochastischer Prozesse eingeführt sowie Eigenschaften der Fokker-Planck-Gleichung und ihrer Lösungen betrachtet. Für das harmonische System des Brownschen Teilchens wird eine exakte Lösung bestimmt, die als Grundlage für die störungstheoretische Behandlung der nachfolgenden Kapitel dient. Das anharmonische System wird definiert und die exakt lösbare stationäre Verteilung für den Grenzfall großer Zeiten bestimmt.

In Kapitel 2 wird die dann Variationsstörungstheorie dann am Teilproblem der Normierungskonstanten der stationären Verteilung getestet. Hierzu wird die Normierungskonstante in Schwach- und Starkkopplungsreihen entwickelt. Die divergente Schwachkopplungsentwicklung wird dann mit Hilfe der Variationsstörungstheorie in eine konvergente Reihe überführt. Besonderes Augenmerk wird dabei auf die Bestimmung des optimalen Wertes für den Variationsparameter gelegt.

Kapitel 3 behandelt die Variationsstörungsrechnung für die Verteilungsfunktion. Die Schwachkopplungskoeffizienten werden hier mit Rekursionsrelationen bestimmt, was deutlich aufwendiger und daher länger als der entsprechende Abschnitt in Kapitel 2 ausfällt. Zusätzlich zur gewöhnlichen (flachen) Störungsreihe wird die sogenannte Kumulantenentwicklung betrachtet, da sie in Bezug auf die stationäre Verteilung und die Positivität der Verteilungsfunktion bessere Ergebnisse verspricht. Anschliessend wird die Variationsstörungsreihe für die Wahrscheinlichkeitsverteilung abgeleitet. Als Maß für die Güte der Variationslösung wird noch eine numerische Lösung des Problems bestimmt, bevor mit der Optimierung des orts- und zeitabhängigen Variationsparameters für ausgewählte Parametersätze begonnen wird. Dabei wird wiederum besonderes Augenmerk auf die Möglichkeiten bei der Auswahl und damit auf die Nullstellenstruktur der Ableitungen der Variationsstörungsreihe gelegt. Zum Abschluß wird noch das Problem des double-well Potentials für negatives  $\gamma$  betrachtet.

Es ist geplant, für weitergehende Informationen eine WWW-Seite zu dieser Arbeit unter folgender Adresse einzurichten:

<http://www.physik.fu-berlin.de/~dreger/diplom>

Dort werden neben Korrekturen auch Daten wie *MATHEMATICA*®-Notebooks oder die berechneten Störungskoeffizienten zu finden sein, die aus Platzgründen nicht in dieser Arbeit wiedergegeben werden konnten.

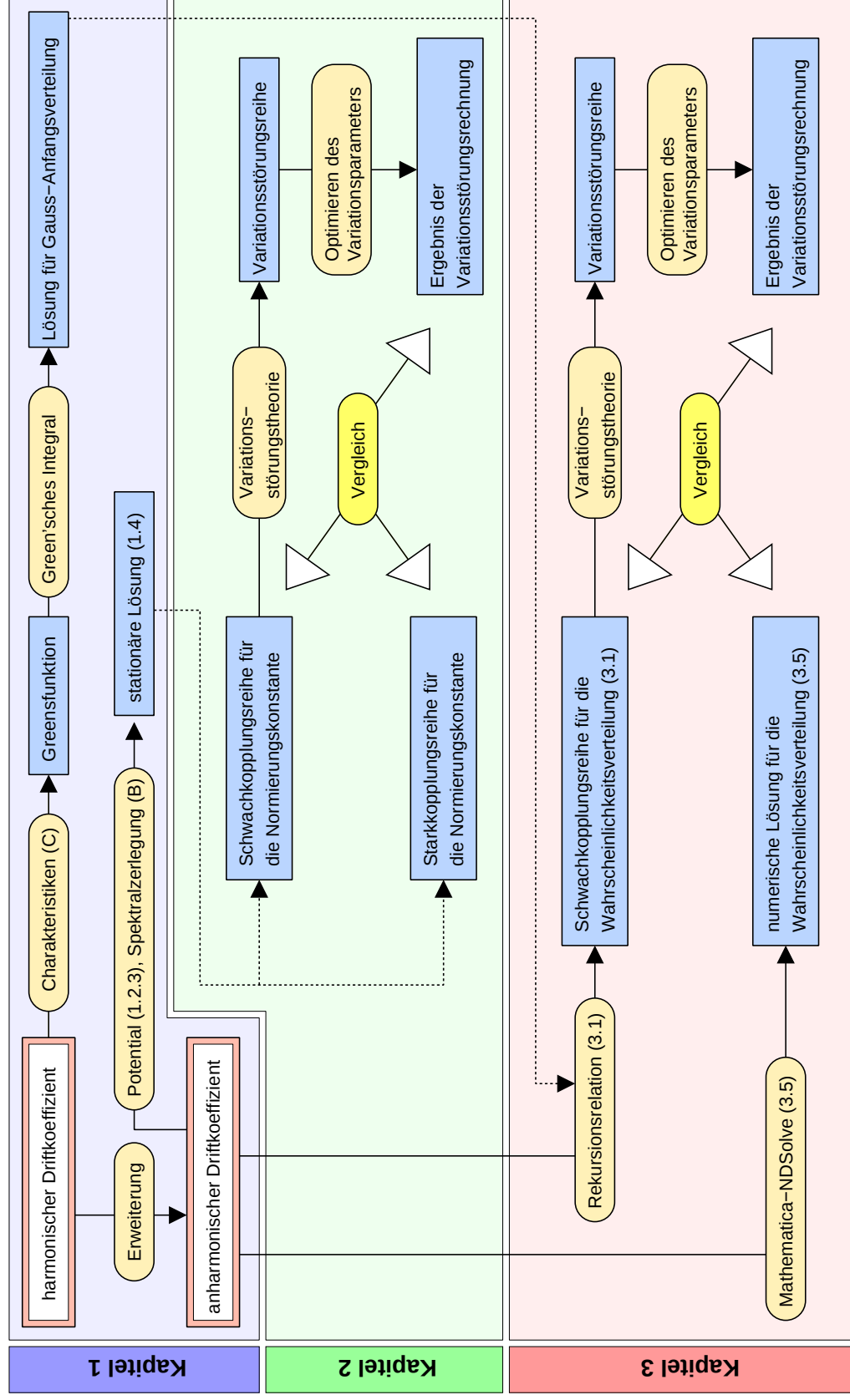


Abbildung 1: Struktur der Arbeit als Flußdiagramm.



# Kapitel 1

## Motivation und Grundlagen

### 1.1 Brownsche Bewegung

Die Fokker-Planck-Gleichung trat erstmalig bei der Behandlung der Brownschen Bewegung auf [Fok14, Pla17]. Aus diesem Grund und weil das Verhalten des Brownschen Teilchens sehr anschaulich und leicht verständlich ist, soll hier mit einer Betrachtung eines solchen Systems begonnen werden.

Gegeben sei ein kleines Teilchen der Masse  $m$  in einer Flüssigkeit der Temperatur  $T$ . Das Teilchen soll zwar klein sein, im Vergleich zu den Flüssigkeitsmolekülen jedoch als groß betrachtet werden können. Den Einfluß der thermisch fluktuierenden Flüssigkeitsmoleküle zerlegt man nun in zwei Anteile.

Den ersten Anteil bezeichnet man als Viskosität: aus allen Richtungen stoßen Flüssigkeitsmoleküle gegen das Teilchen. Bewegt sich das Teilchen nun selbst durch die Flüssigkeit, so ist der Impulsübertrag auf die winzigen Stoßpartner in Bewegungsrichtung am größten.<sup>1</sup> Das Teilchen erfährt daher eine bremsende Gegenkraft, die mit dem Stokes'schen Gesetz modelliert werden soll:

$$F_{\text{stokes}} = -\alpha v, \quad \alpha > 0. \quad (1.1)$$

Mit dieser Reibungskraft alleine lauten die Bewegungsgleichung und ihre Lösung:

$$m\dot{v}(t) + \alpha v(t) = 0, \quad v(t) = v(0)e^{-\frac{\alpha}{m}t}. \quad (1.2)$$

Die Geschwindigkeit des Teilchen nimmt also exponentiell mit der Relaxationszeit  $\tau = m/\alpha$  ab: das Teilchen kommt zur Ruhe. Für ein im Vergleich zu den Flüssigkeitsmolekülen sehr schweres Teilchen wäre dies eine gute Näherung. Entwickelt man die Kräfte, die auf das Teilchen einwirken, in der inversen Masse  $m^{-1}$ , so entspricht dieser Anteil der 0.ten Ordnung.

---

<sup>1</sup>Man denke daran, was passiert, wenn man einen Tennisball gegen einen heraneilenden Zug wirft. Das hier betrachtete Teilchen ist zwar deutlich langsamer, der Effekt aber dennoch vorhanden.

Für kleinere Massen muß man noch einen weiteren Anteil berücksichtigen, denn das Teilchen besitzt aufgrund des Gleichverteilungssatzes der Thermodynamik eine mittlere kinetische Energie:

$$\frac{1}{2}m\langle v^2 \rangle = \frac{1}{2}k_B T. \quad (1.3)$$

Hierbei bezeichnet  $k_B$  die Boltzmann-Konstante und  $T$  die Temperatur der umgebenden Flüssigkeit. Für kleine Massen  $m$  sollte diese thermische Bewegung beobachtbar sein, d.h. es muß auch beschleunigende Kräfte geben. Diese sind in den individuellen Stößen der Flüssigkeitsmoleküle gegen das Teilchen zu suchen. Es ist jedoch schon aufgrund der schieren Anzahl dieser Prozesse nicht möglich, die Bewegungsgleichungen aller Flüssigkeitsmoleküle zu lösen, um alle Kollisionen exakt zu berücksichtigen. Der zweite Anteil, der alle diese Stöße zusammenfaßt, soll daher durch eine *fluktuierende stochastische Kraft*  $F_{\text{flukt}}(t)$  modelliert werden. Eigenschaften dieser Kraft sind nur im Mittel bekannt, insbesondere soll gelten:

- alle Raumrichtungen seien gleich wahrscheinlich:

$$\langle F_{\text{flukt}}(t) \rangle = 0,$$

- die Krafteinwirkung erfolge instantan (Kollisionsdauer  $\ll$  Relaxationszeit):

$$\langle F_{\text{flukt}}(t) F_{\text{flukt}}(t') \rangle = q \delta(t - t').$$

Die zweite Bedingung, dass die Autokorrelationsfunktion proportional zu einer  $\delta$ -Funktion ist, hat weitreichende Konsequenzen. Die stochastische Kraft  $F_{\text{flukt}}(t)$  ist damit zu jedem Zeitpunkt vollkommen unabhängig vom vorherigen Verlauf. Diese Eigenschaft führt dazu, dass sich das hier betrachtete Problem als Markov-Prozess auffassen läßt, was wiederum Grundlage für die Gültigkeit der Fokker-Planck-Gleichung ist.

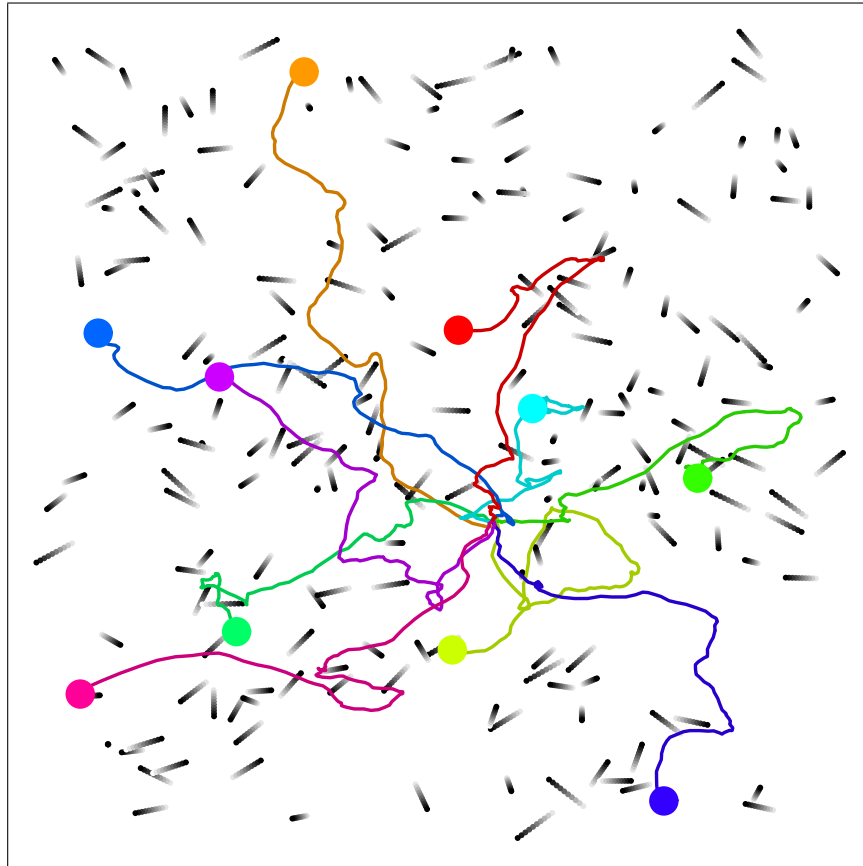
Der Parameter  $q$  sagt etwas über die Stärke der stochastischen Krafteinwirkung aus. Er ist so zu wählen, dass sich die richtige mittlere thermische Energie ergibt. Man erhält unter dieser Bedingung das Fluktuations-Dissipations-Theorem [Ris84]:

$$q = 2\alpha k_B T / m^2, \quad (1.4)$$

welches besagt, dass das mittlere Schwankungsquadrat der Fluktuationen proportional zur Reibung und zur Temperatur ist. Mit der stochastischen Kraft lautet die Bewegungsgleichung für das Brownsche Teilchen nun:

$$m\dot{v}(t) = F_{\text{stokes}}(t) + F_{\text{flukt}}(t) = -\alpha v(t) + F_{\text{flukt}}(t). \quad (1.5)$$

Eine Gleichung dieser Art wird aufgrund des stochastischen Terms als *stochastische Dif-*

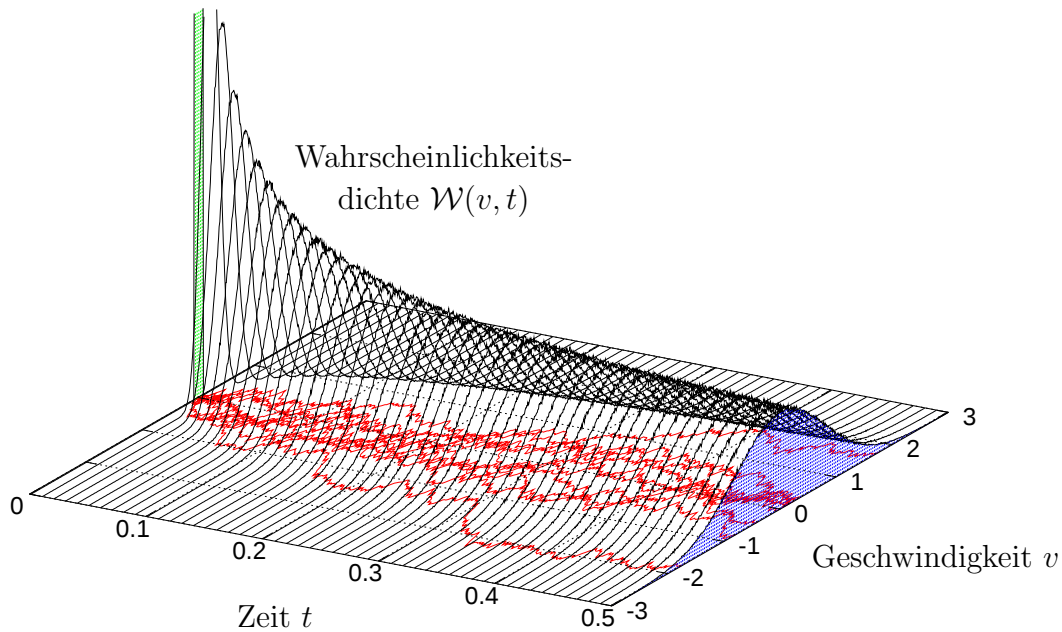


**Abbildung 1.1:** Realisierungen der stochastischen Differentialgleichung (1.5) für  $\alpha = m = k_B = T = 1$ .

ferentialgleichung (SDE) bezeichnet. Häufig findet sich auch die Bezeichnung *Langevin-Gleichung* [Lan08]. Die stochastische Natur der DGL überträgt sich auf die Lösungen, die somit auch stochastischen Charakter annehmen. Man spricht daher statt von Lösungen auch von *Realisierungen* der DGL. Abbildung 1.1 zeigt 10 Realisierungen der SDE (1.5), die mit einer einfachen numerischen Simulation erzeugt wurden. Offensichtlich läßt sich über die Geschwindigkeit und Position eines bestimmten Brownschen Teilchens nichts vorhersagen. Betrachtet man jedoch ein Ensemble von solchen Systemen, so kann man z.B. fragen, wie viele Systeme zu einem bestimmten Zeitpunkt eine Geschwindigkeit im Intervall  $(v, v + dv)$  haben. Damit läßt sich eine Wahrscheinlichkeitsdichte  $W(v, t)$  definieren, so dass die Wahrscheinlichkeit, für ein System mit einer Geschwindigkeit im Intervall  $(v, v + dv)$  zum Zeitpunkt  $t$  durch  $W(v, t)dv$  gegeben ist. Die Wahrscheinlichkeitsdichte hängt von der Anfangswahrscheinlichkeitsdichte  $W(v, 0)$  und der Zeit  $t$  ab. Die zeitliche Entwicklung der Wahrscheinlichkeitsdichte wird durch die folgende Gleichung beschrieben [Ris84]:

$$\frac{\partial}{\partial t} W(v, t) = \frac{\alpha}{m} \frac{\partial}{\partial v} [v W(v, t)] + \frac{\alpha k_B T}{m^2} \frac{\partial^2}{\partial v^2} W(v, t) \quad (1.6)$$

Dies ist eine der einfachsten Fokker-Planck-Gleichungen. Wenn es gelingt, diese Gleichung



**Abbildung 1.2:** Numerische Simulation zur Zeitentwicklung der Wahrscheinlichkeitsverteilung  $\mathcal{W}(x, t)$ .

für eine gegebene Anfangsverteilung zu lösen, lassen sich die Mittelwerte für jede beliebige Funktion  $f(v)$  berechnen:

$$\langle f(v(t)) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f(v) W(v, t) dv. \quad (1.7)$$

In Anhang A ist ein kleines C-Programm angegeben, welches eine Simulation für ein Ensemble von  $N = 1000000$  Brownschen Teilchen entsprechend Gleichung (1.5) durchführt und ein Histogramm  $H(v, t) = n(v, t)/N$  erstellt. Das Ergebnis ist in Abbildung 1.2 wiedergegeben. In der  $t$ - $v$ -Ebene wurden stellvertretend 10 Geschwindigkeitstrajektorien in roter Farbe eingezeichnet. In grüner Farbe ist die Anfangsverteilung und in blau die Wahrscheinlichkeitsverteilung bei  $t = 0.5$  aufgetragen.

## 1.2 Fokker-Planck-Gleichung

### 1.2.1 Definition

Die allgemeine eindimensionale Fokker-Planck-Gleichung hat die Form [Ris84]:

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathcal{W}(x, t) = -\frac{\partial}{\partial x} [K(x, t) \mathcal{W}(x, t)] + \frac{\partial^2}{\partial x^2} [D(x, t) \mathcal{W}(x, t)]. \quad (1.8)$$

Mathematisch gesprochen handelt es sich um eine lineare partielle Differentialgleichung zweiter Ordnung parabolischen Typs. Ein Physiker würde die Gleichung vermutlich eher

als Diffusionsgleichung mit zusätzlicher erster Ortsableitung bezeichnen. Die Koeffizienten in (1.8) tragen folgende Bezeichnungen:

$$K(x, t) \quad \text{Drift-Koeffizient,} \quad (1.9)$$

$$D(x, t) \quad \text{Diffusions-Koeffizient.} \quad (1.10)$$

Im allgemeinen Fall können zu einer stochastischen Differentialgleichung des Langevin Typs:

$$\dot{x} = h(x, t) + g(x, t)\Gamma(t) \quad (1.11)$$

verschiedene Fokker-Planck-Gleichungen gehören und umgekehrt. Hierbei bezeichnet  $\Gamma(t)$  eine Gauss-verteilte,  $\delta$ -korrelierte Zufallskraft mit Mittelwert 0:

$$\langle \Gamma(t) \rangle = 0, \quad \langle \Gamma(t)\Gamma(t') \rangle = 2\delta(t - t'). \quad (1.12)$$

Der Faktor 2 bei der Korrelationsfunktion ist Konvention und wird häufig weggelassen, was dann allerdings zu einem Faktor 1/2 vor dem Diffusionsterm in (1.8) führt. Die Koeffizienten  $g$  und  $h$  sollen in dieser Arbeit nicht explizit zeitabhängig sein:  $g(x, t) \equiv g(x)$ ,  $h(x, t) \equiv h(x)$ . Der stochastische Term  $g(x)\Gamma(t)$  wird auch häufig als *Rauschterm* bezeichnet. Für den Fall, daß dieser nicht explizit von  $x$  abhängt, mithin also  $g(x) \equiv g$  gilt, spricht man von *additivem Rauschen*, andernfalls von *multiplikativem Rauschen*. In dieser Arbeit werden ausschließlich Probleme mit additivem Rauschen betrachtet. Unter diesen Bedingungen ergeben sich Drift- und Diffusionskoeffizient der zu (1.11) gehörigen Fokker-Planck-Gleichung *eindeutig* zu [Ris84]:

$$K(x, t) = h(x), \quad (1.13)$$

$$D(x, t) = g^2. \quad (1.14)$$

Für derartige Probleme erhält man also einen konstanten Diffusionskoeffizienten sowie einen Driftkoeffizienten, der nur vom Ort abhängt. Für den Rest der Arbeit werden daher die Bezeichnungen  $D$  statt  $D(x, t)$  und  $K(x)$  statt  $K(x, t)$  verwendet.

## 1.2.2 Normierung

Die Fokker-Planck-Gleichung (1.8) hat die Form einer *Kontinuitätsgleichung*:

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathcal{W}(x, t) + \frac{\partial}{\partial x} \mathcal{S}(x, t) = 0 \quad (1.15)$$

mit der Wahrscheinlichkeitsstromdichte

$$\mathcal{S}(x, t) = K(x)\mathcal{W}(x, t) - D \frac{\partial}{\partial x} \mathcal{W}(x, t). \quad (1.16)$$

Es sollen natürliche Randbedingungen vorausgesetzt werden, so daß sowohl die Wahrscheinlichkeitsdichte  $\mathcal{W}(x, t)$  als auch der Strom  $\mathcal{S}(x, t)$  für  $x \rightarrow \pm\infty$  verschwinden. Dies garantiert mit (1.15) die Erhaltung der Norm:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{W}(x, t) dx = 0. \quad (1.17)$$

Ist die Anfangsverteilung normiert, so bleibt ihre Norm im Laufe der zeitlichen Entwicklung erhalten. Die in dieser Arbeit betrachteten Lösungen der FP-Gleichung sind als Wahrscheinlichkeitsdichten auf 1 normiert:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{W}(x, t) dx = 1. \quad (1.18)$$

### 1.2.3 Stationäre Lösung

In diesem Abschnitt soll eine stationäre Lösung  $\mathcal{W}_{\text{stat}}(x)$  der FP-Gleichung (1.8) bestimmt werden. Für eine stationäre Lösung muß der Wahrscheinlichkeitsstrom überall konstant sein. Mit natürlichen Randbedingungen verschwindet  $\mathcal{S}(x, t)$  bei  $x \rightarrow \pm\infty$  und muß daher im stationären Fall überall verschwinden:

$$\mathcal{S}_{\text{stat}}(x) = 0 = K(x)\mathcal{W}_{\text{stat}}(x) - D \frac{d}{dx} \mathcal{W}_{\text{stat}}(x). \quad (1.19)$$

Hieraus läßt sich sofort  $\mathcal{W}_{\text{stat}}(x)$  durch Trennung der Variablen und anschließender Integration bestimmen:

$$\int^{\mathcal{W}_{\text{stat}}(x)} \frac{d\mathcal{W}_{\text{stat}}(x)}{\mathcal{W}_{\text{stat}}(x)} = \int^x \frac{K(y)}{D} dy \quad \Rightarrow \quad \mathcal{W}_{\text{stat}}(x) = \mathcal{N} \exp \left[ \frac{1}{D} \int^x K(y) dy \right]. \quad (1.20)$$

Die Integrationskonstante  $\mathcal{N}$  läßt sich über die Normierungsbedingung (1.18) festlegen:

$$\mathcal{N} = \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\frac{1}{D} \int^x K(y) dy} dx \right]^{-1}. \quad (1.21)$$

An dieser Stelle sei noch das Potential  $\Phi(x)$  definiert:

$$\Phi(x) := -\frac{1}{D} \int^x K(y) dy. \quad (\text{Potential}) \quad (1.22)$$

Für den hier betrachteten Fall eines konstanten Diffusionskoeffizienten kann man sich die deterministische Kraft  $h(x)$  in der Langevin-Gleichung (1.11) als Gradienten dieses Potentials darstellen:  $h(x) = K(x) = -D \partial_x \Phi(x)$ . Für die stationäre Lösung (1.20) gilt dann:

$$\mathcal{W}_{\text{stat}}(x) = \mathcal{N} e^{-\Phi(x)}. \quad (1.23)$$

Man kann durch Entwicklung der Wahrscheinlichkeitsdichte  $\mathcal{W}(x, t)$  nach Eigenfunktionen  $\psi_n$  des Fokker-Planck-Operators<sup>2</sup> (siehe hierzu Anhang B) zeigen, dass die Wahrscheinlichkeitsdichte für „vernünftige“ Potentiale bei beliebigen Anfangsverteilungen grundsätzlich gegen die stationäre Lösung  $\mathcal{W}_{\text{stat}}(x)$  strebt. Im eindimensionalen Fall mit natürlichen Randbedingungen ist es ausreichend, wenn das Potential  $\Phi(x)$  positiv ist und für  $x \rightarrow \pm\infty$  ansteigt:

$$\mathcal{W}(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} \psi_n(x) e^{-\lambda_n t} \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \psi_0 e^{-\lambda_0 t} = \mathcal{W}_{\text{stat}}(x). \quad (1.24)$$

Dies liegt daran, dass  $\lambda_0 = 0$  ist und  $\lambda_n > 0$  für alle  $n > 0$  gilt. Die höheren Eigenfunktionen werden also mit zunehmender Zeit exponentiell aus der Summe in (1.24) herausgedämpft.

## 1.3 FP-Gleichung für das Brownsche Teilchen

Die Fokker-Planck-Gleichung für ein BROWN'sches Teilchen mit dem Driftkoeffizienten:

$$K(x) = -\gamma x, \quad \gamma > 0 \quad (\text{Driftkoeffizient für Brownsches Teilchen}) \quad (1.25)$$

lautet:

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x, t) = \frac{\partial}{\partial x} [\gamma x P(x, t)] + D \frac{\partial^2}{\partial x^2} P(x, t). \quad (1.26)$$

Der durch diese Gleichung beschriebene stochastische Prozess wird häufig als *Ornstein-Uhlenbeck-Prozess* bezeichnet. Es sei nun o.B.d.A.  $t_0 = 0$  gewählt. Für die Anfangsbedingung einer  $\delta$ -Funktion:

$$P(x, 0) = \delta(x - x_0) \quad (1.27)$$

ergibt sich die folgende Lösung<sup>3</sup> (GREEN'sche Funktion):

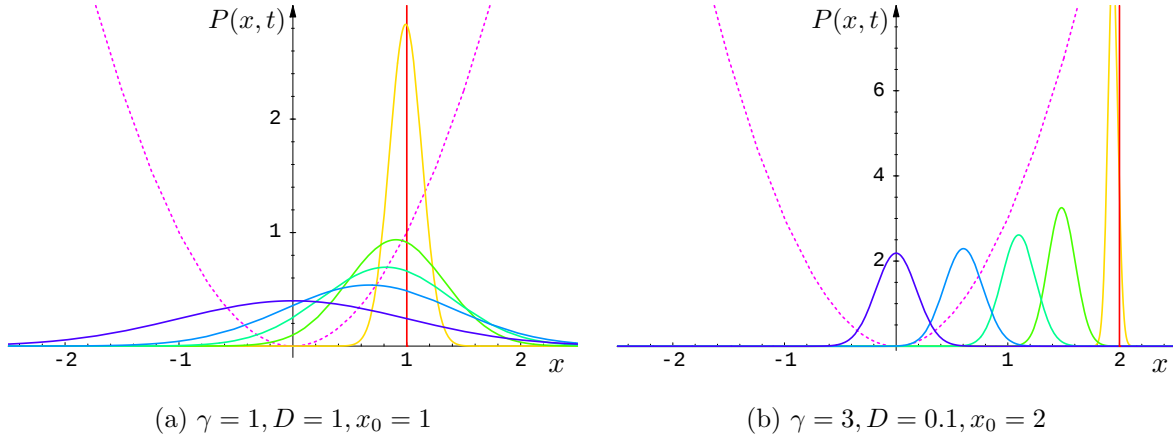
$$G(x, t; x_0) = \sqrt{\frac{\gamma}{2\pi D(1 - e^{-2\gamma t})}} \exp\left[-\frac{\gamma}{2D} \frac{(x - x_0 e^{-\gamma t})^2}{1 - e^{-2\gamma t}}\right] \quad (1.28)$$

Dies ist eine Gauss'sche Normalverteilung mit dem Mittelwert  $\mu(t) = x_0 e^{-\gamma t}$  und der Varianz  $\sigma^2(t) = D(1 - e^{-2\gamma t})/\gamma$ , die sich für  $t \rightarrow \infty$  in die stationäre Verteilung aufweitet.

$$P_{\text{stat}}(x) = \lim_{t \rightarrow \infty} G(x, t; x_0) = \mathcal{N} e^{-\Phi(x)} = \sqrt{\frac{\gamma}{2\pi D}} \exp\left[-\frac{\gamma}{2D} x^2\right]. \quad (1.29)$$

<sup>2</sup>Die hier verwendete Schreibweise suggeriert ein diskretes Eigenwertspektrum. Im allgemeinen können die Eigenwerte auch teilweise oder ganz kontinuierlich verteilt sein. Die hier getroffene Aussage bzgl. der stationären Verteilung bleibt in jedem Fall gültig.

<sup>3</sup>eine mögliche Herleitung ist in Anhang C gegeben



**Abbildung 1.3:** Sich aufweitende Gaussverteilung  $P(x, t)$  für  $P(x, 0) = \delta(x - x_0)$  zu den Zeitpunkten  $t = 0.0, 0.01, 0.1, 0.2, 0.4$  und  $10$  sowie das Potential  $\Phi(x)$ .

Dank der auf 1 normierten Anfangsbedingung und der Eigenschaft der FP-Gleichung, die Norm zu erhalten, ist die GREEN'sche Funktion (1.28) automatisch zu jedem Zeitpunkt normiert. In Abbildung 1.3 sind exemplarisch einige Verteilungen dargestellt.

Mit Kenntnis der GREEN'schen Funktion  $G(x, t; x_0)$  kann man im Prinzip die Lösung der FP-Gleichung (1.26) für beliebige Anfangsbedingungen  $P(x, 0)$  angeben:

$$P(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} G(x, t; x_0) P(x_0, 0) dx_0. \quad (1.30)$$

Für beliebig komplizierte Anfangsverteilungen wird sich das Integral in (1.30) im allgemeinen nicht geschlossen lösen lassen. Eine Klasse von Anfangsverteilungen, die eine geschlossene analytische Lösung erlaubt, ist durch Funktionen der folgenden Form gegeben:

$$P(x, 0) = \mathcal{N}_R R(x) P_N(x; \mu, \sigma^2). \quad (1.31)$$

Hierbei bezeichnet  $P_N(x; \mu, \sigma^2)$  eine Normalverteilung mit Mittelwert  $\mu$  und Varianz  $\sigma^2$ :

$$P_N(x; \mu, \sigma^2) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp \left[ -\frac{(x - \mu)^2}{2\sigma^2} \right]. \quad (\text{Normalverteilung}) \quad (1.32)$$

Die Verteilung  $P_N$  ist auf 1 normiert.  $R(x)$  ist ein beliebiges Polynom. Um eine überall positive Anfangsverteilung zu erhalten, ist es notwendig, dass  $R(x)$  positiv definit gewählt wird.  $\mathcal{N}_R$  ist eine Normierungskonstante, die von der Wahl des Polynoms abhängt. Die Normierbarkeit der Anfangsverteilung wird durch den exponentiellen Abfall der Normalverteilung für  $x \rightarrow \pm\infty$  garantiert.

Für eine beliebige Anfangsverteilung  $P(x, 0)$  besteht die Möglichkeit, diese nach geeigneten orthonormalen Polynomen zu entwickeln und die Reihe dann bei  $N$ -ter Ordnung

abzubrechen. Als Beispiel sei hier eine Entwicklung nach Hermite-Polynomen  $H_n(x)$  betrachtet:

$$R(x) = \sum_{k=0}^N c_k H_k(x). \quad (1.33)$$

Die Koeffizienten  $c_n$  sind so zu wählen, dass stets  $R(x) \geq 0$  gilt. Die Hermite-Polynome  $H_n(x)$  können mit Hilfe der folgenden generierenden Funktion dargestellt werden:

$$e^{2sx-s^2} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(x)}{n!} s^n \quad \Rightarrow \quad H_n(x) = \left. \frac{\partial^n}{\partial s^n} e^{2sx-s^2} \right|_{s=0}. \quad (1.34)$$

Diese generierende Funktion ist selbst von Gauss'scher Form, so dass sich das Integral in (1.30) für diesen Fall lösen läßt. Das Ergebnis enthält dann nur noch Ableitungen nach  $s$ , die sich leicht bestimmen lassen:

$$\begin{aligned} P(x, t) &\stackrel{(1.30)}{=} \int_{-\infty}^{+\infty} P(y, 0) G(x, t; y) dy \\ &\stackrel{(1.31)}{=} \mathcal{N}_R \int_{-\infty}^{+\infty} R(y) P_N(y; \mu, \sigma^2) G(x, t; y) dy \\ &\stackrel{(1.33)}{=} \mathcal{N}_R \int_{-\infty}^{+\infty} \sum_{n=0}^N c_n H_n(y) P_N(y; \mu, \sigma^2) G(x, t; y) dy \\ &\stackrel{(1.34)}{=} \mathcal{N}_R \sqrt{\frac{\gamma}{(2\pi)^2 \sigma^2 D (1 - e^{-2\gamma t})}} \sum_{n=0}^N c_n \frac{\partial^n}{\partial s^n} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{2sy-s^2} e^{-\frac{(y-\mu)^2}{2\sigma^2}} e^{-\frac{\gamma}{2D} \frac{(x-y e^{-\gamma t})^2}{1-e^{-2\gamma t}}} dy \Big|_{s=0} \end{aligned} \quad (1.35)$$

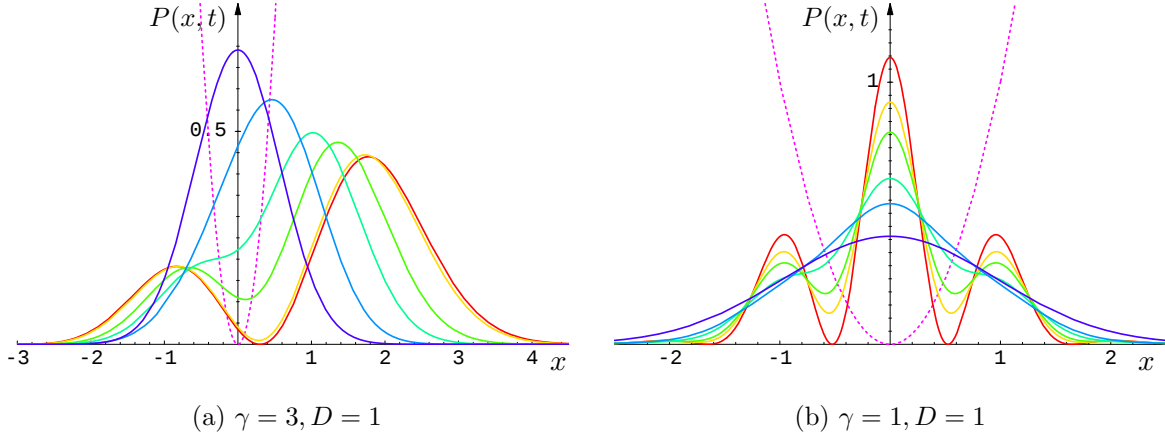
Ausführen des Gaußschen Integrals führt zu dem Ergebnis:

$$\begin{aligned} P(x, t) &= \mathcal{N}_R \sqrt{\frac{\gamma}{2\pi(D - (D - \gamma\sigma^2)e^{-2\gamma t})}} \exp\left[-\frac{\gamma}{2} \frac{(x - \mu e^{-\gamma t})^2}{D - (D - \gamma\sigma^2)e^{-2\gamma t}}\right] \times \\ &\quad \times \sum_{n=0}^N c_n \frac{\partial^n}{\partial s^n} \exp\left[\frac{s((2xe^{\gamma t} - s)\gamma\sigma^2 + D(e^{2\gamma t} - 1)(2\mu + s(2\sigma^2 - 1)))}{D(e^{2\gamma t} - 1) + \gamma\sigma^2}\right] \Big|_{s=0}. \end{aligned} \quad (1.36)$$

In Abbildung 1.4 sind zwei Beispiele für Anfangsbedingungen der Form (1.31) dargestellt. In dieser Arbeit werden nur reine Gaussverteilungen als Anfangsverteilungen verwendet, d.h. es gilt  $R(x) \equiv 1 = H_0(x)$ . Für diesen Fall erhält man aus (1.36) das Ergebnis:

$$P(x, t) = \sqrt{\frac{\gamma}{2\pi(D - (D - \gamma\sigma^2)e^{-2\gamma t})}} \exp\left[-\frac{\gamma}{2} \frac{(x - \mu e^{-\gamma t})^2}{D - (D - \gamma\sigma^2)e^{-2\gamma t}}\right]. \quad (1.37)$$

Für diesen einfachen Fall  $R(x) \equiv 1$  läßt sich die Lösung auch dadurch konstruieren, dass man eine geeignet gewählte GREEN'sche Funktion  $G(x, \tilde{t}; \tilde{x}_0)$ , die ja eine sich aufweitende Gaussglocke darstellt, im richtigen Augenblick als Anfangsverteilung betrachtet, mithin



**Abbildung 1.4:** Links:  $P(x, 0) = (x - 0.3)^2(x + 3)^2 P_N(x; 0, 1)$  zu den Zeitpunkten  $t = 0.0, 0.01, 0.1, 0.2, 0.4$  und  $1.0$  Rechts:  $P(x, 0) = (H_4(x))^2 P_N(x; 0, 1)$  zu den Zeitpunkten  $t = 0.0, 0.01, 0.02, 0.05, 0.1$  und  $1$  sowie jeweils das Potential  $\Phi(x)$ .

also einfach eine Reskalierung der Zeitskala vornimmt ( $t \rightarrow \tilde{t} = t + \tilde{t}_0$ ) und  $\tilde{x}_0$  entsprechend wählt. Es soll also  $G(x, t + \tilde{t}_0; \tilde{x}_0)$  bei  $t = 0$  mit der Normalverteilung übereinstimmen:

$$P(x, 0) = P_N(x; \mu, \sigma^2) \stackrel{!}{=} G(x, t + \tilde{t}_0; \tilde{x}_0)|_{t=0}. \quad (1.38)$$

Man erhält somit als Bestimmungsgleichung für  $\tilde{t}_0$  und  $\tilde{x}_0$

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left[-\frac{(x - \mu)^2}{2\sigma^2}\right] \stackrel{!}{=} \sqrt{\frac{\gamma}{2\pi D(1 - e^{-2\gamma\tilde{t}_0})}} \exp\left[-\frac{\gamma}{2D} \frac{(x - \tilde{x}_0 e^{-\gamma\tilde{t}_0})^2}{1 - e^{-2\gamma\tilde{t}_0}}\right] \quad (1.39)$$

mit der Lösung

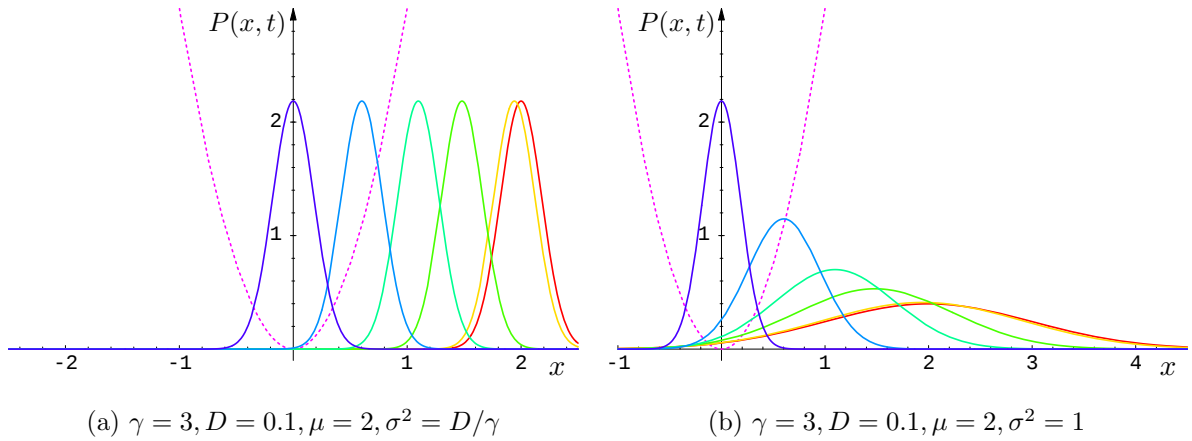
$$\tilde{t}_0 = -\frac{1}{2\gamma} \log(1 - \gamma\sigma^2/D), \quad \tilde{x}_0 = \mu / \sqrt{1 - \gamma\sigma^2/D}. \quad (1.40)$$

Mit dieser Wahl der Parameter  $\tilde{t}_0$  und  $\tilde{x}_0$  erfüllt  $G(x, t - \tilde{t}_0; \tilde{x}_0)$  also die Anfangsbedingung (1.38) bei  $t = 0$  und die Differentialgleichung (1.26) für alle  $t \geq 0$ . Einsetzen von  $\tilde{t}_0$  und  $\tilde{x}_0$  in (1.28) liefert das Endergebnis:

$$\begin{aligned} P(x, t) &= G(x, t - \tilde{t}_0; \tilde{x}_0) \\ &= \sqrt{\frac{\gamma}{2\pi(D - (D - \gamma\sigma^2)e^{-2\gamma t})}} \exp\left[-\frac{\gamma}{2} \frac{(x - \mu e^{-\gamma t})^2}{D - (D - \gamma\sigma^2)e^{-2\gamma t}}\right] \end{aligned} \quad (1.41)$$

welches wie erwartet mit dem Ergebnis (1.37) übereinstimmt. Die Anfangsbedingung  $P(x, 0) = \delta(x - x_0)$  ist als Grenzfall  $\sigma^2 \rightarrow 0, \mu \rightarrow x_0$  weiterhin enthalten.

Ein anderer Grenzfall, nämlich  $\sigma^2 = D/\gamma$ , entspricht einer Anfangsverteilung, die bereits die Form der stationären Verteilung besitzt. Die Verteilung „wandert“ dann langsam in



**Abbildung 1.5:** Wandernde(a)/kontrahierende(b) Gauß-Verteilung  $P(x, t)$  für  $P(x, 0) = P_N(x, \mu, \sigma^2)$  zu den Zeitpunkten  $t = 0, 0.01, 0.1, 0.2, 0.4$  und  $10$  sowie das Potential  $\Phi(x)$ .

Richtung Ursprung, ohne ihre Form zu ändern:

$$P(x, t) = \sqrt{\frac{\gamma}{2\pi D}} \exp\left[-\frac{\gamma}{2D}(x - \mu e^{-\gamma t})^2\right] \quad (1.42)$$

Ebenso ist der Fall  $\sigma^2 > D/\gamma$  möglich, der einer Anfangsverteilung entspricht, die breiter als die stationäre Verteilung ist. Die Verteilung zieht sich also zusammen, statt sich aufzuweiten. In Abbildung 1.5 sind diese beiden Fälle noch einmal verdeutlicht.

Für  $t \rightarrow \infty$  strebt die Lösung (1.41), wie zu erwarten, gegen die stationäre Lösung, wie sie durch (1.29) gegeben ist.

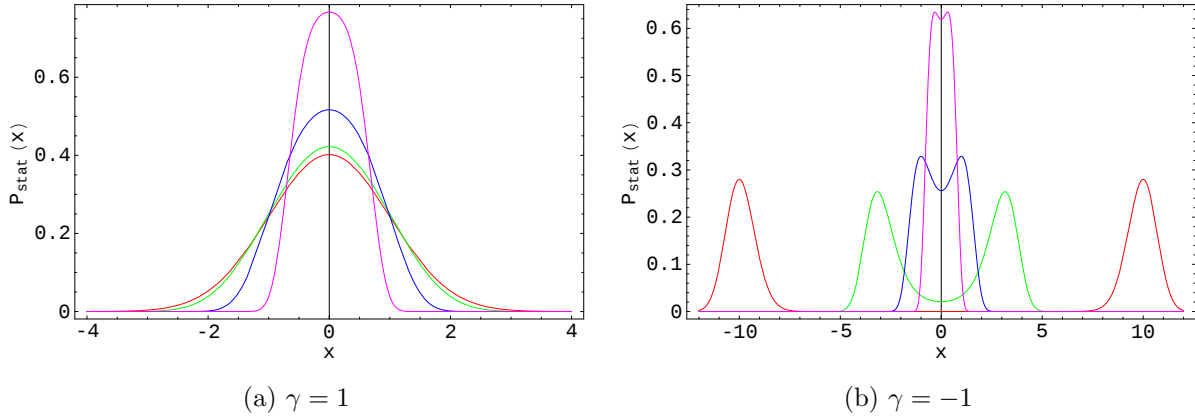
## 1.4 Das anharmonische Potential

In diesem Abschnitt soll das sogenannte anharmonische Potential eingeführt werden, welches eine Erweiterung des bisher betrachteten harmonischen Problems darstellt. Zusätzlich zur harmonischen Drift tritt im anharmonischen Driftkoeffizienten ein kubischer Term auf:

$$K_g(x) = -\gamma x - gx^3. \quad (\text{anharmonischer Driftkoeffizient}) \quad (1.43)$$

Der Koeffizient  $g$  muß positiv gewählt werden, wenn die FP-Gleichung eine stationäre Lösung haben soll. Der Koeffizient  $\gamma$  kann positiv oder negativ gewählt werden. Die Fokker-Planck-Gleichung für den Driftkoeffizienten (1.43) lautet:

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x, t) = \frac{\partial}{\partial x} [(\gamma x + gx^3)P(x, t)] + D \frac{\partial^2}{\partial x^2} P(x, t). \quad (1.44)$$



**Abbildung 1.6:** Stationäre Verteilung  $P_{\text{stat}}(x)$  für  $g = 0.01$ ,  $g = 0.1$ ,  $g = 1$  und  $g = 10$

Gleichung (1.44) ist nicht mehr geschlossen für beliebige Zeiten  $t$  lösbar, für  $t \rightarrow \infty$  jedoch läßt sich wiederum die stationäre Lösung angeben. Mit dem Potential:

$$\Phi_g(x) = -\frac{1}{D} \int^x K_g(y) dy = \frac{1}{2D} \gamma x^2 + \frac{1}{4D} g x^4 \quad (1.45)$$

lautet die stationäre Lösung:

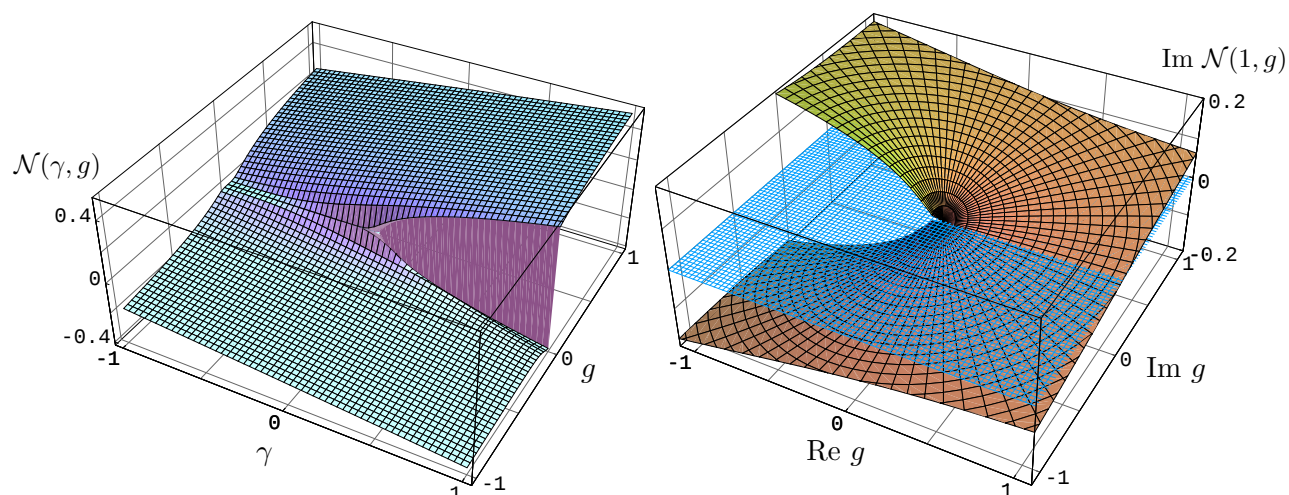
$$\mathcal{P}_{\text{stat}}(x) = \mathcal{N}(\gamma, g) \exp \left[ -\frac{\gamma}{2D} x^2 - \frac{g}{4D} x^4 \right]. \quad (1.46)$$

In Abbildung 1.6 ist die stationäre Verteilung für positives und negatives  $\gamma$  für verschiedene Werte von  $g$  dargestellt. Für die Normierungskonstante ergeben sich in Abhängigkeit von  $\gamma$  folgende Ergebnisse:

$$\mathcal{N}(\gamma, g) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2g}{\gamma}} \exp \left( -\frac{\gamma^2}{8Dg} \right) / K_{\frac{1}{4}} \left[ \frac{\gamma^2}{8Dg} \right] & \text{für } \gamma > 0 \\ \left( \frac{4g}{D} \right)^{1/4} / \Gamma \left( \frac{1}{4} \right) & \text{für } \gamma = 0 \\ \frac{2}{\pi} \sqrt{\frac{g}{|\gamma|}} \exp \left( -\frac{\gamma^2}{8Dg} \right) / \left( I_{-\frac{1}{4}} \left[ \frac{\gamma^2}{8Dg} \right] + I_{\frac{1}{4}} \left[ \frac{\gamma^2}{8Dg} \right] \right) & \text{für } \gamma < 0 \end{cases} \quad (1.47)$$

Hier bezeichnet  $K_n[z]$  die modifizierte Besselfunktion 2.Art und  $n$ -ter Ordnung sowie  $I_n[z]$  die modifizierte Besselfunktion 1.Art und  $n$ -ter Ordnung.

Um zu einer Lösung von (1.44) für beliebige Zeiten zu gelangen, kann man, aufbauend auf der exakten Lösung für das harmonische Potential aus dem vorangegangenen Abschnitt, eine störungstheoretische Lösung in Form einer Schwachkopplungsreihe in  $g$  bestimmen. Dies wird u.a. Gegenstand des Kapitels 3 sein. Es soll jedoch schon an dieser Stelle darauf hingewiesen werden, dass es sich dabei um eine Entwicklung um einen singulären Punkt handelt. Das qualitative Verhalten der Lösungen ändert sich beim Übergang von positiven zu negativen  $g$  total: Während für positive  $g$  eine stationäre Lösung existiert, zerfließt



**Abbildung 1.7:** Singularität der Normierungskonstante bei  $g = 0$ .

für  $g < 0$  jede Anfangsverteilung ins Unendliche. Diese Singularität ist auch an der Normierungskonstanten (1.47) abzulesen, die in allen drei Fällen für  $\gamma$  bei  $g = 0$  erkennbar wird. In Abbildung 1.7 ist dies verdeutlicht: Links ist die Normierung über der  $\gamma$ - $g$ -Ebene aufgetragen. Man erkennt gut den Beginn eines Verzweigungsschnittes bei  $g = 0$ . Rechts ist der Imaginärteil der Normierung für  $\gamma = 1$  über der komplexen  $g$ -Ebene dargestellt. Offensichtlich liegt also bei  $g = 0$  ein Verzweigungspunkt vor. Aus diesen Gründen ist damit zu rechnen, dass eine Lösung in Form einer Störungsentwicklung um  $g = 0$  zu einer divergenten Reihe führen wird.



# Kapitel 2

## Variationsstörungsrechnung für die Normierungskonstante

In diesem Kapitel soll es um einen ersten Test der Variationsstörungsrechnung gehen. Für diesen Zweck ist die Untersuchung der Normierungskonstanten der stationären Verteilung aus mehreren Gründen besonders gut geeignet: Zum einen läßt sich sofort die Schwachkopplungsentwicklung um  $g = 0$  sowie eine exakte Starkkopplungsreihe um  $g = \infty$  für die in geschlossener Form vorliegende Normierungskonstante (1.47) angeben. Zum anderen vereinfacht sich die Ableitung der Variationsstörungsreihe durch die Tatsache, dass die Normierung der stationären Verteilung zeitunabhängig ist. Die Bestimmung des optimalen Variationsparameters ist ebenfalls deutlich einfacher als bei Betrachtung einer ganzen Verteilungsfunktion.

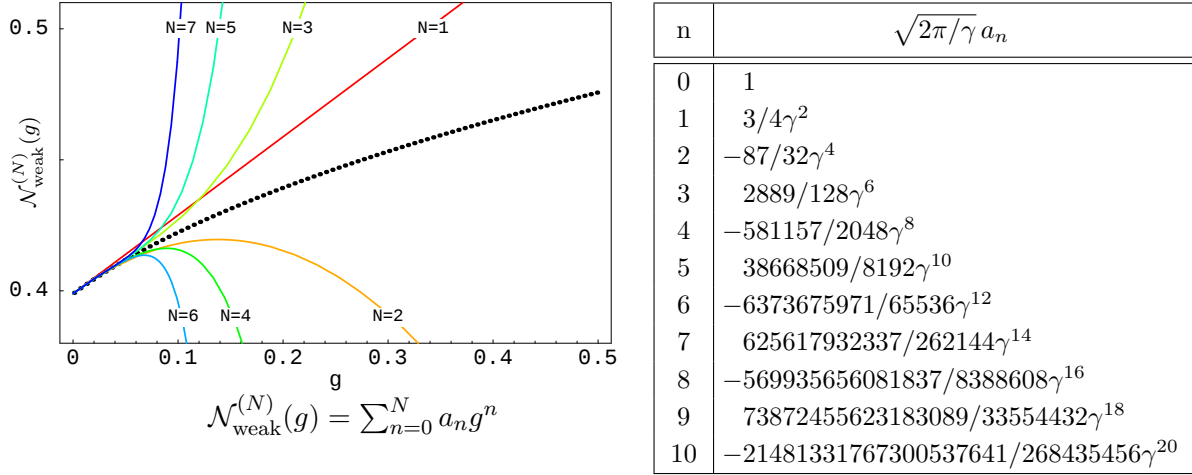
Gleichzeitig spielen bei der Untersuchung der Normierung die gleichen grundlegenden Ideen wie bei der Untersuchung der Wahrscheinlichkeitsverteilung in Kapitel 3 eine Rolle, so dass es schon aus didaktischen Gründen sinnvoll erscheint, mit diesem einfachen Fall zu beginnen. Schließlich lassen sich die Ergebnisse dieses Kapitels zu einem gewissen Grad auf die Untersuchung der Wahrscheinlichkeitsverteilung übertragen, weil die Normierungskonstante der stationären Lösung als Grenzfall für  $x = 0$  und  $t \rightarrow \infty$  in der vollständigen Lösung enthalten ist.

### 2.1 Schwachkopplungsentwicklung

Die stationäre Lösung der FP-Gleichung mit anharmonischem Driftkoeffizienten lautet:

$$P_{\text{stat}}(x) = \mathcal{N}(\gamma, g) \exp \left[ -\frac{\gamma}{2}x^2 - \frac{g}{4}x^4 \right]. \quad (2.1)$$

Der Einfachheit halber wurde hier  $D = 1$  gesetzt. Da es in diesem Kapitel primär um die  $g$ -Abhängigkeit der Normierung geht, wird ab jetzt kurz  $\mathcal{N}(g)$  statt  $\mathcal{N}(\gamma, g)$  geschrieben. Aus



**Abbildung 2.1:** Schwachkopplungsreihe und Schwachkopplungskoeffizienten. Die gepunktete Linie bezeichnet die exakte Kurve für  $\mathcal{N}(g)$ .

der Normierungsbedingung folgt die Normierungskonstante der stationären Verteilung:

$$\mathcal{N}(g) = \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\frac{\gamma}{2}x^2 - \frac{g}{4}x^4\right) dx \right]^{-1}. \quad (2.2)$$

Wie bereits in Abschnitt 1.4 dargelegt wurde, existiert dieses Integral nur für  $g \geq 0$ , was dazu führt, dass bei  $g = 0$  eine Singularität vorliegt. Um eine Entwicklung um diesen Punkt zu erhalten, entwickelt man den Integranden bis zur gewünschten Ordnung  $N$  in  $g$  und führt erst dann das Integral aus:

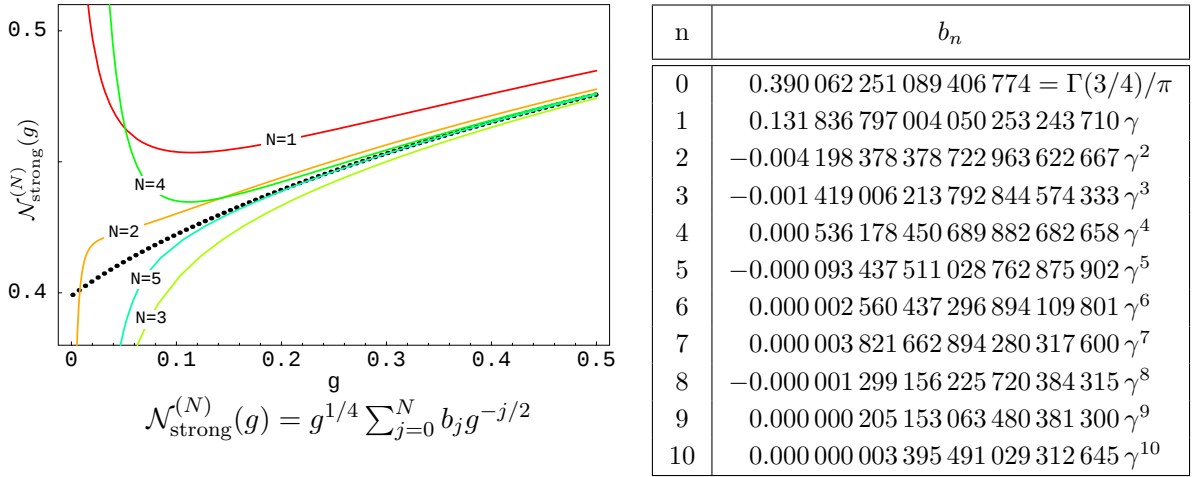
$$\mathcal{N}_{\text{weak}}^{(N)}(\gamma, g) = \left[ \sum_{n=0}^N \frac{(-1)^n}{4^n n!} g^n \int_{-\infty}^{+\infty} x^{4n} e^{-\frac{\gamma}{2}x^2} dx \right]^{-1} =: \sum_{n=0}^N a_n g^n. \quad (2.3)$$

Die Koeffizienten  $a_n$  wachsen faktoriell mit  $n$  an, so dass es sich um eine divergente Reihe handelt. Die Tabelle in Abbildung 2.1 enthält die ersten zehn Koeffizienten. Der Plot links daneben verdeutlicht das divergente Verhalten der Reihe: für kleine  $g$  liefert die Entwicklung durchaus gute Werte, versagt aber vollständig für große  $g$ . Die gepunktete Linie stellt das exakte Ergebnis dar.

## 2.2 Starkkopplungsentwicklung

Es soll nun das asymptotische Verhalten der Normierungskonstanten für große  $g$  betrachtet werden, um eine Starkkopplungsreihe um  $g = \infty$  zu bestimmen. Die Form einer solchen Entwicklung lässt sich leicht erkennen, wenn man in dem Integral (2.2) folgende Variablentransformation einführt:

$$x \rightarrow g^{-1/4}y, \quad dx \rightarrow g^{-1/4}dy. \quad (2.4)$$



**Abbildung 2.2:** Starkkopplungsreihe und Starkkopplungskoeffizienten. Die gepunktete Linie bezeichnet die exakte Kurve für  $\mathcal{N}(g)$ .

Die Normierungskonstante lautet damit:

$$\mathcal{N}(g) = g^{1/4} \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left( -\frac{\gamma}{2g^{1/2}} y^2 - y^4 \right) dy \right]^{-1} \approx g^{1/4} \sum_{j=0}^N b_j g^{-j/2} = \mathcal{N}_{\text{strong}}^{(N)}(g). \quad (2.5)$$

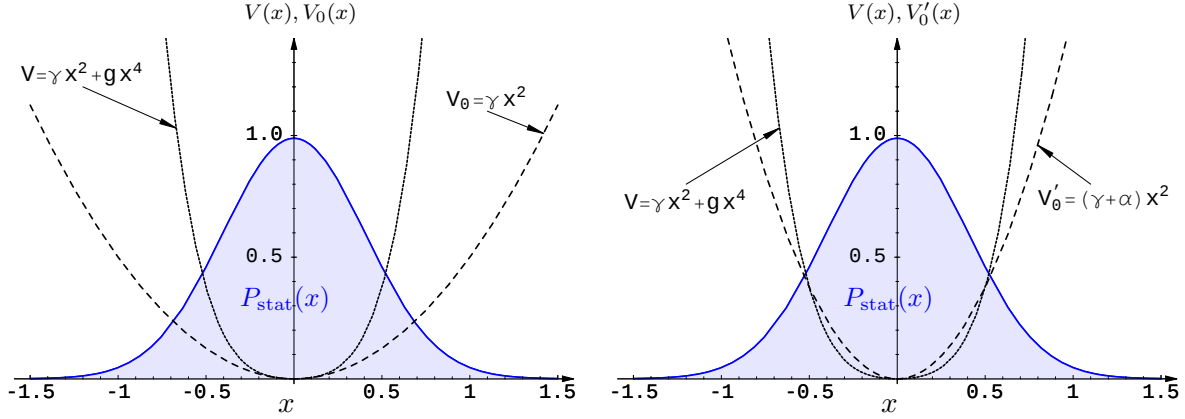
Für  $g \rightarrow \infty$  verhält sich  $\mathcal{N}(g)$  demnach wie  $g^{1/4}$  mit Korrekturen in Potenzen von  $g^{-1/2}$ . Der führende Koeffizient ist gegeben durch:

$$b_0 = \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-y^4} dy \right]^{-1} = \Gamma(3/4)/\pi. \quad (2.6)$$

Nachdem der  $g^{1/4}$ -Faktor abgespalten wurde, ist der Rest der Reihe bei  $g = \infty$  regulär und kann direkt durch Taylor-Entwicklung bestimmt werden. In Abbildung 2.2 sind die ersten zehn Entwicklungskoeffizienten angegeben. Der Plot links zeigt die Starkkopplungsentwicklung für die ersten fünf Ordnungen. Die Reihe liefert gute Ergebnisse für große  $g$ , versagt jedoch für kleine Werte des Kopplungsparameters.

## 2.3 Variationsstörungsreihe für die Normierung

In den beiden vorangegangenen Abschnitten wurden zwei Störungsentwicklungen für die Normierungskonstante bestimmt. Zum einen die Schwachkopplungsreihe (2.3), die als divergente Reihe nur gute Ergebnisse für sehr kleine Werte von  $g$  liefern kann, zum anderen die Starkkopplungsreihe (2.5), die das asymptotische Verhalten für große  $g$  gut beschreibt, jedoch für kleine  $g$  versagt. Obwohl die Schwachkopplungsreihe divergiert, ist in den  $a_n$  die gesamte Information über analytische Funktion  $\mathcal{N}(g)$  enthalten. Deshalb muß es möglich sein, aus den  $a_n$  auch die Starkkopplungsreihe zu gewinnen. Im folgenden Abschnitt soll



**Abbildung 2.3:** Effektive Kompensation des Störpotentials  $V$  durch das Potential  $V_0$  des elementar lösaren Problems. Darstellung dient hier nur der Anschauung, der Parameter  $\alpha$  im rechten Plot wurde nicht systematisch bestimmt.

nun ausgehend von der Schwachkopplungsentwicklung eine Variationsstörungsreihe bestimmt werden, die zwischen diesen beiden Fällen vermittelt und in der Lage ist, ein für alle Werte von  $g$  gültiges Ergebnis zu liefern. Zunächst sei die grundlegende Idee der Variationsstörungstheorie dargestellt.

### 2.3.1 Die Idee

Mit Hilfe der Variationsstörungstheorie ist es möglich, eine divergente Störungsreihe der vorliegenden Art in eine konvergente Reihe umzuformen, so dass sich der Gültigkeitsbereich der Reihe zu beliebig großen Kopplungsstärken erweitern lässt. Die grundlegende Idee dabei ist, das Störpotential für große Kopplungsstärken teilweise durch das Potential eines elementar lösaren Problems zu kompensieren, indem dessen Parameter geeignet optimiert werden. Im hier betrachteten Zusammenhang kann man sich diesen Vorgang als Einfügen eines Brownschen Teilchens vorstellen, dessen Driftkoeffizient in jeder Ordnung und für jeden Zeitpunkt so optimiert wird, dass er die Wirkung des  $x^4$ -Störterms *effektiv* kompensiert, wodurch der Störterm wiederum als klein angesehen werden kann. Abbildung 2.3 veranschaulichte dies für ein  $\alpha x^2$ -Referenzpotential.

Diese Idee soll nun auf das Normierungsintegral (2.2) angewendet werden, indem ein harmonisches Referenzsystem mit dem Driftkoeffizienten  $K_\Omega(x) = -\Omega x$  eingefügt wird. Die Normierung bleibt durch diesen Schritt unverändert, wenn man den zusätzlichen Term gleich wieder vom Störpotential abzieht:

$$\begin{aligned} \mathcal{N}(g)^{-1} &= \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\gamma x^2 - g x^4} dx \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\gamma x^2 - \Omega x^2 - g x^4 + \Omega x^2} dx = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(\gamma + \Omega)x^2 - (g x^4 - \Omega x^2)} dx. \end{aligned} \quad (2.7)$$

Nun soll der zweite Term im Exponenten als Störung gegenüber dem harmonischen Potential  $(\gamma + \Omega)x^2$  betrachtet werden:

$$\Phi_{\text{int}}(x) := \lambda(gx^4 - \Omega x^2). \quad (2.8)$$

Die entsprechende Störungsreihe ergibt sich, wenn man  $(gx^4 - \Omega x^2)$  durch  $\lambda(gx^4 - \Omega x^2)$  ersetzt, nach  $\lambda$  entwickelt und am Ende  $\lambda = 1$  setzt:

$$\mathcal{N}(g)^{-1} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\lambda^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial \lambda^n} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(\gamma+\Omega)x^2 - \lambda(gx^4 - \Omega x^2)} dx \Big|_{\lambda=1}. \quad (2.9)$$

Um nun an die Schwachkopplungsentwicklung aus Abschnitt 2.1 anzuschließen und damit die bekannten Schwachkopplungskoeffizienten verwenden zu können, bringt man diesen Ausdruck durch geeignete Variablentransformation zurück in die ursprüngliche Form (2.2). Mit den Ersetzungen:

$$\tilde{x} = \beta x, \quad d\tilde{x} = \beta dx, \quad (2.10)$$

erhält man für die Normierungskonstante den Ausdruck:

$$\mathcal{N}(g)^{-1} = \frac{1}{\beta} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{\gamma+\Omega-\lambda\Omega}{\beta^2} \tilde{x}^2 - \frac{\lambda g}{\beta^4} \tilde{x}^4} d\tilde{x}. \quad (2.11)$$

Setzt man nun  $\beta = \sqrt{1 + (\Omega - \lambda\Omega)/\gamma}$  und führt als neue Kopplungskonstante  $\tilde{g} := \lambda g/\beta^4$  ein, so erhält man einen Ausdruck der ursprünglichen Form:

$$\mathcal{N}(g)^{-1} = \frac{1}{\sqrt{1 + (\Omega - \lambda\Omega)/\gamma}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\gamma \tilde{x}^2 - \tilde{g} \tilde{x}^4} d\tilde{x}. \quad (2.12)$$

Für diesen läßt sich sofort eine Schwachkopplungsreihe mit den Koeffizienten aus Abschnitt 2.1 angeben:

$$\mathcal{N}(g) = \sqrt{1 + (\Omega - \lambda\Omega)/\gamma} \times \sum_{n=0}^{\infty} a_n \tilde{g}^n. \quad (2.13)$$

Die neue Kopplungskonstante ist dabei gegeben durch:

$$\tilde{g} = \frac{\lambda g}{(1 + (\Omega - \lambda\Omega)/\gamma)^2}. \quad (2.14)$$

Es handelt sich also praktisch um die gleiche Schwachkopplungsreihe wie in Abschnitt 2.1, jedoch hängt die neue Kopplungskonstante  $\tilde{g}$  noch vom Variationsparameter  $\Omega$  ab. Für die unendliche Reihe hebt sich diese Abhängigkeit von  $\Omega$  nach Konstruktion heraus. Wird die Reihe jedoch bei endlicher Ordnung abgebrochen, so bleibt eine Abhängigkeit vom Variationsparameter  $\Omega$  übrig. Diese läßt sich ausnutzen, um den Gültigkeitsbereich der Reihe zu erweitern indem  $\tilde{g}(\Omega)$  durch Optimierung des Variationsparameters  $\Omega$  geeignet skaliert wird.

### 2.3.2 Ableitung der Variationsstörungsreihe

In diesem Abschnitt soll nun eine explizite Darstellung für die Variationsstörungsreihe bis zur  $N$ -ten Ordnung in der Störung (2.8) abgeleitet werden. Diese erhält man, wenn man (2.13) bis zu  $N$ -ter Ordnung in  $\lambda$  entwickelt und anschliessend  $\lambda = 1$  setzt:

$$\begin{aligned} \mathcal{N}(g) &\stackrel{(2.13)}{=} \sqrt{1 + (\Omega - \lambda\Omega)/\gamma} \times \sum_{n=0}^{\infty} a_n \tilde{g}^n \\ &\stackrel{(2.14)}{=} \sum_{n=0}^{\infty} a_n (1 + (\Omega - \lambda\Omega)/\gamma)^{1/2} \left( \frac{\lambda g}{(1 + (\Omega - \lambda\Omega)/\gamma)^2} \right)^n \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} a_n \lambda^n g^n (1 + \Omega/\gamma)^{1/2-2n} \left( 1 - \frac{\lambda\Omega}{\gamma + \Omega} \right)^{1/2-2n}. \end{aligned}$$

An dieser Stelle wird die Reihe nun mit Hilfe der Binomischen Formel in  $\lambda$  entwickelt und nach der  $N$ -ten Ordnung abgebrochen:

$$\mathcal{N}(g) \approx \sum_{n=0}^N a_n \lambda^n g^n (1 + \Omega/\gamma)^{1/2-2n} \sum_{k=0}^{N-n} (-1)^k \binom{1/2-2n}{k} \left( \frac{\lambda\Omega}{\gamma + \Omega} \right)^k.$$

Wird nun  $\lambda = 1$  gesetzt und noch der neue Variationsparameter  $\omega$  eingeführt, der die wesentliche  $g$ -Abhängigkeit bereits enthält:

$$\omega := \frac{g}{(1 + \Omega/\gamma)^2}, \quad (2.15)$$

so lautet das Endergebnis für die Variationsstörungsreihe:

$$\mathcal{N}_{\text{vpt}}^{(N)}(g, \omega) = \left( \frac{g}{\omega} \right)^{1/4} \sum_{n=0}^N a_n \omega^n \sum_{k=0}^{N-n} (-1)^k \binom{1/2-2n}{k} \left( 1 - \left( \frac{\omega}{g} \right)^{1/2} \right)^k. \quad (2.16)$$

Das asymptotische Verhalten dieser Reihe für große  $g$  stimmt mit dem der Starkkoppelungsentwicklung aus Abschnitt 2.2 überein:

$$\mathcal{N}_{\text{vpt}}^{(N)}(g, \omega) = g^{1/4} \sum_{j=0}^N b_j^N(\omega) g^{-j/2}. \quad (2.17)$$

Die Koeffizienten  $b_j^N(\omega)$  ergeben sich nach erneuter Anwendung der Binomischen Entwicklung zu:

$$\begin{aligned} b_j^N(\omega) &= (-1)^j \omega^{j/2-1/4} \sum_{n=0}^N a_n \omega^n \sum_{k=0}^{N-n} (-1)^k \binom{1/2-2n}{k} \binom{k}{j} \\ &= \omega^{j/2-1/4} \sum_{n=0}^N a_n \omega^n (-1)^{j+N+n} \frac{4n-1}{4n+2j-1} \binom{-1/2-2n}{N-n} \binom{N-n}{j}. \end{aligned} \quad (2.18)$$

Der Koeffizient  $b_j^N(\omega)$  ist also ein Näherungswert, den das Verfahren der Variationsstörungsrechnung für den Starkkopplungskoeffizienten  $b_j$  liefert. Das hochgestellte  $N$  bedeutet dabei, dass in die Berechnung dieses Näherungswertes die Werte der ersten  $N$  Schwachkopplungskoeffizienten  $a_n$  eingegangen sind. Wegen  $\binom{k}{j} = 0$  für  $j > k$  gilt grundsätzlich  $b_j^N(\omega) \equiv 0$  für  $j > N$ . Es ist also nicht möglich, mehr Starkkopplungskoeffizienten zu berechnen, als Schwachkopplungskoeffizienten zur Verfügung stehen.

### 2.3.3 Bestimmung des Variationsparameters

Bisher wurde noch nichts darüber gesagt, auf welche Weise ein optimaler Wert für den Variationsparameter  $\omega$  bestimmt werden kann. Wie schon zuvor erwähnt, ist die exakte Normierungskonstante und damit die unendliche Störungsreihe grundsätzlich unabhängig von  $\omega$ . Nach Konstruktion hebt sich das Potential des Referenzsystems in der exakten Lösung heraus:

$$\frac{\partial}{\partial \omega} \mathcal{N}_{\text{vpt}}^{(\infty)}(g, \omega) \equiv 0. \quad (2.19)$$

Für jede endliche Ordnung  $N$  wird die Variationsstörungsreihe jedoch im allgemeinen eine Abhängigkeit von  $\omega$  aufweisen. Dies legt die Forderung nahe, dass der Parameter  $\omega$  so gewählt werden sollte, dass diese Abhängigkeit möglichst gering ausfällt. Die Näherungslösung  $N$ -ter Ordnung soll also möglichst stationär gegenüber Variationen des Parameters  $\omega$  sein:

$$\left. \frac{\partial}{\partial \omega} \mathcal{N}_{\text{vpt}}^{(N)}(g, \omega) \right|_{\omega=\omega_{\text{opt}}} \stackrel{!}{=} 0. \quad (2.20)$$

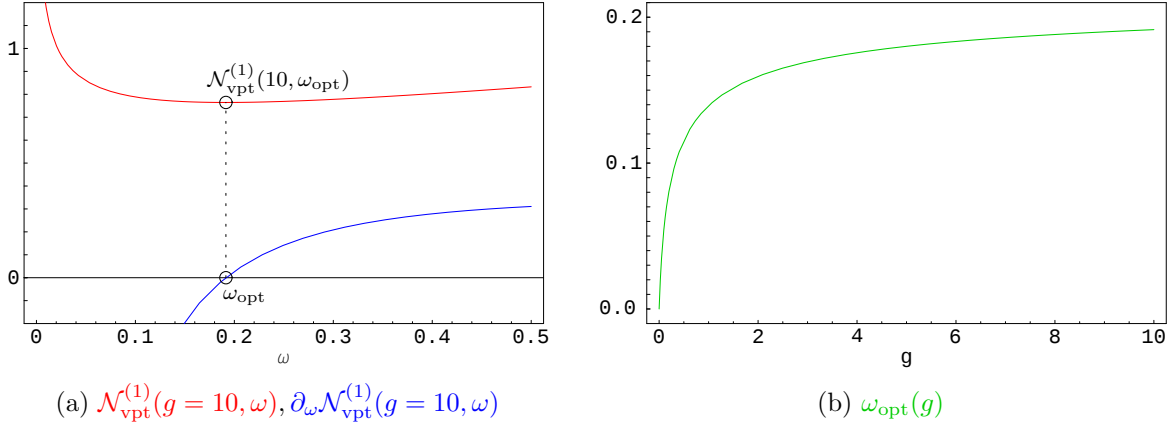
Häufig wird diese Vorgehensweise auch als Aufsuchen des Bereichs minimaler Sensitivität bezüglich  $\omega$  bezeichnet [Ste81]. Ein auf diese Weise bestimmter Werte für den Variationsparameter wird natürlich von  $g$  abhängen. Für höhere Ordnungen  $N$  ist die Bestimmungsgleichung (2.20) für  $\omega_{\text{opt}}$  möglicherweise nur numerisch für fest vorgegebenes  $g$  zu lösen. Desweiteren kann der Fall eintreten, dass die erste Ableitung mehrere Nullstellen besitzt, so dass die Bedingung (2.20) keine eindeutige Lösung liefert. Für den Fall, dass die erste Ableitung keine Nullstellen besitzt, kann man auch höhere Ableitungen heranziehen:

$$\left. \frac{\partial^k}{\partial \omega^k} \mathcal{N}_{\text{vpt}}^{(N)}(g, \omega) \right|_{\omega=\omega_{\text{opt}}} \stackrel{!}{=} 0. \quad (2.21)$$

Als mögliche Kandidaten für den optimalen Wert des Variationsparameters werden daher in den folgenden Untersuchungen an der Normierung die Nullstellen verschiedener Ableitungen herangezogen:

$$\omega_{\text{opt}} \longrightarrow \{\omega_i^{(k)}(g)\}, \quad i\text{-te Nullstelle der } k\text{-ten Ableitung.} \quad (2.22)$$

Da für die Normierungskonstante in allen Fällen exakte Ergebnisse vorliegen, läßt sich die Güte der einzelnen Kandidaten leicht beurteilen. Besonderes Augenmerk soll dabei auf



**Abbildung 2.4:** *Links:* Variationsstörungsreihe für  $N = 1$  und  $g = 10$  sowie die erste Ableitung mit Nullstelle  $\omega_{\text{opt}}$ . *Rechts:* optimierter Variationsparameter  $\omega_{\text{opt}}$  in Abhängigkeit von  $g$ .

mögliche Muster in der Verteilung der besten Ergebnisse gelegt werden, da sich daraus möglicherweise heuristische Argumente für die Wahl des Variationsparameters in komplizierteren Fällen ergeben, in denen Bedingungen wie (2.21) keine eindeutige Auswahl zulassen.

## 2.4 Variationsrechnung erster Ordnung

Es soll nun die Variationsstörungsreihe (2.16) für die Normierungskonstante in erster Ordnung untersucht werden. Entsprechend den Ausführungen im vorangegangenen Abschnitt sollen als Kriterium für Stationarität die Nullstellen der ersten Ableitung dienen:

$$\left. \frac{\partial}{\partial \omega} \mathcal{N}_{\text{vpt}}^{(1)}(g, \omega) \right|_{\omega=\omega_{\text{opt}}} \stackrel{!}{=} 0. \quad (2.23)$$

Für die Variationsstörungsreihe (2.16) und ihre erste Ableitung erhält man mit  $N = 1$ :

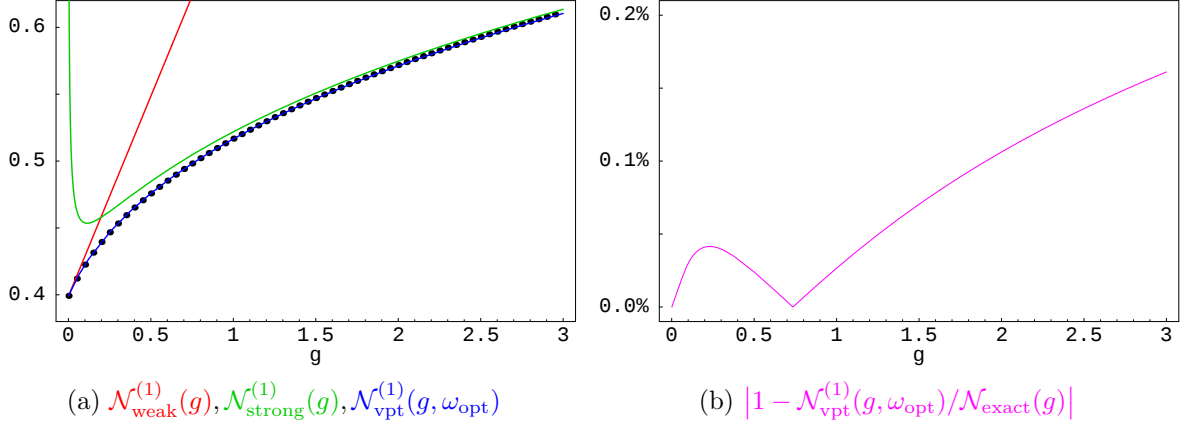
$$\mathcal{N}_{\text{vpt}}^{(1)}(g, \omega) = \frac{2\sqrt{\omega} + \sqrt{g}(3\omega + 2)}{\sqrt{2\pi} 4 g^{\frac{1}{4}} \omega^{\frac{1}{4}}}, \quad (2.24)$$

$$\frac{\partial}{\partial \omega} \mathcal{N}_{\text{vpt}}^{(1)}(g, \omega) = \frac{2\sqrt{\omega} + \sqrt{g}(9\omega - 2)}{\sqrt{2\pi} 16 g^{\frac{1}{4}} \omega^{\frac{5}{4}}}. \quad (2.25)$$

In diesem einfachen Fall läßt sich die Bestimmungsgleichung (2.23) für beliebiges  $g$  geschlossen lösen:

$$\omega_{\text{opt}}(g) = \frac{2(1 + 9g - \sqrt{1 + 18g})}{81g}. \quad (2.26)$$

Insbesondere gibt es für jeden Wert von  $g$  eine und nur eine Nullstelle der ersten Ableitung. Die Wahl des optimalen Wertes  $\omega_{\text{opt}}$  für den Variationsparameter ist also in diesem



**Abbildung 2.5:**  $\bullet$ links: Variationsstörungsreihe mit optimiertem Variationsparameter  $\omega_{\text{opt}}$ . Die gepunktete Linie bezeichnet die exakte Kurve für  $\mathcal{N}_{\text{exact}}(g)$ .  $\bullet$ rechts: relativer Fehler der Variationsstörungslösung erster Ordnung.

Fall eindeutig. In Abbildung 2.4(a) sind  $\mathcal{N}^{(1)}(g, \omega)$  und  $\partial_{\omega}\mathcal{N}^{(1)}(g, \omega)$  für  $g = 10$  über  $\omega$  aufgetragen. Für  $\omega = \omega_{\text{opt}}$  hat die Variationsstörungsreihe erster Ordnung ein flaches Minimum. Der gesuchten Bereich minimaler Sensitivität wird also gut durch  $\omega_{\text{opt}}$  beschrieben. In Abbildung 2.4(b) ist  $\omega_{\text{opt}}(g)$  gemäß (2.26) über  $g$  aufgetragen. Die Abhängigkeit des optimalen Variationsparameters von  $g$  nimmt mit steigendem  $g$  ab und  $\omega_{\text{opt}}$  nähert sich dem Grenzwert:

$$\lim_{g \rightarrow \infty} \omega_{\text{opt}}(g) = \frac{2}{9} \approx 0.222... \quad (2.27)$$

Die Variationsstörungslösung erster Ordnung lautet mit (2.26):

$$\mathcal{N}_{\text{vpt}}^{(1)}(g, \omega_{\text{opt}}) = \frac{(1 + 36g) - \sqrt{1 + 18g} + 3\sqrt{2 + 18g} - 2\sqrt{1 + 18g}}{18\sqrt{2\pi g^4 \sqrt{2 + 18g} - 2\sqrt{1 + 18g}}}. \quad (2.28)$$

Diese Näherungslösung ist in Abbildung 2.5(a) zusammen mit der exakten Kurve (gepunktet) dargestellt. Zum Vergleich sind desweiteren die Schwach- und Starkkopplungsentwicklungen erster Ordnung eingezeichnet. Die Variationsstörungslösung stimmt bemerkenswert gut mit der exakten Kurve überein: Abweichungen sind im gewählten Maßstab nicht erkennbar. Abbildung 2.5(b) zeigt den relativen Fehler der Näherungslösung für  $0 < g < 3$ . Für  $g \rightarrow 0$  geht der Fehler wie zu erwarten gegen 0, da die Variationsstörungslösung für kleine  $g$  in die Schwachkopplungsreihe übergeht. Man erkennt dies leicht, wenn man (2.28) um  $g = 0$  entwickelt:

$$\mathcal{N}_{\text{vpt}}^{(1)}(g, \omega_{\text{opt}}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left( 1 + \frac{3}{4}g - \frac{81}{32}g^2 + \frac{2187}{128}g^3 - \frac{312741}{2048}g^4 + \dots \right) =: \sum_{n=0}^{\infty} a_n^{(1)} g^n. \quad (2.29)$$

Die Variationsstörungsrechnung reproduziert die Schwachkopplungskoeffizienten, die als

| $n$ | $a_n$     | $a_n^{(1)}$ | $ 1 - a_n/a_n^{(1)} $ | $j$ | $b_j$     | $b_j^{(1)}$ | $ 1 - b_j/b_j^{(1)} $ |
|-----|-----------|-------------|-----------------------|-----|-----------|-------------|-----------------------|
| 0   | +0.398942 | +0.398942   | 0%                    | 0   | +0.390062 | +0.387366   | 0.696%                |
| 1   | +0.299207 | +0.299207   | 0%                    | 1   | +0.131837 | +0.136955   | 3.736%                |
| 2   | -1.084624 | -1.009823   | 7.407%                | 2   | -0.004198 | -0.008070   | 47.976%               |
| 3   | +9.004252 | +6.816303   | 32.100%               | 3   | -0.001419 | +0.000317   | $\gg 100\%$           |
| 4   | -113.2071 | -60.92071   | 85.827%               | 4   | +0.000536 | +0.000028   | $\gg 100\%$           |

(a) Schwachkopplungskoeffizienten  $a_n$ (b) Starkkopplungskoeffizienten  $b_n$ 

**Tabelle 2.1:** Vergleich der Koeffizienten der exakten Entwicklung für  $\mathcal{N}(g)$  mit den Entwicklungskoeffizienten der Variationsstörungslösung erster Ordnung sowie relativer Fehler.

Input für die Variationsstörungsreihe benutzt wurden:

$$a_0^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \equiv a_0, \quad (2.30)$$

$$a_1^{(1)} = \frac{3}{4\sqrt{2\pi}} \equiv a_1, \quad (2.31)$$

und liefert Näherungswerte für die höheren Koeffizienten:

$$a_2^{(1)} = -\frac{81}{32\sqrt{2\pi}} \approx a_2 = -\frac{87}{32\sqrt{2\pi}}, \quad (2.32)$$

$$a_3^{(1)} = +\frac{2187}{128\sqrt{2\pi}} \approx a_3 = +\frac{2889}{128\sqrt{2\pi}}. \quad (2.33)$$

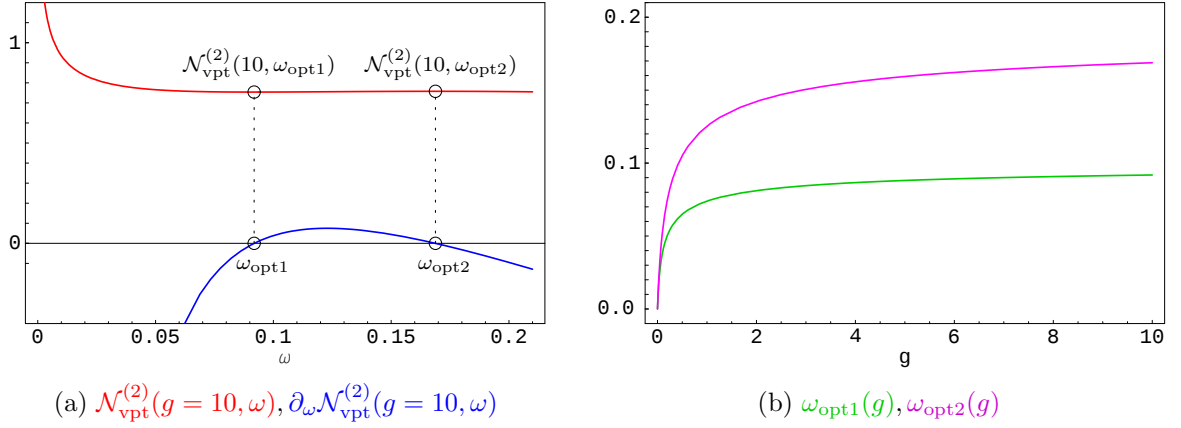
Mit wachsendem  $g$  nimmt der relative Fehler allerdings zu, bleibt jedoch stets unter 0.7%. Für  $g \rightarrow \infty$  läßt sich der maximale relative Fehler direkt angeben:

$$\lim_{g \rightarrow \infty} \left( 1 - \frac{\mathcal{N}_{\text{vpt}}^{(1)}(g, \omega_{\text{opt}})}{\mathcal{N}_{\text{exact}}(g)} \right) = \left( 1 - \frac{\sqrt[4]{2}\sqrt{\pi/3}}{\Gamma(3/4)} \right) = 0.00691... < 0.7\%. \quad (2.34)$$

Die Variationsstörungslösung approximiert also auch die Starkkopplungsentwicklung sehr gut. Entwickelt man (2.28) um  $g = \infty$  so ergibt sich eine Näherung für die Starkkopplungsreihe:

$$\mathcal{N}_{\text{vpt}}^{(1)}(g, \omega_{\text{opt}}) = g^{1/4} \frac{2^{1/4}}{\sqrt{3\pi}} \left( 1 + \frac{1}{2\sqrt{2}}g^{-1/2} - \frac{1}{48}g^{-1} + \frac{1}{864\sqrt{2}}g^{-3/2} + \dots \right) =: g^{1/4} \sum_{j=0}^{\infty} b_j^{(1)} g^{-j/2}. \quad (2.35)$$

In Tabelle 2.1 sind die Entwicklungskoeffizienten aus (2.29) und (2.35) mit denen der Reihen (2.3) und (2.5) verglichen. Dass die Variationsstörungsreihe für große  $g$  so gute Werte liefert, liegt vor allem daran, dass der führende Koeffizient  $b_0$  mit so hoher Genauigkeit approximiert wird. Die höheren Koeffizienten ab  $j \geq 2$  werden zwar nur schlecht approximiert, spielen jedoch aufgrund der guten Konvergenz der Starkkopplungsreihe keine große Rolle ( $b_4$  ist bereits 3 Größenordnungen kleiner als  $b_0$ ).



**Abbildung 2.6:** Links: Variationsstörungsreihe für  $N = 2$  und  $g = 10$  sowie die erste Ableitung mit Nullstellen  $\omega_{\text{opt1}}$  und  $\omega_{\text{opt2}}$ . Rechts: optimierte Variationsparameter  $\omega_{\text{opt1}}$ ,  $\omega_{\text{opt2}}$  in Abhängigkeit von  $g$ .

Hiermit sollen die Untersuchungen an der ersten Ordnung für diesen einfachen Fall abgeschlossen werden. Die Bestimmung eines optimalen Wertes des Variationsparameters machte vor allem deshalb keine Probleme, weil sich eine eindeutige Nullstelle der ersten Ableitung für beliebige Werte von  $g$  bestimmen ließ. Damit war der Bereich geringster Sensitivität gegenüber dem Variationsparameter schnell gefunden. Die Betrachtung höherer Ableitungen war daher nicht notwendig und liefert in diesem Fall auch deutlich schlechtere Ergebnisse.

## 2.5 Variationsrechnung zweiter Ordnung

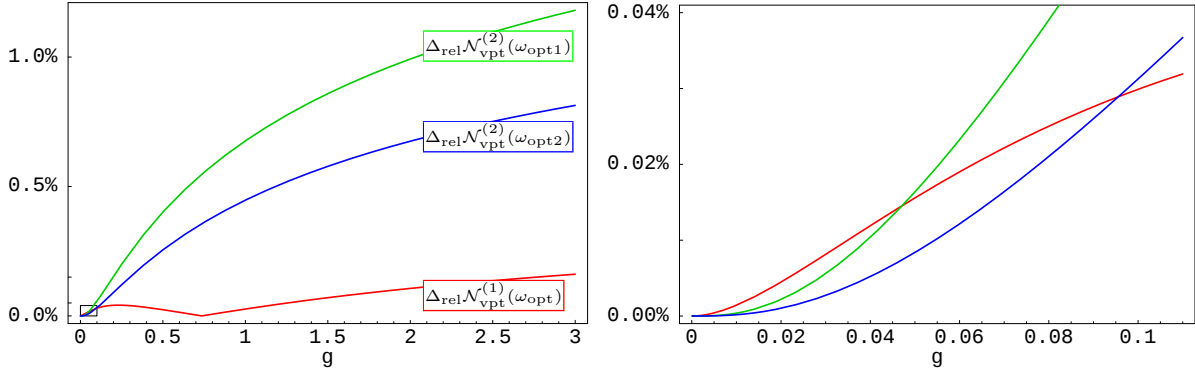
In diesem Abschnitt soll die zweite Ordnung der Variationsstörungsreihe untersucht werden. Es werden dabei die gleichen Schritte wie im vorangegangenen Abschnitt bei der Betrachtung der ersten Ordnung durchgeführt. Die Variationsstörungsentwicklung (2.16) und ihre erste Ableitung lauten für  $N = 2$ :

$$\mathcal{N}_{\text{vpt}}^{(2)}(g, \omega) = \frac{12 \sqrt{g\omega} (2 - 3\omega) - 4\omega + g (12 + 60\omega - 87\omega^2)}{\sqrt{2\pi} 32 g^{\frac{3}{4}} \omega^{\frac{1}{4}}}, \quad (2.36)$$

$$\frac{\partial}{\partial \omega} \mathcal{N}_{\text{vpt}}^{(2)}(g, \omega) = \frac{-3 (4\omega + 4 \sqrt{g\omega} (15\omega - 2) + g (4 - 60\omega + 203\omega^2))}{\sqrt{2\pi} 128 g^{\frac{3}{4}} \omega^{\frac{5}{4}}}. \quad (2.37)$$

Als optimale Werte für den Variationsparameter werden wieder die Nullstellen der ersten Ableitung herangezogen:

$$\left. \frac{\partial}{\partial \omega} \mathcal{N}_{\text{vpt}}^{(2)}(g, \omega) \right|_{\omega=\omega_{\text{opt}}} \stackrel{!}{=} 0. \quad (2.38)$$



**Abbildung 2.7:** Relativer Fehler der Variationsstörungsreihe erster und zweiter Ordnung. Der rechte Plot ist eine Vergrößerung des kleinen Rechtecks unten links im linken Plot.

Im Unterschied zur ersten Ordnung im vorangegangenen Abschnitt treten jetzt für beliebiges  $g$  stets zwei Nullstellen der Ableitung auf:

$$\omega_{\text{opt1}}(g) = \frac{-2(-247+30\sqrt{22}+203(-15+\sqrt{22})g+\sqrt{80809-14820\sqrt{22}-406(-4365+697\sqrt{22})g})}{41209g}, \quad (2.39)$$

$$\omega_{\text{opt2}}(g) = \frac{494+60\sqrt{22}+406(15+\sqrt{22})g-2\sqrt{80809+14820\sqrt{22}+406(4365+697\sqrt{22})g}}{41209g}. \quad (2.40)$$

Abbildung 2.6(a) verdeutlicht dies für  $g = 10$ . In Abbildung 2.6(b) sind  $\omega_{\text{opt1}}(g)$  und  $\omega_{\text{opt2}}(g)$  über  $g$  aufgetragen. Es gibt nun a priori keinen Grund, die eine Nullstelle der anderen vorzuziehen. Da in diesem Fall die exakte Lösung vorliegt, lässt sich leicht überprüfen, welche Nullstelle die besseren Ergebnisse liefert. In Abbildung 2.7 ist der relative Fehler der Variationsstörungslösung zweiter Ordnung für beide Fälle über  $g$  aufgetragen. Die genaueren Werte ergeben sich offenbar bei Verwendung der betragsmäßig größeren Nullstelle  $\omega_{\text{opt2}}$ . Zum Vergleich ist der relative Fehler der ersten Ordnung Variationsstörungstheorie aus dem letzten Abschnitt eingezeichnet. Diese liefert in diesem Fall bessere Werte, wenn man einmal von dem Bereich sehr kleiner  $g$  absieht, der im rechten Plot vergrößert dargestellt ist. Das gegenüber der ersten Ordnung verbesserte Schwachkopplungs-Verhalten

| $n$ | $a_n$     | $a_{n,\omega_{\text{opt1}}}^{(2)}$ | $ 1 - a_n/a_{n,\omega_{\text{opt1}}}^{(2)} $ | $a_{n,\omega_{\text{opt2}}}^{(2)}$ | $ 1 - a_n/a_{n,\omega_{\text{opt2}}}^{(2)} $ |
|-----|-----------|------------------------------------|----------------------------------------------|------------------------------------|----------------------------------------------|
| 0   | +0.398942 | +0.398942                          | 0%                                           | +0.398942                          | 0%                                           |
| 1   | +0.299207 | +0.299207                          | 0%                                           | +0.299207                          | 0%                                           |
| 2   | -1.084624 | -1.009823                          | 0%                                           | -1.084624                          | 0%                                           |
| 3   | +9.004252 | +6.790190                          | 32.607%                                      | +8.076643                          | 11.485%                                      |
| 4   | -113.2071 | -17.95512                          | $\gg 100\%$                                  | -80.66973                          | 40.334%                                      |
| 5   | +1883.118 | -1404.396                          | $\gg 100\%$                                  | +947.2808                          | 98.792%                                      |

**Tabelle 2.2:** Vergleich der Schwachkopplungskoeffizienten der exakten Entwicklung für  $\mathcal{N}(g)$  mit den Entwicklungskoeffizienten der Variationsstörungslösung zweiter Ordnung sowie relativer Fehler.

| $n$ | $b_j$     | $b_{n,\omega_{\text{opt}1}}^{(2)}$ | $ 1 - b_n/b_{n,\omega_{\text{opt}1}}^{(2)} $ | $b_{n,\omega_{\text{opt}2}}^{(2)}$ | $ 1 - b_n/b_{n,\omega_{\text{opt}2}}^{(2)} $ |
|-----|-----------|------------------------------------|----------------------------------------------|------------------------------------|----------------------------------------------|
| 0   | +0.390062 | +0.379763                          | 2.711%                                       | +0.382568                          | 1.959%                                       |
| 1   | +0.131837 | +0.143178                          | 7.921%                                       | +0.140789                          | 6.359%                                       |
| 2   | -0.004198 | -0.010575                          | 60.300%                                      | -0.009603                          | 56.280%                                      |
| 3   | -0.001419 | +0.000928                          | $\gg 100\%$                                  | +0.000692                          | $\gg 100\%$                                  |
| 4   | +0.000536 | -0.000061                          | $\gg 100\%$                                  | -0.000027                          | $\gg 100\%$                                  |
| 5   | -0.000093 | +0.000002                          | $\gg 100\%$                                  | -0.000000                          | $\gg 100\%$                                  |

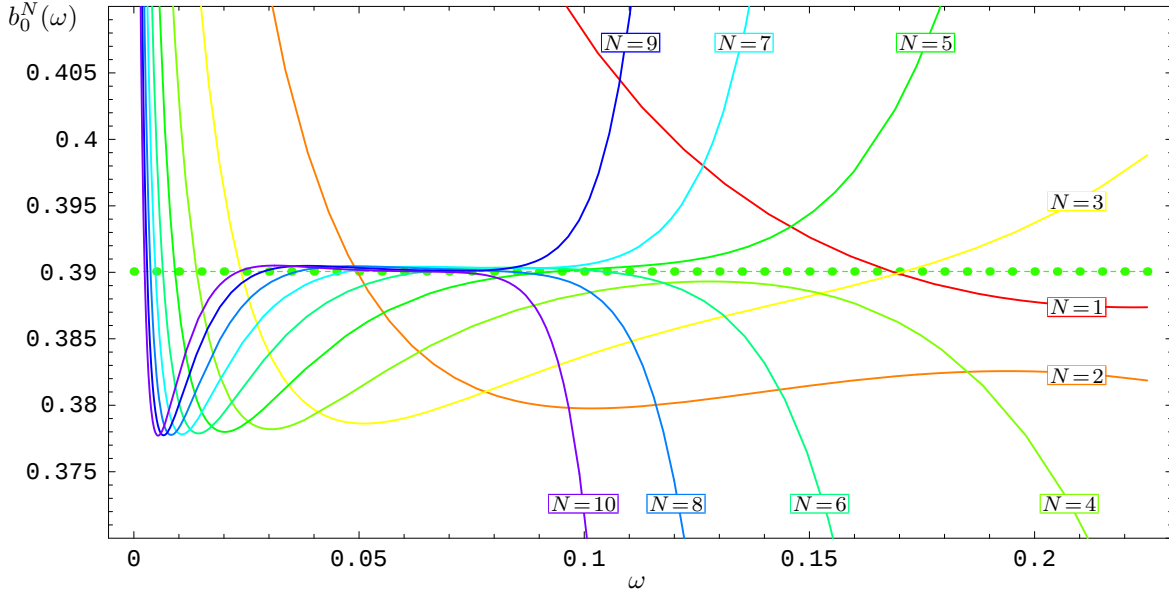
**Tabelle 2.3:** Vergleich der Starkkopplungskoeffizienten der exakten Entwicklung für  $\mathcal{N}(g)$  mit den Entwicklungskoeffizienten der Variationsstörungslösung zweiter Ordnung sowie relativer Fehler.

war zu erwarten, da die Variationsstörungsreihe zweiter Ordnung die ersten *drei* (statt zwei) Schwachkopplungskoeffizienten reproduziert, die als Input verwendet wurden. Mit der zweiten Nullstelle sind auch die Näherungswerte  $a_3^{(2)}$  und  $a_4^{(2)}$  für die Koeffizienten  $a_3$  und  $a_4$  etwas besser als in der ersten Ordnung. Allerdings führt dies nicht notwendigerweise zu besseren Resultaten: Da die Schwachkopplungsreihe divergent ist, bedeutet eine genauere Approximation der ersten Koeffizienten nicht, dass sich das Endergebnis verbessert.

Für große  $g$  dominiert das  $g^{1/4}b_0$ -Verhalten der Reihe. Da der Koeffizient  $b_0^{(2)}$  ungenauer ausfällt als  $b_0^{(1)}$  in der ersten Ordnung, ist auch die Abweichung vom exakten Ergebnis für große  $g$  stärker. Der maximale Fehler bleibt bei Verwendung der betragsmäßig kleineren Nullstelle  $\omega_{\text{opt}1}$  stets unter 2.65%, für  $\omega_{\text{opt}2}$  ist er kleiner als 1.93%. Die Betrachtung der zweiten Ableitung ergibt eine eindeutige Nullstelle, die zu Werten zwischen diesen beiden Fällen führt. Der Maximalfehler ist in dem Fall kleiner als 2.34%. In den Tabellen 2.2 und 2.3 sind die einzelnen Koeffizienten für  $n \leq 5$  aufgelistet.

## 2.6 Variationsrechnung für die Starkkopplungskoeffizienten

In den vorangegangenen zwei Abschnitten war die Bestimmung eines optimalen Wertes für den Variationsparameter  $\omega$  besonders einfach, weil sich die Nullstellen in Abhängigkeit von  $g$  geschlossen angeben ließen. Bei der zweiten Ordnung trat jedoch das prinzipielle Problem mehrerer — zunächst gleichberechtigter — Nullstellen der ersten Ableitung auf. In diesem Abschnitt sollen jetzt die Starkkopplungskoeffizienten mit Hilfe der Variationsstörungsreihe direkt aus den Schwachkopplungskoeffizienten  $a_n$  bestimmt werden. Dabei sollen gleichermaßen hohe Ordnungen und hohe Ableitungen untersucht werden. Zwar kennt man in komplizierteren Fällen selten derart viele Störungskoeffizienten, um



**Abbildung 2.8:** Variationsstörungsreihe für den Starkkopplungskoeffizienten  $b_0^N(\omega)$  für  $N = 1, \dots, 10$ . Die gepunktete grüne Linie bezeichnet den exakten Wert  $b_0 = \Gamma(3/4) \approx 0.390062$ .

zu solch hohen Ordnungen gehen zu können, jedoch können sich aus dieser Untersuchung bestimmte Gesetzmäßigkeiten ableiten lassen, die sich auch auf die Bestimmung des optimalen Variationsparameters in komplizierteren Fällen übertragen lassen.

Aus der Variationsstörungsreihe  $N$ -ter Ordnung (2.16) ergibt sich der vom Variationsparameter  $\omega$  abhängige Starkkopplungskoeffizient  $b_j^N(\omega)$  zu:

$$b_j^N(\omega) = \omega^{j/2-1/4} \sum_{n=0}^N a_n \omega^n (-1)^{j+N+n} \frac{4n-1}{4n+2j-1} \binom{-1/2-2n}{N-n} \binom{N-n}{j}. \quad (2.41)$$

Als erstes soll der führende Koeffizient der Starkkopplungsentwicklung betrachtet werden, für den sich mit (2.41) ergibt:

$$b_0^N(\omega) = \omega^{-1/4} \sum_{n=0}^N a_n \omega^n (-1)^{N+n} \binom{-1/2-2n}{N-n}. \quad (2.42)$$

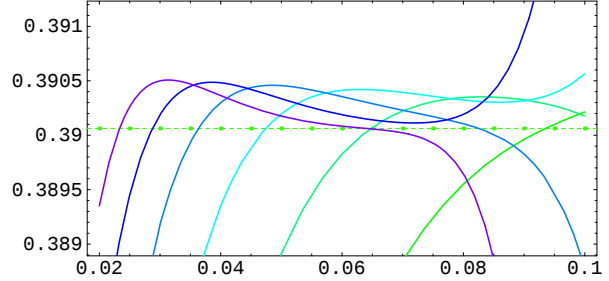
Der exakte Wert, mit dem die Ergebnisse der Variationsstörungsrechnung verglichen werden sollen, lautet:

$$b_0 = \Gamma(3/4)/\pi \approx 0.390062251089406773850463399075459284... \quad (2.43)$$

In Abbildung 2.8 ist  $b_0^N(\omega)$  für  $N = 1, \dots, 10$  über  $\omega$  aufgetragen. Für kleine  $\omega$  dominiert grundsätzlich der  $\omega^{-1/4}$ -Term, so dass die Reihe für alle  $N$  bei  $\omega = 0$  gegen  $+\infty$  strebt. Für große  $\omega$  kommt dagegen das divergente Verhalten der Schwachkopplungskoeffizienten  $a_n$  zum Tragen und  $b_0^N(\omega)$  strebt für gerade  $N$  gegen  $-\infty$ , für ungerade  $N$  gegen  $+\infty$ .

Dazwischen liegt ein Bereich von  $\omega$ -Werten, für die die Variationsstörungsreihe ein vergleichsweise stationäres Verhalten zeigt. Für die höheren Ordnungen ist in Abbildung 2.8 ein regelrechtes Plateau im Bereich  $0.03 < \omega < 0.09$  zu erkennen.

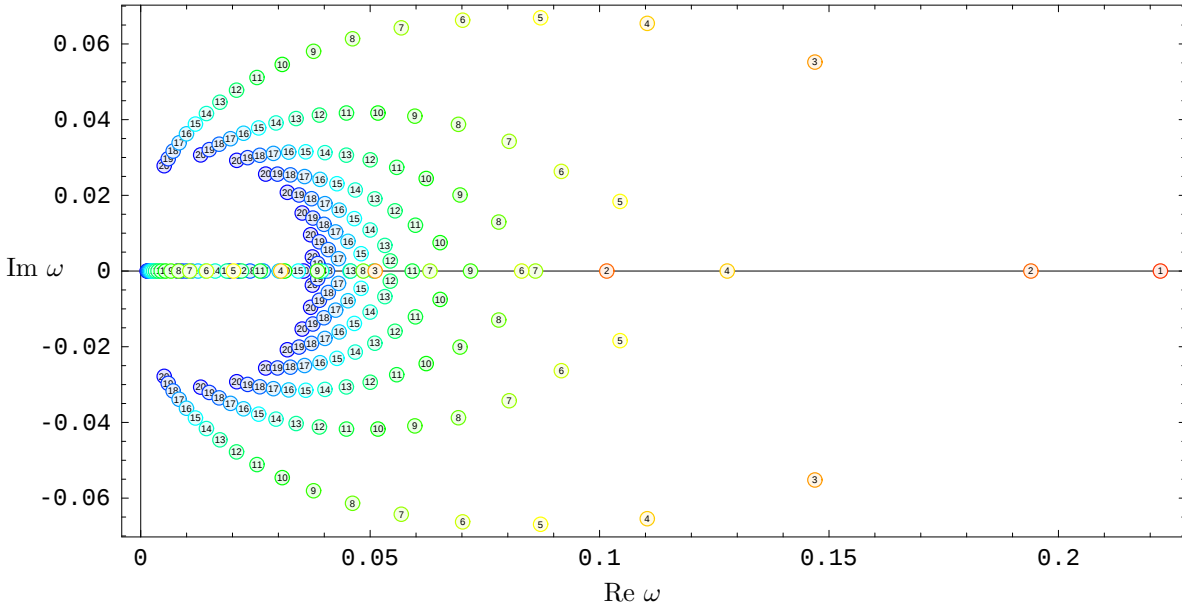
Betrachtet man diesen Bereich genauer, wie in nebenstehender Vergrößerung von Abbildung 2.8, so zeigt sich, dass das Plateau noch recht „hügelig“ ist. Die gepunktete grüne Linie bezeichnet das exakte Ergebnis. Um die  $\omega$ -Werte, für die  $b_0^N(\omega)$  stationär wird, zu bestimmen, sei wieder die  $k$ -te Ableitung der Variationsstörungsreihe betrachtet:



$$\frac{\partial^k}{\partial \omega^k} b_0^N(\omega) = \omega^{-1/4-k} \sum_{n=0}^N a_n \frac{\Gamma(n - \frac{1}{4})}{\Gamma(n - \frac{1}{4} - k)} \omega^n (-1)^{N+n} \binom{-2n - 1/2}{N - n}. \quad (2.44)$$

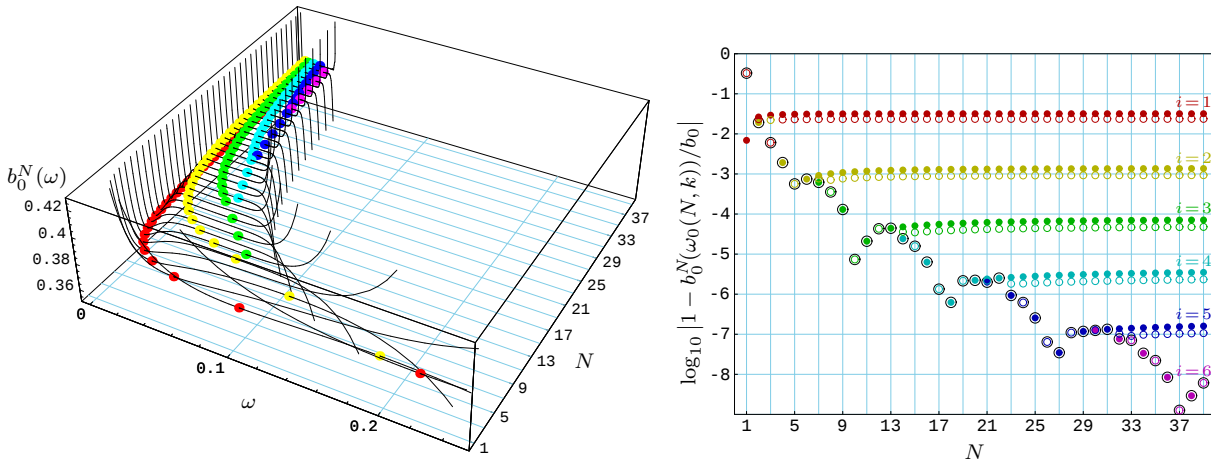
Aufgrund des  $\omega^{-1/4}$ -Faktors nimmt der Grad der Reihe beim Ableiten nicht ab. Die Reihe selbst, wie auch die  $k$ -te Ableitung, besitzt  $N$  zum Teil komplexe Nullstellen. In Abbildung 2.9 sind die Nullstellen der ersten Ableitung von  $b_0^N(\omega)$  für  $N = 1, \dots, 20$  in der komplexen  $\omega$ -Ebene dargestellt. Für die Bestimmung des optimalen Wertes des Variationsparameters kommen nur die reellen Nullstellen in Betracht. Wie viele reelle Nullstellen es in  $N$ -ter Ordnung gibt, läßt sich nicht allgemein bestimmen. In Abbildung 2.10 links sind die reellen Nullstellen der ersten Ableitung nach Größe sortiert dargestellt: die betragsmäßig kleinste Nullstelle ist jeweils rot eingezeichnet, die nächstgrößere gelb, usw. Im Plot rechts daneben ist der relative Fehler bei Verwendung dieser Nullstellen als Variationsparameter aufgetragen. Zusätzlich wurden die Ergebnisse für die Nullstellen der zweiten Ableitung als farbige Kreise eingezeichnet. Man erkennt gut, daß die Anzahl der reellen Nullstellen mit steigender Ordnung zunimmt. Ein sehr gutes Ergebnis für eine gegebene Ordnung  $N$  liefert dabei die betragsmäßig größte Nullstelle. Da die Reihe für ungerade  $N$  gegen  $+\infty$  und für gerade  $N$  gegen  $-\infty$  strebt, wechseln sich hierbei die erste und zweite Ableitung meistens ab: Der letzte stationäre Punkt, bevor die Reihe gegen  $\pm\infty$  strebt, springt dann zwischen Extremum ( $N$  ungerade) und Wendepunkt ( $N$  gerade) hin und her. Dies ist in Abbildung 2.11 links für  $N = 8$  und  $N = 9$  verdeutlicht.

Zur Bestimmung eines optimalen Wertes des Variationsparameters läßt sich daher folgende Strategie angeben: man betrachte die ersten beiden Ableitungen und wähle diejenige Nullstelle als Wert für den Variationsparameter, die betragsmäßig am größten ist. In Abbildung 2.10 rechts sind die nach diesem Verfahren ausgewählten Werte durch schwarze Kreise markiert. Bis auf einen Fall ( $N = 1$ ) liefert diese Regel immer die bestmögliche Nullstelle. Der Ausreißer bei  $N = 1$  wäre jedoch auch ohne Kenntnis des exakten Ergebnisses sofort als solcher zu erkennen, da die Nullstelle der zweiten Ableitung in einem Bereich

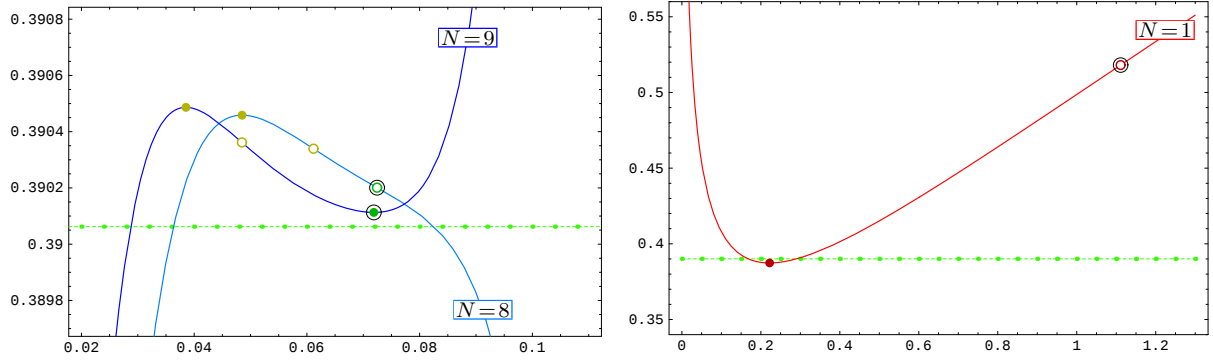


**Abbildung 2.9:** Nullstellen von  $\frac{\partial}{\partial \omega} b_0^N(\omega)$  in der komplexen  $\omega$ -Ebene für  $N = 1, \dots, 20$ . Die Zahlen in den Kreisen bezeichnen die Ordnung  $N$ .

liegt ( $\omega = 10/9$ ), in dem die Variationsstörungsreihe steil ansteigt. Dies ist in Abbildung 2.11 rechts dargestellt. Auch ohne Kenntnis der exakten Lösung wäre hier eindeutig das Minimum bei  $\omega = 2/9$  als stationärer Bereich zu wählen. Für kleine Werte von  $N$  ist also mit Abweichungen von der Regel zu rechnen. Grundsätzlich erscheint es sinnvoll, die Wahl des optimalen Variationsparameters anhand eines Plots der Variationsstörungsreihe für die betreffende Ordnung auf Plausibilität zu überprüfen.

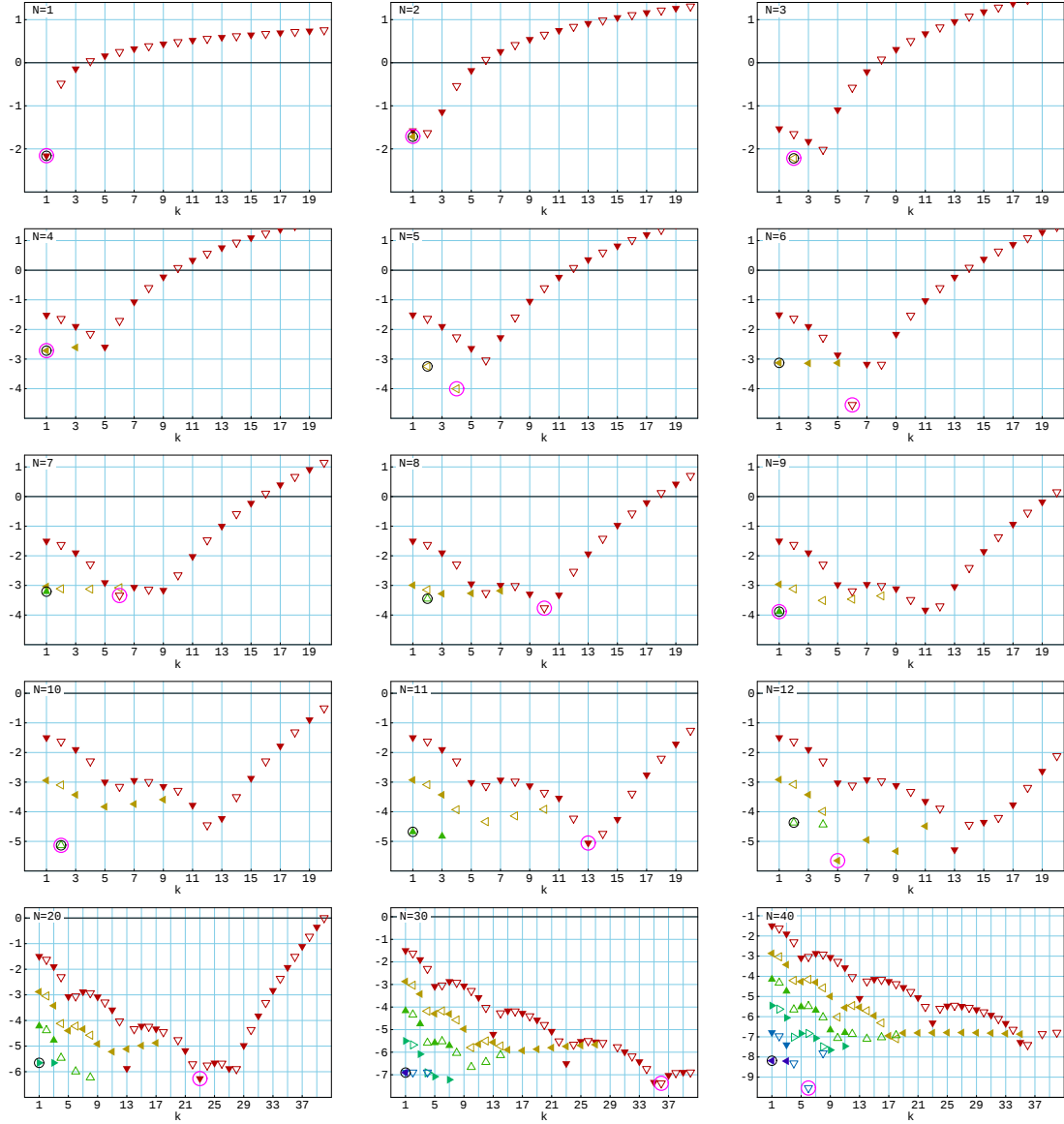


**Abbildung 2.10:** **links:**  $b_0^N(\omega)$  und die reellen Nullstellen der ersten Ableitung nach  $\omega$ . **rechts:** Relativer Fehler bei Verwendung der Nullstellen der ersten ( $\bullet$ ) bzw. der zweiten ( $\circ$ ) Ableitung. Die Farben im linken Plot korrespondieren mit denen im rechten Plot. Die schwarzen Kreise markieren die Nullstellen, die durch die im Text beschriebene Strategie ausgewählt wurden.

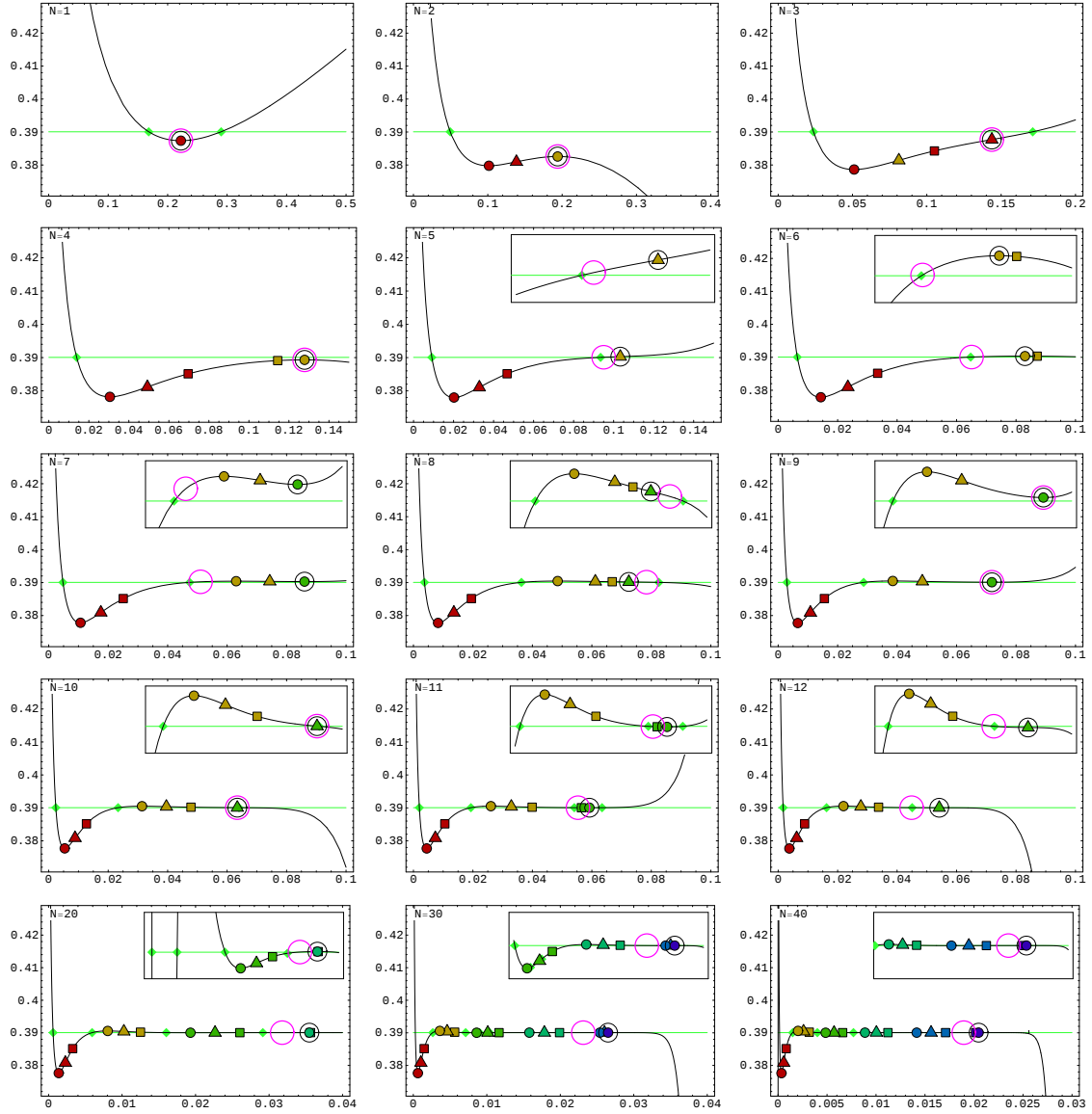


**Abbildung 2.11:** **links:** Wechsel von Wendepunkt/Extremum für gerade/ungerade  $N$ . **rechts:** Das Ergebnis für den optimalen Variationsparameter nach „Kochrezept“ liegt im Fall  $N = 1$  offensichtlich zu weit außerhalb.

Man kann nun weiter fragen, ob sich mit höheren als der ersten und zweiten Ableitung noch bessere Ergebnisse erzielen lassen. In Abbildung 2.12 ist der relative Fehler von  $b_0^N(\omega_0)$  für alle positiven reellen Nullstellen  $\omega_0$  der ersten 20 Ableitungen dargestellt. Die ausgefüllten Dreiecke gehören zu ungeraden Ableitungen. Die Farben entsprechen wie zuvor einer Sortierung nach Größe: rot bezeichnet die betragsmäßig kleinste Nullstelle, gelb die nächstgrößere, usw. Der schwarze, kleinere Kreis markiert diejenige Nullstelle, die mit der zuvor beschriebenen Strategie ausgewählt wurde, während der größere, magentafarbene Kreis den bestmöglichen Wert bei Berücksichtigung aller Nullstellen bis hin zur 20ten Ableitung bezeichnet. Für  $N = 1, \dots, 4$  fallen beide Ergebnisse zusammen. Für  $N \geq 5$  liefert meistens irgendeine höhere Ableitung noch ein besseres Ergebnis, allerdings scheint es kein klares Muster zu geben. Zwar liegt häufig ein guter Wert in der Nähe von  $k = N$  [HP01], jedoch lässt sich dieses „in der Nähe von“ hier nicht genauer präzisieren, so daß sich daraus keine neue Strategie zur Auswahl des Variationsparameters ergibt. Es ist des weiteren zu erkennen, dass die Ergebnisse, die sich mit Hilfe der ersten zwei Ableitungen ergeben, schon sehr gut sind: die zwei Kreise liegen in den Plots meist auf gleicher Höhe. In Abbildung 2.13 sind noch einmal die bisherigen Ergebnisse für  $N = 1, \dots, 12, 20, 30, 40$  aus einem anderen Blickwinkel dargestellt. Die hellgrüne Linie bezeichnet den exakten Wert  $b_0$ , die grünen Rauten entsprechend die Werte von  $\omega$ , für die die Variationsstörungsreihe dieses Ergebnis liefern würde. Die Kreise, Dreiecke und Quadrate bezeichnen die Werte, die sich für die Nullstellen der ersten, zweiten und dritten Ableitung ergeben. Der schwarze Kreis markiert den Wert, der durch die im Text beschriebene Strategie ausgewählt wurde, der magentafarbene Kreis bezeichnet dagegen das beste Ergebnis, welches sich bei Betrachtung aller Nullstellen der ersten 40 Ableitungen ergäbe. Auch hier ist zu erkennen, dass die im Text beschriebene Strategie, die größte Nullstelle der ersten beiden Ableitung als optimalen Wert für den Variationsparameter zu nehmen, sehr gut funktioniert.



**Abbildung 2.12:** Relativer Fehler  $\log_{10} |1 - b_0^N(\omega_0(N, k))/b_0|$  bei Verwendung der positiven reellen Nullstellen der  $k$ -ten Ableitung als Wert für den Variationsparameter in  $N$ -ter Ordnung. Hat eine Ableitung mehrere Nullstellen, so sind diese durch verschiedenfarbige Dreiecke dargestellt.



**Abbildung 2.13:** Ergebnisse der Variationsstörungsreihe für  $b_0^N(\omega)$ , Nullstellen der ersten (○), zweiten (△) und dritten (□) Ableitung sind markiert.



# Kapitel 3

## Variationsstörungsrechnung für die Wahrscheinlichkeitsverteilung

In diesem Kapitel soll es nun um die vollständige orts- und zeitabhängige Lösung der Fokker-Planck-Gleichung mit anharmonischem Driftkoeffizienten gehen. Die Vorgehensweise ist dabei ähnlich der im vorhergehenden Kapitel, in dem die Variationsstörungstheorie an einem besonders einfachen Grenzfall getestet wurde.

Zunächst wird eine Schwachkopplungsreihe für die Wahrscheinlichkeitsverteilung hergeleitet. Die Schwachkopplungskoeffizienten, die im Unterschied zum vorhergehenden Kapitel nun orts- und zeitabhängig sind, werden dabei mit Hilfe eines Rekursionsverfahrens berechnet. Die Schwachkopplungsentwicklung für die Wahrscheinlichkeitsverteilung führt aus den in Abschnitt 1.4 dargelegten Gründen auf eine divergente Reihe.

Auf diese Reihe soll nun die Methode der Variationsstörungstheorie angewandt werden. Daher wird als nächster Schritt eine Variationsstörungsreihe für die Lösung der Fokker-Planck-Gleichung mit anharmonischer Drift bestimmt. Im Anschluß daran wird auf die Normierung der Variationstörungsreihe eingegangen. Diese Problematik kommt gegenüber dem vorhergehenden Kapitel neu hinzu und entstammt der Tatsache, dass hier eine ganze Verteilungsfunktion optimiert wird.

Als Maß für die Güte der Variationsstörungslösung soll eine numerische Lösung dienen, die durch direkte Integration der Fokker-Planck-Gleichung gewonnen wird. In einem kurzen Abschnitt werden hierzu einige grundlegende Punkte erläutert, bevor die Variationsstörungsreihe für ausgewählte Parameterwerte optimiert wird.

### 3.1 Schwachkopplungsreihe

In diesem Abschnitt wird eine Lösung der Fokker-Planck-Gleichung mit anharmonischer Drift in Form einer Schwachkopplungsreihe in  $g$  bestimmt. Der anharmonische Driftkoeffi-

zient geht für  $g = 0$  in den harmonischen Fall über, der für geeignete Anfangsbedingungen geschlossen lösbar ist. Die Störungsreihe wird also auf der harmonischen Lösung aus Abschnitt 1.3 aufbauen. Die wesentlichen Schritte bei der Bestimmung der Störungsreihe seien hier zur besseren Orientierung vorweggenommen:

- Die Wahrscheinlichkeitsverteilung wird in die bekannte harmonische Lösung und einen näher zu bestimmenden anharmonischen Anteil faktorisiert, der die Störung beschreibt.
- Für den noch unbekannten anharmonischen Faktor wird eine Störungsreihe in  $g$  mit orts- und zeitabhängigen Koeffizientenfunktionen  $\phi_n(x, t)$  gewählt.
- Die Koeffizientenfunktionen werden als Potenzreihen in  $x$  mit zeitabhängigen Koeffizienten  $\alpha_{n,k}(t)$  angesetzt.
- Durch Einsetzen dieses Ansatzes in die Fokker-Planck-Gleichung und Koeffizientenvergleich ergeben sich Bedingungen an die Koeffizienten  $\alpha_{n,k}(t)$  in Form von gekoppelten linearen Differentialgleichungen.
- Das System gekoppelter Differentialgleichungen läßt sich auf endliche Rekursionsrelationen für die Koeffizienten  $\alpha_{n,k}(t)$  reduzieren [BW69], [BW73]. Die Differentialgleichungen lassen sich unter Berücksichtigung der Randbedingungen integrieren.

Diese Schritte werden im nun folgenden Abschnitt detailliert ausgeführt.

### 3.1.1 Transformation der Zeitskala

Bevor mit der Berechnung der Schwachkopplungskoeffizienten begonnen wird, soll noch eine Variablentransformation in der Zeitskala durchgeführt werden, um die kommenden Berechnungen zu vereinfachen. Es sei:

$$\tau(t) := \tau_0 e^{-\gamma t} \quad \text{mit} \quad \tau_0 = \sqrt{1 - \gamma\sigma^2/D}. \quad (3.1)$$

Während die physikalische Zeit  $t$  von 0 bis  $\infty$  verläuft, läuft die neue Zeitskala  $\tau$  von  $\tau_0$  bis 0. Mit den Ersetzungen

$$t \rightarrow -\frac{1}{\gamma} \log \left( \frac{\tau}{\tau_0} \right), \quad \frac{\partial}{\partial t} \rightarrow -\gamma\tau \frac{\partial}{\partial \tau} \quad (3.2)$$

lautet die transformierte Fokker-Planck-Gleichung:

$$-\gamma\tau \frac{\partial}{\partial \tau} \mathcal{P}(x, \tau) = \frac{\partial}{\partial x} [K(x) \mathcal{P}(x, \tau)] + D \frac{\partial^2}{\partial x^2} \mathcal{P}(x, \tau). \quad (3.3)$$

Für die Lösung (1.37) bei harmonischem Driftterm erhält man mit (3.1)

$$P_0(x, t) = \mathcal{P}_0(x, \tau) = \sqrt{\frac{\gamma}{2\pi D(1 - \tau^2)}} \exp\left[-\frac{\gamma}{2D} \frac{(x - x_0\tau)^2}{1 - \tau^2}\right], \quad (3.4)$$

wobei noch die Abkürzung:

$$x_0 := \frac{\mu}{\tau_0} = \frac{\mu}{\sqrt{1 - \gamma\sigma^2/D}} \quad (3.5)$$

verwendet wurde. Die Lösung (3.4) erfüllt die Anfangsbedingung:

$$P_0(x, 0) = \mathcal{P}_0(x, \tau_0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left[-\frac{(x - \mu)^2}{2\sigma^2}\right] = P_N(x; \mu, \sigma^2). \quad (3.6)$$

Den Grenzfall der Anfangsbedingung  $P(x, 0) = \delta(x - \mu)$  erhält man mit  $\sigma^2 \rightarrow 0$  und entsprechend  $\tau_0 \rightarrow 1$ .

### 3.1.2 Fläche und kumulative Störungsreihe

Ziel dieses Abschnittes ist es, eine störungstheoretische Lösung  $\mathcal{P}(x, \tau)$  für folgende Problemstellung zu bestimmen:

$$\begin{aligned} -\gamma\tau \frac{\partial}{\partial \tau} \mathcal{P}(x, \tau) &= \frac{\partial}{\partial x} [(\gamma x + g x^3) \mathcal{P}(x, \tau)] + D \frac{\partial^2}{\partial x^2} \mathcal{P}(x, \tau), \\ \mathcal{P}(x, \tau_0) &= P_N(x; \mu, \sigma^2). \end{aligned} \quad (3.7)$$

Die Lösung  $\mathcal{P}_0(x, \tau)$  des ungestörten Problems ist durch (3.4) gegeben. Darauf aufbauend wird nun für  $g > 0$  der folgende Produktansatz gewählt:

$$\mathcal{P}(x, \tau) = \mathcal{P}_0(x, \tau) q(x, \tau). \quad (3.8)$$

Die gesamte  $g$ -Abhängigkeit ist im Korrekturfaktor  $q(x, \tau)$  enthalten. Dieser wird als Potenzreihe in  $g$  mit Koeffizientenfunktionen  $\phi(x, \tau)$  angesetzt:

$$q(x, \tau) = \sum_{n=0}^{\infty} g^n \phi_n(x, \tau). \quad (3.9)$$

Diese Darstellung der Störungsreihe wird im folgenden als *flache Störungsreihe* bezeichnet. Eine weitere Form, die eine wichtige Rolle spielen wird, ist die *kumulative Störungsreihe* oder *Kumulantenentwicklung*<sup>1</sup>:

$$\mathcal{P}(x, \tau) = \mathcal{P}_0(x, \tau) e^{p(x, \tau)}. \quad (3.10)$$

---

<sup>1</sup>In der Feldtheorie spielt die Kumulantenentwicklung eine Rolle als erzeugendes Funktional, welches nur amputierte Feynman-Diagramme erzeugt. Auf das vorliegende Problem übertragen, begründet dies die Hoffnung, dass die Kumulantenentwicklung von einfacherer Struktur ist als die flache Störungsreihe.

Der Exponent  $p(x, \tau)$  wird als *Kumulante* bezeichnet. Auch in diesem Fall wird wieder ein Potenzreihenansatz in  $g$  verwendet:

$$p(x, \tau) = \sum_{n=0}^{\infty} g^n \chi_n(x, \tau). \quad (3.11)$$

Die Koeffizientenfunktionen  $\chi_n(x, \tau)$  stimmen in erster Ordnung mit den  $\phi_n(x, \tau)$  überein. Durch die Exponentialfunktion generiert die Kumulantenentwicklung jedoch auch Terme beliebig hoher Ordnung in  $g$ . Eine Folge davon ist, dass die kumulative Störungsreihe schon in erster Ordnung die stationäre Lösung (1.46) — bis auf die Normierung — richtig wiedergeben kann.

Ein weiterer Vorteil der Kumulantenentwicklung ist die Tatsache, dass sie in jeder Ordnung und für jeden Wert von  $x$  nur positive Werte annimmt, wie es für eine Wahrscheinlichkeitsverteilung der Fall sein sollte. Die flache Störungsreihe kann dies nicht leisten: bricht man die Entwicklung (3.9) bei endlicher Ordnung  $N$  ab, so wird  $q(x, \tau)$  und damit  $\mathcal{P}(x, \tau)$  im allgemeinen auch negative Werte annehmen.

Trotz dieser Vorteile der Kumulante soll die Berechnung der Entwicklungskoeffizienten aus didaktischen Gründen anhand der flachen Störungsreihe diskutiert werden, da die Kopplung der Koeffizienten untereinander für diesen Fall leichter nachzuvollziehen ist. Änderungen am Verfahren, die bei Verwendung der Kumulantenentwicklung notwendig sind, werden dann am Ende des Abschnitts kurz erläutert. Grundsätzlich können die Koeffizienten durch Umentwickeln ineinander umgerechnet werden:

$$\chi_n(x, \tau) = \frac{1}{n!} \frac{\partial^n}{\partial g^n} \left[ \log \sum_{k=0}^n g^k \phi_k(x, \tau) \right] \Big|_{g=0}. \quad (3.12)$$

### 3.1.3 Bestimmung der Schwachkopplungskoeffizienten

Die niedrigste Koeffizientenfunktion  $\phi_0(x, \tau)$  läßt sich sofort festlegen: Für  $g = 0$  muß  $\mathcal{P}(x, \tau) = \mathcal{P}_0(x, \tau)$  gelten, da das Problem dann in den harmonischen Fall übergeht.  $\phi_0(x, \tau)$  ist also notwendigerweise durch  $\phi_0(x, \tau) = 1$  festgelegt. Bestimmungsgleichungen für die höheren Terme erhält man durch Einsetzen des Ansatz (3.8) in die Fokker-Planck-Gleichung (3.7):

$$\begin{aligned} \gamma \tau \dot{q}(x, \tau) + \left( 3gx^2 - \frac{\gamma g \tau x_0}{D(\tau^2 - 1)} x^3 + \frac{\gamma g}{D(\tau^2 - 1)} x^4 \right) q(x, \tau) \\ + \left( -\frac{2\gamma \tau x_0}{\tau^2 - 1} + \gamma \frac{\tau^2 + 1}{\tau^2 - 1} x + gx^3 \right) q'(x, \tau) + Dq''(x, \tau) = 0. \end{aligned} \quad (3.13)$$

Zu besserer Übersicht seien folgende Abkürzungen eingeführt:

$$c_1 = \gamma\tau, \quad c_2 = 3, \quad c_3 = -\frac{\gamma\tau x_0}{D(\tau^2 - 1)}, \quad c_4 = \frac{\gamma}{D(\tau^2 - 1)}, \quad (3.14)$$

$$c_5 = -\frac{2\gamma\tau x_0}{\tau^2 - 1}, \quad c_6 = \gamma\frac{\tau^2 + 2}{\tau^2 - 1}, \quad c_7 = 1, \quad c_8 = D. \quad (3.15)$$

Die Struktur dieser Koeffizienten spielt zunächst keine Rolle. Setzt man nun für  $q(x, \tau)$  die Potenzreihe (3.9) ein, sortiert nach Ordnungen von  $g$  und führt einen Koeffizientenvergleich durch, so erhält man für den Koeffizienten von  $g^n$  die Bedingung:

$$c_1\dot{\phi}_n + c_2\phi_{n-1}x^2 + c_3\phi_{n-1}x^3 + c_4\phi_{n-1}x^4 + c_5\phi'_n + c_6\phi'_n x + c_7\phi'_{n-1}x^3 + c_8\phi''_n = 0. \quad (3.16)$$

Es stellt sich nun die Frage, ob es Polynomlösungen für die  $\phi_n$  gibt, und welche Bedingungen an diese zu stellen sind. Die Vermutung, dass man hier mit Polynomen auskommt, wird dadurch gestärkt, dass sowohl das ungestörte Potential als auch die Störung von polynomialer Natur sind. Im vertrauteren quantenmechanischen Kontext würde dies bedeuten, dass die Matrixelemente des Störoperators in der Basis des ungestörten Problems nur zwischen wenigen nahen Nachbarzuständen von Null verschieden sind und somit nur endlich viele Terme in jeder Ordnung der Störungsreihe auftreten. Für beliebige Störpotentiale ist dagegen mit einer polynomialen Lösung für die  $\phi_n$  nicht zu rechnen.

Hier sei nun  $\phi_n(x, \tau)$  als Potenzreihe in  $x$  angesetzt:

$$\phi_n(x, \tau) := \sum_{k=0}^{M_n} \alpha_{n,k}(\tau) x^k. \quad (3.17)$$

Welchen Grad  $M_n$  muß eine solche Polynomlösung *mindestens* haben? Um diese Frage zu klären, betrachte man den höchsten Grad jedes Terms in (3.16), wenn  $\phi_n$  durch (3.17) gegeben ist:

$$\underbrace{c_1\dot{\phi}_n}_{M_n} + \underbrace{c_2\phi_{n-1}x^2}_{M_{n-1}+2} + \underbrace{c_3\phi_{n-1}x^3}_{M_{n-1}+3} + \underbrace{c_4\phi_{n-1}x^4}_{M_{n-1}+4} + \underbrace{c_5\phi'_n}_{M_{n-1}} + \underbrace{c_6\phi'_n x}_{M_n} + \underbrace{c_7\phi'_{n-1}x^3}_{M_{n-1}+2} + \underbrace{c_8\phi''_n}_{M_{n-2}} = 0. \quad (3.18)$$

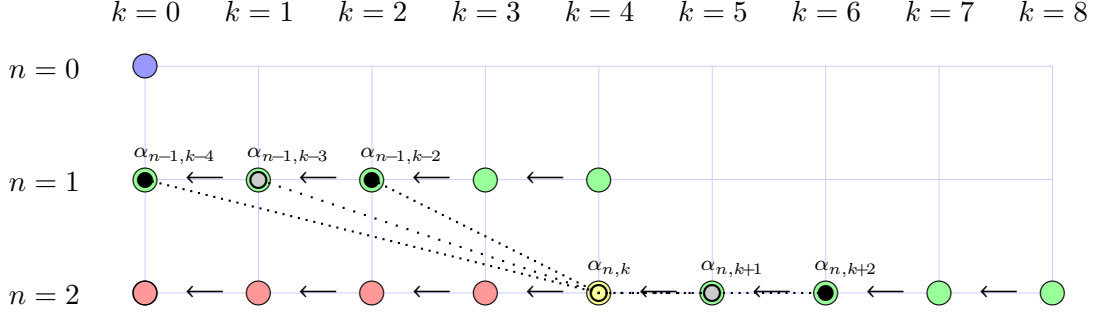
Aufgrund des Terms mit  $M_{n-1} + 4$  muß  $M_n \geq M_{n-1} + 4$  gelten. Zusammen mit  $\phi_0 \equiv 1$  ergeben sich die Bedingungen:

$$M_0 = 0 \quad \text{und} \quad M_n \geq M_{n-1} + 4, \quad (3.19)$$

so dass der minimale Ansatz für  $\phi_n$  lautet:

$$\phi_n(x, \tau) = \sum_{k=0}^{4n} \alpha_{n,k}(\tau) x^k. \quad (3.20)$$

An dieser Stelle sei noch angemerkt, dass die Koeffizienten  $c_3$  und  $c_5$  für  $x_0 = 0$  verschwinden und damit die „ungeraden“ Terme in (3.18) nicht vorhanden sind. Für  $\mu = 0$  bzw.



**Abbildung 3.1:** Rekursive Berechnung der Entwicklungskoeffizienten  $\alpha_{n,k}$ :  $\alpha_{0,0}$  ist der einzige Koeffizient, der a priori ungleich 0 ist (blau). Für jedes  $n$  werden die Koeffizienten für  $k = 4n, \dots, 0$  nacheinander berechnet (gelb). Dabei werden in jedem Schritt nur Koeffizienten benötigt, die schon zuvor berechnet wurden (grün).

$x_0 = 0$  kommt man also in (3.20) mit ausschließlich geraden  $x$ -Potenzen aus. Dies war zu erwarten, da das Problem in dem Fall symmetrisch gegenüber  $x \rightarrow -x$  ist.

Um die Koeffizienten  $\alpha_{n,k}(\tau)$  zu bestimmen, setzt man nun den Potenzreihenansatz (3.20) in (3.16) ein und betrachtet den Koeffizienten von  $x^k$ . Erneuter Koeffizientenvergleich liefert eine Gleichung, die die  $\alpha_{n,k}(\tau)$  miteinander verknüpft:

$$\begin{aligned} c_1 \dot{\alpha}_{n,k} + c_2 \alpha_{n-1,k-2} + c_3 \alpha_{n-1,k-3} + c_4 \alpha_{n-1,k-4} + c_5 (k+1) \alpha_{n,k+1} \\ + c_6 k \alpha_{n,k} + c_7 (k-2) \alpha_{n-1,k-2} + c_8 (k+2)(k+1) \alpha_{n,k+2} = 0. \end{aligned} \quad (3.21)$$

Für den Koeffizienten  $\alpha_{n,k}(\tau)$  ergibt sich hieraus die lineare Differentialgleichung

$$\dot{\alpha}_{n,k}(\tau) + \frac{k(\tau^2 + 1)}{\tau(\tau^2 - 1)} \alpha_{n,k}(\tau) = r_{n,k}(\tau) \quad (3.22)$$

mit der Inhomogenität:

$$\begin{aligned} r_{n,k}(\tau) = -\frac{k+1}{\gamma\tau} \alpha_{n-1,k-2}(\tau) + \frac{x_0}{D(\tau^2 - 1)} \alpha_{n-1,k-3}(\tau) - \frac{1}{D(\tau^3 - \tau)} \alpha_{n-1,k-4}(\tau) \\ + \frac{2x_0}{\tau^2 - 1} (k+1) \alpha_{n,k+1}(\tau) - \frac{D(k+2)(k+1)}{\gamma\tau} \alpha_{n,k+2}(\tau). \end{aligned} \quad (3.23)$$

Dieses System von gewöhnlichen Differentialgleichungen läßt sich rekursiv lösen, wie in Abbildung 3.1 dargestellt ist. Zunächst ist zu beachten, dass gilt:

$$\alpha_{n,k}(\tau) \equiv 0, \quad \text{falls} \quad n < 0 \quad \text{oder} \quad k < 0 \quad \text{oder} \quad k > 4n. \quad (3.24)$$

In Abbildung 3.1 sind die entsprechenden Punkte auf dem  $(n, k)$ -Raster leer oder liegen außerhalb. Beginnt man nun die Berechnung der Koeffizienten  $n$ ter Ordnung bei  $k = 4n$  und arbeitet sich schrittweise in Richtung  $k = 0$  vor, so stehen auf der rechten Seite

von (3.22) nur Koeffizienten, die bereits in einem vorherigen Schritt berechnet wurden. In der Abbildung sind die bereits verfügbaren Koeffizienten grün dargestellt. Die durch die Inhomogenität (3.23) vermittelte Kopplung der Koeffizienten bei Berechnung von  $\alpha_{n,k}$  (gelb) ist durch die gestrichelten Linien angedeutet.  $\alpha_{0,0}$  (blau) ist der einzige Koeffizient, der a priori ungleich 0 ist. Für  $x_0 = 0$  entfällt die Kopplung zu den grau dargestellten Nachbarn  $\alpha_{n-1,k-3}$  und  $\alpha_{n,k+1}$ , wodurch alle Koeffizienten mit ungeradem  $k$  verschwinden. Um eine Lösung für die inhomogene lineare Differentialgleichung (3.22) zu bestimmen, wird zuerst die entsprechende homogene Gleichung gelöst:

$$\dot{\alpha}_{n,k}(\tau) + \frac{k(\tau^2 + 1)}{\tau(\tau^2 - 1)} \alpha_{n,k}(\tau) = 0. \quad (3.25)$$

Diese Gleichung läßt sich nach Partialbruchzerlegung direkt integrieren:

$$\int \frac{d\alpha_{n,k}(\tau)}{\alpha_{n,k}(\tau)} = \int \frac{k}{\tau} - \frac{2\tau k}{\tau^2 - 1} d\tau. \quad (3.26)$$

Mit der Integrationskonstanten  $A_{n,k}$  lautet das Ergebnis:

$$\alpha_{n,k}(\tau) = A_{n,k} \frac{\tau^k}{(\tau^2 - 1)^k}. \quad (3.27)$$

Die Lösung der inhomogenen Gleichung wird mittels der Methode der *Variation der Konstanten* bestimmt: Dazu setzt man die Lösung (3.27) der homogenen Gleichung in (3.22) ein, wobei  $A_{n,k}$  als zeitabhängig angenommen wird. Man erhält somit für  $A_{n,k}(\tau)$

$$\frac{d}{d\tau} A_{n,k}(\tau) = r_{n,k}(\tau) \tau^{-k} (\tau^2 - 1)^k r_{n,k}(\tau), \quad (3.28)$$

mit der Lösung:

$$A_{n,k}(\tau) - A_{n,k}(\tau_0) = \int_{\tau_0}^{\tau} r_{n,k}(\xi) \xi^{-k} (\xi^2 - 1)^k d\xi. \quad (3.29)$$

Um die Integrationskonstante  $A_{n,k}(\tau_0)$  festzulegen, betrachtet man die Anfangsbedingung:

$$\mathcal{P}(x; \mu, \sigma^2) \stackrel{(3.7)}{=} \mathcal{P}(x, \tau_0) \stackrel{(3.8)}{=} \mathcal{P}_0(x, \tau_0) q(x, \tau_0) \stackrel{(3.6)}{=} \mathcal{P}(x; \mu, \sigma^2) q(x, \tau_0). \quad (3.30)$$

Insbesondere muß daher gelten:

$$1 \equiv q(x, \tau_0) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} g^n \sum_{k=0}^{4n} \alpha_{n,k}(\tau_0) x^k. \quad (3.31)$$

Ein Koeffizientenvergleich ergibt, dass alle  $\alpha_{n,k}(\tau_0)$  für  $n \geq 1$  verschwinden müssen, so dass dies unter Berücksichtigung von (3.27) auch für die Integrationskonstanten  $A_{n,k}(\tau_0)$  gelten muß. Als Endergebnis erhält man:

$$\alpha_{n,k}(\tau) = \frac{\tau^k}{(\tau^2 - 1)^k} \int_{\tau_0}^{\tau} r_{n,k}(\xi) \xi^{-k} (\xi^2 - 1)^k d\xi, \quad (3.32)$$

wobei  $r_{n,k}(\tau)$  durch (3.23) gegeben ist. Damit sind die wesentlichen Schritte zur Berechnung der Schwachkopplungskoeffizienten  $\alpha_{n,k}(\tau)$  erläutert. Der Grenzfall, dass die Anfangsbedingung die Form einer  $\delta$ -Funktion annimmt, muß allerdings noch genauer untersucht werden, da die Folgerung (3.31) aus (3.30) in diesem Fall nicht gilt.

Die Anfangsverteilung  $\mathcal{P}(x, \tau_0) = \delta(x - x_0)$  ergibt sich durch den Grenzübergang  $\sigma^2 \rightarrow 0$ , bzw. durch  $\tau_0 \rightarrow 1$ . Für  $k \neq 0$  muß weiterhin  $A_{n,k}(\tau_0) = 0$  gelten, da  $\alpha_{n,k}(\tau)$  sonst bei  $\tau_0$  einen Pol  $k$ -ter Ordnung hätte. Für  $k = 0$  entfällt der Bruch in Gleichung (3.27), so dass dieses Argument nicht gilt. Die Integrationskonstanten  $A_{n,0}(\tau_0)$  lassen sich jedoch durch die Normierungsbedingung festlegen:

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{P}(x, 1) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x - x_0) q(x, 1) dx = q(x_0, 1). \quad (3.33)$$

Einsetzen der Reihendarstellung für  $q(x, \tau)$  liefert:

$$1 = q(x_0, 1) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} g^n \sum_{k=0}^{4n} \alpha_{n,k}(1) x_0^k. \quad (3.34)$$

Durch einen Koeffizientenvergleich für  $g$  ergibt sich hiermit die gesuchte Bedingung für die Integrationskoeffizienten  $A_{n,0}(1)$ :

$$\sum_{k=0}^{4n} \alpha_{n,k}(1) x_0^k = 0 \quad \Rightarrow \quad A_{n,0}(1) = \alpha_{n,0}(1) = - \sum_{k=1}^{4n} \alpha_{n,k}(1) x_0^k. \quad (3.35)$$

Für  $k \neq 0$  sind die Koeffizienten  $\alpha_{n,k}(\tau)$  auch im Grenzfall einer  $\delta$ -förmigen Anfangsverteilung durch (3.32) gegeben, für  $k = 0$  erhält man in diesem Fall dagegen:

$$\alpha_{n,0}(\tau) = \int_1^{\tau} r_{n,0}(\xi) d\xi - \sum_{k=1}^{4n} \alpha_{n,k}(1) x_0^k. \quad (3.36)$$

Dieses Ergebnis stimmt mit (3.32) überein, wenn man den Grenzübergang  $\tau_0 \rightarrow 1$  sorgfältig durchführt:

$$\alpha_{n,k}(\tau) = \lim_{\tau_0 \rightarrow 1} \left[ \frac{\tau^k}{(\tau^2 - 1)^k} \int_{\tau_0}^{\tau} r_{n,k}(\xi) \xi^{-k} (\xi^2 - 1)^k d\xi \right]. \quad (3.37)$$

In diesem Sinne ist Gleichung (3.32) also auch für den Grenzfall der  $\delta$ -förmigen Anfangsverteilung gültig.

### 3.1.4 Koeffizienten der Kumulantenentwicklung

Die Berechnung der Koeffizienten für die Kumulantenentwicklung (3.10) verläuft im Wesentlichen analog zum vorangegangenen Abschnitt, so dass hier nur die wichtigsten For-

meln zusammengestellt werden sollen. Durch Einsetzen von (3.4) und (3.10) in die Fokker-Planck-Gleichung (3.7) erhält man eine Gleichung für die Kumulante  $p(x, \tau)$ :

$$\begin{aligned} \gamma \tau \dot{p}(x, \tau) + 3g x^2 - \frac{\gamma g \tau x_0}{D(\tau^2 - 1)} x^3 + \frac{\gamma g}{D(\tau^2 - 1)} x^4 \\ + \left( -\frac{2\gamma \tau x_0}{\tau^2 - 1} + \gamma \frac{\tau^2 + 1}{\tau^2 - 1} x + g x^3 \right) p'(x, \tau) + D(p'(x, \tau))^2 + Dp''(x, \tau) = 0. \end{aligned} \quad (3.38)$$

Der Hauptunterschied zur vorhergehenden Rechnung besteht in dem nichtlinearen Term  $(p'(x, \tau))^2$ . Man setzt nun wieder den Potenzreihenansatz (3.11) für  $p(x, \tau)$  ein und macht einen Koeffizientenvergleich für  $g^n$ . Mit geeignet gewählten Abkürzungen  $d_i$  wie in (3.14) ergeben sich daraus folgende Gleichungen für die Koeffizientenfunktionen  $\chi_n(x, \tau)$ :

$$\begin{aligned} n = 1 : \quad & d_1 \dot{\chi}_1 + d_2 x^2 + d_3 x^3 + d_4 x^4 + d_5 \chi'_1 + d_6 \chi'_1 x + d_9 \chi''_1 = 0, \\ n \geq 2 : \quad & d_1 \dot{\chi}_n + d_5 \chi'_n + d_6 \chi'_n x + d_7 \chi'_{n-1} x^3 + d_8 \sum_{m=1}^{n-1} \chi'_m \chi'_{n-m} + d_9 \chi''_n = 0. \end{aligned} \quad (3.39)$$

Ein Polynomansatz für die  $\chi_n(x, \tau)$  in  $x$  gemäß

$$\chi_n(x, \tau) = \sum_{k=0}^{M_n} \beta_{n,k}(\tau) x^k \quad (3.40)$$

wirft wiederum die Frage auf, welchen Grad  $M_n$  diese Polynome mindestens haben müssen, um die Bedingungen (3.39) erfüllen zu können. Die Antwort ist abhängig vom maximalen Grad  $\mathcal{M}_n$  des nichtlinearen Terms  $\sum_{m=1}^{n-1} \chi'_m \chi'_{n-m}$ :

$$\mathcal{M}_n = \max_{m=1, \dots, n-1} (M_n + M_{n-m}) - 2. \quad (3.41)$$

Ein Blick auf den Grad aller Terme in (3.39):

$$\begin{aligned} n = 1 : \quad & \underbrace{d_1 \dot{\chi}_1}_{M_1} + \underbrace{d_2 x^2}_2 + \underbrace{d_3 x^3}_3 + \underbrace{d_4 x^4}_4 + \underbrace{d_5 \chi'_1}_{M_1-1} + \underbrace{d_6 \chi'_1 x}_{M_1} + \underbrace{d_9 \chi''_1}_{M_1-2} \\ n \geq 2 : \quad & \underbrace{d_1 \dot{\chi}_n}_{M_n} + \underbrace{d_5 \chi'_n}_{M_n-1} + \underbrace{d_6 \chi'_n x}_{M_n} + \underbrace{d_7 \chi'_{n-1} x^3}_{M_{n-1}+2} + \underbrace{d_8 \sum_{m=1}^{n-1} \chi'_m \chi'_{n-m}}_{\mathcal{M}_n} + \underbrace{d_9 \chi''_n}_{M_n-2}, \end{aligned} \quad (3.42)$$

zeigt, dass notwendigerweise  $M_1 \geq 4$  sowie  $M_n \geq M_{n-1} + 2$  gelten muß. Mit dem minimalen Ansatz  $M_n = 2n + 2$  ergibt sich der Grad des nichtlinearen Terms zu  $\mathcal{M}_n = M_n$ , was keine weiteren Probleme aufwirft. Damit wächst der Grad der Koeffizientenpolynome  $\chi_n$  der Kumulante nur halb so schnell wie bei der flachen Reihe, so dass nur halb so viele Koeffizienten zu berechnen sind. Andererseits bezahlt man diese Verringerung der Koeffizientenanzahl mit einer komplizierteren Kopplung der Koeffizienten untereinander, die durch den nichtlinearen Term hervorgerufen wird. Es ist daher nicht offensichtlich, welche Koeffizienten sich im allgemeinen einfacher bestimmen lassen. Die Praxis hat gezeigt, dass

für die Kumulantenentwicklung nicht nur weniger Koeffizienten gebraucht werden, sondern dass diese auch noch von einfacherer Struktur sind. Bei den Berechnungen hat es sich desweiteren als sinnvoll erwiesen, noch eine zusätzliche Entwicklung in  $x_0$  vorzunehmen:

$$\chi_n(x, \tau) = \sum_{k=0}^{2n+2} \sum_{l=0}^{2n+2-k} \beta_{n,k,l}(\tau) x^k x_0^l. \quad (3.43)$$

Dass die Summe über  $l$  nur bis maximal  $2n+2-k$  läuft, hängt damit zusammen, dass der Koeffizient des Terms mit der höchsten  $x$ -Potenz in (3.42) kein  $x_0$  enthält. Mit jedem Schritt  $k \rightarrow k-1$  kann der Grad der  $x_0$ -Potenz jedoch nur maximal um eins ansteigen.

Mit dem Ansatz (3.43) für die Koeffizientenfunktionen  $\chi_n(x, \tau)$  erhält man eine lineare Differentialgleichung für die  $\beta_{n,k,l}(\tau)$ :

$$\dot{\beta}_{n,k,l}(\tau) + \frac{k(\tau^2 + 1)}{\tau(\tau^2 - 1)} \beta_{n,k,l}(\tau) = s_{n,k,l}(\tau). \quad (3.44)$$

Diese hat die gleiche Form wie die im vorangegangenen Abschnitt gelöste Gleichung (3.22), so dass sich die Lösung direkt übertragen lässt:

$$\beta_{n,k,l}(\tau) = \frac{\tau^k}{(\tau^2 - 1)^k} \int_{\tau_0}^{\tau} s_{n,k,l}(\xi) \xi^{-k} (\xi^2 - 1)^k d\xi \quad (3.45)$$

Die Inhomogenität  $s_{n,k,l}(\tau)$  ist in diesem Fall gegeben durch:

$$\begin{aligned} s_{1,k,l}(\tau) = & -\frac{3}{\gamma\tau} \delta_{k,2} \delta_{l,0} + \frac{1}{D(\tau^2 - 1)} \delta_{k,3} \delta_{l,1} - \frac{1}{D(\tau^3 - \tau)} \delta_{k,4} \delta_{l,0} \\ & + \frac{2(k+1)}{\tau^2 - 1} \beta_{1,k+1,l-1} - \frac{D(k+2)(k+1)}{\tau\gamma} \beta_{1,k+2,l}, \end{aligned} \quad (3.46)$$

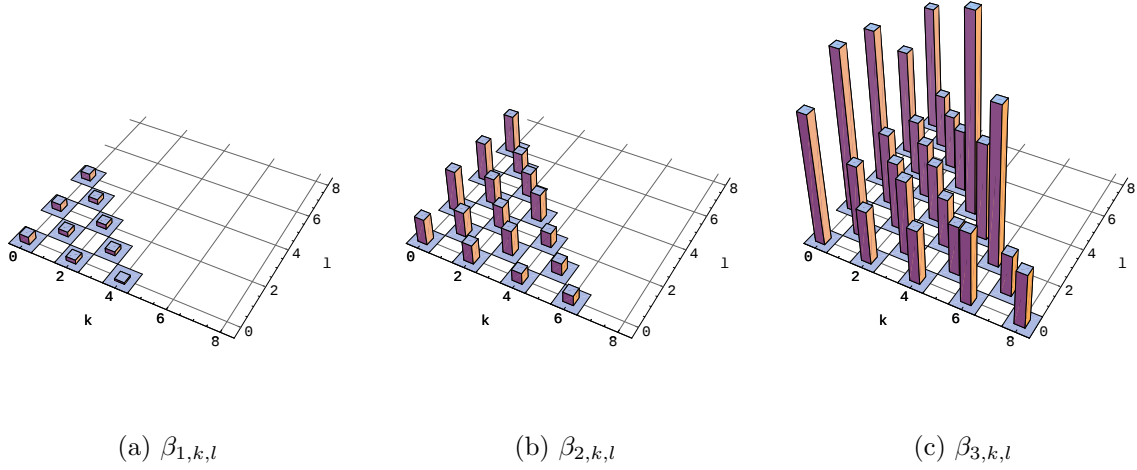
$$\begin{aligned} s_{n,k,l}(\tau) = & -\frac{k-2}{\gamma\tau} \beta_{n-1,k-2,l} + \frac{2(k+1)}{\tau^2 - 1} \beta_{n,k+1,l-1} - \frac{D(k+2)(k+1)}{\gamma\tau} \beta_{n,k+2,l} \\ & - \frac{D}{\gamma\tau} \sum_{m=1}^{n-1} \sum_{j=1}^{k+1} j(k-j+2) \sum_{i=0}^l \beta_{m,j,i} \beta_{n-m,k-j+2,l-i}. \end{aligned} \quad (3.47)$$

Ist eine der folgenden Bedingungen erfüllt, so gilt a priori  $\beta_{n,k,l}(\tau) \equiv 0$ :

$$\begin{aligned} n &< 0 \\ k &< 0 \quad \text{oder} \quad k > 2n+2 \\ l &< 0 \quad \text{oder} \quad l > 2n+2-k \\ k+l &\text{ ungerade} \end{aligned}$$

Letzteres erkennt man, wenn man beachtet, dass für  $k+l$  ungerade jeder Term in (3.44) wenigstens einen Faktor  $\beta_{n,j,i}$  mit  $j+i$  ungerade enthält. Für den letzten Term in (3.47) folgt dies aus:

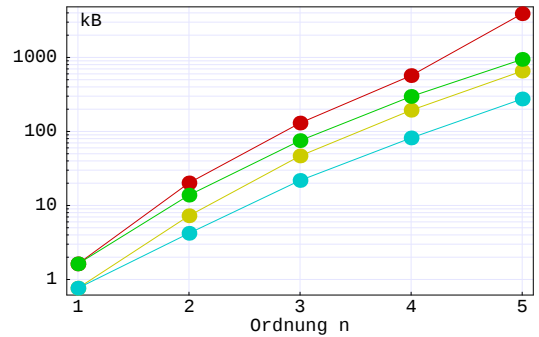
$$\begin{aligned} (k+l \text{ ungerade} \quad \wedge \quad j+i \text{ ungerade}) &\Rightarrow k-j+2+l-i \text{ gerade} \\ (k+l \text{ ungerade} \quad \wedge \quad j+i \text{ gerade}) &\Rightarrow k-j+2+l-i \text{ ungerade} \end{aligned}$$



**Abbildung 3.2:** Relativer Rechenzeitverbrauch für die ersten drei Ordnungen der Störungskoeffizienten  $\beta_{n,k,l}$  für die Kumulantenentwicklung.

Für die einzigen a priori von 0 verschiedenen Terme in (3.46) gilt  $k + l = 2$  oder  $k + l = 4$ , also  $k + l$  gerade. In Anhang D ist die *MATHEMATICA*-Implementation der Gleichung (3.44) angegeben, die zur Berechnung der Koeffizienten benutzt wurde. In Abbildung 3.4 sind die Koeffizienten  $\beta_{1,k,l}$  der ersten Ordnung aufgelistet und für  $\gamma = D = \tau_0 = 1$  über den Zeitachsen  $\tau$  und  $t$  aufgetragen. Die Koeffizienten  $\beta_{1,4,0}$  und  $\beta_{1,0,4}$  nehmen bei  $\tau = 1$  bzw.  $t = 0$  endliche Werte an, wie dies nur für  $\delta$ -förmige Anfangsverteilungen möglich ist. Die einzigen Koeffizienten, die für  $\tau \rightarrow 0$  bzw.  $t \rightarrow \infty$  nicht verschwinden, sind  $\beta_{1,4,0}$  und  $\beta_{1,0,0}$ .  $\beta_{1,4,0}$  strebt gegen  $1/4D$  und reproduziert damit den  $gx^4/4D$ -Term im Exponenten der stationären Lösung. Der Koeffizient  $\beta_{1,0,0}(\tau = 0)$  entspricht dem ersten Term in der Entwicklung der Normierungskonstante der stationären Lösung. Auf die Normierung der Störungsreihen wird im nächsten Abschnitt noch genauer eingegangen.

In Abbildung 3.2 ist der relative Rechenaufwand für die Berechnung der ersten drei Ordnungen verdeutlicht. Die benötigte Rechenzeit wächst sehr schnell mit der Ordnung  $n$  an. Zum einen nimmt die Anzahl der Koeffizienten quadratisch zu.<sup>2</sup> Im Fall der flachen Reihe sind in  $n$ -ter Ordnung  $\sum_{k=0}^{2n} (2k+1) = (2n+1)^2$  Koeffizienten  $\alpha_{n,k,l}$  zu berechnen, für die Kumulantenentwicklung sind es  $\sum_{k=0}^{n+1} (2k+1) = (n+2)^2$  Koeffizienten  $\beta_{n,k,l}$ . Gleichzeitig wächst auch die



**Abbildung 3.3:** Speicherverbrauch

<sup>2</sup>Die Anzahl ist jeweils durch die Summe der ersten  $2n + 1$  beziehungsweise  $n + 2$  ungeraden Zahlen gegeben, wie in Abbildung 3.2 zu erkennen ist.

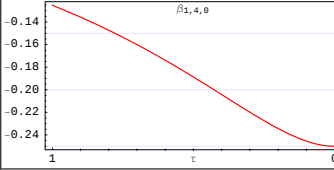
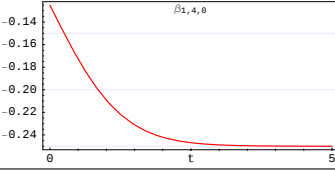
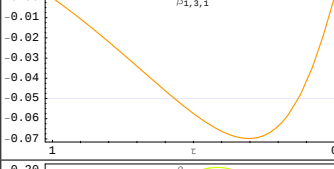
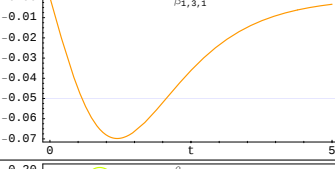
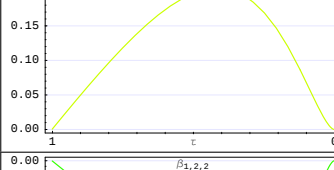
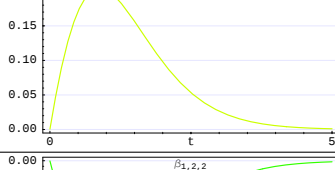
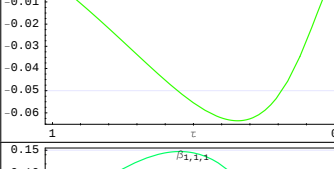
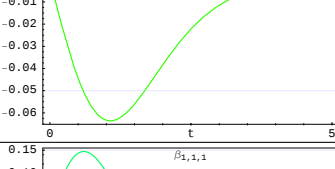
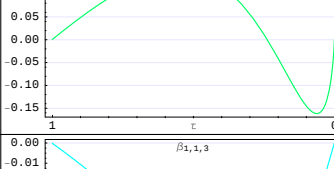
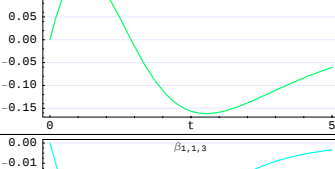
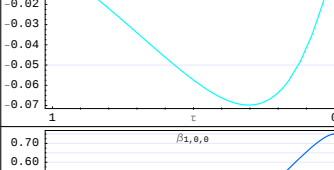
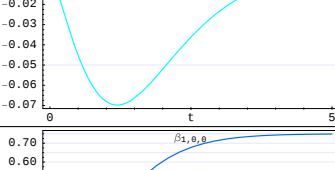
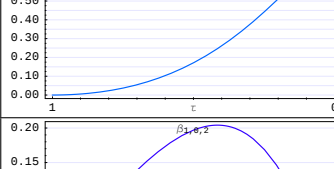
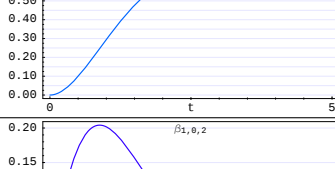
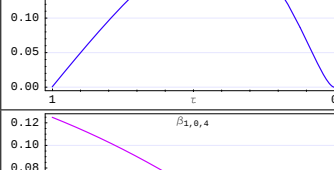
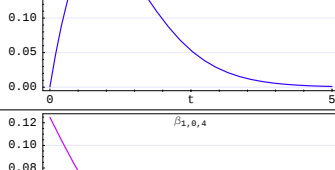
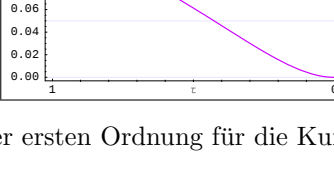
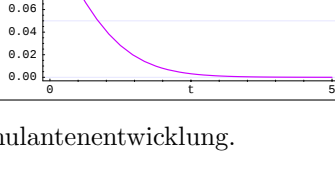
|                 | Koeffizient für $\tau_0 \rightarrow 1$<br>Anfangsbedingung $\mathcal{P}(x, 1) = \delta(x - x_0)$  | $\beta_{n,k,l}(\tau)$<br>Transformierte Zeitachse $\tau$                             | $\beta_{n,k,l}(t)$<br>Physikalische Zeitachse $t$                                     |
|-----------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------|
| $\beta_{1,4,0}$ | $\frac{2\tau^2 + 3\tau^4 - 6\tau^6 + \tau^8 + 12\tau^4 \log(\tau)}{4D(\tau^2 - 1)^4}$             |    |    |
| $\beta_{1,3,1}$ | $\frac{-\tau - 9\tau^3 + 9\tau^5 + \tau^7 - 12\tau^3(1 + \tau^2) \log(\tau)}{2D(\tau^2 - 1)^4}$   |    |    |
| $\beta_{1,2,0}$ | $\frac{3\tau^2(5 - 4\tau^2 - \tau^4 + 4(1 + 2\tau^2) \log(\tau))}{2\gamma(\tau^2 - 1)^3}$         |    |    |
| $\beta_{1,2,2}$ | $\frac{3\tau^2(3 - 3\tau^4 + 2(1 + 4\tau^2 + \tau^4) \log(\tau))}{2D(\tau^2 - 1)^4}$              |   |   |
| $\beta_{1,1,1}$ | $\frac{-3\tau(2 + 2\tau^2 - 4\tau^4 + (1 + 8\tau^2 + 3\tau^4) \log(\tau))}{\gamma(\tau^2 - 1)^3}$ |  |  |
| $\beta_{1,1,3}$ | $\frac{-\tau - 9\tau^3 + 9\tau^5 + \tau^7 - 12\tau^3(1 + \tau^2) \log(\tau)}{2D(\tau^2 - 1)^4}$   |  |  |
| $\beta_{1,0,0}$ | $\frac{3D(1 + 4\tau^2 - 5\tau^4 + 4\tau^2(2 + \tau^2) \log(\tau))}{4\gamma^2(\tau^2 - 1)^2}$      |  |  |
| $\beta_{1,0,2}$ | $\frac{3\tau^2(5 - 4\tau^2 - \tau^4 + 4(1 + 2\tau^2) \log(\tau))}{2\gamma(-1 + \tau^2)^3}$        |  |  |
| $\beta_{1,0,4}$ | $\frac{2\tau^2 + 3\tau^4 - 6\tau^6 + \tau^8 + 12\tau^4 \log(\tau)}{4D(\tau^2 - 1)^4}$             |  |  |

Abbildung 3.4: Koeffizienten der ersten Ordnung für die Kumulantenentwicklung.

Komplexität der einzelnen Koeffizienten, so dass der Speicherplatzverbrauch insgesamt exponentiell anwächst. Für praktische Anwendungen kommt man daher kaum über die fünfte Ordnung hinaus. Abbildung 3.3 zeigt den Speicherplatzverbrauch der Koeffizienten der flachen Störungsreihe (rot) und der Kumulantenentwicklung (grün) für den allgemeinen Fall. Legt man die Parameter  $\gamma$ ,  $D$  und  $\tau_0$  von vornherein fest, so dass die Koeffizienten nur noch von  $t$  abhängen, so ergeben sich für die flache Reihe die gelbe und für die Kumulante die blaue Kurve. Ab der fünften Ordnung werden die Terme so groß, dass man sie mit *MATHEMATICA*\* nicht mehr sinnvoll analytisch bearbeiten kann.

### 3.1.5 Normierung der flachen Störungsreihe

Die unendliche Störungsreihe ist definitionsgemäß auf 1 normiert, da sie die exakte Lösung für einer auf 1 normierten Anfangsbedingung darstellt und die Fokker-Planck-Gleichung die Eigenschaft hat, die Norm zu erhalten:

$$1 \stackrel{(1.18)}{=} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{P}(x, t) dx \stackrel{(3.8)}{=} \sum_{n=0}^{\infty} g^n \int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{P}_0(x, t) \phi_n(x, t) dx. \quad (3.48)$$

Ein Koeffizientenvergleich liefert für:

$$n = 0 : \quad \int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{P}_0(x, t) \phi_0(x, t) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{P}_0(x, t) dx = 1, \quad (3.49)$$

$$n \geq 1 : \quad \int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{P}_0(x, t) \phi_n(x, t) dx = 0. \quad (3.50)$$

Die flache Störungsreihe bis zu  $N$ -ter Ordnung in  $g$ :

$$\mathcal{P}_S^{(N)}(x, t) := \mathcal{P}_0(x, t) \sum_{n=0}^N g^n \phi_n(x, t) \quad (3.51)$$

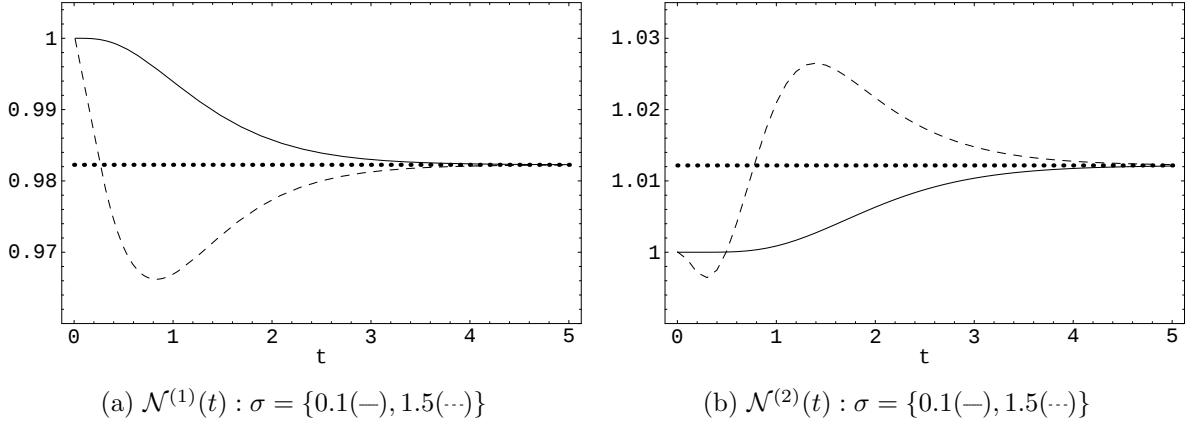
ist daher in jeder Ordnung normiert:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{P}_S^{(N)}(x, t) dx = \sum_{n=0}^N g^n \int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{P}_0(x, t) \phi_n(x, t) dx = 1. \quad (3.52)$$

### 3.1.6 Normierung der Kumulantenentwicklung

Für die Kumulantenentwicklung gilt die Argumentation des vorangegangenen Abschnitts nicht, da die Exponentialfunktion bereits in jeder Ordnung beliebig hohe  $g$ -Potenzen generiert. Die Kumulantenentwicklung  $N$ -ter Ordnung in  $g$ :

$$\mathcal{P}_K^{(N)}(x, t) := \mathcal{N}_K^{(N)}(t) \mathcal{P}_0(x, t) \exp \left\{ \sum_{n=0}^N g^n \chi_n(x, t) \right\} \quad (3.53)$$



**Abbildung 3.5:** Normierungskonstante  $\mathcal{N}_K^{(1)}(t)$  und  $\mathcal{N}_K^{(2)}(t)$  für  $\gamma = 1, g = 0.1, \mu = 0, D = 1$ . Die gepunktete Linie (···) kennzeichnet den exakten Wert für  $\mathcal{N}_K^{(1)}(\infty)$  bzw.  $\mathcal{N}_K^{(2)}(\infty)$ .

muß daher entsprechend nachnormiert werden. Die zeitabhängige Normierungskonstante  $\mathcal{N}_K^{(N)}(t)$  in  $N$ -ter Ordnung ist gegeben durch:

$$\mathcal{N}_K^{(N)}(t) = \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{P}_0(x, t) \exp \left\{ \sum_{n=0}^N g^n \chi_n(x, t) \right\} dx \right]^{-1}. \quad (3.54)$$

Für  $N \rightarrow \infty$  geht die Reihe in die exakte Lösung über, die bereits richtig normiert ist. Desweiteren ist die Anfangsverteilung für  $t = 0$  auf 1 normiert:

$$\mathcal{N}_K^{(\infty)}(t) \equiv 1, \quad (3.55)$$

$$\mathcal{N}_K^{(N)}(0) = 1. \quad (3.56)$$

Für  $t \rightarrow \infty$  strebt die Kumulantenentwicklung gegen die exakt bekannte stationäre Verteilung (1.46):

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \mathcal{P}_K^{(N)}(x, t) = \mathcal{P}_{\text{stat}}(x) = \mathcal{N}_\infty e^{-\frac{\gamma}{2D}x^2 - \frac{g}{4D}x^4}. \quad (3.57)$$

deren Normierungskonstante  $\mathcal{N}_\infty$  durch (1.47) gegeben ist. fGleichzeitig gilt für die Kumulantenentwicklung:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \mathcal{P}_K^{(N)}(x, t) = \mathcal{N}_K^{(N)}(\infty) \underbrace{\sqrt{\frac{\gamma}{2\pi D}} e^{-\frac{\gamma}{2D}x^2}}_{\mathcal{P}_0(x, \infty)} \exp \left\{ \sum_{n=0}^N g^n \chi_n(x, \infty) \right\}. \quad (3.58)$$

Ein Vergleich mit (3.57) liefert eine Störungsreihe für die Normierungskonstante:

$$\begin{aligned} \mathcal{N}_K^{(N)}(\infty) &= \sqrt{2\pi D/\gamma} \mathcal{N}_\infty e^{-\frac{g}{4}x^4} \exp \left\{ - \sum_{n=0}^N g^n \chi_n(x, \infty) \right\} \\ &= \sqrt{2\pi D/\gamma} \mathcal{N}_\infty \exp \left\{ -\frac{3D}{4\gamma^2} g + \frac{3D^2}{\gamma^4} g^2 - \frac{99D^3}{4\gamma^6} g^3 + \cdots + \mathcal{O}(g^{N+1}) \right\}. \end{aligned} \quad (3.59)$$

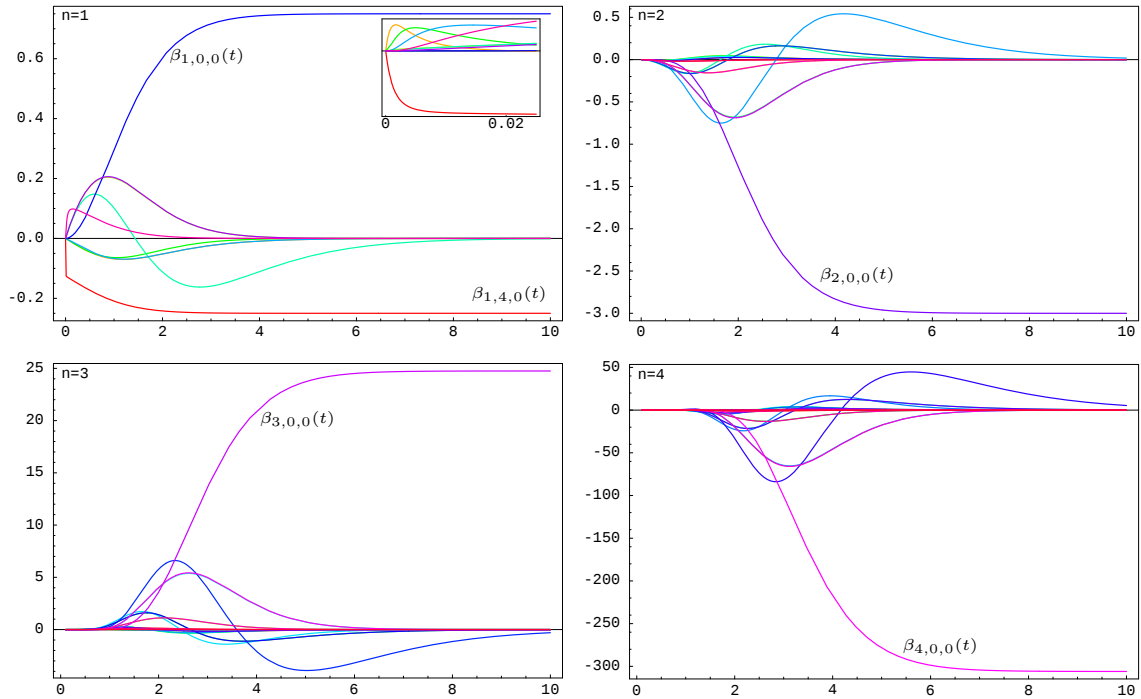
Die Koeffizienten  $\beta_{n,0,0}(\infty) = \chi_n(0, \infty)$  bilden also praktisch eine kumulative Entwicklung der Normierungskonstante  $\mathcal{N}_\infty$  der stationären Verteilung. Daraus ergibt sich ein einfacher Konsistenzcheck der Koeffizienten  $\beta_{n,0,0}(t)$  für  $t \rightarrow \infty$ :

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \beta_{n,0,0}(t) = -\frac{1}{n!} \frac{\partial^n}{\partial g^n} \log \left( \sum_{k=0}^n (-1)^k \left( \frac{g}{4D} \right)^k \int_{-\infty}^{+\infty} x^{4k} e^{-\frac{\gamma}{2D} x^2} dx \right) \Big|_{g=0}. \quad (3.60)$$

Für  $0 < t < \infty$  muß das Normierungsintegral (3.54) berechnet werden. In Abbildung 3.5 ist der zeitliche Verlauf der Normierung für die erste und zweite Ordnung für ausgewählte Parameterwerte exemplarisch dargestellt.

### 3.1.7 Ergebnisse für die Störungsreihen

Bevor es im nächsten Abschnitt um die Variationsstörungsreihe für die Wahrscheinlichkeitsverteilung geht, sollen an dieser Stelle die bisherigen Ergebnisse für die Störungsreihen noch etwas genauer betrachtet werden. Dies wird insbesondere die kommenden Versuche zusätzlich motivieren, die Ergebnisse mit Hilfe der Variationsstörungstheorie zu verbessern, da sich zeigen wird, dass das Problem allein mit der Schwachkopplungsentwicklung



**Abbildung 3.6:** Störungskoeffizienten der Kumulantenentwicklung für die ersten vier Ordnungen  $n = 1, \dots, 4$  aufgetragen über der Zeit  $t$  mit den Parameterwerten:  $\gamma = 1$ ,  $D = 1$  und  $\sigma = 0.1$ . Der „Knick“ des Koeffizienten  $\beta_{1,4,0}$  bei  $t \approx 0$  ist kein Artefakt.

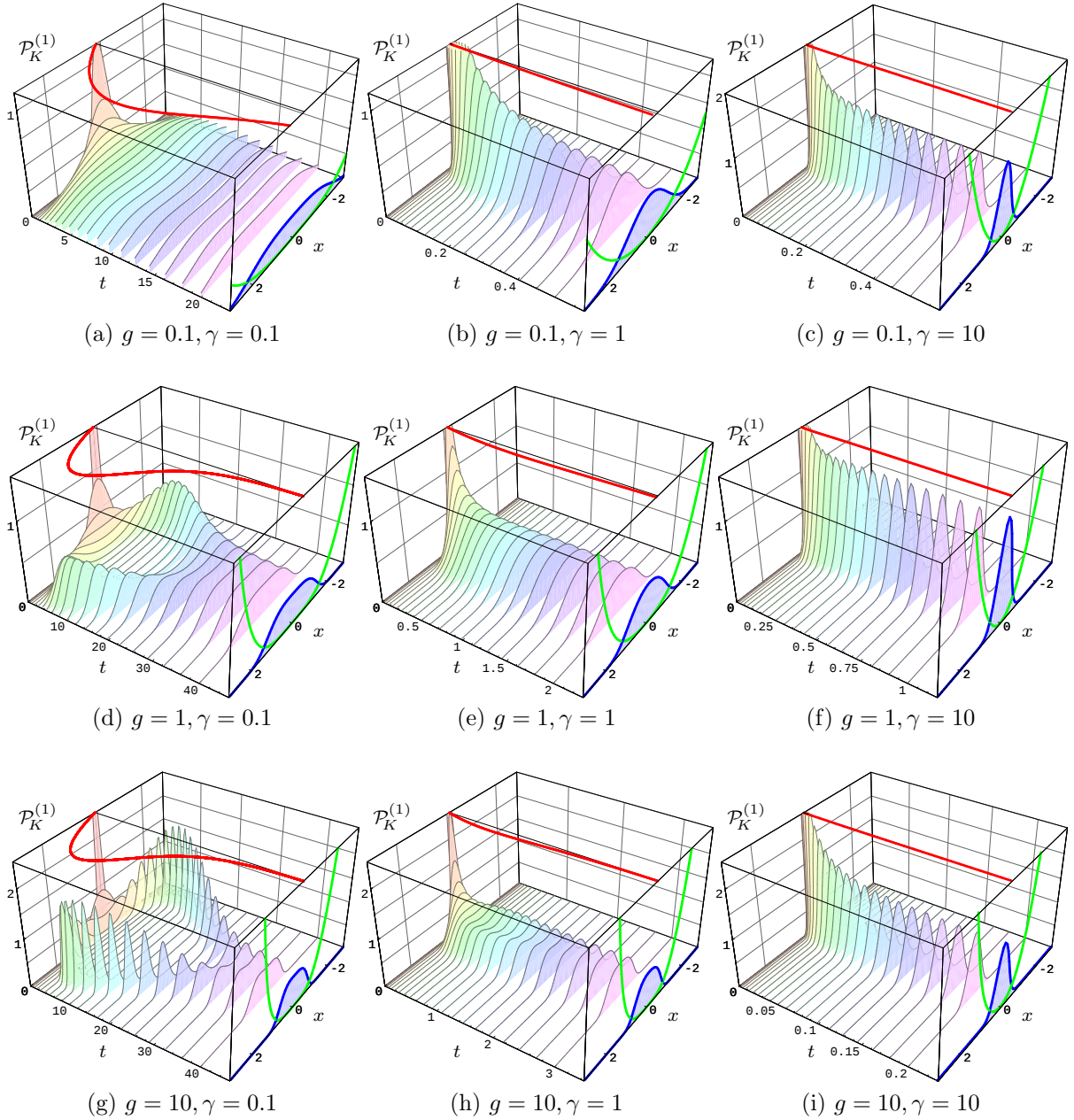
nicht zufriedenstellend behandelt werden kann. In Abbildung 3.6 sind die Koeffizienten der ersten vier Ordnungen für die Kumulante über der Zeit  $t$  aufgetragen. Durch die hohe Zahl an Koeffizienten ist es nicht möglich, alle Kurven den entsprechenden  $(n, k, l)$ -Werten zuzuordnen. Klar zu erkennen sind die zu  $\beta_{n,0,0}$  gehörigen Linien, die für  $t \rightarrow \infty$  die Normierungskonstante reproduzieren. Die rote Kurve in der Abbildung 3.6 oben links für die erste Ordnung gehört zum Koeffizienten  $\beta_{1,4,0}$ , der die stationäre Lösung erzeugt und der als einziger ausser den  $\beta_{n,0,0}$  für  $t \rightarrow \infty$  einen endlichen Wert behält. Die Vergrößerung in der kleinen Unterabbildung stellt das Verhalten bei sehr kleinen  $t$  dar. Alle Koeffizienten verschwinden bei  $t = 0$ , wie es für eine Anfangsverteilung endlicher Breite der Fall sein muß. Der Koeffizient  $\beta_{1,4,0}$  wächst dann sehr schnell an.

Auf der Zeitskala sind drei Regionen mit qualitativ unterschiedlichem Verhalten zu beobachten: Für  $t \rightarrow 0$  verschwinden grundsätzlich alle Koeffizienten, so dass die Störungsreihe dort für beliebige Werte von  $g$  vernünftige Ergebnisse liefern wird. Die Lösung liegt nahe an der Anfangsverteilung. Für  $t \rightarrow \infty$  verschwinden wiederum alle Koeffizienten bis auf  $\beta_{1,4,0}$  und die  $\beta_{n,0,0}$ . Letztere beeinflussen nur die globale Skalierung der Wahrscheinlichkeitsverteilung, nicht aber ihre *Form*. Diese wird also für große Zeiten immer recht nahe am exakten Ergebnis — der stationären Verteilung — liegen. Dazwischen befindet sich ein Bereich, in dem alle Koeffizienten eine wesentliche Rolle spielen. Durch das divergente Verhalten der Störungsreihe werden die Koeffizienten mit steigender Ordnung betragsmässig größer. Die Koeffizienten mit  $k = 0$  ändern die Form der Verteilung nicht. Wird die störungstheoretische Lösung am Schluß noch einmal nachnormiert, spielen diese Koeffizienten trotz divergenten Verhaltens keine Rolle. Die Koeffizienten für  $k > 0$  beeinflussen die  $x$ -Abhängigkeit der Verteilung und damit ihre Form. Für eine gegebene Ordnung wird die störungstheoretische Lösung zu diesen intermediären Zeiten von einem dieser Koeffizienten dominiert, so dass sich ein unphysikalisches Verhalten ergeben kann.

In Abbildung 3.7 ist die zeitliche Entwicklung der Kumulantenentwicklung erster Ordnung für alle Kombinationen von  $\gamma = \{0.1, 1, 10\}$  und  $g = \{0.1, 1, 10\}$  dargestellt. Die restlichen Parameterwerte lauten für alle Unterabbildungen  $D = 1$ ,  $\sigma = 0.1$  und  $\mu = 0$ . Skaliert man  $\gamma$  und  $g$  gleichermaßen mit einem Faktor  $\alpha$ , so ergibt sich die gleiche Fokker-Planck-Gleichung, wie wenn man den Diffusionskoeffizienten  $D$  durch  $\alpha D$  ersetzt und die Zeitachse mit  $1/\alpha$  skaliert. Die Abbildung 3.7(a) beschreibt also z.B. auch den Fall  $\gamma = 1$  und  $g = 1$  für  $D = 10$ , wenn man  $t$  durch  $t/10$  ersetzt.

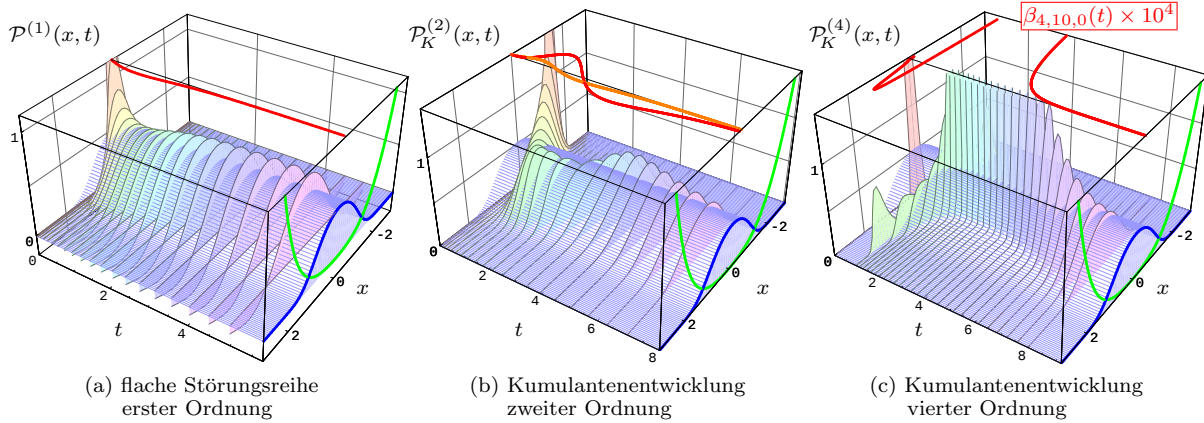
Zur besseren Vergleichbarkeit wurden alle Verteilungen auf dem selben  $x$ -Intervall  $[-3, 3]$  geplottet, obwohl sie sehr unterschiedliche Breiten aufweisen. An der Stirnseite der Kästen in  $t$ -Richtung ist jeweils die zugehörige stationäre Verteilung in [blau](#) sowie das Potential in [grün](#) eingezeichnet. Die [rote](#) Linie, die über den Verteilungen sozusagen im Deckel der Kästen aufgetragen ist, verdeutlicht den Störungskoeffizienten  $\beta_{1,2,0}$ , der wesentlichen Anteil an den Abweichungen von der exakten Lösung trägt.

In allen in Abbildung 3.7 dargestellten Fällen nähert sich die störungstheoretische Lösung



**Abbildung 3.7:** Zeitentwicklung der Kumulantenentwicklung erster Ordnung für  $\gamma = \{0.1, 1, 10\}$  und  $g = \{0.1, 1, 10\}$ . Allen Abbildungen gemeinsam sind die Parameterwerte  $D = 1$ ,  $\sigma = 0.1$  und  $\mu = 0$ .

mit zunehmender Zeit an die stationäre Verteilung an. In den Fällen 3.7(b), 3.7(c) und 3.7(f), wo  $\gamma$  größer als  $g$  gewählt wurde, liefert die Störungsreihe vernünftige Ergebnisse, wie man es von einer Schwachkopplungsreihe in  $g$  auch erwartet. Mit  $\gamma = g = 1$  ist in der Unterabbildung 3.7(a) zu erkennen, dass die Verteilung um  $t = 10$  herum zu weit auseinanderläuft. Dies ist direkt mit dem Koeffizienten  $\beta_{1,2,0}$  korreliert, der in diesem Bereich besonders groß ist. Für  $\gamma < g$  in den Unterabbildungen 3.7(d), 3.7(g) und 3.7(h)



**Abbildung 3.8:** Problematische Fälle für  $g = \gamma = 1$ : **links:** Die flache Störungsreihe produziert *negative* Wahrscheinlichkeiten und kann die stationäre Lösung nicht reproduzieren. **mitte:** Die Kumulantenentwicklung zweiter Ordnung schwankt für  $\mu \neq 0$  um das richtige Ergebnis. **rechts:** Die Kumulantenentwicklung vierter Ordnung ist für diesen Fall zwischen  $t = 0$  und  $t = 0.687\dots$  nicht normierbar.

liefert die Störungsentwicklung ganz offensichtlich falsche Ergebnisse: die Verteilung läuft zunächst weit auseinander, um sich dann langsam wieder für  $t \rightarrow \infty$  zusammenzuziehen. Tatsächlich tritt dieser Effekt auch in den Fällen für  $\gamma \geq g$  auf, nur ist er dort so klein, dass man ihn auf diesen Plots nicht erkennen kann. Die flache Störungsreihe liefert sogar schon in solchen Fällen schlechte Ergebnisse, wo Fehler der Kumulantenentwicklung nicht mit dem bloßen Auge erkennbar sind. In Abbildung 3.8(a) ist das für  $g = \gamma = 1$  verdeutlicht. Dieser entspricht der Abbildung 3.7(e) auf der vorhergehenden Seite. Die feinen blauen Linien deuten die stationäre Verteilung an und man erkennt gut, dass die flache Störungsreihe in der Nähe von  $x = 0$  für  $t \rightarrow \infty$  zu große Werte annimmt. Dafür liefert sie für größere Werte von  $x$  *negative* Wahrscheinlichkeiten.

In Abbildung 3.8(b) ist die Kumulantenentwicklung zweiter Ordnung für  $g = \gamma = 1$  dargestellt, wobei die Anfangsverteilung in diesem Fall nicht bei  $\mu = 0$ , sondern bei  $\mu = -1.5$  zentriert ist. Dadurch treten in der Kumulantenentwicklung auch Koeffizienten mit  $l \neq 0$  auf. Die Verteilung schwankt um  $x = 0$ , im Unterschied zur exakten Lösung, die nicht oszilliert. In der  $x$ - $t$ -Ebene über der Verteilung sind die Koeffizienten  $\beta_{2,1,1}$  und  $\beta_{2,3,1}$  aufgetragen, die für dieses Verhalten verantwortlich sind.

In Abbildung 3.8(c) ist die vierte Ordnung der Kumulantenentwicklung dargestellt. Hier tritt zwischen  $t = 0$  und  $t = 0.687\dots$  das Problem auf, dass der Koeffizient  $\beta_{4,10,0}$  der dominierenden  $x$ -Potenz in der Kumulante für dieses Zeitintervall *positiv* ist. Die Verteilung ist daher in diesem Zeitintervall nicht normierbar. In der Kumulante dritter Ordnung war der dominierende Koeffizient stets für alle  $t$  positiv, so dass keine Kumulantenentwicklung dritter Ordnung existierte.

Nachfolgend die Ergebnisse für die Störungskoeffizienten der ersten Ordnung in  $g$ :

$$\mathcal{P}_K^{(1)}(x, t) = \mathcal{P}_0(x, t) \exp \left\{ g \sum_{k=0}^4 \sum_{l=0}^{4-k} \beta_{1,k,l} x^k \mu^l \right\}$$

|                 |                                                                                                                                                                                                                                                                                                             |
|-----------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| $\beta_{1,0,0}$ | $= \frac{3D(D^2(-5+e^{4t\gamma}-4t\gamma+e^{2t\gamma}(4-8t\gamma))+8D\gamma(1+t\gamma+e^{2t\gamma}(-1+t\gamma))\sigma^2-2\gamma^2(1-e^{2t\gamma}+2t\gamma)\sigma^4)}{4\gamma^2(D(-1+e^{2t\gamma})+\gamma\sigma^2)^2}$                                                                                       |
| $\beta_{1,0,2}$ | $= \frac{3D^2(D(1+e^{4t\gamma}(-5+4t\gamma)+e^{2t\gamma}(4+8t\gamma))-2\gamma(1-e^{4t\gamma}+4e^{2t\gamma}t\gamma)\sigma^2)}{2\gamma(D(-1+e^{2t\gamma})+\gamma\sigma^2)^3}$                                                                                                                                 |
| $\beta_{1,0,4}$ | $= \frac{D^3(1-6e^{2t\gamma}+2e^{6t\gamma}+e^{4t\gamma}(3-12t\gamma))}{4(D(-1+e^{2t\gamma})+\gamma\sigma^2)^4}$                                                                                                                                                                                             |
| $\beta_{1,1,1}$ | $= \frac{-3De^{t\gamma}(2D^2(4+3t\gamma+e^{4t\gamma}(-2+t\gamma)+e^{2t\gamma}(-2+8t\gamma))-D\gamma(13-4t\gamma+12t\gamma+4e^{2t\gamma}(-3+4t\gamma))\sigma^2+3\gamma^2(1-e^{2t\gamma}+2t\gamma)\sigma^4)}{2\gamma(D(-1+e^{2t\gamma})+\gamma\sigma^2)^3}$                                                   |
| $\beta_{1,1,3}$ | $= \frac{-(D^2e^{t\gamma}(D(-1+e^{6t\gamma}+e^{4t\gamma}(9-12t\gamma)-3e^{2t\gamma}(3+4t\gamma))+3\gamma(1-e^{4t\gamma}+4e^{2t\gamma}t\gamma)\sigma^2))}{2(D(-1+e^{2t\gamma})+\gamma\sigma^2)^4}$                                                                                                           |
| $\beta_{1,2,0}$ | $= \frac{3(D^3(1+e^{4t\gamma}(-5+4t\gamma)+e^{2t\gamma}(4+8t\gamma))-D^2\gamma(3+e^{4t\gamma}(-7+4t\gamma)+4e^{2t\gamma}(1+4t\gamma))\sigma^2+D\gamma^2(3-e^{4t\gamma}+e^{2t\gamma}(-2+8t\gamma))\sigma^4+(-1+e^{2t\gamma})\gamma^3\sigma^6)}{2\gamma(D(-1+e^{2t\gamma})+\gamma\sigma^2)^3}$                |
| $\beta_{1,2,2}$ | $= \frac{-3De^{2t\gamma}(D^2(3+2t\gamma+8e^{2t\gamma}t\gamma+e^{4t\gamma}(-3+2t\gamma))-D\gamma(5-e^{4t\gamma}+4t\gamma+e^{2t\gamma}(-4+8t\gamma))\sigma^2+\gamma^2(1-e^{2t\gamma}+2t\gamma)\sigma^4)}{2(D(-1+e^{2t\gamma})+\gamma\sigma^2)^4}$                                                             |
| $\beta_{1,3,1}$ | $= \frac{e^{t\gamma}(D^3(1-e^{6t\gamma}+3e^{4t\gamma}(-3+4t\gamma)+3e^{2t\gamma}(3+4t\gamma))-3D^2\gamma(1+e^{4t\gamma}(-5+4t\gamma)+e^{2t\gamma}(4+8t\gamma))\sigma^2+3D\gamma^2(1-e^{4t\gamma}+4e^{2t\gamma}t\gamma)\sigma^4+(-1+e^{2t\gamma})\gamma^3\sigma^6)}{2(D(-1+e^{2t\gamma})+\gamma\sigma^2)^4}$ |
| $\beta_{1,4,0}$ | $= \frac{-(e^{2t\gamma}(D^3(2-6e^{4t\gamma}+e^{6t\gamma}+3e^{2t\gamma}(1+4t\gamma))-6D^2\gamma(1-e^{4t\gamma}+4e^{2t\gamma}t\gamma)\sigma^2+6D\gamma^2(1+e^{2t\gamma}(-1+2t\gamma))\sigma^4+2(-1+e^{2t\gamma})\gamma^3\sigma^6))}{4(D(-1+e^{2t\gamma})+\gamma\sigma^2)^4}$                                  |
| $\beta_{1,k,l}$ | $= 0 \quad \text{falls } (k < 0) \vee (k > 4) \vee (l < 0) \vee (l > 4 - k) \vee (k + l) \text{ ungerade}$                                                                                                                                                                                                  |

Tabelle 3.1: Störungskoeffizienten der ersten Ordnung:  $\phi_1(x, t) = g \sum_{k=0}^{2n+2} \sum_{l=0}^{2n+2-k} \beta_{1,k,l} x^k \mu^l$

## 3.2 Variationsstörungsreihe für die Wahrscheinlichkeitsverteilung

Die Betrachtung der bisherigen Ergebnisse für die Schwachkopplungsreihe der Wahrscheinlichkeitsverteilung zeigt überdeutlich, dass hier noch Verbesserungsbedarf besteht. Für sehr kleine Werte von  $g$  mag die Störungsreihe noch sinnvolle Ergebnisse liefern, für etwas größere  $g$  kommt es zum Teil zu vollkommen unphysikalischem Verhalten der Verteilung, was natürlich mit dem divergenten Verhalten der zugrundeliegenden Störungskoeffizienten zusammenhängt.

Diese Schwachkopplungsreihe soll nun mit Hilfe der Variationsstörungsrechnung in eine konvergente Reihe überführt werden, wie dies schon mit der Entwicklung für die Normierungskonstante in Kapitel 2 erfolgreich durchgeführt wurde. Durch die zusätzliche Orts- und Zeitabhängigkeit ergeben sich in der Ableitung der Variationsstörungsreihe gegenüber Kapitel 2 einige Änderungen. Ziel der folgenden Ableitung ist das Auffinden eines „Kochrezeptes“, mit dem sich aus den vorhandenen Schwachkopplungskoeffizienten die Koeffizienten der Variationsstörungsreihe effizient bestimmen lassen. Die zugrundeliegende Idee der Variationsstörungsrechnung wurde bereits in Abschnitt 2.3.1 erläutert und soll nun direkt auf die Fokker-Planck-Gleichung mit anharmonischer Drift

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathcal{P}(x, t) = \frac{\partial}{\partial x} [(\gamma x + gx^3) \mathcal{P}(x, t)] + D \frac{\partial^2}{\partial x^2} \mathcal{P}(x, t) \quad (3.61)$$

angewendet werden. Die Anfangsbedingung bei  $t = 0$  sei gegeben durch eine Normalverteilung der Breite  $\sigma$  mit Mittelwert  $\mu$ :

$$\mathcal{P}(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}. \quad (3.62)$$

Für diese Problemstellung wurde im vorhergehenden Kapitel eine Lösung in Form einer Schwachkopplungsreihe (3.8), (3.10) bestimmt.

Es wird nun im Sinne der Variationsstörungstheorie ein harmonisches Referenzsystem mit dem Driftkoeffizienten  $K_\omega(x) = -\omega x$  eingefügt:

$$\gamma x + gx^3 \longrightarrow \gamma x + \omega x + gx^3 - \omega x = (\gamma + \omega)x + (gx^3 - \omega x). \quad (3.63)$$

Nun soll der Term  $K_{\text{int}} = (gx^3 - \omega x)$  im Driftkoeffizienten als neuer Störterm aufgefaßt werden. Um hierfür eine Störungsreihe zu entwickeln, ersetzt man  $(gx^3 - \omega x)$  durch  $\lambda(gx^3 - \omega x)$ , entwickelt nach  $\lambda$  und setzt am Schluß  $\lambda = 1$ . Die neue Fokker-Planck-Gleichung lautet:

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathcal{P}(x, t) = \frac{\partial}{\partial x} [((\gamma + \omega)x + \lambda(gx^3 - \omega x)) \mathcal{P}(x, t)] + D \frac{\partial^2}{\partial x^2} \mathcal{P}(x, t). \quad (3.64)$$

Um an die Schwachkopplungsreihe für die Fokker-Planck-Gleichung der Form (3.61) anzuschließen, wird Gleichung (3.64) nun auf diese Form zurücktransformiert. Hierzu führt man folgende Variablentransformation ein:

$$\tilde{t} = \alpha t, \quad \frac{\partial}{\partial t} = \alpha \frac{\partial}{\partial \tilde{t}}, \quad \tilde{x} = \beta x, \quad \frac{\partial}{\partial x} = \beta \frac{\partial}{\partial \tilde{x}}. \quad (3.65)$$

Für die transformierte Fokker-Planck-Gleichung erhält man:

$$\alpha \frac{\partial}{\partial \tilde{t}} \tilde{\mathcal{P}}(\tilde{x}, \tilde{t}) = \beta \frac{\partial}{\partial \tilde{x}} \left[ \left( (\gamma + \omega - \lambda\omega) \frac{\tilde{x}}{\beta} + \lambda g \frac{\tilde{x}^3}{\beta^3} \right) \tilde{\mathcal{P}}(\tilde{x}, \tilde{\tau}) \right] + \beta^2 D \frac{\partial^2}{\partial \tilde{x}^2} \tilde{\mathcal{P}}(\tilde{x}, \tilde{\tau}). \quad (3.66)$$

Um das  $\beta^2$  im Diffusionsterm zu kompensieren muß offensichtlich  $\alpha = \beta^2$  gewählt werden mit dem Ergebnis:

$$\frac{\partial}{\partial \tilde{t}} \tilde{\mathcal{P}}(\tilde{x}, \tilde{t}) = \frac{\partial}{\partial \tilde{x}} \left[ \left( (\gamma + \omega - \lambda\omega) \frac{\tilde{x}}{\beta^2} + \lambda g \frac{\tilde{x}^3}{\beta^4} \right) \tilde{\mathcal{P}}(\tilde{x}, \tilde{\tau}) \right] + D \frac{\partial^2}{\partial \tilde{x}^2} \tilde{\mathcal{P}}(\tilde{x}, \tilde{\tau}). \quad (3.67)$$

Setzt man nun

$$\beta := \sqrt{1 + (\omega - \lambda\omega)/\gamma} \quad (3.68)$$

und führt die neue Kopplungskonstante  $\tilde{g}$  ein:

$$\tilde{g} = \frac{\lambda g}{\beta^4} \quad (3.69)$$

so ist die Fokker-Planck-Gleichung (3.64) formal auf die Ausgangsform (3.61) zurückgeführt:

$$\frac{\partial}{\partial \tilde{t}} \tilde{\mathcal{P}}(\tilde{x}, \tilde{t}) = \frac{\partial}{\partial \tilde{x}} \left[ (\gamma \tilde{x} + \tilde{g} \tilde{x}^3) \tilde{\mathcal{P}}(\tilde{x}, \tilde{\tau}) \right] + D \frac{\partial^2}{\partial \tilde{x}^2} \tilde{\mathcal{P}}(\tilde{x}, \tilde{\tau}), \quad (3.70)$$

wobei die neue Kopplungskonstante  $\tilde{g}$  über (3.68) vom Variationsparameter  $\omega$  abhängt. Es bleibt noch die Anfangsverteilung zu überprüfen. Aus Dimensionsbetrachtungen folgt, dass mit  $x$  auch  $\mu$  und  $\sigma$  entsprechend transformiert werden müssen:

$$\tilde{\mu} = \beta \mu, \quad \tilde{\sigma} = \beta \sigma. \quad (3.71)$$

Für die transformierte Anfangsverteilung erhält man:

$$\tilde{\mathcal{P}}(\tilde{x}, 0) = \frac{\beta}{\sqrt{2\pi\tilde{\sigma}^2}} e^{\frac{(\tilde{x}-\tilde{\mu})^2}{2\tilde{\sigma}^2}}. \quad (3.72)$$

Diese ist wie gewünscht auf eins normiert:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\mathcal{P}}(\tilde{x}, 0) d\tilde{x} = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\beta}{\sqrt{2\pi\tilde{\sigma}^2}} e^{\frac{(\tilde{x}-\tilde{\mu})^2}{2\tilde{\sigma}^2}} d\tilde{x} = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi\tilde{\sigma}^2}} e^{\frac{(\tilde{x}-\tilde{\mu})^2}{2\tilde{\sigma}^2}} d\tilde{x} = 1. \quad (3.73)$$

Mit den bekannten Schwachkopplungskoeffizienten läßt sich sofort eine Lösung in Form einer Störungsreihe in  $\tilde{g}$  angeben:

$$\tilde{\mathcal{P}}(\tilde{x}, \tilde{t}) = \tilde{\mathcal{P}}_0(\tilde{x}, \tilde{t}) \sum_{n=0}^{\infty} \tilde{g}^n \sum_{k=0}^{4n} \sum_{l=0}^{4n-k} \alpha_{n,k,l}(t) \tilde{\mu}^l \tilde{x}^k. \quad (3.74)$$

$\tilde{\mathcal{P}}_0(\tilde{x}, \tilde{t})$  ist dabei die Lösung des ungestörten Problems mit den Variablentransformationen (3.65) und (3.71). Auch für die Kumulantenentwicklung läßt sich die Lösung entsprechend übertragen.

Man erhält also eine Lösung des ursprünglichen Problems als Störungsreihe in  $\tilde{g}$  für den Störoperator  $gx^3 - \omega x$ , wenn man in der Lösung (3.8) oder (3.10) folgende Ersetzungen vornimmt:

$$x \rightarrow \tilde{x} = \beta x = \sqrt{1 + (\omega - \lambda\omega)/\gamma} x, \quad (3.75)$$

$$t \rightarrow \tilde{t} = \beta^2 t = (1 + (\omega - \lambda\omega)/\gamma) t, \quad (3.76)$$

$$\mu \rightarrow \tilde{\mu} = \beta\mu = \sqrt{1 + (\omega - \lambda\omega)/\gamma} \mu, \quad (3.77)$$

$$\sigma \rightarrow \tilde{\sigma} = \beta\sigma = \sqrt{1 + (\omega - \lambda\omega)/\gamma} \sigma, \quad (3.78)$$

$$g \rightarrow \tilde{\lambda} = \lambda g / \beta^4 = \lambda g / (1 + (\omega - \lambda\omega)/\gamma)^2, \quad (3.79)$$

nach  $\lambda$  entwickelt, und anschließend  $\lambda = 1$  setzt. Das gleiche Ergebnis erhält man deutlich einfacher, wenn man nur  $\gamma$  und  $g$  ersetzt, denn die ersten vier Variablentransformationen (3.75)-(3.78) lassen sich auch durch die Transformation von  $\gamma \rightarrow \gamma + \omega - \lambda\omega$  erreichen. Dies liegt daran, dass die Variablen  $x$ ,  $\mu$  und  $\sigma$  in der Störungsentwicklung immer von einem Faktor  $\gamma^{1/2}$  begleitet werden, während die Zeit  $t$  immer in der Form  $\gamma t$  auftritt.

Das gesuchte „Kochrezept“, mit dem die Variationsstörungsreihe aus der Schwachkopplungsentwicklung bestimmt wird, lautet damit für diesen Fall:

- ① überall  $\gamma$  und  $g$  ersetzen:  $\gamma \rightarrow \tilde{\gamma} = \gamma + \omega - \lambda\omega$ ,  
 $g \rightarrow \tilde{g} = \lambda g$ ,
  - ② um den Entwicklungspunkt  $\lambda = 0$  nach  $\lambda$  entwickeln,
  - ③  $\lambda = 1$  setzen.
- (3.80)

Oder in *MATHEMATICA*-Schreibweise ausgedrückt:

$$\mathcal{P}^{(N)}(x, t, \omega) = \text{Series}[\mathcal{P}^{(N)}(x, t) /. \{\gamma \rightarrow \gamma + \omega - \lambda\omega, g \rightarrow \lambda g\}, \{\lambda, 0, N\}] /. \{\lambda \rightarrow 1\}$$

Diese Vorgehensweise stimmt mit der in [KPP01] verwendeten überein. Die Autoren ersetzen zunächst  $\gamma$  durch  $K(1 + gr)$ , entwickeln dann nach  $g$  und setzen anschließend

$r = (\gamma - K)/gK$ :

$$\begin{aligned}
 F(\gamma, g) &\rightarrow \sum_{n=0}^{\infty} \left( \frac{d^n}{dg^n} F(K(1+gr), g) \right) \frac{g^n}{n!} \Big|_{r=(\gamma-K)/gK} \\
 &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{g^n}{n!} \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} \frac{\partial^k F}{\partial \gamma^k} (Kr)^k \frac{\partial^{n-k} F}{\partial g^{n-k}} \Big|_{r=(\gamma-K)/gK} \\
 &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{g^n}{n!} \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} \frac{\partial^k F}{\partial \gamma^k} \frac{\partial^{n-k} F}{\partial g^{n-k}} \left( \frac{\gamma - K}{g} \right)^k.
 \end{aligned} \tag{3.81}$$

Mit den Ersetzungen  $\gamma \rightarrow \gamma + \omega - \lambda\omega$  und  $g \rightarrow \lambda g$ , Entwickeln nach  $\lambda$  und Einsetzen von  $\lambda = 1$  erhält man:

$$\begin{aligned}
 F(\gamma, g) &\rightarrow \sum_{n=0}^{\infty} \left( \frac{d^n}{d\lambda^n} F(\gamma + \omega - \lambda\omega, \lambda g) \right) \frac{\lambda^n}{n!} \Big|_{\lambda=1} \\
 &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} \frac{\partial^k F}{\partial \gamma^k} (-\omega)^k \frac{\partial^{n-k} F}{\partial g^{n-k}} g^{n-k} \\
 &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{g^n}{n!} \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} \frac{\partial^k F}{\partial \gamma^k} \frac{\partial^{n-k} F}{\partial g^{n-k}} \left( \frac{-\omega}{g} \right)^k.
 \end{aligned} \tag{3.82}$$

Die Reihen stimmen gliedweise überein, wobei noch  $K = \gamma + \omega$  gewählt werden muß. Dem entspricht, dass in [KPP01] als Störoperator  $gx^3 + (\gamma - K)x$  betrachtet wird, wobei dort der Driftkoeffizient des eingefügten Brownschen Teilchens durch  $-Kx$  gegeben ist.

Nach Abschluss dieser Prozedur erhält man wieder eine Störungsreihe in  $g$ , nur dass jetzt in allen Termen eine zusätzliche  $\omega$ -Abhängigkeit hinzugekommen ist. Für die flache Störungsreihe erhält man somit:

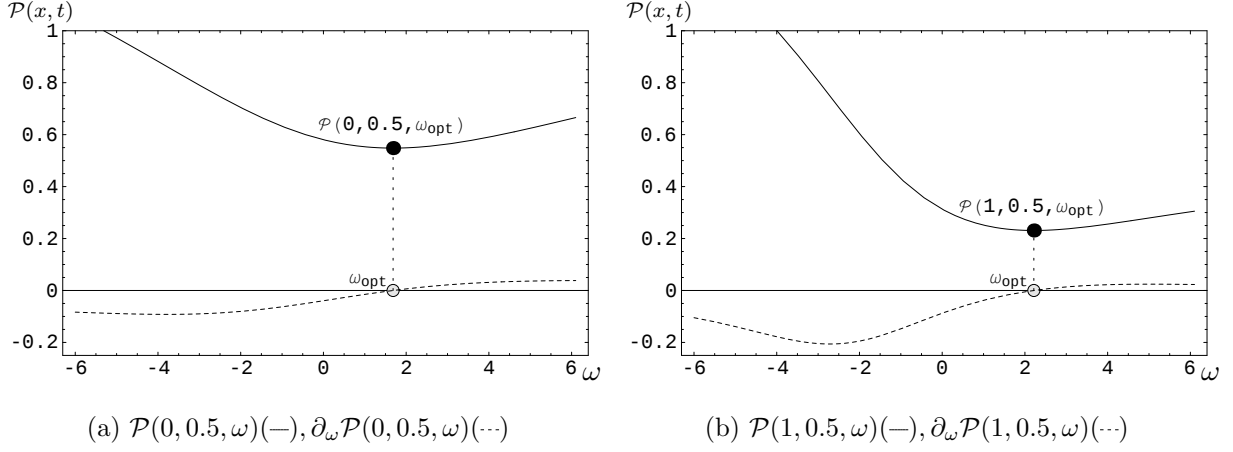
$$\mathcal{P}(x, t) \rightarrow \mathcal{P}(x, t, \omega) = \mathcal{P}_0(x, t, \omega) \sum_{n=0}^{\infty} g^n \phi_n(x, t, \omega). \tag{3.83}$$

Die Variationsstörungsreihe für die Kumulantenentwicklung lautet:

$$\mathcal{P}_K(x, t) \rightarrow \mathcal{P}_K(x, t, \omega) = \mathcal{P}_0(x, t, \omega) \exp \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} g^n \chi_n(x, t, \omega) \right\}. \tag{3.84}$$

### 3.3 Bestimmung des Variationsparameters

Wie soll nun der optimale Wert für den Variationsparameter im Fall der Wahrscheinlichkeitsverteilung bestimmt werden? Zunächst unterscheidet sich die Argumentation hier nicht von der im Falle der Variationsstörungsreihe für die Normierung im Abschnitt 2.3.3:



**Abbildung 3.9:** Wahrscheinlichkeitsdichte  $\mathcal{P}(x, t, \omega)$  und deren Ableitung nach  $\omega$  in Abhängigkeit des Variationsparameters  $\omega$  zum festen Zeitpunkt  $t = 0.5$  für  $x = 0$  und  $x = 1$ .

Für die exakte Lösung spielt das harmonische Referenz-Potential nach Konstruktion keine Rolle, da es durch Addition einer 0 hinzugefügt wurde. Die exakte Lösung — und damit die unendlichen Reihen<sup>3</sup> in (3.83) und (3.84) — ist also grundsätzlich unabhängig von  $\omega$ :

$$\frac{\partial}{\partial \omega} \mathcal{P}(x, t, \omega) = \frac{\partial}{\partial \omega} \left( \mathcal{P}_0(x, t, \omega) \times \sum_{n=0}^{\infty} g^n \phi_n(x, t, \omega) \right) \equiv 0. \quad (3.85)$$

In jeder endlichen Ordnung  $N$  der Störungsreihe wird die Lösung jedoch im allgemeinen vom Parameter  $\omega$  abhängen. Dies legt die Forderung nahe, dass der Parameter  $\omega$  so gewählt werden sollte, dass diese Abhängigkeit möglichst gering ausfällt, dass also die Näherungslösung in  $N$ -ter Ordnung

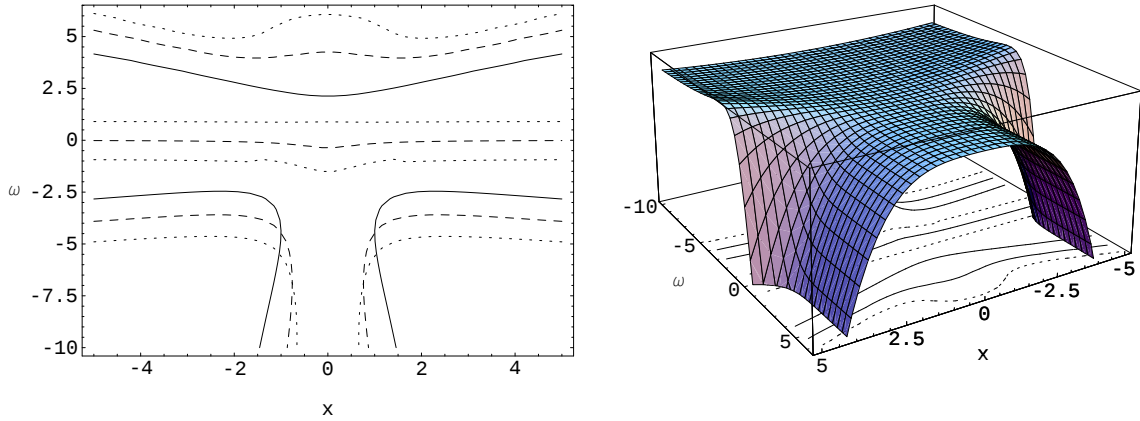
$$\mathcal{P}^{(N)}(x, t, \omega) = \mathcal{P}_0(x, t, \omega) \times \sum_{n=0}^N g^n \phi_n(x, t, \omega) \quad (3.86)$$

möglichst stationär gegenüber Änderungen des Parameters  $\omega$  ist:

$$\left. \frac{\partial}{\partial \omega} \mathcal{P}^{(N)}(x, t, \omega) \right|_{\omega=\omega_{\text{opt}}} \stackrel{!}{=} 0. \quad (3.87)$$

Bis hierher stimmt die Argumentation mit der im Kapitel 2 für die Normierungskonstante überein. Bedingung (3.87) ist in Abbildung 3.9 für  $t = 0.5$  und  $x = 0$  bzw.  $x = 1$  illustriert. Für verschiedene Werte von  $x$  ergeben sich unterschiedliche Nullstellen der Ableitung  $\partial_\omega \mathcal{P}(x, t, \omega)$ , was zunächst nicht verwundert. Im Fall der Normierungskonstante

<sup>3</sup>Die Aussagen in diesem Abschnitt treffen gleichermaßen auf die flache wie auch auf die kumulative Störungsreihe zu. Stellvertretend werden die Formeln nur für die flache Störungsreihe angegeben, um Wiederholungen zu vermeiden.



**Abbildung 3.10:** **Links:** Nullstellen der ersten (—), zweiten (--) und dritten (---) Ableitung der Kumulante  $W^{(1)}(x, 1, \omega) = \log(\mathcal{P}^{(1)}(x, 1, \omega))$  nach dem Variationsparameter  $\omega$  für den festen Zeitpunkt  $t = 1$ . **Rechts:**  $W^{(1)}(x, 1, \omega)$  über  $x$  und  $\omega$ . Jeweils mit  $\gamma = 1, g = 1, D = 1, \sigma = 0.1, \mu = 0$ .

ging es nur um die Optimierung einer *Zahl*, so dass eine Orts- oder Zeitabhängigkeit der Nullstellen nicht auftreten konnte. Hier soll jedoch eine *Verteilungsfunktion* optimiert werden, so dass die Nullstellen im allgemeinen eine Orts- und Zeitabhängigkeit aufweisen werden:

$$\omega_{\text{opt}} = \omega_{\text{opt}}(x, t). \quad (3.88)$$

Das Problem dabei ist nun, dass dies der ursprünglichen Annahme widerspricht, wonach der Variationsparameter  $\omega$  eine Konstante sein sollte, die zwar auf geeignete Weise zu optimieren ist, aber doch für das gesamte Problem nur einen einzigen Zahlenwert annimmt. Insbesondere wurde bei der Ableitung der Variationsstörungsreihe davon ausgegangen, dass die Differentialoperatoren in der Fokker-Planck-Gleichung mit  $\omega$  vertauschen, was aber mit (3.88) im allgemeinen nicht mehr stimmt. Daher ist natürlich  $\mathcal{P}^{(N)}(x, t, \omega)$  mit dem auf diese Weise bestimmten Variationsparameter keine Lösung der ursprünglichen Fokker-Planck-Gleichung mehr. Andererseits ist aber auch  $\mathcal{P}^{(N)}(x, t)$  keine exakte Lösung dieser Gleichung, sondern erfüllt diese nur bis auf Terme der Ordnung  $\mathcal{O}(g^{N+1})$ . Ziel des Variationsverfahrens ist es, diese Näherungslösung für die vorliegende Ordnung zu verbessern. Dass die verbesserte Lösung die Fokker-Planck-Gleichung auch nicht exakt erfüllt, ist zu erwarten und spielt in diesem Zusammenhang keine Rolle. Wichtig ist, in wie weit sich die Lösung für eine gegebene Ordnung der Störungsentwicklung verbessern lässt, sowie die Beobachtung, dass die Variationsstörungsentwicklung mit steigender Ordnung ( $N \rightarrow \infty$ ) vom Variationsparameter  $\omega$  unabhängig wird. Damit nimmt auch die Abhängigkeit des optimalen Wertes des Parameters  $\omega$  von  $x$  und  $t$  mit steigender Ordnung ab.

Es ist im allgemeinen weder sicher, dass (3.87) eine eindeutige Lösung besitzt, noch dass es überhaupt eine Nullstelle der ersten Ableitung gibt. Ob und wieviele Lösungen man findet hängt zusätzlich auch noch vom betrachteten  $x$  und  $t$  ab. Wenn die erste Ableitung

keine Nullstelle besitzt, kann man auch höhere Ableitungen heranziehen:

$$\left. \frac{\partial^k}{\partial \omega^k} \mathcal{P}^{(N)}(x, t, \omega) \right|_{\omega=\omega_{\text{opt}}} \stackrel{!}{=} 0. \quad (3.89)$$

In Abbildung 3.10 sind die Nullstellen für die ersten drei Ableitungen der Kumulante erster Ordnung in  $g$  in der  $x$ - $\omega$ -Ebene dargestellt. Für die erste Ableitung fallen diese mit den Nullstellen von (3.89) zusammen. Für höhere Ableitungen ergeben sich bei Betrachtung der Kumulante leicht andere Ergebnisse als wenn man die Ableitung der Wahrscheinlichkeitsdichte  $\mathcal{P}^{(N)}(x, t, \omega)$  selbst betrachtet.

Selbst wenn die erste Ableitung im betrachteten Bereich eine eindeutige Nullstelle besitzt, stellt sich die Frage, ob diese das bestmögliche Ergebnis für die Variationsstörungsreihe liefert, oder ob höhere Ableitungen bessere Werte liefern. Es werden also in den folgenden Untersuchungen für den Variationsparameter Kandidaten der folgenden Form herangezogen:

$$\omega_{\text{opt}} \longrightarrow \{\omega_i(x, t; k)\} \quad i\text{-te Nullstelle der } k\text{-ten Ableitung.} \quad (3.90)$$

### 3.4 Normierung der Variationsstörungsreihe

In den Abschnitten 3.1.5 und 3.1.6 wurde die Normierung der Störungsreihen diskutiert und dargelegt, dass der Normierungsfaktor im Falle der Kumulantenentwicklung für jeden Zeitpunkt  $t$  und jede Ordnung  $N$  der Reihenentwicklung neu berechnet werden muß:

$$\mathcal{N}_K^{(N)}(t) = \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{P}_0(x, t) \exp \left\{ \sum_{n=0}^N g^n \chi_n(x, t) \right\} dx \right]^{-1}. \quad (3.91)$$

Eine auf diese Weise normierte Kumulantenentwicklung kann nicht mit dem Kochrezept-Verfahren (3.80) in eine Variationsstörungsreihe entwickeln werden, weil die Normierungskonstante bei  $g = 0$  (und damit bei  $\lambda = 0$ ) eine wesentliche Singularität besitzt. Dieser Pfad ist in untenstehendem Diagramm mit einem  $\nabla$  gekennzeichnet. Man kann jedoch erst die Variationsstörungsreihe bestimmen, und dann nachnormieren, was dem  $\Rightarrow$ -Pfad in folgendem Diagramm entspricht:

$$\begin{array}{ccc} \mathcal{P}_K^{(N)}(x, t) & \xrightarrow{\text{Variationsstörungsentwicklung}} & \mathcal{P}_K^{(N)}(x, t, \omega) \\ \text{Normierung} \downarrow & & \downarrow \text{Normierung} \\ \mathcal{N}_K^{(N)}(t) \mathcal{P}^{(N)}(x, t) & \xrightarrow{\nabla} & \mathcal{N}_K^{(N)}(t, \omega) \mathcal{P}_K^{(N)}(x, t, \omega) \end{array} \quad (3.92)$$

Dadurch hängt nun auch die Normierungskonstante  $\mathcal{N}_K^{(N)}(t, \omega)$  vom Variationsparameter  $\omega$  ab und man erhält für jeden *konstanten* Wert von  $\omega_{\text{opt}}$  eine normierte Wahrscheinlichkeitsdichte. Die im vorangegangenen Abschnitt beschriebene Methode, den Variationsparameter für jedes  $x$  durch Forderung nach Stationarität der Lösung zu bestimmen, ist

jedoch lokaler Natur. Dies schlägt sich wie beschrieben in einem *ortsabhängigen* optimierten Variationsparameter  $\omega_{\text{opt}}(x)$  nieder, so dass die Normierung im allgemeinen selbst dann nicht erhalten bleibt, wenn die Variationsstörungsreihe zuvor wie in (3.92) normiert wurde. Wollte man dies erreichen, so müßte der optimale Wert  $\omega_{\text{opt}}(x)$  des Variationsparameters für jedes  $x$  unter der Nebenbedingung bestimmt werden, dass das Normierungsintegral über alle  $x$  konstant bleibt. Da der Integrand wiederum von  $\omega_{\text{opt}}(x)$  abhängt, führt diese Forderung auf eine Integralgleichung, die das Auffinden des optimalen Variationsparameterwertes um ein Vielfaches verkompliziert.

Es muß also in jedem Fall nach Bestimmung des optimalen Wertes  $\omega_{\text{opt}}(x)$  nachnormiert werden. Bleibt die Frage, ob es sinnvoll ist, vor der Optimierung des Variationsparameters zu normieren, oder ob man diesen Schritt besser nur einmal ganz am Ende der Rechnung durchführt. Beide Methoden wurden untersucht: den Vorteil, mit einer für konstante  $\omega$  normierten Verteilung zu arbeiten bezahlt man mit einer deutlich komplizierteren  $\omega$ -Abhängigkeit der Variationsstörungsreihe. In der praktischen Anwendung nimmt der Aufwand bereits in der ersten Ordnung durch vorhergehende Normierung um ein Vielfaches zu, so dass dieses Verfahren insbesondere für höhere Ordnungen als nicht praktikabel erscheint. Aus diesem Grund wurde die Bestimmung der Normierung in allen untersuchten Fällen bis zum Ende aufgeschoben. Hier sei noch einmal die Vorgehensweise anschaulich dargestellt:

$$\mathcal{P}_K^{(N)}(x, t) \xrightarrow{\textcircled{1}} \mathcal{P}_K^{(N)}(x, t, \omega) \xrightarrow{\textcircled{2}} \mathcal{P}_K^{(N)}(x, t, \omega_{\text{opt}}(x)) \xrightarrow{\textcircled{3}} \mathcal{N}_K^{(N)}(t) \mathcal{P}_K^{(N)}(x, t, \omega_{\text{opt}}(x))$$

- ① Die nicht-normierte Schwachkopplungsreihe  $N$ -ter Ordnung mittels (3.80) in eine Variationsstörungsreihe umentwickeln.
- ② Für feste Werte von  $x$  und  $t$  mit der Bedingung (3.89) den optimalen Wert  $\omega_{\text{opt}}(x, t)$  des Variationsparameters bestimmen.
- ③ Die Wahrscheinlichkeitsverteilung zu jedem Zeitpunkt für diese Werte des Variationsparameters nachnormieren.

## 3.5 Numerische Lösung

In Kapitel 2 bei den Untersuchungen an der Normierungskonstanten, war es einfach, die Güte der Variationsstörungsrechnung zu beurteilen, weil für alle Größen exakte Ergebnisse zum Vergleich bereitstanden. Für die Wahrscheinlichkeitsverteilung existieren analytische Resultate nur für  $t = 0$  und  $t \rightarrow \infty$ : Die Anfangsverteilung und die stationäre Lösung. Dies sind auch gleichzeitig die Zeitregionen, für die schon die Schwachkopplungsreihen gute Ergebnisse liefern. Um die Güte der Variationsstörungsrechnung für intermediäre

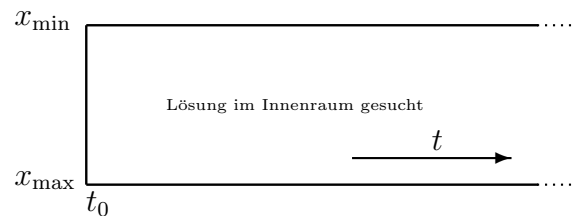
Zeitpunkte über das Augenmaß hinaus beurteilen zu können, soll in diesem Abschnitt eine numerische Lösung des gegebenen Problems bereitgestellt werden, an der die Ergebnisse der Variationsstörungsrechnung gemessen werden können.

Numerische Lösungsverfahren für partielle Differentialgleichungen bilden ein umfangreiches Forschungsfeld, auf das an dieser Stelle nicht genauer eingegangen werden kann. Eine gute Einführung in dieses Themengebiet findet man z.B. in Kapitel 19 von [PTVF93].

Es soll nun kurz auf die in diesem Zusammenhang wesentlichen Eigenschaften des betrachteten Systems sowie mögliche Problemquellen bei der numerischen Lösung eingegangen werden. Die betrachtete partielle Differentialgleichung hat die Form:

$$\frac{\partial}{\partial t}\mathcal{P}(x,t) = -\frac{\partial}{\partial x}[K(x,t)\mathcal{P}(x,t)] + D\frac{\partial^2}{\partial x^2}\mathcal{P}(x,t), \quad (3.93)$$

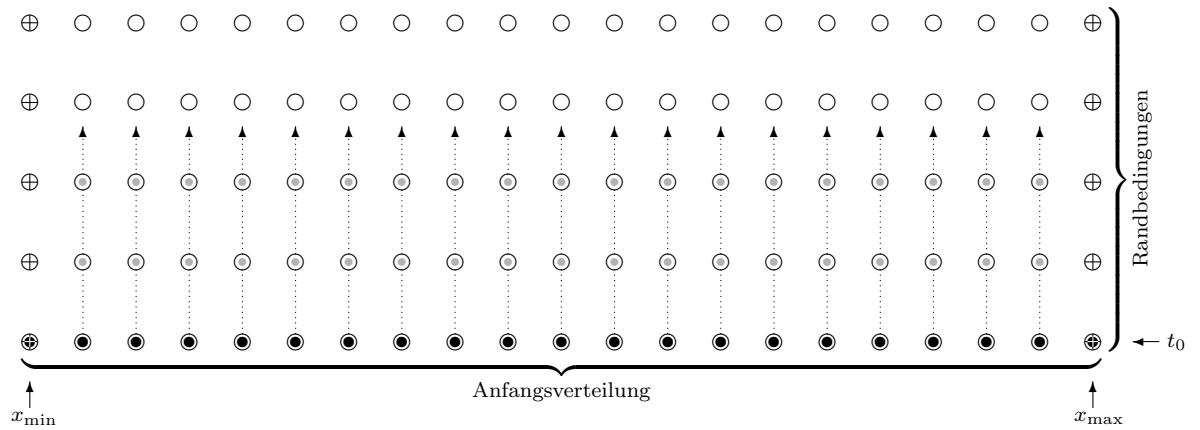
wobei eine Anfangsverteilung für  $t = t_0$  vorgegeben ist. Es handelt sich um einen klassischen Vertreter eines *Anfangswertsproblems*. Die analytische Lösung existiert auf dem Intervall  $-\infty < x < \infty$  und  $t \geq t_0$ . Eine Lösung durch numerische Integration kann aber nur für ein endliches Gebiet bestimmt werden:



Statt der natürlichen Randbedingungen  $\mathcal{P}(x,t) = 0$  bei  $x = \pm\infty$  müssen dem numerischen Verfahren die Randwerte bei  $x_{\min}$  und  $x_{\max}$  für jeden Zeitpunkt geliefert werden. Desweiteren ist die Anfangsverteilung  $\mathcal{P}(x,t_0)$  auf dem Intervall  $[x_{\min}, x_{\max}]$  vorzugeben. An das numerische Lösungsverfahren sind dann folgende Forderungen zu stellen. Es soll:

- die Lösung für beliebiges  $t > t_0$  liefern,
- stabil arbeiten,
- die Lösung mit ausreichender Genauigkeit bestimmen.

Stabilität und Genauigkeit sind dabei zwei grundlegend unterschiedliche Dinge. So kann es z.B. passieren, dass das Verfahren bei dem Versuch, die Genauigkeit zu erhöhen, instabil wird und „explodiert“. Ist das zugrundeliegende physikalische Problem bereits instabil, wie es z.B. für eine Fokker-Planck-Gleichung mit negativem Diffusionskoeffizienten der Fall wäre, so ist es auch sinnlos, nach einem stabilen numerischen Lösungsverfahren zu suchen. Mit positivem Diffusionskoeffizienten ist das System jedoch sehr stabil, da es wie schon zuvor beschrieben für beliebige Anfangsbedingungen gegen eine stationäre Lösung konvergiert. Dies muß also auch für die numerische Lösung gelten.



**Abbildung 3.11:** Numerische Lösung des Anfangswertproblems mit Hilfe der *Method of Lines*.

Hier soll als die Lösung mit Hilfe der **NDSolve**-Routine aus *MATHEMATICA*<sup>®</sup> bestimmt werden. Diese nutzt für 1+1-dimensionale PDE's wie (3.93) die sogenannte *Method of Lines*: Das  $x$ -Intervall wird in  $K$ -Teilintervalle der Größe  $\Delta x$  eingeteilt, wodurch  $K - 2$  Linien parallel zu  $x = x_{\min}$  definiert sind. Dies ist in Abbildung 3.11 dargestellt. Auf der  $k$ -ten Linie werden nun die Differentialoperatoren in  $x$  diskretisiert. Für den Diffusionsterm kann man beispielsweise verwenden<sup>4</sup>:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \mathcal{P}(x, t) \rightarrow \frac{\mathcal{P}(x_{k+1}, t) - 2\mathcal{P}(x_k, t) + \mathcal{P}(x_{k-1}, t)}{(\Delta x)^2}, \quad (3.94)$$

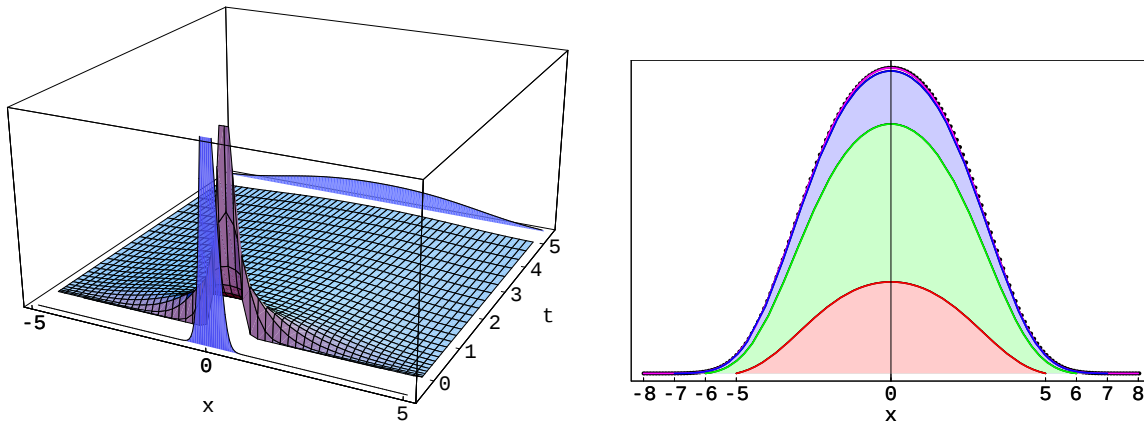
wobei  $x_k = x_{\min} + k\Delta x$  gesetzt wurde. Schreibt man weiterhin vereinfachend  $V_k(t) := \mathcal{P}(x_k, t)$  so erhalten man für jede Linie eine gewöhnliche Differentialgleichung (ODE) in  $t$  der Form:

$$\frac{d}{dt} V_k(t) = \frac{V_{k+1}(t) - 2V_k(t) + V_{k-1}(t)}{(\Delta x)^2}. \quad (3.95)$$

Insgesamt erhält man also ein System von  $K - 2$  gekoppelten ODE's. Löst man dieses nun mit impliziten Methoden, was der Stabilität zugute kommt, so sind mitunter große Gleichungssysteme zu lösen, was wiederum die Genauigkeit beeinträchtigen kann. Daher ist es nicht unbedingt sicher, dass sich die Lösung einfach dadurch verbessern läßt, dass man eine feinere Diskretisierung mit mehr Linien wählt. Diese Darstellung ist u.a. deshalb vereinfacht, weil *MATHEMATICA*<sup>®</sup> sicherlich eine adaptive Schrittweitensteuerung einsetzt, um die gewünschte Genauigkeit zu erreichen.

Die räumliche Breite der numerischen Lösung ist durch die anfängliche Wahl von  $x_{\min}$  und  $x_{\max}$  festgelegt. Diese ist so zu wählen, dass die stationäre Lösung, über die man in analytischer Form verfügt, noch gut in dieses Intervall hineinpaßt. Die Randbedingungen bei  $x_{\min}$  und  $x_{\max}$  fallen für  $t = t_0$  mit den Anfangsbedingungen zusammen (in

<sup>4</sup>Dies ist nur ein Beispiel einer möglichen Diskretisierung. Welche Methode *MATHEMATICA*<sup>®</sup> genau verwendet ist nicht bekannt. Siehe hierzu auch [Wol99].

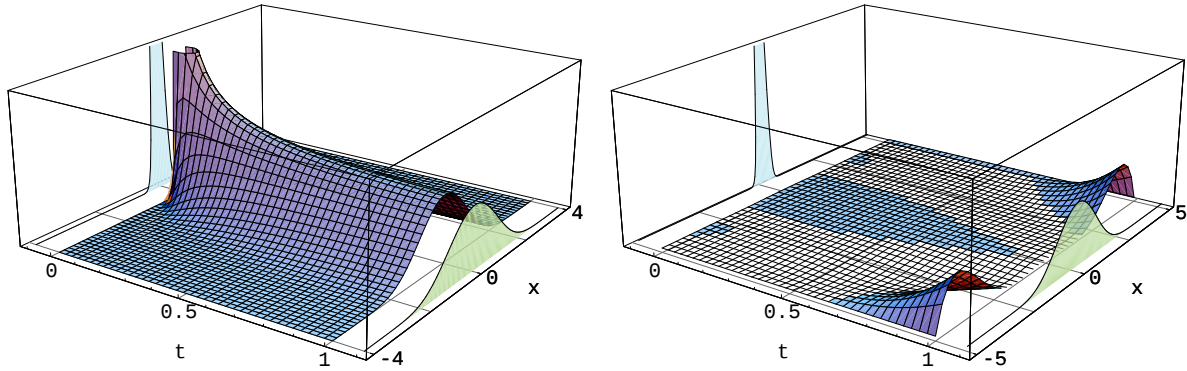


**Abbildung 3.12:** **Links:** Numerische Lösung für zu kleines  $x$ -Intervall sowie Anfangsverteilung für  $t = 0$  und stationäre Lösung für  $t \rightarrow \infty$ . **Rechts:** numerische Lösung bei  $t = 5$  für unterschiedlich große  $x$ -Intervalle  $[-5, 5]$ ,  $[-6, 6]$ ,  $[-7, 7]$  und  $[-8, 8]$ . Die Lösung für  $[-8, 8]$  fällt auf dem Plot mit der stationären Lösung zusammen (jeweils für  $g = 0.1, \gamma = 1, D = 1, \mu = 0, \sigma = 0.2$ ).

Abbildung 3.11 durch  $\otimes$  gekennzeichnete Punkte). Da die Randbedingungen nicht von der Zeit abhängen, gelten sie auch für beliebig späte Zeitpunkte. Weicht nun die stationäre Verteilung bei  $x_{\min}$  oder  $x_{\max}$  signifikant von der Anfangsverteilung ab, so wird es im allgemeinen zu Problemen bei der numerischen Lösung kommen. Dieser Fall tritt schnell ein, wenn die Anfangsverteilung relativ schmal, die stationäre Verteilung jedoch relativ breit ist: für große Zeiten ist die numerische Lösung dann sozusagen bei  $x_{\min}$  und  $x_{\max}$  mit zu kleinen Randwerten „festgenagelt“, wodurch die gesamte Lösung langsam runtergezogen wird. Dieses Problem ist in Abbildung 3.12 illustriert.

Das  $x$ -Intervall einfach zu vergrößern hilft indes auch nicht immer, wie in Abbildung 3.13 dargestellt ist. Obwohl **NDSolve** in dem Beispiel für das  $x$ -Intervall  $[-4, 4]$  noch eine vernünftige Lösung liefert, kommt schon bei ansonsten unveränderten Bedingungen auf dem Intervall  $[-5, 5]$  ein vollkommen falsches Ergebnis heraus. Dies liegt daran, dass in letzterem Fall für die Randbedingungen zu *kleine* Werte auftreten, die zu numerischen Instabilitäten führen. Vermutlich treten die Randwerte innerhalb des Lösungsalgorithmus für das System gewöhnlicher Differenzialgleichungen als Nenner auf. Grundsätzlich gilt, dass Probleme mit der begrenzten Maschinengenauigkeit immer dann zu erwarten sind, wenn Werte sehr unterschiedlicher Grössenordnung in die Berechnung eingehen. Für die Beispiele aus Abbildung 3.13 waren die Randwerte im Fall (a)  $\mathcal{P}(-4, 0) \approx 10^{-154}$  beziehungsweise im Fall (b)  $\mathcal{P}(-5, 0) \approx 10^{-241}$ . Mit den Optionen **MaxSteps** sowie **StartingStepSize** lassen sich mit **MATHEMATICA**® auch für kritische Fälle häufig noch numerische Lösungen bestimmen. Man sollte dann allerdings die Warnungen ernst nehmen, die das Programm ausgibt, wenn die vorgebene Genauigkeit nicht mehr eingehalten werden kann.

Zur Bestimmung der numerischen Vergleichslösung geht man am besten folgendermassen

(a) Stabile Lösung auf  $x$ -Intervall  $[-4, 4]$ (b) Instabile Lösung auf  $x$ -Intervall  $[-5, 5]$ 

**Abbildung 3.13:** Numerische Lösung für  $g = 0.1, \gamma = 1, D = 1, \mu = 0, \sigma = 0.15$  sowie Anfangsverteilung für  $t = 0$  und stationäre Lösung für  $t \rightarrow \infty$ . Der in (b) heller dargestellte Bereich des 3D-Plots bezeichnet negative Werte.

vor: zunächst ermitteln man die ungefähre Breite der stationären Lösung für den betrachteten Fall und wählt das  $x$ -Intervall entsprechend. Dann prüft man die Randwerte, die sich aus den Werten der Anfangsverteilung bei  $x_{\min}$  und  $x_{\max}$  ergeben. Sind diese zu klein, muß die Anfangsverteilung breiter gewählt werden. Nach dem bisher gesagten ist klar, dass sich eine  $\delta$ -Funktion als Anfangsbedingung numerisch nur schwer behandeln läßt. Gerade die Notwendigkeit, numerisch mit einer ausreichend breiten Anfangsverteilung zu arbeiten, hat letztlich die Bestimmung der Störungsreihe für beliebige Gaußkurven als Anfangsverteilung motiviert. Die Lösung in Abbildung 3.13(a) erhält man beispielsweise durch die folgenden *MATHEMATICA*® Befehle:

```
In[1]:= x_min = -4; x_max = 4; t_0 = 0; t_max = 1;
```

```
In[2]:= P_0[x_, t_] = Sqrt[gamma / (2 * pi * (d - ((d - gamma * sigma^2) * Exp[-2 * gamma * t])))] * Exp[-gamma / (2 * (d - ((d - gamma * sigma^2) * Exp[-2 * gamma * t])) * (x - mu * Exp[-gamma * t])^2];
```

```
In[3]:= P[x_, t_] = p[x, t] /. First[
  NDSolve[{D[p[x, t], t] == D_x((gamma * x + g * x^3) * p[x, t]) + d * D_x,x[p[x, t],
    p[x, t_0] == P_0[x, t_0],
    p[x_min, t] == P_0[x_min, t_0],
    p[x_max, t] == P_0[x_max, t_0]] /.
  {d -> 1, gamma -> 1, g -> .1, mu -> 0, sigma -> .15}, p, {x, x_min, x_max}, {t, t_0, t_max}]]
```

NDSolve::mxsst : Using maximum number of grid points 200 allowed by the MaxSteps option.

```
Out[3]= InterpolatingFunction[{{-4., 4.}, {0., 1.}}, <>][x, t]
```

```
In[4]:= Plot3D[P[x, t], {x, x_min, x_max}, {t, t_0, t_max}, PlotPoints -> 40];
```

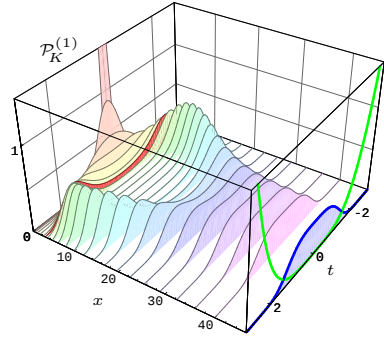
## 3.6 Variationsstörungsrechnung für die Wahrscheinlichkeitsverteilung

Die Ausführungen in Abschnitt 3.1.7 haben deutlich gemacht, dass die bisherigen Ergebnisse der Störungsreihen noch verbesserungsbedürftig sind. Es gibt also hier viel für die Variationsstörungsrechnung zu tun.

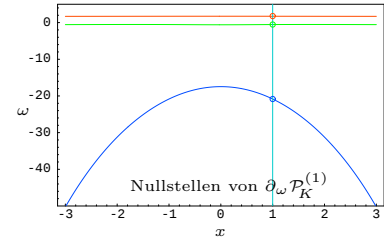
Zunächst soll die Bestimmung einer Variationsstörungslösung für die Wahrscheinlichkeitsverteilung detailliert an einem Beispiel dargestellt werden. Hierzu sei der Fall aus Abbildung 3.7(d) herausgegriffen, für den folgende Parameterwerte gelten:

$$g = 1, \gamma = 0.1, D = 1, \sigma = 0.1 \text{ und } \mu = 0.$$

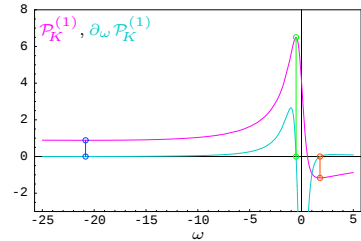
Für die Optimierung sei der Zeitpunkt  $t = 3$  betrachtet, für den die Kumulantenentwicklung ein offensichtlich falsches Ergebnis liefert. Die Verteilung bei  $t = 3$  ist in der Abbildung rechts rot hervorgehoben.



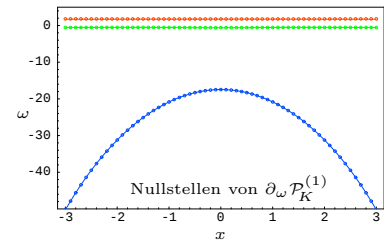
Zuerst verschafft man sich einen Überblick über die Nullstellenstruktur der Ableitung (3.87). In der Abbildung rechts sind die Nullstellen der ersten Ableitung in der  $x$ - $\omega$ -Ebene dargestellt. Offenbar gibt es drei Kandidaten, die zum Zeitpunkt  $t = 3$  für alle  $x$  existieren. Vermutlich wird die größte positive Nullstelle (rot) die besten Ergebnisse liefern.



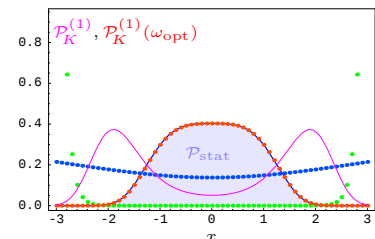
Rechts ist der Schnitt bei  $x=1$  aus der vorhergehenden Abbildung über  $\omega$  dargestellt. Man erkennt, dass die mittlere Nullstelle zu einem vergleichsweise spitzen Maximum gehört. Für die größte Nullstelle macht das Extremum wie gewünscht einen stationären Eindruck, die negative Nullstelle liegt so weit in Negativen, dass sie nicht wirklich in Frage kommt.

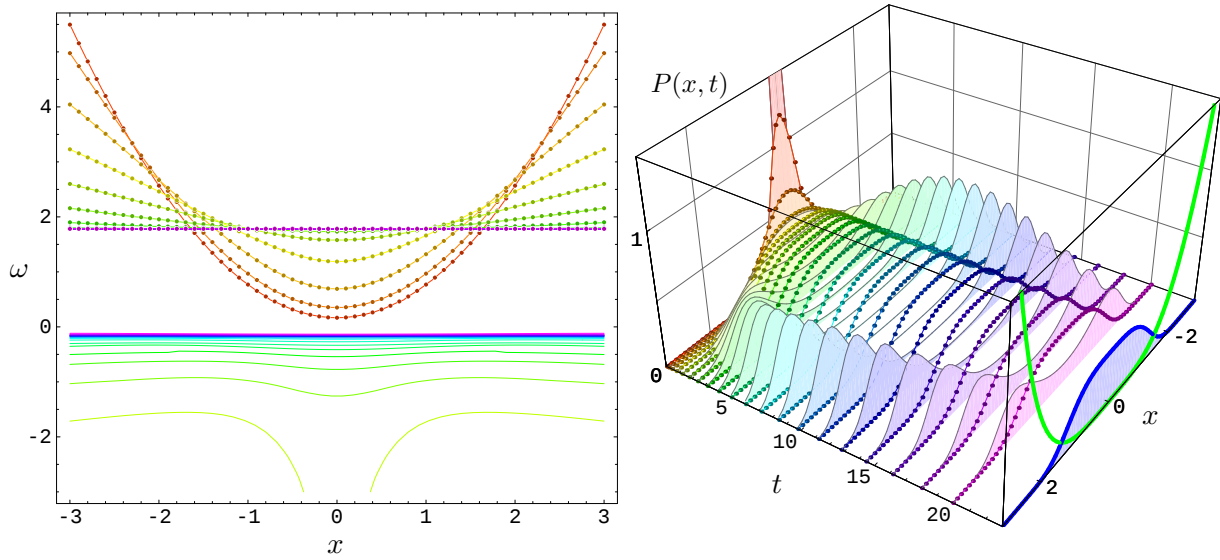


Nun wird die  $x$ -Abhängigkeit der Nullstellen bestimmt. Eine solche ist auch bei den roten und grünen Nullstellen vorhanden, beim verwendeten Maßstab jedoch nicht zu erkennen. Die Schrittweite  $\Delta x$  muß klein genug gewählt werden, damit die Verteilung am Ende ausreichend gut approximiert wird. Dies ist vor allem auch wichtig, um den Fehler beim Nachnormieren klein zu halten.



In der Abbildung rechts ist nun das Endergebnis der Variationsstörungsrechnung für alle drei Nullstellen nach dem Nachnormieren dargestellt. Die magentafarbene Lösung der Kumulantenentwicklung kann mit der roten Variationslösung deutlich verbessert werden. Sie unterscheidet sich zu dieser Zeit ( $t = 3$ ) kaum noch von der stationären Lösung.



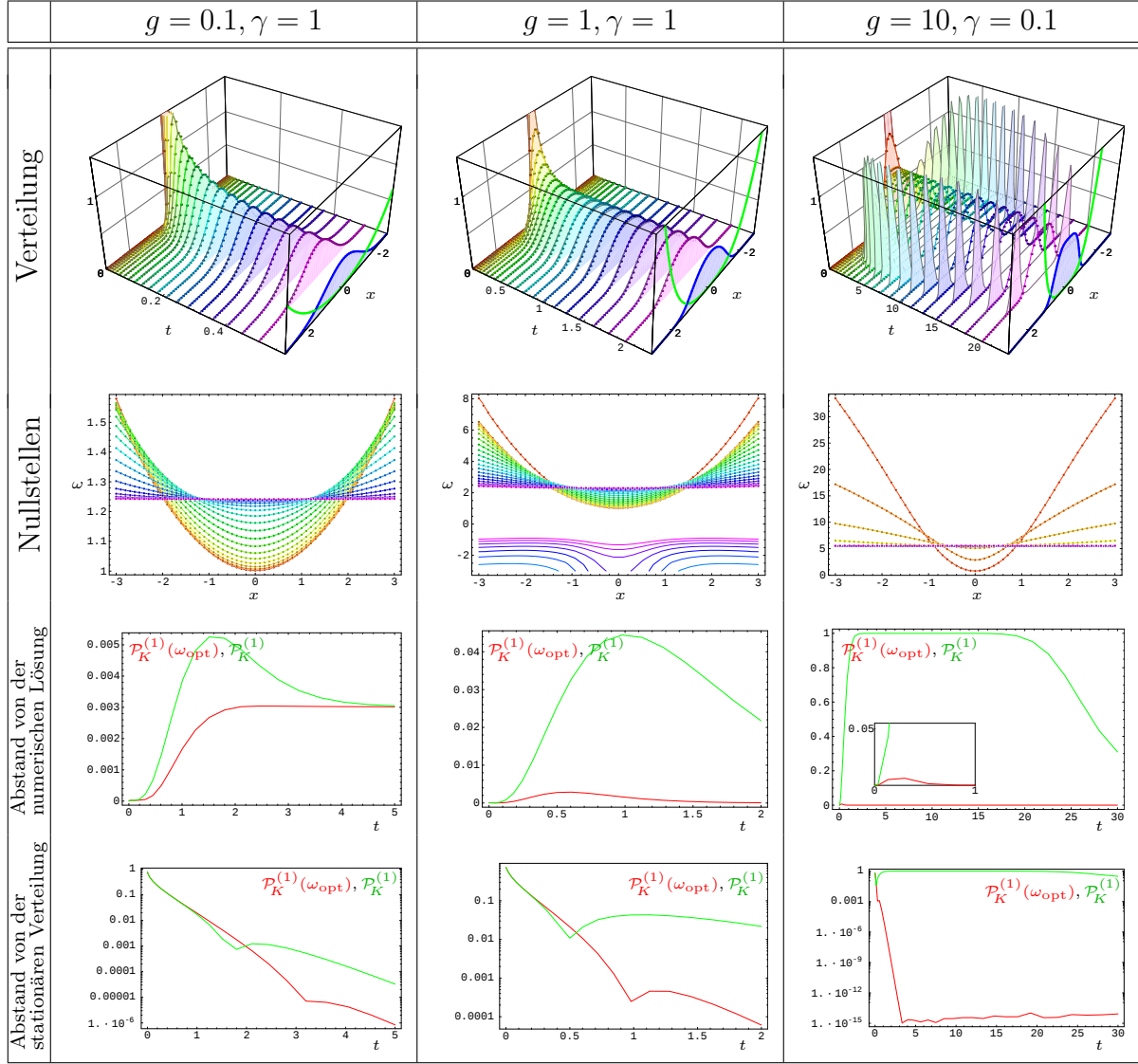


(a) Nullstellen der ersten Ableitung der Kumulante für verschiedene Zeiten  $t$  in der  $x$ - $\omega$ -Ebene.

(b) Kumulantenentwicklung (Flächen), Variationsstörungslösung (Punkte) und numerische Lösung (Linien zwischen den Punkten).

**Abbildung 3.14:** Optimierung der zeitlichen Entwicklung der Wahrscheinlichkeitsverteilung für den Fall aus Abbildung 3.7(d):  $g = D = 1$ ,  $\gamma = 0.1$ ,  $\sigma = 0.1$  und  $\mu = 0$ . **links:** Nullstellen der ersten Ableitung der Kumulante. Die Farben markieren unterschiedliche Zeitpunkte und gehören zu den entsprechenden Kurven in der Abbildung rechts. **rechts:** Die Punkte korrespondieren mit den Nullstellen in der Abbildung links. Die numerische Lösung ist durch die feinen Linien zwischen den Punkten dargestellt.

Mit den bisher beschriebenen Schritten konnte die Kumulantenentwicklung erster Ordnung zum Zeitpunkt  $t = 3$  optimiert werden. Diese Rechnung ist nun für verschiedene Zeiten durchzuführen, um die vollständige Zeitentwicklung der Wahrscheinlichkeitsverteilung zu optimieren. In Abbildung 3.14 ist das Ergebnis einer solchen Rechnung auf dem Zeitintervall  $0 \leq t \leq 20$  für die Parameterwerte  $g = D = 1$ ,  $\gamma = 0.1$ ,  $\sigma = 0.1$  und  $\mu = 0$  dargestellt. In Abbildung 3.14(a) sind die Nullstellen in der  $x$ - $\omega$ -Ebene aufgetragen: Für kleine  $t$  ist deutlich eine  $x^2$ -Abhängigkeit des optimalen Variationsparameters zu erkennen (rote bis gelbe Kurven). Für große Werte von  $t$  wird der Variationsparameter unabhängig von  $x$ . Dies entspricht der Erwartung, da die Verteilung gegen die stationäre Lösung strebt. In Abbildung 3.14(b) sind die Ergebnisse der Variationsstörungsrechnung der Kumulantenentwicklung gegenübergestellt. Die optimierten Verteilungen erreichen die stationäre Lösung offenbar viel schneller. Jeder Punkt entspricht einem optimierten Variationsparameter und korrespondiert mit einem Punkt im Nullstellenplot 3.14(a). Die feinen Linien, die die Punkte in 3.14(b) verbinden, entsprechen der numerischen Lösung. Eine Abweichung der Variationslösung von diesen exakten Kurven ist in der Abbildung nicht zu erkennen, so dass das Ergebnis der Variationsrechnung für alle betrachteten Zeitpunkte als sehr gut angesehen werden kann. Um darüber hinaus etwas über die Güte der Ergebnisse aussagen zu können, sei der Abstand zweier Verteilungsfunktionen  $\mathcal{P}$  und  $\tilde{\mathcal{P}}$



**Abbildung 3.15:** Ergebnisse der Variationsstörungsrechnung für die Zeitentwicklung der Wahrscheinlichkeitsverteilung für drei Größenordnung des Verhältnisses  $\gamma/g$ . Die übrigen Parameterwerte sind jeweils  $D = 1$ ,  $\mu = 0$  und  $\sigma = 0.1$ .

folgendermaßen definiert:

$$\Delta_t\{\mathcal{P}, \tilde{\mathcal{P}}\} := \frac{1}{2} \sum_{x_i=x_{\min}}^{x_{\max}} |\mathcal{P}(x_i, t) - \tilde{\mathcal{P}}(x_i, t)| \quad (3.96)$$

Wenn beide Verteilungen positiv und auf 1 normiert sind, kann die Grösse  $\Delta_t\{\mathcal{P}, \tilde{\mathcal{P}}\}$  maximal den Wert 1 annehmen. Dies ist genau dann der Fall, wenn die beiden Verteilungen keinen Überlapp besitzen. Stimmen die Verteilungen dagegen überein, so ist  $\Delta_t\{\mathcal{P}, \tilde{\mathcal{P}}\}$  gleich 0. Kleine Werte von  $\Delta_t\{\mathcal{P}, \tilde{\mathcal{P}}\}$  bedeuten daher gute Übereinstimmung der Verteilungen.

In Abbildung 3.15 sind die Resultate der Variationsstörungsrechnung für drei Größenordnungen des Verhältnisses  $\gamma/g$  zusammengestellt. Für den ersten Fall in Spalte eins mit  $g = 0.1$  und  $\gamma = 1$  liefert auch die Kumulantenentwicklung schon gute Werte. Es sind keine Abweichungen von der numerischen Lösung zu erkennen. Der Abstand der Variationslösung  $\Delta_t\{\mathcal{P}_K^{(1)}(\omega_{\text{opt}}), \mathcal{P}_{\text{NDSolve}}\}$  von der numerisch bestimmten Verteilung ist jedoch zu jedem Zeitpunkt kleiner als für die Kumulantenentwicklung, so dass die Variationsrechnung auch hier das bessere Resultat liefert. Für große Zeiten ( $t \geq 5$ ) unterscheiden sich sowohl die Kumulantenentwicklung als auch die Variationslösung kaum noch von der stationären Verteilung. Dass der Abstand von der numerischen Lösung für diese Zeiten endlich bleibt, liegt daran, dass die numerische Lösung hier das schlechtere Ergebnis liefert, da sie aufgrund der festen Randbedingungen bei der numerischen Integration die stationäre Verteilung nicht exakt erreichen kann. Die Kumulantenentwicklung und die Variationsstörungsreihe konvergieren hingegen für große Zeiten gegen die stationäre Verteilung, wie dem untersten Plot zu entnehmen ist. Dieser zeigt den Abstand  $\Delta_t\{\mathcal{P}_K^{(1)}(\omega_{\text{opt}}), \mathcal{P}_{\text{stat}}\}$  bzw.  $\Delta_t\{\mathcal{P}_K^{(1)}, \mathcal{P}_{\text{stat}}\}$  in logarithmischer Auftragung.

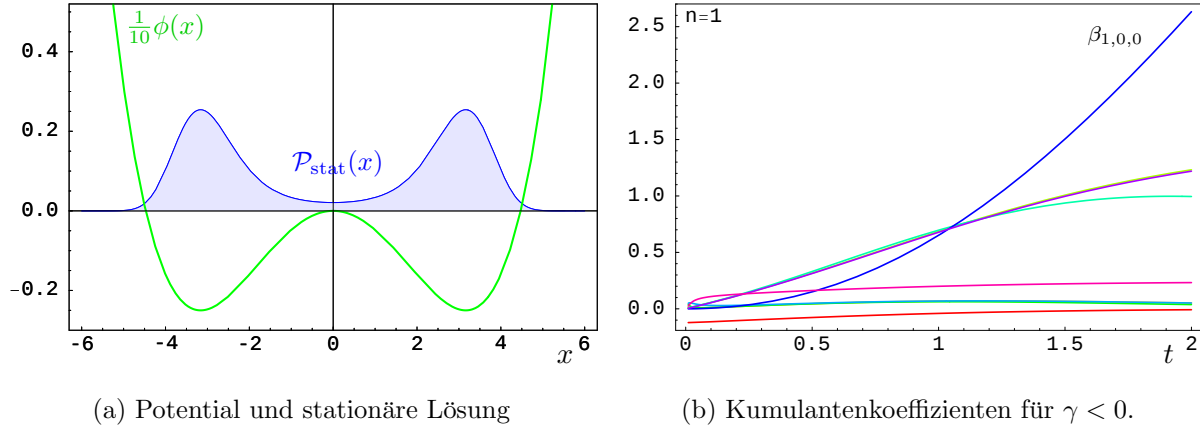
Für die Parameterwerte  $g = \gamma = 1$  in der mittleren Spalte ist die Überlegenheit der Variationslösung gegenüber der Kumulantenentwicklung deutlicher zu erkennen. Der Abstand von der numerischen Lösung ist im kritischen Zeitintervall  $0 \leq t \leq 2$  um ein Vielfaches geringer.

In der rechten Spalte sind die Resultate für  $g = 10$  und  $\gamma = 0.1$  dargestellt. Während die Kumulantenentwicklung hier ein vollkommen unphysikalisches Verhalten zeigt und mit der numerischen Lösung im kritischen Zeitintervall  $0 \leq t \leq 20$  praktisch keinen Überlapp hat, liefert die Variationslösung auch in diesem Fall sehr gute Ergebnisse. Der Abstand zur numerischen Lösung ist nur für sehr kleine Zeiten nennenswert von 0 verschieden und bleibt stets unter 0.01. Um im Vergleich zum riesigen Fehler der Kumulantenentwicklung überhaupt eine Abweichung der Variationslösung erkennen zu können, wurde der Bereich für  $t \leq 1$  zusätzlich vergrößert dargestellt.

## 3.7 Das Doppelmulden-Potential

Zum Abschluß soll noch ein Blick auf das sogenannte *double-well Potential* oder auch die *Doppel-Mulde* geworfen werden. Woher diese Bezeichnung stammt, läßt sich unschwer an Abbildung 3.16(a) erkennen. Mit  $\gamma < 0$  bildet das Potential eine Zwei-Mulden-Struktur aus. Für kleine Werte von  $x$  dominiert der nun negative harmonische Term, das Potential entspricht einer nach unten offenen Parabel. Für größere  $x$ -Werte gewinnt irgendwann der positive anharmonische Term und sichert somit, dass das Potential für  $x \rightarrow \pm\infty$  positiv wird, so dass eine stationäre Lösung existieren kann.

Genau genommen existiert die Störungsentwicklung aus Abschnitt 3.1 nicht für dieses



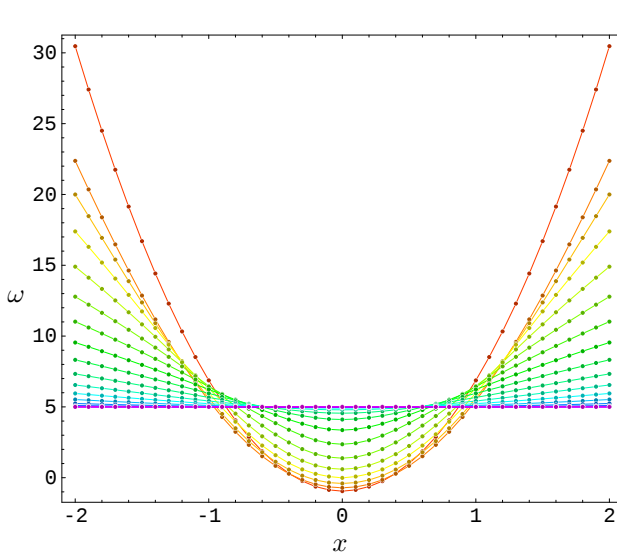
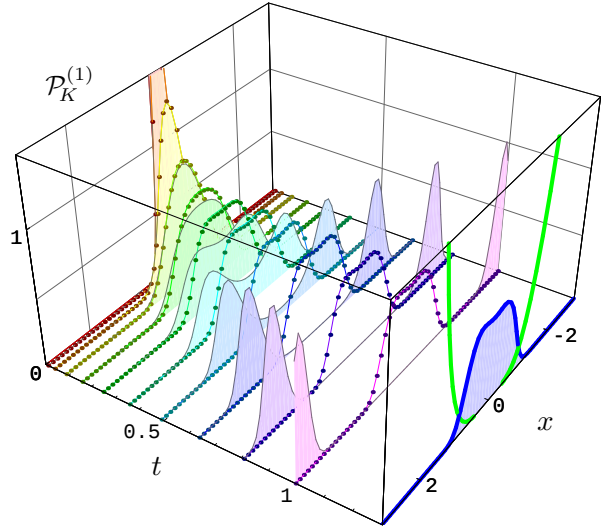
**Abbildung 3.16:** **Links:** Potential (mit 1/10 skaliert) und stationäre Verteilung für  $\gamma = -1$ ,  $g = 0.1$  und  $D = 1$ . **Rechts:** Entwicklungskoeffizienten der Kumulante 1. Ordnung für  $\gamma = -1$  über der Zeit aufgetragen. Der Koeffizient  $\beta_{1,0,0}$  strebt gegen  $\infty$ .

Problem, weil das *ungestörte* Problem mit  $g = 0$  keine normierbare Lösung besitzt. Dies schlägt sich im Verhalten der Entwicklungskoeffizienten  $\beta_{n,k,l}(t)$  nieder, welches in Abbildung 3.16(b) für die erste Ordnung wiedergegeben ist. Der Koeffizient  $\beta_{1,4,0}(t)$  des  $x^4$ -Terms verschwindet nun für große Zeiten, so dass die Kumulantenentwicklung für  $\gamma < 0$  nicht einmal die stationäre Verteilung reproduzieren kann. In folgender Tabelle ist das Langzeitverhalten der Koeffizienten angegeben:

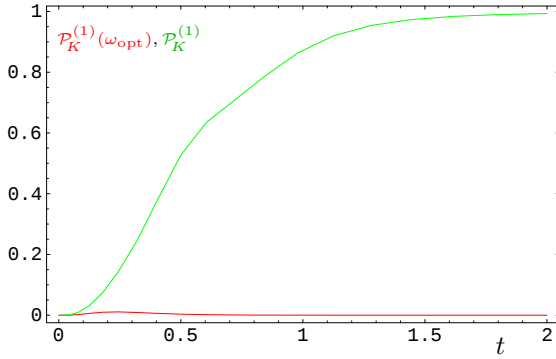
| $\lim_{t \rightarrow \infty}$ | $\beta_{1,0,0}(t)$     | $\beta_{1,4,0}(t)$ | $\beta_{1,2,0}(t)$  | $\beta_{1,0,2}(t)$                                          | $\beta_{1,0,4}(t)$                  |
|-------------------------------|------------------------|--------------------|---------------------|-------------------------------------------------------------|-------------------------------------|
| $\gamma > 0$                  | $\frac{3D}{4\gamma^2}$ | $-\frac{1}{4D}$    | 0                   | 0                                                           | 0                                   |
| $\gamma < 0$                  | $\infty$               | 0                  | $\frac{3}{2\gamma}$ | $\frac{3D^2(D-2\gamma\sigma^2)}{2\gamma(D-\gamma\sigma^2)}$ | $\frac{D^3}{4(D-\gamma\sigma^2)^4}$ |

Die nicht aufgeführten Koeffizienten verschwinden in beiden Fällen. Statt des  $x^4$ -Terms überlebt in der Kumulantenentwicklung für  $t \rightarrow \infty$  nun ein  $x^2$ -Term ( $\beta_{1,2,0}$ ).

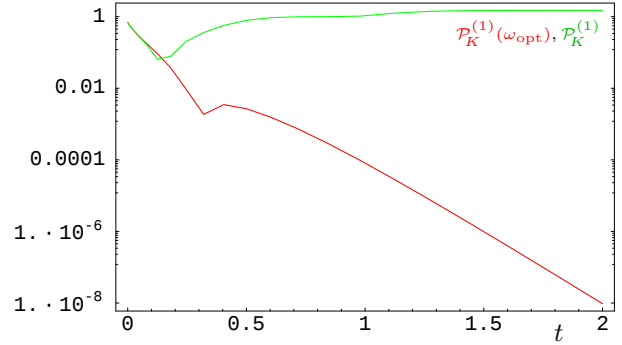
In Abbildung 3.17 sind die Ergebnisse der Variationsrechnung für den Fall einer sehr starken Anharmonizität  $g = 10$  bei  $\gamma = -1$  zusammengestellt. Die starke Anharmonizität sorgt dafür, dass zu allen Zeiten  $t$  eine durchgehenden Nullstelle für alle  $x$ -Werte im betrachteten Intervall existiert. Dies vereinfacht die Suche des optimalen Wertes für den Variationsparameter. Wie in der Abbildung oben rechts zu erkennen ist, divergiert die Kumulantenentwicklung wie erwartet. Die Variationslösung (Punkte) fällt dagegen mit der numerischen Lösung (Linien zwischen den Punkten) zusammen und liefert auch in diesem Fall hervorragende Ergebnisse, wie die Abbildungen 3.17(c) und 3.17(d) belegen, die den Abstand zur numerischen Lösung bzw. zur stationären Verteilung wiedergeben: Während die Störungsreihe für die Kumulante schon nach kurzer Zeit keinerlei Überlapp

(a) Nullstellen in der  $x$ - $\omega$ -Ebene

(b) Zeitabhängigkeit der Verteilung



(c) Abstand von der numerischen Lösung

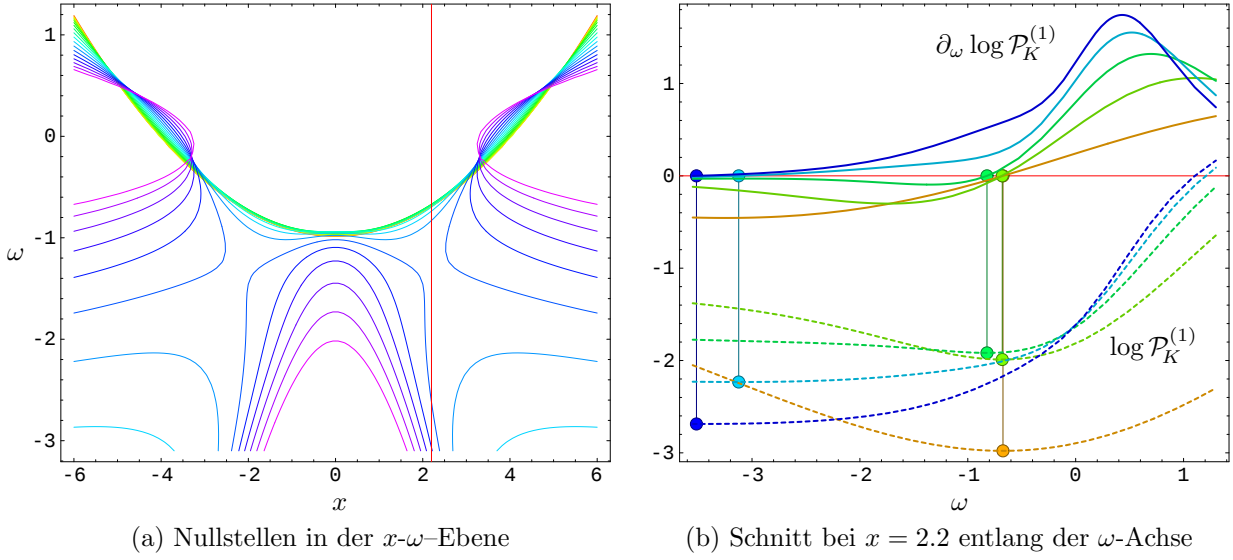


(d) Abstand von der stationären Verteilung

**Abbildung 3.17:** Parameterwerte  $\gamma = -1$ ,  $g = 10$ ,  $D = 1$ ,  $\sigma = 0.1$  und  $\mu = 0$ . **(a)** Nullstellen der ersten Ableitung der Variationsstörungsreihe für die Kumulantenentwicklung in der  $x$ - $\omega$ -Ebene. **(b)** Gefüllte Kurven bezeichnen die Kumulantenentwicklung, die Punkte die Ergebnisse der Variationsrechnung und die Linien zwischen den Punkten die numerische Lösung. Die Farben korrespondieren mit der Abbildung links. **(c)** Abstand der Kumulantenentwicklung und der Variationslösung von der numerischen Lösung. **(d)** Abstand der Kumulantenentwicklung und der Variationslösung von der stationären Verteilung.

mehr mit der numerischen Lösung hat, liefert die Variationslösung für alle Zeiten sehr gute Werte.

Dass die Variationslösung die stationäre Lösung so gut wiedergeben kann, ist nur dadurch möglich, dass der optimale Wert für den Variationsparameter von  $x$  abhängt. Da der Koeffizient  $\beta_{1,4,0}$  des  $x^4$ -Terms in der Kumulantenentwicklung mit  $\gamma < 0$  für  $t \rightarrow \infty$  verschwindet, muss die  $\exp(c_0 x^2 - c_1 x^4)$ -Abhängigkeit der stationären Verteilung zum Teil über die  $x$ -Abhängigkeit des Variationsparameters generiert werden. Für große Zei-

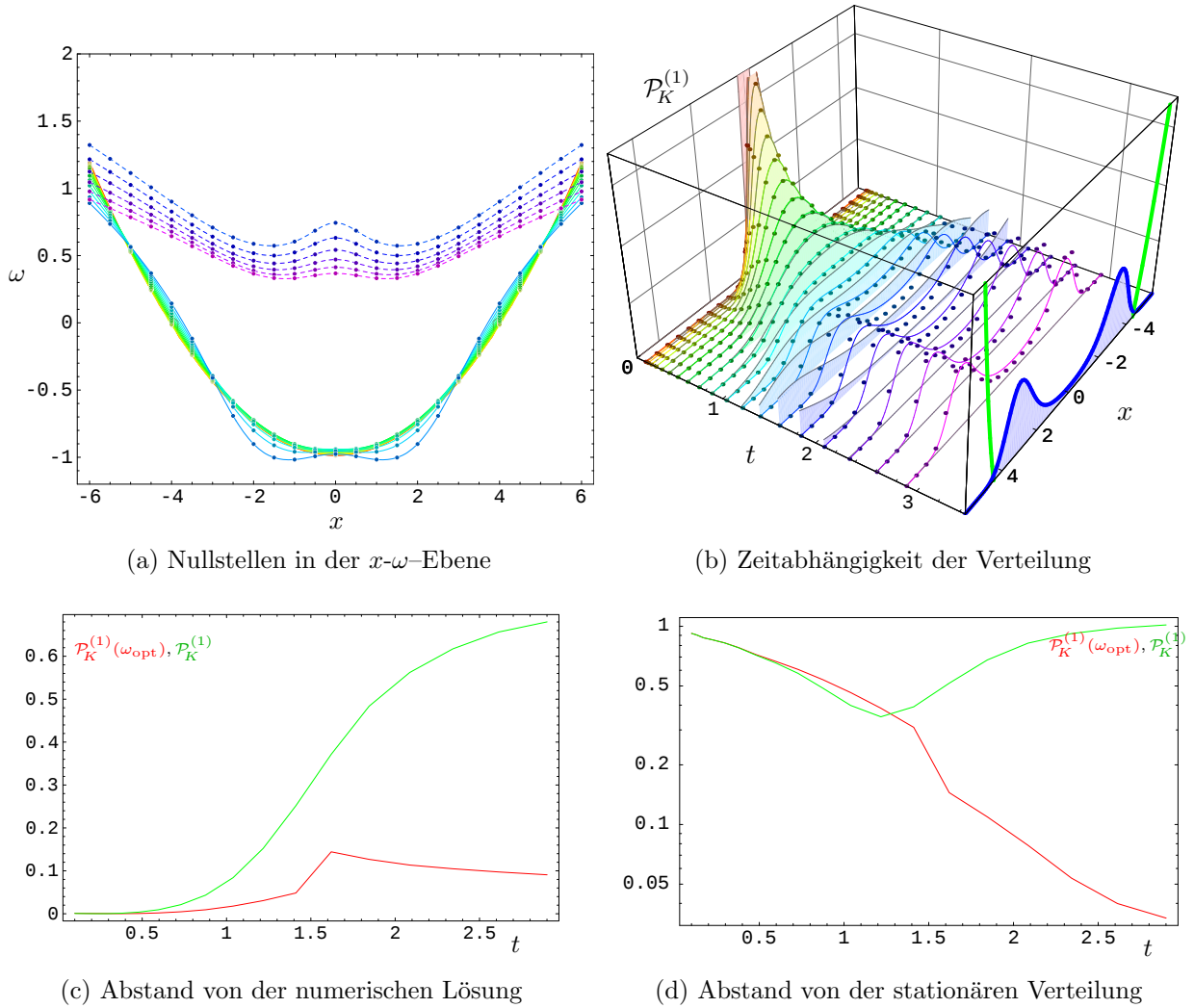


**Abbildung 3.18:** Kritischer Fall mit den Parameterwerten  $\gamma = -1$ ,  $g = 0.1$ ,  $D = 1$ ,  $\sigma = 0.1$  und  $\mu = 0$ . **Links:** Nullstellen von  $\partial_\omega \mathcal{P}_K^{(1)}(x, t, \omega)$  in der  $x$ - $\omega$ -Ebene für verschiedene Zeiten. **Rechts:** Schnitt bei  $x = 2.2$ , in der Abbildung links als rote Linie angedeutet. Kumulante (gestrichelt) und erste Ableitung der Kumulanten in Abhängigkeit vom Variationsparameter.

ten sollte  $\omega_{\text{opt}}(x)$  daher die Form  $a_0 + a_2x^2 + a_4x^4$  annehmen, was auch tatsächlich der Fall ist. Der Koeffizient  $a_2$  ist dabei deutlich grösser als  $a_4$ , so dass die  $x^4$ -Abhängigkeit im wesentlichen mit Hilfe des nicht verschwindenden Koeffizienten  $\beta_{1,2,0}$  vor dem  $x^2$ -Term der Kumulantenentwicklung entsteht.

Es soll nun der kritische Fall einer schwachen Anharmonizität mit  $g = 0.1$  und  $\gamma = -1$  untersucht werden. Das zugehörige Potential und die stationäre Verteilung sind in Abbildung 3.16(a) dargestellt. Die Zwei-Mulden-Struktur ist sehr ausgeprägt und die stationäre Verteilung damit sehr breit. Der positive anharmonische Term kann sich erst für große  $x$  durchsetzen.

In Abbildung 3.18(a) ist die Nullstellen-Struktur der ersten Ableitung der Kumulanten in der  $x$ - $\omega$ -Ebene dargestellt. Für kleine Zeiten ergeben sich wie schon im zuletzt betrachteten Fall zusammenhängende Nullstellenkurven mit  $x^2$ -Abhängigkeit (rot-grün). Allerdings gibt es nun einen kritischen Zeitpunkt  $t_{\text{krit}} \approx 1.6$ , bei dem diese Kurven in der  $x$ - $\omega$ -Ebene zerfallen. In der Abbildung 3.18(b) ist für  $x \approx 2.2$ , wo der Sprung in der Nullstelle erstmals auftritt, ein Schnitt in  $\omega$ -Richtung aufgetragen. Dargestellt sind die Kumulanten (gestrichelte Linien) und ihre ersten Ableitungen. Die Farben korrespondieren mit der Abbildung 3.18(a). Die Nullstellen und die zugehörigen Extrema sind mit Kreisen markiert. Man erkennt, dass das zunächst stabile Minimum bei  $\omega \approx -1$  plötzlich verschwindet (blaue Kurven). Man kann nun für  $t > t_{\text{krit}}$  nicht einfach im Bereich  $-2 \leq x \leq 2$  den einen Ast und ausserhalb den anderen Ast der Nullstellenkurve verwenden, weil diese zu



**Abbildung 3.19:** Ergebnisse der Variationsstörungstheorie für das Doppelmulden-System mit schwacher Anharmonizität. Die Parameterwerte sind  $\gamma = -1$ ,  $g = 0.1$ ,  $D = 1$ ,  $\sigma = 0.1$  und  $\mu = 0$ . Die gestrichelten Linien in 3.19(a) bezeichnen Nullstellen der zweiten Ableitung.

Segmenten der Verteilungsfunktion mit unterschiedlicher Normierung führen würden. Es ist dann nicht klar, wie diese zusammenzufügen sind.

Um nun eine zusammenhängende Nullstellenkurve zu erhalten kann man höhere Ableitungen betrachten. Mit der zweiten Ableitung finden sich für alle Zeiten  $t > t_{\text{krit}}$  geeignete Nullstellen (gestrichelte Kurven in Abbildung 3.19(a)). Die Ergebnisse sind in Abbildung 3.19 zusammengestellt: Für Zeiten  $t < t_{\text{krit}}$  wurde die erste, danach die zweite Ableitung benutzt. Beim Abstand zur numerischen Lösung und zur stationären Verteilung erkennt man daher einen Knick in der Nähe von  $t_{\text{krit}} \approx 1.6$ . Erstmals liegen auch die Werte der Variationslösung erkennbar neben denen der numerischen Lösung (3.19(b)). Zum Teil liegt dies sicherlich auch an der groben  $x$ -Auflösung, mit der die optimalen Werte für den Va-

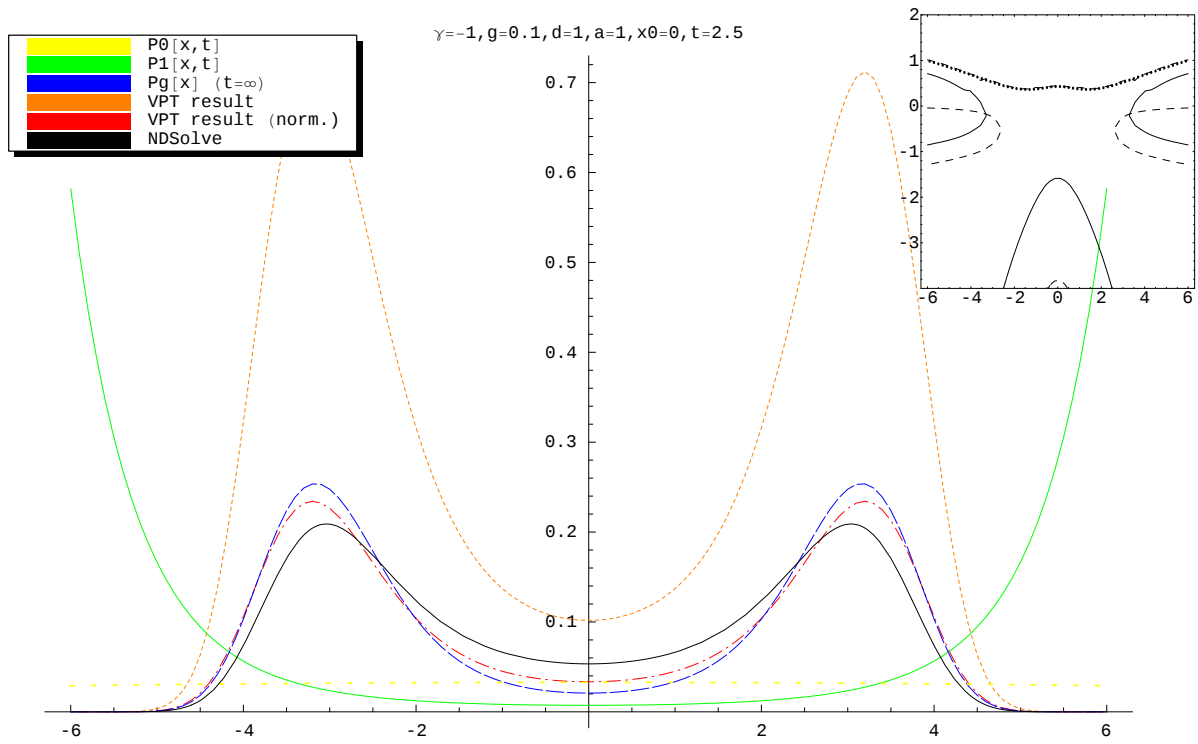
riationsparameter bestimmt wurden. Statt die Nullstellenkurve zu wechseln, kann man auch versuchen, der verschwundenen Nullstelle zu folgen: wenn in Abbildung 3.18(b) ein Extremum verschwindet, muss es in eine Wendestelle übergehen. Es entsteht also eine Nullstelle der zweiten Ableitung. Dieser kann man nun folgen, bis sie ebenfalls verschwindet und einer Nullstelle der nächsthöheren Ableitung weicht. Im vorliegenden Fall hat sich jedoch gezeigt, dass die Nullstellen schneller verschwinden, als man ihnen folgen kann: der Graben zwischen den Ästen der ehemals zusammenhängenden Nullstellenkurve wächst zu schnell mit fortschreitender Zeit.

### 3.8 Höhere Ordnungen

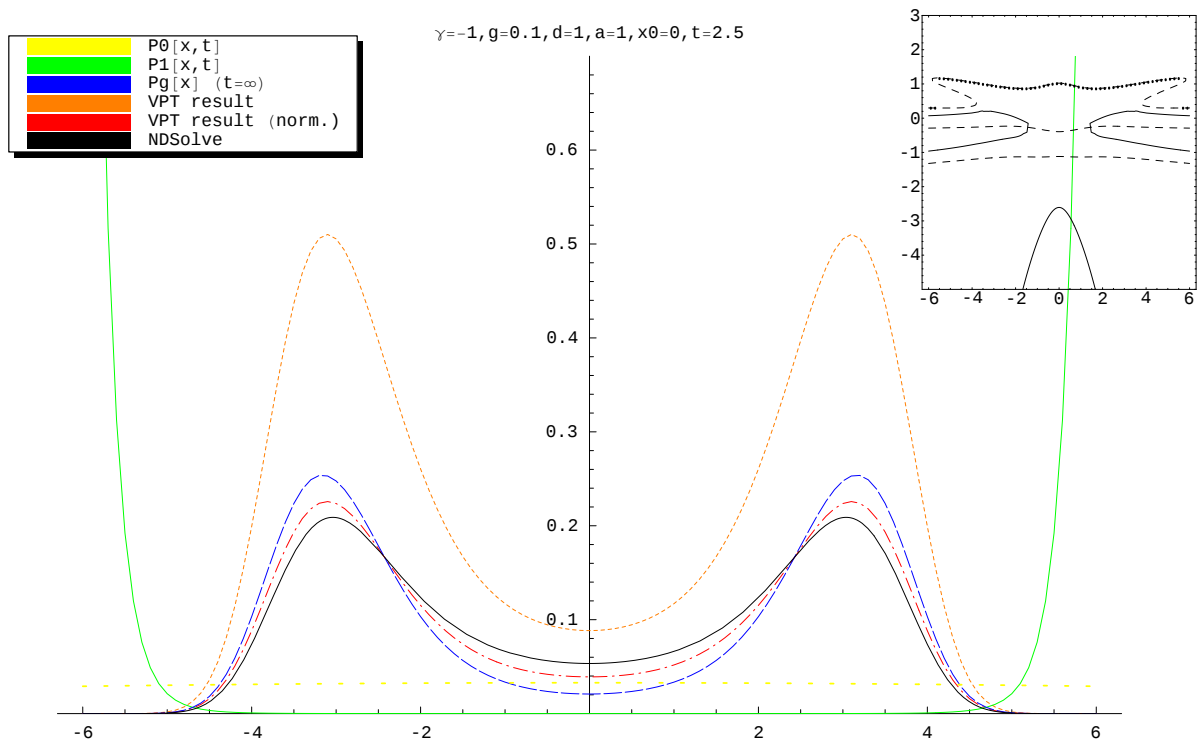
Für den Fall  $\gamma = -1$ ,  $g = 0.1$  und  $D = 1$  wurden für eine  $\delta$ -förmige, bei  $x = 0$  zentrierte Anfangsverteilung ( $\sigma = 0, \mu = 0$ ) höhere Ordnungen der Variationsstörungsrechnung zum festen Zeitpunkt  $t = 2.5$  untersucht. Dieser Zeitpunkt liegt oberhalb des Nullstellensprunges, der im vorhergehenden Absatz diskutiert wurde. Die Ergebnisse sind in den Abbildungen 3.20 und 3.21 zusammengestellt. Dabei werden folgende Bezeichnungen verwendet:

|                           |                                                  |
|---------------------------|--------------------------------------------------|
| <b>P0[x, t]</b>           | Ungestörte Lösung für $g = 0$                    |
| <b>P1[x, t]</b>           | Kumulantenentwicklung 1.Ordnung                  |
| <b>Pg[x]</b>              | stationäre Verteilung für $t \rightarrow \infty$ |
| <b>VPT result</b>         | nicht normierte Variationslösung                 |
| <b>VPT result (norm.)</b> | nachnormierte Variationslösung                   |
| <b>NDSolve</b>            | numerische Lösung ( <i>MATHEMATICA</i> ®)        |

Insbesondere sind die schwarzen und roten Kurven miteinander zu vergleichen. Die mittlere quadratische Abweichung der normierten Variationslösung vom numerischen Ergebnis ist in der jeweiligen Bildunterschrift angegeben. Dort ist auch vermerkt, welche Nullstellen zur Optimierung des Variationsparameters verwendet wurden. Die oben rechts eingefügten Plots zeigen einen Ausschnitt aus der  $x$ - $\omega$ -Ebene, der einen Eindruck von der Nullstellenstruktur gibt. Aufgrund zu geringer Auflösung treten in solchen **CoutourPlots** häufig Artefakte auf. Sie sind daher nur geeignet, um sich einen ersten Überblick zu verschaffen. Die Variationslösung wird mit jeder Ordnung besser, allerdings wird auch die Nullstellenstruktur komplizierter. Hier ließ sich die Regel aus Abschnitt 2.6 verifizieren, dass die Ableitung, die den besten Wert für den Variationsparameter liefert, mit steigender Ordnung zwischen 1. und 2. Ableitung wechselt. Die erste Ordnung macht hier nur deshalb eine Ausnahme, weil es für diesen späten Zeitpunkt  $t = 2.5$  keine zusammenhängenden Nullstellen der ersten Ableitung gibt, so dass die Nullstellen der zweiten Ableitung verwendet werden mußten.

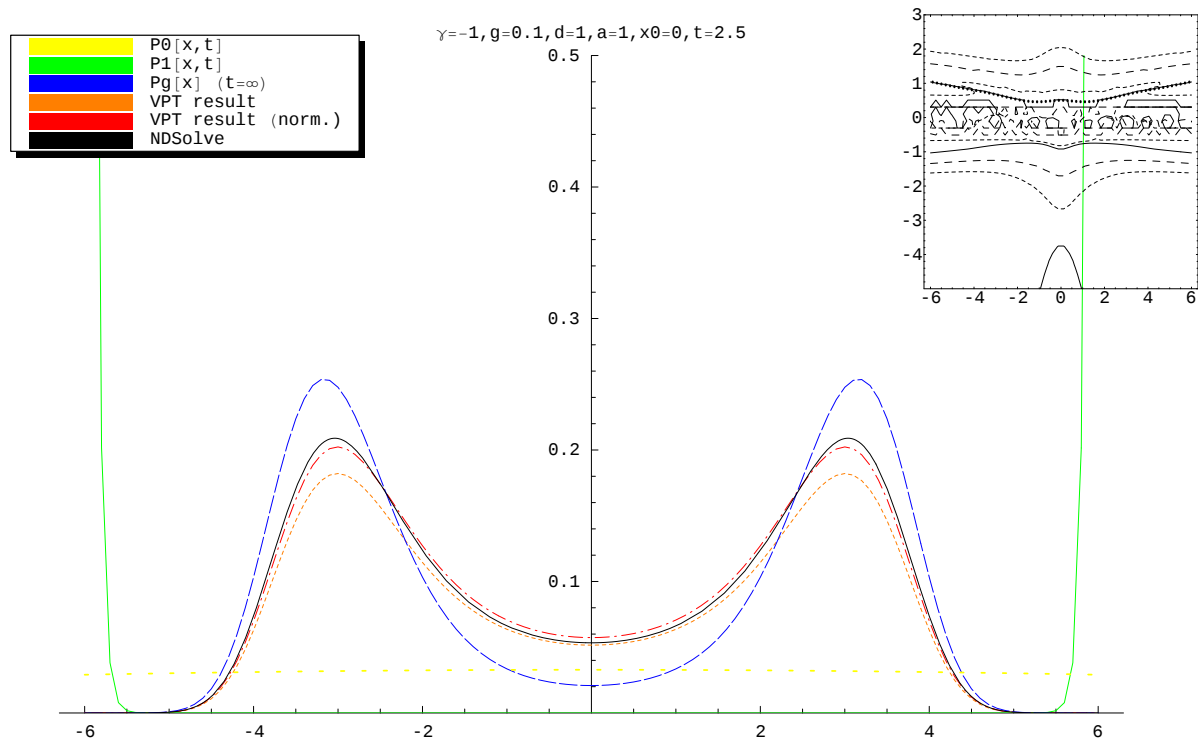


(a) 1.Ordnung, Nullstellen der 2.Ableitung. Abweichung von numerischer Lösung: 0.0517291.

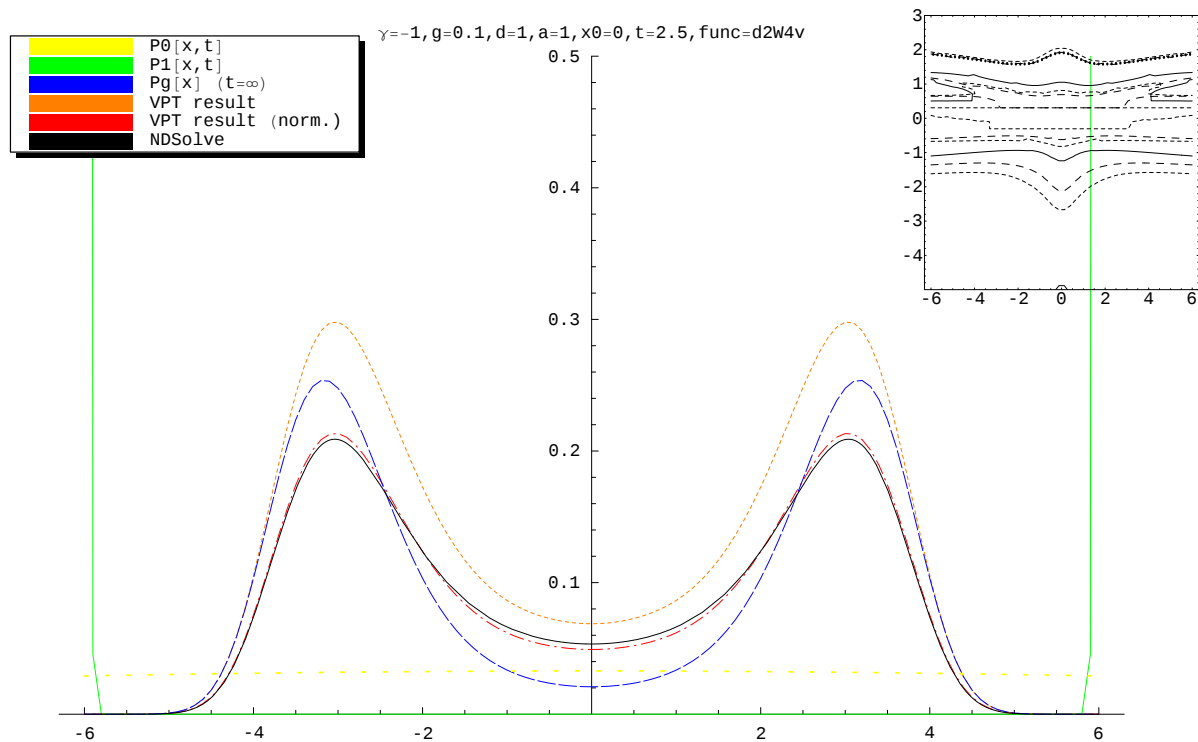


(b) 2.Ordnung, Nullstellen der 2.Ableitung. Abweichung von numerischer Lösung: 0.0170686.

**Abbildung 3.20:** Ergebnisse der Variationsstörungsrechnung 1. und 2.Ordnung für das Doppelmulden-System mit  $\gamma = -1$ ,  $g = 0.1$ ,  $D = 1$ ,  $\sigma = 0$  und  $\mu = 0$  zum Zeitpunkt  $t = 2.5$ .



(a) 3.Ordnung, Nullstellen der 1.Ableitung. Abweichung von numerischer Lösung: 0.00203189.



(b) 4.Ordnung, Nullstellen der 2.Ableitung. Abweichung von numerischer Lösung: 0.0010194.

**Abbildung 3.21:** Ergebnisse der Variationsstörungsrechnung 3. und 4.Ordnung für das Doppelmulden-System mit  $\gamma = -1$ ,  $g = 0.1$ ,  $D = 1$ ,  $\sigma = 0$  und  $\mu = 0$  zum Zeitpunkt  $t = 2.5$ .

# Zusammenfassung und Ausblick

In allen untersuchten Fällen, die den ganzen Bereich bisher physikalisch relevanter Fragestellungen abdecken, konnte gezeigt werden, dass die Variationsstörungsrechnung für die anharmonische Fokker-Planck-Gleichung sehr gute Ergebnisse in 1.Ordnung liefert, und zwar für die ganze Wahrscheinlichkeitsverteilung als Funktion von Ort und Zeit. Für die einfache Mulde, d.h.  $\gamma > 0$ , sind diese Ergebnisse schon so exzellent, dass es Schwierigkeiten bereitet, die vermutete exponentielle Konvergenz durch Hinzunahme höherer Ordnungen direkt zu verifizieren. Denn die 1.Ordnung kommt der Genauigkeit einer mit vertretbarem Aufwand zu erzielenden numerischen Lösung schon so nahe, dass eventuelle Verbesserungen nicht mehr sicher abgeschätzt werden konnten. Allerdings sind die Rechnungen der Variationsstörungstheorie in höheren Ordnungen auch sehr aufwendig. Mit der verfügbaren Rechenkapazität muß etwa 1 Tag Rechenzeit für die Ermittlung der Verteilung  $\mathcal{P}(x, t)$  in 4.Ordnung und zu einem festen Zeitpunkt  $t$  angesetzt werden!

Das Hauptproblem besteht im Aufsuchen eines geeigneten Wertes des Variationsparameters  $\omega(x, t)$ . Es hat sich zwar auch hier die heuristische Regel bestätigen lassen, dass die größte reelle Nullstelle aus der Menge aller Nullstellen aller Ableitungen bis zur Ordnung  $N$  der Entwicklung den besten oder einen geringfügig davon abweichenden Wert liefert, aber welches diese Nullstelle jeweils ist, muß im Prinzip für jedes  $x$  und  $t$  neu bestimmt werden. Dazu müssen alle Nullstellen einer transzendenten Funktion in einem größeren Bereich gefunden werden. Es ist keine automatische Methode für diese Nullstellensuche bekannt, die in jedem Falle stabil arbeitet. In Abhängigkeit von  $x$  und  $t$  gehört jede Nullstelle einer Nullstellenkurve an. Das Verfolgen einer einmal gefundenen Nullstelle als Funktion von  $x$  und  $t$  liefert deshalb zwar oft ein gutes Ergebnis. Aber es ist die Ausnahme, dass eine Nullstelle für alle interessierenden Werte von  $x$  und  $t$  erhalten bleibt ohne von anderen Nullstellen aus dem optimalen Intervall verdrängt zu werden. Deshalb ist in der Regel ein mehrfacher Wechsel der verwendeten Nullstelle auch und gerade hin zu höheren Ableitungen unvermeidbar, der nicht selten etwas Augenmaß erfordert. Etwas mehr Aufschluß über den Wert höherer Ordnungen der Variationsstörungstheorie läßt sich für die Doppelmulde gewinnen. Sie ist durch  $\gamma < 0$  charakterisiert. Eine erschöpfende Untersuchung dieses Problems leistet diese Arbeit nicht. Es konnten nur die Fälle  $\gamma = 1$ ,  $g = 10$  bzw.  $g = 0.1$  exemplarisch analysiert werden. Wichtiges Resultat ist, daß die Va-

riationsstörungsrechnung auch für dieses „kranke“ System gute bis sehr gute Ergebnisse liefert. „Krank“ ist das System, weil seine ungestörte Variante keine normierbare Lösung besitzt. Die Normierbarkeit wird erst durch das störende  $gx^4$ -Potential gewährleistet. Da die Variationsstörungstheorie dieses anharmonische Störpotential durch ein effektives harmonisches approximiert und somit zum ungestörten Problem weitgehend herüberzieht, heilt sie das ungestörte Problem und macht eine sinnvolle Störungsentwicklung überhaupt erst möglich.

Eine Anharmonizität mit  $g = 10$  ist so stark, dass sie sogar allen Nullstellenmengen  $\omega(x, t)$  für den gesamten relevanten Parameterbereich die Existenz sichert und folglich eine automatisierte Nullstellensuche zuläßt.

Die wirkliche Leistungsfähigkeit der Variationsstörungstheorie kommt bei der Doppelmulde mit  $\gamma = 1$  und  $g = 0.1$  zur Geltung. Denn obwohl sich in diesem System die heilende Wirkung der Anharmonizität erst für große  $x$  bemerkbar macht, kommt die Variationsstörungsrechnung schon in 1. Ordnung zu guten Ergebnissen. Es muß allerdings bei  $t \approx 1.6$  die Nullstelle gewechselt werden. Dabei zeigt sich, dass es der an sich anheliegende Übergang zur nächst höheren Ableitung auch bei mehrfacher Anwendung nicht vermag, die größte (und optimale) Nullstelle zu erreichen. Ein Wechsel von einer Nullstelle zu einer anderen läßt sich nicht vermeiden.

Im Ergebnis „springt“ die Verteilung unstetig von Werten für  $t < 1.6$  auf Werte für  $t > 1.6$ . Sie springt von einer Seite der exakten Lösung auf die andere. Natürlich ließe sich ein solcher Sprung durch Interpolation der Verteilung von einem geeigneten Wert für  $t = t_0 < 1.6$  zu einem  $t = t_1 > 1.6$  glätten. Konsequenter wäre es aber, diese Glättung einer nächsten Ordnung der Variationsstörungstheorie zu überlassen, die das Gewünschte vermutlich auch leisten wird. Diese Vermutung stützt sich auf Beobachtungen am System mit  $\gamma = -1$  und  $g = 0.1$  zur mittleren Zeit  $t = 2.5$ . Hier ist die Konvergenz langsam genug, um noch sinnvoll an der numerischen Lösung meßbar zu sein. Im Ergebnis ist die Konvergenz exponentiell. Der Fehler verringert sich mit jeder Ordnung von der 1. bis zur 4. etwas um den Faktor 5.

## Danksagung

Ich danke Bodo Hamprecht, Axel Pelster, Hagen Kleinert, Michael Onnen und meinen Eltern. So, oder so ähnlich, hätte diese Danksagung wohl ausgesehen, wenn nicht soeben das Prüfungsbüro kundgetan hätte, dass meine Diplomarbeit erst morgen um 16:00 Uhr erwartet wird, und nicht *jetzt*. Auf Anregung von Axel Pelster habe ich jetzt sogar eine neue Seite für die Danksagung angefangen, mit allen Gefahren die das in einer modernen L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X-Umgebung mit sich bringt. Ich habe ja bis morgen 16:00 Uhr Zeit, die Folgen dieser verwegenen Tat auszubügeln.

Zuerst habe ich offensichtlich Grund, dem Prüfungsbüro in Gestalt von Prof. Jürgen Bosse und Katharina Suarez zu danken, und zwar nicht so sehr für die Zeit, diese Danksagung zu schreiben, sondern für die zwei Tage Verlängerung davor. Es ist schon erstaunlich, was man in zwei Tagen schaffen kann, vorausgesetzt, es handelt sich um die absolut letzten Tage des Diplomarbeit-Bearbeitungszeitraums.

Allen voran möchte ich Prof. Bodo Hamprecht für die Betreuung meiner Diplomarbeit danken. Von ihm habe ich vor allem gelernt, dass es keine Probleme sondern nur Lösungen gibt. Mehr als einmal hat er weder Kosten noch Mühen gescheut, mir die Gültigkeit dieses Satzes zu beweisen, als ich schon fast vom Gegenteil überzeugt war. Selbst am Verhungern hat er mich gehindert, wofür ich ihm nun, da die Arbeit fertig ist, doch dankbar bin.

Axel Pelster möchte ich herzlichst für seine vielfältige Unterstützung danken. In vielen Diskussionen hat er mir mit wertvollen Anregungen und Tipps auf die Sprünge geholfen. Er hatte immer Zeit, um Fragen oder Probleme zu diskutieren und grundlegend zu klären. Vor allem möchte ich Axel auch für sein Interesse an meiner Arbeit danken. Durch wiederholtes Nachfragen, was denn bei dieser oder jener Rechnung rausgekommen sei, hat er mich immer wieder motiviert, die Rechnung endlich mal zu machen. Gerade in der Endphase der Arbeit hat er mir durch gründlichstes Korrekturlesen sehr geholfen.

Nicht unbedankt davonkommen darf Prof. Hagen Kleinert. Von ihm stammt nicht nur der erste Vorschlag in Richtung dieser Arbeit, sondern fast die ganze Variationsstörungstheorie, auf die diese Arbeit aufbaut. Nicht auszudenken, wenn *ich* das auch noch alles hätte erfinden müssen. Fragen zur Variationsstörungstheorie, die ich sonst schon überall erfolglos vorgebracht hatte, konnte meist Hagen Kleinert beantworten. Und das ohne Buch! Danke für die Hilfe!

Michael Onnen möchte ich vor allem dafür danken, dass er mit seiner Diplomarbeit auf mich gewartet hat, damit wir das zusammen (durch)machen können. Ganz hat es nicht geklappt, weil ich nun doch etwas früher fertig bin. Er hat mir keine Anregungen und Tipps gegeben, was ich noch untersuchen könnte, hat mich nicht gefragt, was bei welcher Rechnung rauskommt oder wie viele Seiten ich jetzt fertig habe und wie viele ich noch brauche. Dafür möchte ich ihm auf's allerherzlichste mit einem großen 'Un' danken!

Zum Abschluß danke ich meinen Eltern, die mich durch ihr Vertrauen in mich und meine Arbeit unterstützt haben. Sie haben mir niemals das Gefühl gegeben, dass sie daran zweifeln könnten, dass dies alles ein gutes Ende nimmt. Und das hat es ja nun auch. Auch hierfür meinen Dank!

Und ganz zum Schluß kann ich es mir nicht verkneifen, L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X dafür zu danken, dass es trotz Einfügen dieser Seite, die Abbildung 1.3(b) nicht mit Abbildung 3.16(a) vertauscht hat. Oder? Moment...

# Anhang A

## Numerische Langevin-Simulation

Das folgende Programm simuliert die zeitliche Entwicklung von 1 000 000 Brownschen Teilchen und erstellt ein Histogramm. Es wurde verwendet, um Abbildung [1.2](#) zu erstellen:

```
#include <cmath>
#include <fstream>
#include <cstdlib>
#include <cstdio>

#define SYSTEMS 1000000
#define BINSIZE 0.01
#define BINMIN -3.0
#define BINMAX 3.0
#define TIMESTEP 0.001
#define TMAX 0.502
#define K 1.0
#define G 0.0

double x[SYSTEMS], v[SYSTEMS];

inline double dv(int i) {
    return -(K*v[i]+G*v[i]*v[i]*v[i])*TIMESTEP + sqrt(24)*(rand()/(RAND_MAX+1.))-0.5)*sqrt(TIMESTEP);
}

inline void advance_lv() {
    for(int i=0; i<SYSTEMS; i++) {
        v[i] = v[i] + dv(i);
        x[i] = x[i] + v[i]*TIMESTEP;
    }
}

int main() {
    ofstream density( "density.dat" ), trajectory( "trajectory.dat" );
    int tstep=0;
    int bins = (int)ceil((BINMAX-BINMIN)/BINSIZE);
    int *bin = new int[bins];

    for(double t=0; t<=TMAX; t+=TIMESTEP) {
        if( !((tstep++-1)%10) ) {
            cout << t << endl;

            for(int b=0; b<bins; b++) { bin[b] = 0; }
            for(int i=0; i<SYSTEMS; i++) {
                if( (v[i] < BINMAX) && (v[i] > BINMIN) ) { bin[(int)((v[i]-BINMIN)/BINSIZE)]++; }
            }

            for(int b=0; b<bins; b+=1) {
                density << t << "\t"
                << BINMIN+b*(BINMAX-BINMIN)/bins << "\t"
                << (double)bin[b]/SYSTEMS/BINSIZE << endl;
            }
            density << endl << endl;
        }
        trajectory << t << "\t";
        for(int i=0; i<10; i++) { trajectory << x[i] << "\t" << v[i] << "\t"; }
        trajectory << endl;

        advance_lv();
    }
}
```

# Anhang B

## Entwicklung des FP-Operators in Eigenfunktionen

In der vorliegenden Arbeit wird an vielen Stellen die Tatsache ausgenutzt, dass die Lösung der Fokker-Planck-Gleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathcal{P}(x, t) = \frac{\partial}{\partial x} [K(x) \mathcal{P}(x, t)] + D \frac{\partial^2}{\partial x^2} \mathcal{P}(x, t) \quad (\text{B.1})$$

bei beliebiger Anfangsverteilung für  $t \rightarrow \infty$  gegen die stationäre Verteilung

$$\mathcal{P}_{\text{stat}}(x) = \mathcal{N} e^{-\phi(x)} \quad \text{mit} \quad \phi(x) = -\frac{1}{D} \int^x K(y) dy \quad (\text{B.2})$$

konvergiert. Hierfür soll in diesem Anhang eine Begründung geliefert werden. Dabei sollen natürliche Randbedingungen und  $D = \text{const}$  vorausgesetzt werden, wie es auch sonst in der Arbeit der Fall ist. Eine allgemeinere Ableitung findet sich in [Ris84].

Bei zeitunabhängigen Drift- und Diffusionskoeffizienten bietet sich für die Wahrscheinlichkeitsdichte ein Separationsansatz an:

$$\mathcal{P}(x, t) = \varphi(x) e^{-\lambda t}. \quad (\text{B.3})$$

Mit dem *Fokker-Planck-Operator*

$$\mathcal{L}_{\text{FP}} \bullet = \frac{\partial}{\partial x} [K(x) \bullet] + D \frac{\partial^2}{\partial x^2} \bullet = D \frac{\partial}{\partial x} e^{-\phi(x)} \frac{\partial}{\partial x} e^{\phi(x)} \bullet \quad (\text{B.4})$$

reduziert sich die Fokker-Planck-Gleichung (B.1) auf ein Eigenwertproblem:

$$\mathcal{L}_{\text{FP}} \varphi = -\lambda \varphi. \quad (\text{B.5})$$

Hierbei bezeichnet  $\lambda$  die Eigenwerte des Fokker-Planck-Operators  $\mathcal{L}_{\text{FP}}$  und  $\varphi$  die zugehörigen Eigenfunktionen. Das Eigenwertspektrum kann kontinuierlich oder diskret sein. Der Einfachheit halber soll letzteres angenommen werden, die Ergebnisse dieses Abschnitts lassen sich problemlos auf den kontinuierlichen Fall übertragen.

Der Operator  $\mathcal{L}_{\text{FP}}$  ist offenbar nicht hermitesch, jedoch läßt sich leicht ein selbstadjungierter Operator  $\mathcal{L}$  konstruieren:

$$\mathcal{L} := e^{\phi/2} \mathcal{L}_{\text{FP}} e^{-\phi/2}. \quad (\text{B.6})$$

Dies sei hier anhand zweier Lösungen der Fokker-Planck-Gleichung  $\mathcal{P}_1, \mathcal{P}_2$ , die die Randbedingungen erfüllen, kurz nachgeprüft:

$$\begin{aligned}
 \int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{P}_1 \mathcal{L} \mathcal{P}_2 dx &= \int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{P}_1 e^{\phi/2} \mathcal{L}_{\text{FP}} e^{-\phi/2} \mathcal{P}_2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{P}_1 D e^{\phi/2} \frac{\partial}{\partial x} e^{-\phi} \frac{\partial}{\partial x} e^{\phi/2} \mathcal{P}_2 dx \\
 &\stackrel{\text{P.I.}}{=} - \int_{-\infty}^{+\infty} \left[ D \frac{\partial}{\partial x} \mathcal{P}_1 e^{\phi/2} \right] e^{-\phi(x)} \left[ \frac{\partial}{\partial x} \mathcal{P}_2 e^{\phi/2} \right] dx \\
 &\stackrel{\text{P.I.}}{=} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{P}_2 D e^{\phi/2} \frac{\partial}{\partial x} e^{-\phi} \frac{\partial}{\partial x} e^{\phi/2} \mathcal{P}_1 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{P}_2 \mathcal{L} \mathcal{P}_1 dx,
 \end{aligned} \tag{B.7}$$

wobei bei den partiellen Integrationen ausgenutzt wurde, dass die Wahrscheinlichkeitsdichte bei  $x = \pm\infty$  ausreichend schnell verschwindet. Es gilt also  $\mathcal{L}^\dagger = \mathcal{L}$ . Sind nun  $\varphi_n(x)$  Eigenfunktionen des Fokker-Planck-Operators  $\mathcal{L}_{\text{FP}}$  mit Eigenwert  $\lambda_n$ , so sind mit

$$\psi_n(x) := e^{\phi/2} \varphi_n(x) \tag{B.8}$$

Eigenfunktionen des Operators  $\mathcal{L}$  mit den gleichen Eigenwerten  $\lambda_n$  gegeben:

$$\mathcal{L} \psi_n(x) = \lambda_n \psi_n(x). \tag{B.9}$$

Da der Operator  $\mathcal{L}$  hermitesch ist, sind seine Eigenwerte reell. Eigenfunktionen zu verschiedenen Eigenwerten sind orthogonal und lassen sich so normieren, dass sie eine Vollständigkeitsrelation erfüllen:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n \psi_m dx = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\phi} \varphi_n \varphi_m dx = \delta_{m,n}. \tag{B.10}$$

Es ist nun leicht, die Positivität der Eigenwerte zu erkennen:

$$\begin{aligned}
 \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_n e^{\phi} \mathcal{L}_{\text{FP}} \varphi_n dx &\stackrel{\text{(B.6)}}{=} \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_n e^{\phi/2} \mathcal{L} e^{\phi/2} \varphi_n dx \stackrel{\text{(B.8)}}{=} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n \mathcal{L} \psi_n dx \stackrel{\text{(B.10)}}{=} -\lambda_n \\
 &\stackrel{\text{(B.6)}}{=} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n D e^{\phi/2} \frac{\partial}{\partial x} e^{-\phi} \frac{\partial}{\partial x} e^{\phi/2} \psi_n dx \stackrel{\text{P.I.}}{=} -D \int_{-\infty}^{+\infty} \left( \frac{\partial}{\partial x} \psi_n e^{\phi/2} \right)^2 e^{-\phi} dx \leq 0.
 \end{aligned} \tag{B.11}$$

Mit  $D > 0$  folgt daraus, dass alle Eigenwerte von  $\mathcal{L}$  und damit auch von  $\mathcal{L}_{\text{FP}}$  größer oder gleich null sind. Das Gleichheitszeichen in (B.11) gilt gerade für die stationäre Verteilung mit dem Eigenwert  $\lambda_0 = 0$ :

$$\frac{\partial}{\partial x} (\psi_0 e^{\phi/2}) \stackrel{!}{=} 0 \quad \Rightarrow \quad \psi_0 = e^{-\phi/2}. \tag{B.12}$$

Die stationäre Verteilung für die Fokker-Planck-Gleichung (B.1) lautet also bis auf die Normierung:

$$\varphi_0(x) = e^{-\phi(x)/2} \psi_0(x) = e^{-\phi(x)}. \tag{B.13}$$

# Anhang C

## Exakte Lösung der FP-Gleichung für das Brownsche Teilchen

In diesem Anhang soll die exakte Lösung der Fokker-Planck-Gleichung für das Problem des Brownschen Teilchens mit dem Driftterm  $K(x) = -\gamma x$  abgeleitet werden. Hierbei wird die sogenannte *Methode der Charakteristiken* [BSMM95] zur Anwendung kommen, die es erlaubt, partielle Differentialgleichungen erster Ordnung zu integrieren. Die Methode läßt sich hier einsetzen, da die Fokker-Planck-Gleichung für diesen einfachen Fall mittels Fouriertransformation auf eine partielle Differentialgleichung erster Ordnung in  $k$  und  $t$  transformierbar ist. Gesucht ist die Lösung des Anfangswertproblems:

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x, t) = \frac{\partial}{\partial x} [\gamma x P(x, t)] + D \frac{\partial^2}{\partial x^2} P(x, t), \quad (\text{C.1})$$

$$P(x, t_0) = \delta(x - x_0). \quad (\text{C.2})$$

Durch Fouriertransformation:

$$\tilde{P}(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} P(x, t) e^{ikx} dx \quad (\text{C.3})$$

erhält man hieraus folgende Problemstellung:

$$\frac{\partial}{\partial t} \tilde{P}(k, t) + \gamma k \frac{\partial}{\partial k} \tilde{P}(k, t) = -D k^2 \tilde{P}(k, t), \quad (\text{C.4})$$

$$\tilde{P}(k, t_0) = e^{ikx_0}. \quad (\text{C.5})$$

Die Idee der Methode der Charakteristiken besteht nun darin, eine Kurve  $\{k(s), t(s)\}$  zu suchen, so dass sich (C.4) auf eine gewöhnliche Differentialgleichung reduziert:

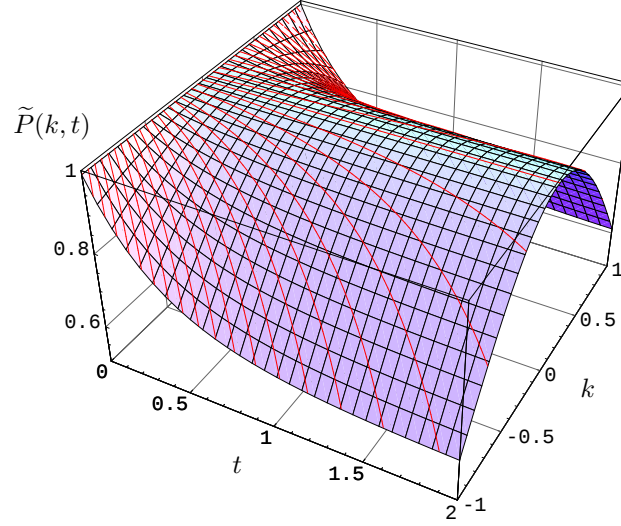
$$\frac{d}{ds} \tilde{P}(k, t) = \frac{dt}{ds} \frac{\partial}{\partial t} \tilde{P}(k, t) + \frac{dk}{ds} \frac{\partial}{\partial k} \tilde{P}(k, t) = f(k, t) \tilde{P}(k, t). \quad (\text{C.6})$$

Ein Vergleich von (C.6) mit (C.4) liefert dafür die Bedingungen

$$\frac{dt}{ds} = 1, \quad \frac{dk}{ds} = \gamma k. \quad (\text{C.7})$$

Diese lassen sich sofort integrieren zu:

$$t(s) = t_0 + s, \quad k(s) = k_0 e^{\gamma s}. \quad (\text{C.8})$$



**Abbildung C.1:** Fouriertransformierte der Wahrscheinlichkeitsverteilung  $\tilde{P}(k, t)$  für  $\gamma = D = 1$  und  $t_0 = x_0 = 0$ . Die Charakteristiken sind rot eingezeichnet: auf diesen durch  $s$  parametrisierten Kurven gilt für  $\tilde{P}(k(s), t(s))$  die gewöhnliche Differentialgleichung (C.9).

Damit ergibt sich für  $\tilde{P}(k(s), t(s))$  folgende gewöhnliche Differentialgleichung in  $s$ :

$$\frac{d\tilde{P}}{ds} = -Dk(s)^2 \tilde{P} = -Dk_0^2 e^{2\gamma s} \tilde{P}. \quad (\text{C.9})$$

Sie besitzt die Lösung:

$$\int_{\tilde{P}(k_0, t_0)}^{\tilde{P}(k(s), t(s))} \frac{d\tilde{P}}{\tilde{P}} = - \int_0^s Dk_0^2 e^{2\gamma s} ds \quad \Rightarrow \quad \log \left( \frac{\tilde{P}(k, t)}{C(k_0)} \right) = -\frac{Dk_0^2}{2\gamma} (e^{2\gamma s} - 1). \quad (\text{C.10})$$

Hier bezeichnet  $C(k_0)$  eine Integrationskonstante, die für jede Kurve  $\{k(s), t(s)\}$  einen anderen Wert haben kann, was durch die Abhängigkeit von  $k_0$  ausgedrückt wird. Die Bezeichnung  $C(k_0, t_0)$  zu verwenden wäre insofern irreführend, als dass  $k_0$  und  $t_0$  nicht unabhängig voneinander gewählt werden können, sondern über die Anfangsbedingung (C.5) miteinander verknüpft sind. Um  $C(k_0)$  zu bestimmen, drückt man daher  $k_0$  durch  $k_0(k) = ke^{-\gamma(t-t_0)}$  aus und verwendet die Anfangsbedingung (C.5):

$$C(k_0) = C(ke^{-\gamma(t-t_0)})|_{t=t_0} \stackrel{!}{=} e^{ikx_0} \quad \Rightarrow \quad C(k, t) = \exp(ikx_0 e^{-\gamma(t-t_0)}) \quad (\text{C.11})$$

Für die Fouriertransformierte der Lösung erhält man somit:

$$\tilde{P}(k, t) = \exp \left( ikx_0 e^{-\gamma(t-t_0)} - \frac{D}{2\gamma} k^2 (1 - e^{-2\gamma(t-t_0)}) \right) \quad (\text{C.12})$$

Die Lösung des Anfangswertproblems (C.1) ergibt sich durch Rücktransformation:

$$\begin{aligned} P(x, t) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{P}(k, t) e^{-ikx} dk \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left( -\frac{D}{2\gamma} k^2 (1 - e^{-2\gamma(t-t_0)}) + ik(x_0 e^{-\gamma(t-t_0)} - x) \right) dk \end{aligned} \quad (\text{C.13})$$

Durch Auswertung des Gaußschen Integrals erhält man das Endergebnis:

$$P(x, t) = \sqrt{\frac{\gamma}{2\pi D(1 - e^{-2\gamma(t-t_0)})}} \exp \left[ -\frac{\gamma}{2D} \frac{(x - x_0 e^{-\gamma(t-t_0)})^2}{1 - e^{-2\gamma(t-t_0)}} \right] \quad (\text{C}\cdot 14)$$

Im rechten Teil der Abbildung C.1 sind die charakteristischen Kurven für dieses Beispiel dargestellt. Auf diesen durch  $s$  parametrisierten Kurven genügt  $\tilde{P}(k(s), t(s))$  der gewöhnlichen Differentialgleichung (C.9).

Alternativ und etwas einfacher läßt sich die Lösung von Gleichung (C.1) mit dem Ansatz

$$P(x, t) = \exp [-a(t)x^2 - b(t)x - c(t)] \quad (\text{C}\cdot 15)$$

gewinnen. Eingesetzt in (C.1) erhält man durch Koeffizientenvergleich in  $x$  die folgenden drei gewöhnlichen Differentialgleichungen:

$$\begin{aligned} \dot{a}(t) &= 2\gamma a(t) - 4D a(t)^2 \\ \dot{b}(t) &= \gamma b(t) - 4D a(t) b(t) \\ \dot{c}(t) &= -\gamma + 2D a(t) - D b(t)^2 \end{aligned} \quad (\text{C}\cdot 16)$$

mit folgenden an die Anfangsbedingung (C.2) angepaßten Lösungen:

$$\begin{aligned} a(t) &= \frac{\gamma}{2D} \frac{1}{1 - e^{-2\gamma(t-t_0)}} \\ b(t) &= -\frac{\gamma}{D} \frac{x_0 e^{-\gamma(t-t_0)}}{1 - e^{-2\gamma(t-t_0)}} \\ c(t) &= \frac{1}{2} \log [2\pi D(1 - e^{-2\gamma(t-t_0)})/\gamma] + \frac{\gamma}{2D} \frac{x_0^2 e^{-2\gamma(t-t_0)}}{1 - e^{-2\gamma(t-t_0)}} \end{aligned} \quad (\text{C}\cdot 17)$$

In (C.15) eingesetzt ergeben sie die Lösung (C.14).

# Anhang D

## Ausgewählte *MATHEMATICA*® Routinen

### D.1 Berechnung der Störungskoeffizienten

Die folgenden *MATHEMATICA*®-Anweisungen berechnen die Koeffizienten der Kumulantenentwicklung. Für die erste Ordnung geht die Berechnung noch *sehr* schnell:

```

δ /: δi_,k_ := If[i == k, 1, 0]

β /: β0,0,0 = 0;

β /: βn_,k_,l_ :=
  0 /; (n == 0 && k > 0) || n < 0 || k < 0 || k > 2 n + 2 || l < 0 || l > 2 n + 2 - k || OddQ[k + 1]

β /: βn_,k_,l_ := β /: βn,k,1 = Module[{f},
  f = ∫ sn,k,1 τ-k (τ2 - 1)k dτ; Expand[ $\frac{\tau^k}{(\tau^2 - 1)^k}$  (f - Limit[f, τ → τ0])]
  s /: s1,k_,l_ := s /: s1,k,1 = - $\frac{3}{\gamma \tau}$  δk,2 δ1,0 +  $\frac{1}{d (\tau^2 - 1)}$  δk,3 δ1,1 -  $\frac{1}{d (\tau^3 - \tau)}$  δk,4 δ1,0 +
 $\frac{2 (k + 1)}{\tau^2 - 1}$  β1,k+1,1-1 -  $\frac{d (k + 2) (k + 1)}{\gamma \tau}$  β1,k+2,1 // Expand
  s /: sn_,k_,l_ := s /: sn,k,1 = - $\frac{k - 2}{\gamma \tau}$  βn-1,k-2,1 +  $\frac{2 (k + 1)}{\tau^2 - 1}$  βn,k+1,1-1 -  $\frac{d (k + 2) (k + 1)}{\gamma \tau}$  βn,k+2,1 -
 $\frac{d}{\gamma \tau} \sum_{m=1}^{n-1} \sum_{j=1}^{k+1} j (k - j + 2) \sum_{i=0}^1 \beta_{m,j,i} \beta_{n-m,k-j+2,1-i}$  // Expand
  CalcSimpOrder[n_] := Table[
    TimeC = First[Timing[βn,k,1]];
    TimeS = First[Timing[β /: βn,k,1 = Simplify[βn,k,1]]];
    {k, 1, TimeC, TimeS}, {k, 2 n + 2, 0, -1}, {1, If[EvenQ[k], 0, 1], 2 n + 2 - k, 2}];
  TableForm[Flatten[CalcSimpOrder[1], 1],
    TableHeadings → {None, {"k", "l", "Calculation Time", "Simplification Time"}}]

```

| k | l | Calculation Time | Simplification Time |
|---|---|------------------|---------------------|
| 4 | 0 | 0. Second        | 0. Second           |
| 3 | 1 | 0.05 Second      | 0. Second           |
| 2 | 0 | 0.05 Second      | 0. Second           |
| 2 | 2 | 0.06 Second      | 0. Second           |
| 1 | 1 | 0.07 Second      | 0. Second           |
| 1 | 3 | 0.06 Second      | 0. Second           |
| 0 | 0 | 0.13 Second      | 0.01 Second         |
| 0 | 2 | 0.12 Second      | 0. Second           |
| 0 | 4 | 0.12 Second      | 0. Second           |

## D.2 Schwach- und Starkkopplungskoeffizienten für die Reihenentwicklungen der Normierung

Mit den nachfolgenden *MATHEMATICA*®-Anweisungen lassen sich die Koeffizienten der folgenden Reihen effizient bestimmen:

$$\mathcal{N}(\gamma, g) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n g^n = g^{1/4} \sum_{j=0}^{\infty} b_j g^{-j/2} = \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\frac{\gamma}{2}x^2 - \frac{g}{4}x^4\right) dx \right]^{-1}$$

Für die Schwachkopplungskoeffizienten  $a_n$  verwendet man:

```
a[0] = Sqrt[γ / (2 π)];
a[n_] := a[n] = Coefficient[
Series[1/Sum[√2 (-g)k γ-1/2-2k / k! Gamma[1/2 + 2k], {k, 0, n}], {g, 0, n}], gn]

Table[√2 π / γ a[n], {n, 0, 10}] // PowerExpand

{1, 3/4 γ2, -87/32 γ4, 2889/128 γ6, -581157/2048 γ8, 38668509/8192 γ10, -6373675971/65536 γ12,
625617932337/262144 γ14, -569935656081837/8388608 γ16, 73872455623183089/33554432 γ18, -21481331767300537641/268435456 γ20}
```

In ähnlicher Weise lassen sich beliebig viele Starkkopplungskoeffizienten  $b_j$  bestimmen:

```
Ng = 1 / Integrate[Exp[-γ / 2 x2 - g / 4 x4], {x, -∞, ∞}, Assumptions -> {Re[g] > 0}];
b[0] = PowerExpand[Limit[g-1/4 Ng, g -> ∞]];
b[j_] := b[j] = PowerExpand[Coefficient[Series[Ng g-1/4 /. g -> y2, {y, 0, j + 1}], yj]]

Table[b[j], {j, 0, 10}] // N

{0.390062, 0.131837 γ, -0.00419838 γ2, -0.00141901 γ3, 0.000536178 γ4, -0.0000934375 γ5,
2.56044 × 10-6 γ6, 3.82166 × 10-6 γ7, -1.29916 × 10-6 γ8, 2.05153 × 10-7 γ9, 3.39549 × 10-9 γ10}
```

Dies sind gerade die Koeffizienten, die in den Abbildungen 2.1 und 2.2 aufgelistet sind.

## D.3 Störungsreihe für die Verteilungsfunktion

Die folgenden *MATHEMATICA*®-Anweisungen spiegeln in etwa die Schritte wieder, die für das kleine Beispiel am Anfang von Abschnitt 3.6 notwendig sind. Um die in D.1 berechneten Koeffizienten verwenden zu können, müssen die Beziehungen 3.1 und 3.5 rückeingesetzt werden:

```
P0[x_, t_] = √[γ / (2 π (d - ((d - γ σ2) Exp[-2 γ t])))] Exp[-γ / 2 (x - μ Exp[-γ t])2 / (d - ((d - γ σ2) Exp[-2 γ t]))];

p1[x_, t_] =
Sum[gn Sum[Sum[βn,k,1 x01 xk /. {x0 -> μ / τ0, τ -> τ0 Exp[-γ t], τ0 -> Sqrt[1 - γ σ2 / d]}], {k, 0, 2 n + 2}], {n, 1, 2}];

P1[x_, t_] = P0[x, t] Exp[p1[x, t]];
```

Ein kurzer Konsistenzcheck zeigt, dass  $P1[x, t]$  die Fokker-Planck-Gleichung bis zur ersten Ordnung in  $g$  löst und die Anfangsbedingung erfüllt:

```
Series[-∂t P1[x, t] + ∂x ((γ x + g x3) P1[x, t]) + d ∂x,x P1[x, t], {g, 0, 1}]
0[g]2

P1[x, 0] // PowerExpand


$$\frac{e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}}{\sqrt{2\pi}\sigma}$$

```

Das folgende Kommando implementiert das „Kochrezept“ 3.80:

```
VPTexpand[f_, n_: 1] := Module[{r},
  r = Series[Evaluate[f /. {γ → K + λ (γ - K), g → λ g}], {λ, 0, n}] // Normal; r /. {λ → 1}]
```

Nun wird die Kumulante  $W1[x, t]$  definiert und in eine Variationsstörungsreihe  $W1vpt[x, t]$  entwickelt sowie die erste Ableitung  $dw1vpt[1, x, t]$  bestimmt.

```
W1[x_, t_] = Log[P1[x, t]];

W1vpt[x_, t_] = VPTexpand[W1[x, t]];

dw1vpt[1, x_, t_] = D[W1vpt[x, t], {K, 1}];
```

Die Parameterwerte des betrachteten Systems werden in **vals** abgelegt...

```
vals = {g → 1, γ → 0.1, d → 1, σ → 0.1, μ → 0};
```

...und schon kann der erste **ContoutPlot** der Nullstellen angefertigt werden:

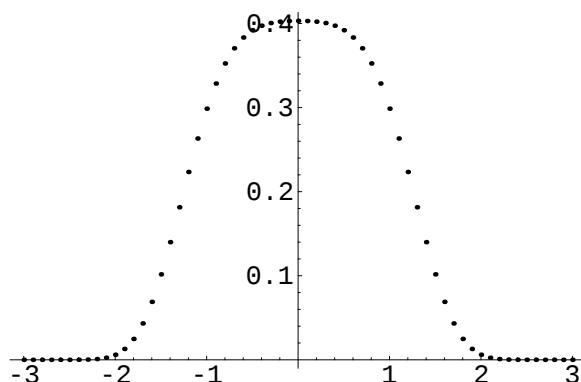
```
ContourPlot[Evaluate[dw1vpt[1, x, 3] /. vals], {x, -3, 3}, {K, -65, 10}, Contours → {0},
  ContourShading → False, AspectRatio → 1/GoldenRatio, PlotPoints → 100];
```

Um die Nullstellen im Intervall  $[1, 3]$  zu bestimmen, kommt **FindRoot** zum Einsatz:

```
zerosList = Table[
  {x, K /. FindRoot[Evaluate[dw1vpt[1, x, 3] /. vals] == 0, {K, 1, 3}}], {x, -3, 3, .1}];
```

Einsetzen der optimierten Variationsparameter ergibt die Variationsstörungslösung für die Verteilungsfunktion:

```
probList = {#[[1]], (Exp[W1vpt[#[[1], 3]] /. vals /. K → #[[2]])} & /@ zerosList;
ListPlot[Rescale[probList]];
```



# Literaturverzeichnis

- [BSMM95] BRONSTEIN, I. N. ; SEMENDJAEV, K. A. ; MUSIOL, G. ; MÜHLIG, H.: *Taschenbuch der Mathematik*. 2., überarb. und erw. Aufl. Frankfurt am Main : Harri Deutsch Verlag, 1995. – 1020 S. – ISBN 3-8171-2002-8
- [BW69] BENDER, Carl M. ; WU, Tai T.: Anharmonic Oscillator. In: *Phys. Rev.* **184** (1969), S. 1231–1260. – <http://link.aps.org/abstract/PR/v184/p1231>
- [BW73] BENDER, Carl M. ; WU, Tai T.: Anharmonic Oscillator. II. A Study of Perturbation Theory in Large Order. In: *Phys. Rev. D* **7** (1973), S. 1620–1636. – <http://link.aps.org/abstract/PRD/v7/p1620>
- [Ein05] EINSTEIN, A.: Über die von der molekularkinetische Theorie der Wärme geforderte Bewegung von in ruhenden Flüssigkeiten suspendierten Teilchen. In: *Ann. Phys.* **17** (1905), S. 549–560
- [FK86] FEYNMAN, R. P. ; KLEINERT, H.: Effective classical partition functions. In: *Phys. Rev. A* **34** (1986), S. 5080. – <http://link.aps.org/abstract/PRA/v34/p5080>
- [Fok14] FOKKER, A. D.: Die mittlere Energie rotierender elektrischer Dipole im Strahlungsfeld. In: *Ann. Phys.* **43** (1914), S. 810–820
- [Gar85] GARDINER, C. W. ; HAKEN, H. (Hrsg.): *Handbook of Stochastic Methods*. 2nd Ed. Springer, 1985 (Springer Series in Synergetics, Vol. 13). – 442 S. – <http://www.vuw.ac.nz/~gardiner/cwgbooks.html>. – ISBN 3-540-61634-9
- [HP01] HAMPRECHT, B. ; PELSTER, A.: The highest-derivative Variant of Variational Perturbation Theory. In: JANKE, W. (Hrsg.) ; PELSTER, A. (Hrsg.) ; SCHMIDT, H.-J. (Hrsg.) ; BACHMANN, M. (Hrsg.): *Fluctuating Paths and Fields*. Singapore : World Scientific, 2001. – <http://www.physik.fu-berlin.de/~kleinert/book/articles.html>, Kapitel 3, S. 347–364
- [JK95] JANKE, W. ; KLEINERT, H.: Convergent Strong-Coupling Expansions from Divergent Weak-Coupling Perturbation Theory. In: *Phys. Rev. Lett.* **75** (1995), S. 2787–2791. – <http://link.aps.org/abstract/PRL/v75/p2787>

- [KJ95] KLEINERT, H. ; JANKE, W.: Convergence behavior of variational perturbation expansion — A method for locating Bender-Wu singularities. In: *Phys. Lett. A* **206** (1995), S. 283–289. — <http://xxx.lanl.gov/abs/quant-ph/9509005>
- [Kle95] KLEINERT, H.: *Path Integrals in Quantum Mechanics Statistics and Polymer Physics*. 2nd Ed. Singapore : World Scientific, 1995. — 860 S. — <http://www.physik.fu-berlin.de/~kleinert/re.html>. — ISBN 9410214715
- [KPP01] KLEINERT, H. ; PELSTER, A. ; PUTZ, M.: Variational Perturbation Theory for Markov Processes. (2001). — Phys. Rev. E accepted for publication
- [KSF01] KLEINERT, H. ; SCHULTE-FROHLINDE, V.: *Critical Properties of  $\phi^4$ -Theories*. 1st Ed. Singapore : World Scientific, 2001. — 512 S. — <http://www.physik.fu-berlin.de/~kleinert/re.html>. — ISBN 981-02-4658-7
- [Lan08] LANGEVIN, P.: Sur la Theorie du Mouvement Brownien. In: *Comptes Rendus* **146** (1908), S. 530
- [Oko01] OKOPIŃSKA, Anna: The Fokker-Planck equation for bistable potential in the optimized expansion. (2001). — submitted to Phys. Rev. E, <http://arXiv.org/abs/cond-mat/0111389>
- [Pla17] PLANCK, M.: Über einen Satz der statistischen Dynamik und seine Erweiterung in der Quantentheorie. In: *Sitzungsber. Preuß. Akad. Wiss.* (1917), S. 324–341
- [PTVF93] PRESS, W. H. ; TEUKOLSKY, S. A. ; VETTERLING, W. T. ; FLANNERY, B. P.: *Numerical Recipes in C: The Art of Scientific Computing*. 2nd Ed. Cambridge University Press, 1993. — 994 S. — <http://www.nr.com/>. — ISBN 3-540-61634-9
- [Ris84] RISKEN, H. ; HAKEN, H. (Hrsg.): *The Fokker-Planck Equation*. 2nd Ed. Springer, 1984 (Springer Series in Synergetics, Vol. 18). — 472 S. — ISBN 3-540-61530-X
- [Ste81] STEVENSON, P. M.: Optimized perturbation theory. In: *Phys. Rev. D* **23** (1981), S. 2916–2944. — <http://link.aps.org/abstract/PRD/v23/p2916>
- [Wol99] WOLFRAM, S.: *The MATHEMATICA® Book*. 4th Ed. Cambridge University Press, 1999. — 1470 S. — <http://documents.wolfram.com/v4/>. — ISBN 0521643147