

# Elimination schneller chaotischer Freiheitsgrade in Hamiltonschen Systemen

## Dissertation

zur Erlangung des Doktorgrades  
des Fachbereichs Mathematik und Naturwissenschaften (Dr. rer. nat.)  
der Bergischen Universität Wuppertal

WUB-DIS 2004-07

vorgelegt von

**Nilüfer Baba**

geboren am 01.08.1974 in Berlin

November 2004

erstellt am

MAX-PLANCK-INSTITUT FÜR PHYSIK KOMPLEXER SYSTEME  
DRESDEN

Die Dissertation kann wie folgt zitiert werden:

urn:nbn:de:hbz:468-20050094

[<http://nbn-resolving.de/urn/resolver.pl?urn=urn%3Anbn%3Ade%3Ahbz%3A468-20050094>]

# Abstract

Many natural systems which are of scientific relevance are coupled systems with time scale separation. Low dimensional systems with fast chaotic degrees of freedom constitute a large class of such systems. The presence of the fast degrees of freedom makes the study of long time behavior difficult or even impossible. Such long time predictions are important and desired in many cases, like for example in the study of climate or ecological changes, where they play a very important role. However, only the slow variables are relevant when considering such large time intervals. Therefore it is of great interest to find a way to get rid of the fast degrees of freedom, and thus to achieve a reduced description in terms of the slow variables. There are well known techniques for the elimination of fast degrees of freedom like adiabatic elimination or averaging, which assume that the fast dynamics is relaxing fast to an equilibrium state or quasi-periodic, respectively. However, for systems with chaotic fast degrees of freedom these techniques cannot be applied.

In this work we examine one technique for the elimination of fast degrees of freedom for the large class of Hamiltonian systems with time scale separation showing chaotic behaviour in their fast variables. This technique is based on the idea of replacing the fast variables by a suitable stochastic process. In this method we assume that the time scale separation is pronounced and can be expressed via a parameter that is small compared to unity. Formal perturbation expansions over this small parameter, involving a Markov approximation, yield a Fokker-Planck equation in the slow subspace which respects conservation of energy. A detailed numerical and analytical investigation of several suitable model systems demonstrates the accuracy and the efficiency of this technique. The results show that non-Markovian and non-Gaussian features of the fast variables are negligible, especially if the long time behaviour is considered.





# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>9</b>
1.1	Chaos versus stochastischer Prozess . . . . .	11
<b>2</b>	<b>Theorie: Eliminationsverfahren für Hamiltonsches Chaos</b>	<b>13</b>
2.1	Grundkonzept der Projektionsmethode . . . . .	14
2.1.1	Nakajima-Zwanzig-Formalismus . . . . .	15
2.2	Skizze: Herleitung einer Fokker-Planck-Gleichung . . . . .	17
2.2.1	Bornsche Näherung . . . . .	21
2.2.2	Markov-Approximation . . . . .	22
<b>3</b>	<b>Pseudo-Hamiltonsches Kubo-Modell</b>	<b>25</b>
3.1	Kubo-Oszillator . . . . .	25
3.2	Einkubomodell . . . . .	27
3.3	Diracsche Störungsrechnung für das Einkubomodell . . . . .	28
3.3.1	Herleitung des Driftkoeffizienten . . . . .	29
3.3.2	Herleitung des Diffusionskoeffizienten . . . . .	33
3.3.3	Vergleich mit Eliminationsverfahren . . . . .	35
3.4	Vergleich Theorie und Numerik: Fokker-Planck-Näherung . . . . .	36
3.4.1	Numerische Bestimmung von Drift- und Diffusionskoeffizienten . . .	37
3.4.2	Abweichungen von der Theorie . . . . .	42
3.5	Momente und Autokorrelation des langsamen Oszillators . . . . .	43
3.5.1	Kurzzeitverhalten . . . . .	45
3.5.2	Langzeitverhalten . . . . .	46
3.5.3	Langsame Autokorrelationen . . . . .	46
3.6	Zweikubomodell - Einfluss der schnellen Dimensionen . . . . .	48
3.6.1	Reduzierte Bewegungsgleichung . . . . .	49
3.6.2	Numerischer Vergleich . . . . .	50
3.7	Reduzierte stationäre Dichte . . . . .	52
3.7.1	Thermodynamischer Limes: Das $n$ -Kubomodell . . . . .	53
3.7.2	Untersuchungen zum Langzeitverhalten . . . . .	54

<b>4</b>	<b>Koexistenz von regulärer und chaotischer Dynamik</b>	<b>57</b>
4.1	Hamiltonsches Chaos und Markov-Approximation . . . . .	59
4.2	Gekoppelte symplektische Abbildungen: Zerfall schneller Korrelationen . . . . .	60
4.2.1	Langsame Katzen- und schnelle Schanz-Abbildung . . . . .	63
4.2.2	Langsame Standard- und schnelle Schanz-Abbildung . . . . .	66
4.2.3	Langsame Harmonische- und schnelle Schanz-Abbildung . . . . .	68
4.2.4	Vergleich der Zerfallseigenschaften . . . . .	70
<b>5</b>	<b>Anwendungen I: Schnelles Hamiltonsches Chaos</b>	<b>73</b>
5.1	Hamiltonsches System mit quartischem Potential . . . . .	74
5.1.1	Theoretisch vorhergesagte Fokker-Planck-Koeffizienten . . . . .	76
5.1.2	Numerisch: Diffusionsbestimmung . . . . .	78
5.1.3	Abweichungen von der Theorie . . . . .	79
5.1.4	Lyapunov-Exponenten . . . . .	80
5.1.5	Kurz- und Langzeitverhalten . . . . .	83
5.2	Hénon-Heiles-Modell als schnelles Subsystem . . . . .	89
5.2.1	Theoretisch vorhergesagte Fokker-Planck-Koeffizienten . . . . .	90
5.2.2	Langzeitverhalten: Einfluss regulärer Regionen und der Ankopplung	93
5.3	Höherdimensionales Chaos: 6-dimensionales System . . . . .	97
5.3.1	Lyapunov-Exponenten . . . . .	98
5.3.2	Theoretisch vorhergesagte Fokker-Planck-Koeffizienten . . . . .	100
5.3.3	Numerische Diffusionsbestimmung . . . . .	101
5.3.4	Einfluss der schnellen Dimensionen auf das Zeitverhalten . . . . .	102
<b>6</b>	<b>Anwendungen II: Wasserstoff-Atom im homogenen Magnetfeld</b>	<b>107</b>
6.1	Klassische Behandlung des Wasserstoff-Atoms . . . . .	108
6.1.1	Hamiltonsche Bewegungsgleichungen . . . . .	109
6.1.2	Anwendung des Eliminationsverfahrens: Diffusionsgleichung der Schwer- punktsbewegung . . . . .	110
6.2	Chaotische Schwerpunktsbewegung und Eliminationsverfahren . . . . .	112
6.2.1	Vergleich der Diffusionskoeffizienten . . . . .	113
6.2.2	Zeitliche Entwicklung: Momente . . . . .	117
<b>7</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>119</b>
<b>A</b>	<b>Numerische Integratoren</b>	<b>125</b>
<b>B</b>	<b>Zustandsdichte Quartischer Systeme: Elliptische Integrale</b>	<b>127</b>
<b>C</b>	<b>Herleitung: Diffusionsgleichung der Schwerpunktsbewegung</b>	<b>129</b>





# Kapitel 1

## Einleitung

Viele Phänomene in der Natur sind charakterisiert durch gekoppelte Prozesse, deren Dynamik auf verschiedenen Zeitskalen ablaufen. Es gibt zahllose Beispiele aus nahezu allen Forschungsbereichen: Angefangen bei der Physik, über die Biologie, die Medizin, die Meteorologie bis hin zur Kursentwicklung von Wertpapieren auf den Finanzmärkten. Für eine Reihe von Systemklassen kann man die Trennung der Zeitskalen ausnutzen, um die Lösung der vollen, gekoppelten Dynamik in geeigneter Weise zu vereinfachen und reduzierte Gleichungen für das langsame System abzuleiten.

Im Hinblick auf das Langzeitverhalten ist es im besonderen Maße hilfreich, die Zahl der Freiheitsgrade, insbesondere der schnellen, zu reduzieren. Für eine Vielzahl gekoppelter Systeme kann das Langzeitverhalten bei detaillierter Berücksichtigung der schnellen Freiheitsgrade nicht simuliert werden. In vielen Fällen sind jedoch Langzeitprognosen, wie z.B. beim Klima oder der Entwicklung ökologischer Systeme wichtig und daher erwünscht. Bereits im Rahmen der Statistischen Physik des Nichtgleichgewichts stellt die Modellierung der schnellen Freiheitsgrade durch einen geeigneten stochastischen Prozess eine wohlbekannte Herangehensweise dar. Sie führt zu effektiv reduzierten Beschreibungen wie der Boltzmann-, der Master- oder der Fokker-Planck-Gleichung [1, 2]. Allerdings wird hier eine unendliche Anzahl schneller Freiheitsgrade, welche zu einem gewissen Grad im lokalen thermodynamischen Gleichgewicht liegen, vorausgesetzt. Im Thermodynamischen Limes wirkt das schnelle Teilsystem<sup>1</sup> als Wärmebad für das langsame. Wenn kein lokales thermodynamisches Gleichgewicht vorliegt, sind andere Verfahren zur Elimination der schnellen Freiheitsgrade heranzuziehen. Zwei recht bekannte Methoden sind die *adiabatische Elimination*<sup>2</sup> [3] und die *adiabatische Mittelung* (oder *averaging*) [4, 5]. Die erste ist immer dann anwendbar, wenn die zugehörige Dynamik relaxierend ist, während die zweite Methode schnelle quasiperiodische Prozesse erfordert. In diesen Fällen gewinnt man eine effektive deterministische Bewegungsgleichung, in der nur noch die langsamen Freiheitsgrade auftreten. Der Einfluss der schnellen Freiheitsgrade wird in einer geeigneten Funktion der langsamen zusammengefasst.

Ein instruktives Beispiel ist das Ozean-Atmosphären-Modell, das zur Vorhersage von

---

<sup>1</sup>Das schnelle Teilsystem ist dasjenige System, welches die schnellen Freiheitsgrade umfasst.

<sup>2</sup>Versklavungsprinzip nach Haken

Klimaänderungen verwendet wird. Hier funktioniert allerdings keines der oben genannten Verfahren zur Ableitung einer reduzierten Bewegungsgleichung, da die schnellen Freiheitsgrade weder relaxierend noch quasiperiodisch sind. Das Wetter wird in diesem Modell durch sich in der Atmosphäre ausbildende Strukturen in Form von Zyklonen und Antizyklonen mit einer Lebensdauer von wenigen Tagen bestimmt. Für das Klima hingegen sind die Veränderungen des Ozeans verantwortlich, die auf einer Zeitskala von einigen hundert Jahren liegen. Hier existiert auf natürliche Weise eine Trennung der Zeitskalen, bei der das Wetter die Rolle des schnellen und das Klima die des langsamen Prozesses übernimmt. Die Atmosphäre, die das Wetter bestimmt, ist jedoch weder im thermodynamischen Gleichgewicht, noch verfügt sie über eine relaxierende oder quasiperiodische Dynamik. Sie zeichnet sich vielmehr durch eine chaotische und turbulente Dynamik aus. Für die große Klasse von schnellen chaotischen Systemen mit endlicher Anzahl von Freiheitsgraden gab es bisher kein befriedigendes Eliminationsverfahren.

Im Rahmen der Klimaforschung wurde 1976 erstmals die Verwendung eines stochastischen Klimamodells von Hasselmann [6] vorgeschlagen. Neuerdings wird diese Idee von einigen Mathematikern [7] wieder aufgegriffen. Das Ziel ist hierbei, die schnellen chaotischen Freiheitsgrade durch Rauschen, d.h. einen geeigneten stochastischen Prozess, zu ersetzen. Das volle deterministische System wird durch eine stochastische Differentialgleichung approximiert. Dieses Grundkonzept ist sehr verwandt mit der Vorgehensweise in der Statistischen Physik.

In dieser Arbeit beschränken wir uns auf Systeme mit einer endlichen Zahl von Freiheitsgraden, wobei das schnelle Subsystem auch chaotisch ist. Auch hier sind Verfahren wie adiabatische Elimination oder *averaging* nicht anwendbar. Es stellen sich an dieser Stelle zwei entscheidende Fragen: Zum einen, wie man systematisch ein stochastisches Modell für das deterministische System ableiten kann und zum anderen, in welchem Sinne die stochastische Bewegungsgleichung für die langsamen Variablen eine sinnvolle Approximation des deterministischen Ausgangssystems darstellt.

Für die Klasse Nicht-Hamiltonscher Systeme konnten diese Fragen geklärt und ein Verfahren zur Elimination schneller chaotischer Freiheitsgrade entwickelt werden. Die wesentlichen Arbeiten wurden hierbei in der Arbeitsgruppe Kantz et al. [8, 9, 10] durchgeführt. Das Ziel der vorliegenden Arbeit besteht nun darin, ein entsprechendes Verfahren für gekoppelte Hamiltonsche Systeme zu untersuchen und seine Leistungsfähigkeit mittels geeigneter Beispielsysteme zu überprüfen. Der Ausgangspunkt ist, wie auch im Nicht-Hamiltonschen Fall, ein zweikomponentiges System bei dem lediglich zwischen *schneller* und *langsamer* Zeitskala unterschieden wird.

Die Arbeit gliedert sich in die folgende Teile: In **Kapitel 2** wird die Herleitung der reduzierten Bewegungsgleichung zur Beschreibung der langsamen Dynamik unter Verwendung der Projektionsmethode im Sinne des Nakajima-Zwanzig-Formalismus dargelegt, s.a. [11]. Im anschließenden **Kapitel 3** wird das gewonnene Verfahren auf die *Pseudo-Hamiltonschen Kubomodelle* angewandt, welche als idealisierte Modellsysteme zu betrachten sind. Sie bestehen aus einem langsamen und einem schnellen Subsystem, wobei in das schnelle ein *Gaußscher* Rauschprozess geeignet eingekoppelt wird. Dadurch zerfallen die Korrelationen exponentiell schnell und die Dynamik des schnellen Systems kann als Markov-Prozess inter-

pretiert werden. Auf diese Weise wird die im Rahmen der Herleitung verwendete Markov-Approximation exakt.

Im Allgemeinen ist Hamiltonsches Chaos hingegen durch Zerfallsprozesse gekennzeichnet, die nicht ausschließlich exponentiell verlaufen. Der Grund hierfür ist ein gemischter Phasenraum mit koexistierenden regulären und chaotischen Bereichen. Vor diesem Hintergrund werden in **Kapitel 4** die Grenzen der Anwendbarkeit der Markov-Approximation anhand der Untersuchung von Wiederkehr-Verteilungen gekoppelter, symplektischer Abbildungen diskutiert. In **Kapitel 5** und **6** wird die Güte der Vorhersage und der Vorhersagehorizont des betrachteten Eliminationsverfahrens bei der Anwendung auf Hamiltonsche Systeme untersucht. In **Kapitel 5** werden diese Untersuchungen an einer Reihe von einfachen Modellsystemen vorgenommen, wohingegen in **Kapitel 6** mit dem Wasserstoff-Atom im homogenen Magnetfeld ein realistisches, physikalisches System betrachtet wird.

## 1.1 Chaos versus stochastischer Prozess

Das im Folgenden im Detail diskutierte Eliminationsverfahren für gekoppelte Hamiltonsche Systeme basiert auf der Idee, die schnellen chaotischen Freiheitsgrade durch einen geeigneten stochastischen Prozess zu ersetzen. Dies setzt jedoch voraus, dass chaotische und stochastische Prozesse über gemeinsame Eigenschaften verfügen, wodurch dieser Ansatz gerechtfertigt werden kann.

Betrachtet man experimentell gewonnene Messreihen derartiger Prozesse, dann ist eine Unterscheidung chaotischer und stochastischer Prozesse auf dieser *makroskopischen* Ebene unter bestimmten Bedingungen schwierig oder gar unmöglich. Die von Irregularität geprägte Dynamik beider Prozesse unterstreicht vielmehr ihre Ähnlichkeit. Unterdessen kann auf der *mikroskopischen* Ebene sehr wohl zwischen chaotischem und stochastischem Verhalten unterschieden werden. Die chaotische Dynamik ist determiniert durch nichtlineare Bewegungsgleichungen einiger weniger Freiheitsgrade, wohingegen der stochastische Prozess als die Summe einer unendlich großen Zahl mikroskopischer Prozesse aufzufassen ist.

Damit eng verbunden ist die Tatsache, dass der Träger der chaotischen Dynamik im Phasenraum im Gegensatz zum stochastischen Fall endlich ist. Die zeitliche Entwicklung eines chaotischen Systems wird durch die zugehörige invariante Menge im Phasenraum charakterisiert. Der maximale Abstand zwischen zwei Punkten auf der invarianten Menge ist endlich und nach oben beschränkt. Diese Eigenschaft hat gravierende Folgen, wenn man z.B. die stochastische Resonanz am Doppelmulden-Potential betrachtet. Beim Einkoppeln einer stochastischen Kraft mit unbegrenztem Träger wie z.B. Gaußschen Rauschens können nämlich, auch wenn die Kraft im Mittel sehr klein ist, zufällige Fluktuationen mit ausreichend großen Amplituden auftreten, so dass die Potentialerhebung übersprungen werden kann und das Teilchen die Mulde wechselt. Wird nun ein chaotisches System an das Doppelmulden-Potential angekoppelt, dann ist bei entsprechender Skalierung der chaotischen Systemdynamik kein Springen zwischen den Potentialmulden möglich, weil der Träger der invarianten Menge endlich ist [12].

In der kürzlich erschienen Arbeit von Kantz et al. [9] konnte gezeigt werden, dass die Unterschiede zwischen chaotischen und stochastischen Prozesse lediglich auf kleinen Skalen relevant sind. Auf großen Skalen hingegen werden beide Prozesse ununterscheidbar. Hierzu wurden Dimensionsbetrachtungen auf der Basis der Kolmogorov-Sinai-Entropie (KS-Entropie) durchgeführt. Die KS-Entropie ist ein Maß für den Informationsverlust über den Systemzustand pro Zeiteinheit. Für reguläre Systeme ist sie gleich Null, für chaotische Systeme ist sie größer Null aber endlich, während sie für stochastische Prozesse unendlich groß wird. Betrachtet man jedoch gekoppelte Systeme mit ausgeprägter Zeitskalentrennung  $0 < \varepsilon \ll 1$  und einem schnellen chaotischen Subsystem, dann skaliert die KS-Entropie wie  $KS \rightarrow KS/\varepsilon$ . Das heißt, auf großen Skalen divergiert also auch die KS-Entropie chaotischer Systeme, wodurch sie den stochastischen Systemen zunehmend ähnlicher werden.

Im Rahmen der Ableitung des Eliminationsverfahrens wird sich zeigen, dass der Zerfall der Korrelationen die entscheidende Eigenschaft des schnellen Systems ist, welche für seine Anwendbarkeit erforderlich ist. Über diese Eigenschaft verfügen chaotische und stochastische Systeme in gleichem Maße. Vor diesem Hintergrund ist eine Modellierung der chaotischen Freiheitsgrade durch einen geeigneten stochastischen Prozess nur konsequent.

In frühen Arbeiten von Zaslavsky [13] und auch Chirikov [14] wird im Zusammenhang mit der chaotischen Dynamik in Hamiltonschen Systemen häufig von *stochastic web* gesprochen. Aus dieser begrifflichen Identifikation chaotischer und stochastischer Prozesse wird ersichtlich, dass diese großen Wissenschaftler intuitiv bereits in einer frühen Phase der *Nichtlinearen Forschung* die Analogie zwischen diesen Prozessen gesehen haben.



# Kapitel 2

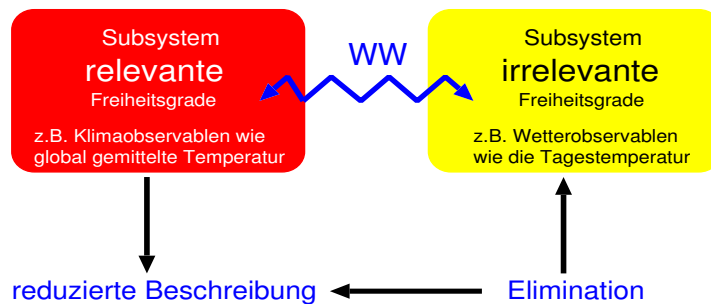
## Theorie: Eliminationsverfahren für Hamiltonsches Chaos

Allen Eliminationsverfahren gemein ist, dass sie auf einer reduzierten Beschreibung beruhen, in der zwischen relevanten und irrelevanten Observablen unterschieden wird. Das gemeinsame Ziel dabei ist, effektive Bewegungsgleichungen für die relevanten Variablen unter geeigneter Beseitigung der irrelevanten Freiheitsgrade zu gewinnen. Dies geschieht durch Informationsreduktion auf Kosten der irrelevanten Freiheitsgrade. Bei stochastischer Modellierung weist die reduzierte Beschreibung infolge der unvermeidbaren Informationsverringerung Dissipation auf. Effektiv macht sich diese in Form eines Dämpfungsterms bemerkbar. Häufig wird die Dämpfung heuristisch angesetzt; dies ist typisch für phänomenologische Wissenschaftsbetrachtungen. Besser ist allerdings, wenn sich die Dissipation aus allgemeineren Betrachtungen ergibt. Mit der Dissipation einher geht die Tatsache, dass die durch die reduzierte Beschreibung beschriebenen Prozesse irreversibel sind. Im Gegensatz dazu sind konservative Hamiltonsche Systeme bekanntermaßen reversibel und nichtdissipativ. Aber gerade für diese Systemklasse wird in diesem Kapitel die Herleitung eines Verfahrens zur Elimination schneller chaotischer Freiheitsgrade aufgezeigt. Das gekoppelte Hamiltonsche System, von dem wir hier ausgehen, verfügt über folgende Struktur: Es besteht aus einem langsamen Teilsystem, welches über eine Kopplung in Wechselwirkung mit einem schnellen chaotischen Teilsystem steht. Hierbei wird eine ausgeprägte Zeitskalentrennung vorausgesetzt. Ziel des Eliminationsverfahren ist, ausgehend von den vollen deterministischen Bewegungsgleichungen, eine effektiv reduzierte Bewegungsgleichung für die langsamen Observablen zu gewinnen. Erreichen wollen wir das durch eine geeignete Ersetzung der chaotischen Dynamik durch einen stochastischen Rauschprozess. Die somit gewonnenen effektiven Gleichungen für die langsamen Freiheitsgrade sind stochastische Differentialgleichungen. An dieser Stelle könnte sich die Frage aufdrängen: Was ist neu gegenüber Arbeiten, wie z.B. von Hasselmann [6]? Er schlägt in den hier betrachteten Fällen ebenfalls eine stochastische Beschreibung in Form einer Langevin- bzw. Fokker-Planck-Gleichung für die langsamen Variablen vor. Der entscheidende Unterschied ist, dass er diesen Ansatz ad hoc macht, motiviert durch die beobachtete Ähnlichkeit von chaotischen und stochastischen Prozessen. Im Gegensatz dazu gewinnen wir die Fokker-Planck-Beschreibung für die

relevanten langsamen Freiheitsgrade über eine mathematisch rigorose Herleitung. Diese Herleitung geht auf A. Riegert [11] zurück. Sie wird in diesem Kapitel lediglich skizziert. Für diese Herleitung wird das Konzept der aus der Nichtgleichgewichts-Statistik bekannten Projektionsmethode im Zusammenhang mit dem Nakajima-Zwanzig-Formalismus verwendet. Auf diese wichtigen Konzepte der statistischen Mechanik wollen wir in den nächsten Abschnitten genauer eingehen und darauf aufbauend unser Eliminationsverfahren diskutieren.

## 2.1 Grundkonzept der Projektionsmethode

Betrachtet man ein typisches Vielteilchensystem aus der statistischen Mechanik, so ist es ein sinnloses Unterfangen, die zeitliche Entwicklung all seiner mikroskopischen Eigenschaften beschreiben zu wollen. Dasselbe gilt gleichermaßen für gekoppelte Systeme, deren schnelle Komponente chaotisch ist. Auch hier erscheint es wenig sinnvoll, die komplizierte nichtlineare Dynamik im Detail zu berücksichtigen. Das eigentliche Problem besteht darin, die wenigen *relevanten* Größen auszuwählen und den zeitlichen Verlauf ihrer Mittelwerte zu bestimmen. Das Gesamtsystem enthält nämlich sehr viele Informationen, deren Detailkenntnis für die Dynamik der relevanten Observablen nicht nötig ist, die aber deren Berechnung erheblich erschweren. Die Projektionsmethode [15, 16] gestattet, sich dieser *irrelevanten Informationen* auf eine elegante Weise zu entledigen. Man wird so auf eine geschlossene Bewegungsgleichung für die relevanten Freiheitsgrade geführt. In Abb. 2.1 ist das Prinzip zur Gewinnung der reduzierten Bewegungsgleichung illustriert.



**Abbildung 2.1:** Schema: Gewinnung einer reduzierten Beschreibung infolge der Elimination schneller Freiheitsgrade.

Bei den thermodynamischen Systemen sind die relevanten Größen makroskopische Observablen (wie z.B. Temperatur, Druck, etc.), während die irrelevanten durch die thermischen Badfreiheitsgrade auf der mikroskopischen Ebene gegeben sind. Hier hat sich die Technik der Projektionsoperatoren als ein mächtiges Instrument im Umgang mit den schwierig handhabbaren statistischen Systemen im Nichtgleichgewicht bewährt.

Während bei den statistischen Systemen die große Zahl von Freiheitsgraden für die komplizierte Dynamik verantwortlich ist, folgt sie bei niedrigdimensionalen chaotischen

Systemen aus der Nichtlinearität der Bewegungsgleichung. Vor diesem Hintergrund erscheint der Schritt naheliegend, die aus der statistischen Physik bekannten Konzepte auf nichtlineare Systeme zu übertragen. In den letzten Jahrzehnten ist dies auf vielfältige Weise von zahlreichen Wissenschaftlern mit Erfolg angewandt worden [17].

Unter den verschiedenen Varianten des Projektions-Formalismus möchten wir hier nur diejenige besprechen, die auf Nakajima und Zwanzig zurückgeht. Diese hat sich für das hier betrachtete Eliminationsverfahren als geeignet erwiesen.

### 2.1.1 Nakajima-Zwanzig-Formalismus

Historisch geht dieser Formalismus auf den japanischen Wissenschaftler S. Nakajima (1958) und den USA-Physiker R. Zwanzig (1960) [18] zurück. Er besteht in der Anwendung des Projektionsoperators  $\mathcal{P}$  und seinem korrespondierenden komplementären Projektor  $\mathcal{Q} = 1 - \mathcal{P}$  auf die Liouville-Gleichung für eine Dichtefunktion bzw. einen Dichteoperator  $\rho(t)$  (=  $\rho_t$ ). Die Operatoren  $\mathcal{P}$  und  $\mathcal{Q}$  projizieren das Gesamtsystem, welches sowohl die relevanten als auch die irrelevanten Freiheitsgrade enthält, jeweils auf die durch die relevanten ( $\mathcal{P}$ ) und die irrelevanten ( $\mathcal{Q}$ ) Variablen aufgespannten Unterräume. Damit wird eine Zerlegung der Gesamtdichte in der folgenden Weise herbeigeführt:

$$\mathcal{P}\rho_t = \rho_t^{rel} \quad \text{und} \quad \mathcal{Q}\rho_t = \rho_t^{irr} \quad \implies \quad \rho_t = \rho_t^{rel} + \rho_t^{irr}. \quad (2.1)$$

Kernstück dieses Formalismus ist die Festlegung der Projektionsoperatoren gemäß:

$$\mathcal{P} + \mathcal{Q} = 1 \quad , \quad \mathcal{P}^2 = \mathcal{P} \quad , \quad \mathcal{Q}^2 = \mathcal{Q} \quad , \quad \mathcal{P}\mathcal{Q} = \mathcal{Q}\mathcal{P} = 0 \quad (2.2)$$

d.h. die Projektoren  $\mathcal{P}$  und  $\mathcal{Q}$  sind notwendigerweise orthogonal zueinander und zusätzlich idempotent. Für ein gegebenes System lassen sich eine Reihe von Projektoren finden, die diesen Forderungen genügen. Welcher Projektionsoperator hierbei der geeignete ist, muss von Fall zu Fall entschieden werden, denn nicht jeder Operator ermöglicht in gleichem Maße eine Vereinfachung des Problems. Bei der Anwendung der Projektionstechnik stellt genau dies die wesentliche Herausforderung dar.

Wie angekündigt werden diese Operatoren nun auf die Liouville-Gleichung<sup>1</sup>:

$$\frac{\partial \rho_t}{\partial t} = -i\mathcal{L}\rho_t(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \quad (2.3)$$

angewendet. Damit ergibt sich zum einen die Gleichung der relevanten Freiheitsgrade nach Gl. (2.1) und Gl. (2.2)

$$\frac{\partial \rho_t^{rel}}{\partial t} = \frac{\partial \mathcal{P}\rho_t}{\partial t} = -\mathcal{P}i\mathcal{L}\mathcal{P}\rho_t - \mathcal{P}i\mathcal{L}\mathcal{Q}\rho_t \quad (2.4)$$

und zum anderen die der irrelevanten Freiheitsgrade

$$\frac{\partial \rho_t^{irr}}{\partial t} = \frac{\partial \mathcal{Q}\rho_t}{\partial t} = -\mathcal{Q}i\mathcal{L}\mathcal{Q}\rho_t - \mathcal{Q}i\mathcal{L}\mathcal{P}\rho_t. \quad (2.5)$$

---

<sup>1</sup>Die Beschreibung der Bewegungsgleichungen in Gestalt der Liouville-Gleichung ist völlig gleichberechtigt zur üblichen, trajektorieweisen Beschreibung durch Hamiltonsche Differentialgleichungen.

Mit  $\mathbf{x}$  sind die langsamen und mit  $\mathbf{y}$  die schnellen Variablen in Gl. (2.3) bezeichnet. Der wesentliche Schritt des Verfahrens besteht nun darin, den *irrelevanten* Teil  $\rho_t^{irr}$  formal zu eliminieren. Dazu wird Gl. (2.5) - eine operatorwertige, lineare inhomogene Differentialgleichung erster Ordnung für  $\rho_t^{irr}$  - formal integriert. Die konkrete Konstruktion der erforderlichen homogenen Lösung und einer Partikularlösung wird ersichtlich, wenn man die Gl. (2.5) folgendermaßen umschreibt

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_t^{irr} = -\mathcal{A} \rho_t^{irr} - \mathcal{B}_t \quad (2.6)$$

$$\text{mit } \mathcal{A} := \mathcal{Q}i\mathcal{L} \quad , \quad \mathcal{B}_t := \mathcal{Q}i\mathcal{L}\mathcal{P}\rho_t, \quad (2.7)$$

und anschließend durch formale Integration löst:

$$\rho_t^{irr} = \mathcal{Q}\rho_t = e^{-\mathcal{A}t} \mathcal{Q}\rho_0 - \int_0^t dt' e^{-\mathcal{A}t'} \mathcal{B}_{t-t'} \quad (2.8)$$

$$= e^{-\mathcal{Q}i\mathcal{L}t} \mathcal{Q}\rho_0 - \int_0^t dt' e^{-\mathcal{Q}i\mathcal{L}t'} \mathcal{Q}i\mathcal{L}\mathcal{P}\rho_{t-t'}. \quad (2.9)$$

Setzen wir diesen Ausdruck in die Gleichung (2.4) ein, so erhalten wir die Nakajima-Zwanzig-Gleichung:

$$\frac{\partial \rho_t^{rel}}{\partial t} = -\mathcal{P}i\mathcal{L}\mathcal{P}\rho_t^{rel} - \mathcal{P}i\mathcal{L}e^{-\mathcal{Q}i\mathcal{L}t} \mathcal{Q}\rho_0 + \int_0^t \mathcal{P}i\mathcal{L}e^{-\mathcal{Q}i\mathcal{L}t'} \mathcal{Q}i\mathcal{L}\mathcal{P}\rho_{t-t'}^{rel} dt'. \quad (2.10)$$

Es handelt sich bei ihr um eine Integro-Differentialgleichung für  $\rho_t^{rel}$ .

Die formale Elimination der irrelevanten Freiheitsgrade bleibt nicht folgenlos. Im Vergleich zur ursprünglichen Liouville-Gleichung (2.3) treten auf der rechten Seite zwei weitere Ausdrücke auf: Der zweite Term beschreibt den Einfluss der irrelevanten Informationen, die zum Anfangszeitpunkt vorlagen, während der Integralkern des letzten Terms alle von den formal eliminierten Korrelationen herrührende Einflüsse auf die Zeitentwicklung des *relevanten* Anteils enthält. Anschaulich bringt der Integralterm also das *Gedächtnis an vorhergehende Zustände* (Retardierung) zum Ausdruck. Dieser Gedächtnis-term ist verantwortlich für den zeitlich nicht-lokalen Charakter der Gleichung (2.10). Seine physikalische Bedeutung wird klar, wenn er von links nach rechts gelesen wird: Zur Zeit  $t' < t$  koppeln die durch  $\mathcal{P}$  ausgesonderten relevanten Freiheitsgrade aufgrund der Wechselwirkung  $\mathcal{L}$  an die irrelevanten Freiheitsgrade (ausprojiziert durch  $\mathcal{Q}$ ), die gemäß des Entwicklungsoperators  $e^{-\mathcal{Q}i\mathcal{L}t'}$  sich zeitlich verändern, bis sie aufgrund einer erneuten Wechselwirkung  $\mathcal{L}$  Relevanz erlangen und so Einfluss auf die gegenwärtige Entwicklung der relevanten Observablen zum Zeitpunkt  $t$  nehmen. In ähnlicher Weise kann der zweite Term interpretiert werden. Die irrelevanten Komponenten des Anfangszustands ( $\mathcal{Q}$ ) entwickeln sich in der Zeit, um wiederum zum Zeitpunkt  $t$  durch die Wechselwirkung  $\mathcal{L}$  relevant zu werden. Eine sinnvolle Annahme für den Zustand zum Zeitpunkt  $t = 0$  ist  $\rho_0 = \rho_0^{rel}$ , d.h. am Anfang ist die reduzierte Dichte gleich der vollen. Hieraus resultiert  $\mathcal{Q}\rho_0 = 0$ , wodurch der zweite Term auf der rechten Seite der Gleichung (2.10) verschwindet. Physikalisch entspricht dies der Abwesenheit von Korrelationen zwischen den beiden Teilsystemen bei  $t = 0$ .

Die obigen Betrachtungen zeigen, dass der Einfluss der irrelevanten Freiheitsgrade, d.h. die *Komplexität der Dynamik*, auf ein zeitlich nicht lokales Verhalten abgebildet wird. Die Berechnung der zukünftigen Erwartungswerte stützt sich dann nicht nur auf die gegenwärtigen, sondern auch auf die vergangenen Werte. Das Auffinden einer exakten Lösung der Bewegungsgleichung (2.10) ist daher, wie im Fall der Liouville-Gleichung, illusorisch. Der entscheidende Vorteil der Nakajima-Zwanzig-Gleichung besteht darin, dass sie eine bessere Ausgangsposition als die entsprechende Liouville-Gleichung für verschiedene Approximationen bietet. Zahlreiche Gleichungen, wie die Langevin-, Fokker-Planck-, Master-, zeitabhängige Hartree-Fock- oder Boltzmann-Gleichung, können als Spezialfälle oder mittels Näherungen aus Gl.(2.10) abgeleitet werden.

## 2.2 Skizze: Herleitung einer Fokker-Planck-Gleichung

Im letzten Abschnitt wurden die technischen Konzepte vorgestellt, auf denen das Verfahren zur Elimination schneller chaotischer Freiheitsgrade aufbaut. In diesem Abschnitt folgt die konkrete Herleitung der reduzierten stochastischen Beschreibung in Gestalt der Fokker-Planck-Gleichung für Hamiltonsche Systeme mit unterschiedlichen Zeitskalen, s.a. Riegert et al. [11].

Die Projektionsmethode wurde ursprünglich entwickelt, um Näherungen durchzuführen, die auf der Existenz unterschiedlicher Zeitskalen beruhen. Tatsächlich eignet sich die allgemeine Bewegungsgleichung (2.10) der relevanten Observablen gut als Ausgangspunkt für zwei wichtige Näherungen: Die mit der Störungsentwicklung verbundene Bornsche Näherung und die Markov-Approximation. Sie stellen, wie wir später noch sehen werden, die wesentlichen Schritte auf dem Weg zur reduzierten Beschreibung dar. Zuerst jedoch muss der Projektor  $\mathcal{P}$  (2.1) geeignet gewählt werden. Dazu ist es erforderlich, zunächst das System zu definieren, auf welches der Projektor anzuwenden ist. Wir wollen uns auf gekoppelte Hamiltonsche Systeme beschränken, die ausschließlich über zwei Zeitskalen verfügen, einer *langsamen*  $\tau_l$  und einer *schnellen*  $\tau_s$ . Die auf der schnellen Zeitskala ablaufenden Prozesse werden als chaotisch vorausgesetzt.

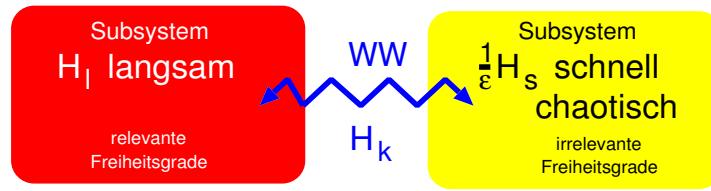
Zur Beschreibung der hier betrachteten Systeme kann allgemein ein Hamiltonian der folgenden Struktur zugrunde gelegt werden:

$$\mathcal{H}(q, p, Q, P) = \mathcal{H}_l(Q, P) + \frac{1}{\varepsilon} \mathcal{H}_s(q, p) + \mathcal{H}_k(q, Q), \quad (2.11)$$

wobei  $\mathcal{H}_l$  den langsamen,  $\mathcal{H}_s$  den schnellen und  $\mathcal{H}_k$  den Wechselwirkungs-Hamiltonian bezeichnet. Für die weitere Rechnung wird hier aus Gründen der Einfachheit eine lineare, in diesem Fall eine harmonische Kopplung  $\mathcal{H}_k = \frac{1}{2}\kappa(Q - q)^2$  mit Kopplungsstärke  $\kappa$  betrachtet<sup>2</sup>.

---

<sup>2</sup>Das Eliminationsverfahren kann prinzipiell für beliebige Kopplungen durchgeführt werden. Die resultierende reduzierte Bewegungsgleichung, welche eine Fokker-Planck-Gleichung repräsentieren würde, wäre jedoch bei nichtlinearer Kopplung wesentlich komplizierter hinsichtlich der auftretenden Terme.



**Abbildung 2.2:** Schema: Gekoppeltes Hamiltonsches System mit Zeitskalentrennung.

Um die Renormierungsanteile, welche aus der Kopplung resultieren, werden der zugehörigen schnelle und langsame Hamiltonian erweitert. Man erhält also auf diese Weise die folgende Aufteilung des Gesamthamiltonians:

$$\mathcal{H}(q, p, Q, P) = \tilde{\mathcal{H}}_l(Q, P) + \frac{1}{\varepsilon} \tilde{\mathcal{H}}_s(q, p) + \tilde{\mathcal{H}}_k(q, Q) \quad \text{mit} \quad (2.12)$$

$$\tilde{\mathcal{H}}_l = \mathcal{H}_l + \frac{1}{2} \kappa Q^2 \quad (2.13)$$

$$\tilde{\mathcal{H}}_s = \mathcal{H}_s + \frac{1}{2} \varepsilon \kappa q^2 \quad (2.14)$$

$$\tilde{\mathcal{H}}_k = -\kappa Q q. \quad (2.15)$$

In Kleinbuchstaben erscheint hier der Satz an schnellen Orts- und kanonisch konjugierter Impulsvariablen  $(q, p)$ . Entsprechend sind die langsamen Variablen in Großbuchstaben-Notation  $(Q, P)$  gegeben<sup>3</sup>. Mit dem Parameter  $\varepsilon$  kann die Zeitskalentrennung eingestellt werden. Da wir von einer ausgeprägten Zeitskalentrennung ausgehen wollen, fordern wir  $0 < \varepsilon \ll 1$ . In Abb. 2.2 ist das gekoppelte System illustriert. Zusätzlich wird eine Reskalierung der Gesamtenergie  $E_g$  entsprechend  $E_g = E/\varepsilon = \mathcal{H}(q, p, Q, P)$  vorausgesetzt. Dies erscheint sinnvoll in Anbetracht der Zeitskalentrennung des Gesamthamiltonians (2.12). Durch die Reskalierung wird sichergestellt, dass die Energie des Gesamtsystems im Limes  $\varepsilon \rightarrow 0$  nicht divergiert.

Ausgehen wollen wir ähnlich wie im letzten Abschnitt (2.1.1) von der Bewegungsgleichung des gekoppelten Systems in Gestalt der Liouville-Gleichung:

$$\frac{\partial \rho_t}{\partial t} = -i\mathcal{L}\rho_t(q, p, Q, P). \quad (2.16)$$

Dabei ist der Liouville-Operator festgelegt durch die Poisson-Klammer-Beziehung:

$$i\mathcal{L} \cdot = \{\mathcal{H}, \cdot\}. \quad (2.17)$$

Im Hinblick auf die Anwendung der Projektionsmethode hat sich hier die folgende Zerle-

<sup>3</sup>Ohne größere Schwierigkeiten kann man die Betrachtungen auf den Fall beliebiger Anzahl der konjugierten Paare  $(Q_j, P_j)$  und  $(q_j, p_j)$  mit  $j = 1, 2, 3, \dots, N$  verallgemeinern.

gung der Liouville-Operatoren:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{\varepsilon} \mathcal{L}_0 + \mathcal{L}_1 \quad \text{mit} \quad \mathcal{L}_0 := \mathcal{L}_s \quad , \quad \mathcal{L}_1 := \mathcal{L}_l + \mathcal{L}_k \quad (2.18)$$

$$\mathcal{L} = \frac{1}{\varepsilon} \widehat{\mathcal{L}}_s^{(\varepsilon)} + \widehat{\mathcal{L}}_l \quad \text{mit} \quad \widehat{\mathcal{L}}_s^{(\varepsilon)} := \mathcal{L}_s + \varepsilon \mathcal{L}_{k,s} \quad , \quad \widehat{\mathcal{L}}_l := \mathcal{L}_l + \mathcal{L}_{k,l} \quad (2.19)$$

als geeignet erwiesen. In einer ersten Zerlegung (2.18) wird der Liouville-Operator  $\mathcal{L}$  nach Ordnungen des Zeitskalenparameters  $\varepsilon$  aufgespalten. In einer zweiten Zerlegung (2.19) wird er bezüglich der *schnellen* und *langsamen* Ableitungen aufgeteilt. Hierbei ist  $i\mathcal{L}_{k,s}$  der Wechselwirkungsbeitrag, der aus den Ableitungen nach den schnellen Variablen  $(q, p)$  resultiert und  $i\mathcal{L}_{k,l}$  der Beitrag, der die Ableitungen nach den langsamen Variablen  $(Q, P)$  enthält:

$$i\mathcal{L}_k \cdot = \{\widetilde{\mathcal{H}}_k, \cdot\} = \underbrace{\left( -\frac{\partial \widetilde{\mathcal{H}}_k}{\partial Q} \frac{\partial}{\partial P} \cdot \right)}_{i\mathcal{L}_{k,l}} + \underbrace{\left( -\frac{\partial \widetilde{\mathcal{H}}_k}{\partial q} \frac{\partial}{\partial p} \cdot \right)}_{i\mathcal{L}_{k,s}}. \quad (2.20)$$

Die Erfordernis einer derart komplizierten Aufteilung des Liouville-Operators rührt von der Hamiltonschen Struktur her. Sie führt zu einer Vermischung der Ordnung nach dem Zeitskalenparameter  $\varepsilon$  in den zugehörigen Hamiltonschen Bewegungsgleichungen. Im Hinblick auf die Störungsentwicklung, die in Ordnungen von  $\varepsilon$  durchgeführt werden soll, bedeutet dies eine zusätzliche Komplikation, da der Projektor  $\mathcal{P}$  selbst  $\varepsilon$ -abhängig wird. In Fällen, in denen hingegen eine Hamiltonsche Struktur fehlt und keine Einschränkung durch die Energieerhaltung besteht, reicht eine Zerlegung des Liouville-Operators gemäß  $\mathcal{L} = \frac{1}{\varepsilon} \mathcal{L}_0 + \mathcal{L}_1$  in schnelle und langsame Anteile vollkommen aus. Dies konnte in einigen Arbeiten [8, 9, 10], die in unserer Arbeitsgruppe entstanden sind, verwendet werden.

Wie man aus dem letzten Abschnitt weiß, ist der Projektor  $\mathcal{P}$  bis auf einige wenige grundlegende Eigenschaften (2.2) nicht weiter festgelegt. Insbesondere fehlen jegliche allgemein verbindliche Vorschriften oder Kriterien zur Gewinnung eines geeigneten Projektors. Man kann lediglich versuchen, für die konkrete Situation, die man vorfindet, eine möglichst sinnvoll erscheinende Auswahl zu treffen<sup>4</sup>. Wählt man den  $\varepsilon$ -abhängigen Projektor  $\mathcal{P}_\varepsilon$  wie folgt

$$\rho_t^{rel} = \mathcal{P}_\varepsilon \rho_t = \rho_{ad}^{(\varepsilon)}(q, p|Q, P) \int \rho_t dqdp =: \rho_{ad}^{(\varepsilon)}(q, p|Q, P) \bar{\rho}_t(Q, P) \quad \text{mit} \quad (2.21)$$

$$\mathcal{P}_\varepsilon = \varepsilon^0 \mathcal{P}_0 + \varepsilon^1 \mathcal{P}_1 + \dots \quad \text{und} \quad \rho_{ad}^{(\varepsilon)} = \varepsilon^0 \rho_{ad}^{(0)} + \varepsilon^1 \rho_{ad}^{(1)} + \dots \quad , \quad (2.22)$$

dann ist der Projektor (2.21) so beschaffen, dass er durch Einwirken auf die Gesamtdichte  $\rho_t$  zu einer Aufspaltung dieser in Form eines Produktes führt. Das Produkt besteht

---

<sup>4</sup>Der Projektor  $\mathcal{P}$  muss so beschaffen sein, dass kein Informationsverlust bezüglich der langsamen Dynamik auftritt, während der Informationsverlust hinsichtlich der chaotischen Freiheitsgrade beliebig groß werden kann.

aus der adiabatischen Dichte<sup>5</sup>  $\rho_{ad}^{(\varepsilon)}$  des schnellen Systems und der über die schnellen Freiheitsgrade gemittelten Gesamtdichte  $\bar{\rho}_t(Q, P)$ . Ein solcher Ansatz, bei dem der Einfluss der schnellen Prozesse auf die langsame Dynamik in Form der stationären adiabatischen Dichte zusammengefasst wird, ist bei ausgeprägter Zeitskalentrennung sinnvoll. Unter derartigen Umständen kann die langsame Dynamik bezüglich der Prozesse, die typischer Weise auf der schnellen Zeitskala ablaufen, als quasi-eingefroren betrachtet werden. In Gleichung (2.22) wird sowohl die adiabatische Dichte  $\rho_{ad}^{(\varepsilon)}$  als auch der Projektor  $\mathcal{P}_\varepsilon$  einer Reihenentwicklung nach  $\varepsilon$  unterworfen.

Die Idempotenz des Projektors  $\mathcal{P}_\varepsilon$  (2.21) ist durch die Normierung der adiabatischen Dichte  $\rho_{ad}^{(\varepsilon)}$  garantiert. Allerdings muss die adiabatische Dichte zusätzlich noch definiert werden. Diese wählen wir so, dass die Bedingung

$$i\widehat{\mathcal{L}}_s^{(\varepsilon)} \rho_{ad}^{(\varepsilon)} = 0 \quad (2.23)$$

gilt. Eine adiabatische Dichte  $\rho_{ad}^{(\varepsilon)}$  der folgenden Form

$$\rho_{ad}^{(\varepsilon)}(q, p|Q, P) = \frac{\delta(\varepsilon\mathcal{H} - E)}{Z^{(\varepsilon)}(E, Q, P)} \quad \text{mit} \quad Z^{(\varepsilon)}(E, Q, P) := \int \delta(\varepsilon\mathcal{H} - E) dqdp \quad (2.24)$$

erfüllt die Festlegung (2.23). Mit  $E$  ist die Gesamtenergie des Systems bezeichnet. Sie ist eine Erhaltungsgröße, da konservative Systeme betrachtet werden. Das hat zur Konsequenz, dass in Gl. (2.24) sowohl die stationäre Dichte  $\rho_{ad}^{(\varepsilon)}$  als auch die zugehörige Zustandsdichte  $Z^{(\varepsilon)}(E)$  auf der mikrokanonischen Verteilungsfunktion  $\rho_m^{(\varepsilon)} = \delta(\varepsilon\mathcal{H} - E)$  des vollen Systems aufbauen.

Für den hier verwendeten Projektor (2.21) gilt infolge der Beziehung (2.23):

$$i\widehat{\mathcal{L}}_s^{(\varepsilon)} \mathcal{P}_\varepsilon = 0. \quad (2.25)$$

Außerdem gilt auch der Zusammenhang:

$$\mathcal{P}_\varepsilon i\widehat{\mathcal{L}}_s^{(\varepsilon)} = 0. \quad (2.26)$$

Dies wird ersichtlich, wenn man die Beschränktheit der Gesamtdichte  $\rho_t$  bei der Auswertung der rechten Seite von Gl. (2.26) berücksichtigt:

$$\mathcal{P}_\varepsilon i\widehat{\mathcal{L}}_s^{(\varepsilon)} = \rho_{ad}^{(\varepsilon)} \int i\widehat{\mathcal{L}}_s^{(\varepsilon)} \rho_t dqdp = \rho_{ad}^{(\varepsilon)} \int \left\{ \frac{\partial \widetilde{\mathcal{H}}_s}{\partial p} \frac{\partial \rho_t}{\partial q} - \frac{\partial}{\partial q} (\widetilde{\mathcal{H}}_s + \varepsilon \widetilde{\mathcal{H}}_k) \frac{\partial \rho_t}{\partial p} \right\} dqdp \quad (2.27)$$

$$= \rho_{ad}^{(\varepsilon)} \left\{ \underbrace{\int \left[ \rho_t \frac{\partial \widetilde{\mathcal{H}}_s}{\partial p} \right]_{-\infty}^{+\infty} dp}_{=0} - \underbrace{\int \left[ \rho_t \frac{\partial}{\partial q} (\widetilde{\mathcal{H}}_s + \varepsilon \widetilde{\mathcal{H}}_k) \right]_{-\infty}^{+\infty} dq}_{=0} \right\} = 0. \quad (2.28)$$

Wertet man die allgemeine Nakajima-Zwanzig-Gleichung (2.10) für die Beziehungen (2.25) und (2.26) aus, so nimmt die Bewegungsgleichung der relevanten Dichte  $\rho_t^{rel}$  die folgende

<sup>5</sup>Sie ist die stationäre Lösung bezüglich der schnellen Variablen bei festgehaltenen langsamen Variablen.



Form an:

$$\frac{\partial \rho_t^{rel}}{\partial t} = -\mathcal{P}_\varepsilon i\widehat{\mathcal{L}}_l \mathcal{P}_\varepsilon \rho_t^{rel} + \int_0^t \mathcal{P}_\varepsilon i\widehat{\mathcal{L}}_l e^{-\mathcal{Q}_\varepsilon i\mathcal{L}t'} \mathcal{Q}_\varepsilon i\widehat{\mathcal{L}}_l \mathcal{P}_\varepsilon \rho_{t-t'}^{rel} dt'. \quad (2.29)$$

Aus praktischen Erwägungen soll hier noch die folgende Abkürzung eingeführt werden:

$$\mathcal{P}_\varepsilon \mathcal{F} \mathcal{P}_\varepsilon \rho_t^{rel} = \mathcal{P}_\varepsilon \mathcal{F} \rho_t^{rel} = \rho_{ad}^{(\varepsilon)} \underbrace{\left\{ \int \mathcal{F} \rho_{ad}^{(\varepsilon)} dq dp \right\}}_{:= \langle \mathcal{F} \rangle^{(\varepsilon)}} \bar{\rho}_t = \rho_{ad}^{(\varepsilon)} \langle \mathcal{F} \rangle^{(\varepsilon)} \bar{\rho}_t. \quad (2.30)$$

Dabei ist  $\mathcal{F}$  ein beliebiger Operator und  $\langle \dots \rangle^{(\varepsilon)}$  die Ensemble-Mittelung über die schnellen Variablen. So vereinfacht sich die Nakajima-Zwanzig-Gleichung (2.29) zu

$$\frac{\partial \bar{\rho}_t}{\partial t} = \underbrace{-\langle i\widehat{\mathcal{L}}_l \rangle^{(\varepsilon)} \bar{\rho}_t}_{\text{Frequenzterm}} + \underbrace{\int_0^t \langle i\mathcal{L}_{k,l} e^{-\mathcal{Q}_\varepsilon i\mathcal{L}t'} \mathcal{Q}_\varepsilon i\widehat{\mathcal{L}}_l \rangle^{(\varepsilon)} \bar{\rho}_{t-t'} dt'}_{\text{Gedächtnisterm}}. \quad (2.31)$$

Bei dem ersten Term auf der linken Seite der Gleichung (2.31) spricht man vom *Frequenzterm*, während es sich bei dem zweiten Term erneut um den besprochenen *Gedächtnisterm* handelt. Auffällig ist, dass sich der Gedächtnisterm gegenüber dem Ausdruck in Gl. (2.29) vereinfacht hat: Der erste Operator  $i\widehat{\mathcal{L}}_l$  im Kern des Gedächtnisterms reduziert sich auf  $i\mathcal{L}_{k,l}$ . Das ergibt sich zum einen, da  $i\mathcal{L}_l$  nur von den langsamen Variablen abhängt und aus der Mittelung über die schnellen Variablen  $\langle \dots \rangle^{(\varepsilon)}$  gezogen werden kann. Zum anderen gilt  $\mathcal{P}_\varepsilon \mathcal{Q}_\varepsilon = 0$ .

An dieser Stelle wird offenkundig, dass die anfangs angesprochenen Näherungen benötigt werden, um den komplizierten Ausdruck des Gedächtnisterms in geeigneter Weise zu vereinfachen. Darauf wird in den nächsten Abschnitten im Detail eingegangen.

### 2.2.1 Bornsche Näherung

Gekoppelte Systeme, wie wir sie hier betrachten, verfügen über eine ausgeprägte Zeitskalentrennung. Bei den Molekülen beispielsweise verläuft die Kernbewegung wegen der wesentlich größeren Masse der Atomkerne viel langsamer, als die der Elektronen. Dies bedeutet, dass sich die Elektronenhülle bei der Bewegung der Kerne praktisch instantan auf den jeweiligen Kernabstand einstellt. Die langsame Dynamik kann also als quasi-eingefroren betrachtet werden. An dieser Stelle kann man mit der so genannten Bornschen Näherung ansetzen, indem das langsame und das schnelle chaotische Subsystem in erster Näherung als unkorreliert angenommen werden und das gesamte System nach dem bereits eingeführten Zeitskalenparameter  $\varepsilon$  entwickelt wird. In der Bornsche Näherung bricht man die Entwicklung des Zeitentwicklungsoperators  $e^{-\mathcal{Q}_\varepsilon i\mathcal{L}t'}$  im Gedächtnisterm der Gl. (2.31) nach der niedrigsten nicht verschwindenden Ordnung in  $\varepsilon$  ab, und erhält somit:

$$e^{-\mathcal{Q}_\varepsilon i\mathcal{L}t'} \approx e^{-i\widehat{\mathcal{L}}_s^{(\varepsilon)} t'/\varepsilon}. \quad (2.32)$$

Häufig wird die Bornsche Näherung in Zusammenhang mit schwacher Wechselwirkung zwischen System und Umgebung gebraucht. Dann kann eine Entwicklung des zugehörigen Zeitentwicklungsoperators in Ordnungen des Kopplungsparameters vorgenommen werden. Im Gegensatz zu dieser gängigen Interpretation der Bornschen Näherung wird in unserem Fall die ausgeprägte Trennung der Zeitskalen ausgenutzt. Anstelle der Entwicklung nach Potenzen der Kopplungsstärke tritt eine Entwicklung in Ordnungen des Zeitskalenparameters  $\varepsilon$  auf.

Die exakte Nakajima-Zwanzig-Gleichung (2.31) vereinfacht sich infolge der Bornsche-Näherung (2.32):

$$\frac{\partial \bar{\rho}_t}{\partial t} = \underbrace{-\langle i\hat{\mathcal{L}}_l \rangle^{(\varepsilon)} \bar{\rho}_t}_{\text{Frequenzterm}} + \underbrace{\int_0^t \langle i\mathcal{L}_{k,l} e^{-i\hat{\mathcal{L}}_s^{(\varepsilon)} t'/\varepsilon} \mathcal{Q}_\varepsilon i\hat{\mathcal{L}}_l \rangle^{(\varepsilon)} \bar{\rho}_{t-t'} dt'}_{\text{Gedächtnisterm}}. \quad (2.33)$$

Die Auswertung und Umformung des Gedächtnisterm in Gl. (2.33) geht auf A. Riegert zurück und ist in [11] ausgeführt. Das Resultat ist

$$\int_0^t \kappa^2 \left\{ \varepsilon \frac{\partial}{\partial P} \frac{\partial \tilde{\mathcal{H}}_l}{\partial P} \frac{1}{Z^{(\varepsilon)}} \frac{\partial}{\partial E} \langle \delta_{ad}^{(\varepsilon)} q_s(t) \delta_{ad}^{(\varepsilon)} q \rangle^{(\varepsilon)} + \frac{\partial^2}{\partial P^2} \langle \delta_{ad}^{(\varepsilon)} q_s(t) \delta_{ad}^{(\varepsilon)} q \rangle^{(\varepsilon)} \right\} \bar{\rho}_{t-t'} dt'. \quad (2.34)$$

Mit  $\delta_{ad}^{(\varepsilon)} q_s := q - \langle q \rangle^{(\varepsilon)}$  werden anschaulich die Fluktuationen bezüglich der schnellen Variable  $q$  beschrieben, während  $q_s(t) := e^{i\hat{\mathcal{L}}_s^{(\varepsilon)} t'/\varepsilon} q$  die zeitabhängige Lösung bei quasi-eingefrorenen langsamen Variablen zu der Anfangsbedingung  $q_s(0) = q$  darstellt.

Die Integro-Differentialgleichung (2.33), in die nur die Bornsche Näherung eingeht, wird als *verallgemeinerte Mastergleichung* bezeichnet.

### 2.2.2 Markov-Approximation

Durch die Bornsche Näherung wurde lediglich der Anteil der Korrelationen, die infolge der Wechselwirkung erscheinen, im Gedächtnisterm beseitigt. Die Korrelationen, die innerhalb des schnellen chaotischen Teilsystems auftreten, werden in (2.33) jedoch weiterhin berücksichtigt. Das ist aber genau der springende Punkt: Die Korrelationen in einem chaotischen System zerfallen im Allgemeinen sehr schnell, im Fall einer hyperbolischen Dynamik sogar exponentiell. Die Gleichung (2.33) wird daher durch Markov-Approximation weiter vereinfacht.

Die Zeitskala, auf der die schnellen Korrelationen verschwinden, ist durch  $\tau_s$  gegeben, während die Veränderungen im langsamen System auf der Zeitskala  $\tau_l$  stattfinden. Die Markov-Approximation beruht nun darauf, dass es eine Zeitskala  $\Delta\tau$  gibt, für die gilt:

$$\tau_s \ll \Delta\tau \ll \tau_l. \quad (2.35)$$

In unserem Fall ist diese Bedingung wegen der Voraussetzung  $0 < \varepsilon \ll 1$  erfüllt. Sie garantiert, dass die schnellen Korrelationen auf einer sehr viel kleineren Zeitskala verklingen

als sich Veränderung im langsamen System ergeben. Somit kann man in Gleichung (2.33) die reduzierte Dichte der langsamen Variablen  $\bar{\rho}_{t-t'}$  durch  $\bar{\rho}_t$  ersetzen. Anschließend kann die obere Integrationsgrenze bis unendlich ausgedehnt werden, da für Zeiten  $t - t' \gg \tau_s$  der Integrand verschwindet. Damit ergibt sich mit Hilfe der Gleichung (2.34) die auf einer vergrößerten Zeitskala  $\Delta\tau$  gültige Fokker-Planck-Gleichung als reduzierte Bewegungsgleichung der langsamen Dynamik

$$\frac{\partial}{\partial t} \bar{\rho}_t(Q, P) = -\langle i\hat{\mathcal{L}}_l \rangle^{(\varepsilon)} \bar{\rho}_t + \underbrace{\varepsilon^2 \frac{\partial}{\partial P} \left\{ \frac{\partial \tilde{\mathcal{H}}_l}{\partial P} \right\} \tilde{\gamma}^{(\varepsilon)}(Q, P) \bar{\rho}_t}_{\text{Dämpfungsterm}} + \underbrace{\varepsilon \frac{\partial^2}{\partial P^2} \tilde{D}_{PP}^{(2,\varepsilon)}(Q, P) \bar{\rho}_t}_{\text{Diffusionsterm}}, \quad (2.36)$$

mit den Koeffizienten

$$\tilde{D}_{PP}^{(2,\varepsilon)}(Q, P) = \kappa^2 \int_0^\infty \langle \delta_{ad}^{(\varepsilon)} q_s(t) \delta_{ad}^{(\varepsilon)} q \rangle^{(\varepsilon)} dt \quad (2.37)$$

$$\begin{aligned} \tilde{\gamma}^{(\varepsilon)}(Q, P) &= \kappa^2 \int_0^\infty \frac{1}{Z^{(\varepsilon)}} \frac{\partial}{\partial E} \langle \delta_{ad}^{(\varepsilon)} q_s(t) \delta_{ad}^{(\varepsilon)} q \rangle^{(\varepsilon)} dt \\ &= \frac{1}{Z^{(\varepsilon)}(E, Q, P)} \frac{\partial}{\partial E} (Z^{(\varepsilon)}(E, Q, P) \tilde{D}_{PP}^{(2,\varepsilon)}(Q, P)). \end{aligned} \quad (2.38)$$

Der eliminierte irrelevante Anteil der chaotischen Freiheitsgrade macht sich in der reduzierten Bewegungsgleichung effektiv in Form eines Dämpfungs- und Diffusionsterms bemerkbar. Die Fokker-Planck-Gleichung ergibt sich hier auf natürliche Weise, ohne dass sie durch eine ad hoc Annahme wie bei Hasselmann [6] eingeführt werden muss.

Allerdings enthalten die Koeffizienten  $\tilde{D}_{PP}^{(2,\varepsilon)}$  und  $\tilde{\gamma}^{(\varepsilon)}$  noch eine Reihenentwicklung nach  $\varepsilon$ . Im nächsten Schritt soll die  $\varepsilon$ -Entwicklung nach der niedrigsten nicht-trivialen Ordnung abgebrochen werden. Somit ergibt sich die endgültige Form für die zugehörigen Fokker-Planck-Koeffizienten zu

$$\tilde{D}_{PP}^{(2)}(Q, P) = \kappa^2 (d_0 - \varepsilon \tilde{\mathcal{H}}_l d_1) + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \quad (2.39)$$

$$\tilde{\gamma}(Q, P) = \kappa^2 \frac{1}{Z^{(0)}} \frac{\partial}{\partial E} (Z^{(0)} d_0) + \mathcal{O}(\varepsilon) = \kappa^2 (d_1 + d_0 \frac{\partial}{\partial E} \ln Z^{(0)}) + \mathcal{O}(\varepsilon) \quad (2.40)$$

mit der Zustandsdichte in niedrigster Ordnung in  $\varepsilon$

$$Z^{(0)}(E) = \int \delta(\mathcal{H}_s - E) dqdp \quad (2.41)$$

und den zu bestimmenden Unterkoeffizienten

$$d_0 = \int_0^\infty \langle q_s(t) q \rangle^{(0)} dt \quad \text{und} \quad d_1 = \frac{\partial d_0}{\partial E}. \quad (2.42)$$

Man sieht anhand von  $d_0$  und  $d_1$ , dass sowohl der Dämpfungs- als auch der Diffusionsterm im wesentlichen durch das Zeitintegral über die schnellen Korrelationen bestimmt ist. Zur

Auswertung der Korrelationsfunktionen  $d_0$  und  $d_1$  (2.42) sowie der Zustandsdichte  $Z^{(0)}$  (2.41) reicht es demnach aus, das isolierte chaotische System zu betrachten.

Von besonderer Bedeutung ist nicht nur die Viskosität der auftretende Dämpfung, sondern auch die erstaunliche Kleinheit mit der sie erscheint. Sie geht in quadratischer Ordnung des Zeitskalenparameter  $\varepsilon$  ein, während die Diffusion von linearer Ordnung ist. Ihre Viskosität kann auf die Linearität der verwendeten harmonischen Kopplung zurückgeführt werden, wohingegen die Entdeckung der enormen Kleinheit der Dämpfung bei energieerhaltenden Hamiltonschen Systemen eine echte Neuheit darstellt. Ihre Ursache ist in der *natürlichen* Reskalierung der Gesamtenergie mit  $1/\varepsilon$  begründet. Sie wird durch eine entsprechende Skalierung des schnellen Hamiltonian  $\mathcal{H}_s$  nach Gl. (2.11) nahegelegt. Ohne diese Reskalierung der Energie wäre hier auch die Diffusion von der Ordnung  $\varepsilon^2$ . Im Nicht-Hamiltonschen Fall hingegen konnte die Dämpfung und Diffusion der reduzierten Bewegungsgleichung (die auch hier eine Fokker-Planck-Gleichung ist) jeweils in linearer Ordnung von  $\varepsilon$  bestimmt werden [9, 10]. Dieser Unterschied rührt daher, dass die Kopplung im schnellen Hamiltonschen Subsystem in der Ordnung  $\mathcal{O}(\varepsilon)$  erscheint, während sie bei dissipativen Dynamik von  $\mathcal{O}(1)$  ist.

In der Arbeit von Jarzynski [19] wird in diesem Zusammenhang von deterministischer Reibung gesprochen, aber die enorme Kleinheit dieser dynamischen Größe wird nicht erkannt. Wie wir später sehen werden, hat sie weitreichende Konsequenzen, insbesondere wenn man sich die Schwierigkeiten vor Augen führt, die sich daraus für die konkrete Bestimmung der Dämpfung aus Zeitreihen der langsamen Variablen bei Simulation des vollen Systems ergeben. Die empirischen Verfahren zur Drift- und Diffusionsbestimmung basieren auf der Kramers-Moyal-Entwicklung in niedrigster Ordnung. Diese Verfahren funktionieren nur dann befriedigend, wenn die zu bestimmenden Koeffizienten groß genug sind, so dass Korrekturen höherer Ordnung keine Rolle spielen. Diese Voraussetzung ist hier aber nicht mehr gegeben.

Aus dem Vergleich der Dämpfungs- und Diffusionskoeffizienten nach Gl. (2.39) und Gl. (2.40) ersieht man, dass beide dynamischen Größen über  $d_0$  und  $d_1$  in Verbindung stehen. Dies kann als Fluktuations-Dissipations-Relation interpretiert werden.

Die Fokker-Planck-Gleichung (2.36) mit den entwickelten Koeffizienten (2.42) und der Zustandsdichte in niedrigster Ordnung (2.41) ist Kernstück unseres Eliminationsverfahrens. Sie kann in eine äquivalente Langevin-Gleichung umgeformt werden. Das anfangs gesteckte Ziel, ausgehend von den deterministischen Bewegungsgleichungen des gekoppelten Systems auf formal exakte Weise eine stochastische Differentialgleichung herzuleiten, wurde also erreicht.

In den folgenden Kapiteln werden wir auf der Basis der Darstellung (2.36) die Methode zur Elimination schneller chaotischer Freiheitsgrade auf eine Reihe von Beispielsystemen anwenden und in Form von Vergleichen zwischen Theorie und Numerik ihre Leistungsfähigkeit im Detail untersuchen. Insbesondere die Güte, mit der das Langzeitverhalten der langsamen Freiheitsgrade vorhergesagt werden kann, bildet den wesentlichen Schwerpunkt bei den durchgeführten Untersuchungen.

# Kapitel 3

## Pseudo-Hamiltonsches Kubo-Modell

Nichtlineare Systeme sind Systeme mit einer reichen und komplexen Dynamik. Das macht sie auf der einen Seite zu interessanten Untersuchungsobjekten. Auf der anderen Seite verhindert gerade die Nichtlinearität eine analytische Behandlung.

Im letzten Abschnitt, in dem das Eliminationsverfahren analytisch abgeleitet wurde, hat man aus diesem Grund bei der Einbeziehung der schnellen chaotischen Dynamik des gekoppelten Systems auf eine Markov-Approximation zurückgegriffen. Natürlich wäre es wünschenswert, in einem ersten Schritt die Leistungsfähigkeit und den Vorhersagehorizont unseres Verfahrens anhand eines einfachen und vollständig analytisch handhabbaren Modells zu überprüfen. Damit könnte man im Detail verfolgen, wie sich beispielsweise die Dämpfungs- und Diffusionsbeiträge ergeben.

Das war die Motivation, nach einem idealisierten Beispielsystem zu suchen. Eine Aufgabe bestand darin, das schnelle chaotische System durch ein geeignetes lineares System zu ersetzen. Zusätzlich musste dieses System der Forderung nach Energieerhaltung und nach einer Hamiltonischen Struktur der zugehörigen Bewegungsgleichungen genügen. Um schließlich den hinreichend schnellen Zerfall der Korrelationen (des schnellen Subsystems) zugewährleisten, kommt man unter den vorliegenden Einschränkungen nicht umhin, ein stochastisches System zu wählen. In der Tat erfüllt der stochastische *Kubo-Oszillator* [2, 20] alle Anforderungen. Das Rauschen, welches eingekoppelt wird, ist hierbei Gaußsches Rauschen. Die Korrelationen zerfallen in diesem System exponentiell schnell. Demzufolge ist der Kubo-Oszillator selbst ein Markov-Prozess, womit die entsprechende Approximation exakt wird.

Ziel dieses Kapitels ist es, anhand des pseudo-Hamiltonschen Kubo-Modells, bestehend aus einem schnellen Kubo- und einem langsamen harmonischen Oszillator, die wesentlichen Aspekte unseres Eliminationsverfahrens eingehend zu untersuchen.

### 3.1 Kubo-Oszillator

Der Kubo-Oszillator ist eines der wenigen stochastischen Systeme, das sowohl energieerhaltend ist als auch über eine pseudo-Hamiltonische Struktur der Bewegungsgleichungen

verfügt [20]. Die Energieerhaltung wird durch das tangentielle Einkoppeln des Rauschens erreicht. Dies schlägt sich in den Bewegungsgleichungen wie folgt nieder:

$$\dot{q} = p(1 + \xi(t)) \quad (3.1)$$

$$\dot{p} = -q(1 + \xi(t)), \quad (3.2)$$

wobei  $q$  die Ortsvariable und  $p$  der zugehörige kanonisch konjugierte Impuls ist.  $\xi(t)$  ist eine geeignete Realisierung des unkorrelierten Gaußschen Rauschprozesses, d.h. es gilt

$$\langle \xi(t)\xi(t') \rangle = 2\delta(t - t') \quad \text{und} \quad \langle \xi(t) \rangle = 0. \quad (3.3)$$

Die hier erscheinenden Bewegungsgleichungen Gl. (3.1) und Gl. (3.2) des Kubo-Oszillators sind als Langevin-Gleichungen im Sinne von Stratonovich zu interpretieren [20].

Geht man von  $\mathcal{H} = \frac{1}{2}(p^2 + q^2)$  als Hamiltonian des Kubo-Oszillators aus, dann weist der nach der Zeit differenzierte Hamiltonian  $\frac{d}{dt}\mathcal{H} = p\dot{p} + q\dot{q}$  neben den Orts- und Impulsvariablen zusätzlich die zugehörigen Zeitableitungen dieser Variablen auf. Diese können im nächsten Schritt unter Verwendung der Bewegungsgleichungen des Kubo-Oszillators (3.1) und (3.2) ersetzt werden. Es lässt sich zeigen, dass  $\frac{d}{dt}\mathcal{H} = 0$  gilt. Infolge der Energieerhaltung ist die Bewegung des Kubo-Oszillators auf eine Energiefläche beschränkt. Das wird deutlicher, wenn man zu Zylinderkoordinaten übergeht:

$$q = r \sin(\varphi) \quad (3.4)$$

$$p = r \cos(\varphi). \quad (3.5)$$

Unter Verwendung dieser Transformation ergeben sich aus den Gleichungen (3.1) und (3.2) des Kubo-Oszillators für die Winkelkoordinate  $\varphi$  und den Radius  $r$  folgende Differentialgleichungen:

$$\dot{\varphi} = -(1 + \xi(t)) \quad (3.6)$$

$$\dot{r} = 0. \quad (3.7)$$

Man erkennt, dass der Radius  $r$  konstant bleibt, während die Winkelkoordinate  $\varphi$  eine Funktion des zeitlich veränderlichen Rauschprozesses  $\xi(t)$  ist. Der Radius ist dabei festgelegt durch die Gesamtenergie  $E_{ko}$  des Kubo-Oszillators. Es gilt  $r = \sqrt{2E_{ko}}$ .

### Zerfall der Korrelationen

Ein entscheidendes Kriterium für die Anwendbarkeit unseres Eliminationsverfahrens ist, dass das betrachtete schnelle System die Voraussetzungen für die Markov-Approximation (nach Abschnitt 2.2.2) erfüllt. Als schnelles System wird in diesem Kapitel der Kubo-Oszillator dienen. Im Folgenden wollen wir sehen, wie es sich mit dem Zerfall der Korrelationen in diesem System verhält.

Durch Einführen der komplexen Variable  $z := p + iq$  können die Bewegungsgleichungen (3.1) und (3.2) des Kubo-Systems zu einer einzigen Gleichung

$$\dot{z} = i(1 + \xi(t))z \quad (3.8)$$

mit reellwertigem Rauschen zusammengefasst werden. Bei der Gleichung (3.8) handelt es sich um eine einfache homogene, lineare Differentialgleichung erster Ordnung in der Zeit, die man gemäß

$$z(t) = z_0 \exp \left( i \left( t + \int_0^t \xi(t') dt' \right) \right) \quad (3.9)$$

lösen kann. Da man hier von einem Gaußschen Rauschprozess entsprechend (3.3) ausgeht, ergibt sich die komplexwertige Autokorrelationsfunktion zu

$$\langle z(t)z(t') \rangle = \tilde{z}_0 \exp(i|t - t'|) \exp(-|t - t'|). \quad (3.10)$$

Mit Hilfe der Beziehung (3.10) erhält man die zugehörige reellwertige Korrelationsfunktion der Ortskoordinate  $q$ :

$$C(t - t') := \langle q(t)q(t') \rangle = E_{ko} \cos(|t - t'|) e^{-|t - t'|}. \quad (3.11)$$

Auf ähnliche Weise ergibt sich die Korrelationsfunktion für die zugehörige kanonisch konjugierte Impulskoordinate  $p$ . Die Korrelationen in einen Kubo-Oszillator mit weißem Rauschen zerfallen nach (3.11) exponentiell schnell in der Zeit. Somit sind die Bedingungen zur Anwendung der Markov-Näherung erfüllt.

## 3.2 Einkubomodell

Nun wollen wir das Modell vorstellen, auf dem unsere Untersuchungen in diesem Kapitel basieren. Es besteht aus einem langsamen harmonischen Oszillator und einem schnellen Kubo-Oszillator, die über eine harmonische Kopplung miteinander wechselwirken. Die zeitliche Entwicklung dieses Systems wird durch die folgenden Hamiltonschen Bewegungsgleichungen

$$\dot{Q} = P \quad (3.12)$$

$$\dot{P} = -(1 + \kappa)Q + \kappa q \quad (3.13)$$

$$\dot{q} = \frac{1}{\varepsilon}(1 + \sqrt{\varepsilon}\xi(t))p \quad (3.14)$$

$$\dot{p} = -\frac{1}{\varepsilon}(1 + \sqrt{\varepsilon}\xi(t))((1 + \varepsilon\kappa)q - \varepsilon\kappa Q) \quad (3.15)$$

beschrieben. Hierbei erscheint der Satz an kanonisch konjugierten Orts- und Impulsvariablen des langsamen Oszillators in Großbuchstaben und der für den schnellen Kubo-

Oszillator in Kleinbuchstaben. Der zugehörige Hamiltonian hat die folgende Gestalt:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_l + \frac{1}{\varepsilon}\mathcal{H}_s + \mathcal{H}_k \quad \text{mit} \quad (3.16)$$

$$\mathcal{H}_l = \frac{1}{2}(Q^2 + P^2) \quad (\text{harmonischer Oszillator}) \quad (3.17)$$

$$\mathcal{H}_s = \frac{1}{2}(q^2 + p^2) \quad (\text{Kubo-Oszillator}) \quad (3.18)$$

$$\mathcal{H}_k = \frac{1}{2}\kappa(Q - q)^2 \quad (\text{harmonische Kopplung}). \quad (3.19)$$

Durch  $\mathcal{H}_l$  ist der Hamiltonian des langsamen, durch  $\mathcal{H}_s$  der des schnellen Systems und mit  $\mathcal{H}_k$  der für die Wechselwirkung zuständige Hamiltonian mit der Kopplungsstärke  $\kappa$  bezeichnet. Abkürzend wird hier für dieses gekoppelte System die Bezeichnung *Einkubomodell* bzw. *-system* eingeführt. In späteren Abschnitten werden auch gekoppelte Kubomodelle mit mehr als einem Kubo-Oszillator untersucht.

Dass der harmonische Oszillator als langsames System verwendet wird, ist auf seine einfache Dynamik zurückzuführen. Mögliche Zusatzeffekte, die sich aus einer komplexen langsamen Dynamik ergeben und die grundlegenden Prozesse der reduzierten Bewegung überlagern könnten, werden somit vermieden.

### 3.3 Diracsche Störungsrechnung für das Einkubomodell

Infolge der Einfachheit und Linearität des *Einkubomodells* ist eine vollständig analytische Behandlung möglich. Diese ihrerseits gestattet eine alternative Herleitung der Drift- und Diffusionskoeffizienten, die im Rahmen der reduzierten Beschreibung in Gl. (2.36) benötigt werden. Insbesondere kann hier anstelle der Projektionsmethode die *Diracsche Störungsrechnung* in heuristischer Weise verwendet werden. Ziel der Störungsrechnung ist es zu vergleichen, inwieweit die Fokker-Planck-Gleichung, die mittels der Projektionsmethode gefunden wurde, reproduzierbar ist. Außerdem kann auf diesem Wege im Detail nachvollzogen werden, woher die Dämpfung rührt. Das heißt, auf der Basis dieses einfachen Systems möchten wir die physikalischen Ursachen und Mechanismen, die mit der Reduktion der schnellen Freiheitsgrade einhergehen, besser verstehen lernen.

Bevor wir zur angekündigten Herleitung übergehen, muss, um spätere Missverständnisse zu vermeiden, darauf aufmerksam gemacht werden, dass wir uns im Folgenden auf die leicht veränderte Variante der harmonischen Kopplung  $\mathcal{H}_k = \frac{1}{2}\kappa(Q^2 - 2Qq)$  beschränken wollen. Es wird also lediglich der Renormierungsanteil der schnellen Ortsvariablen  $q$  vernachlässigt.



### 3.3.1 Herleitung des Driftkoeffizienten

Als Ausgangspunkt für die Herleitung des Driftkoeffizienten  $\mathbf{D}^{(1)}(Q, P) = (D_Q^{(1)}, D_P^{(1)})^T$  wählen wir die Definition, die sich aus der Kramers-Moyal-Entwicklung [20] ergibt. Betrachten wir zunächst die Driftkomponente in  $P$ :

$$D_P^{(1)}(Q_0, P_0) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \langle P(\Delta t) - P_0 \rangle_{(q_0, p_0) \in \Omega_E, \xi(t)} \Big|_{(Q_0, P_0)}. \quad (3.20)$$

Um die Notation so einfach wie möglich zu halten, wird hier der Driftkoeffizient  $D_P^{(1)}$  an der speziellen Stelle  $(Q_0, P_0)$  betrachtet. Dieses Wertepaar repräsentiert die langsamen Anfangsbedingungen des harmonischen Oszillators zum Zeitpunkt  $t = 0$  und  $P(\Delta t)$  ist die Lösung des vollen Systems, ausgehend von  $(Q_0, P_0, q_0, p_0)$  zur Zeit  $\Delta t$ .

Die eckigen Klammern in Gl. (3.20) bedeuten eine Ensemble-Mittelung über alle schnellen Anfangsbedingungen  $(q_0, p_0)$ , die auf der Energiefläche  $\Omega_E$  des Gesamtsystems (3.16) liegen. Zusätzlich muss hier eine Mittelung über alle Rauschrealisierungen  $\xi(t)$  durchgeführt werden (was im Fall einer schnellen chaotischen Dynamik entfallen würde).

Ausgehend von Gl. (3.20) wird im Folgenden die  $P$ -Komponente der Drift schrittweise für kleine Zeiten entwickelt. Dazu betrachten wir zunächst die Impulsdifferenz  $P$ , die sich durch Auswertung zu den Zeitpunkten  $t = 0$  und  $t = \Delta t$  und unter Verwendung der langsamen Bewegungsgleichung (3.14) zu

$$P(\Delta t) - P(0) = \int_0^{\Delta t} \dot{P}(t) dt = -(1 + \kappa) \int_0^{\Delta t} Q(t) dt + \kappa \int_0^{\Delta t} q(t) dt \quad (3.21)$$

ergibt. Das betrachtete Zeitintervall  $\Delta t$  wird, gemessen an der langsamen Zeitskala  $\tau_l$ , als klein vorausgesetzt. Nun kann man  $Q(t)$  um den Anfangszeitpunkt  $t = 0$  in einer Taylorreihe entwickeln:

$$Q(t) = Q(0) + t\dot{Q}(0) + \frac{t^2}{2}\ddot{Q}(0) + \dots = Q(0) + tP(0) + \mathcal{O}(t^2). \quad (3.22)$$

Damit erhalten wir für die Driftkomponente  $D_P^{(1)}$  den folgenden genäherten Ausdruck:

$$D_P^{(1)}(Q_0, P_0) = -(1 + \kappa)Q_0 + \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\kappa}{\Delta t} \underbrace{\left\langle \int_0^{\Delta t} q(t) dt \right\rangle_{(q_0, p_0) \in \Omega_E, \xi(t)} \Big|_{(Q_0, P_0)}}_{=: I_{\Delta t}(Q_0, P_0)}. \quad (3.23)$$

Der zweite Integralterm in Gl. (3.21) lässt sich nicht auf diese Weise behandeln. Er enthält wesentliche Beiträge, die aus der Wechselwirkung herrühren. Deshalb wird er im Folgenden abkürzend als Wechselwirkungsterm  $I_{\Delta t}(Q_0, P_0)$  bezeichnet. Um diesen Term in geeigneter Weise zu entwickeln, werden wir auf das Konzept, das der Diracschen Störungsrechnung zugrunde liegt, zurückgreifen.

### Ansatz für schnelle Kubo-Dynamik

Der entscheidende Schritt zur Approximation des Wechselwirkungsterms im Rahmen der Diracschen Störungsrechnung besteht darin, zunächst die ungestörten Lösungen des freien Kubo-Oszillators zu betrachten. Diese sind aus dem Abschnitt 3.1 mit den Lösungsgleichungen (3.4) und (3.6) bekannt. Beim Übergang zum gekoppelten Fall kann die auftretende Wechselwirkung für hinreichend kleine Zeiten  $t \ll \tau_l$  als kleine Störung der freien Lösungen des schnellen Oszillators interpretiert werden. Die Folge ist, dass die bislang konstante Amplitude  $A$  (Radius  $A := r$  in Gl. (3.4)) zeitabhängig wird. Zusätzlich ergibt sich infolge der Wechselwirkung mit dem harmonischen Oszillator eine Nullpunktverschiebung der schnellen Ortvariablen. Sie wird sichtbar, wenn man unter Verwendung der Bewegungsgleichung (3.15) der schnellen Impulsvariablen, die folgende Umformungen durchführt:

$$\begin{aligned} 0 &= \langle \dot{p} \rangle_{(q_0, p_0) \in \Omega_E, \xi(t)} = -\frac{1}{\varepsilon} \langle (1 + \sqrt{\varepsilon} \xi(t))(q - \varepsilon \kappa Q) \rangle_{(q_0, p_0) \in \Omega_E, \xi(t)} \\ \Rightarrow \quad \langle q \rangle_{(q_0, p_0) \in \Omega_E, \xi(t)} &= \varepsilon \kappa Q. \end{aligned} \quad (3.24)$$

Somit können für hinreichend kleine Zeiten  $t \ll \tau_l$  folgende Lösungen für die schnelle Kubo-Dynamik angesetzt werden:

$$q(t) = A(t) \sin(\varphi_0 + t + W_t) + \varepsilon \kappa Q \quad (3.25)$$

$$p(t) = A(t) \cos(\varphi_0 + t + W_t) \quad \text{mit} \quad W_t := \int \xi(t) dt. \quad (3.26)$$

Dabei ist  $\varepsilon \kappa Q$  in Gl. (3.25) die erwähnte Nullpunktverschiebung und  $W_t$  ist ein Wiener-Prozess<sup>1</sup>. Der Ausdruck  $\varphi = \varphi_0 + t + W_t$  ergibt sich durch formale Integration der Gl. (3.6).

Unter Ausnutzung der Energieerhaltung des Gesamtsystems kann im nächsten Schritt die Amplitude  $A(t)$  bestimmt werden. Dazu muss man lediglich die obigen Ansätze (3.25) und (3.26) in den Gesamthamiltonian Gl. (3.16) einsetzen. Anschließend kann nach der Amplitude aufgelöst werden:

$$A(t) = \sqrt{\varepsilon \sqrt{2E_k - ((1 + \kappa - \varepsilon \kappa^2)Q^2 + P^2)}}. \quad (3.27)$$

Die Amplitudenfunktion (3.27) enthält hier den Zeitskalenparameter  $\varepsilon$ . Das ist die Konsequenz aus dem Kopplungsvorgang. Mit  $E_k$  ist die Gesamtenergie des Einkubosystems bezeichnet.

### Taylorentwicklung der Amplitude $A(t)$

Unter Verwendung von Gl. (3.27) für die Amplitudenfunktion und der Ansätze (3.25) und (3.26) zur Beschreibung der schnellen dynamischen Prozesse im Kubo-Systems, kann der

---

<sup>1</sup>Dieser Prozess ist ein Beispiel eines Markov-Prozesses. Er dient häufig als Modell für rein diffusive Transportprozesse in der statistischen Physik. Der Diffusionskoeffizient für einen Wiener-Prozess ist konstant und durch  $D^{(2)} = \frac{1}{2}$  festgelegt.

Wechselwirkungsterm  $I_{\Delta t}$  gemäß

$$I_{\Delta t} = \left\langle \int_0^{\Delta t} A(t) \sin(\varphi(t)) dt \right\rangle_{R_{E,\xi} \Big|_{(Q_0, P_0)}} + \varepsilon \kappa \int_0^{\Delta t} Q(t) dt. \quad (3.28)$$

umgeschrieben werden. Aus rein praktischen Gründen wurde hier durch Einführen von  $R_{E,\xi} := \{(q_0, p_0) \in \Omega_E, \xi(t)\}$  die bisherige Mittelungsvorschrift kompakter aufgeschrieben. Diese Abkürzung wird auch im weiteren Verlauf der Rechnung verwendet.

Die langsamen zeitabhängigen Orts- und Impulsvariablen, die in der Amplitudenfunktion (3.28) erscheinen, können für kleine Zeitintervalle  $t' < \Delta t$  entwickelt werden. Für die Ortsvariable  $Q$  erhält man nach Gl. (3.22) näherungsweise  $Q \approx Q_0$ . Der langsame Impuls  $P$  kann ähnlich zu Gl. (3.21) um  $t' \approx 0$  entwickelt werden:

$$P = P_0 - t'(1 + \kappa)Q_0 + \kappa \int_0^{t'} q(t'') dt'' + \mathcal{O}(t'^2) \approx P_0 + \kappa \int_0^{t'} q(t'') dt'' \quad (3.29)$$

$$\Rightarrow P^2 \approx P_0^2 + 2P_0\kappa \int_0^{t'} q(t'') dt'' + \underbrace{\kappa^2 \left( \int_0^{t'} q(t'') dt'' \right)^2}_{\mathcal{O}(t'^2)}. \quad (3.30)$$

Der dritte Term in Gleichung (3.30) wird vernachlässigt, da die Zeit  $t'$  quadratisch eingeht. Sie wird hier als sehr klein vorausgesetzt ( $t' \ll 1$ ). Somit erhält man für die Amplitude unter Berücksichtigung von Gleichung (3.29) und der konstanten Anfangsamplitude  $A_0 := A(0)$ :

$$A(t') \approx A_0 \sqrt{1 - S(t')} \quad \text{mit} \quad S(t') := \frac{2\varepsilon\kappa P_0}{A_0^2} \int_0^{t'} q(t'') dt''. \quad (3.31)$$

Schließlich kann man die Amplitude selbst noch für kleine Terme von  $S$  um die Null in einer Taylorreihe entwickeln und erhält auf diese Weise:

$$A(t') \approx A_0 \left( 1 - \frac{1}{2} S(t') \right) = A_0 - \frac{\varepsilon\kappa P_0}{A_0} \int_0^{t'} q(t'') dt''. \quad (3.32)$$

Die zusammengesetzte Funktion  $S(t')$  ist eine kleine Größe, da sowohl der Kleinheitsparameter  $\varepsilon$  als auch die als sehr klein angenommene Zeit  $t'$  eingehen.

### Ausnutzung: Markov-Prozess

Betrachten man zunächst für  $q(t'')$  eine Lösung entsprechend (3.25). Bei Ersetzung von  $A(t)$  nach (3.32) in die Gleichung (3.23) für den Driftkoeffizienten bleiben im Limes  $\Delta t \rightarrow 0$  nur konstante Terme der Ordnung  $\Delta t$  übrig, so dass  $q(t'')$  in (3.32) durch  $q(t'') = A_0 \sin(\varphi(t'')) + \varepsilon\kappa Q_0$  vollständig beschrieben ist. Damit ergibt sich für die Gl. (3.28):

$$I_{\Delta t} = -\varepsilon\kappa P_0 \int_0^{\Delta t} dt' \int_0^{t'} dt'' \underbrace{\langle \sin(\varphi(t'')) \sin(\varphi(t')) \rangle_{R_{E,\xi} \Big|_{(Q_0, P_0)}}}_{C_0(t'-t'')} + \varepsilon\kappa \Delta t Q_0 + \mathcal{O}(\Delta t^2). \quad (3.33)$$

Mit  $C_0(t' - t'')$  ist hier die normierte schnelle Autokorrelationsfunktion bezeichnet. Sie ergibt sich nach Gl. (3.11) zu  $C_0(t' - t'') = \cos((t' - t'')/\varepsilon)e^{(t' - t'')/\varepsilon}$ . An dieser Stelle können wir eine wesentliche Vereinfachung erzielen, indem wir ausnutzen, dass die Dynamik des schnellen Kubo-Oszillators ein Markov-Prozess ist. Damit ergibt sich für den ersten Term auf der rechten Seite von Gl. (3.33):

$$\begin{aligned} \int_0^{\Delta t} dt' \int_0^{t'} dt'' C_0(t' - t'') &= \int_0^{\Delta t} dt' \int_0^{t'} dt'' \cos\left(\frac{1}{\varepsilon}|t' - t''|\right) e^{-|t' - t''|/\varepsilon} \\ &= \frac{\varepsilon}{2} \left[ \Delta t + \lim_{\Delta t \rightarrow \infty} \int_0^{\Delta t} e^{-t'/\varepsilon} \left( \sin\left(\frac{t'}{\varepsilon}\right) - \cos\left(\frac{t'}{\varepsilon}\right) \right) dt' \right] \\ &= \frac{\varepsilon}{2} \Delta t. \end{aligned} \quad (3.34)$$

Der exponentielle Zerfall der Autokorrelation mit der schnellen Rate  $\frac{1}{\varepsilon}$  bedingt, dass das Zweifachintegral über die Zeit durch ein einziges Zeitintegral ersetzt und dessen obere Integralgrenze bis unendlich ausgedehnt werden kann. Dieses Zweifachintegral entspricht in seinen Grundzügen einer Entwicklung des Zeitentwicklungsoperators des Gesamtsystems (im Dirac-Bild) in der Dyson-Reihe, wie man es aus der Diracschen Störungsrechnung kennt.

Setzt man den ausgewerteten Ausdruck für das Zeitintegral über die schnellen Autokorrelationen (3.34) in den Wechselwirkungsterm in Gl. (3.33) ein, so erhält man hierfür

$$I_{\Delta t} = \Delta t \left( \varepsilon \kappa Q_0 - \frac{\varepsilon^2 \kappa}{2} P_0 \right) + \mathcal{O}(\Delta t^2). \quad (3.35)$$

Abschließend wird der gewonnene Ausdruck für  $I_{\Delta t}$ , unter Berücksichtigung der Grenzwertbildung  $\Delta t \rightarrow 0$ , in die Ausgangsgleichung (3.23) für die  $P$ -Komponente der Drift eingesetzt und ausgewertet:

$$D_P^{(1)}(Q_0, P_0) = -\Omega_{1K} Q_0 - \gamma_{1K} P_0 \quad (3.36)$$

mit

$$\Omega_{1K} := (1 + \kappa - \varepsilon \kappa^2) \quad \text{und} \quad \gamma_{1K} := \frac{\varepsilon^2 \kappa^2}{2}. \quad (3.37)$$

Der erste Term in Gl. (3.36) für die  $P$ -Komponente der Drift ist der deterministische Driftanteil. Mit  $\Omega_{1K}$  ist die renormierte Frequenz des langsamen harmonischen Oszillators bezeichnet. Sie enthält zwei weitere Beiträge gegenüber der ursprünglichen Oszillatorfrequenz des freien Systems: Zum einen  $\kappa$ , welches der Renormierungsanteil aus der harmonischen Kopplung ist und zum anderen  $\varepsilon \kappa^2$ , dieser Term entspricht der Nullpunktverschiebung infolge der Wechselwirkung. Der Dämpfungsterm ist hier mit  $\gamma_{1K}$  abgekürzt. Man findet also in Übereinstimmung mit der Ableitung auf der Basis der Projektionsmethode einen Dämpfungsterm in Ordnung  $\varepsilon^2$ , wobei das erste  $\varepsilon$  durch die schnelle Amplitude und das zweite  $\varepsilon$  durch den exponentiellen Zerfall der schnellen Korrelationen des Kubo-Oszillators resultiert.

Auf ähnliche Weise, aber ohne die zusätzliche Komplikation durch die Kopplung, erhält man die  $Q$ -Komponente der Drift zu  $D_Q^{(1)}(Q_0, P_0) = P_0$ .

### 3.3.2 Herleitung des Diffusionskoeffizienten

Im letzten Abschnitt wurden die Driftkoeffizienten des langsamen harmonischen Oszillators bestimmt. Hier wollen wir nun die Koeffizienten des zugehörigen Diffusionstensors

$$\mathbf{D}^{(2)}(Q, P) = \begin{pmatrix} D_{QQ}^{(2)} & D_{QP}^{(2)} \\ D_{PQ}^{(2)} & D_{PP}^{(2)} \end{pmatrix} \quad (3.38)$$

mit Hilfe der Beziehungen, die sich aus der Kramers-Moyal-Entwicklung [20] ergeben, ableiten. Zunächst betrachten wir die  $PP$ -Komponente des Diffusionstensors (3.38):

$$D_{PP}^{(2)}(Q_0, P_0) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{2\Delta t} \langle (P(\Delta t) - P_0)^2 \rangle_{R_{E,\xi}} \Big|_{(Q_0, P_0)}. \quad (3.39)$$

Nach Gl. (3.39) ist die Diffusionkomponente im Wesentlichen durch den mittleren quadratischen Abstand des langsamen Impulses  $P$  im Limes  $\Delta t \rightarrow 0$  bestimmt.

Wegen der augenfälligen Gemeinsamkeiten der  $PP$ -Komponente der Diffusion  $D_{PP}^{(2)}$  mit der  $P$ -Komponente der Drift, können an geeigneter Stelle eine Reihe von Teilergebnissen und Zwischenschritten übernommen werden. Dadurch wird die Rechnung wesentlich verkürzt. In diesem Sinne können wir die quadrierte zeitliche Abstandsdifferenz der langsamen Impulsvariablen  $P$  unter Verwendung der Beziehung (3.21) gemäß

$$(P(\Delta t) - P_0)^2 = (F + G)^2 = F^2 + 2FG + G^2 \quad \text{mit} \quad (3.40)$$

$$F := -(1 + \kappa) \int_0^{\Delta t} Q(t') dt' \quad (3.41)$$

$$G := \kappa \int_0^{\Delta t} q(t') dt' \quad (3.42)$$

umschreiben. Der erste Term auf der rechten Seite der Gl. (3.40) kann mit Hilfe der Gl. (3.22), wie folgt

$$\langle F^2 \rangle_{R_{E,\xi}} \Big|_{(Q_0, P_0)} \approx \Delta t^2 (1 + \kappa)^2 Q_0^2. \quad (3.43)$$

genähert werden. Der zweite Term ist ein Mischterm und ist ein wenig komplizierter. Er erweist sich bei genauerer Betrachtung als eine leicht veränderte Form des Wechselwirkungsterms  $I_{\Delta t}$ . Für diesen kennen wir nach Gl. (3.35) (vorhergehender Abschnitt) die Näherung für kleine Zeitintervalle  $\Delta t \ll \tau_l$ . Damit kann auch dieser Term abgeschätzt werden und ergibt sich zu

$$\langle 2FG \rangle_{R_{E,\xi}} \Big|_{(Q_0, P_0)} \approx -2\kappa(1 + \kappa)\Delta t Q_0 \left\langle \int_0^{\Delta t} q(t') dt' \right\rangle_{R_{E,\xi}} \Big|_{(Q_0, P_0)} \quad (3.44)$$

$$= -2\kappa(1 + \kappa)\Delta t Q_0 I_{\Delta t}(Q_0, P_0). \quad (3.45)$$

Der letzte Term aus Gl. (3.40) lässt sich auf folgende Weise umformen:

$$\begin{aligned}
\langle G^2 \rangle_{R_{E,\varepsilon}} \Big|_{(Q_0, P_0)} &= \kappa^2 \left\langle \left( \int_0^{\Delta t} q(t') dt' \right)^2 \right\rangle_{R_{E,\varepsilon}} \Big|_{(Q_0, P_0)} \\
&\approx \kappa^2 \int_0^{\Delta t} dt' \int_0^{t'} dt'' \langle q(t') q(t'') \rangle_{R_{E,\varepsilon}} \Big|_{(Q_0, P_0)} \\
&\approx A_0^2 \kappa^2 \int_0^{\Delta t} dt' \int_0^{t'} dt'' \langle \sin(\varphi(t')) \sin(\varphi(t'')) \rangle_{R_{E,\varepsilon}} \Big|_{(Q_0, P_0)} \\
&= A_0^2 \kappa^2 \Delta t \frac{\varepsilon}{2}.
\end{aligned} \tag{3.46}$$

In einem abschließenden Schritt werden nun die genäherten Ausdrücke (3.43), (3.44) und (3.46) für die besprochenen drei Terme zur Bestimmung der  $PP$ -Diffusionskomponente aus Gl. (3.39) verwendet. Für  $A_0^2$  ist die Gl. (3.27) zum Zeitpunkt  $t = 0$  zu betrachten. Damit ergibt sich:

$$\begin{aligned}
D_{PP}^{(2)}(Q_0, P_0) &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{2\Delta t} \left\{ \langle F^2 \rangle_{R_{E,\varepsilon}} \Big|_{(Q_0, P_0)} + \langle 2FG \rangle_{R_{E,\varepsilon}} \Big|_{(Q_0, P_0)} + \langle G^2 \rangle_{R_{E,\varepsilon}} \Big|_{(Q_0, P_0)} \right\} \tag{3.47} \\
&= \frac{\varepsilon^2 \kappa^2}{2} (E_k - \tilde{\mathcal{H}}_i^{(1)}), \tag{3.48}
\end{aligned}$$

wobei  $\tilde{\mathcal{H}}_i^{(1)} = \frac{1}{2}((1+\kappa)Q_0^2 + P_0^2)$  den durch die Kopplung veränderten Hamiltonian des langsamen harmonischen Oszillators bezeichnet. Man kann durch entsprechende Vorgehensweise auch die anderen Komponenten der Diffusionmatrix (3.38) berechnen und zeigen, dass sie verschwinden.

Auffällig ist, daß auch die Diffusion nun von der Ordnung  $\varepsilon^2$  ist. Dies steht keineswegs im Widerspruch zum Ergebnis aus dem Eliminationsverfahren, sondern kann darauf zurückgeführt werden, dass die Gesamtenergie  $E_k$  nicht mit  $\varepsilon$  reskaliert ist. Geht man jedoch zur reskalierten Energie  $E_k \rightarrow E/\varepsilon$  über, dann kann der Ausdruck für die Diffusionskomponente  $D_{PP}^{(2)}$  nachträglich so umformt werden, dass die reskalierte Gesamtenergie  $E$  erscheint:

$$D_{PP}^{(2)}(Q_0, P_0) = \frac{\varepsilon \kappa^2}{2} (E - \varepsilon \tilde{\mathcal{H}}_i^{(1)}). \tag{3.49}$$

In dem hier betrachteten Fall, in dem das schnelle System als Kubo-Oszillators gewählt wird, ist es nicht entscheidend, ob die Energie mit dem Zeitskalenparameter reskaliert wird oder nicht. Die Eigenschaften der schnellen Dynamik bleiben davon unberührt. Es hat lediglich Auswirkungen auf die maximalen Amplituden, die bei den langsamen Observablen auftreten. Anders ist es im chaotischen Fall: Hier muss verständlicherweise sichergestellt werden, dass im zeitlichen Mittel genügend Energie im schnellen System vorhanden ist, da es ansonsten regulär werden kann. In diesen Fall ist die Reskalierung der Gesamtenergie sinnvoll.

### 3.3.3 Vergleich mit Eliminationsverfahren

In diesem Abschnitt wollen wir die Resultate aus der Diracschen Störungsrechnung den Resultaten, die sich auf der Basis des Eliminationsverfahrens ergeben, gegenüberstellen. Für den Vergleich müssen zunächst die theoretischen Fokker-Planck-Koeffizienten  $\tilde{D}_{PP}^{(2)}(Q, P)$  (Diffusionsterm) und  $\tilde{\gamma}(Q, P)$  (Dämpfungsterm) aus dem Eliminationsverfahren nach Gl. (2.39) und Gl. (2.41) für das Einkubosystem bestimmt werden. Zuvor müssen jedoch die Zustandsdichte  $Z^{(0)}$  nach Gl. (2.41) und die Koeffizienten  $d_0, d_1$  nach Gl. (2.42) für den Kubo-Oszillator ausgewertet werden:

$$Z^{(0)} = \int \int \delta(H_s - E) dqdp = \pi \quad (3.50)$$

$$d_0 = \int_0^\infty \langle q(t)q(t+\tau) \rangle d\tau = \int_0^\infty E \cos(\tau) e^{-\tau} d\tau = \frac{1}{2} \kappa^2 E \quad (3.51)$$

$$d_1 = \frac{\partial}{\partial E} d_0 = \frac{1}{2} \kappa^2. \quad (3.52)$$

Mit Hilfe der Beziehungen (3.50), (3.51) und (3.52) ergeben sich der Dämpfungs- und Diffusionskoeffizient zu:

$$\tilde{\gamma}(Q, P) = d_1 + d_0 \frac{\partial}{\partial E} \ln Z^{(0)} = \frac{1}{2} \kappa^2 \quad (3.53)$$

$$\tilde{D}_{PP}^{(2)}(Q, P) = d_0 - \varepsilon \tilde{\mathcal{H}}_l^{(1)} d_1 = \frac{\kappa^2}{2} (E - \varepsilon \tilde{\mathcal{H}}_l^{(1)}). \quad (3.54)$$

Schließlich muß noch der Frequenzterm berechnet werden. Er ergibt sich hierbei wie folgt:

$$\langle \hat{\mathcal{L}}_l \rangle \cdot = \langle \mathcal{L}_l + \mathcal{L}_{k,l} \rangle \cdot = \left( \underbrace{\frac{\partial \tilde{\mathcal{H}}_l^{(1)}}{\partial P}}_P \frac{\partial}{\partial Q} \cdot - \underbrace{\frac{\partial \tilde{\mathcal{H}}_l^{(1)}}{\partial Q}}_{(1+\kappa)Q} \frac{\partial}{\partial P} \cdot \right) - \underbrace{\frac{\partial \tilde{\mathcal{H}}_k}{\partial Q}}_{-\kappa\langle q \rangle} \frac{\partial}{\partial P} = P \frac{\partial}{\partial Q} \cdot - \Omega_{1K} Q \frac{\partial}{\partial P} \cdot \quad (3.55)$$

Wie man aus Gl. (3.55) ersieht, geht die Nullpunktverschiebung  $\kappa\langle q \rangle = \varepsilon \kappa^2 Q$  beim Eliminationsverfahren aus dem Frequenzterm hervor. Hierbei besteht der folgende Zusammenhang zu den Koeffizienten, die mittels der Diracschen Störungsrechnung bestimmt wurden:

$$\gamma_{1K} = \varepsilon^2 \tilde{\gamma} = \frac{1}{2} \varepsilon^2 \kappa^2 \quad (3.56)$$

$$D_{PP}^{(2)} = \varepsilon \tilde{D}_{PP}^{(2)} = \frac{\varepsilon \kappa^2}{2} (E - \varepsilon \tilde{\mathcal{H}}_l^{(1)}). \quad (3.57)$$

In der Tat sind die resultierenden Ausdrücke (3.53) und (3.54) sowohl für die Drift- als auch für die Diffusionskoeffizienten identisch mit denen, die zuvor mit Hilfe der Diracschen Störungsrechnung ermittelten wurden. Die zugehörige Fokker-Planck-Gleichung hat also in beiden Fällen die folgende Gestalt:

$$\frac{\partial}{\partial t} \bar{\rho}_t(Q, P) = -P \frac{\partial}{\partial Q} \bar{\rho}_t + \Omega_{1K} Q \frac{\partial}{\partial P} \bar{\rho}_t + \varepsilon^2 \frac{\partial}{\partial P} \tilde{\gamma} P \bar{\rho}_t + \varepsilon \frac{\partial^2}{\partial P^2} \tilde{D}_{PP}^{(2)} \bar{\rho}_t. \quad (3.58)$$

Bei  $\Omega_{1K}$  handelt es sich um die renormierte Oszillatorfrequenz (3.37) (s. Abschnitt 3.3.1).

Die gefundene Überstimmung bezüglich der reduzierten Bewegungsgleichung (3.58) für das betrachtete Modellsystem ist ein guter Hinweis, dass die vorgenommenen Näherungen (Bornsche und Markov-Approximation) des Eliminationsverfahrens für das vorliegende Einkubosystem geeignet sind. Die Ergebnisse, die mit Hilfe der Diracschen Störungsrechnung gefunden wurden, sind weiterhin genäherte Größen. Die zugehörige Rechnungen in Abschnitt 3.3.1 und 3.3.2 beruhen auf den gleichen Näherungen. Daher ist eine Überprüfung dieser Resultate auf der Basis von numerischen Simulationen notwendig. Wird werden dabei die numerischen Verfahren ausführlich erläutern, die wir später auch bei streng Hamiltonschen Systemen anwenden. Diese Systeme jedoch erlauben keine analytische Lösung mehr.

### 3.4 Vergleich Theorie und Numerik: Fokker-Planck-Näherung

Im Folgenden wollen wir uns der Simulation des Einfachkubosystem zuwenden und überprüfen, ob die numerisch bestimmten Fokker-Planck-Koeffizienten das theoretische Resultat bestätigen. Zur Bestimmung der Drift- und Diffusionskoeffizienten wählen wir ein empirisches Verfahren nach Siegert et al. [21], das auf der Kramers-Moyal-Entwicklung beruht. Der Schätzer zur Bestimmung des Driftkoeffizienten  $D_P^{(1)}$  sieht wie folgt aus:

$$D_P^{(1)}(Q, P, \Delta t) = \frac{1}{\Delta t} \langle P(t + \Delta t) - P(t) \rangle_{(q_0, p_0) \in \Omega_E} \Big|_{(Q_0, P_0)} + \mathcal{O}(\Delta t^2). \quad (3.59)$$

Für den Diffusionskoeffizienten  $D_{PP}^{(2)}$  nehmen wir den nach Ragwitz und Kantz [22] verbesserten Schätzer:

$$D_{PP}^{(2)}(Q, P, \Delta t) \approx \frac{1}{2\Delta t} \left( \langle (P(t + \Delta t) - P(t))^2 \rangle_{(q_0, p_0) \in \Omega_E} \Big|_{(Q_0, P_0)} - \Delta t^2 (D_P^{(1)}(Q, P, \Delta t))^2 \right). \quad (3.60)$$

Die eckigen Klammern in Gl. (3.59) und Gl. (3.60) bedeuten eine statistische Mittelung der Lösungen mit unterschiedlich schnellen Anfangsbedingungen  $(q_0, p_0)$  auf der Energieschale  $\Omega_E$ .

Der Fehler bei dem Driftschätzer (3.59) wächst quadratisch mit zunehmenden Zeitabstand  $\Delta t$  an. Daher muß die Drift zu möglichst kleinen Werten  $\Delta t$  bestimmt werden, um den Fehler klein zu halten. Entsprechendes gilt für den Diffusionsschätzer (3.60). An dieser Stelle wird ein Problem sichtbar, dass im Zusammenhang mit der Dämpfung steht. Nach den theoretischen Vorhersagen ist sie von der Ordnung  $\varepsilon^2$  und damit sehr klein. Der Fehler der Ordnung  $\mathcal{O}(\Delta t^2)$  des Driftschätzer (3.59) müßte kleiner als die Dämpfung, welche von der Ordnung  $\mathcal{O}(\varepsilon^2)$  ist, sein. Das Zeitintervall  $\Delta t$  kann jedoch nicht beliebig klein gewählt werden, da sich unterhalb eines bestimmten Wertes der Zeitdifferenz  $\Delta t$  Markov-Verletzungen bemerkbar machen. Für solch kurze Zeiträume sind die schnellen



Korrelationen nicht hinreichend zerfallen (siehe Abb. 3.1 (a1) - (a2)). Die Anwendung des konventionellen Verfahrens nach (3.59) ist also zu grob, um eine derart kleine Dämpfung zu bestimmen. In Folgenden werden einige Ideen vorgestellt, die das empirische Verfahren zur Driftbestimmung (3.59) verbessern können.

Bei der nachfolgenden numerischen Drift- bzw. Diffusionsberechnung wird, soweit nicht anders beschrieben, immer von der vollen harmonischen Kopplung ausgegangen.

### 3.4.1 Numerische Bestimmung von Drift- und Diffusionskoeffizienten

Zur Verbesserung des besprochenen Driftschätzers (3.59) ist es notwendig, Korrekturen bis zu einer ausreichend hohen Ordnung in  $\Delta t$  zu berücksichtigen, so dass die die Dämpfung der Beobachtung zugänglich wird. Für die Korrektur ist jedoch die detaillierte Kenntnis der Koeffizienten nötig. Das bedeutet insbesondere, dass man mit Hilfe der theoretisch zu erwartenden Driftkoeffizienten die Korrekturen berechnet und anschließend damit die numerischen Werte korrigiert. Beschreiben die theoretisch vorhergesagten Koeffizienten in zutreffender Weise die tatsächlichen Gegebenheiten im System, dann ergibt sich in selbstkonsistenter Weise eine Übereinstimmung von theoretischen und numerischen Koeffizienten. In allen anderen Fällen sind Diskrepanzen zu erwarten. Natürlich ist die Notwendigkeit der exakten Kenntnis der Koeffizienten gleichzeitig auch eine große Schwäche dieser Idee.

Im Falle vollständig linearer Drift, welche für das Einkubosystem zu erwarten ist, hat  $D_P^{(1)}$  die folgende Form:

$$\mathbf{D}^{(1)}(Q, P) = \mathbf{M} \begin{pmatrix} Q \\ P \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad \mathbf{M} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}. \quad (3.61)$$

Die Koeffizientenmatrix  $\mathbf{M}$  mit den konstanten Komponenten  $a, b, c$  und  $d$  wird zur Korrektur der Drift entsprechend

$$\mathbf{D}_{\text{kor},N}^{(1)}(Q, P) = \mathbf{D}^{(1)}(Q, P) - \sum_{n=2}^N \frac{\Delta t^n}{n!} \mathbf{M}^n \begin{pmatrix} Q \\ P \end{pmatrix} + \mathcal{O}(\Delta t^{N+1}) \quad (3.62)$$

verwendet. Wie man leicht erkennt, liegt bei Gl. (3.62) eine Taylorentwicklung um  $\Delta t = 0$  zugrunde. Je mehr Korrekturordnungen  $N$  einbezogen werden, desto kleiner wird der Fehler bei der Bestimmung der korrigierten Drift  $\mathbf{D}_{\text{kor},N}^{(1)}$ . Von einer Korrektur des Diffusionskoeffizienten wird hier abgesehen, da dieser verhältnismäßig groß gegen  $\Delta t$  ist. Der besprochene Schätzer (3.60) sollte also zur numerischen Diffusionsbestimmung genügen.

Weiterhin wird eine spürbare Verbesserung des empirischen Verfahrens zur Drift- und Diffusionsbestimmung erreicht, indem abweichend von der gängigen Herangehensweise, bei der nur eine Systemtrajektorie zum Zweck der statistischen Mittelung herangezogen wird, eine Vielzahl von Systemtrajektorien mit unterschiedlichen Anfangsbedingungen des schnellen Systems verwendet wird. Diese Methode wird hier unter den Begriff *Gittermethode* zusammengefasst und nachfolgend erläutert.

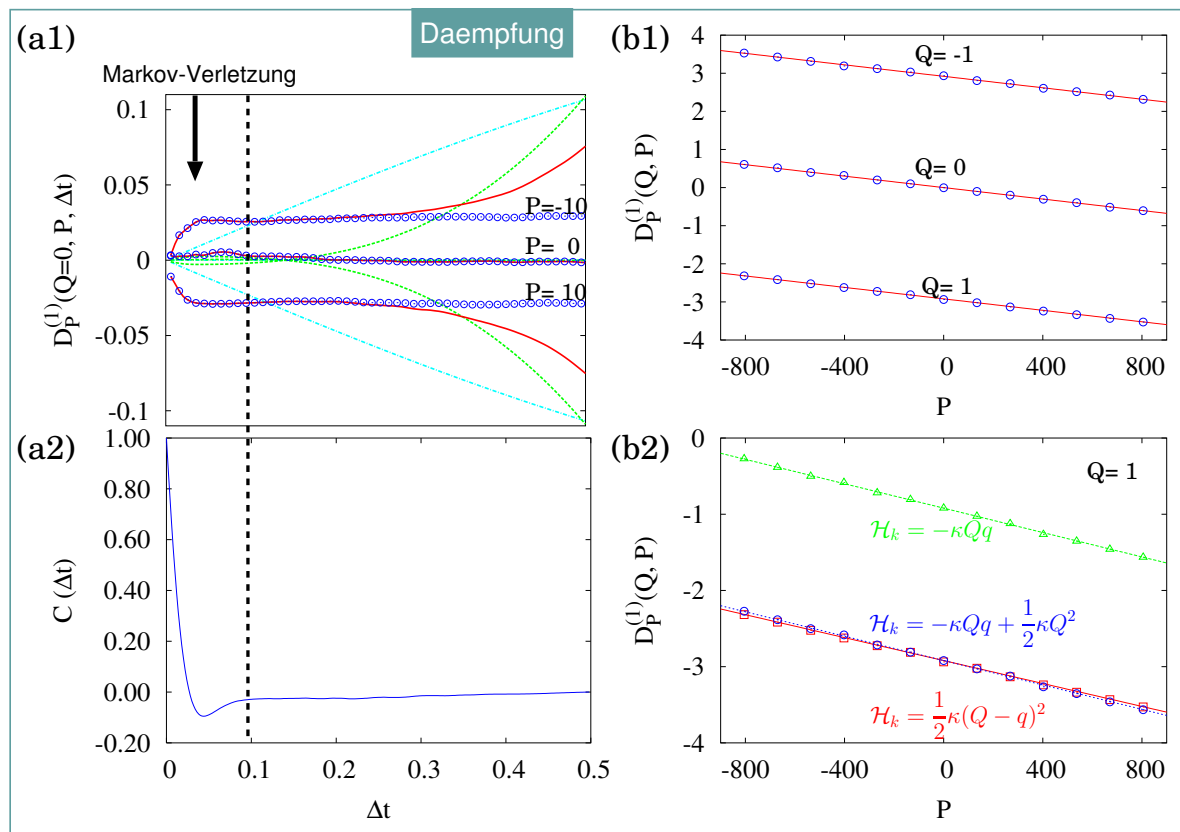
## Gittermethode

Die Gittermethode basiert auf der Idee, anstelle einer einzigen Trajektorie ein Bündel von Trajektorien zu unterschiedlich schnellen Anfangsbedingungen  $(q_0, p_0)$  bei fest vorgegebenen langsamen Ort- und Impulsvariablen  $(Q, P)$  zu betrachten. In dem Eintrajektorien-Verfahren werden die Drift- bzw. Diffusionskoeffizienten nach den langsamen  $(Q, P)$ -Paaren aussortiert, um im Anschluss eine Mittelung des Koeffizienten zu festen  $(Q, P)$  durchzuführen. Damit ergeben sich einige Nachteile: Zum einen ist das Aussortieren der Koeffizienten zu einem bestimmten Wertepaar  $(Q, P)$  sehr aufwändig. Hinzu kommt, dass der Genauigkeit bei der Diskretisierung enge Grenzen gesetzt sind, um eine ausreichende statistische Basis zu haben. Daher werden u.U. zeitintensive numerische Rechnungen nötig. Im Gegensatz dazu werden beim Vieltrajektorien-Verfahren im Vorfeld die interessierenden langsamen  $(Q, P)$ -Wertepaare, für die man die Koeffizienten bestimmen möchte, anschaulich auf einem  $(Q, P)$ -Gitter fest vorgegeben. Jeder der Gitterpunkte  $(Q, P)$  ist zugleich die Anfangsbedingung des langsamen Systems. Die Trajektorien, die im selben Gitterpunkt starten, unterscheiden sich lediglich in den schnellen Anfangsbedingungen  $(q_0, p_0)$ . Ihre Werte sind dabei zufällig über die Energiefläche des gekoppelten Systems verteilt. Mit der Zahl der Trajektorien wird so die Basis der statistischen Mittelung gewählt. Eine jede Trajektorie muß dabei jeweils für das betrachtete Gesamtzeitintervall in  $\Delta t$  numerisch integriert werden. Dabei handelt es sich in der Regel um sehr kurze Zeiträume. Das wiederum eröffnet die Möglichkeit, dass auch numerische Integratoren mit geringerer Genauigkeit erfolgreich angewendet werden können. Dies ist ein weiterer Vorteil gegenüber dem herkömmlichen Verfahren.

Die Schätzer (3.59) und (3.60) setzen stillschweigend eine langsame Dynamik voraus, die sich *Markovsch* verhält. Dies stellt eine Einschränkung bei der Anwendung dar. Hier kann sie jedoch als zusätzlicher Test für die verwendete Markov-Approximation ausgenutzt werden. Anhand der in Abhängigkeit von  $\Delta t$  aufgetragenen Koeffizienten, wird eine mögliche Markov-Verletzung direkt beobachtbar. Zusätzlich kann das Zeitintervall  $\Delta t_m$ , in der die Verletzung vorliegt, bestimmt werden.

## Drift

In Abbildung 3.1 sind einige Ergebnisse zur numerisch bestimmten Drift für das Einkubosystem in einer Übersicht zusammengestellt. Die Ergebnisse wurden mit der besprochenen *Gittermethode* gewonnen. Das zentrale Resultat ist, dass man tatsächlich auch auf numerischem Wege eine viskose Dämpfung  $-\frac{1}{2}\varepsilon^2\kappa^2P$  findet, die in sehr guter Übereinstimmung mit der theoretische Vorhersage ist. In Abb. 3.1 (b1) wird das besonders eindrucksvoll demonstriert. Für drei unterschiedliche Werte der langsamen Ortsvariablen  $Q$  sind sowohl die theoretischen Werte der Drift für die  $P$ -Komponente (rote Gerade) als auch die zugehörigen numerisch ermittelten Werte (blaue Kreissymbole) aufgetragen. Wie man sieht, liegen die zugehörigen numerischen Werte nahezu perfekt auf der theoretisch vorhergesagten Geraden. Die viskose Dämpfung führt hier zu einer sehr kleinen negativen Steigung der beobachteten Geraden, die für alle drei Ortsvariablen  $Q$  von gleichem Betrag ist. Lediglich



**Abbildung 3.1:** Numerisch berechnete Driftkoeffizienten nach Gl. (3.62) für  $Q = 0$  eines langsamen harmonischen Oszillators (Einkubosystem Gl. (3.13)-(3.15)), welcher mit einem Kubo-Oszillator gekoppelt ist (Gl. (3.16)), ( $\varepsilon = 0.02$ ,  $\kappa = 4$  und  $E = 4$ ). (a1) Türkise Linie: unkorrigiertes Ergebnis, grüne Linie: umfasst auch lineare Korrekturen (reskaliert um einen Faktor  $1/10$ ), rote Linie: umfasst auch kubische Korrekturen, blaue Kreissymbole: Korrekturen bis  $\mathcal{O}(\Delta t^5)$ . Die Zusatzabbildung (a2) zeigt die schnelle Autokorrelationsfunktion des Kubo-Oszillators, Grund für die anfängliche Markov-Verletzung ist der unzureichende Zerfall der schnellen Korrelationen. In (b1) ist für drei  $Q$ -Werte die Driftkomponente  $D_P^{(1)}$  berechnet, rote Linien: theoretische Vorhersage, blaue Kreissymbole: numerische Berechnung. (b2) Vergleich der ermittelten Drift  $D_P^{(1)}$  für drei Varianten der harmonischen Kopplung ( $Q = 1$ ). Parameter bei (b1) - (b2):  $\varepsilon = 0.02$ ,  $\kappa = 2$  und  $E = 8000$ . (Bei der Simulation wurde die reskalierte Energie betrachtet.)

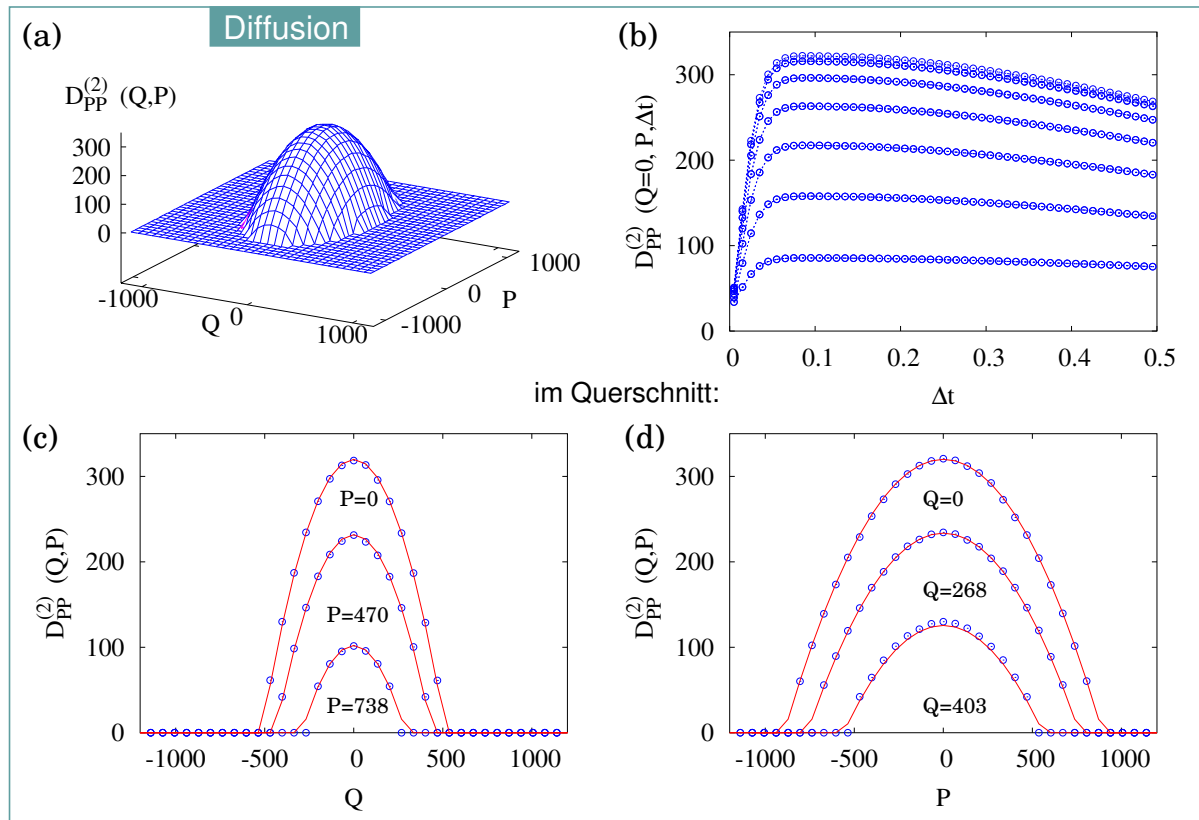
der  $y$ -Achsenabschnitt ist wegen des deterministischen Driftanteils in der  $P$ -Komponente gemäß Gl. (3.36) (entsprechend  $-(1 + \kappa - \varepsilon\kappa^2)Q$ ) verschoben.

Wie wir oben bereits diskutiert haben, erfordert die Bestimmung einer derart kleinen Dämpfung Korrekturen in den höheren Ordnung von  $\Delta t$ . In Abb. 3.1 (a1) ist die Driftkomponente  $D_P^{(1)}$  für drei unterschiedliche Impulswerte  $P$  an der Stelle  $Q = 0$  ausgewertet. Erst die Berücksichtigung der Korrekturen bis einschließlich der fünften Ordnung in  $\Delta t$  (blaue Kreissymbole) erlaubt die Beobachtung der Dämpfung (s. Abb.3.1 (a1)). Für Zeitenintervalle  $\Delta t < 0.1$  wird hier die Markov-Verletzung sichtbar. Die Ursache liegt im mangelnden Zerfall der schnellen Korrelationen für kleine Zeitintervalle. In der Zusatzabbildung 3.1 (a2) kann das nachvollzogen werden. Hier ist zum Vergleich für den selben Zeitraum die Autokorrelationsfunktion der schnellen Ortsvariable  $q$  aufgetragen.

Bei der Herleitung der Drift- und Diffusionskoeffizienten im Rahmen der Diracschen Störungsrechnung wurde von der harmonischen Kopplung ohne den schnellen Renormierungsanteil  $\frac{1}{2}\kappa q^2$  ausgegangen. Es stellt sich die Frage, inwieweit die Vernachlässigung der schnellen bzw. langsamen Renormierungsanteile in der harmonischen Kopplung berechtigt ist und welche Auswirkungen sie beispielweise auf die beobachtete Dämpfung hat. Die letzten Untersuchungen dieses Abschnitts sind dieser Frage gewidmet. In Abb. 3.1 (b2) werden zwei Varianten, die durch die genannte Vernachlässigung der Renormierungsanteile zustande kommen, mit der vollen harmonische Kopplung für  $Q = 1$  verglichen. Tatsächlich bleibt die Dämpfung davon unberührt. Im dem Fall, in welchem die Kopplung lediglich den bilinearen Anteil  $\mathcal{H}_\kappa = -\kappa Qq$  enthält, verschiebt sich, wie erwartet, der  $y$ -Achsenabschnitt, da im deterministischen Driftanteil gemäß Gl. (3.36) der langsame Renormierungsanteil  $\frac{1}{2}\kappa Q^2$  entfällt. Wenn man diesen Anteil zusätzlich zum bilinearen hinzufügt, dann ist die beobachtete Drift nahezu deckungsgleich mit der Drift bei vollständiger harmonischer Kopplung. Damit kann die anfangs aufgeworfene Frage dahingehend beantwortet werden, dass im Fall des Einkubomodells die Vernachlässigung der Renormierungsanteile keine wesentliche Auswirkung auf die dynamischen Verhältnisse hat. Dies ist zu erwarten, da der langsame Renormierungsanteil zu einer Renormierung der entsprechenden Oszillatorfrequenz führt und der schnelle Anteil mit  $\varepsilon$  eingeht. Damit ist er in der Regel vernachlässigbar. Allerdings darf im Falle der bilinearen Kopplung  $\kappa$  nicht zu groß gewählt werden, weil sonst das harmonische Potential negativ werden kann.

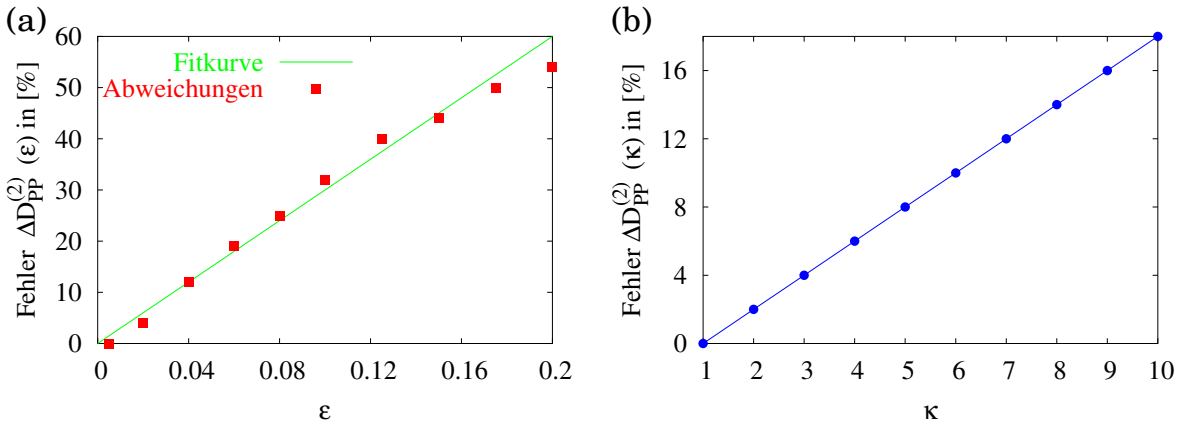
## Diffusion

Die numerische Bestimmung der Diffusion ist weit weniger kritisch, da sie von der Ordnung in  $\varepsilon E_r = \varepsilon(E/\varepsilon)$  ist, und durch geeignete Wahl der Energie  $E$  ausreichend vergrößert werden kann. Es reicht also völlig aus, das bekannte Verfahren nach Gl. (3.60) zu verwenden. Dies wird von der Abb. 3.2 (b) bestätigt. Die Kurven zu unterschiedlichen Impulswerten  $P$  bei festgewähltem Ortswert  $Q = 0$  verlaufen im Zeitintervall  $\Delta t = 0.05 - 0.2$  nahezu parallel. Der Diffusionskoeffizient ist also zu einem festen  $\Delta t$  aus diesem Intervall zu bestimmen. In der Übersicht Abb. 3.2 sind einige Ergebnisse hinsichtlich der  $PP$ -Komponente der Diffusion zusammengestellt. Die anderen Komponenten entfallen, da sie Null sind, was auch numerisch bestätigt werden konnte. Der Vergleich der theoretisch vorhergesagten Diffusi-



**Abbildung 3.2:** Numerisch berechnete Diffusionskomponente  $D_{PP}^{(2)}$  des langsamen harmon. Oszillator (Einkubosystem Gl. (3.13)-(3.15)) : (a) 3-dimensional, (b) in Abhängigkeit von der Zeitdifferenz  $\Delta t$  nach Gl. (3.60). (c) und (d) Vergleich für  $D_{PP}^{(2)}$  im Querschnitt: rote Linien: theoretische Vorhersage und blaue Kreissymbole: numerische Werte. Parameter für (a) - (d):  $\varepsilon = 0.02$ ,  $\kappa = 2$  und  $E = 8000$ . (Bei der Simulation wurde die reskalierte Energie betrachtet.)

on (rote durchgezogene Kurven) mit der resultierenden numerischen (blaue Kreissymbole) wird in Abb. 3.1 (a) und (b) anhand von Querschnitten parallel zur Achse der langsamen Ortsvariablen  $Q$  bzw. der dazugehörigen konjugierten Impulsvariablen  $P$  durchgeführt. Man sieht, dass die numerischen Werte nahezu perfekt auf den theoretisch vorhergesagten Diffusionskurven liegen. Die parabelförmige Gestalt der Diffusion als Funktion von  $Q$  bzw.  $P$ , bei jeweils festem Wert für die konjugierte Variable, ist im Einklang mit der theoretischen Vorhersage aus Gl. (3.47). Die auffällige Stauchung der  $PP$ -Komponente der Diffusion in Richtung der  $Q$ -Achse kann auf den langsamen Renormierungsanteil von  $\frac{1}{2}\kappa Q^2$  zurückgeführt werden, der aus der Kopplung resultiert.



**Abbildung 3.3:** Abweichungen zwischen Theorie und Numerik für die Diffusionskomponente  $\Delta D_{PP}^{(2)}$  des Einkubosystem gemäß Gl. (3.13) - (3.15): (a) in Abhängigkeit vom Zeitskalenparameter  $\varepsilon$  und (b) in Abhängigkeit von der Kopplungsstärke  $\kappa$ . Parameter: (a)  $\kappa = 1$ , (b)  $\varepsilon = 0.01$  und  $E = 8000$  in beiden Fällen. (Bei der Simulation wurde die reskalierte Energie betrachtet.)

### 3.4.2 Abweichungen von der Theorie

Für die oben betrachtete Parameterwahl konnte eine sehr gute Übereinstimmung zwischen Simulation und Theorie für die Drift- und Diffusionskoeffizienten gefunden werden. Dabei war klar, dass der Zeitskalenparameter genügend klein zu wählen ist, da die analytisch gewonnene Fokker-Planck-Gleichung nur bis zur quadratischen Ordnung in  $\varepsilon$  richtig ist. In der Störungsrechnung werden alle Terme höherer Ordnung nicht nur aus praktischen Gründen vernachlässigt, sondern auch, weil höhere Ordnungen in  $\varepsilon$  mit räumlichen Ableitungen höher als 2-ter Ordnung einhergehen und somit die resultierende Gleichung nicht interpretierbar wäre. Insbesondere wäre hierbei die Positivität der reduzierten Dichte  $\bar{\rho}_t$  nicht mehr gewährleistet. Damit drängt sich die Frage auf: Welche Diskrepanzen ergeben sich zwischen numerisch bestimmten und theoretisch vorhergesagten Fokker-Planck-Koeffizienten bei systematischer Variation des Zeitskalenparameters  $\varepsilon$  oder der Kopplungsstärke  $\kappa$ ? Wie kann man die Abweichung quantifizieren, welcher funktionale Zusammenhang besteht zu  $\varepsilon$  oder  $\kappa$ ? Zur Untersuchung dieser Frage kommt der günstige Umstand zur Hilfe, dass sich die Diffusionskoeffizienten numerisch vergleichsweise einfach bestimmen lassen. Genau das kann man ausnutzen, um beispielsweise bei fixiertem  $Q$  den Parameter  $\varepsilon$  oder  $\kappa$  zu variieren und jeweils die Abweichung zur theoretisch vorhergesagten Diffusion zu bestimmen. Von dieser Idee ausgehend, werden zunächst bei festgehaltener Kopplungsstärke  $\kappa$  und fixierter langsamer Ortsvariable  $Q = 0$  die besagten Abweichungen in Abhängigkeit vom Zeitskalenparameter  $\varepsilon$  bestimmt. Anschließend wird dasselbe in analoger Weise für die Kopplungsstärke  $\kappa$  bei festen  $\varepsilon$  wiederholt. In Abb. 3.3 sieht man das Resultat bezüglich der  $PP$ -Diffusionskomponente  $\Delta D_{PP}^{(2)}$  als Funktion von  $\varepsilon$  (Abb. 3.3 (a)) und von  $\kappa$  (Abb. 3.3 (b)). In beiden Fällen erkennt man in guter Näherung einen linearen Zusammenhang, wobei dieser bezüglich der Kopplungsstärke viel klarer und ausgeprägter ist.

Für einen Zeitskalenparameter  $\varepsilon < 0.05$  ist die Abweichung  $\Delta D_{PP}^{(2)}$  kleiner als 15% und wächst linear mit  $\varepsilon$ . Aus der linearen Extrapolation ergibt sich für die relative Abweichung der Zusammenhang  $\Delta D_{PP}^{(2)} \approx 300\varepsilon\%$  in Prozent. Demzufolge eignet sich das hier vorgestellte Eliminationsverfahren erwartungsgemäß nur bei ausgeprägter Zeitskalentrennung zwischen schnellem und langsamen System. Der Zeitskalenparameter  $\varepsilon$  sollte einen Wert von  $\approx 0.1$  nicht überschreiten, d.h. das schnelle System muss mindestens zehn Mal schneller als das langsame sein. Bei diesem Zeitskalenparameter liegt die relative Abweichung bereits um die 30%.

Aus der Variation nach der Kopplungsstärke  $\kappa$  lässt sich zweierlei ersehen. Zum einen wächst auch hier die Abweichung  $\Delta D_{PP}^{(2)}$  proportional mit  $\kappa$ , wenn auch schwächer. Und zum anderen ist die Abweichung zur Theorie auch für große Kopplungsparameter verhältnismäßig gering. Zum Beispiel liegt sie für eine Kopplungsstärke bis  $\kappa = 5$  unter 7%. Mit zunehmendem  $\kappa$  greift das langsame System stärker in die Dynamik des schnellen Systems ein. Damit sind in immer geringerem Maße die Voraussetzungen erfüllt, unter denen die Fokker-Planck-Koeffizienten angegeben werden können. Nach den zugehörigen Gleichungen (2.39) und (2.41) wird angenommen, dass der Einfluss des langsamen Systems auf das schnelle vernachlässigbar ist und man folglich die Koeffizienten mit Hilfe der Kenntnis des isolierten schnellen Systems bestimmen kann.

In diesem Zusammenhang muß jedoch angemerkt werden, dass prinzipiell zu jeder Kopplungsstärke  $\kappa$  eine Zeitskalentrennung  $\varepsilon$  gewählt werden kann, so dass die Abweichungen von der Theorie vernachlässigbar klein werden. Umgekehrt jedoch kann nicht durch eine hinreichend schwache Kopplung bei fester Zeitskalentrennung eine beliebig geringe Abweichung von der theoretischen Vorhersage erzielt werden. Der Grund hierfür ist, dass die Störungsrechnung, welche im Rahmen des Eliminationsverfahrens durchgeführt wurde, nur die Zeitskalentrennung als Entwicklungsparameter berücksichtigt.

### 3.5 Momente und Autokorrelation des langsamen Oszillators

Nachdem in den vorhergehenden Abschnitten ausführlich die aus dem Eliminationsverfahren resultierenden Drift- und Diffusionskoeffizienten diskutiert wurden, wollen wir in diesem Abschnitt den Vorhersagehorizont des Verfahrens untersuchen. Dabei erscheint es sinnvoll, sich sowohl den Kurzzeit- als auch den Langzeitlimes anzusehen. Auf diese Weise kann Aufschluss über den Zeithorizont, auf dem das Eliminationsverfahren die dynamischen Verhältnisse im langsamen System richtig beschreibt, erlangt werden. In einem späteren Abschnitt über die reduzierte stationäre Dichte wird erneut das Langzeitverhalten betrachtet, allerdings in Hinblick auf den thermodynamischen Limes.

Momente und Korrelationsbeziehungen sind wichtige Größen, um die Dynamik eines stochastischen Systems zu studieren. Anhand von ihnen wollen wir uns die Zeitentwicklung des langsamen harmonischen Oszillators ansehen. Ausgehend von der reduzierten Bewegungsgleichung (3.58) für das Einfachkubosystem, kann man analytisch die Momente

des reduzierten langsamen Systems berechnen. Hierzu ist lediglich die betrachtete Fokker-Planck-Gleichung (3.58) mit  $Q$ ,  $P$ ,  $Q^2$ ,  $QP$  oder  $P^2$  zu multiplizieren und anschließend über den langsamen Phasenraum zu integrieren. Auf diese Weise erhält man folgendes gekoppeltes, lineares Differentialgleichungssystem erster Ordnung in der Zeit für die ersten Momente

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle Q \rangle(t) = \langle P \rangle \quad (3.63)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle P \rangle(t) = -\Omega_{1K} \langle Q \rangle - \gamma_{1K} \langle P \rangle \quad (3.64)$$

und für die zweiten Momente

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle Q^2 \rangle(t) = 2 \langle QP \rangle \quad (3.65)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle QP \rangle(t) = -\Omega_{1K} \langle Q^2 \rangle - \gamma_{1K} \langle QP \rangle + \langle P^2 \rangle \quad (3.66)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle P^2 \rangle(t) = -\gamma_{1K} \langle Q^2 \rangle - 2\Omega_{1K} \langle QP \rangle - 3\gamma_{1K} \langle P^2 \rangle + 2\gamma_{1K} \frac{E}{\varepsilon}, \quad (3.67)$$

wobei  $\Omega_{1K} = (1 + \kappa - \varepsilon \kappa^2)$  die renormierte Frequenz des langsamen harmonischen Oszillators und  $\gamma_{1K} = \frac{1}{2} \varepsilon^2 \kappa^2$  der Dämpfungsfaktor nach Gl. (3.37) ist.

Mit den ersten Momenten sind  $\langle Q \rangle$  und  $\langle P \rangle$  und mit den zweiten  $\langle Q^2 \rangle$ ,  $\langle QP \rangle$  und  $\langle P^2 \rangle$  gemeint. Das Gleichungssystem für die ersten Momente lässt sich sofort auflösen und wir erhalten die folgenden Lösungen:

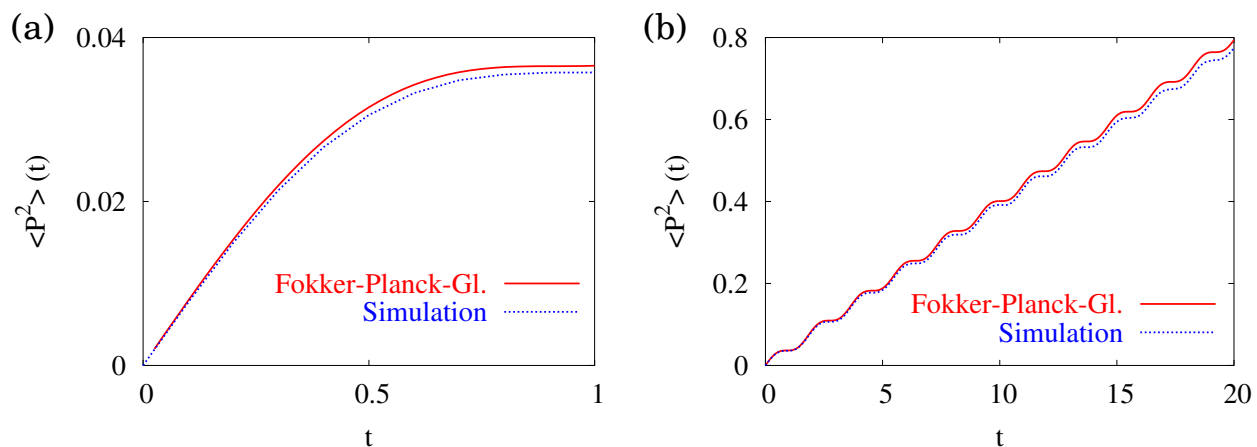
$$\langle P \rangle(t) = P_0 \cos(\alpha t) \exp\left[-\frac{1}{2} \gamma_{1K} t\right] \quad (3.68)$$

$$\langle Q \rangle(t) = \frac{Q_0}{\Omega_{1K}} \left[ \alpha \sin(\alpha t) - \frac{1}{2} \gamma_{1K} \cos(\alpha t) \right] \exp\left[-\frac{1}{2} \gamma_{1K} t\right] \quad , \quad \alpha := \sqrt{\Omega_{1K}^2 - \frac{1}{4} \gamma_{1K}^2}. \quad (3.69)$$

Den Lösungen (3.68) und (3.69) zufolge ist ein sehr langsamer exponentieller Zerfall für die ersten Momente des reduzierten langsamen Systems zu erwarten. Der Exponent, mit dem der Zerfall erfolgt, entspricht gerade dem halben Dämpfungsfaktor  $\gamma_{1K}$ . Diesen kennen wir aus der reduzierten Bewegungsgleichung (3.58) des langsamen harmonischen Oszillators und wir haben bereits zuvor die enorme Kleinheit dieser Größe diskutiert. Somit eröffnet der besprochene Zerfallsprozess die Möglichkeit eines alternativen Weges zur Bestimmung der Dämpfung. Begleitet wird der Zerfallsprozess von Oszillationen, die im wesentlichen durch die renormierte Frequenz  $\Omega_{1K}$  des langsamen harmonischen Oszillators gegeben sind. Die Oszillationsfrequenz  $\alpha$  nach Gl. (3.69) ist überwiegend durch die verhältnismäßig große Frequenz  $\Omega_{1K}$  bestimmt. Der zweite Anteil ist vernachlässigbar, da der auftretende Dämpfungsfaktor sehr klein ist.

Auch das lineare Gleichungssystem der zweiten Momente lässt sich durch entsprechende Diagonalisierung lösen. Allerdings ergeben sich äußerst komplizierte und unübersichtliche Ausdrücke für die berechneten Eigenwerte. Deshalb soll an dieser Stelle auf die Angabe





**Abbildung 3.4:** Vergleich Theorie und Numerik für das Kurzzeitverhalten, anhand der kinetischen Energie bzw. des Moments  $\langle P^2 \rangle$  des langsamen harmon. Oszillators (Einkubosystem Gl. (3.13)-(3.15)): (a) bis  $t=3$  und (b) bis  $t=20$ . Anfangsbedingung:  $Q_0 = P_0 = 0$ , Parameter:  $\varepsilon = 0.01, \kappa = 2, E = 2$ . (Bei der Simulation wurde die reskalierte Energie betrachtet.)

der zugehörigen Lösungen verzichtet werden. Für die weiteren Untersuchungen wird diese Schwierigkeit umgangen, indem die Differentialgleichungen (3.65) - (3.67) numerisch integriert werden.

### 3.5.1 Kurzzeitverhalten

In Abbildung 3.4 wird zu festen Anfangsbedingungen  $Q_0 = P_0 = 0$  des langsamen Oszillatorsystems das zweite Moment  $\langle P^2 \rangle$ , das der mittleren kinetischen Energie entspricht, mit der zugehörigen theoretischen Vorhersage verglichen. Im Vordergrund steht dabei das anfängliche dynamische Verhalten für kurze Zeitdauern. Mit dieser speziellen Wahl der langsamen Anfangsbedingung wird sichergestellt, dass die gesamte Energie zum Anfangszeitpunkt  $t = 0$  in dem schnellen System enthalten ist. Aus beiden Abbildungen 3.4 (a) und (b) geht hervor, dass das auf der Basis des Eliminationsverfahrens prognostizierte Kurzzeitverhalten in der Tat das tatsächliche Verhalten widerzuspiegeln vermag. In Abb. 3.4 (b) ist der lineare Anstieg von periodischen Oszillationen überlagert. Diese rühren, wie wir bereits diskutiert haben, aus der oszillatorischen Dynamik des langsamen Systems her. Bei den ersten Momenten ist die Periode solcher Oszillationen durch  $\alpha$  nach Gl. (3.69) festgelegt. Entsprechendes ist für die zweiten Momente zu erwarten.

Für das zugehörige Moment  $\langle Q^2 \rangle$  wird ein ähnliches Verhalten beobachtet. Die ersten Momente interessieren hier nicht, da sie aufgrund der gewählten Anfangsbedingungen gleich Null sind.

### 3.5.2 Langzeitverhalten

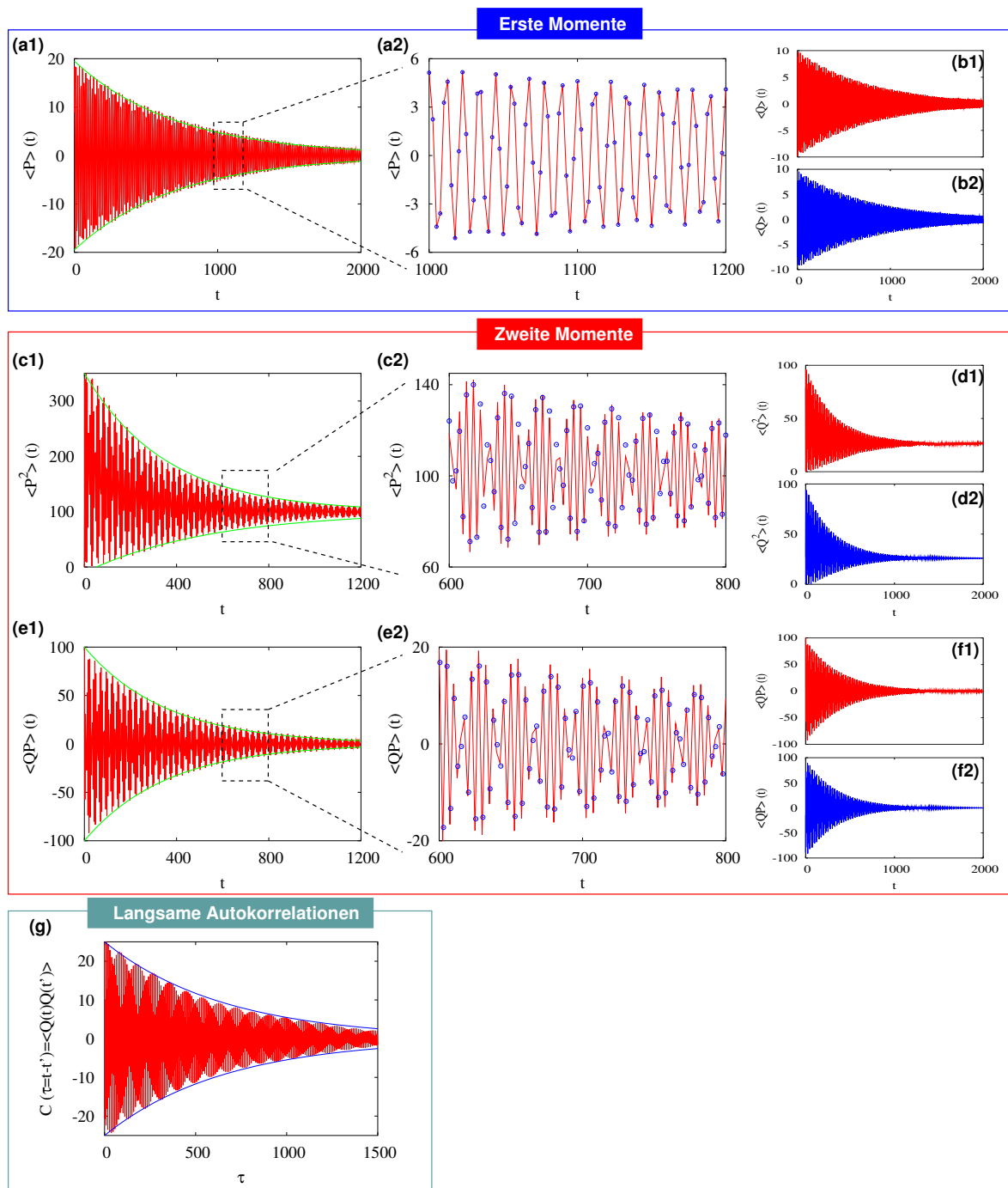
Wie sieht es nun mit dem Langzeitverhalten aus? Die Antwort darauf erhalten wir durch die Abbildung 3.5. Hier wurden zu fest vorgegebenen langsamen Anfangsbedingungen  $Q_0 = 5$  und  $P_0 = 5$  (reskalierte Gesamtenergie  $E_r = 200$ ) sowohl die ersten als auch die zweiten Momente für große Zeiträume bestimmt. Die Zeitintervalle umfassen hierbei einige hundert Zeiteinheiten. Hierzu wurden die Gleichungssysteme der theoretisch vorhergesagten ersten Momente (3.63) - (3.64) und der zweiten Momente (3.65) - (3.67) numerisch integriert. Die so gewonnenen Momente wurden mit den entsprechenden Momenten aus der Simulation des vollen Einkubosystems verglichen. Das transiente Verhalten, das in Form des langsamen exponentiellen Zerfalls theoretisch vorhergesagt wird, lässt sich in sehr guter Näherung wiederfinden und zwar bei allen Momenten. Für die ersten Momente haben wir diesen langsamen Zerfall bereits anhand der Gleichungen (3.68) und (3.69) diskutiert. Auf den vergrößerten Bildausschnitten 3.5 (a2), (c2) und (e2) wird im Detail die langsame Dynamik mit der theoretisch zu erwartenden Zeitentwicklung nach Verstreichen von einigen hundert Zeiteinheiten verglichen. Man erkennt hieraus, dass auch das Langzeitverhalten richtig von unserem Eliminationsverfahren vorhergesagt wird.

### 3.5.3 Langsame Autokorrelationen

Schließlich erscheint es in diesem Zusammenhang lohnenswert, auch die langsame Autokorrelationsfunktion zu studieren. Für sie kann auf eine ähnliche Weise wie bei den ersten Momenten, und zwar auf der Grundlage der reduzierten Bewegungsgleichung ein System von analogen Differentialgleichungen für die Korrelationen aufgestellt werden. Evident wird das, wenn man das Gleichungssystem der ersten Momente (3.63) - (3.64) beispielsweise mit  $Q(t')$  bzw.  $P(t')$  zur festen Zeit  $t'$  multipliziert. Somit sind  $Q(t')$  bzw.  $P(t')$  konstant und können in die eckigen Klammern hineingezogen werden, wodurch die Autokorrelationsfunktion sichtbar wird. Formal sollte dieses Gleichungssystem, insbesondere hinsichtlich des eingehenden Dämpfungsfaktors  $\gamma_{1K}$  und der renormierten Frequenz  $\Omega_{1K}$ , vollkommen mit dem Gleichungssystem der ersten Momente übereinstimmen. Demzufolge wäre ein ebenso langsamer exponentieller Zerfall der Autokorrelation für das reduzierte harmonische Oszillatorsystem zu erwarten. In Abb. 3.5 (g) bestätigt sich diese theoretische Vorhersage. Es kann ein zeitlicher Zerfall entsprechend  $\exp(-\frac{1}{2}\gamma_{1K}\tau)$  (nach Gl. (3.68) und Gl. (3.69)) bei der numerisch berechneten Autokorrelation  $\langle Q(t)Q(t') \rangle$  ermittelt werden.

#### Praktischer Vorteil des Eliminationsverfahrens

Die numerische Integration der gekoppelten Gleichungssysteme (3.63) - (3.64) und (3.63) - (3.64) für die Momente erfordert bei Verwendung des simplen *Euler* Integrators nur wenige Minuten, um das oben beschriebene Langzeitverhalten zu berechnen. Demgegenüber benötigt man für die numerische Berechnung der Momente auf der Basis der Simulation des vollen Systems für einen entsprechenden Zeitraum und für eine ausreichende Statistik einige Tage. Entsprechendes gilt auch für die Berechnung der Momente auf einer kurzen



**Abbildung 3.5:** Momente des langsamen harmon. Oszillators (Einkubosystem Gl. (3.13) - (3.15)): Erste Momente: (a1) für  $\langle P \rangle$ , grüne Linien: asymptotisch vorhergesagtes Langzeitverhalten nach Gl. (3.63) - (3.64), (a2) Vergrößerter Ausschnitt: rote Linie: Theorie und blaue Kreissymbole: Simulation, für  $\langle Q \rangle$ : (b1) Simulation, (b2) Theorie. Zweite Momente: (c1)  $\langle P^2 \rangle$  und (e1)  $\langle QP \rangle$ , grüne Linien: asymptotisch vorhergesagtes Langzeitverhalten nach Gl. (3.65) - (3.67), (c2), (e2) Vergrößerter Ausschnitt: rote Linie: Theorie und blaue Kreissymbole: Simulation, für  $\langle Q \rangle$ : (d1), (f1) Simulation, (d2), (f2) Theorie. (Bei allen Momente: Parameter:  $\varepsilon = 0.025$ ,  $\kappa = 3$  und  $E = 5$ , Anfangsbed.:  $Q_0 = 5$  und  $P_0 = 5$  (Gesamtenergie bei Simulation  $E_r = E/\varepsilon = 200$ )). (g) langsame Autokorrelationsfunktion (Parameter:  $\varepsilon = 0.025$ ,  $\kappa = 3$ ,  $E = 5$ ).

Zeitskala. Mit unserer Methode erfolgt die Berechnung in weniger als einer Minute für eine Zeit  $t \leq 20$ , während die volle Simulation, verknüpft mit hinreichender statistischer Mittelung, mehrere Stunden erfordert.

Die Zeitersparnis, die auf der Grundlage des Eliminationsverfahrens erzielt wird, ist also erheblich und reicht über einige Größenordnungen. Dies verdeutlicht auf eindrucksvolle Weise die Effizienz und das Leistungsvermögen des vorgeschlagenen Verfahrens.

Selbst wenn man die zur Fokker-Planck-Gleichung korrespondierende Langevin-Gleichung der effektiven langsamen Dynamik numerisch integriert, wäre die Zeitersparnis gegenüber der Simulation des vollen Systems groß.

### 3.6 Zweikubomodell - Einfluss der schnellen Dimensionen

Der schnelle Kubo-Oszillator, den wir hier betrachten, ist niedrigdimensional. Gerade die Dimension bzw. die Anzahl der schnellen Freiheitsgrade ist ein Aspekt, dem bisher nicht genug Beachtung geschenkt wurde. Was würde beispielweise geschehen, wenn wir den einfachen Kubo-Oszillator durch einen entsprechenden höherdimensionalen Oszillator austauschen würden? Wie würde sich das insbesondere auf die dynamischen Verhältnisse bezüglich der Dämpfung und der Diffusion im langsamen System auswirken?

Das Ziel dieses Abschnittes ist es also, die Veränderungen zu untersuchen, die mit dem Anwachsen der schnellen Dimensionen bei den Fluktuations-Dissipations-Relationen einhergehen. Dazu empfiehlt es sich, als langsames System den harmonischen Oszillator beizubehalten und lediglich das schnelle Subsystem zu verändern.

Ein naheliegender Schritt ist, anstelle der Ankopplung eines schnellen Kubo-Oszillators zwei separate Kubo-Oszillatoren an den langsamen harmonischen Oszillator zu koppeln. Jeder der Kubo-Oszillatoren wechselwirkt mit dem langsamen System über eine separate harmonische Kopplung, während die Kubo-Oszillatoren untereinander nicht gekoppelt sind. Die zeitliche Entwicklung dieses Systems, das hier in Analogie zum Einkubosystem als *Zweikubosystem* bezeichnet sei, wird durch die folgenden Hamiltonschen Bewegungsgleichungen beschrieben:

$$\dot{Q} = P \tag{3.70}$$

$$\dot{P} = -(1 + 2\kappa)Q + \kappa \sum_{i=1}^2 q_i \tag{3.71}$$

$$\dot{q}_i = \frac{1}{\varepsilon}(1 + \sqrt{\varepsilon}\xi(t))p_i \tag{3.72}$$

$$\dot{p}_i = -\frac{1}{\varepsilon}(1 + \sqrt{\varepsilon}\xi(t))((1 + \varepsilon\kappa)q_i - \varepsilon\kappa Q) \quad \text{mit} \quad i = 1, 2. \tag{3.73}$$

Der zugehörige Hamiltonian hat die Form

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_l + \frac{1}{\varepsilon}(\mathcal{H}_s^{(1)} + \mathcal{H}_s^{(2)}) + \mathcal{H}_k \quad \text{mit} \quad (3.74)$$

$$\mathcal{H}_l = \frac{1}{2}(Q^2 + P^2) \quad (\text{harmonischer Oszillator}) \quad (3.75)$$

$$\mathcal{H}_s^{(i)} = \frac{1}{2}(q_i^2 + p_i^2) \quad (i\text{-ter Kubo-Oszillator}) \quad (3.76)$$

$$\mathcal{H}_k = \frac{1}{2}\kappa \sum_{i=1}^2 (Q - q_i)^2, \quad (\text{harmonische Kopplung}) \quad (3.77)$$

wobei auch hier der Satz an langsamen kanonisch konjugierten Orts- und Impulsvariablen in Großbuchstaben- und der Satz an schnellen in Kleinbuchstaben-Notation notiert ist. Mit dem Index  $i = 1, 2$  sind die Kubo-Oszillatoren und die zugehörigen Variablen durchnumeriert.

### 3.6.1 Reduzierte Bewegungsgleichung

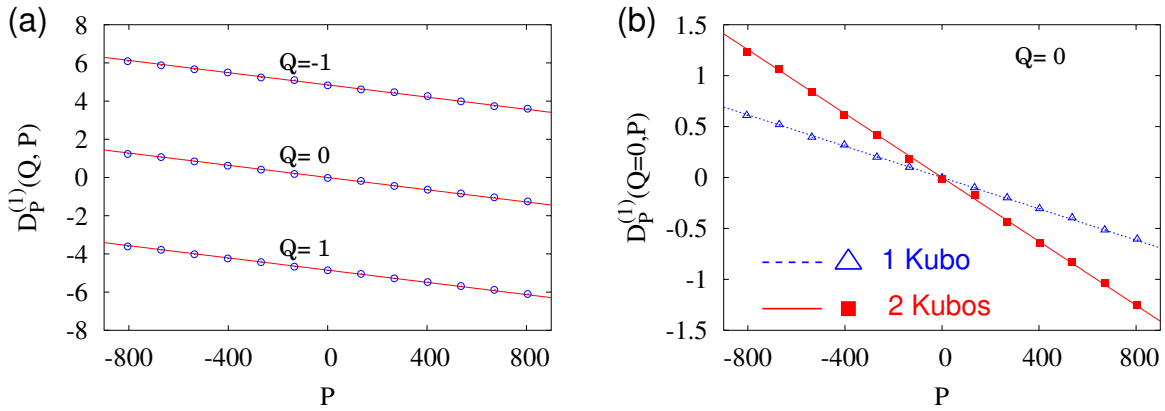
Die eingangs gestellte Frage, wie ein schnelles System mit höherer Dimension auf die reduzierte langsame Dynamik wirkt, kann zunächst auf analytischem Wege untersucht werden, da es sich bei dem Zweikubosystem erneut um ein vollständig lineares System handelt. Ganz ähnlich wie im Falle des Einkubomodells kann man auch hier mit Hilfe der heuristisch angesetzten Diracschen Störungsrechnung die Koeffizienten der reduzierten Bewegungsgleichung, sprich Drift und Diffusion, herleiten. Die Vorgehensweise ist dabei entsprechend der in Abschnitt 3.3. Deshalb wird an dieser Stelle auf die detaillierte Rechnung verzichtet und direkt das Resultat diskutiert. Man findet im Gegensatz zum Einkubosystem eine doppelt so große Dämpfung bei quasi unveränderter Diffusion:

$$D_P^{(1)}(Q, P) = -\Omega_{2K}Q - \gamma_{2K} \quad D_{PP}^{(2)}(Q, P) = \mu_{2K}(E - \varepsilon\tilde{\mathcal{H}}_l^{(2)}) \quad (3.78)$$

$$\text{mit} \quad \mu_{2K} := \frac{\varepsilon\kappa^2}{2}, \quad \gamma_{2K} := \varepsilon^2\kappa^2, \quad \tilde{\mathcal{H}}_l^{(2)} := \frac{1}{2}((1 + 2\kappa)Q^2 + P^2). \quad (3.79)$$

Hierbei bezeichnet  $\gamma_{2K}$  den Dämpfungs- und  $\mu_{2K}$  den Diffusionsfaktor. Durch  $\Omega_{2K} := (1 + 2(\kappa - \varepsilon\kappa^2))$  ist die renormierte Frequenz des langsamen harmonischen Oszillators bei Ankopplung an zwei Kubo-Oszillatoren definiert. Der neu eingeführte Hamiltonian  $\tilde{\mathcal{H}}_l^{(2)}$  entspricht dem langsamen Hamiltonian erweitert um die beiden Renormierungsanteile  $2\frac{1}{2}\kappa Q^2$ , die aus den beiden harmonischen Kopplungen herrühren. In der Rechnung wurde, wie auch beim Einfachkubosystem, nicht die volle harmonische Kopplung, sondern die Variante mit vernachlässigtem schnellen Renormierungsanteil  $\mathcal{H}_k = \frac{1}{2}\kappa \sum_{i=1}^2 (Q^2 - 2Qq_i)$  verwendet. Damit sieht die vollständige Fokker-Planck-Gleichung für das Zweikubomodell wie folgt aus:

$$\frac{\partial}{\partial t}\bar{\rho}_t(Q, P) = -P\frac{\partial}{\partial Q}\bar{\rho}_t + \Omega_{2K}Q\frac{\partial}{\partial P}\bar{\rho}_t + \frac{\partial}{\partial P}\gamma_{2K}P\bar{\rho}_t + \frac{\partial^2}{\partial P^2}D_{PP}^{(2)}(Q, P)\bar{\rho}_t. \quad (3.80)$$

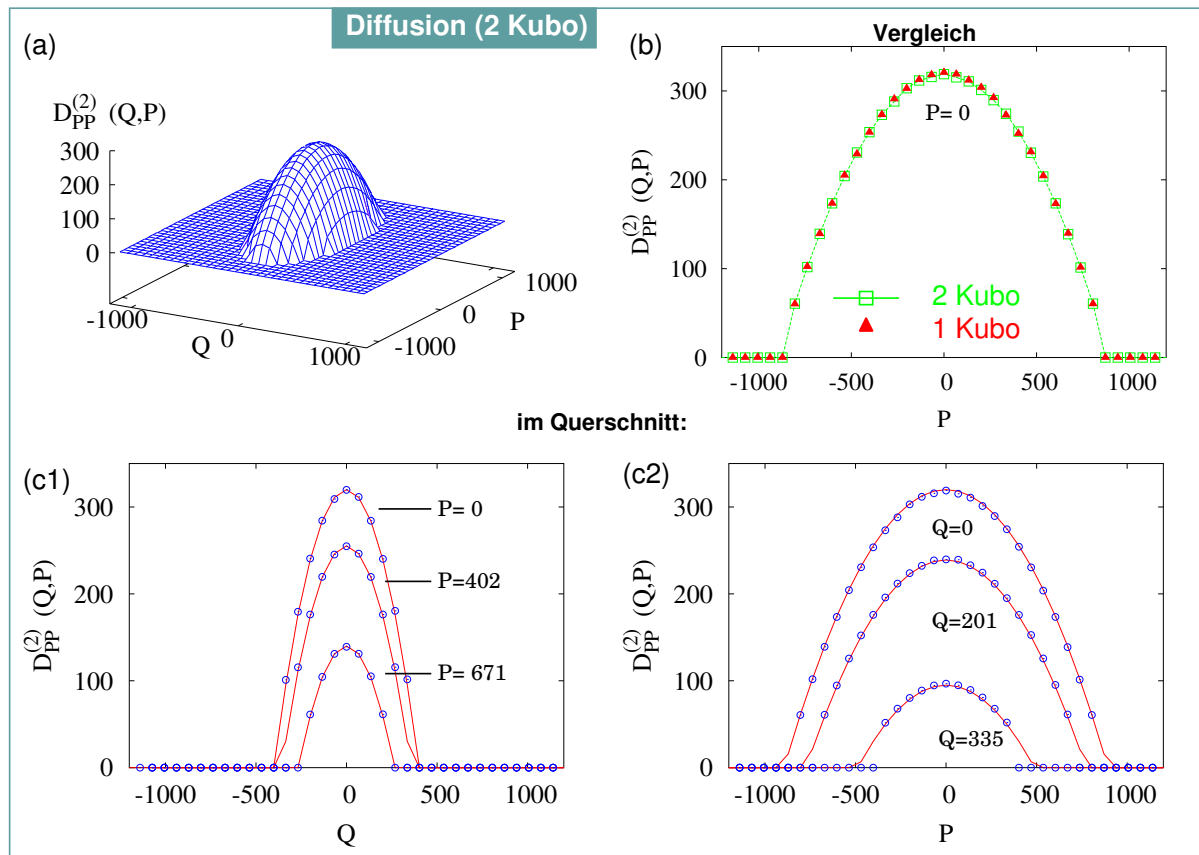


**Abbildung 3.6:** Dämpfung des langsamen harmon. Oszillators im Zweikubomodell: (a) Driftkomponente  $D_P^{(1)}$  für drei verschiedene  $Q$ -Werte, rote Linien: Theorie und blaue Kreissymbole: Numerische Simulation nach Gl. (3.62) (b) Vergleich der Dämpfung für das Ein- und Zweikubomodell. (Parameter für (a) und (b):  $\varepsilon = 0.02$ ,  $\kappa = 2$ ,  $E = 8000$  (numerische Simulation mit Gesamtenergie  $E_r = E/\varepsilon$ )).

Wendet man das Eliminationsverfahren auf das Zweikubosystem an, dann erhält man erneut die reduzierte Bewegungsgleichung in Gestalt von Gl. (3.80). Die Diracsche Störungsrechnung und das Eliminationsverfahren führen unabhängig voneinander wiederum auf die gleichen Resultate.

### 3.6.2 Numerischer Vergleich

In diesem Abschnitt gilt es anhand von Simulationen des Zweikubosystems die theoretischen Ergebnisse des letzten Abschnitts zu überprüfen. Man erwartet, dass die Dämpfung hier zwei Mal so groß ist wie für das Einkubosystem. In Abb. 3.6 sind einige Ergebnisse zur Drift des Zweikubomodells, die aus der numerischen Simulation gewonnenen wurden, graphisch dargestellt. Exemplarisch ist in Abb. 3.6 (b) für  $Q = 0$  die  $P$ -Komponente der Drift  $D_P^{(1)}$  sowohl für das Einkubo- (blaue Gerade) als auch für das Zweikubosystem (rote Gerade) bei gleichen Systemparametern berechnet worden. Mit der Wahl der langsamen Ortsvariablen  $Q = 0$  entfällt der deterministische Driftanteil in  $D_P^{(1)}$  und der verbleibende Dämpfungsanteil kann direkt beobachtet werden. Aus dem graphischen Vergleich geht ganz klar die Richtigkeit der theoretische Vorhersage hervor. In Abb. 3.6 (a) ist für drei unterschiedliche Werte der langsamen Ortsvariablen  $Q$  wiederum die Driftkomponente  $D_P^{(1)}$  numerisch bestimmt worden. Auch hier sieht man, dass die numerischen Werte nahezu perfekt auf den theoretisch vorhergesagten roten Geraden liegen. Wir beobachten also wie erwartet in der Simulation eine Verdopplung der Dämpfung. Nun gilt es die zweite Vorhersage, nämlich dass die Diffusion unverändert bleibt, zu überprüfen. In Abb. 3.7 sind die numerisch berechneten Werte der  $PP$ -Diffusionskomponente (blaue Kreissymbole) zusammen mit den zugehörigen theoretisch vorhergesagten (parabelförmigen roten) Kurven



**Abbildung 3.7:** Numerisch berechnete Diffusionskomponente  $D_{PP}^{(2)}$  nach Gl. (3.60) des harmon. Oszillators im Zweikubosystems: (a) 3-dimensional, (b) Vergleich zwischen Ein- und Zweikubomodell für  $Q = 0$ . (c) und (d) Vergleich für  $D_{PP}^{(2)}$  im Querschnitt: rote Linien: theoretische Vorhersage und blaue Kreissymbole: numerische Berechnung nach Gl. (3.60). (Parameter für (a), (b), (c1) und (c2):  $\varepsilon = 0.02$ ,  $\kappa = 2$ ,  $E = 8000$  (numerische Simulation mit Gesamtenergie  $E_r = E/\varepsilon$ )).

aufgetragen. Der Vergleich weist eine sehr gute Übereinstimmung zwischen Theorie und Numerik nach. In Abb. 3.7 (b) ist für  $Q = 0$  die  $PP$ -Diffusionskomponente der beiden Kubosysteme zu identischen Parametern zum Vergleich gemeinsam aufgetragen. Die zugehörigen Werte liegen nahezu perfekt übereinander, d.h auch die zweite Aussage kann bestätigt werden.

Im Hinblick auf die Ausgangsfrage lässt sich zusammenfassend also folgendes sagen: Die Vergrößerung der Anzahl der Dimensionen bzw. Freiheitsgrade des schnellen Teilsystems führt zu einer Änderung der Fluktuations-Dissipations-Relation in der reduzierten Beschreibung dahingehend, dass die Dämpfung wächst, während die Diffusion quasi unverändert bleibt. Dies wird vom Eliminationsverfahren vorhergesagt.

### 3.7 Reduzierte stationäre Dichte

Im letzten Abschnitt haben wir bereits gesehen, dass die Vergrößerung der Anzahl der schnellen Dimensionen bzw. Freiheitsgrade eine Veränderung der Fluktuations-Dissipations-Relation bewirkt. Es ist naheliegend, einen Schritt weiterzugehen und nach dem thermodynamischen Limes zu fragen. In diesem Abschnitt werden wir uns das Langzeitverhalten des reduzierten Systems genau unter diesem Gesichtspunkt ansehen.

In den meisten Fällen, in denen eine Beschreibung im Rahmen der Fokker-Planck-Gleichung möglich ist, existiert auch eine stationäre Dichte, die das langsame System asymptotisch in der Zeit anstrebt. Die stationäre Dichte eignet sich demnach sehr gut zum Studium des Langzeitverhaltens. Einige Teilaspekte des Langzeitverhaltens wurden bereits im Abschnitt 3.5 anhand der zeitlichen Entwicklung von Momenten der Autokorrelationsfunktion des langsamen Systems untersucht. Hier geht es uns nun darum, den direkten Vergleich zwischen dem theoretisch vorhergesagten und dem tatsächlich erreichten Zustand der reduzierten stationäre Dichte durchzuführen.

Die Linearität des Einkubomodells erlaubt hier sogar die analytische Berechnung der reduzierten stationäre Dichte des langsamen Oszillatorsystems. Hierzu ist es lediglich erforderlich, die Gesamtdichte des vollen Systems  $\rho_t = \delta(\mathcal{H} - E_g)$  über dem schnellen Phasenraum zu integrieren und anschließend durch die Gesamtzustandsdichte  $Z(E_g)$  zu dividieren:

$$\bar{\rho}_*^{(1)}(Q, P) = \frac{1}{Z(E_g)} \int dqdp \delta(\mathcal{H} - E_g), \quad Z(E_g) = \int dQdP \int dqdp \delta(\mathcal{H} - E_g). \quad (3.81)$$

Wir wenden also lediglich die Definition (3.81) der reduzierten stationären Dichte an. Hier empfiehlt es sich für die konkrete Rechnung, den Gesamthamiltonian  $\mathcal{H}$  zunächst in Polarkoordinaten zu überführen und zusätzlich die Ansätze (3.25) und (3.26) für die schnelle Dynamik zu verwenden. Auf diese Weise ergibt sich die reduzierte stationäre Dichte im Falle des Einkubosystems zu:

$$\bar{\rho}_*^{(1)}(Q, P) = \frac{\sqrt{\Omega_{1K}}}{\pi E_g} \Theta(\mathcal{E}_1(Q, P)) \quad \text{mit} \quad \Omega_{1K} = 1 + \kappa - \varepsilon\kappa^2, \quad (3.82)$$

wobei mit  $\Theta(\mathcal{E}_1(Q, P))$  die zugehörige Heaviside-Funktion mit dem Argument

$$\mathcal{E}_1(Q, P) := E_g - \frac{1}{2}(\Omega_{1K}Q^2 + P^2). \quad (3.83)$$

bezeichnet ist. Durch sie wird die Positivität der stationären Dichte sichergestellt. Die stationäre Dichte des langsamen harmonischen Oszillatorsystems ist demnach konstant und ist festgelegt durch die renormierte Frequenz  $\Omega_{1K}$  und die Gesamtenergie  $E_g$ .

Es muss angemerkt werden, dass auf die beschriebene Weise die reduzierte stationäre Dichte nur dann berechnet werden kann, wenn in der Kopplung der schnelle Renormierungsanteil  $\frac{1}{2}\kappa q^2$  vernachlässigt wird. Damit wird also eine harmonische Kopplung der Form  $\mathcal{H}_k = \frac{1}{2}\kappa(Q^2 - 2Qq)$  verwendet.



### 3.7.1 Thermodynamischer Limes: Das $n$ -Kubomodell

Wie das Einkubosystem auf ein Zweikubosystem erweitert werden kann, haben wir bereits gesehen. Daraus wird auch ersichtlich wie man die Verallgemeinerung auf ein  $n$ -Kubosystem erreichen kann, bei dem der langsame harmonische Oszillator an  $n$  separate schnelle Kubo-Oszillatoren über  $n$  separate harmonische Kopplungen gekoppelt ist. Im Hamiltonian (3.74) und den zugehörigen Bewegungsgleichungen (3.70) des Zweikubomodells wird dann der Index für Anzahl der Kubo-Oszillator von zwei auf  $n$  ausgedehnt. Mit dieser Erweiterung können wir im Folgenden den thermodynamischen Limes untersuchen. Dazu betrachten wird die reduzierte stationäre Dichte. Diese kann auch für ein beliebiges  $n$ -Kubosystem analytisch berechnet werden. Zunächst berechnen wir für das Zwei-, Drei- und Vierkubosystem genau wie im Fall des Einkubosystems die reduzierte stationäre Dichte. Wir erhalten:

$$2 \text{ Kubo:} \quad \bar{\rho}_*^{(2)}(Q, P) = \frac{2\sqrt{\Omega_{2K}}}{\pi E_g^2} [E_g - \frac{1}{2}(\Omega_{2K}Q^2 + P^2)] \Theta(\mathcal{E}_2(Q, P)) \quad (3.84)$$

$$3 \text{ Kubo:} \quad \bar{\rho}_*^{(3)}(Q, P) = \frac{3\sqrt{\Omega_{3K}}}{\pi E_g^3} [E_g - \frac{1}{2}(\Omega_{3K}Q^2 + P^2)]^2 \Theta(\mathcal{E}_3(Q, P)) \quad (3.85)$$

$$4 \text{ Kubo:} \quad \bar{\rho}_*^{(4)}(Q, P) = \frac{4\sqrt{\Omega_{4K}}}{\pi E_g^4} [E_g - \frac{1}{2}(\Omega_{4K}Q^2 + P^2)]^3 \Theta(\mathcal{E}_4(Q, P)). \quad (3.86)$$

mit den langsamen renormierten Oszillatorfrequenzen

$$\Omega_{jK} = 1 + j(\kappa - \varepsilon\kappa^2) \quad \text{mit} \quad j = 1, 2, 3, 4 \quad (3.87)$$

und der Heaviside-Sprungfunktion mit den Argumenten

$$\mathcal{E}_j(Q, P) = E_g - \frac{1}{2}(\Omega_{jK}Q^2 + P^2) \quad \text{mit} \quad j = 1, 2, 3, 4. \quad (3.88)$$

Die Struktur der oben bestimmten Dichten legt eine Gesetzmäßigkeit offen, die wir leicht zu einer Rekursionsformel für den Fall von  $n$  linear angekoppelten Kubo-Oszillatoren verallgemeinern können. Demzufolge ergibt sich die reduzierte stationäre Dichte für ein  $n$ -Kubomodell zu:

$$n \text{ Kubos:} \quad \bar{\rho}_*^{(n)}(Q, P) = \frac{n\sqrt{\Omega_{nK}}}{\pi E_g^n} [E_g - \frac{1}{2}(\Omega_{nK}Q^2 + P^2)]^{(n-1)} \Theta(\mathcal{E}_n(Q, P)) \quad (3.89)$$

Physikalisch ist es sinnvoll, anstelle von  $\kappa \rightarrow \frac{\tilde{\kappa}}{n}$  zu betrachten, da ansonsten u.U. die Oszillatorfrequenz  $\Omega_{nK}$  negativ werden kann. Eine derartige Gegebenheit ist jedoch physikalisch auszuschließen. Im nächsten Schritt wollen wir den thermodynamischen Limes für  $n \rightarrow \infty$  betrachten. Hierzu wird zunächst die stationäre Dichte (3.89) des  $n$ -Kubomodell durch Einführen von  $E := E_g/n$  noch weiter umgeformt:

$$\begin{aligned} \bar{\rho}_*^{(n)}(Q, P) &= \frac{\sqrt{\Omega_{nK}}}{\pi E^n} [E - \frac{1}{2(n-1)}(\Omega_{nK}Q^2 + P^2)]^{(n-1)} \Theta(\mathcal{E}_n(Q, P)) \\ &= \frac{\sqrt{\Omega_{nK}}}{\pi E} \left[ 1 - \frac{1}{n-1} \left( \frac{1}{2E}(\Omega_{nK}Q^2 + P^2) \right) \right]^{(n-1)} \Theta(\mathcal{E}_n(Q, P)). \end{aligned} \quad (3.90)$$

An dieser Stelle kann ausgenutzt werden, dass die Exponentialfunktion der Grenzwert der Zahlenfolge

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \left[ 1 - \frac{x}{n} \right]^n = \exp(-x). \quad (3.91)$$

darstellt. Mit Hilfe der Beziehung (3.91) kann der thermodynamische Limes für die stationäre Dichte (3.90) eines  $n$ -Kubosystems durchgeführt werden und wir erhalten:

$$\bar{\rho}_*^{(B)}(Q, P) := \lim_{n \rightarrow \infty} \bar{\rho}_*^{(n)}(Q, P) = \frac{1}{\pi E} \exp\left(-\frac{\mathcal{H}_l}{E}\right) \quad (3.92)$$

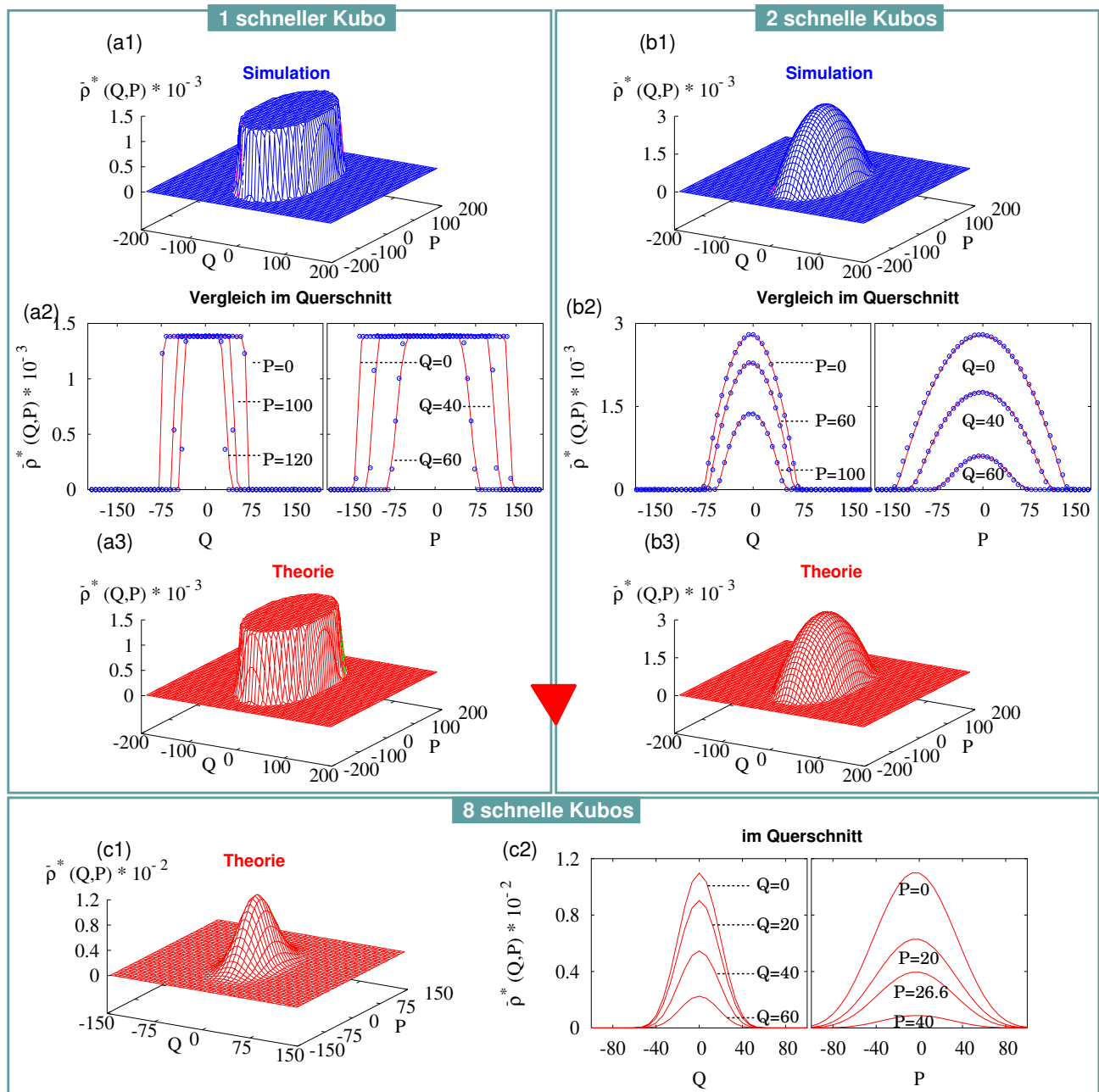
Mit  $\mathcal{H}_l = \frac{1}{2}(Q^2 + P^2)$  wird weiterhin der Hamiltonian des langsamen harmonischen Oszillators bezeichnet. Nach Gl. (3.92) konvergiert im thermodynamischen Limes von unendlich vielen schnellen Kubo-Oszillatoren die reduzierte stationäre Dichte des langsamen harmonischen Oszillators gegen die *Boltzmann-Verteilung*  $\bar{\rho}_*^{(B)}(Q, P)$ . Auf diese Weise wird gewissermaßen ein thermisches Wärmebad mit Hilfe von unendlich vielen schnellen Kubo-Oszillatoren konstruiert.

### 3.7.2 Untersuchungen zum Langzeitverhalten

Aus der Analyse im letzten Abschnitt kennen wir nunmehr für ein beliebiges  $n$ -Kubomodell die zugehörige stationäre Dichte des reduzierten Systems exakt. Es muß jedoch noch überprüft werden, inwieweit die einzelne reduzierte Dichte-Verteilung, welche das vom Eliminationsverfahren vorhergesagte Langzeitverhalten repräsentiert, der stationären Dichte des langsamen Oszillators bei Simulation des vollen Systems entspricht. Bei der Untersuchung dieser Frage beschränken wir uns auf das Einkubo- und Zweikubomodell. Diese werden hier numerisch simuliert.

In Abb. 3.8 sind die zugehörigen Resultate in einer Übersicht zusammengetragen. Es geht daraus hervor, dass durch die reduzierten stationären Dichten die langsamen Dichte-Verteilungen des vollen Systems für die betrachteten Fälle des Einkubo- und Zweikubosystems vollständig reproduziert werden können. Dies wird besonders deutlich, wenn man die theoretisch vorhergesagte und die durch Simulation des vollen Systems gewonnene stationäre Dichte im Querschnitt parallel zur  $Q$ - und  $P$ -Achse vergleicht. Die roten Kurven entsprechen der theoretischen Vorhersage des Eliminationsverfahrens, während die blauen Kreisymbole die durch Simulation des vollen Systems gewonnenen Werte für die langsame stationäre Dichte repräsentieren. Wie man erkennen kann, ist die Übereinstimmung sehr gut.

Eine letzte Untersuchung gilt dem bereits diskutierten thermodynamischen Limes. Hierzu wurde ein Achtkubosystem, bei dem acht schnelle Kubo-Oszillatoren an dem langsamen harmonischen Oszillator angekoppelt werden, die theoretisch zu erwartende stationäre Dichteverteilung des reduzierten Systems berechnet. Man kann hier bereits eine Tendenz hin zur Boltzmann-Verteilung erkennen. Die Verteilung ist weniger parabelförmig, und fällt zu den Rändern schwächer ab.



**Abbildung 3.8:** Langzeitverhalten: (reduzierte) stationäre Dichte des langsamen harmonischen Oszillators für 1) Einkubomodell: (a1) Simulation, (a2) im Querschnitt (rote Linien: Theorie, blaue Kreissymbole: Numerik), (a3) Theorie (Parameter  $\varepsilon = 0.03$ ,  $\kappa = 3$ ,  $E = 300$ ). 2) Zweikubomodell: (b1) Simulation, (b2) im Querschnitt (rote Linien: Theorie, blaue Kreissymbole: Numerik), (b3) Theorie (Parameter  $\varepsilon = 0.03$ ,  $\kappa = 1.5$ ,  $E = 300$ ). Ankopplung 8 schneller Kubo-Oszillatoren: (c1) theoretisch vorhergesagte reduzierte stationäre Dichte, (c2) im Querschnitt (Parameter  $\varepsilon = 0.03$ ,  $\kappa = 0.375$ ,  $E = 300$ ).



# Kapitel 4

## Koexistenz von regulärer und chaotischer Dynamik

Generische Hamiltonsche Systeme sind von Natur aus weder vollständig regulär noch vollständig chaotisch, sondern weisen zumeist einen gemischten Phasenraum aus koexistierenden regulären und chaotischen Regionen auf. Häufig ist eine jede reguläre Insel umgeben von einer Hierarchie von kleiner werdenden Inselketten. Auf diese Weise ergeben sich selbstähnliche Strukturen auf unterschiedlichen Hierarchiestufen.

In einem integrablen System ist der anfängliche Phasenraum mit Familien von invarianten Kolmogorov-Arnold-Moser Tori (*KAM-Tori*) aufgefüllt. Durch Erhöhung der Energie werden nach und nach diese regulären Tori zerstört, wodurch sich der irreguläre Bereich (man spricht bildhaft von einem *chaotischen See*) zusehends ausdehnt. Die Energie wirkt also in Hamiltonschen Systemen als Bifurkationsparameter. Im Zuge dieses Zerstörungsprozesses entstehen häufig hierarchische Inselstrukturen gemeinsam mit den sogenannten *Cantori*. Diese sind gewissermaßen als die Überreste der zerstörten regulären Tori zu betrachten. Die Cantori sind fraktal beschaffene Begrenzungen in der Nähe von Inseln. Im Gegensatz zu den KAM-Tori stellen sie keine unüberwindbaren Schranken dar. Die überlebenden KAM-Tori hingegen trennen einzelne Regionen des Phasenraums voneinander. An ihrer Oberfläche ist der Lyapunov-Exponent Null.

Die sich auf diese Weise entfaltende Komplexität der Hamiltonschen Dynamik gibt Anlass zu Beobachtungen [23] -[34], die bis heute von Wissenschaftlern kontrovers diskutiert werden. Eine dieser Beobachtungen steht in unmittelbarer Verbindung mit dem Zerfall der Korrelationsfunktion  $C(T)$ , die eine fundamentale Größe zur Charakterisierung der Dynamik darstellt. In Systemen mit gemischtem Phasenraum findet man oft algebraische Zerfälle [23] - [34], die auch in der Verteilung von Wiederkehrzeiten  $W(T)$  beobachtet werden. Sie machen sich durch die sogenannten *power law tails* bemerkbar, d.h. der anfänglich exponentielle Zerfall der Häufigkeitsverteilung  $W(T)$  wird durch einen im Mittel algebraischen Zerfall (in den *Schwänzen* der Wiederkehrzeit-Verteilung) abgelöst [33]:

$$W(T) \sim \begin{cases} e^{-\eta T} & \text{für } T < T_e \\ T^{-\beta} & \text{für } T_e < T < T_a . \end{cases} \quad (4.1)$$

Hierbei sind  $\eta$  und  $\beta$  die zugehörigen Zerfallsexponenten. Der Zerfall der Wiederkehrzeit-Wahrscheinlichkeit determiniert nach Chirikov und Shepelyansky [34] den Korrelationszerfall gemäß:

$$C(T) \sim TW(T). \quad (4.2)$$

Bei streng chaotischen Systemen ohne stabile Inseln, wie z.B. bei der Arnoldschen Katzen-Abbildung, ist der Zerfall ausschließlich exponentiell.

Die Idee zur Betrachtung von Wiederkehrzeiten geht auf Poincaré zurück. Nach dem von ihm aufgestellten Theorem, kehrt in einem energieerhaltenden System jede Trajektorie, die eine kleine Region  $A$  des Phasenraums verlässt, nach endlicher Zeit  $T$  zu dieser zurück<sup>1</sup>. Im Grenzfall unendlich langer Zeit durchläuft die Trajektorie diese Umgebung also unendlich häufig.

Eine Trajektorie, die im chaotischen See startet, kommt früher oder später infolge der Ergodizität in die Nähe von regulären Inseln, deren Umgebung wie bereits erwähnt hierarchisch strukturiert ist. In diesem Bereich verweilt sie u.U. für längere Zeit; man spricht von *stickiness* (Klebrigkeit) [26, 24, 29]. Dieser Effekt führt zu den genannten *power law tails*, d.h. einem algebraischen Zerfall der Wiederkehrzeit-Statistik. Ein Eindringen der Trajektorie in den regulären Bereich ist hierbei ausgeschlossen, da ansonsten das Phasenraumvolumen schrumpfen würde. Das jedoch steht im Widerspruch zu dem Liouville-Theorem für konservative Systeme.

Im Hinblick auf das Eliminationsverfahren spielt der Zerfall der Korrelationen eine entscheidende Rolle, da die verwendete Markov-Approximation eine exponentiell mischende Dynamik voraussetzt (s. Kap. 2). Außer Frage steht, dass bei Hamiltonschem Chaos der gemischte Phasenraum eher die Regel als die Ausnahme darstellt und demnach der algebraische Zerfall ein nicht vernachlässigbarer Umstand ist. Die Frage, die sich in der Konsequenz ergibt, lautet: Welche Auswirkungen hat dies für die Gültigkeit des Eliminationsverfahrens? An dieser Stelle muss angemerkt werden, dass sich bisherige Untersuchungen zu den besprochenen algebraischen Zerfällen auf isolierte chaotische Systeme und insbesondere symplektische Abbildungen beschränkt haben [23] - [34]. Es ist also a priori nicht klar, was im Falle eines chaotischen Systems zu erwarten ist, welches in Wechselwirkung mit einem anderen System steht. Ob es zu einer Schwächung (evtl. gar Beseitigung) der störenden algebraischen Zerfälle oder deren Verstärkung kommt, ist bis jetzt unbekannt. Der zweite Abschnitt, der den zentralen Abschnitt in diesem Zusammenhang darstellt, ist genau dieser Frage gewidmet.

Die Intention dieses Kapitels ist, anhand von konkreten Beispielen, den hier aufgeworfenen Fragen genauer nachzugehen. Hierzu bedienen wir uns der Einfachheit halber gekoppelter symplektischer Abbildungen. Sie können gewissermaßen als diskretisierte Modelle für Hamiltonsche Systeme betrachtet werden. Ihr Vorzug ist, dass sie weniger Dimensionen

---

<sup>1</sup>Dieses Theorem beruht auf der Erhaltung des Phasenraumvolumens Hamiltonscher Systeme. Eine Trajektorie, die eine kleine Region  $A$  des Phasenraums mit dem Volumen  $\Gamma_A$  verlässt, muss in diese nach endlicher Zeit  $T$  zurückkehren. Andernfalls schrumpft die Phasenraumvolumen. Dies ist jedoch nach dem Theorem von Liouville verboten (siehe auch [33]).

als kontinuierliche Hamiltonsche Systeme besitzen, aber dennoch chaotisches Verhalten aufweisen können.

In der aktuellen Forschung wird in zahlreichen Arbeiten die Möglichkeit eines universellen Zerfallsexponenten für den algebraischen Zerfall der Wiederkehr-Verteilung diskutiert [23, 34]. Bevor wir uns also den gekoppelten Abbildungen zuwenden, wollen wir im nächsten Abschnitt diskutieren, ob mit Hilfe dieses Exponenten der Fehler, der sich aus der Verwendung der Markov-Approximation für das Eliminationsverfahren ergibt, abgeschätzt werden kann.

## 4.1 Hamiltonsches Chaos und Markov-Approximation

Mit Hilfe der Markov-Approximation konnten wir im Kapitel 2 den dort auftretenden Gedächtnisterm vereinfachen und somit durch das Eliminationsverfahren eine Fokker-Planck-Gleichung gewinnen. Der Gedächtnisterm seinerseits ist grob gesprochen durch das Zeitintegral über das Produkt aus der reduzierten Dichte  $\bar{\rho}_{t-t'}$  und der Korrelationsfunktion  $C(t-t')$  der schnellen Freiheitsgrade gemäß

$$\int dt \bar{\rho}_{t-t'} C(t-t') \quad (4.3)$$

bestimmt. Ist der Zerfall der Korrelationen im schnellen chaotischen Teilsystem exponentiell und verklingen sie schnell auf der langsamen Zeitskala  $\tau_l$ , dann ist der Fehler, den man beim Abschätzen dieses Integrals auf der Basis der Markov-Approximation macht, gering. Dies ist im Fall von hyperbolischer Dynamik idealerweise erfüllt. Uns aber interessiert der allgemeine Fall mit gemischtem Phasenraum. Nach Beziehung (4.1) und (4.2) ist hier für Zeiten  $T < T_e$  ein exponentieller Zerfall der Korrelationen zu erwarten. Insbesondere für große Zerfallsexponenten  $\mu$  ist der Fehler durch Anwendung der Markov-Näherung klein, wie im hyperbolischen Fall. Für größere Zeiten  $T > T_e$  wächst der Fehler. Wie groß er schließlich wird, hängt von dem Exponenten  $\beta$  des algebraischen Zerfalls ab. Damit die Markov-Approximation gültig bleibt, darf  $\beta$  nicht kleiner als 2 sein, sonst divergiert das Integral (4.3). An dieser Stelle ergibt sich die Frage, ob der Exponent  $\beta$  des algebraischen Zerfalls bestimmbar ist.

Der algebraische Zerfall scheint eine universelle Eigenschaft von Hamiltonschen Systemen zu sein. Vor diesem Hintergrund ist es naheliegend, auch die Existenz eines universellen Zerfallsexponenten  $\beta$  zu vermuten. Der Exponent  $\beta$ , der bisher mittels numerischer Berechnungen für endliche Simulationsdauern bestimmt wurde, scheint nicht universell zu sein. Er variiert von System zu System und mit den Parametern. Typischerweise rangiert er zwischen 1 und 2.25 [25]-[29]. Bei der numerischen Berechnung der Verteilung von Wiederkehrzeiten handelt es sich um eine aufwändige und zeitintensive Angelegenheit, insbesondere wenn man eine große Zahl von Wiederkehrereignissen erreichen will. Dies ist im Hinblick auf eine aussagekräftige Statistik notwendig. Je schlechter die Statistik ist, desto stärker streuen die Werte für große Zeiten in der Wiederkehr-Verteilung. Es verwundert also nicht, dass hier unterschiedliche Werte des Exponenten gefunden werden.

In der 1999 erschienenen Arbeit von Chirikov und Shepelyansky [34] wird argumentiert, dass für asymptotisch große Zeitdauern der Zerfallsexponent  $\beta$  unabhängig von den spezifischen Systemeigenschaften und Parametern wird. Der universelle Exponent, den sie auf der Basis der Renormierungstheorie gewinnen, beträgt 3. Weiss, Hufnagel und Ketzmerick [23] finden hingegen anhand von numerischen Langzeitsimulationen zur Standard-Abbildung einen universellen Koeffizienten  $\beta = 1.85$  des algebraischen Zerfalls der Wiederkehrwahrscheinlichkeit. Dieser Wert für den universellen Koeffizient  $\beta$  stimmt relativ gut mit dem theoretisch vorhergesagten Wert  $\beta = 1.96$  überein, den Meiss und Ott [24] auf der Basis ihres *markov-tree model* ableiten konnten. Dennoch ist das kein Beweis für die Richtigkeit der Resultate von Weiss et al. [23]. Die Diskussion bezüglich der Existenz des universellen Exponenten  $\beta$  und seines Zahlenwertes bleibt offen. Eine Abschätzung des Integrals (4.3) ist auf diesem Wege nicht möglich.

Allerdings sind die universellen Exponenten  $\beta$  ausschließlich für isolierte Systeme berechnet worden. Wir aber betrachten gekoppelte Hamiltonsche Systeme, die über eine schnelle chaotische Komponente verfügen. Solche Systeme sind jedoch nicht generisch. Wie sich die Zerfallseigenschaften der schnellen Korrelationen durch die Ankopplung verändern, ist damit nicht geklärt. Es erscheint sinnvoll, diese Lücke durch entsprechende Untersuchungen zu schließen. Im nächsten Abschnitt werden hierzu Wiederkehrverteilungen für die schnelle Komponente einiger gekoppelter symplektischer Abbildungen qualitativ untersucht. Wir beschränken uns hier auf eine qualitative Analyse, da die für die quantitative Untersuchung notwendige Statistik, wie bereits erläutert, schwierig zu erreichen ist.

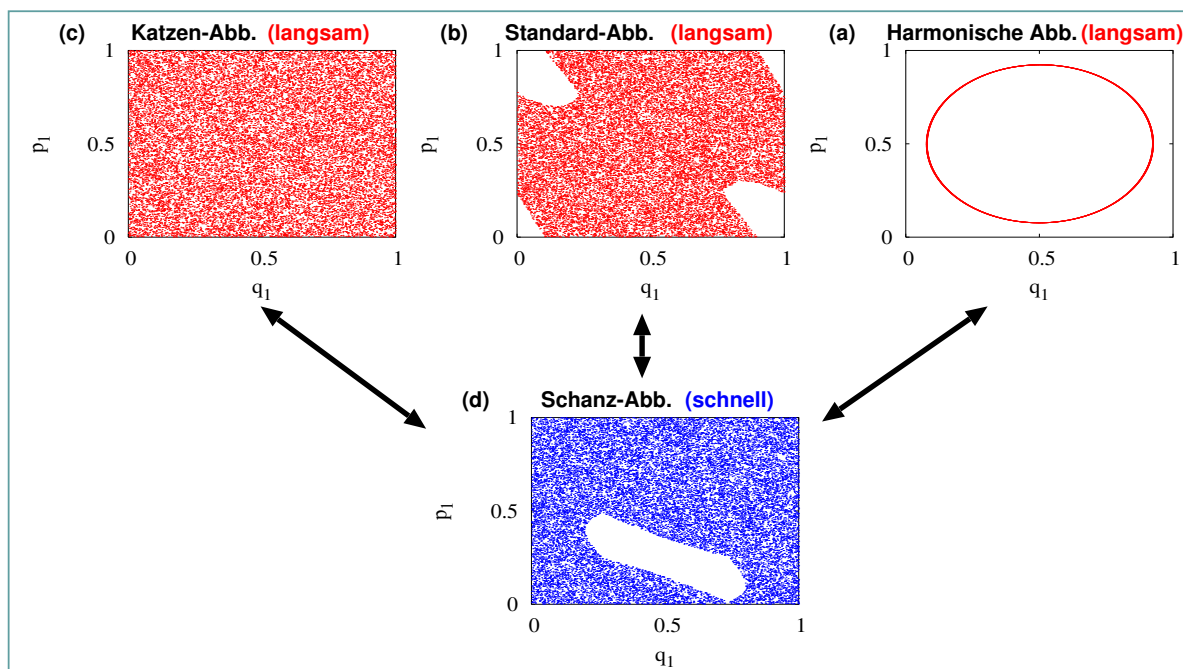
## 4.2 Gekoppelte symplektische Abbildungen: Zerfall schneller Korrelationen

In diesem Abschnitt wird anhand dreier unterschiedlich gekoppelter symplektischer Abbildungen der Zerfall der schnellen Korrelationen studiert. Symplektische Abbildungen können als stark vereinfachte diskretisierte Modelle für Hamiltonsche Systeme verwendet werden. Eine Abbildung ist symplektisch, wenn sie den folgenden Bedingungen genügt:

$$(1) \quad \det(\mathbf{J}) = 1 \quad (2) \quad \mathbf{J}^T \mathbf{S} \mathbf{J} = \mathbf{S} \quad \text{mit} \quad \mathbf{S} = \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{I} \\ -\mathbf{I} & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.4)$$

Hierbei ist  $\mathbf{J}$  die zur Abbildung gehörige Jacobi-Matrix,  $\mathbf{S}$  die im Rahmen der Symplektizität erforderliche antisymmetrische Matrix und  $\mathbf{I}$  die Einheitsmatrix. Als schnelle Abbildung dient in allen drei Fällen die Schanz-Abbildung [35]. Ihr Vorteil ist, dass sie bei einer geeigneten Wahl der Parameter nur eine einzige große reguläre Insel im ansonsten chaotischen See aufweist (siehe Abb. 4.1(d)). Bei den drei gekoppelten Abbildungen unterscheiden sich also lediglich die langsamen Abbildungen. Die konkrete Wahl erfolgt nach dem Kriterium der *Integrabilität*. Die zugrunde liegende Idee war es zu überprüfen, ob eine vollständig reguläre, eine gemischte oder eine vollständig chaotische langsame Dynamik jeweils unterschiedliche Auswirkungen auf die schnelle Dynamik hat. Eine naheliegende





**Abbildung 4.1:** Übersicht: Verschiedene langsame symplektische Abbildungen zur Ankopplung mit (c) Schanz-Abbildung (siehe Gl. (4.5) mit  $b = 0$ , Parameter:  $K_s = 3$ ). (a) 1. Fall: Arnoldsche Katzen-Abb. (siehe Gl. (4.5) mit  $b = 0$ ), 2. Fall: Standard-Abb. (siehe Gl. (4.6) mit  $b = 0$ , Parameter:  $K = 3$ ) und 3. Fall: Harmonische Abb. (siehe Gl. (4.7) mit  $b = 0$ , Parameter:  $\alpha = 0.01$ ).

Vermutung, welche wir im Verlauf der nächsten Abschnitte bestätigen werden, ist, dass sich eine chaotische langsame Dynamik begünstigend auf den Zerfall der Korrelationen im schnellen Teilsystem auswirkt.

Die drei Fälle werden exemplarisch an den folgenden langsamen Abbildungen untersucht: An der Harmonischen-Abbildung (*reguläre* Dynamik), der Standard-Abbildung zu geeigneten Parametern (gemischter Phasenraum) und schließlich der Arnoldschen Katzen-Abbildung (chaotisch hyperbolisch). In allen drei Fällen wird linear gekoppelt und die Kopplungsstärke über den Parameter  $b$  reguliert. Abb. 4.1 zeigt alle drei besprochenen Abbildungen in ihrem ungekoppelten Zustand zu dem Parametersatz, wie er im Folgenden verwendet wird.

### Was bedeutet schnelle oder langsame Abbildung?

Bisher wurde ohne nähere Erläuterung von schneller und langsamer Abbildung gesprochen. Bei der Kopplung der dynamischen Hamiltonschen Systeme wird die Zeitskalentrennung durch die Einführung eines Parameters  $\varepsilon$  erreicht. Dies ist nicht ohne weiteres auf gekoppelte Abbildungen übertragbar. Es besteht dabei die Gefahr, dass die dynamischen Eigenschaften der Abbildungen (unerwünscht) grundlegend verändert werden.

Das Ziel der Überlegung bleibt aber, den Einfluss der Kopplung auf die Dynamik der

einen Abbildung - im Folgenden die schnelle Abbildung - zu bestimmen.

Die Einkopplung der langsamen Abbildung geschieht daher nach folgendem Schema: Die schnelle Abbildung wird iteriert, wobei  $n$  der Iterationsindex ist.  $n \equiv T$  stellt das Analogon zur Zeit in einem dynamischen System dar. Nach einer Anzahl  $\Delta$  von Iterationsschritten wird dann für genau einen Iterationsschritt die langsame Abbildung eingekoppelt. Für diesen Schritt wird nun auch die langsame Abbildung iteriert. Ihr Index  $l$  läuft um den Faktor  $\Delta$  langsamer als  $n$ . Die Abbildungen koppeln also stets, wenn  $n = l\Delta$  gilt.

Diese Kopplung ist anders als im zeitkontinuierlichen Fall, da nur in festen Zeitabständen gekoppelt wird. Durch die Einhaltung der Symplektizitätsbedingung der hier betrachteten Abbildungen ist die Wahl der Kopplung stark eingeschränkt. Die vorgeschlagene Kopplung erfüllt diese Bedingung und wurde deshalb hier favorisiert.

### Vorschlag: Methode zur Berechnung von Wiederkehrzeiten

Eine recht gängige Herangehensweise zur Berechnung von Wiederkehrzeit-Verteilungen besteht darin, die Zeit  $T$  zwischen dem Verlassen und der Wiederkehr einer Trajektorie in eine kleine Umgebung  $A$  zu messen, und die zugehörigen Wiederkehr-Ereignisse zu zählen.

Der Nachteil dieser Methode sind zeitintensive numerische Berechnungen. Der Aufwand lässt sich verringern, indem man nicht eine einzige Umgebung betrachtet, sondern den gesamten der Abbildung zur Verfügung stehenden Bereich mit einem Gitter von  $n \times m$  Stützstellen überzieht. Anschließend startet man die Trajektorie von einer beliebigen Box im Bereich des chaotischen Sees und ermittelt dann die Wiederkehrzeiten der Trajektorie während ihres fortlaufenden Wanderns zu den einzelnen Boxen im Gitter. Damit kann in der gleichen Simulationszeit eine wesentlich größere Zahl von Events erreicht werden. Zusätzlich wird dadurch die Auszeichnung einer Umgebung vermieden, und man erhält eine globale Mittelung über die gesamte schnelle Dynamik.

### Anmerkung

Zu welchem Zeitpunkt  $T$  genau der exponentielle oder der algebraische Zerfall einsetzt, ist abhängig von der Größe der Umgebung, die für die Wiederkehr der Trajektorie betrachtet wird. Je kleiner die Umgebung gewählt ist, desto geringer wird die Wahrscheinlichkeit für die Wiederkehr der Trajektorie. Das ihrerseits bedingt die Verschiebung der gesamten Verteilung zu größeren Wiederkehrzeiten. Damit ist die Zeitskala der Wiederkehr nicht absolut, sondern muß immer zur Umgebungsgröße ins Verhältnis gesetzt werden<sup>2</sup>. In Bezug auf die hier verwendete Methode zur Berechnung von Wiederkehr-Ereignissen ist die Feinheit der Box-Zerlegung zu berücksichtigen.

In den kommenden Unterabschnitten wird die Dynamik der schnellen Schanz-Abbildung bei Ankopplung an unterschiedliche langsame Abbildungen untersucht. Dazu werden sowohl Wiederkehrzeit-Verteilungen als auch Poincaré-Schnitte herangezogen. Das verwendete Gitter wird in allen Fällen zu jeweils  $100 \times 100$  Stützstellen gewählt.

---

<sup>2</sup>Nach dem Lemma von Kac ist die mittlere Wiederkehrzeit umgekehrt proportional zum Phasenraumvolumen.

### 4.2.1 Langsame Katzen- und schnelle Schanz-Abbildung

Der denkbar günstigste Fall ist der, bei dem durch die langsame Dynamik keine zusätzlichen Korrelationen in die schnelle Dynamik eingebracht werden. Dazu muß das langsame System notwendigerweise vollständig chaotisch sein. Die Arnoldsche Katzen-Abbildung verfügt über eine derartige Dynamik. Daher erscheint es sinnvoll, zunächst diesen Fall zu betrachten. Dazu wird die Katzen-Abbildung linear an die schnelle Schanz-Abbildung gekoppelt. Die resultierende Abbildung hat die folgende Gestalt:

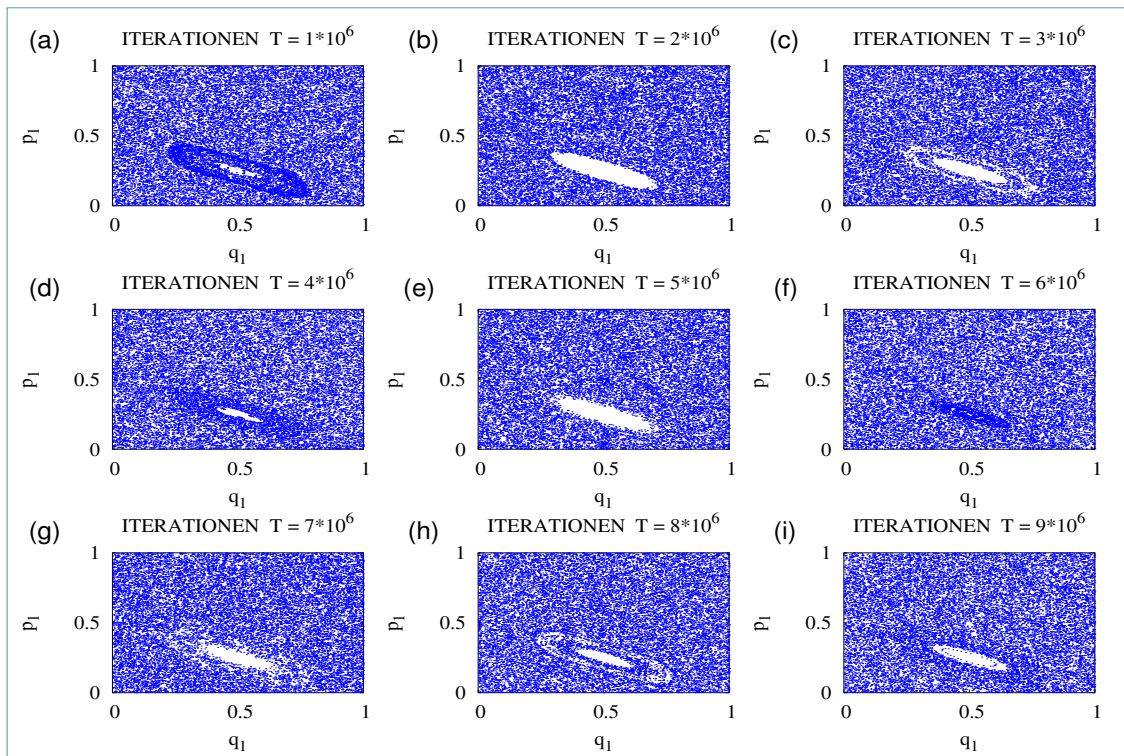
$$\begin{aligned}
 \text{Katzen-Abb.: } q_{l+1}^{cat} &= q_l^{cat} + p_l^{cat} & (\text{mod } 1) \\
 p_{l+1}^{cat} &= p_l^{cat} + q_{l+1}^{cat} + bq_n^{sc} \Big|_{n=(l+1)\Delta} & (\text{mod } 1) \\
 \text{Schanz-Abb.: } q_{n+1}^{sc} &= q_n^{sc} + \left( \frac{p_n^{sc}}{|p_n^{sc}|} + \frac{K_s}{2\pi} \cos(2\pi p_n^{sc}) \right) & (\text{mod } 1) \\
 p_{n+1}^{sc} &= p_n^{sc} - \left( q_{n+1}^{sc} - \frac{1}{2} \right) + b\delta_{n,(l+1)\Delta} q_{l+1}^{cat} & (\text{mod } 1).
 \end{aligned} \tag{4.5}$$

Mittels der Bedingungen (4.4) kann gezeigt werden, dass sowohl die einzelne der beiden Abbildungen als auch die daraus hervorgehende Abbildung in Gl. (4.5)-(4.5) symplektisch ist.

Um Einblick in die dynamischen Abläufe und Veränderungen infolge der Ankopplung der schnellen Schanz-Abbildung zu gewinnen, ist es sinnvoll, eine Serie zeitlich aufeinander folgender Poincaré-Schnitte zu betrachten. In Abb. 4.2 sind diese in einem Abstand von einer Million Iterationsschritten aufgenommen worden. Das beobachtete Szenario ist charakterisiert durch eine zeitlich veränderliche Inselregion. Sie dehnt sich hier nicht über die ursprünglichen Inselgrenzen der freien Schanz-Abbildung hinaus aus. Dies ersieht man aus dem Vergleich mit Abb. 4.1 (d), die zu demselben Parametersatz berechnet wurde. Die Kopplung führt also im zeitlichen Mittel zu einer Schrumpfung der Inselregion. Zusätzlich beobachtet man das Eindringen der Systemtrajektorie in die reguläre Insel. Beispielsweise in den Poincaré-Schnitten 4.2 (a), (f) und (h) wird dieses Verhalten sichtbar. Ohne die Ankopplung wäre die Systemtrajektorie für immer hier gefangen. Durch die Wechselwirkung ändert sich aber fortwährend der schnelle Phasenraum, so dass nach einer Weile die Trajektorie wieder im chaotischen See verläuft (siehe dazu den Übergang von (a) zu (b)). Das Eindringen in die Inselregion ist in dieser Konstellation nicht mehr verboten, da das schnelle System nicht isoliert ist.

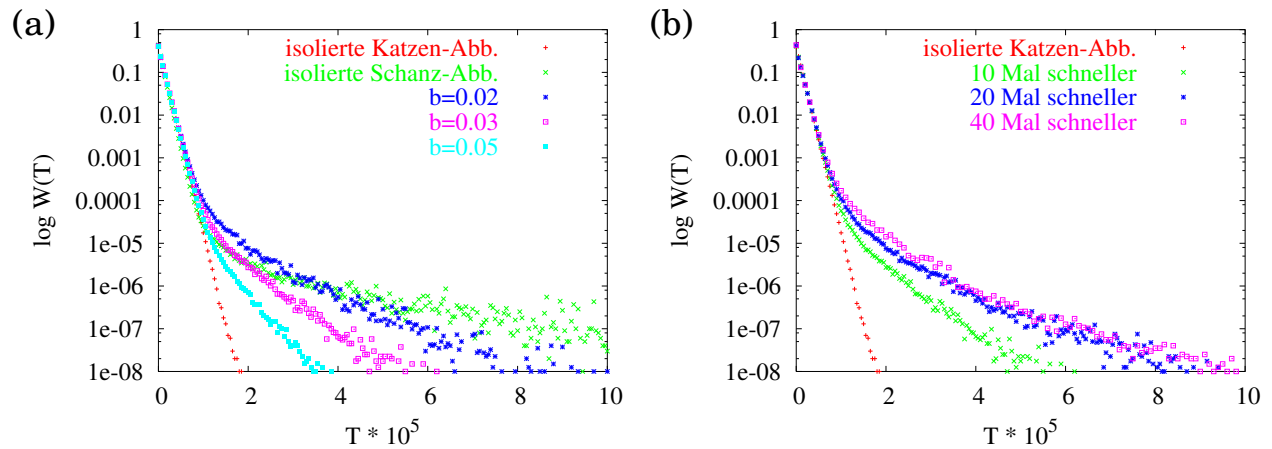
Die Poincaré-Aufnahmen sind hier für eine schwache Kopplung  $b = 0.01$  erstellt worden. Die Schanz-Abbildung wird hier zehnmal häufiger als die langsame Katzen-Abbildung iteriert. Für weniger schwache Kopplungen  $b > 0.01$  ist der Eingriff des langsamen Systems in die schnelle Dynamik wesentlich tiefgreifender. Man beobachtet eine stärkere Schrumpfung der regulären Inselregion in der schnellen Schanz-Abbildung.

Wir gewinnen auf der Basis der berechneten Poincaré-Schnitte lediglich einige Einblicke in die dynamischen Prozesse, die in der schnellen Abbildung stattfinden. Interessanterweise wird nicht das Entstehen von neuen Inseln oder etwa das Wandern der Insel in der schnellen Schanz-Abbildung beobachtet, was durchaus denkbar wäre.



**Abbildung 4.2:** Dynamisches Szenario der schnellen Schanz-Abb. beim Einkoppeln der langsamen Katzen-Abb. nach Gl. (4.5): Zeitlich aufeinanderfolgende Momentaufnahmen mittels Poincaré-Schnitte (der Schanz-Abb.) alle  $10^6$  Iterationen  $T$  (Parameter:  $K_s = 3$ ,  $\Delta = 10$  und  $b = 0.01$ ).

Aus der Einleitung dieses Kapitels wissen wir, dass stabile Inseln - bildhaft gesprochen - klebrig (*sticky*) sind, d.h. die Trajektorie *klebt fest* ohne einzudringen. Es kommt dadurch zu algebraischen Zerfällen in der Wiederkehr-Verteilung. Die hier beobachtete Insel ist nicht mehr stabil, sondern verändert sich in der Zeit. Welche Folgen hat das nun für den Zerfall der schnellen Korrelationen? Zur Beantwortung dieser Frage wollen wir uns im nächsten Schritt die Wiederkehr-Verteilungen für die gekoppelte Schanz-Abbildung ansehen. In Abb. 4.3 (a) ist diese zu drei unterschiedlichen Kopplungsstärken  $b$  bestimmt worden. Dabei ist die Schanz-Abbildung stets zehnmal so schnell wie die angekoppelte Katzen-Abbildung. Es werden jeweils  $10^8$  Wiederkehr-Ereignisse berücksichtigt. Zusätzlich sind hier die Wiederkehr-Verteilungen für die isolierte Katzen- und Schanz-Abbildung mitaufgenommen. Sie wurde zu den gleichen Parametern wie die Teilabbildungen der gekoppelte Abbildung bestimmt. Damit können sie hier als Referenz-Verteilungen eingesetzt werden, um qualitative Veränderungen bei der Verteilung der gekoppelten Schanz-Abbildung zu registrieren. Erwartungsgemäß zerfällt die Wiederkehr-Verteilung der isolierten Katzen-Abbildung exponentiell. In der halblogarithmischen Darstellung erscheint sie daher als abfallende Gerade. Im Gegensatz dazu geht der exponentielle Zerfall bei der isolierten Schanz-Abbildung bei ungefähr  $T \approx 60000$  in einen algebraischen Zerfall über. Das ist die



**Abbildung 4.3:** Wiederkehr-Verteilungen für die schnelle Schanz-Abb. bei Ankopplung an die langsame Katzen-Abb. nach Gl. (4.5): (a) für drei verschiedene Kopplungsstärken  $b$  bei  $\Delta = 10$  und (b) für drei verschiedene Zeitskalenparameter  $\Delta$  bei  $b = 0.03$  (Parameter:  $K_s = 3$  und Berücksichtigung von  $10^8$  Wiederkehr-Ereignissen).

Folge der großen regulären Insel. Bei den Verteilungen der gekoppelten Schanz-Abbildung beobachtet man prinzipiell ein ähnliches Verhalten. Nach einem exponentiellen Zerfall folgt ein algebraischer. Aus dem Vergleich mit diesen Referenz-Verteilungen ersieht man aber zweierlei: Zum einen wird die Zahl von Wiederkehr-Ereignissen für große Zeiten  $T$  mit wachsender Stärke der Kopplung  $b$  immer geringer, d.h. die algebraischen Zerfallschwänze immer kürzer. Zum anderen wird der anfängliche exponentielle Zerfall mit zunehmender Kopplung für immer größere Wiederkehrzeiten beobachtet. Bei z.B.  $b = 0.02$  kann ein exponentieller Zerfall bis  $T = 100000$  registriert werden, während er für eine mehr als zweifache Kopplungsstärke  $b = 0.05$  bis einschließlich  $T = 140000$  beobachtet werden kann. Wenn man sich die Prozesse vergegenwärtigt, die in Zusammenhang mit den Poincaré-Schnitten beobachtet wurden, dann lässt sich das verstehen: Durch die Kopplung (verbunden mit der Zeitskalentrennung) wird in immer gleichen Zeitabständen in die schnelle Dynamik eingegriffen. Jeder dieser Eingriffe führt zur Umstrukturierung des Phasenraums, insbesondere zur Veränderung der Inselgröße. Eine Trajektorie, die z.B. infolge der *stickiness* in der unmittelbaren Inselumgebung eingefangen ist, kann durch diese Umstrukturierungsprozesse entkommen. Ihre Verweildauer wird in solchen Regionen des Phasenraums wesentlich verkürzt, wodurch sich die Zahl von Ereignissen mit großen Wiederkehrzeiten verringert. Das erklärt die Beobachtung der sich verkürzenden Schwänze der Wiederkehr-Verteilung, d.h. des Teils, der im Mittel algebraisch zerfällt. Diese sind für nicht zu schwache Kopplungen ( $b > 0.02$ ) wesentlich kürzer als bei der isolierten Schanz-Abbildung. Sogar die zeitweiligen Aufenthalte in der Insel haben keine dramatischen Konsequenzen, da die Trajektorie durch eine Schrumpfung der Inselregion wieder im chaotischen See verlaufen kann. Die Ankopplung wirkt sich hier also in unserem Sinne positiv auf die Zerfalleigenschaften der schnellen Korrelationen aus, indem sie möglichen Effekten, wie z.B. der *stickiness*,

entgegenwirkt.

Eine Variation der Zeitskalentrennung bei einer festen Kopplungsstärke  $b = 0.03$  ist in Abb. 4.3 (b) durchgeführt. In dieser werden für drei schnelle Zeitskalen ( $\Delta = 10$  Mal,  $\Delta = 20$  Mal und  $\Delta = 40$  Mal schneller), bei sonst gleichen Parametern, die Verteilung der Wiederkehrzeiten der schnellen Schanz-Abbildung berechnet. Erkennbar ist, dass eine geringere Anzahl schneller Iterationen, wie z.B. im Fall von  $\Delta = 10$ , den Zerfall der schnellen Korrelationen begünstigt. Die Ursache hierfür ist in der gewählten Realisierung der Kopplung zu suchen. Im Gegensatz zum kontinuierlichen Hamiltonschen System ist die Kopplung nicht fortwährend aktiv, sondern wird zu ganz bestimmten Zeitpunkten eingeschaltet. Dadurch tritt eine Wechselwirkung mit der langsamen Katzen-Abbildung, die infolge ihrer chaotischen Dynamik den Abbau schneller Korrelationen unterstützt, mit wachsender Anzahl von  $\Delta$  in immer größeren Zeitabständen und damit immer seltener auf.

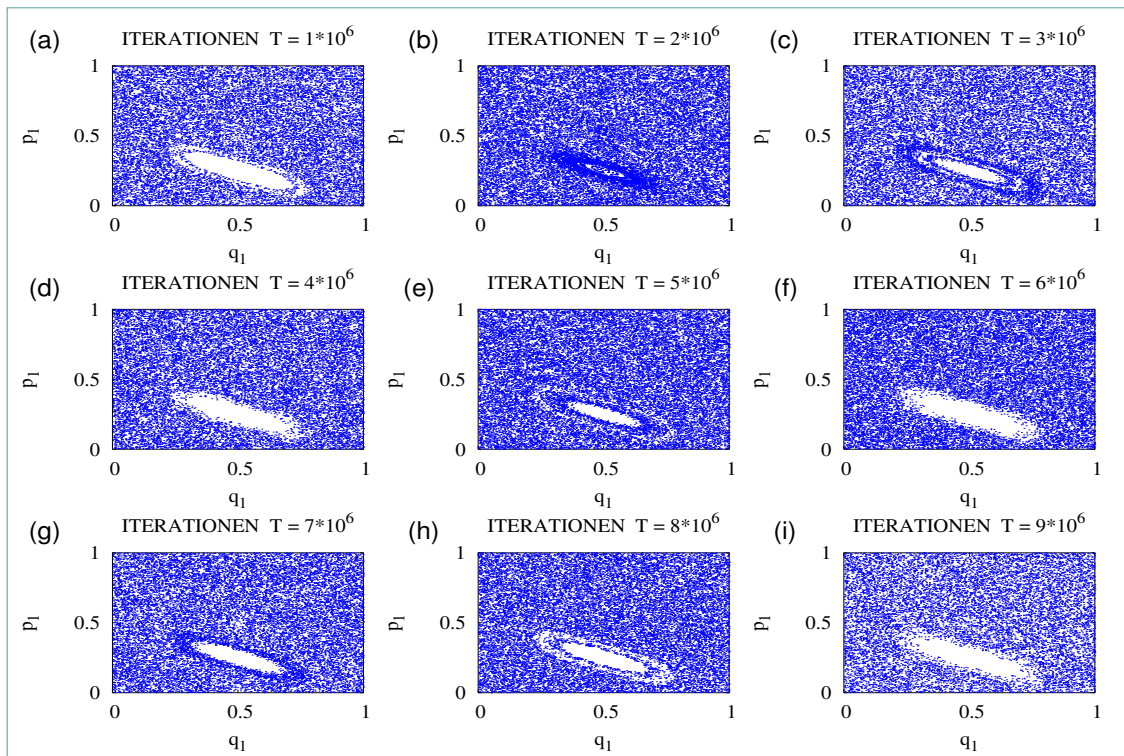
### 4.2.2 Langsame Standard- und schnelle Schanz-Abbildung

Im vorhergehenden Abschnitt wurde gewissermaßen der Idealfall bezüglich der langsamen Dynamik betrachtet. Wie verändert sich aber das Zerfallsverhalten bei der schnellen Schanz-Abbildung, wenn die wechselwirkende langsame Komponente nicht mehr vollständig chaotisch, sondern einen gemischten Phasenraum aufweist? Im Gegensatz zu dem vorhergehenden Fall besteht hier die Möglichkeit, durch die Ankopplung einer derartigen langsamen Abbildung zusätzliche Korrelationen in die schnelle Dynamik einzubringen. Zur Untersuchung dieses Falls tauschen wir lediglich die Arnoldsche Katzen-Abbildung durch die Standard-Abbildung zu geeigneten Parametern aus. Hierbei wird ein Parametersatz gewählt, für den die freie Standard-Abbildung einen gemischten Phasenraum gemäß Abb. 4.1 (b) aufweist. Damit ergibt sich die zugehörige gekoppelte Abbildung zu:

$$\begin{aligned}
 \text{Standard-Abb.: } q_{l+1}^{st} &= q_l^{st} + p_l^{st} && (\text{mod } 1) \\
 p_{l+1}^{st} &= p_l^{st} - \frac{K}{2\pi} \sin(2\pi q_{l+1}^{st}) + b q_n^{sc} \Big|_{n=(l+1)\Delta} && (\text{mod } 1) \\
 \text{Schanz-Abb.: } q_{n+1}^{sc} &= q_n^{sc} + \left( \frac{p_n^{sc}}{|p_n^{sc}|} + \frac{K_s}{2\pi} \cos(2\pi p_n^{sc}) \right) && (\text{mod } 1) \\
 p_{n+1}^{sc} &= p_n^{sc} - \left( q_{n+1}^{sc} - \frac{1}{2} \right) + b \delta_{n,(l+1)\Delta} q_{l+1}^{st} && (\text{mod } 1).
 \end{aligned} \tag{4.6}$$

Es erscheint auch hier sinnvoll, sich anhand von zeitlich aufeinander folgenden Poincaré-Schnitten erste Einblicke in die infolge der Kopplung veränderten dynamischen Prozesse der schnellen Schanz-Abbildung zu verschaffen. In Abb. 4.4 sind wie im vorhergehenden Fall alle 1 Million Zeiteinheiten Poincaré-Schnitte erstellt worden. Es stellt sich die Frage: Welche grundlegenden Änderungen sind im Vergleich zur Ankopplung der langsamen Katzen-Abbildungen festzustellen? Das dynamische Szenario, das die Abb. 4.4 offen legt, ist qualitativ sehr ähnlich zu dem vorhergehenden Fall (vergleiche hierzu Abb. 4.2). Auch hier ist die Dynamik der schnellen Schanz-Abbildung charakterisiert durch eine zeitlich veränderliche Inselregion. Eine Wanderung oder Entstehung zusätzlicher regulärer Inseln tritt in Übereinstimmung mit dem voll chaotischen Fall nicht auf. Die unbestreitbare Ähnlichkeit der

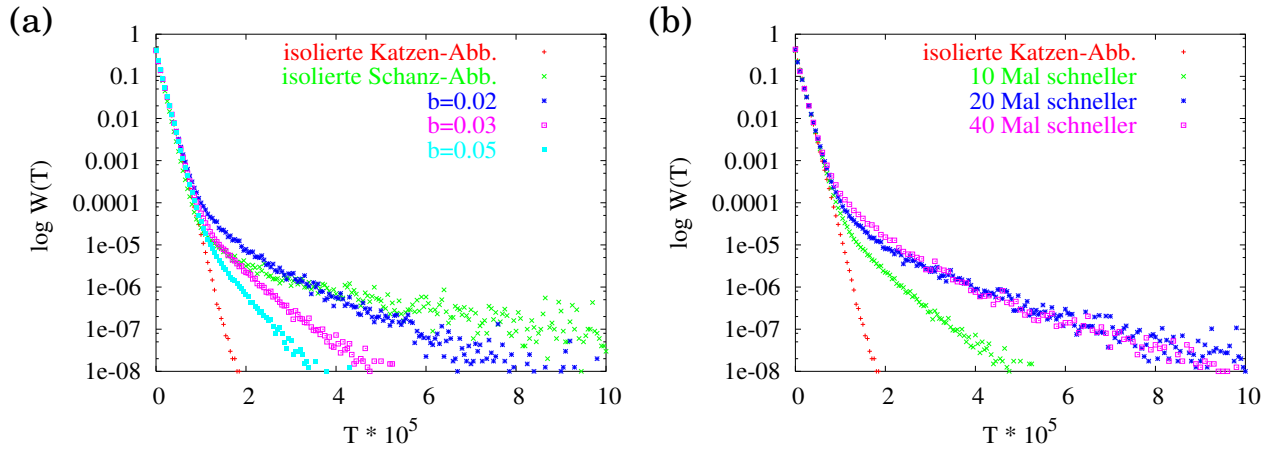




**Abbildung 4.4:** Dynamisches Szenario der schnellen Schanz-Abb. beim Einkoppeln der langsamen Standard-Abb. nach Gl. (4.6): Zeitlich aufeinanderfolgende Momentaufnahmen mittels Poincaré-Schnitte (der Schanz-Abb.) alle  $10^6$  Iterationen  $T$  (Parameter:  $K_s = 3$ ,  $K = 3$ ,  $\Delta = 10$  und  $b = 0.01$ ).

Szenarien bei der Ankopplung der Katzen- und Standard-Abbildung legt die Vermutung nahe, dass die Auswirkungen auf die Zerfallsprozesse der schnellen Korrelationen ebenfalls ähnlich sein müssten. Diese Vermutung kann mit Hilfe der Wiederkehr-Verteilungen für die schnelle Schanz-Abbildung (zu gleichen Parameterwerten) überprüft werden. Zu diesem Zweck werden die Verteilungen in Abb. 4.4 (a) zu gleichen Werten der Kopplungsstärke ( $b = 0.02, 0.03$  und  $0.05$ ) und bei gleicher Zeitskalentrennung ( $\Delta = 10$  Mal schneller) dargestellt. Das Zerfallsverhalten, welches anhand dieser Wiederkehr-Verteilungen abgelesen werden kann, stimmt qualitativ vollkommen mit der voll chaotischen Katzen-Abbildung überein. Mit wachsender Kopplungsstärke nehmen die algebraisch zerfallenden Verteilungsschwänze zu Gunsten eines verlängerten exponentiellen Zerfalls ab. Demnach wirkt sich die Kopplung selbst im Falle einer nicht vollständig chaotischen langsamen Dynamik günstig auf den Zerfallsprozess der schnellen Korrelationen aus. Im letzten Abschnitt 4.2.4 wird gezeigt, dass die Ankopplung der Katzen-Abbildung und der hier betrachteten Standard-Abbildung (bei gleicher Kopplungsstärke und Zeitskalentrennung) zu einem nahezu identischen Zerfall der Korrelationen in der Schanz-Abbildung führt.

Bei der Betrachtung unterschiedlich starker Zeitskalentrennung stellt man ein sehr ähnliches Zerfallsverhalten schneller Korrelationen wie bei der Ankopplung der Katzen-



**Abbildung 4.5:** Wiederkehr-Verteilungen für die schnelle Schanz-Abb. bei Ankopplung an die langsame Standard-Abb. nach Gl. (4.6): (a) für drei verschiedene Kopplungsstärken  $b$  bei  $\Delta = 10$  und (b) für drei verschiedene Zeitskalenparameter  $\Delta$  bei  $b = 0.03$  (Parameter:  $K_s = 3$  und  $K_s = 3$  und Berücksichtigung von  $10^8$  Wiederkehr-Ereignissen).

Abbildung fest. Dies wird durch die Abb. 4.5 (b) nahegelegt. Eine weniger ausgeprägte Trennung von schneller und langsamer Zeitskala wirkt sich auch hier positiv auf den beobachteten Zerfall in der Wiederkehr-Verteilung der Schanz-Abbildung aus. Begründen lässt sich dies auf ähnliche Weise wie im Falle der Ankopplung der Katzen-Abbildung (s. Abs. 4.2.1).

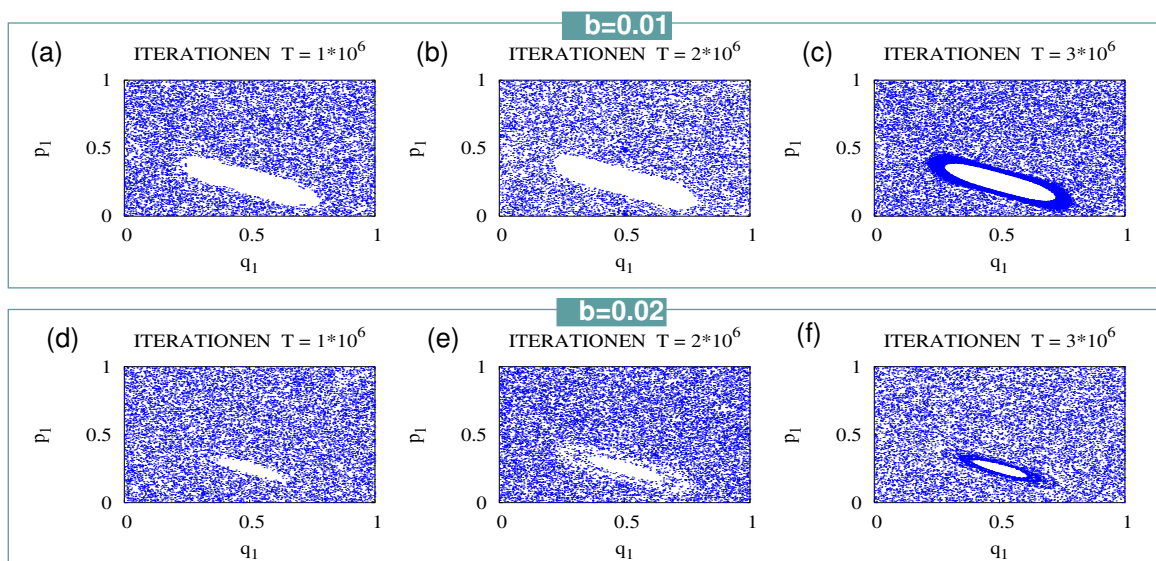
### 4.2.3 Langsame Harmonische- und schnelle Schanz-Abbildung

Nachdem wir im letzten Abschnitt 4.2.2 gesehen haben, dass selbst die Kopplung einer langsamen Abbildung mit gemischtem Phasenraum den schnellen Korrelationszerfall positiv beeinflusst, ist es naheliegend, nach dem Extremfall vollständig regulärer langsamer Dynamik zu fragen. Dazu wird hier eine gekoppelte symplektische Abbildung bestehend aus einer langsamen harmonischen Abbildung und einer schnellen Schanz-Abbildung betrachtet:

$$\begin{aligned}
 \text{Harmon. Abb.: } q_{l+1}^{ha} &= q_l^{ha} + \alpha p_l^{ha} + 1 \\
 p_{l+1}^{ha} &= p_l^{ha} - \alpha q_{l+1}^{ha} + b q_n^{sc} \Big|_{n=(l+1)\Delta} \\
 \text{Schanz-Abb.: } q_{n+1}^{sc} &= q_n^{sc} + \left( \frac{p_n^{sc}}{|p_n^{sc}|} + \frac{K_s}{2\pi} \cos(2\pi p_n^{sc}) \right) \pmod{1} \\
 p_{n+1}^{sc} &= p_n^{sc} - \left( q_{n+1}^{sc} - \frac{1}{2} \right) + b \delta_{n,(l+1)\Delta} q_{l+1}^{ha} \pmod{1}.
 \end{aligned} \tag{4.7}$$

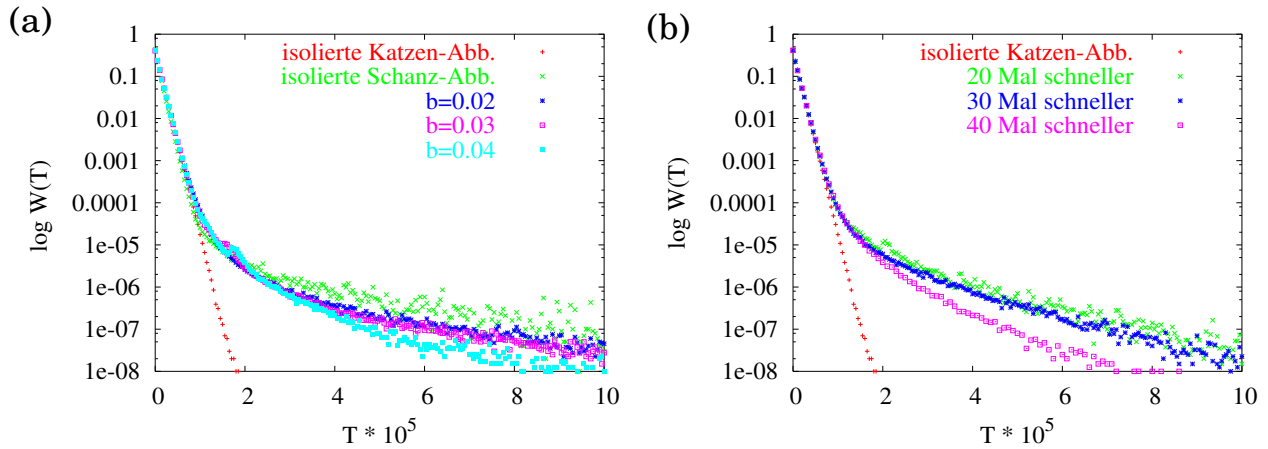
Die Parameter sind so gewählt, dass die betrachteten Abbildungen im ungekoppelten Zustand einen Phasenraum gemäß Abb. 4.1 (a) bzw. (d) aufweist. Welche Unterschiede ergeben sich bei dieser Konstellation für die schnelle Dynamik der Schanz-Abbildung gegenüber





**Abbildung 4.6:** Dynamisches Szenario der schnellen Schanz-Abb. beim Einkoppeln der langsamen Harmonischen Abb. nach Gl. (4.7): Zeitlich aufeinanderfolgende Momentaufnahmen mittels Poincaré-Schnitte (der Schanz-Abb.) alle  $10^6$  Iterationen  $T$ : (a) - (c) bei einer Kopplungsstärke  $b = 0.01$  und (d) - (f) für  $b = 0.02$ . (Parameter:  $K_s = 3$ , Zeitskalentrennung  $\Delta = 10$ ).

den vorhergehenden Fällen? Einen wesentlichen Unterschied kann man aus der Abb. 4.6 (a) - (c) entnehmen. Die dargestellten Poincaré-Schnitte, die hier erneut mit einer Zeitdifferenz von einer Million Iterationsschritten und für eine schwache Kopplung  $b = 0.01$  aufgenommen wurden, zeigen eine geringfügig geschrumpfte Inselregion. Sie verändert sich in ihrer Ausdehnung im Gegensatz zu den anderen Fällen zeitlich kaum. Man beobachtet bei der schnellen Schanz-Abbildung lediglich zwei dynamische Zustände. Entweder ist die Trajektorie im chaotischen See (Abb. 4.6 (a) und (b)) oder hält sich in der Insel (Abb. 4.6 (c)) auf. Wählt man die zweifache Kopplungsstärke  $b = 0.02$  und belässt die Zeitskalentrennung wie zuvor bei  $\Delta = 10$ , dann ändert sich das Szenario (s. Abb. 4.6 (d) - (f)). Es wird ähnlich dem dynamischen Szenario, welches bei der Einkopplung von Katzen- oder Standard-Abbildung zu einer halb so schwachen Kopplungsstärke  $b = 0.01$  (s. Abb. 4.4 und Abb. 4.4) erscheint. Die Inselregion der schnellen Schanz-Abbildung ist, wie anhand der Abb. 4.6 (d) - (f) erschen werden kann, wesentlich geschrumpft. Welche Folgen ergeben sich aus diesem dynamischen Verhalten der schnellen Schanz-Abbildung für den zugehörigen Korrelationszerfall? Die Antwort erhalten wir durch die in Abb. 4.7 (a) berechneten Wiederkehrzeit-Verteilungen. Für eine schwache Kopplung ( $b = 0.02$  oder  $b = 0.03$ ), wie wir sie auch schon bei den vorhergehenden Fällen betrachtet haben, ergibt sich ein Zerfallsverhalten, das qualitativ der freien Schanz-Abbildung mit gemischtem Phasenraum sehr ähnlich ist. Erst ab einer Kopplungsstärke von  $b = 0.04$  ist eine Verbesserung der Zerfallseigenschaften der gekoppelten Schanz-Abbildung zu verzeichnen, und zwar dahingehend, dass sich die Zahl der Wiederkehr-Ereignisse für größere Zeiten  $T$  verringert.

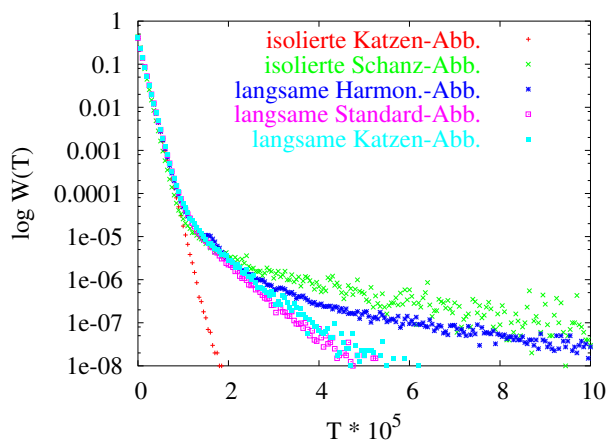


**Abbildung 4.7:** Wiederkehr-Verteilungen für die schnelle Schanz-Abb. bei Ankopplung an die langsame Harmonische-Abb. nach Gl. (4.5): (a) für drei verschiedene Kopplungsstärken  $b$  bei  $\Delta = 10$  und (b) für drei verschiedene Zeitskalenparameter  $\Delta$  bei  $b = 0.03$  (Parameter:  $K_s = 3$  und Berücksichtigung von  $10^8$  Wiederkehr-Ereignissen).

Berechnet man die Wiederkehr-Verteilung bei festgewählter Kopplungsstärke  $b$  für unterschiedlich schnelle Schanz-Abbildungen, wie in Abb. 4.7 (b), so kann eine interessante Beobachtung gemacht werden. Bei einer ausgeprägten Zeitskalentrennung von beispielsweise  $\Delta = 40$  sind deutlich weniger Ereignisse für große Wiederkehrzeiten  $T$  als bei einer schwächer ausgeprägten Trennung der Zeitskalen wie z.B.  $\Delta = 20$  oder  $\Delta = 30$  beobachtbar. Der Grund hierfür ist, dass die einkoppelnde Harmonische Abbildung infolge ihrer regulären Dynamik zusätzliche Korrelationen in die schnelle Schanz-Abbildung einbringt. Solange der Eingriff durch die langsamen Abbildung in einem genügend großen Zeitabstand erfolgt, wirkt es sich positiv auf den Zerfall der Korrelationen aus, da es zu einer Aufmischung der schnellen Dynamik führt. Dies ihrerseits schwächt *stickiness* Effekte. Wenn allerdings die langsame Harmonische Abbildung in zu kurzen Zeitabständen  $\Delta$  in Wechselwirkung mit der schnellen Schanz-Abbildung tritt, so werden im wesentlich größerem Umfang Korrelationen in die schnelle Dynamik eingebracht als durch Umstrukturierungsprozesse abgebaut werden können.

#### 4.2.4 Vergleich der Zerfalleigenschaften

In den letzten Abschnitten haben wir die drei grundlegenden Fälle der Ankopplung einer Abbildung mit schneller Dynamik an eine Abbildung mit langsamer Dynamik diskutiert. Im Zentrum stand die Frage, welche Auswirkungen die Kopplung auf den Zerfallsprozess der schnellen Korrelationen hat. Als schnelle Abbildung diente in allen Fällen die Schanz-Abbildung mit gemischtem Phasenraum nach Abb. 4.1 (d). Hier wollen wir nun abschließend diese Fälle jeweils repräsentiert durch die Wiederkehr-Verteilung für die schnelle Schanz-Abbildung zu fester Kopplungsstärke einander gegenüberstellen. Aus der



**Abbildung 4.8:** Im Vergleich: Einfluss der langsamen Dynamik auf die Zerfallseigenschaften der schnellen Schanz-Abb. bei Ankopplung an drei unterschiedliche Abbildungen: Katzen-, Standard- und Harmonische Abbildung bei einer Kopplungsstärke  $b = 0.03$  und einer Zeitskalentrennung  $\Delta = 10$  nach Gl. (4.5): (Parameter:  $K_s = 3$ ,  $K = 3$  und Berücksichtigung von  $10^8$  Wiederkehr-Ereignissen).

Abb. 4.8, die genau zu diesem Zweck für die Kopplungsstärke  $b = 0.03$  und einer Zeitskalentrennung  $\Delta = 10$  berechnet wurde, ersehen wir, dass die Ankopplung der Katzen- und der Standard-Abbildung zu nahezu identischen Wiederkehr-Verteilungen führen. Sie weisen gegenüber der freien Schanz-Abbildung ein verbessertes Zerfallsverhalten auf. Im Falle der Harmonischen Abbildung, die vollständig regulär ist, ist auch bei der betrachteten Kopplung zunächst eine Verbesserung der Zerfallseigenschaften hinsichtlich der schnellen Korrelationen festzustellen. Sie fällt jedoch im Vergleich zu den Fällen chaotischer langsamer Abbildungen geringer aus. Im letzten Abschnitt haben wir gesehen, dass sich sowohl durch eine ausgeprägte Zeitskalentrennung als auch stärkere Kopplung im Fall regulärer langsamer Dynamik eine weitere Steigerung des Zerfalls schneller Korrelationen erreichen lässt.

Zusammenfassend lässt sich also feststellen, dass eine nicht zu schwache Kopplung und eine hinreichend ausgeprägte Zeitskalentrennung zu einem verbesserten Korrelationszerfall bei der schnellen chaotischen Komponente führt. Ist die langsame Dynamik selbst chaotisch, dann kann bereits für sehr schwache Kopplungen ein beschleunigter Korrelationszerfall für die schnelle Dynamik erreicht werden. Die algebraischen Zerfälle werden mit wachsender Kopplungsstärke weiter zurückgedrängt. Anschaulich führt die Kopplung zu einer anhaltenden Aufmischung und Umstrukturierung des schnellen Phasenraums. Dies wiederum begünstigt gewissermaßen die Zerstörung von vorhandenen Korrelationen, welche für die algebraischen Zerfälle in der Wiederkehr-Verteilung verantwortlich sind. Demnach besteht berechtigte Hoffnung, dass die Markov-Approximation für einen Großteil der gekoppelten Hamiltonschen Systeme mit chaotischem schnellem Subsystem, wie wir sie hier betrachten, gültig bleibt. Das gilt insbesondere, wenn man berücksichtigt, dass das resultierende System wesentlich mehr Dimensionen hat, als entsprechende symplektische

Abbildungen. Dadurch werden vermutlich Effekte wie *stickiness* immer unbedeutender, da eine Trajektorie durch den höherdimensionalen Phasenraum wesentlich mehr Möglichkeiten, wie z.B. Arnold-Diffusion, zur Verfügung stehen, um zu entweichen. Damit wird die Wahrscheinlichkeit, in die Nähe von Inselregionen zu geraten und dort für längere Zeiten zu verweilen, entsprechend gering.

# Kapitel 5

## Anwendungen I: Schnelles Hamiltonsches Chaos

Bisher beschränken sich unsere Untersuchungen hinsichtlich der Leistungsfähigkeit des Eliminationsverfahrens auf die im Kapitel 3 vorgestellten Pseudo-Hamiltonschen Kubomodelle. Es handelt sich dabei um stochastische Systeme, die für erste Untersuchungen durchaus geeignet sind, aber keinen abschließenden Test für das Eliminationsverfahren darstellen. Diese Lücke soll in diesem Kapitel nun geschlossen werden, indem das Eliminationsverfahren auf eine Reihe von gekoppelten Systemen mit unterschiedlichen chaotischen Subsystemen angewendet wird. Eine analytische Berechnung der Fokker-Planck-Koeffizienten, die für die reduzierte Bewegungsgleichung (2.36) (s. Kap.2) erforderlich ist, ist hier nicht möglich. Sie müssen ausschließlich numerisch bestimmt werden.

In den folgenden drei Abschnitten wird wie im Kapitel 3 als langsames System immer der harmonische Oszillator verwendet. Zusätzliche Effekte, die von der Dynamik des langsamen Systems herrühren, sollen damit soweit wie möglich vermieden werden. Außerdem beschränken wir uns auf eine harmonische Kopplung. Dies liegt in der Tatsache begründet, dass das hier betrachtete Eliminationsverfahren für lineare Kopplungen auf die vereinfachten Ausdrücke in Gl. (2.36) führt, während für eine allgemeinere Kopplung komplizierte Ausdrücke auftreten. Eventuell können auch nicht-viskose Dämpfungsterme erscheinen. Im nächsten Kapitel 6 wird in Zusammenhang mit dem Wasserstoff-Atom nicht die harmonische Kopplung, sondern ein anderer Typ der linearen Kopplung betrachtet werden.

Die hier zu untersuchenden schnellen chaotischen Systeme sind zunächst ein Hamiltonsches System mit quartischem Potential, dann das Hénon-Heiles-System und schließlich ein 6-dimensionales System. Anhand dieser unterschiedlichen schnellen Systeme werden verschiedene Aspekte untersucht: Bei dem erstgenannten System können durch geeignete Wahl der Gesamtenergie die regulären Regionen soweit zurückgedrängt werden, dass der Phasenraum nahezu allein von der chaotischen Dynamik beherrscht wird. Damit eignet sich dieses System, um die grundsätzliche Gültigkeit der Eliminationsmethode zu überprüfen. Das Hénon-Heiles-System hingegen verfügt sowohl über ein asymmetrisches Potential als auch bekanntermaßen über einen ausgeprägt gemischtem Phasenraum, selbst bei der größtmöglichen Energie. Dies eröffnet die Möglichkeit zwei wesentliche Aspekte zu un-

tersuchen: Zum einen die Leistungsgrenzen des Eliminationsverfahrens bei der Vorhersage des Langzeitverhaltens bei einem schnellen Subsystem mit ausgedehnten regulären Regionen, und zum anderen unterschiedliche Realisierungen der Ankopplung (symmetrische bzw. asymmetrische) an das schnelle Subsystem. Bei der Untersuchung des 6-dimensionalen Systems steht die Frage im Vordergrund, welche möglichen Effekte beim Übergang zum thermodynamischen Limes zu erwarten sind.

### Konvention

Im Folgenden werden häufig die Begriffe *theoretisch* oder *Theorie* z.T. ohne nähere Erläuterung gebraucht. Mit der Bezeichnung *theoretisch* oder *Theorie* sind hier, soweit nicht anders beschrieben, die theoretischen Aussagen, welche aus dem Eliminationsverfahrens resultieren, gemeint.

## 5.1 Hamiltonsches System mit quartischem Potential

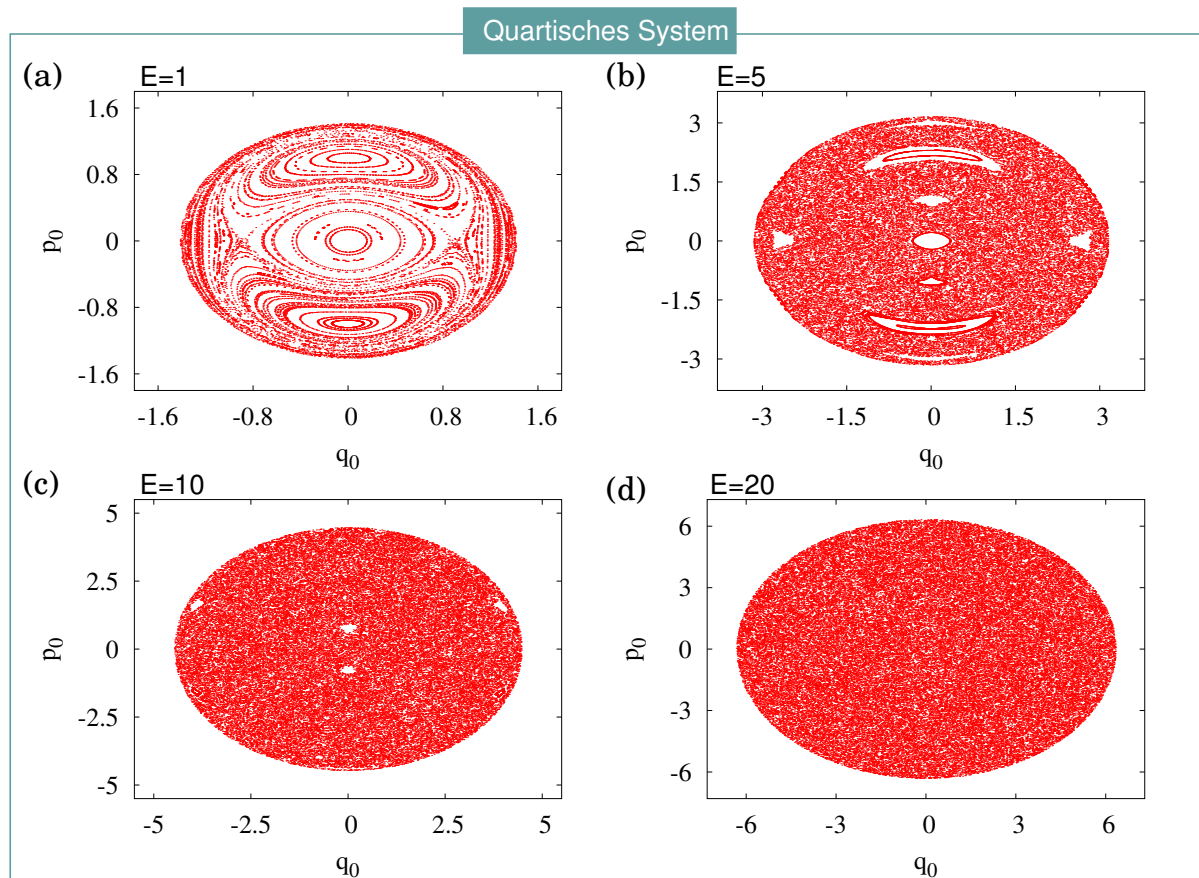
Das System mit quartischem Potential<sup>1</sup> gehört zu den wenigen Beispielen aus der Klasse der Hamiltonschen Systeme, die niedrigdimensional sind und eine chaotische Dynamik aufweisen. Dabei finden sich in der Literatur leicht unterschiedliche Varianten in der konkreten Modellierung [36, 38, 37]. Wir wählen hier die folgende Variante des Hamiltonian:

$$\mathcal{H}_s = \frac{1}{2}(p_0^2 + p_1^2 + q_0^2 + q_1^2 + q_0^2 q_1^2). \quad (5.1)$$

Mit  $(q_0, q_1)$  ist der Satz der Orts- und mit  $(p_0, p_1)$  die zugehörigen kanonisch konjugierten Impulsvariablen bezeichnet. Wie man am Hamiltonian (5.1) sehen kann, handelt es sich um ein sehr einfaches System mit einem vollständig symmetrischen Potential. Der Vorteil gegenüber Systemen, wie z.B. dem Hénon-Heiles-System ist, dass es auch für beliebig große Energien gebunden bleibt. Zusätzlich verhält es sich ab einer genügend großen Energie nahezu vollständig irregulär, d.h. chaotisch. Dies wurde eingehend in Arbeiten, wie z.B. von Carnegie et al. [36] und Steeb et al. [37] für den klassischen Fall und von Pullen et al. [38] auch für den quantenmechanischen Fall untersucht.

In Abb. 5.1 (a) - (d) sind jeweils zu unterschiedlichen Energien Poincaré-Schnitte dargestellt. Für die Gesamtenergie  $E = 1$  ist die beobachtete Dynamik noch vollständig regulär. Ab einer Energie  $E = 5$  ist der Phasenraum bereits gemischt. Man findet reguläre Inseln umgeben von einem chaotischen See. Oberhalb der Energie  $E = 20$  sind mit dem bloßen Auge keine regulären Bereiche mehr auszumachen, die Dynamik ist fast vollständig chaotisch. Nach heutiger Kenntnis ist auch bei vollständiger Irregularität die Existenz von regulären Inseln mit sehr geringer Ausdehnung nicht auszuschließen. Eine Ausnahme bilden die sogenannten Arsonov-Systeme, die über eine hyperbolische Dynamik verfügen. Die hier betrachteten chaotischen Systeme gehören nicht zu dieser Systemklasse.

<sup>1</sup>Im Folgenden vereinfachend als Quartisches System bezeichnet.



**Abbildung 5.1:** Poincaré-Schnitte für das Systems mit quartischem Potential (5.1) zu verschiedenen Energiewerten.

### Gekoppeltes System

Das gekoppelte System, das hier untersucht wird, setzt sich zusammen aus dem oben besprochenen *Quartischen System* und einem langsamen harmonischen Oszillator. Der Gesamthamiltonian dieses Systems weist die folgende Struktur auf:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_l + \frac{1}{\varepsilon} \mathcal{H}_s + \mathcal{H}_k \quad \text{mit} \quad (5.2)$$

$$\mathcal{H}_l = \frac{1}{2}(Q^2 + P^2) \quad (\text{harmonischer Oszillator}) \quad (5.3)$$

$$\mathcal{H}_s = \frac{1}{2}(p_0^2 + p_1^2 + q_0^2 + q_1^2 + q_0^2 q_1^2) \quad (\text{Quartisches System}) \quad (5.4)$$

$$\mathcal{H}_k = \frac{1}{2} \kappa (Q - q_0)^2 \quad (\text{harmonische Kopplung}). \quad (5.5)$$

Die numerischen Simulationen erfolgen hier aus den im Abschnitt 3.3.2 diskutierten Gründen für die reskalierte Energie  $E_r = \frac{E}{\varepsilon}$ . Damit wird sichergestellt, dass ausreichend viel Energie

im Zeitmittel im schnellen Subsystem vorliegt und es nicht regulär wird. Das Ziel ist, wie im Kapitel 3, die numerisch berechneten Drift- und Diffusionskoeffizienten mit den theoretisch vorhergesagten Fokker-Planck-Koeffizienten der reduzierten Bewegungsgleichung (2.36) (s. Kap. 2) zu vergleichen. Dabei ist die Herangehensweise in vielen Punkten ähnlich dem Vorgehen bei den Kubomodellen aus Kapitel 3.

### 5.1.1 Theoretisch vorhergesagte Fokker-Planck-Koeffizienten

Das schnelle System ist in diesem Fall im Gegensatz zu den gekoppelten Kubomodellen chaotisch. Das heißt, dass die im Rahmen des Eliminationsverfahrens abgeleiteten Koeffizienten  $d_0$ ,  $d_1$  (Gl. (2.42)) und die zugehörige Zustandsdichte  $Z^{(0)}$  (Gl. (2.41)) des schnellen Systems nicht analytisch bestimmt werden können, sondern numerisch ausgewertet werden müssen. Aus diesen Koeffizienten setzen sich dann die theoretisch zu erwartenden Drift- und Diffusionskoeffizienten nach Gl. (2.40) und Gl. (2.39) zusammen. Man beachte, dass in die Gleichung zur Bestimmung der Koeffizienten und der Zustandsdichte lediglich das freie chaotische System eingeht. Der Grund hierfür ist, dass die Koeffizienten  $d_0$ ,  $d_1$  und die Zustandsdichte  $Z^{(0)}$  Ausdrücke in der niedrigsten Ordnung in der Störungsrechnung (s. Kapitel 2) darstellen. Für die niedrigste Ordnung aber genügt es, das schnelle Subsystem zur Gesamtenergie  $E$  ohne die Ankopplung an das langsame zu betrachten. Bei genauer Betrachtung dieser Beziehungen erkennt man, dass die Hauptaufgabe in der numerischen Berechnung des Zeitintegrals über die Autokorrelation des schnellen Systems nach  $d_0 = \int_0^\infty \langle q_s(t)q_s(t+t') \rangle^{(0)} dt'$  und der Bestimmung von  $Z^{(0)}$  besteht. Hierbei ist  $q_s$  diejenige schnelle Ortsvariable, über die gekoppelt wird.

In Abb. 5.2 sind die Resultate aus der numerischen Auswertung der besprochenen Koeffizienten dargestellt. Man ersieht aus der Abb. 5.2 (a), dass  $d_0$  in sehr guter Näherung eine linear wachsende Funktion der Energie ist. Durch Extrapolation erhält man den Zusammenhang  $d_0 \approx 0.0252E$ . Unmittelbar daraus resultiert der Koeffizient  $d_1 = \frac{\partial d_0}{\partial E} = 0.0252$ . Die Zustandsdichte lässt sich unter Ausnutzung der Symmetrie des betrachteten Quartischen Systems durch das folgende elliptische Integral ausdrücken (s.a. Anhang B):

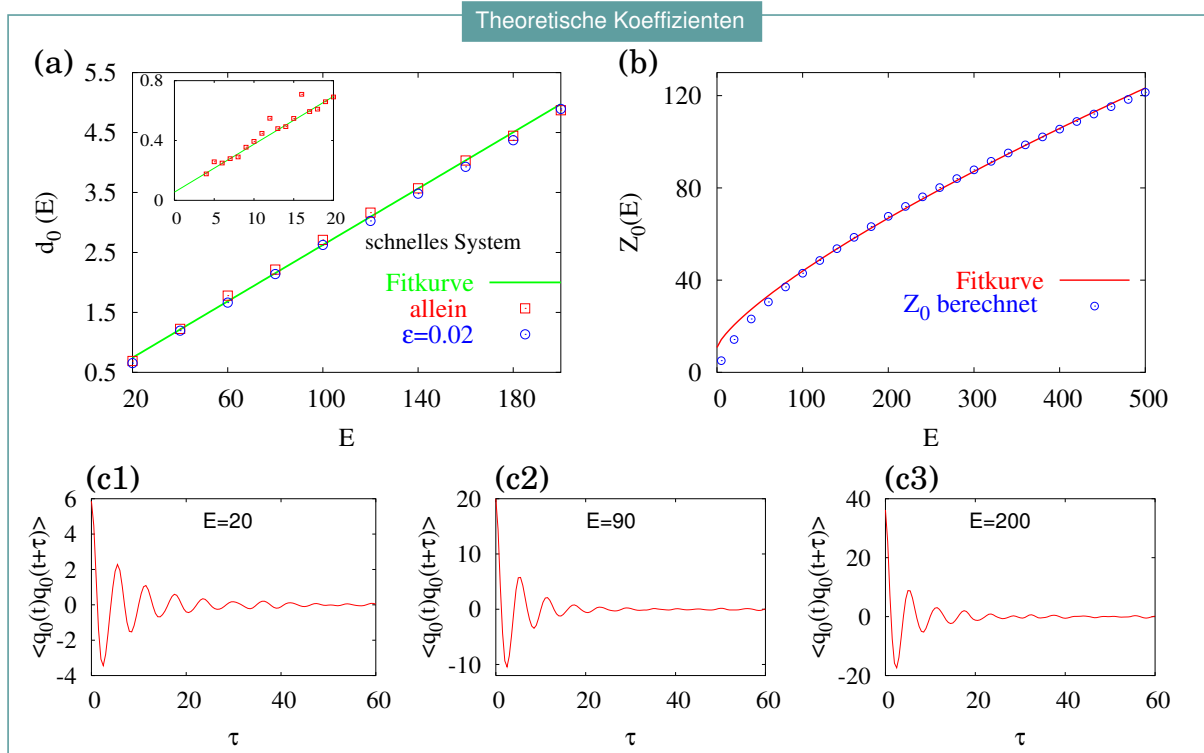
$$Z^{(0)}(E) = \int \delta(E - \mathcal{H}_l) dq_0 dq_1 dp_0 dp_1 = 2\pi \int_0^{\sqrt{2E}} \sqrt{\frac{2E - q_1^2}{1 + q_1^2}}. \quad (5.6)$$

Dieses Integral kann numerisch ausgewertet werden, wodurch man den in Abb. 5.2 (b) dargestellten Zusammenhang zwischen der Zustandsdichte  $Z^{(0)}$  und der Energie  $E$  erhält. Er ist in guter Näherung durch ein Potenzgesetz  $Z^{(0)}(E) \approx 1.58E^{0.7}$  beschreibbar. Damit ergeben sich die nach der Theorie zu erwartenden Dämpfungs- und Diffusionskoeffizienten zu:

$$\tilde{\gamma} = \kappa^2(d_1 + d_0 \frac{\partial \ln Z^{(0)}}{\partial E}) \approx 0.043\kappa^2 \quad (5.7)$$

$$\tilde{D}_{PP}^{(2)}(Q, P) = \kappa^2(d_0 - \varepsilon \tilde{\mathcal{H}}_l d_1) \approx 0.0252\kappa^2(E - \tilde{\mathcal{H}}_l). \quad (5.8)$$





**Abbildung 5.2:** Numerische Auswertung der theoretisch vorhergesagten Koeffizienten (bzw. Zustandssumme) der reduzierte Bewegungsgleichung (2.36) für das Quartische System: (a)  $d_0$  nach Gl. (2.42) für freien (s. Gl. (5.1)) und gekoppelten Fall (s. Gl. (5.2) - (5.5)). Für das isolierte Quartische System: (b) Zustandsdichte  $Z^{(0)}$  nach Gl. (5.6) und (c1) - (c3) schnelle Autokorrelationsfunktion der Ortskoordinate  $q_0$  zu unterschiedlichen Gesamtenergien.

Mit  $\tilde{\mathcal{H}}_l = \frac{1}{2}((1 + \kappa)Q^2 + P^2)$  ist der infolge der Ankopplung veränderte Hamiltonian des langsamen harmonischen Oszillators gemeint. Es tritt eine Renormierung seiner Frequenz  $\Omega_{h1} := (1 + \kappa)$  auf. Der Zusammenhang, der nach Gleichung (5.7) und (5.8) zwischen Dämpfung und Diffusion durch den Koeffizienten  $d_1$  hergestellt wird, stellt eine Fluktuations-Dissipations-Relation dar.

Aus dem Vergleich mit dem Einkubomodell (siehe Kapitel 3) ersieht man, dass die hier auftretende Dämpfung mehr als zehnmal kleiner ist. Im Falle des Einkubosystems war diese durch  $\gamma_{1K} = \varepsilon^2 \tilde{\gamma} = \frac{1}{2} \varepsilon^2 \kappa^2$  (nach Gl. (3.57), Abschnitt 3.3.3) gegeben. Die Dämpfung hier hingegen beträgt  $\gamma_{h1} = \varepsilon^2 \tilde{\gamma} = 0.043 \varepsilon^2 \kappa^2$  und ist damit sehr klein. An dieser Stelle wird deutlich, dass eine numerische Bestimmung der hier auftretenden Dämpfung über die Kramers-Moyal-Koeffizienten auch auf der Basis der verbesserten Gittermethode (nach Gl. (3.62)) wegen ihrer enormen Kleinheit und der unzureichenden Kenntnis der Nullpunktverschiebung unmöglich ist. Die Nullpunktverschiebung der langsamen Ortsvariablen  $Q$  tritt infolge der Ankopplung auf und ist aufgrund der Nichtlinearität des schnellen Systems nicht ohne weiteres bestimmbar. Es sind lediglich Schätzungen möglich.

Auf einen Aspekt soll hier noch näher eingegangen werden. In der Theorie wird zur Bestimmung des Koeffizienten  $d_0$  lediglich die Autokorrelation des isolierten chaotischen Systems betrachtet. Man geht hierbei davon aus, dass auch im gekoppelten Fall die schnellen Korrelationen in ähnlicher Weise zerfallen. Die Frage ist, ob diese Annahme richtig ist? Zur Beantwortung dieser Frage wurde  $d_0$  ein zweites Mal berechnet, diesmal mittels der Autokorrelation des gekoppelten *Quartischen Systems*. Die auf diese Weise gewonnenen Werte stimmen gut mit denen überein, die man für  $d_0$  im ungekoppelten Fall ermittelt hat (siehe Abb. 5.2 (a)).

Eine weitere interessante Beobachtung ist, dass auch im Energieintervall zwischen  $E = 5$  und  $E = 20$ , in welchem der Phasenraum gemischt ist, näherungsweise eine lineare Beziehung zwischen  $d_0$  und der Energie  $E$  (siehe Abb. 5.2 (a)) gefunden wird. Mit dieser wird das lineare Verhalten aus dem Energiebereich, bei dem eine nahezu vollständig chaotische Dynamik vorliegt, fortgesetzt.

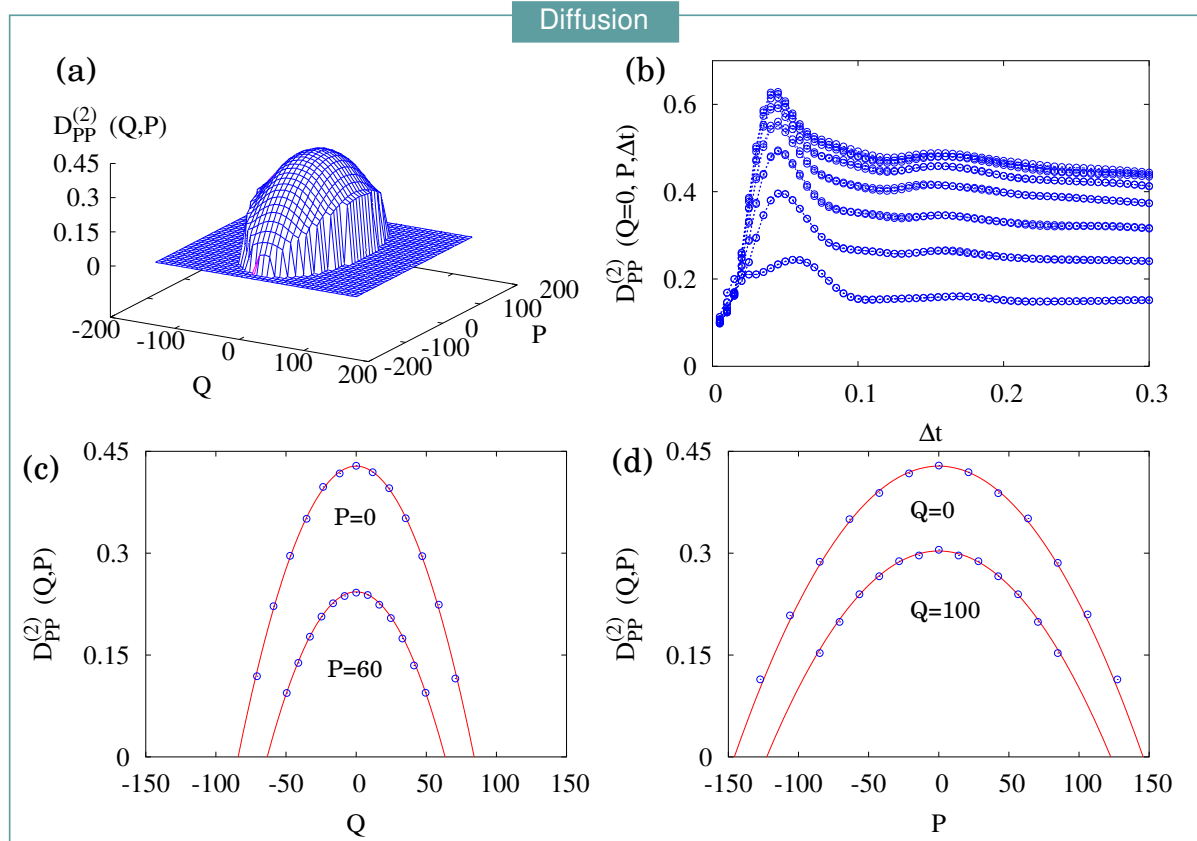
Um Einblick in den Zerfallsprozess der Autokorrelationen im Quartischen System (isoliert) zu erhalten, sind in Abb. 5.2 (c1) - (c3) zu drei unterschiedlichen Energiewerten ( $E = 20, 90$  und  $200$ ) die Autokorrelationsfunktionen der Ortsvariable  $q_0$  in Abhängigkeit von der Zeit  $\tau$  aufgetragen. In allen drei Fällen ist der Korrelationszerfall begleitet von Oszillationen. Diese sind für große Energien, wie z.B.  $90$  und  $200$ , schwächer ausgeprägt. Der Grund ist die wachsende Irregularität der Dynamik des Quartischen Systems mit zunehmender Gesamtenergie (siehe Poincaré-Schnitte 5.1). Dies wiederum ist der Grund für einen verbesserten Zerfall der Korrelationen.

### 5.1.2 Numerisch: Diffusionsbestimmung

Für das gekoppelte Quartische System ist die Dämpfung aufgrund ihrer enormen Kleinheit nicht direkt über die Kramers-Moyal-Koeffizienten bestimmbar. Die Diffusion ist im Gegensatz dazu durch eine geeignete Wahl der Energie weiterhin groß genug, um durch das Verfahren nach Siebert et al. [21] und Ragwitz et al. [22] (siehe Gl. (3.60), Abs. 3.4) ermittelt zu werden. Hier betrachten wir das durch die Gittermethode modifizierte Verfahren. Diese Methode hatten wir zuvor erfolgreich für die Kubomodelle aus Kapitel 3 angewendet. In Abb. 5.3 sind die numerischen Berechnungen zur Diffusionskomponente  $D_{PP}^{(2)}$  im Überblick dargestellt. Auf die Darstellung der anderen Komponenten der zugehörigen Diffusionsmatrix (3.38) wurde verzichtet, da sie sich gemäß der Theorie zu Null ergeben. Die Übereinstimmung zwischen theoretisch vorhergesagter und der tatsächlich beobachteten Diffusion ist nahezu perfekt. Dies wird durch Diffusionsquerschnitte parallel zur  $Q$ - und  $P$ -Achse in Abb. 5.3 (c) und (d) bestätigt.

Die abrupten Abfälle an den Rändern der drei-dimensionalen Darstellung der Diffusionskomponente  $D_{PP}^{(2)}$  sind unphysikalisch. Sie sind auf die Unzulänglichkeiten der Gittermethode für die Randwerte zurückzuführen. In diesem Bereich ist eine ausreichend genaue Bestimmung der Diffusion durch die Gittermethode nicht mehr gewährleistet.

Eine Auffälligkeit sticht in Abb. 5.3 (d) ins Auge: Man findet bei den numerisch berechneten Diffusionskurven zu  $D_{PP}^{(2)}$  mit wachsender Zeitdifferenz  $\Delta t$  eine leicht abfallende Tendenz. Jede der dargestellten Kurven ergibt sich hier durch Auswerten des Diffu-



**Abbildung 5.3:** Diffusion des langsamen harmonischen Oszillators: Numerisch berechnete Diffusionskomponente  $D_{PP}^{(2)}$  mit Hilfe des empirischen Verfahrens (s. Gl. (3.60) (in Kombination mit Gittermethode) bei Simulation des vollgekoppelten Quartischen Systems (s. Gl. (5.2) - (5.5)): (a) als Funktion von  $Q$  und  $P$ , (b) in Abhängigkeit von der Zeitdifferenz  $\Delta t$  nach Gl. (3.60). In (c) und (d) Schnitte von (a): rote Linien: theoretische Vorhersage und blaue Kreissymbole: numerisch bestimmte Werte  $D_{PP}^{(2)}$ . Parameter für (a) - (d):  $\varepsilon = 0.02$ ,  $\kappa = 2$  und  $E = 200$ .

sionskoeffizienten zu unterschiedlichen Werten des langsamen Impulses  $P$  bei fest vorgebener Ortsvariable  $Q = 0$ . Der Abfall rührt von den höheren Korrekturtermen her, die in der Kramers-Moyal-Entwicklung im Rahmen des Verfahrens nach Ragwitz et al. [22] vernachlässigt werden. Sie gewinnen mit zunehmender Zeitdifferenz  $\Delta t$  an Einfluss. Ihre Vernachlässigung ist dennoch vertretbar, da die Diffusionskoeffizienten für möglichst kleine Werte von  $\Delta t$  bestimmt werden. In diesem Bereich fallen die Korrekturen nicht ins Gewicht.

### 5.1.3 Abweichungen von der Theorie

Wie eingangs gesagt, lassen sich eine Reihe von Analysen analog zum Kapitel 3 durchführen. Eine in diesem Zusammenhang interessante Untersuchung betrifft die Abweichungen, die

gegenüber der theoretischen Vorhersage des Eliminationsverfahrens bei systematischer Variation des Zeitskalenparameters  $\varepsilon$  bzw. der Kopplungsstärke  $\kappa$  beobachtet werden. Diesen Aspekt hatten wir zuvor am Beispiel des Einkubomodell im Kapitel 3 untersucht. Es stellt sich also die Frage: Wie fallen die Diskrepanzen zur Theorie im Fall von echtem Hamiltonschem Chaos im Vergleich zum stochastischen Einkubomodell aus? Man könnte vermuten, dass diese Diskrepanzen größer ausfallen, da im Einkubomodell bereits optimale Zerfallseigenschaften der Korrelationen im schnellen Subsystem vorliegen. Der Grund hierfür ist das einkoppelnde weiße Rauschen im schnellen Kubo-Oszillator. Die zugehörigen Korrelationen zerfallen auf einer sehr kurzen Zeitskala exponentiell. Zur Untersuchung dieser Frage wurde die Abweichung wie im Fall des Einkubosystems mit Hilfe der numerisch verhältnismäßig einfach bestimmbar Diffusionskomponente  $D_{PP}^{(2)}$  zu  $Q = 0$  ermittelt. Das Ergebnis findet sich in Abb. 5.4 (a) - (b) wieder.

Es zeigt sich, dass auch hier im wesentlichen ein linearer Zusammenhang zwischen der ermittelten Abweichung  $\Delta D_{PP}^{(2)}$  und den Parametern  $\varepsilon$  (siehe (a)) und  $\kappa$  (siehe (b)) auftritt. Dieses Ergebnis steht im Einklang mit dem Pseudo-Hamiltonschen Fall (vergleiche Abb. 3.3, Abs. 3.4.2). Auch im chaotischen Fall gelangt man also zu dem Schluss, dass eine ausgeprägte Zeitskalentrennung die Voraussetzung für die Anwendung der Eliminationsmethode bildet. Das ist, da zu ihrer Ableitung eine Störungsentwicklung in Ordnungen des Zeitskalenparameters  $\varepsilon$  vorgenommen wird, auch nicht anders zu erwarten.

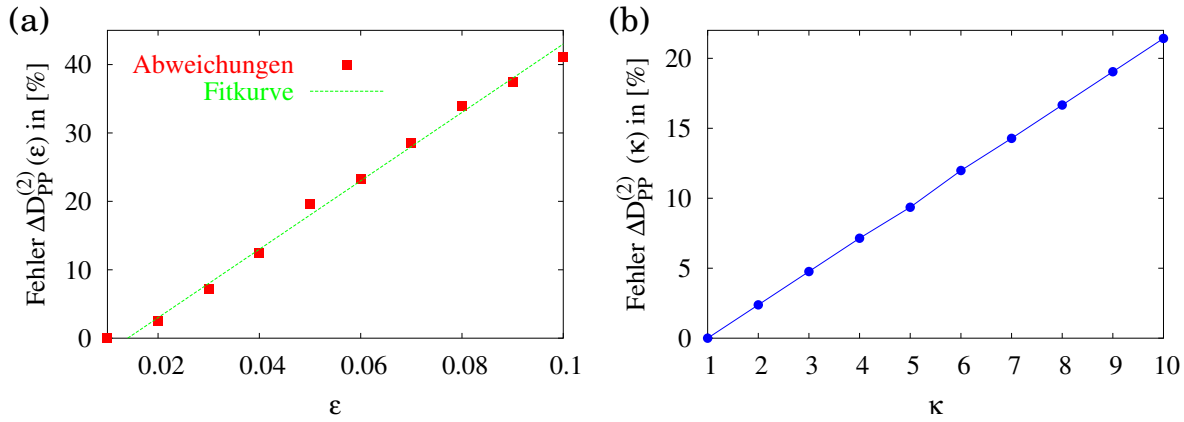
Im Fall des Quartischen Systems ist speziell zu beachten, dass der Parameter der Zeitskalentrennung nicht größer als  $\varepsilon = 0.05$  wird, da ansonsten der Fehler die 15%-Grenze übersteigt. Im Gegensatz dazu hängen die Abweichungen weniger empfindlich von der Kopplungsstärke ab, wie auch schon im Fall des Einkubomodells (siehe Abb. 3.3, Abs. 3.4.2). Beispielsweise liegt der prozentuale Fehler bei einer Kopplungsstärke von  $\kappa = 5$  (mit  $\varepsilon = 0.01$ ) unterhalb von 10%. Bei einer genaueren Gegenüberstellung der Resultate für das Einkubosystem und das gekoppelte Quartische System ergibt sich, dass die Abweichungen hinsichtlich der theoretischen Vorhersage nach dem Eliminationsverfahren im chaotischen Fall geringfügig (um 1% bis 2%) größer ausfallen, als im Fall des idealisierten stochastischen Modellsystems. Zu diesem Ergebnis gelangt man beim Vergleich der entsprechenden Resultate nach Abb. 3.3 und Abb. 5.4.

### 5.1.4 Lyapunov-Exponenten

Eine naheliegende Frage, die sich beim Vergleich zwischen Kubo-System und Quartischem System unmittelbar ergibt, ist die nach den Lyapunov-Exponenten. Wie variiert der maximale Lyapunov-Exponent des schnellen Quartischen Systems in Abhängigkeit von Systemparametern wie etwa dem Zeitskalenparameter  $\varepsilon$ , der Kopplungsstärke  $\kappa$  oder der Energie  $E$ ?

Allgemein ist der Lyapunov-Exponent ein Maß für die Geschwindigkeit, mit der sich zwei anfangs benachbarte Trajektorien voneinander entfernen:

$$\lambda = \limsup_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \ln |\delta \mathbf{x}(t)| \quad \text{mit} \quad \frac{d}{dt} \delta \mathbf{x}(t) = \left. \frac{\partial F}{\partial \mathbf{x}} \right|_{\delta \mathbf{x}_r(t)} \delta \mathbf{x}(t) \quad (5.9)$$

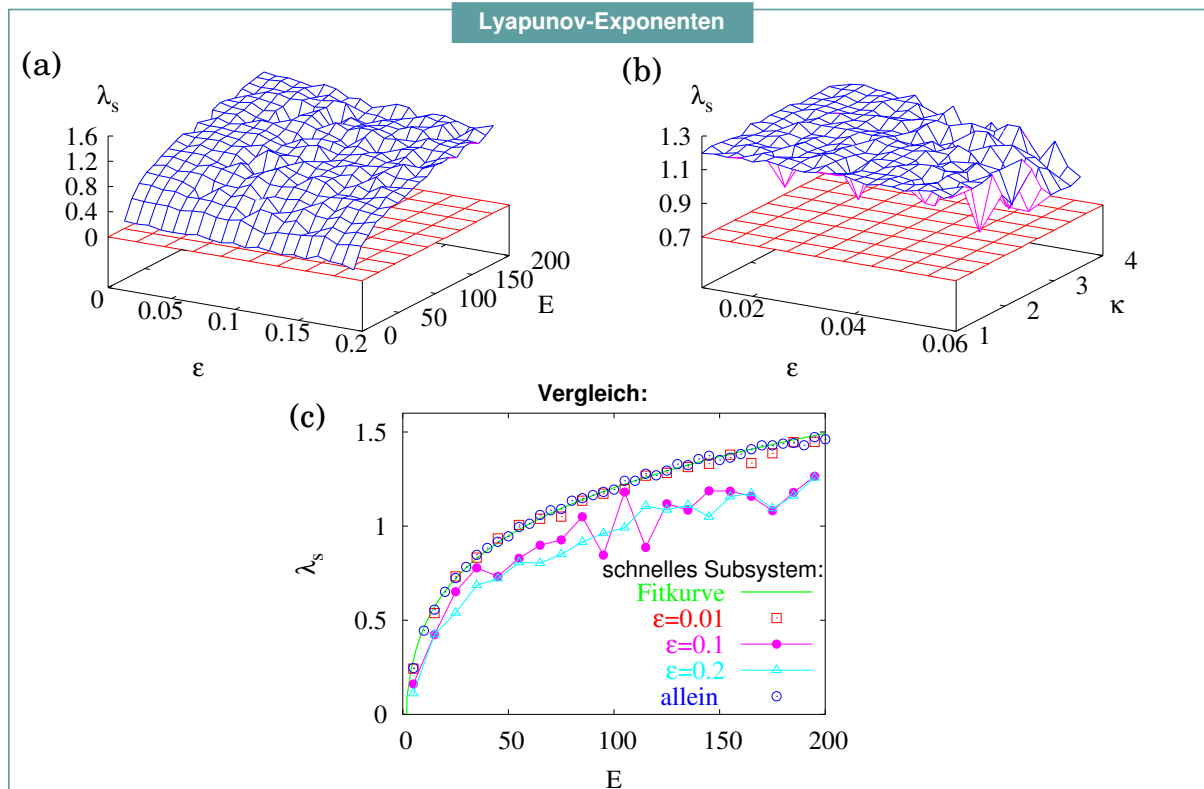


**Abbildung 5.4:** Abweichungen zwischen theoretisch vorhergesagter und mittels des empirischen Verfahrens nach Gl. (3.60) ermittelter Diffusionskomponente  $\Delta D_{PP}^{(2)}$  des harmonischen Osz. bei Ankopplung des Quartischen Systems: (a) in Abhängigkeit vom Zeitskalenparameters  $\epsilon$  und (b) in Abhängigkeit von der Kopplungsstärke  $\kappa$ . Parameter: (a)  $\kappa = 1$ , (b)  $\epsilon = 0.01$  und  $E = 400$  in beiden Fällen.

Hierbei bezeichnet  $\delta \mathbf{x}(t) = \mathbf{x} - \mathbf{x}_r$  den Abstand zwischen der betrachteten Systemtrajektorie  $\mathbf{x}$  zu einer gewählten Referenztrajektorie  $\mathbf{x}_r$ . Die zugehörige Jacobi-Matrix ist mit  $\partial F / \partial \mathbf{x} |_{\delta \mathbf{x}_r(t)}$  gegeben.

Abbildung 5.5 zeigt zusammenfassend die Ergebnisse dieser Untersuchung. Eine erste interessante Beobachtung lässt sich anhand der Abb. 5.5 (b) machen. Hier ist zu unterschiedlichen Paarungen von Zeitskalenparametern  $\epsilon$  und Kopplungsstärken  $\kappa$  bei fest gewählter Gesamtenergie der maximale Lyapunov-Exponent des schnellen Quartischen Systems berechnet worden. Auffällig ist der signifikante Einbruch des positiven Lyapunov-Exponenten bei abnehmender Zeitskalentrennung und bei vergleichsweise starker Kopplung. Außerhalb dieses Bereichs findet man ein nahezu ebenes Plateau, wo der Lyapunov-Exponent durchgehend den konstanten Maximalwert von  $\lambda_s \approx 1.2$  aufweist. Im Bereich des Einbruches hingegen geht der Wert bis auf nahezu  $\frac{2}{3}$  dieses maximalen Wertes zurück. Demzufolge wirkt sich eine schwache Trennung von schneller und langsamer Zeitskala verbunden mit einer starken Kopplung nachteilig auf die *Irregularität* des schnellen Teilsystems aus. Dies lässt sich verstehen, wenn man bedenkt, dass der langsame harmonische Oszillator mit abnehmender Zeitskalentrennung und zunehmender Kopplung zusehends stärker in die chaotische Dynamik eingreift. Da dieser im isolierten Zustand regulär ist, kann er zusätzliche Korrelationen in das schnelle System einbringen.

Der zweite wesentliche Aspekt ist, wie sich der Übergang von regulärer zu chaotischer Dynamik - gemessen am maximalen Lyapunov-Exponenten - im schnellen System vollzieht, der durch die zur Verfügung stehende Energie reguliert wird (siehe Abb. 5.1). Die Abbildung 5.5 (a) zeigt den maximalen Lyapunov-Exponent im schnellen Teilsystem bei systematischer Variation sowohl des Parameters  $\epsilon$  als auch der Energie  $E$ . Man beobachtet, wie erwartet, einen deutlichen Anstieg des Lyapunov-Exponenten mit wachsender Energie



**Abbildung 5.5:** Maximaler Lyapunov-Exponenten des Quartischen Systems  $\lambda_s$  bei Variation: (a) des Zeitskalenparameter  $\varepsilon$  und der Energie  $E$  bei fester Kopplungsstärke  $\kappa = 1$ , (b) des Zeitskalenparameter  $\varepsilon$  und der Kopplungsstärke  $\kappa$  bei fester Energie  $E = 200$  und (c) in Abhängigkeit der Energie  $E$  sowohl für den freien als auch für den gekoppelten Fall (verschiedene  $\varepsilon$ ) bei fester Kopplungsstärke  $\kappa = 1$ . (Bei dem gekoppelten Quartischen System ist immer die im zeitlichen Mittel vorliegende Energie gemeint.)

$E$  und zwar nahezu unabhängig vom Zeitskalenparameter  $\varepsilon$ . In der Abb. 5.5 (c) wird diese Tendenz besonders deutlich sichtbar. Hier fällt der Anstieg anfangs bis zu einer Energie von  $E = 50$  sehr steil aus, während er danach abflacht. Dies lässt sich verstehen, wenn wir uns die Poincaré-Schnitte 5.1 zu Beginn dieses Abschnittes ins Gedächtnis zurückrufen. Ab einer Energie von  $E = 20$  ist der Phasenraum vollständig durchsetzt von irregulären Punkten. Die anfänglich existierenden regulären Bereiche waren im Zuge der Energieerhöhung verschwunden. Genau das muss die Ursache für diesen Kurvenverlauf sein. Ab einer bestimmten Energie sind die regulären Regionen soweit geschrumpft, dass das System durch größere Energiezufuhr nur unwesentlich irregulärer wird. Dies schlägt sich im schwächeren Anwachsen des positiven Lyapunov-Exponenten nieder.

Zusätzlich ist hier der Lyapunov-Exponent des ungekoppelten Quartischen Systems in Abhängigkeit mit der Energie berechnet worden. Aus dem Vergleich wird ersichtlich, dass für eine Zeitskalentrennung von  $\varepsilon \leq 0.05$  das dynamische Verhalten des gekoppelten und

des ungekoppelten schnellen Systems quasi ununterscheidbar ist. Für eine abnehmende Zeitskalentrennung wird der beschriebene Verlauf tendenziell beibehalten. Allerdings ist er überlagert von Schwankungen und insgesamt weniger steil. In diesem Parameterbereich macht sich also der negative Einfluss der langsamen Dynamik auf das chaotische Verhalten des schnellen Teilsystems bemerkbar. Aus der Regression für den Bereich  $\varepsilon \leq 0.05$  kann die folgende Beziehung  $\lambda_s(E) \approx E^{0.175} - 1.035$  extrapoliert werden.

### 5.1.5 Kurz- und Langzeitverhalten

In diesem Abschnitt wollen wir das Kurz- und Langzeitverhalten des langsamen harmonischen Oszillators bei Ankopplung des Quartischen Systems untersuchen. Es soll geklärt werden, inwieweit die reduzierte Bewegungsgleichung, die aus dem Eliminationsverfahren gewonnen wird, für kurze Zeiten und auch im Langzeitlimites Gültigkeit behält. Diese Fragestellung wurde zuvor für das stochastische Einkubo- bzw. Zweikubomodell im Kapitel 3 behandelt. Für diese Systeme konnte eine sehr gute Vorhersage sowohl des Langzeit- als auch des Kurzzeitverhaltens auf der Basis der zugehörigen reduzierten Bewegungsgleichung erzielt werden. Das Vorgehen im Folgenden ist analog, d.h. es werden die Momente, die Autokorrelation und schließlich die reduzierte stationäre Dichte analysiert.

#### Zeitliches Verhalten: Momente

Durch Einsetzen der ermittelten Fokker-Planck-Koeffizienten (5.7) und (5.8) in die allgemein formulierte Gl. (2.36) aus Kapitel 2 ergibt sich die reduzierte Bewegungsgleichung des langsamen harmonischen Oszillators, welcher an das schnelle Quartische System gekoppelt ist. Ausgehend von dieser Bewegungsgleichung gewinnt man in derselben Weise wie im Fall des Einkubomodells (siehe Gl. (3.63) - (3.67), Abs. 3.5) ein gekoppeltes Differentialgleichungssystem für die ersten Momente

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle Q \rangle(t) = \langle P \rangle \quad (5.10)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle P \rangle(t) = -\Omega_{h1} \langle Q \rangle - \gamma_{h1} \langle P \rangle \quad (5.11)$$

und für die zweiten Momente

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle Q^2 \rangle(t) = 2 \langle QP \rangle \quad (5.12)$$

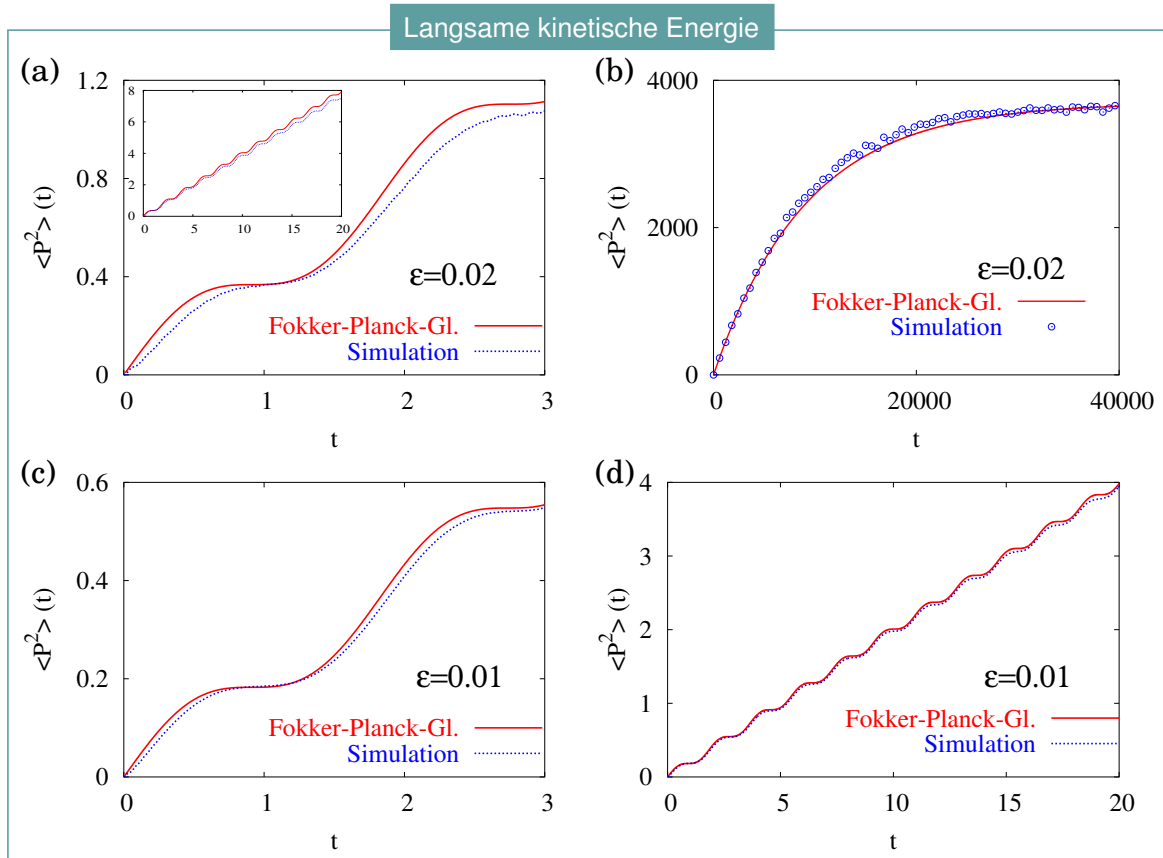
$$\frac{\partial}{\partial t} \langle QP \rangle(t) = -\Omega_{h1} \langle Q^2 \rangle - \gamma_{h1} \langle QP \rangle + \langle P^2 \rangle \quad (5.13)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle P^2 \rangle(t) = -\varepsilon \mu_{h1} \langle Q^2 \rangle - 2\Omega_{h1} \langle QP \rangle - (2\gamma_{h1} + \varepsilon \mu_{h1}) \langle P^2 \rangle + 2\mu_{h1} \frac{E}{\varepsilon} \quad (5.14)$$

mit

$$\Omega_{h1} := (1 + \kappa) \quad (5.15)$$

$$\gamma_{h1} := 0.043\kappa^2\varepsilon^2 \quad \text{und} \quad \mu_{h1} := 0.0252\kappa^2\varepsilon. \quad (5.16)$$



**Abbildung 5.6:** Vergleich theoretisch vorhergesagter und durch numerische Simulation berechneter Zeitentwicklung der langsamen kinetischen Energien  $\langle P^2 \rangle$  des harmon. Osz. bei Ankopplung mit Quartischen System: (a) Kurzzeitverhalten bis  $t = 3$  bzw.  $t = 20$  und (b) Langzeitverhalten: bis  $t = 40000$ . Anfangsbedingung:  $Q_0 = P_0 = 0$ , Parameter:  $\varepsilon = 0.02$ ,  $\kappa = 2$ ,  $E = 200$ . Für ausgeprägtere Zeitskalentrennung  $\varepsilon = 0.01$ : (a) bis  $t = 3$  und (b) bis  $t = 20$  (sonstige Parameter wie vorher).

Hierbei ist  $\Omega_{h1}$  gerade die renormierte Frequenz des langsamen harmonischen Oszillators,  $\gamma_{h1}$  die Dämpfungs- und  $\mu_{h1}$  der Diffusionsfaktor im Falle des Quartischen Systems nach Gl. (5.7) - (5.8).

In Abbildung 5.6 wird das in direkter Beziehung zur kinetischen Energie stehende Moment  $\langle P^2 \rangle$  für unterschiedlich lange Zeiträume berechnet. Als Anfangsbedingung ist stets  $Q_0 = P_0 = 0$  gewählt. Im Vordergrund steht hier der Vergleich der zeitlichen Entwicklung zwischen dem durch Simulation und statistische Mittelung gewonnenen und dem auf Grundlage der Fokker-Planck-Gleichung abgeleiteten Moment  $\langle P^2 \rangle$ .

In der Abb. 5.6 (a) ist das Kurzzeitverhalten bei einem Zeitskalenparameter von  $\varepsilon = 0.02$  dargestellt. Aus dieser Abbildung geht hervor, dass die dynamische Zeitentwicklung der betrachteten langsamen Observablen  $\langle P^2 \rangle$  gut durch die theoretisch prognostizierte Entwicklung beschrieben ist.



Die Übereinstimmung ist allerdings wie in Abb. 5.6 (a) deutlich zu sehen nicht vollkommen. In der Abb. 5.6 (c), bei der lediglich der Zeitskalenparameter  $\varepsilon$  halbiert wurde, fallen die Abweichungen geringer aus. Das bedeutet, dass sich der Fehler mit zunehmender Zeitskalentrennung verringert. Aus Abb. 5.2 entnehmen wir, dass die Korrelationen im betrachteten System für  $\tau \approx 50$  zerfallen sind, d.h. auf der langsamen Zeitskala geschieht dies für  $\varepsilon = 0.02$  nach einem Zeitraum von  $\tau_l = 1$ . Die Diskrepanzen sind also durch Markov-Verletzungen zu erklären und können durch Vergrößerung der Zeitskalentrennung abgeschwächt werden. Dieses Ergebnis wird durch die Resultate in Abs. 5.1.3 unterstützt.

Der lineare Anstieg in all den bisher erwähnten Abbildungen ist überlagert von periodischen Oszillationen. Der Grund hierfür ist, wie im Falle des Einkubosystem, in der periodischen Dynamik des harmonischen Oszillators zu suchen. Die Periode dieser Oszillationen entspricht in guter Näherung der renormierten Frequenz  $\Omega_{h1}$ .

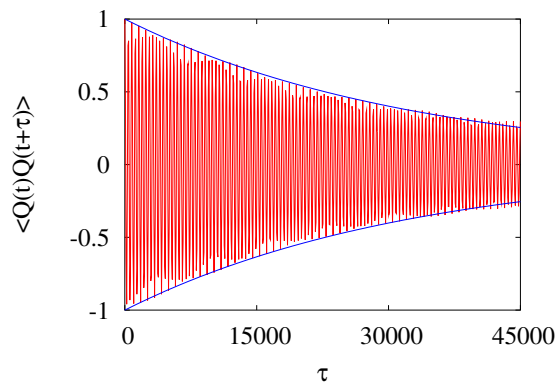
Geht man nun zu sehr großen Zeiträumen wie in Abb. 5.6 (b) über, dann sättigt die bisher linear anwachsende Kurve von  $\langle P^2 \rangle$  bei ungefähr 30000 Zeiteinheiten. Dies ist in Anbetracht der Energieerhaltung und der zugehörigen Fluktuations-Dissipations-Relation zu erwarten. Die kinetische Energie  $\langle P^2 \rangle$  kann in einem konservativen System nicht beliebig anwachsen.

Anhand dieser Langzeitberechnung wird nachgewiesen, dass das Eliminationsverfahren auch das Langzeitverhalten richtig reproduziert. Man findet in diesem Falle eine gute Übereinstimmung zwischen theoretisch vorhergesagter und beobachteter Entwicklung der kinetischen Energie  $\langle P^2 \rangle$  des reduzierten Oszillatorsystems. Die Abweichungen, die hier auftreten, sind wiederum auf Effekte höherer Ordnung in  $\varepsilon$  zurückzuführen. Bei einer ausgeprägteren Zeitskalentrennung verringern sie sich, genau wie wir es bereits beim Kurzzeitverhalten gesehen haben.

Wichtig ist hierbei, dass zur numerischen Berechnung einer langsamen Größe, wie z.B. der kinetischen Energie  $\langle P^2 \rangle$ , für einen Zeitraum von 40000 langsamen Zeiteinheiten (Abb. 5.6 (b)) auf der Basis der Simulation des voll gekoppelten Systems ungefähr eine Woche benötigt wird. Dies ist erforderlich, um im ausreichenden Maße statistische Mittelungen vorzunehmen. Dem gegenüber bedarf die numerische Integration des gekoppelten Differential-Gleichungssystems (5.10) - (5.13) zur Vorhersage von  $\langle P^2 \rangle$  für denselben langsamen Zeitraum weniger als drei Minuten. Dieses Gleichungssystem wurde auf der Grundlage der reduzierten Bewegungsgleichung gewonnen. Aus diesem einfachen Vergleich wird der große Vorzug des Eliminationsverfahrens bei Langzeitvorhersagen gegenüber der konventionellen Herangehensweise ersichtlich.

### Zeitliches Verhalten: Autokorrelation

Es ist hierbei interessant, sich auch die langsame Autokorrelationsfunktion des reduzierten Oszillatorsystems für die Ortsvariable anzusehen. Diese hatten wir bereits im Zusammenhang mit den stochastischen Kubomodellen (s. Kap. 3) diskutiert. Auf der Grundlage des gekoppelten Gleichungssystems der ersten Momente (5.10) - (5.11) kann, wie auch im Falle der Kubomodelle, der Zerfall der langsamen Autokorrelationsfunktion vorhergesagt werden. Dazu muss zuvor dieses Gleichungssystem für die Autokorrelationen reformuliert



**Abbildung 5.7:** Langsame Autokorrelationsfunktion (normiert) des harmonischen Oszillators bei Ankopplung des schnellen Quartischen Systems. Einhüllende (blaue Linien): gemäß der Theorie vorhergesagter Zerfall unter Berücksichtigung des numerischen Wertes von  $\gamma_{h1}$ . (Parameter  $\varepsilon = 0.02$ ,  $\kappa = 2$ ,  $E = 400$ ).

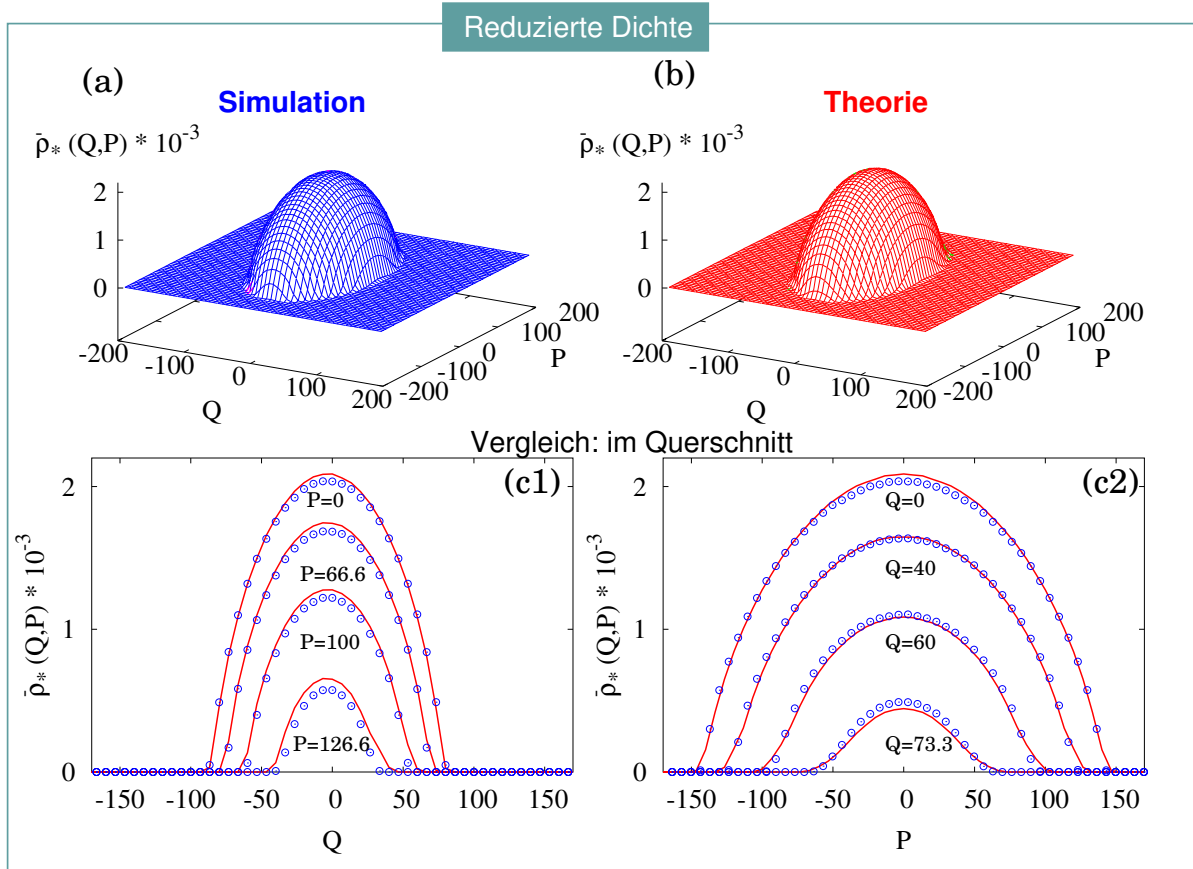
werden. Die Struktur dieser Gleichungen bleibt davon unberührt.

In Abbildung 5.8 ist die langsame Autokorrelationsfunktion  $\langle Q(t)Q(t+\tau) \rangle$  für die langsame Ortsvariable (des harmonischen Oszillators) numerisch bestimmt worden. Die aufgetragene Einhüllende (blaue Linien) entspricht der theoretischen Vorhersage ihres Zerfalls. Dieser ist hier durch  $\exp(-\frac{1}{2}\gamma_{h1}\tau)$  festgelegt. Wie man aus der Abb. 5.8 ersieht, erweist sich diese Vorhersage als richtig.

### Langzeitverhalten: Reduzierte stationäre Dichte

Im Extremfall einer unendlich großen Zeitdauer nimmt das reduzierte System den asymptotisch angestrebten Zustand der stationären Dichte an (falls dieser existiert). Daraus ergibt sich die Frage, ob das Eliminationsverfahren auch diesen Grenzfall des Langzeitverhaltens richtig vorhersagen kann. Abbildung 5.8 zeigt die stationäre Dichte. In Abb. 5.8 (a) und (b) des langsamen harmonischen Oszillators, welche man aus der Simulation des gekoppelten Quartischen Systems erhält, derjenigen, die man durch numerische Integration der Langevin-Gleichung gewinnen kann, in Form von dreidimensionalen Graphiken gegenübergestellt. Die Darstellung der reduzierten Bewegungsgleichungen in Gestalt der Fokker-Planck-Gleichung ist äquivalent zu einer Darstellung entsprechend einer Langevin-Gleichung.

Bereits aus dieser Gegenüberstellung lässt sich eine sehr gute Übereinstimmung erahnen. Besser erkennt man dies jedoch anhand der vergleichenden Abbildungen 5.8 (c1) und (c2). Hier sind Querschnitte parallel zur  $Q$ - und  $P$ -Achse durch die stationären Dichten erstellt worden. In diesen Querschnitten sind sowohl die theoretisch zu erwartenden als auch die numerisch berechneten Werte der reduzierten Dichte zu unterschiedlichen  $P$ - bzw.  $Q$ -Werten aufgetragen. Es wurde eine ausgeprägte Zeitskalentrennung mit  $\varepsilon = 0.02$  und eine Kopplungsstärke von  $\kappa = 2$  für die Berechnungen gewählt. Die numerisch be-



**Abbildung 5.8:** Asymptotischer Grenzfall des Langzeitverhaltens: (Reduzierte) stationäre Dichte des langsamen harmonischen Oszillators (gekoppelt an das Quartische System): (a) Simulation (des vollen Systems), (b) Theorie, (c1) - (c2) Vergleich im Querschnitt (rote Linien: theoretische Vorhersage, blaue Kreissymbole: numerisch bestimmte Werte). Parameter  $\varepsilon = 0.02$ ,  $\kappa = 2$ ,  $E = 200$ .

rechneten Werte der stationären Dichte (blaue Kreissymbole) des vollen Systems liegen nahezu perfekt auf den theoretisch vorhergesagten Kurven (rote durchgezogene Linien). Diese Kurven ergeben sich nach der reduzierten Bewegungsgleichung (2.36) ausgewertet für die Koeffizienten Gl. (5.7) - (5.8).

Eine ähnlich gestaltete reduzierte stationäre Dichte haben wir im Falle des stochastisch angetriebenen Zweikubomodells gefunden. In beiden Fällen ist der schnelle Phasenraum vierdimensional und das langsame System ist der harmonische Oszillator. Die Ursache für diese Ähnlichkeit ist in einem ähnlichen Verhältnis von Dämpfungs- und Diffusionsfaktor begründet. Sie ergibt sich im Falle des Zweikubomodells nach Gl. (3.79) zu

$$\Xi_{2K} := \frac{\gamma_{2K}}{\varepsilon \mu_{2K}} = \frac{\varepsilon^2 \kappa^2}{0.5 \varepsilon^2 \kappa^2} = 2. \quad (5.17)$$

Für das gekoppelte Quartische System erhält mit den Beziehungen aus Gl. (5.15) das

folgende Verhältnis:

$$\Xi_{h1} := \frac{\gamma_{h1}}{\varepsilon\mu_{h1}} = \frac{0.043\kappa^2\varepsilon^2}{0.0252\kappa^2\varepsilon^2} = 1.7. \quad (5.18)$$

Wie man sieht, liegen die berechneten Verhältnisse nahe beieinander. Ein ähnliches Verhältnis von Dämpfungs- und Diffusionsfaktor ist die Folge einer ähnlich gestalteten Fluktuations-Dissipations-Relation.

### Zusammenfassende Bemerkungen

Die gute Vorhersage sowohl des Kurzzeit- als auch des Langzeitverhaltens des langsamen harmonischen Systems bei Ankopplung mit dem Quartischen System kann als starkes Indiz für die Anwendbarkeit der Markov-Approximation gedeutet werden. Obwohl die Dynamik des Quartischen Systems nicht hyperbolisch ist, liefert diese Approximation die richtige Beschreibung. Die Untersuchungen an Beispielen von gekoppelten symplektischen Abbildungen aus Kapitel 4 deuten bereits auf ein derart positives Ergebnis hin. Anhand des betrachteten Systems bestehend aus langsamen harmonischen Oszillator und schnellen Quartischen System kann es hier bestätigt werden.

## 5.2 Hénon-Heiles-Modell als schnelles Subsystem

Das weitaus bekannteste Modell, das niedrigdimensionales Hamiltonsches Chaos aufweist, ist 1964 von Hénon und Heiles eingeführt worden [40]. Es wurde ursprünglich entwickelt, um die Bewegung eines Sternes in einem zylindrisch geformten galaktischen Potential zu untersuchen. Man betrachtete hauptsächlich die dynamische Entwicklung für sehr lange Zeiträume. Die zugehörige Hamilton-Funktion weist die folgende Gestalt auf:

$$\mathcal{H}_s = \frac{1}{2}(p_0^2 + q_0^2 + p_1^2 + q_1^2) + q_0^2 q_1 - \frac{1}{3} q_1^3. \quad (5.19)$$

Das Hénon-Heiles-System besteht also aus zwei gekoppelten harmonischen Oszillatoren, wobei die Kopplung über kubische Koordinatenterme erfolgt. Die besondere Struktur des korrespondierenden Potentials

$$V_s = \frac{1}{2}(q_0^2 + q_1^2 + 2q_0^2 q_1 - \frac{2}{3} q_1^3) \quad (5.20)$$

ermöglicht den Einsatz dieses Modells auch zur Simulation von dreiatomigen Festkörperstrukturen und von vibrierenden dreiatomigen Molekülen nach Abspaltung der Schwerpunktsbewegung [41]. Es handelt sich gemäß Gl. (5.20) um ein asymmetrisches Potential im Gegensatz zum vollständig symmetrischen Potential des Quartischen Systems. Infolge dessen ist eine Unterscheidung zwischen symmetrischer und asymmetrischer Ortsvariablen entsprechend  $q_0$  und  $q_1$  möglich. Es stellt sich die Frage, welche Auswirkungen die Ankopplung über die symmetrische bzw. asymmetrische schnelle Ortsvariable auf den stationären Zustand hat, den das volle System im Limes unendlich großer Zeit einnimmt, und inwieweit wird durch das Eliminationsverfahren die richtige Beschreibung hierfür geliefert.

Allerdings ist das Hénon-Heiles-System ein schwierig handhabbares System. Dies wird ersichtlich, wenn man bedenkt, dass erst oberhalb einer Energie  $E > 0.12$  mehr als 50% des Phasenraums von dem chaotischen See überdeckt sind. Unterhalb dieser Energie ist das Hénon-Heiles-System weitgehend regulär. Im Zuge der Vergrößerung der Gesamtenergie können nach und nach die regulären Tori zerstört werden, wodurch der chaotische Bereich wächst. Dadurch wird die reguläre Dynamik zunehmend verdrängt. Dieser Prozess wird jedoch bei einer Energie von  $E = \frac{1}{6} = 0.16667$  beendet, denn oberhalb dieser Energie verlässt das System den gebundenen Zustand. Der Phasenraum ist auch für diese maximal mögliche Energie weiterhin stark gemischt.

Die Verwendung des Hénon-Heiles-Systems als schnelles Teilsystem ermöglicht also, zwei wichtige Aspekte im Hinblick auf das Eliminationsverfahren zu untersuchen: Zum einen die Bedeutung der Symmetrie des schnellen Potential hinsichtlich der Ankopplung und zum anderen die Anwendbarkeit des Verfahrens bei chaotischer Dynamik mit ausgeprägtem gemischtem Phasenraum. Die damit verbundenen Untersuchungen sind Ziel dieses Abschnittes.

### Gekoppeltes System

Im Hinblick auf die beschriebenen Untersuchungen erscheint es sinnvoll, das gekoppelte System aus dem Abschnitt 5.1 beizubehalten und lediglich das schnelle Quartische Sy-

stem durch das Hénon-Heiles-System zu ersetzen. Auf diese Weise erhält man das folgende Hamiltonsche Gesamtsystem:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_l + \frac{1}{\varepsilon}\mathcal{H}_s + \mathcal{H}_k \quad \text{mit} \quad (5.21)$$

$$\mathcal{H}_l = \frac{1}{2}(Q^2 + P^2) \quad (\text{harmonischer Oszillator}) \quad (5.22)$$

$$\mathcal{H}_s = \frac{1}{2}(p_0^2 + q_0^2 + p_1^2 + q_1^2 + 2q_0^2q_1 - \frac{2}{3}q_1^3) \quad (\text{Hénon-Heiles-System}) \quad (5.23)$$

$$\mathcal{H}_k = \frac{1}{2}\kappa(Q - q_i)^2 \quad \text{mit } i = 0 \text{ oder } 1 \quad (\text{harmonische Kopplung}). \quad (5.24)$$

Das Potential des Hénon-Heiles-Systems ist nach Gl. (5.20) bezüglich seiner Ortskoordinate  $q_0$  eine symmetrische Funktion, während es für die andere Ortskoordinate  $q_1$  asymmetrisch ist. Demnach kann hier zwischen einer harmonischen Ankopplung (5.24) über die symmetrische und asymmetrische schnelle Ortsvariable unterschieden werden.

### 5.2.1 Theoretisch vorhergesagte Fokker-Planck-Koeffizienten

Für die Anwendung des Eliminationsverfahrens müssen auch hier zunächst die theoretisch vorhergesagten Koeffizienten  $d_0$  bzw.  $d_1$  nach Gl. (2.42) und die Zustandsdichte  $Z^{(0)}$  nach Gl. (2.41) für das schnelle Hénon-Heiles-System numerisch ausgewertet werden. Dazu empfiehlt es sich, wie im letzten Abschnitt 5.1 vorzugehen. In der Abbildung 5.9 (a) ist der Koeffizient  $d_0$  in Abhängigkeit der Energie  $E$  berechnet. Betrachtet wurde bei der numerische Auswertung die schnelle asymmetrische Ortsvariable  $q_1$ . Dieser Koeffizient ist von essentieller Bedeutung. Aus ihm ergeben sich unter Berücksichtigung der Zustandsdichte  $Z^{(0)}$  alle weiteren Koeffizienten. Man findet auch hier ein lineares Anwachsen mit der Energie. Durch lineare Regression ergibt sich der Zusammenhang  $d_0(E) \approx 0.58E$ . Damit ist  $d_1 = \frac{\partial d_0}{\partial E} \approx 0.58$ . Die Zustandsdichte wurde hier von Holger Kantz mit Hilfe einer Monte-Carlo-Simulation bestimmt; es gilt  $\frac{\partial}{\partial E} \ln Z^{(0)} \approx 1$ . Auf dieser Basis können wir nun die zugehörigen Dämpfungs- und Diffusionskoeffizienten nach Gl. (2.40) - (2.39) der reduzierten Bewegungsgleichung errechnen. Wir erhalten das Folgende:

$$\tilde{\gamma} = \kappa^2(d_1 + d_0 \frac{\partial}{\partial E} \ln Z^{(0)}) \approx 1.16\kappa^2 \quad (5.25)$$

$$\tilde{D}_{PP}^{(2)}(Q, P) = \kappa^2(d_0 - \varepsilon \tilde{\mathcal{H}}_l d_1) \approx 0.58\kappa^2(E - \varepsilon \tilde{\mathcal{H}}_l). \quad (5.26)$$

Die zugehörigen Dämpfungs- und Diffusionsvorfaktoren ergeben sich hier zu:

$$\gamma_{h2} := \varepsilon^2 \tilde{\gamma} = 1.16\kappa^2 \varepsilon^2 \quad \text{und} \quad \mu_{h2} := 0.58\kappa^2 \varepsilon. \quad (5.27)$$

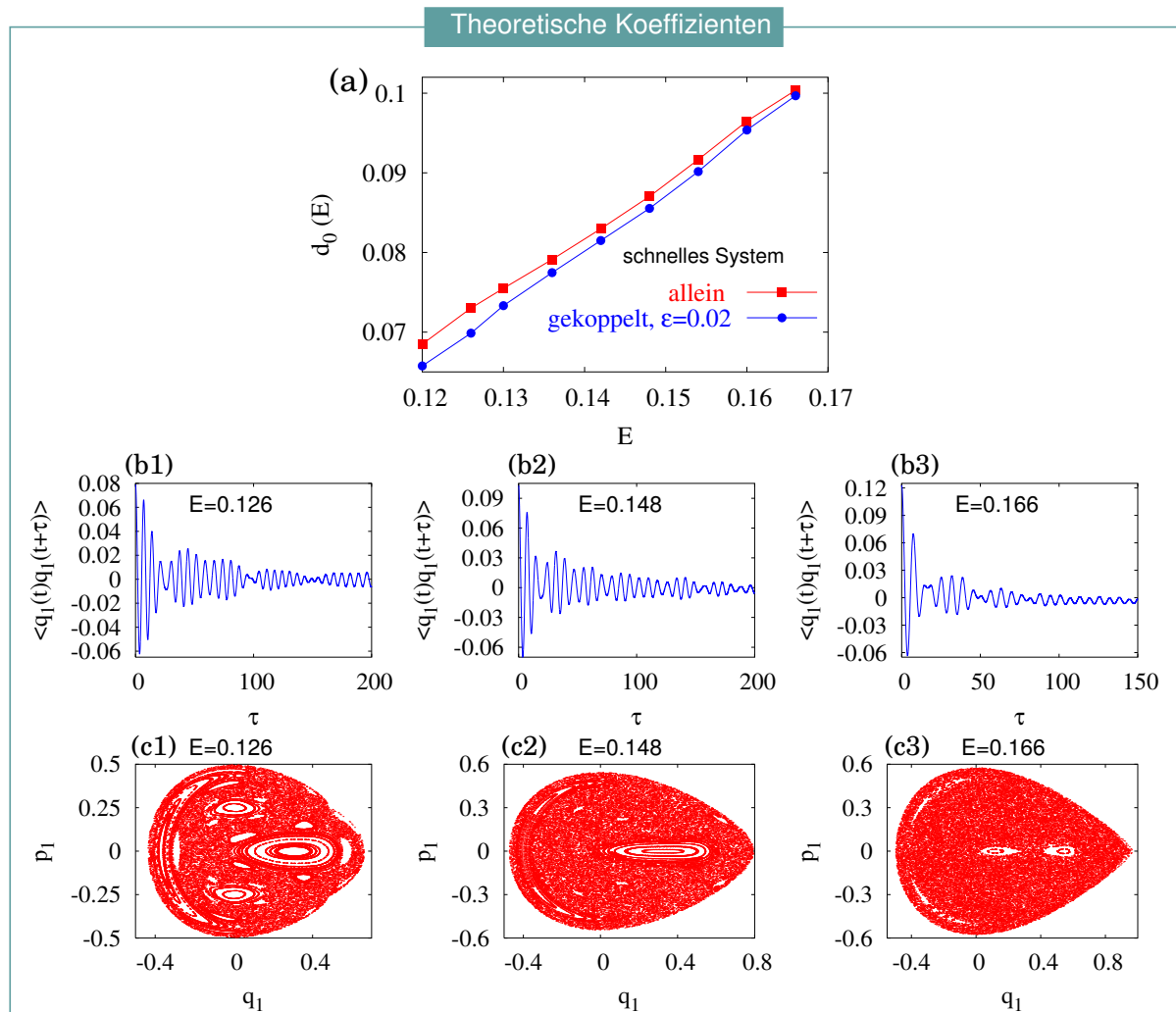
Damit erhält man das Verhältnis  $\Xi_{h2}$  dieser Vorfaktoren (5.27) zu

$$\Xi_{h2} := \frac{\gamma_{h2}}{\varepsilon \mu_{h2}} = 2. \quad (5.28)$$

Der Zahlenwert dieses Verhältnisses (5.28) hängt empfindlich von der Zustandsdichte  $Z^{(0)}$  des isolierten schnellen Teilsystems ab. Dies hatten wir auch schon bei dem Fall des gekoppelten Quartischen Systems und der stochastischen Kubomodelle aus Kapitel 3 gesehen. Dieses Verhältnis ist unter anderem entscheidend für den im Langzeitlimites eingenommenen stationären Zustand der reduzierten Dichte und Ausdruck der hierbei geltenden Fluktuations-Dissipations-Relation.

Die Dämpfungs- und Diffusionskoeffizienten in Gl. (5.25) - (5.26) sind auffällig groß. Sie sind ungefähr zwanzig Mal größer als im Falle des gekoppelten Quartischen Systems und zwei Mal größer als im Fall des Zweikubomodells. Der Vergleich der zugehörigen Autokorrelationsfunktionen für das Quartische System (Abb. 5.2 (c1) - (c3)) mit denen für das Hénon-Heiles-System (Abb. 5.9 (b1) - (b3)) zeigt einen wichtigen Unterschied auf: Die Anfangsamplitude der zeitlich veränderlichen Autokorrelationsfunktion entspricht im Falle des Quartischen Systems grob geschätzt  $\frac{1}{4}$  der Gesamtenergie. Im Falle des hier betrachteten Hénon-Heiles-Systems ist diese größer als  $\frac{3}{4}$  des Energiebetrages. Dies gibt einen wichtigen Ausschlag bei dem Zeitintegral über die Autokorrelationsfunktion und damit für den Koeffizienten  $d_0$ .

Ein weiterer Unterschied besteht darin, dass im Falle des Hénon-Heiles-Systems die Autokorrelationen wesentlich langsamer zerfallen. Der Zerfallsprozess wird gegenüber dem Quartischen System von deutlich mehr und ausgeprägteren Oszillationen begleitet. Das langsame Abklingen der Korrelationen ist die Folge eines Phasenraums mit stark ausgedehnten regulären Bereichen. Selbst bei der maximalen Energie  $E = 0.166$  sind reguläre Inseln von signifikanter Grösse und Anzahl zu beobachten. Dies ersieht man aus den Poincaré-Schnitten 5.9 (c1) - (c3). Der langsame Korrelationszerfall ist einer der Hauptursachen dafür, dass die numerisch ermittelte Koeffizientenfunktion  $d_0$  für das freie und das gekoppelte Hénon-Heiles-System weniger gut zusammenfallen als im Falle des Quartischen Systems (siehe Teil-Abb. 5.9 (a)).



**Abbildung 5.9:** Numerische Auswertung der theoretisch vorhergesagten Koeffizienten der reduzierten Bewegungsgleichung (2.36) für das Hénon-Heiles-System: (a)  $d_0$  nach Gl. (2.42) für freien (s. Gl. (5.19)) und gekoppelten Fall (s. Gl. (5.21) - (5.24)). Für das isolierte Hénon-Heiles-System: (b1) - (b3) schnelle Autokorrelationsfunktion der Ortskoordinate  $q_1$  und (c1) - (c3) zugehörige Poincaré-Schnitte zu unterschiedlichen Gesamtenergien.

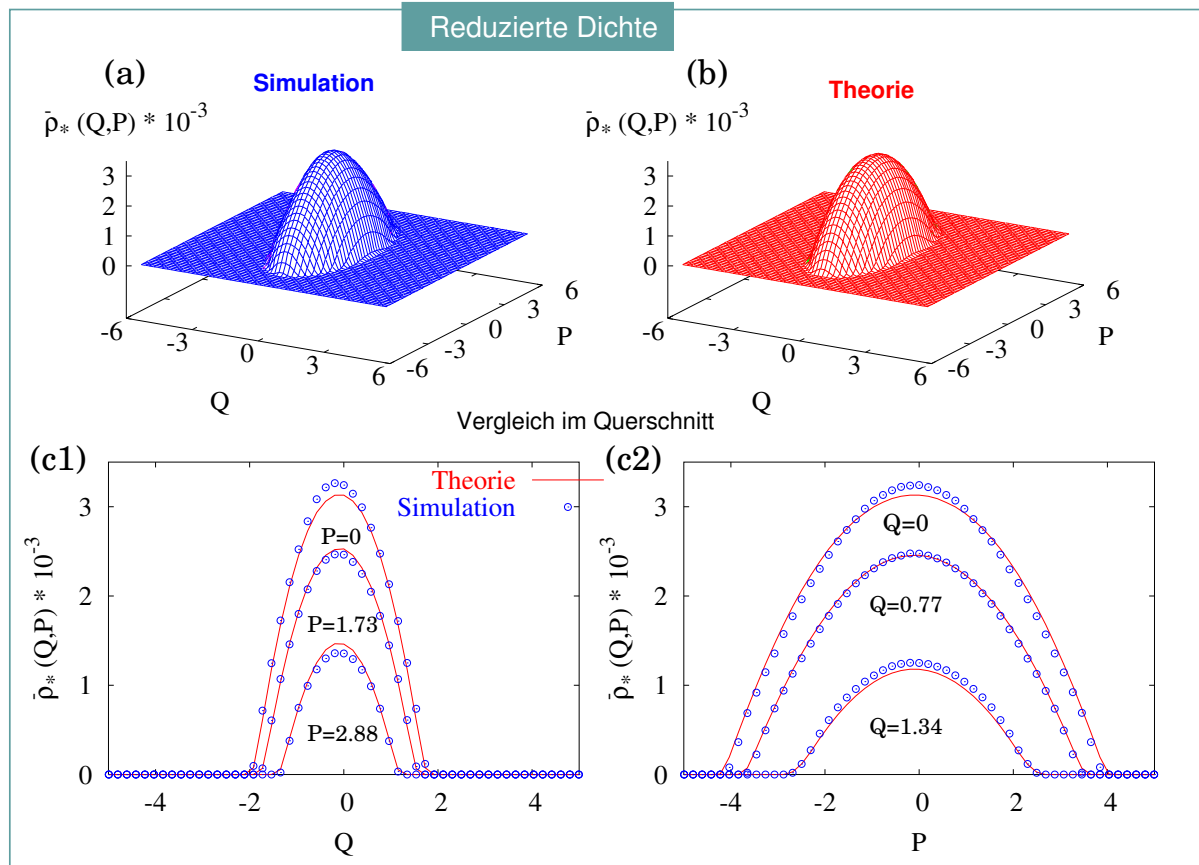


### 5.2.2 Langzeitverhalten: Einfluss regulärer Regionen und der Ankopplung

Im letzten Unterabschnitt wurden die erforderlichen Dämpfungs- und Diffusionskoeffizienten auf der Grundlage des isolierten Hénon-Heiles-Systems für die reduzierte Bewegungsgleichung (2.36) bestimmt. Dabei wurde die Auswertung anhand der asymmetrische schnelle Ortsvariable  $q_1$  durchgeführt. Damit können die in der Einleitung dieses Kapitels angekündigten Untersuchungen durchgeführt werden. Ziel der Untersuchungen ist es zu überprüfen, mit welcher Güte das Langzeitverhalten des langsamen harmonischen Oszillators auf der Basis des Eliminationsverfahrens vorhergesagt werden kann, wenn das schnelle System asymmetrisch und nicht vollständig chaotisch ist.

#### Langzeitverhalten: Reduzierte stationäre Dichte

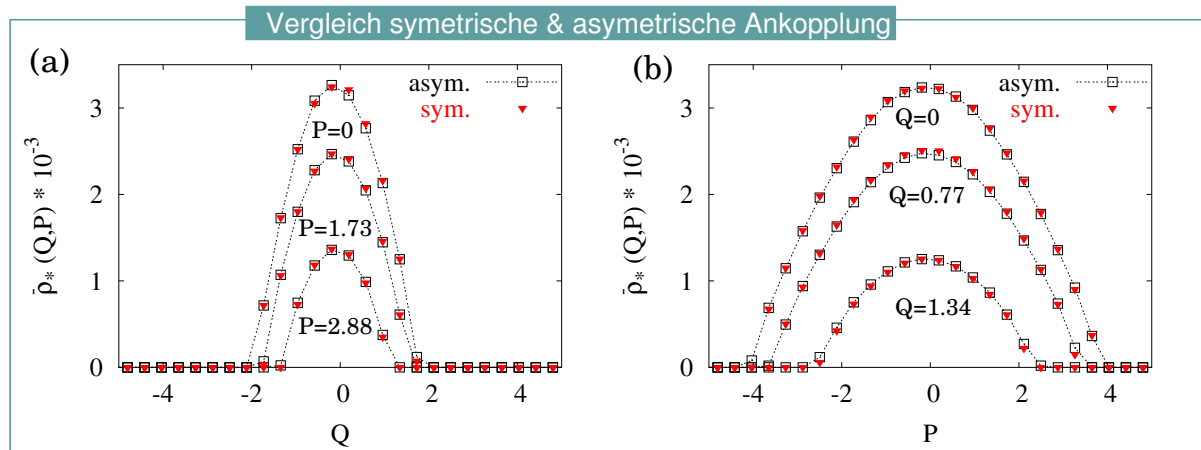
Wie wir sowohl im Falle des gekoppelten Quartischen Systems als auch im Zusammenhang mit den Pseudo-Hamiltonschen Kubomodellen gesehen haben, eignet sich die reduzierte stationäre Dichte für Untersuchungen zum Langzeitverhalten. Sie repräsentiert gemäß ihrer Definition den Zustand, dem sich das reduzierte System im zeitlichen Ablauf asymptotisch nähert. Wie die reduzierte stationäre Dichte numerisch bestimmt wird, wurde sowohl im Abschnitt über das gekoppelte Quartische System (siehe Abs. 5.1) als auch im Rahmen der stochastischen Kubomodelle (siehe Kapitel 3) detailliert erläutert. Wir wollen daher direkt zu den Resultaten übergehen. In Abbildung 5.10 ist die reduzierte Dichte des langsamen harmonischen Oszillators für eine ausgeprägte Zeitskalentrennung  $\varepsilon = 0.02$  und eine Kopplungsstärke von  $\kappa = 4$  bestimmt worden. Dabei wurde das gekoppelte System zu der maximalen Energie  $E = 0.166$  berechnet, um in gewissen Grenzen sicherzustellen, dass die Dynamik des angekoppelten Hénon-Heiles-Systems nicht vollständig regulär durch den Energieaustausch wird. In der Abb. 5.10 (a) ist die reduzierte stationäre Dichte durch die numerische Simulation des vollgekoppelten Systems in einer dreidimensionalen Darstellung abgebildet. Hier wurde eine harmonische Ankopplung über die schnelle asymmetrische Ortsvariable  $q_1$  betrachtet. Diese Dichte wurde ebenfalls mit Hilfe der zugehörigen reduzierten Bewegungsgleichung berechnet. Sie ist in der Abb. 5.10 (b) dargestellt. Der Vergleich dieser Dichteverteilungen wird hier mittels Querschnitten parallel zur Achse der langsamen Orts- und Impulsvariablen durchgeführt. Die damit verbundene Gegenüberstellung in den Abbildungen 5.10 (c1) und (c2) zeigt auf eindrucksvolle Weise die hohe Güte mit der das Langzeitverhalten hierbei durch das Eliminationsverfahren vorhergesagt wird. Die durch Simulation gewonnenen Werte der reduzierten Dichte (blaue Kreissymbole) liegen nahezu ohne Abweichung auf den theoretisch berechneten Kurven (rote Linien). Damit erweist sich das Eliminationsverfahren selbst im schwierigen Fall schneller Dynamik, mit stark ausgeprägt gemischten Phasenraum, als erfolgreich. Dieser letzte Punkt ist besonders wichtig, da gerade für derartige Fälle die Anwendbarkeit des Eliminationsverfahrens bisher nicht abschließend geklärt war.



**Abbildung 5.10:** Langzeitverhalten: (Reduzierte) stationäre Dichte des langsamen harmonischen Oszillators (gekoppelt an das Hénon-Heiles-System): (a) Simulation (des vollen Systems), (b) Theorie, (c1)-(c2) Vergleich im Querschnitt (rote Linien: theoretische Vorhersage, blaue Kreissymbole: numerisch bestimmte Werte). Parameter  $\varepsilon = 0.02$ ,  $\kappa = 4$ ,  $E = 0.166$ .

### Einfluss von symmetrischer und asymmetrischer Ankopplung

Schließlich ist unsere letzte Untersuchung dem Aspekt der Ankopplung gewidmet. Diese Untersuchung erscheint sinnvoll, wenn eine Unterscheidung zwischen symmetrischen und asymmetrischen Koordinaten gegeben ist. Dies ist in der Tat bei dem betrachteten Hénon-Heiles-System der Fall. Die reduzierte stationäre Dichte des langsamen harmonischen Oszillators ist in Abbildung 5.10 (a) durch die Simulation des vollgekoppelten Systems bei harmonischer Ankopplung über die schnelle asymmetrische Ortsvariable  $q_1$  gewonnen worden. Die harmonische Kopplung hat die Form  $\frac{1}{2}\kappa(Q - q_1)^2$ . Im nächsten Schritt wurde zu den selben Parametern die reduzierte stationäre Dichte bei Ankopplung über die schnelle symmetrische Ortsvariable  $q_0$  auf dieselbe Weise numerisch bestimmt. In Abbildung 5.11 sind die durch symmetrische und asymmetrische Ankopplung ermittelten reduzierten Dichte im Querschnitt sowohl bezüglich der langsamen Ortsachse  $Q$  als auch der Impul-

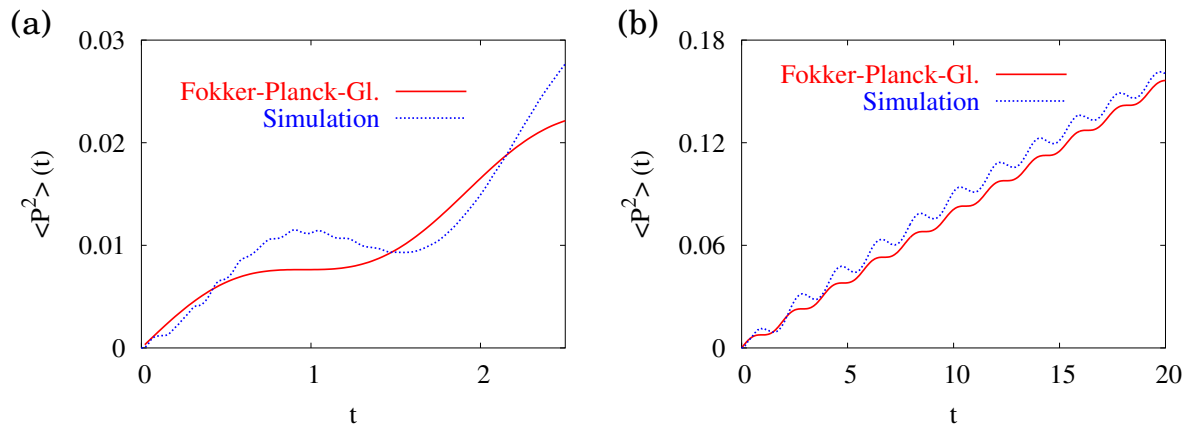


**Abbildung 5.11:** Vergleich der stationäre Dichte des langsamen harmonischen Oszillators bei Ankopplung über die symmetrische Ortsvariable  $q_0$  und über die asymmetrische  $q_1$  des schnellen Hénon-Heiles-Systems: Vergleich im Querschnitt: (a) bezüglich langsamer Ortsvariablen  $Q$  und (b) bezüglich langsamer Impulsvariablen  $P$  (Parameter  $\varepsilon = 0.02$ ,  $\kappa = 4$ ,  $E = 0.166$ ).

sachse  $P$  gemeinsam aufgetragen. Aus dem graphischen Vergleich ersieht man eine perfekte Überstimmung beider Verteilungen. Demzufolge spielt also die Ankopplung bezüglich der schnellen symmetrischen bzw. asymmetrische Variablen keine Rolle für die Langzeitentwicklung des langsamen Systems.

### Kurzzeitverhalten: Momente

Bisher ging es ausschließlich um das Langzeitverhalten. Wie steht es mit dem zugehörigen Kurzzeitverhalten? Spielen hier die regulären Gebiete im Hénon-Heiles-System eine wesentliche Rolle? Dazu wollen wir, wie auch in den vorhergehenden Beispielsystemen, die Zeitentwicklung der Momente ansehen. Speziell soll das mit der mittleren kinetischen Energie korrespondierende Moment  $\langle P^2 \rangle$  zur festen langsamen Anfangsbedingung  $Q_0 = P_0 = 0$  betrachtet werden. In Abb. 5.12 ist die dynamische Entwicklung dieser Größe, die sich auf der Basis der Fokker-Planck-Gleichung (2.36) ergibt, mit der tatsächlichen, die aus der Simulation des gekoppelten Systems resultiert, verglichen. Einmal für einen sehr kleinen Zeitraum von  $t = 3$  Zeiteinheiten (Abb. 5.12 (a)), und dann für ein etwas längeres Zeitintervall von  $t = 20$  Zeiteinheiten (Abb. 5.12 (b)). Aus dem Vergleich ersieht man eine weniger gute Übereinstimmung zwischen dem theoretisch vorhergesagten und dem durch numerische Simulation gewonnenen Kurzzeitverhalten. Das Langzeitverhalten hingegen wurde nahezu perfekt durch die reduzierte Bewegungsgleichung reproduziert (s. letzten Abschnitt). Zum einen sind die periodischen Oszillationen, die dem steilen Anstieg von  $\langle P^2 \rangle$  innewohnen, wesentlich ausgeprägter als von der Theorie vorhergesagt (Teil-Abb. (b)). Zum anderen beobachtet man systematische Abweichungen, die besonders stark für sehr kurze Zeitdauern in Erscheinung treten. In der Abb. 5.12 (a) ist das der Fall. Ermutigend ist die Tatsache,



**Abbildung 5.12:** Vergleich theoretisch vorhergesagter und durch numerische Simulation berechneter Zeitentwicklung der langsamen kinetische Energie  $\langle P^2 \rangle$  des harmon. Osz. (gekoppelt mit Hénon-Heiles-System): (a) Kurzzeitverhalten bis  $t = 3$  bzw.  $t = 20$ . (Parameter:  $\varepsilon = 0.02$ ,  $\kappa = 2$  und  $E = 0.166$ , Anfangsbedingung:  $Q_0 = P_0 = 0$ )

dass sowohl die Periodizität der Oszillationen als auch der Anstieg von  $\langle P^2 \rangle$  durch die reduzierte Bewegungsgleichung näherungsweise richtig wiedergegeben wird.

Die beobachteten Diskrepanzen hinsichtlich des Kurzzeitverhaltens sind auf die nicht hinreichende chaotische Dynamik des schnellen Hénon-Heiles-System zurückzuführen. Der Grund hierfür ist dessen gemischter Phasenraum mit zum Teil großen regulären Regionen. Dies macht sich verständlicher Weise für kurze Zeiten besonders negativ bemerkbar.

### Bemerkung zum Kurzzeitverhalten

Für das Kurzzeitverhalten ist eine wesentlich schlechtere Vorhersage auf der Grundlage des Eliminationsverfahrens zu erwarten, da die Korrelationen im schnellen Hénon-Heiles-System sehr langsam zerfallen (s.a. Abbildungen 5.9 (b1) - (b3) für die zeitliche Entwicklung der Autokorrelationsfunktion des isolierten Hénon-Heiles-Systems). Die Zeitskala, auf der die Korrelationen abklingen, ist vergleichbar mit der langsamen Zeitskala. Dazu betrachte man beispielsweise eine Zeitskalentrennung von z.B.  $\varepsilon = 0.01$ . Die Autokorrelationen zerfallen bei einer Energie von z.B.  $E = 0.166$  auf der schnellen Zeitskala von schätzungsweise  $\tau = 100$ . Das kann auf die langsame Zeit umgerechnet werden, und ergibt sich zu  $\tau_l = 1$ . Das bedeutet eine Dominanz von nicht-Markovschen Effekten für verhältnismäßig lange Zeitintervalle. Demnach ist für kurze Zeitintervalle das Eliminationsverfahren in diesem Fall nicht anwendbar, da die erforderlichen Voraussetzungen nicht mehr gegeben sind. Das vorrangige Ziel, welches mit dem Eliminationsverfahren allgemein verfolgt wird, ist nicht die Beschreibung und Vorhersage des Kurzzeitverhaltens, sondern des Langzeitverhaltens der langsamen Meßgrößen. Damit stellt diese Erkenntnis keine grundsätzliche Einschränkung der Brauchbarkeit des Verfahrens dar.

## 5.3 Höherdimensionales Chaos: 6-dimensionales System

In den vorangegangenen Abschnitten 5.1 und 5.2 wurden zwei gekoppelte Hamiltonsche Systeme mit unterschiedlichen chaotischen Teilsystemen untersucht. Als langsames Subsystem wurde stets der harmonische Oszillator gewählt. Trotz der Unterschiede zwischen dem Quartischen System und dem Hénon-Heiles-System, welche als schnelle Subsysteme verwendet wurden, ergab sich in beide Fällen ein ähnliches Verhältnis von Dämpfungs- und Diffusionsfaktor. Sie betrug im Falle des gekoppelten Hénon-Heiles-System  $\Xi_{h2} = 2$  (Gl. (5.28)) und beim gekoppelten Quartischen System  $\Xi_{h1} = 1.7$  (Gl. (5.18)). Dies hat sich wiederum in einer ähnlich gestalteten stationären Dichte-Verteilung des reduzierten langsamen Oszillatorsystems niedergeschlagen. Eine ähnlich geformte, reduzierte stationäre Dichte konnte bereits im Zusammenhang mit dem Zweikubomodell im Kapitel 3 beobachtet werden. Im zugehörigen Abschnitt 3.7 konnte gezeigt werden, dass mit wachsender Zahl schneller Freiheitsgrade die reduzierte stationäre Dichte des jeweiligen  $n$ -Kubo-Systems sich zunehmend der Boltzmann-Verteilung annäherte. Im thermodynamischen Limes von unendlich vielen schnellen Freiheitsgraden konvergierte diese Dichte schließlich gegen die Boltzmann-Verteilung. Hierbei verschob sich mit zunehmender Anzahl der angekoppelten schnellen Kubo-Oszillatoren das Verhältnis von Dämpfungs- und Diffusionsfaktor zu Gunsten der Dämpfung. Der Grund hierfür ist, dass die Dämpfung mit der Zahl der angekoppelten Kubo-Oszillatoren anwächst, während die Diffusion im Wesentlichen unverändert bleibt. Es stellt sich die Frage, ob ein ähnlicher Effekt auch für gekoppelte zweiskalige Systeme mit schnellen chaotischen Subsystemen existiert. Dies ist zu erwarten, da die chaotische Dynamik bezüglich ihres Zerfallsverhaltens hinsichtlich der Korrelationen eine gewisse Wesensverwandtschaft zu den stochastischen Prozessen aufweist. Je nach Typ des chaotischen Systems wird sich dieser Limes unterschiedlich gestalten. Das erkennt man durch Gegenüberstellung der schnellen Zustandsdichte: Für das Quartische System findet man den Zusammenhang  $Z^{(0)}(E) \sim E^{0.7}$  (siehe Abs. 5.1), wohingegen sich für das Hénon-Heiles-System eine Beziehung  $Z^{(0)}(E) \sim E$  (siehe Abs. 5.2) ergibt. Die Zustandsdichte  $Z^{(0)}$  weist eine empfindlich Abhängigkeit von der speziellen Ausprägung der schnellen Dynamik auf. Sie bestimmt hier maßgeblich das Verhältnis von Dämpfungs- und Diffusionsfaktor und somit auch die zugehörige Fluktuations-Dissipations-Relation.

Die hier aufgeworfene Frage wird in diesem Abschnitt keiner detaillierten Untersuchung unterzogen. Vielmehr soll in Hinblick auf eine Grenzwertbildung bezüglich der Zahl der Freiheitsgrade (thermodynamischer Limes) das Quartische System erweitert werden. Dazu wird ein 6-dimensionales Hamiltonsches System vorgeschlagen, dessen Hamiltonian die folgende Form besitzt:

$$\mathcal{H}_s^{\text{dim } 6} = \frac{1}{2}(p_0^2 + q_0^2 + p_1^2 + q_1^2 + p_2^2 + q_2^2 + q_0^2 q_1^2 + q_0^2 q_2^2 + q_1^2 q_2^2) \quad (5.29)$$

Wie man sieht, besteht es aus drei harmonischen Oszillatoren, die über quartische Koppelungsterme miteinander verbunden sind. Wegen der Analogie zum Quartischen System werden wir in Zukunft gelegentlich vom *6-dimensionalen Quartischen System* sprechen.

## Gekoppeltes System

Für die anschließenden Untersuchungen wird folgende Komposition von Subsystemen verwendet:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_l + \frac{1}{\varepsilon} \mathcal{H}_s + \mathcal{H}_k \quad \text{mit} \quad (5.30)$$

$$\mathcal{H}_l = \frac{1}{2}(Q^2 + P^2) \quad (\text{harmonischer Oszillator}) \quad (5.31)$$

$$\mathcal{H}_s = \mathcal{H}_s^{6 \text{ dim}} \quad (6\text{-dim. Quartisches System}) \quad (5.32)$$

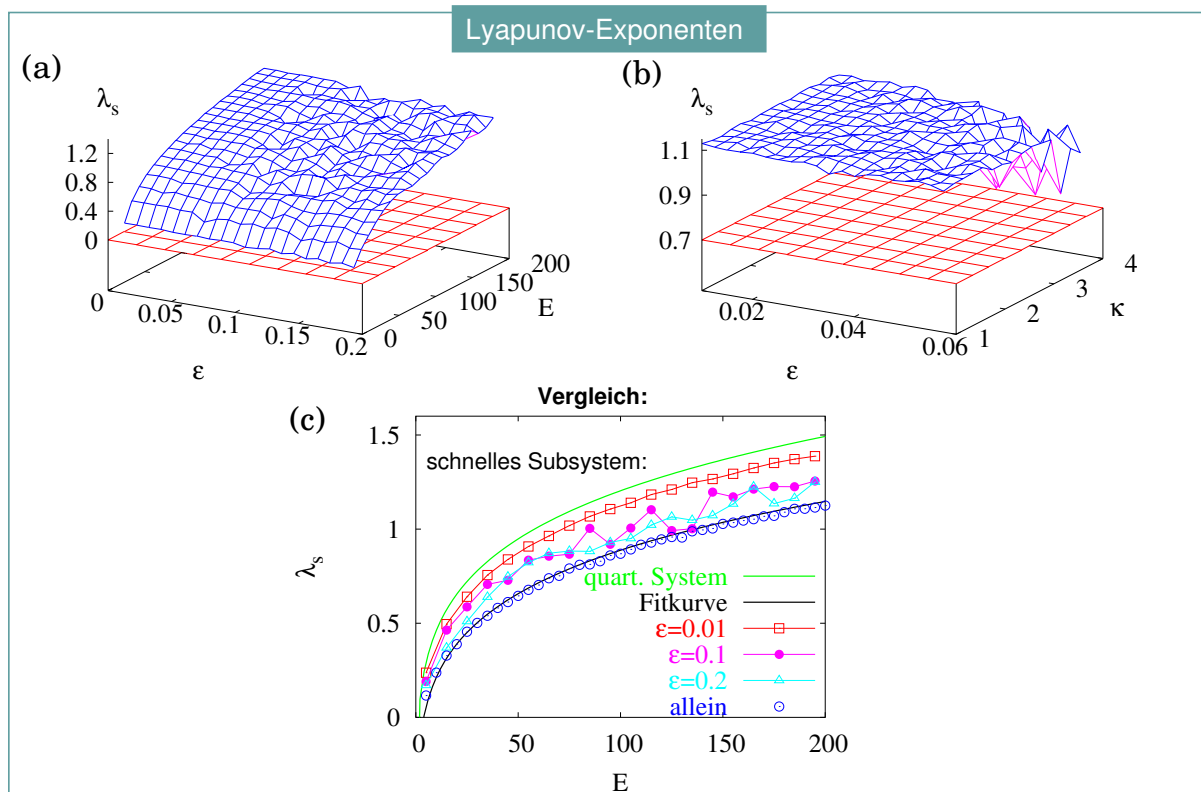
$$\mathcal{H}_k = \frac{1}{2} \kappa (Q - q_0)^2 \quad (\text{harmonische Kopplung}). \quad (5.33)$$

Der harmonische Oszillator wird auch hier als langsames System beibehalten.

### 5.3.1 Lyapunov-Exponenten

Die dynamischen Eigenschaften des vorgeschlagenen 6-dimensionalen Systems sind bisher unbekannt. Aufgrund der starken strukturellen Verwandtschaft zum Quartischen System ist anzunehmen, dass es sich in vielen Aspekten ähnlich verhält. Ob dies tatsächlich der Fall ist, wird im Folgenden mittels Berechnung des maximalen Lyapunov-Exponenten nach Gl. (5.9) untersucht. Dieses Vorgehen ist sinnvoll, da gerade das irreguläre Verhalten im Zusammenhang mit der Eliminationsmethode von Interesse ist. Die Betrachtung von Poincaré-Schnitten ist schwierig aufgrund der größeren Zahl der Dimensionen.

In Abbildung 5.13 sind einige Ergebnisse aus der Bestimmung des maximalen Lyapunov-Exponenten für das freie und das gekoppelte 6-dimensionale Quartische System zusammengetragen. Aus der Abb. 5.13 (c) ersieht man, dass die Vergrößerung der Energie des freien 6-dimensionalen Quartischen Systems Hand in Hand mit einem Anwachsen des positiven Lyapunov-Exponenten (blaue Kreissymbole) geht. Der Kurvenverlauf stimmt in seiner Gestalt mit dem des einfachen Quartischen Systems (grüne, durchgezogene Linie) überein. Er ist lediglich gegenüber dieser (parallel zur Energie-Achse) zu kleineren Werten des Lyapunov-Exponenten verschoben. Der steile Anstieg bis zu einer Energie  $E = 50$  wird abgelöst von einem zunehmend abflachenden Verlauf. Es ist anzunehmen, dass sich dies genau wie im Falle des Quartischen Systems auf die Schrumpfung der regulären Regionen zurückführen lässt, da oberhalb eines bestimmten Energiewertes nahezu alle regulären Bereiche verschwunden sind (siehe Abb. 5.1, Abs. 5.1). Ab diesem Energiewert wächst die Irregularität des Systems und damit der Lyapunov-Exponent schwächer an. Zusätzlich sind zu drei unterschiedlichen Zeitskalenparametern  $\varepsilon$  die Kurvenverläufe des gekoppelten 6-dimensionalen Systems aufgetragen. Sie sind denen des freien chaotischen Systems sehr ähnlich. Im Gegensatz zum einfachen Quartischen System übersteigen die beobachteten Lyapunov-Exponenten mit zunehmender Zeitskalentrennung immer stärker die zugehörigen Lyapunov-Exponenten des freien Systems und nähern sich den Werten des Quartischen Systems an. Demnach führt die Ankopplung in Verbindungen mit einer ausgeprägten Zeitskalentrennung zu einer Verstärkung des chaotischen Verhaltens bei dem 6-dimensionalen

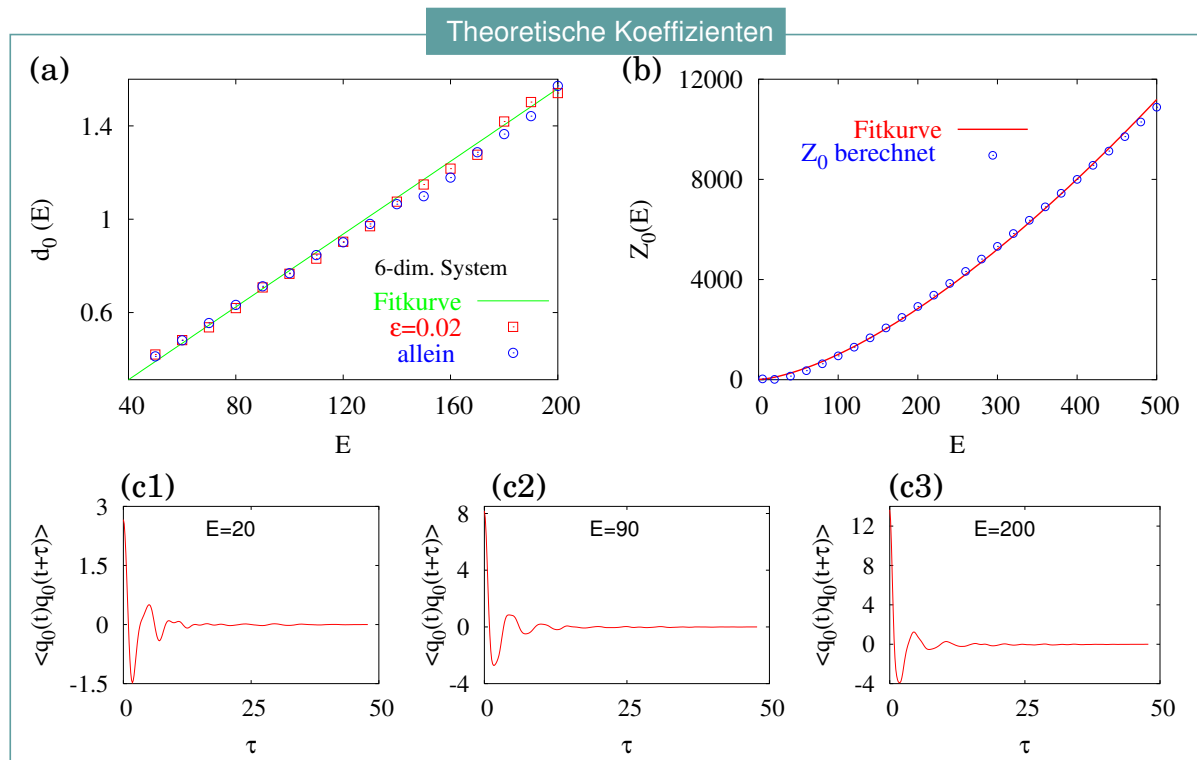


**Abbildung 5.13:** Maximaler Lyapunov-Exponent des schnellen 6-dimensionalen Teilsystems  $\lambda_s$ . Variation des: (a) Zeitskalenparameters  $\varepsilon$  und der Energie  $E$  bei fester Kopplungsstärke  $\kappa = 1$ , (b) des Zeitskalenparameters  $\varepsilon$  und der Kopplungsstärke  $\kappa$  bei fester Energie  $E = 200$  und (c) in Abhängigkeit von der Energie  $E$  sowohl für das freie als auch das gekoppelte System (verschiedene  $\varepsilon$ ) bei fester Kopplungsstärke  $\kappa = 1$  (Grüne Kurve: freies Quartisches System). Bei dem gekoppelten 6-dim. Quartischen System ist immer die im zeitlichen Mittel vorliegende Energie gemeint.

System. Eine ähnliche Beobachtung konnte im Zusammenhang mit den gekoppelten symplektischen Abbildungen in Kapitel 4 gemacht werden.

In der Abb. 5.13 (a) ist der maximale Lyapunov-Exponent bei systematischer Variation des Zeitskalenparameters  $\varepsilon$  und der Energie  $E$  des gekoppelten 6-dimensionalen Systems berechnet worden. Während in der Abb. 5.13 (b) anstelle der Energie  $E$  die Kopplungsstärke  $\kappa$  variiert wird. Die Resultate sind ähnlich den entsprechenden Untersuchungen des einfachen Quartischen Systems (siehe Abb. 5.5). Der wesentliche Unterschied besteht darin, dass der maximale Lyapunov-Exponent hier ungefähr um 10% kleiner ausfällt. Der hier beobachtete Einbruch des Lyapunov-Exponenten bei schwacher Zeitskalentrennung und wachsender Kopplungsstärke (Teil-Abb. 5.13 (b)) belegt, zu welcher negativer Verkettung eine derartige Konstellation für die Irregularität im schnellen System führen kann.

Die Untersuchungen auf der Basis des maximalen Lyapunov-Exponenten bestätigen die Vermutung, dass das hier betrachtete 6-dimensionale System ein ähnliches dynamisches



**Abbildung 5.14:** Numerische Auswertung der theoretisch vorhergesagten Koeffizienten (bzw. Zustandssumme) der reduzierten Bewegungsgleichung (2.36) für des 6-dim. Quartische System: (a)  $d_0$  nach Gl. (2.42) für freien (s. Gl. (5.30)) und gekoppelten Fall (s. Gl. (5.33) - (5.5)). Für das isolierte 6-dim. Quartische System: (b) Zustandsdichte  $Z^{(0)}$  nach Gl. (5.6) und (c1) - (c3) schnelle Autokorrelationsfunktion der Ortskoordinate  $q_0$  zu unterschiedlichen Gesamtenergien.

Verhalten wie das einfache Quartische System aufweist.

### 5.3.2 Theoretisch vorhergesagte Fokker-Planck-Koeffizienten

Um die allgemeine reduzierte Bewegungsgleichung (2.36) für das vorliegende gekoppelte System zu spezifizieren, ist die Auswertung der zugehörigen Dämpfungs- und Diffusionskoeffizienten nach Gl. (2.39) und Gl. (2.40) vorzunehmen. Dies geschieht ganz analog zu den vorhergehenden Beispielen. Das heißt, es müssen erneut die Koeffizienten  $d_0$  bzw.  $d_1$  nach Gl. (2.42) und die Zustandsdichte  $Z^{(0)}$  nach Gl. (2.41) bestimmt werden. Die Zustandsdichte kann aufgrund der Symmetrie des 6-dimensionalen Systems genau wie im Falle des einfachen Quartischen Systems, auf ein elliptisches Integral zurückgeführt werden (siehe Anhang B). Wir erhalten nach numerischer Bestimmung des Integrals  $Z^{(0)} \sim E^{1.5}$  (s. Abb. 5.14 (b)). Den Koeffizienten  $d_0$  gewinnen wir durch Auswerten des Zeitintegrals über die Autokorrelationsfunktion des 6-dimensionalen Systems. In Abbildung 5.14 (a) ist das zu verschiedenen Energien durchgeführt worden und zwar sowohl für den freien als auch für



den gekoppelten Fall. Sie liegen nahezu deckungsgleich auf einer Geraden. Es lässt sich in sehr guter Näherung eine lineare Beziehung  $d_0(E) \approx 0.0078E$  aufstellen. Dieses Verhalten stimmt mit den Beobachtungen, die wir in den vorangehenden Abschnitten machen konnte, überein. Es wird erneut die Richtigkeit der Annahme bestätigt, wonach es ausreichend ist  $d_0$  ausschließlich unter Verwendung des freien chaotischen Systems zu bestimmen. Diese Näherung ergibt sich im Rahmen der  $\varepsilon$ -Entwicklung des Eliminationsverfahrens.

Damit ergibt sich  $d_1 = \frac{\partial d_0}{\partial E} \approx 0.0078$ . Auf der Basis dieser Koeffizienten können nun die Dämpfungs- und Diffusionskoeffizienten aufgestellt werden:

$$\tilde{\gamma} = \kappa^2(d_1 + d_0 \frac{\partial}{\partial E} \ln Z^{(0)}) \approx 0.0195\kappa^2 \quad (5.34)$$

$$\tilde{D}_{PP}^{(2)}(Q, P) = \kappa^2(d_0 - \varepsilon \tilde{\mathcal{H}}_l d_1) \approx 0.0078\kappa^2(E - \tilde{\mathcal{H}}_l). \quad (5.35)$$

Es ergeben sich also die zugehörigen Dämpfungs- und Diffusionsfaktoren zu:

$$\gamma_{h3} := 0.0195\kappa^2\varepsilon^2 \quad \text{und} \quad \mu_{h3} := 0.0078\kappa^2\varepsilon. \quad (5.36)$$

Das Verhältnis  $\Xi_{h3}$  dieser Faktoren (5.36) ist

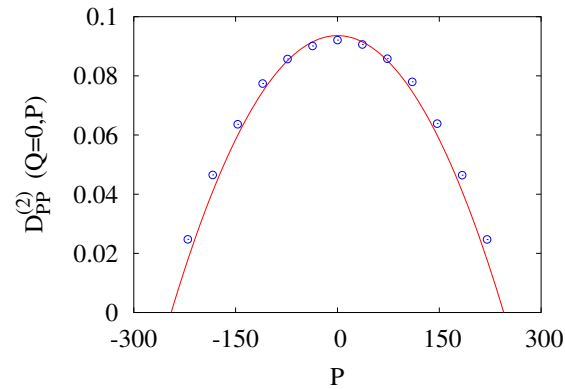
$$\Xi_{h3} := \frac{\gamma_{h3}}{\varepsilon\mu_{h3}} = 2.5. \quad (5.37)$$

Dieses Verhältnis ist um ein Drittel größer als beim Quartischen System nach Gl. (5.18). Im Abschnitt 5.3.4 werden wir untersuchen, welche Konsequenzen dies für den im Langzeitlimiten eingenommenen Zustand der reduzierten stationären Dichte hat.

An dieser Stelle sei noch auf den raschen Zerfall der Korrelationen im betrachteten 6-dimensionalen System hingewiesen. Dies kann anhand der Abbildungen 5.14 (c1), (c2) und (c3) zu verschiedenen Energiewerten nachvollzogen werden. Die Amplitude der Autokorrelationsfunktion zu allen drei Energiewerten  $E = 20$ ,  $E = 90$  und  $E = 200$  geht nahezu gleich schnell gegen Null. Der Zerfallsprozess ist von sehr wenigen Oszillationsdurchgängen gekennzeichnet. Aus dem Vergleich mit dem Quartischen System (siehe Abb. 5.2) stellt man fest, dass die Autokorrelationen zu entsprechenden Energiewerten hier wesentlich schneller verklingen.

### 5.3.3 Numerische Diffusionsbestimmung

Im letzten Abschnitt wurde der theoretisch zu erwartende Diffusionskoeffizient (5.35) für das gekoppelte 6-dimensionale Quartische System bestimmt. Hier möchten wir diesen mit der tatsächlich beobachtbaren Diffusion vergleichen. Dazu wird das vollgekoppelte System simuliert und mit Hilfe des empirischen Verfahrens (3.60) (siehe Abs. 3) (in Verbindung mit der Gittermethode) die Diffusion numerisch ermittelt. In Abb. 5.15 wurde hierzu die Diffusionskomponente  $D_{PP}^{(2)}$  an der Stelle  $Q = 0$  als Funktion des langsamen Impulses  $P$  berechnet. Die rote Kurve entspricht der theoretischen Vorhersage und die blauen Kreis-symbole der Diffusionswerte, welche durch das empirische Verfahren gewonnen wurden. Diese Werte liegen relativ gut auf der theoretisch vorgegebenen Kurve. Damit wird die im Rahmen des Eliminationsverfahrens theoretisch vorhergesagte Diffusion bestätigt.



**Abbildung 5.15:** Diffusion des langsamen harmonischen Oszillators: Numerisch berechnete Diffusionskomponente  $D_{PP}^{(2)}$  mit Hilfe des empirischen Verfahren (s. Gl. (3.60) in Kombination mit Gittermethode) bei Simulation des vollgekoppelten 6-dim. Quartischen Systems (s. Gl. (5.30) - (5.33)): Schnitt entlang der Impulsachse  $P$  bei  $Q = 0$ : rote Linien: theoretische Vorhersage und blaue Kreissymbole: numerische bestimmte Werte  $D_{PP}^{(2)}$ . (Parameter für:  $\varepsilon = 0.01$ ,  $\kappa = 2$  und  $E = 300$ .)

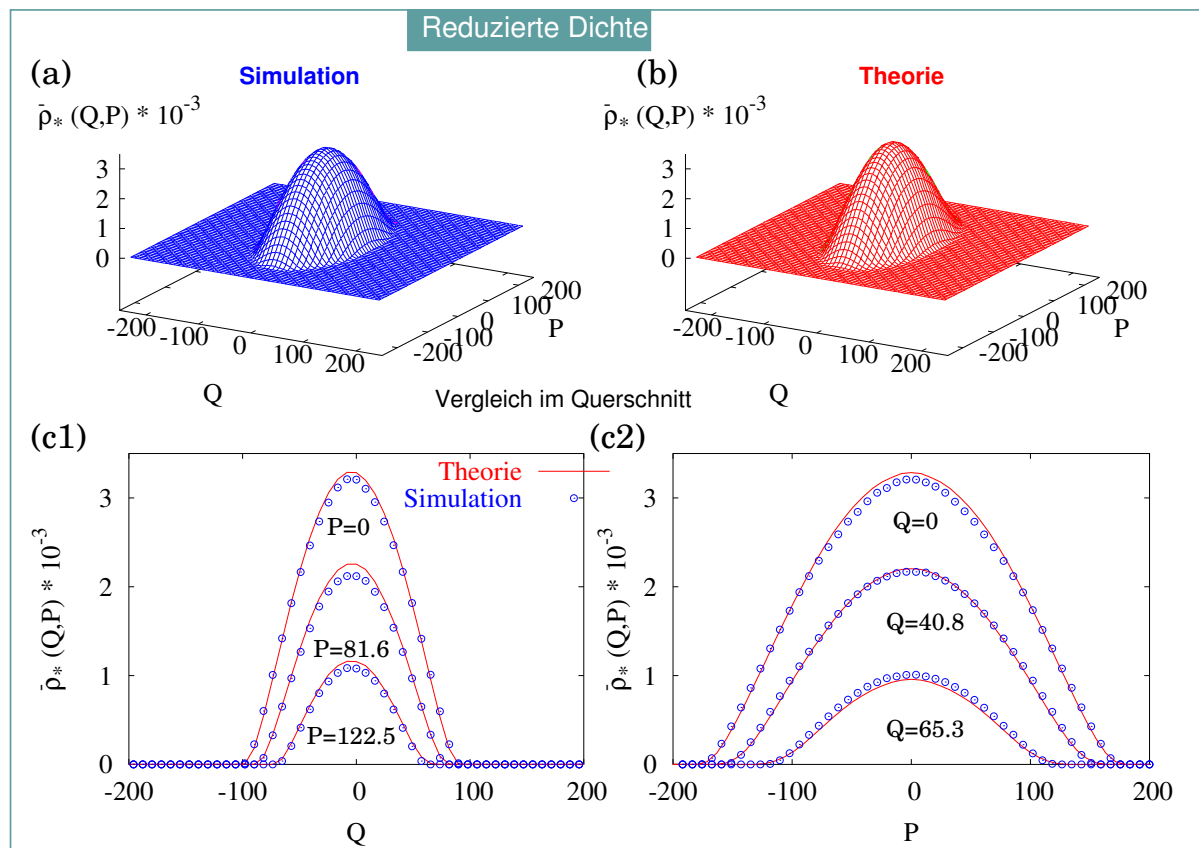
### 5.3.4 Einfluss der schnellen Dimensionen auf das Zeitverhalten

Durch die zuvor bestimmten theoretischen Fokker-Planck-Koeffizienten (5.34) - (5.35) ist die reduzierte Bewegungsgleichung (2.36) für den langsamen harmonischen Oszillator, welcher mit dem 6-dimensionalen Quartischen System gekoppelt ist, festgelegt. Mit ihrer Hilfe kann die zeitliche Entwicklung des langsamen harmonischen Oszillators vorhergesagt werden. Das Ziel dieses Abschnitts ist zu untersuchen, welche Änderungen sich für die reduzierte Dynamik ergeben, wenn man vom vierdimensionalen Quartischen System zu seinem sechsdimensionalen Analogon übergeht. Auf der Grundlage der zugehörigen reduzierten stationären Dichte werden diese vergleichenden Untersuchungen durchgeführt. Wir wollen hier einige Betrachtungen zu der eingangs gestellten Frage nach dem thermodynamischen Limes anstellen und fragen, welchen Einfluss die Vergrößerung der Anzahl schneller Freiheitsgrade auf die reduzierte Dynamik ausübt und inwieweit das Eliminationsverfahren die richtige Beschreibung dafür liefert.

#### Langzeitverhalten: Reduzierte stationäre Dichte

In Abbildung 5.16 ist für das volle gekoppelte System die theoretisch vorhergesagte der durch die Simulation gewonnenen, reduzierten stationären Dichte gegenübergestellt. Hierbei wurde eine ausgeprägte Trennung von schneller und langsamer Zeitskala mit  $\varepsilon = 0.025$  und eine Kopplungsstärke von  $\kappa = 2.5$  gewählt. Für die Simulation wurde hierbei die reskalierte Energie  $E_r = \frac{E}{\varepsilon}$  verwendet.

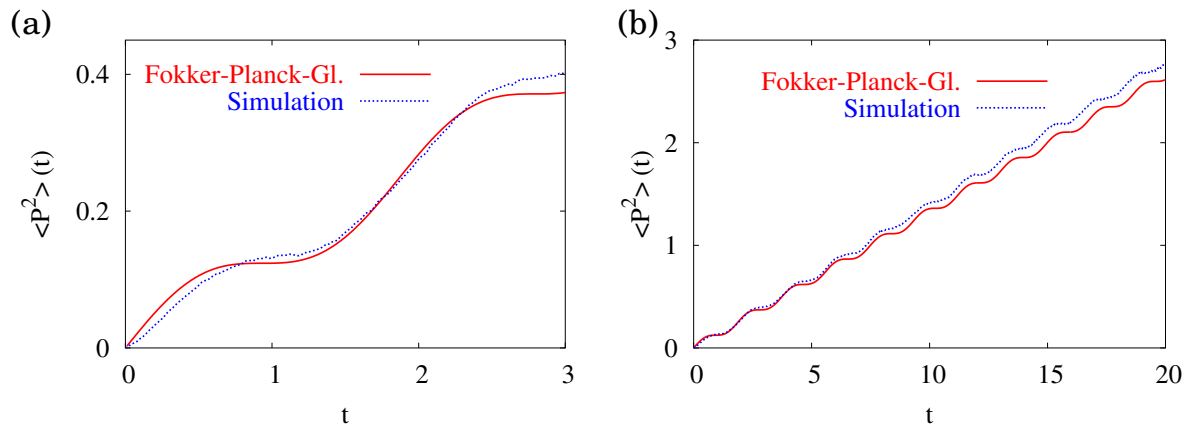
Aus der Abbildung 5.16 ersieht man zweierlei: Zum einen wird durch die theoretisch vorhergesagte stationäre Dichte die tatsächlich beobachtete Dichteverteilung des langsamen Oszillatorsystems nahezu perfekt reproduziert, wie in den Abbildung 5.16 (a) und (b)



**Abbildung 5.16:** Langzeitverhalten: (Reduzierte) stationäre Dichte des langsamen harmonischen Oszillators gekoppelt an das 6-dimensionale Quartische System: (a) Simulation, (b) Theorie, (c1)-(c2) Vergleich im Querschnitt (rote Linien: Theorie, blaue Kreissymbole: Numerik). Parameter  $\varepsilon = 0.025$ ,  $\kappa = 2.5$ ,  $E = 375$  (Simulation mit reskalierte Energie).

deutlich zu sehen ist. Noch klarer zeigen die Querschnitts-Abbildungen 5.16 (c1) und (c2), die durch Aufschneiden der reduzierten stationären Dichte parallel zur  $Q$ - und  $P$ -Achse gewonnen werden, die quantitativ sehr gute Übereinstimmung.

Zum anderen fällt die reduzierte stationäre Dichte wesentlich schwächer zu den Rändern hin ab als im Falle des einfachen Quartischen Systems (vergleiche Abb. 5.8). Dieser veränderte Abfall der reduzierten Dichte, die ihre Parabelform verloren hat, muss auf die vergrößerte Anzahl schneller Freiheitsgrade zurückgeführt werden. Denn gegenüber dem gekoppelten einfachen Quartischen System wurde hier ausschließlich dies verändert. In der entsprechenden Diskussion für die stochastisch angetriebenen Kubomodelle in Kapitel 3 (anlässlich des thermodynamischen Limes) war die wesentliche Aussage, dass mit wachsender Zahl der einkoppelnden schnellen Kubo-Oszillatoren die Dämpfung wuchs. Ein derartiges Verhalten kann auch hierbei festgestellt werden. Dies wird ersichtlich aus dem Vergleich der ermittelten Verhältnisse  $\Xi$  von Dämpfungs- und Diffusionsfaktor für den Fall der Ankopplung des Quartischen Systems mit der Ankopplung des sechsdimensionalen Analogons.



**Abbildung 5.17:** Vergleich theoretisch vorhergesagter und durch numerische Simulation berechneter Zeitentwicklung der langsamen kinetische Energie  $\langle P^2 \rangle$  des harmon. Osz. (gekoppelt mit 6-dim. Quartischen System): (a) Kurzzeitverhalten bis  $t = 3$  (b) bzw.  $t = 20$ . Parameter:  $\varepsilon = 0.02$ ,  $\kappa = 2$  und  $E = 200$  (Simulation mit reskalierte Energie).

In Abschnitt 5.3.2 ergibt sich auf der Basis des Eliminationsverfahrens ein um ein Drittel vergrößertes Verhältnis  $\Xi_{h3} = 2.5$  (siehe Gl. (5.37)) für die Dynamik des langsamen harmonischen Oszillators bei Ankopplung des 6-dimensionalen Quartischen Systems. Das Modellpotential für das Quartische System lässt sich leicht verallgemeinern, so dass höherdimensionale Systeme konstruiert werden können. Es ist zu erwarten, dass das Verhältnis  $\Xi$  für das reduzierte System dann mit der Ankopplung zunehmend höherdimensionaler Quartischer Systeme wächst. Auf diese Weise kann im Grenzfall von unendlich vielen chaotischen Freiheitsgraden, genau wie bei den  $n$ -Kubomodellen, der thermodynamische Limes durchgeführt werden. Falls der thermodynamische Limes existiert, würde man hierbei erneut die Boltzmann-Verteilung erhalten. Das angekoppelte schnelle chaotische System verhält sich mit wachsender Zahl seiner Freiheitsgrade zunehmend mehr als Wärmebad im Bezug auf den langsamen harmonischen Oszillator. Das Eliminationsverfahren beschreibt dieses Verhalten korrekt, da das schnelle chaotische System hierbei als endlich-dimensionales Wärmereservoir interpretiert wird.

### Kurzzeitverhalten: Momente

Abschließend wollen wir noch das Kurzzeitverhalten betrachten. In Abbildung 5.17 (a) - (b) ist die zeitliche Entwicklung anhand des quadratische Moments  $\langle P^2 \rangle$  dargestellt. Die Vorhersage dieser langsamen Größe ergibt sich nach dem Eliminationsverfahren ganz analog zum Beispiel des gekoppelten Quartischen Systems in Abschnitt 5.1.5. Das entsprechende Gleichungssystem ist von derselben Form wie Gl. (5.12) - (5.14). Auch das zeitliche Verhalten der mittleren kinetischen Energie  $\langle P^2 \rangle$  ist qualitativ von derselben Art, wie im Falle des gekoppelten Quartischen Systems (siehe Abb. 5.6 und Abschnitt 5.1.5 für Details). Entscheidend ist, dass auch hier eine gute Vorhersage auf der Grundlage des Eliminati-

onsverfahrens für das Kurzzeitverhalten von  $\langle P^2 \rangle$  gelingt. Dies wird durch die Abb. 5.17 (a) für ein sehr kurzes Zeitintervall bis  $t = 3$  und durch die Abb. 5.17 (b) für ein etwas ausgedehnteres Intervall bis  $t = 20$  bestätigt. Die gemeinsam aufgetragenen Kurven der theoretisch vorhergesagten und durch Simulation des vollen Systems bestimmten Größe  $\langle P^2 \rangle$  liegen dicht beieinander.

Die beobachteten Abweichungen sind auch hier auf nicht-Markovsche Effekte zurückzuführen (vgl. Unterabs. 5.1.5, Abs. 5.1).



# Kapitel 6

## Anwendungen II: Wasserstoff-Atom im homogenen Magnetfeld

Im Kapitel 5 wurde das Eliminationsverfahren an einer Reihe von gekoppelten Modellsystemen erprobt. Dabei spielten vorwiegend mathematische Modellsysteme eine Rolle, für die keine physikalische Realisierung existiert. In diesem letzten Kapitel wollen wir das vorgeschlagene Verfahren zur Elimination von chaotischen Freiheitsgraden auf ein tatsächlich existierendes System anwenden.

Im Falle von Hamiltonschen Systemen ist wohl eines der einfachsten realistischen Beispiele, bei denen der Übergang von regulärem Verhalten zu Chaos beobachtet werden kann, das Wasserstoff-Atom in einem homogenen Magnetfeld. Es verfügt infolge des großen Massenunterschieds von Kern und Elektron über eine besonders ausgeprägte Zeitskalentrennung zwischen Relativ- und Schwerpunktbewegung auf der atomaren Zeitskala.

Seine Dynamik wurde sowohl theoretisch [42, 43, 44] als auch experimentell [45] in den letzten Jahrzehnten mit einer enorm hohen Genauigkeit untersucht. Insbesondere die schnelle chaotische Relativbewegung des Elektrons bezüglich des Kerns war Gegenstand zahlreicher wissenschaftlicher Abhandlungen. Die langsame Schwerpunktbewegung hingegen wurde zumeist ignoriert, weil zum einen die zugehörigen Koordinaten nicht mehr explizit im Hamiltonian erscheinen und zum anderen wegen der verhältnismäßig großen Kernmasse. Schmelcher und Cederbaum konnten 1992 [46] anhand von numerischen Experimenten zeigen, dass die Schwerpunktbewegung nicht vernachlässigbar ist und ihrerseits chaotisch werden kann. Sie stellten fest, dass die Schwerpunktbewegung im chaotischen Regime der zufälligen Bewegung eines Brownschen Teilchens entsprach. Sie ist weder abhängig von der speziellen Wahl der Anfangsbedingung, noch im Ortsraum in ihrer Ausdehnung beschränkt. Aus der Berechnung des mittleren quadratischen Abstands konnte geschlossen werden, dass es sich um einen voll diffusiven Prozess handelt. Das Abstandsquadrat wächst bei konstanter Diffusion linear mit der Zeit. Aufgrund dieser Beobachtungen wurde von ihnen eine Langevin-Gleichung zur Beschreibung der chaotischen Schwerpunktbewegung vorgeschlagen.

Im Gegensatz dazu soll im Folgenden gezeigt werden, dass das Eliminationsverfahren auf natürliche Weise die richtige Beschreibung für die langsame Schwerpunktbewegung

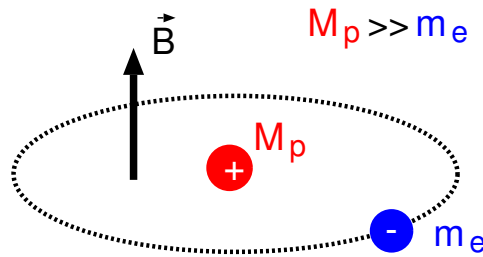
liefert, ohne auf einen derartigen ad hoc Ansatz, der empirisch motiviert ist, zurückgreifen zu müssen.

## 6.1 Klassische Behandlung des Wasserstoff-Atoms

Als Ausgangspunkt wählen wir die nichtrelativistische klassische Beschreibung des Wasserstoff-Atoms in einem homogenen Magnetfeld. Die zugehörige Hamiltonfunktion in kartesischen Koordinaten hat die folgende Gestalt:

$$\mathcal{H}_c = \underbrace{\frac{1}{2m_e} \left( \mathbf{p}_c - \frac{e}{2} \mathbf{B} \times \mathbf{r}_c \right)^2}_{\text{Elektron}} + \underbrace{\frac{1}{2M_p} \left( \mathbf{P}_c + \frac{e}{2} \mathbf{B} \times \mathbf{R}_c \right)^2}_{\text{Proton}} + V, \quad (6.1)$$

wobei  $(\mathbf{r}_c, \mathbf{p}_c)$  den Ortsvektor und den kanonisch konjugierten Impulsvektor des Elektrons und  $(\mathbf{R}_c, \mathbf{P}_c)$  die entsprechenden Vektoren des Kerns bezeichnet. Wie üblich ist  $e$  die elektrische Ladung und  $m_e$  die Masse des Elektrons, während  $M_p$  die Kernmasse ist. Der letzte Term  $V$  von Gl. (6.1) umfasst das Coulomb-Potential. Infolge der Eichsymmetrie enthält der obige Hamiltonian das Vektorpotential  $\mathbf{A} = \frac{1}{2} \mathbf{B} \times \mathbf{r}_c$  bzw.  $\mathbf{A} = \frac{1}{2} \mathbf{B} \times \mathbf{R}_c$ , wobei  $\mathbf{B}$  die Magnetfeldstärke darstellt.



**Abbildung 6.1:** Veranschaulichung: Wasserstoff-Atom im homogenen Magnetfeld  $\mathbf{B}$

Das konservative Hamiltonsche System nach Gl. (6.1) besitzt eine Konstante der Bewegung, den so genannten Pseudo-Impuls  $\mathbf{K}$ :

$$\mathbf{K} = \mathbf{p}_c + \frac{e}{2} \mathbf{B} \times \mathbf{r}_c + \mathbf{P}_c - \frac{e}{2} \mathbf{B} \times \mathbf{R}_c. \quad (6.2)$$

$\mathbf{K}$  ist die Summe aller Impulse und beschreibt in gewisser Weise die Kollektivbewegung. Mit seiner Hilfe kann eine Zerlegung der Schwerpunktsbewegung erreicht werden. Hierzu sind zwei Transformationen notwendig. Zum einen müssen die kartesischen Koordinaten in geeigneter Weise in die Relativ- und die Schwerpunktskoordinate  $\mathbf{r}$  bzw.  $\mathbf{R}$  überführt werden. Es gilt

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_c - \mathbf{R}_c \quad \text{und} \quad \mathbf{R} = \frac{M_p \mathbf{R}_c + m_e \mathbf{r}_c}{M} \quad \text{mit} \quad M := M_p + m_e. \quad (6.3)$$



Mit  $M$  ist die Gesamtmasse des Wasserstoff-Atoms, bestehend aus Elektron und Kern, bezeichnet. Der Pseudo-Impuls kann nun wie folgt zusammengefasst werden:

$$\mathbf{K} = \mathbf{P} + \frac{e}{2}\mathbf{B} \times \mathbf{r}. \quad (6.4)$$

Der Gesamtimpuls  $\mathbf{P}$  ist hier der kanonisch konjugierte Schwerpunktsimpuls. In einem abschließenden Schritt kann der Hamiltonian (6.1) in die Schwerpunkts- und Relativkoordinaten überführt werden, wenn zusätzlich zur Beziehung (6.4) die Transformationsvorschrift

$$\mathbf{p} = \mathbf{p}' - \frac{e}{2}\mathbf{B} \times \mathbf{R} \quad (6.5)$$

berücksichtigt wird. Hierbei sind  $\mathbf{p}$  und  $\mathbf{p}'$  der zugehörige neue und der alte kanonisch konjugierte Impuls zur Relativkoordinate  $\mathbf{r}$ . Damit ergibt sich der resultierende Hamiltonian zu:

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2M}(\mathbf{K} - e\mathbf{B} \times \mathbf{r})^2 + \frac{1}{2\mu} \left( \mathbf{p} - \frac{e\mu}{2\mu'}\mathbf{B} \times \mathbf{r} \right)^2 + V, \quad (6.6)$$

wobei  $\mu = \frac{M_p m_e}{M_p + m_e}$  die reduzierte Masse und  $\mu' = \frac{M_p m_e}{M_p - m_e}$  ist. Mit Hilfe der Transformationen (6.4) und (6.5) kann der Pseudo-Impuls  $\mathbf{K}$  ebenfalls als kanonisch konjugierter Schwerpunktsimpuls interpretiert werden [46].

### 6.1.1 Hamiltonsche Bewegungsgleichungen

Auf der Basis des umgeformten Hamiltonian (6.6) können nun die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen für die gekoppelte Relativ- und Schwerpunktsbewegung aufgestellt werden:

$$\dot{\mathbf{R}} = \frac{1}{M}(\mathbf{K} - e(\mathbf{B} \times \mathbf{r})) \quad (6.7)$$

$$\dot{\mathbf{K}} = 0 \quad (6.8)$$

$$\dot{\mathbf{r}} = \frac{1}{\mu} \left( \mathbf{p} - \frac{e\mu}{2\mu'}\mathbf{B} \times \mathbf{r} \right) \quad (6.9)$$

$$\dot{\mathbf{p}} = -\frac{e}{M}(\mathbf{B} \times \mathbf{K}) - \frac{e}{2\mu'}(\mathbf{B} \times \mathbf{p}) + \frac{e^2}{4\mu}\mathbf{B} \times (\mathbf{B} \times \mathbf{r}) - e^2 \frac{\mathbf{r}}{|\mathbf{r}|^3}. \quad (6.10)$$

Wie man anhand des obigen Gleichungssystems (6.7) - (6.10) ersieht, wird die Kopplung zwischen Relativ- und Schwerpunktsbewegung durch das Magnetfeld erzwungen. Bei Abwesenheit des Magnetfeldes ( $\mathbf{B} = 0$ ) würden diese beiden Arten der Bewegung entkoppelt und der Schwerpunkt würde eine uniforme Translationsbewegung ausführen. Schaltet man das Magnetfeld ein, dann koppeln selbst im Falle eines verschwindenden Pseudo-Impulses  $\mathbf{K} = 0$  die Relativ- und Schwerpunktsbewegung. Die Bewegung des Schwerpunkts wäre hierbei vollständig durch die Relativbewegung nach Gl. (6.7) determiniert. Für diesen Fall

verschwindet der erste Term  $-\frac{1}{M}(\mathbf{B} \times \mathbf{K})$  aus Gleichung (6.10) und die ausgeprägte Zeitskalentrennung zwischen den beiden Bewegungsarten als Folge des großen Massenunterschieds tritt deutlich in Erscheinung. Zusätzlich verläuft hier die Bewegung rotationssymmetrisch um die Magnetfeldachse (welche in Richtung der  $z$ -Achse gewählt wird). Der Hamiltonian (6.6) kann für  $\mathbf{K} = 0$  wie folgt umgeschrieben werden:

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2\mu} \mathbf{p}^2 - \frac{e}{2\mu'} B_z L_z + \frac{e^2}{2\mu} (\mathbf{B} \times \mathbf{r})^2 + V, \quad (6.11)$$

wobei  $L_z$  die zugehörige Drehimpulskomponente in  $z$ -Richtung ist. In dem Hamiltonian (6.16) erscheinen die Schwerpunktskoordinaten nicht mehr explizit. Anhand der Bewegungsgleichung (6.7) ersieht man, dass die Schwerpunktsbewegung weiterhin Teil der Gesamtdynamik ist.

In der gängigen Literatur erscheint in Zusammenhang mit dem Wasserstoff-Atom gewöhnlich der Hamiltonian (6.16). Insbesondere wird er häufig für den Fall  $L_z = 0$  diskutiert. Genau auf diesen Fall  $K = 0$  und  $L_z = 0$ , wollen wir uns im Folgenden beschränken und zwar sowohl bei der Ableitung der reduzierten Bewegungsgleichung des Schwerpunkts im nächsten Abschnitt als auch bei dem darauf anschließenden Vergleich mit der numerisch ermittelten Diffusion und den numerisch bestimmten Momenten.

### 6.1.2 Anwendung des Eliminationsverfahrens: Diffusionsgleichung der Schwerpunktsbewegung

In der Einleitung zu diesem Kapitel wurde darauf hingewiesen, dass Schmelcher und Cederbaum [46] auf rein empirischem Wege eine Diffusionsgleichung für die chaotische Bewegung des Schwerpunktes finden konnten. Hier wollen wir im Gegensatz dazu durch Anwendung des Eliminationsverfahrens eine entsprechende reduzierte Bewegungsgleichung für den Schwerpunkt gewinnen. Es werden im Folgenden nur die wesentlichen Schritte vorgestellt und kurz diskutiert. Die vollständige Rechnung findet sich im Anhang C. In einem allerersten Schritt ist es wichtig zu überprüfen, ob das betrachtete System über eine Hamiltonsche Struktur gemäß Gl. (2.11) verfügt. Eine Unterteilung in schnellen Teil, langsamen Teil und Wechselwirkungsanteile muss wie in Gl. (2.11) möglich sein. Dies ist die Voraussetzung für die Anwendbarkeit des Eliminationsverfahrens. Sie ist im Falle des Wasserstoff-Atoms im homogenen Magnetfeld erfüllt. Das wird deutlich, wenn der zugehörige Hamiltonian (6.6) wie folgt umgeformt und aufgeteilt wird:

$$\tilde{\mathcal{H}} = M\mathcal{H} = \tilde{\mathcal{H}}_l + \frac{1}{\varepsilon} \tilde{\mathcal{H}}_s + \tilde{\mathcal{H}}_k, \quad \varepsilon := \frac{\mu}{M} \quad (6.12)$$

mit

$$\tilde{\mathcal{H}}_l = \frac{1}{2} \mathbf{K}^2 \quad (\text{langsam}) \quad (6.13)$$

$$\tilde{\mathcal{H}}_s = \frac{1}{2} \left( \left( \mathbf{p} - \frac{e\mu}{2\mu'} \mathbf{B} \times \mathbf{r} \right)^2 + e^2 \mu \frac{\mathbf{r}}{|\mathbf{r}|^3} + \varepsilon e^2 (\mathbf{B} \times \mathbf{r})^2 \right) \quad (\text{schnell}) \quad (6.14)$$

$$\tilde{\mathcal{H}}_k = -e\mathbf{K}(\mathbf{B} \times \mathbf{r}). \quad (\text{Kopplung}) \quad (6.15)$$

Zunächst wurde die Gl. (6.6) mit der Gesamtmasse  $M$  multipliziert, wodurch der Zeitskalenparameter  $\varepsilon$  mit dem Verhältnis von Relativ- zu Gesamtmasse identifiziert werden konnte. Anschließend konnte der Hamiltonian  $\tilde{\mathcal{H}}$  nach seinem schnellen Anteil  $\tilde{\mathcal{H}}_s$ , seinem langsamen Anteil  $\tilde{\mathcal{H}}_l$  und seinen Kopplungsanteil  $\tilde{\mathcal{H}}_k$  aufgespalten werden.

Die Kopplung (6.15) ist auch in diesem Fall linear und wird über das Magnetfeld ausgeübt. Das homogene Magnetfeld, welches hier speziell zu  $\mathbf{B} = (0, 0, B_z)^T$  gewählt ist, führt zu einer Aufmischung der Ortskomponenten der schnellen Relativbewegung. Die Konsequenz ist eine Kopplung der einzelnen schnellen Ortskomponenten untereinander.

An diesem Punkt verfährt man Schritt für Schritt nach der in Kapitel 2 vorgeschlagenen Prozedur (entsprechend Eliminationsverfahren) und eliminiert die schnellen chaotischen Freiheitsgrade der Relativbewegung. Die resultierende effektive Bewegungsgleichung für den Schwerpunkt hat die folgende Gestalt:

$$\frac{\partial}{\partial t} \bar{\rho}_t(\mathbf{R}) = \varepsilon \left( \frac{\partial^2}{\partial R_1^2} \tilde{D}_{22}^{(2)}(\mathbf{R}) \bar{\rho}_t - 2 \frac{\partial^2}{\partial R_1 \partial R_2} \tilde{D}_{12}^{(2)}(\mathbf{R}) \bar{\rho}_t + \frac{\partial^2}{\partial R_2^2} \tilde{D}_{11}^{(2)}(\mathbf{R}) \bar{\rho}_t \right) \quad (6.16)$$

mit den Diffusionskoeffizienten:

$$\tilde{D}_{ij}^{(2)}(\mathbf{R}) = \kappa_R^2 \int_0^\infty \langle r_i(t) r_j(t + \tau) \rangle d\tau \quad \text{mit} \quad i, j = 1, 2 \quad (6.17)$$

$$\kappa_R := eB_z. \quad (6.18)$$

Bei der abgeleiteten Gl. (6.16) handelt es sich um eine Diffusionsgleichung. Sie ist ein Spezialfall der Fokker-Planck-Gleichung. Die Diffusionskoeffizienten ergeben sich nach (6.17) durch Integration über die Autokorrelationen der schnellen Relativbewegung. Der Einfluss der schnellen chaotischen Dynamik wird hier effektiv durch die Diffusion erfasst. Die Rolle der Kopplungsstärke wird von der magnetischen Feldstärke  $B_z$  übernommen. Dies geht aus Gl. (6.17) hervor. Der vollständige Diffusionskoeffizient ist durch  $D_{ij}^{(2)}(\mathbf{R}) = \varepsilon \tilde{D}_{ij}^{(2)}(\mathbf{R})$  gegeben. Dies wird beim Vergleich mit Diffusionskoeffizienten, welcher auf der Basis empirischer Verfahren bestimmt werden kann, (in den folgenden Abschnitten) berücksichtigt.

Das Fehlen einer Drift ist darauf zurückzuführen, dass hier der Fall  $\mathbf{K} = 0$  betrachtet wird. Damit tritt aber auch keine Dämpfung auf. Im Hinblick auf die Energieerhaltung stellt das kein Widerspruch dar, da mit der Diffusionsgleichung (6.16) die Schwerpunktsbewegung im Ortsraum beschrieben wird. Bei der Bewegung der Schwerpunkts bezüglich des Impulsraum ist hingegen ein Dämpfungsterm zu erwarten.

Interessanterweise entspricht das Produkt aus  $\kappa_R$  und  $\varepsilon$  im wesentlichen der Zyklotronfrequenz  $\omega_{zykl} = \frac{eB_z}{M}$ . Das ist nicht erstaunlich, da das Elektron bzw. Proton im homogenen Magnetfeld eine vergleichbare Situation wie in einem Beschleuniger vorfindet.

Übereinstimmend mit Schmelcher et al. [46] ist also eine Diffusionsgleichung zur Beschreibung der Schwerpunktsbewegung gefunden worden. Die Frage ist, ob diese reduzierte Gleichung tatsächlich die Bewegung des Schwerpunkts richtig zu beschreiben vermag. Dieser Frage sind die anschließenden Untersuchungen in den folgenden Abschnitten gewidmet. Im Zentrum steht dabei der Vergleich zwischen numerisch bestimmter und theoretisch vorhergesagter Diffusion. Eine weitere Überprüfung wird anhand der Momente durchgeführt.

### Regularisierung: Numerische Simulation des Wasserstoff-Atoms

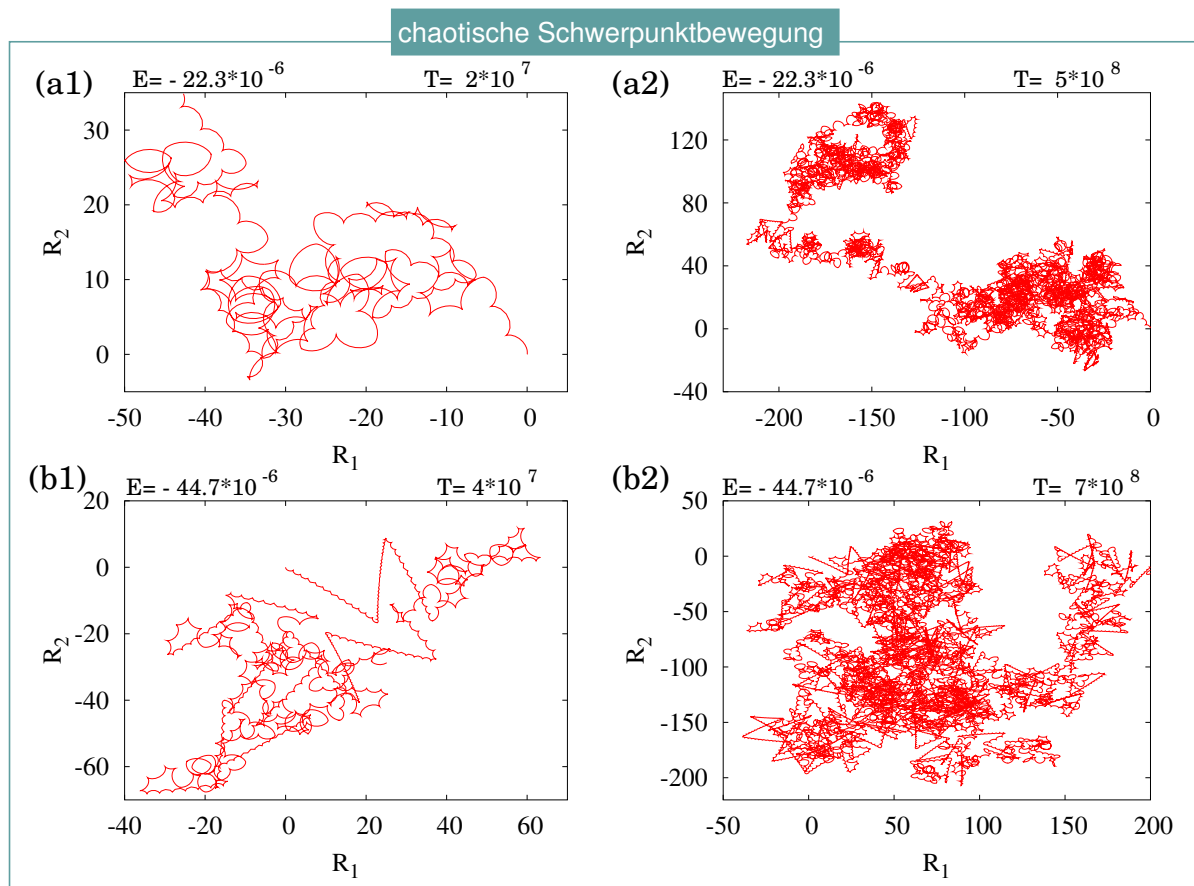
Das hier betrachtete Coulomb-Potential hat infolge seiner  $\frac{1}{r}$ -Abhängigkeit eine Singularität bei  $r = 0$ . Aufgrund dieser Singularität ist die numerische Integration der gekoppelten Bewegungsgleichungen (6.7) - (6.10) für Relativ- und Schwerpunktskoordinate nicht direkt möglich. Man kann dieses Schwierigkeit beheben, indem man durch geeignete Transformation der Zeit, der Energie, der Orts- und Impulskoordinaten die Singularität formal beseitigt. Man spricht hierbei von *Regularisierung*. Das auf diese Weise gewonnene Gleichungssystem kann nun ohne größere Probleme einer numerischen Integration unterworfen werden.

Das regularisierte Gleichungssystem für das Wasserstoff-Atom im homogenen Magnetfeld, welches bei der numerischen Simulation im Folgenden verwendet wurde, findet sich in Schmelcher et al. [46]. Zur numerischen Integration wurde hier ein symplektischer Runge-Kutta-Integrator 7-ter Ordnung verwendet.

## 6.2 Chaotische Schwerpunktsbewegung und Eliminationsverfahren

Nachdem im letzten Abschnitt auf der Basis des Eliminationsverfahrens eine Diffusionsgleichung zur Beschreibung der Schwerpunktsbewegung abgeleitet werden konnte, soll in diesem Abschnitt die Güte ihrer Vorhersage mittels numerischer Simulationsexperimente überprüft werden. Dazu werden die Diffusion und die Momente der langsamen Schwerpunktsbewegung untersucht.

Zuvor wollen wir die irreguläre Bewegung des Schwerpunkts anhand von Phasenraumporträts betrachten. In Abb. 6.2 sind diese für zwei unterschiedliche Gesamtenergien erstellt worden. Die Magnetfeldstärke wurde stets zu  $B_z = 10^{-5}$  atomaren Einheiten [a.u.] gewählt. Dies entspricht in SI Einheiten  $B_z = 2.5$  Tesla. Mit dieser Wahl ist sichergestellt, dass die Schwerpunktsbewegung im chaotischen Regime ist [44]. Für alle weiteren Simulationen wird diese Magnetfeldstärke beibehalten. Anzumerken ist, dass mit der Energie des Systems hier stets die Bindungsenergie bezüglich der Ionisationsgrenze bei  $E = 0$  gemeint ist. Die Phasenraumporträts 6.2 (a1) und (a2) sind für eine Energie von  $E = -22.3 \cdot 10^{-6}$  [a.u.] berechnet worden. Sie stellen Momentaufnahmen der Schwerpunktsbewegung zu zwei unterschiedlichen Zeitpunkten dar. In der Abb. 6.2 (a1) ist das Phasenraumporträt nach Ablauf einer langsamen Zeit von  $2 \cdot 10^7$  [a.u.] erstellt worden, während die Abb. 6.2 (a2) zu einem wesentlichen späteren Zeitpunkt  $5 \cdot 10^8$  [a.u.] bestimmt wurde. Aus dem Vergleich dieser Abbildungen erkennt man, dass die Bahnkurve des Schwerpunktes mit zunehmender Zeit ein immer größeres Phasenraumvolumen überdeckt. Die Trajektorie des Schwerpunkts breitet sich hierbei irregulär im Phasenraum aus. Ihre Bewegung weist Anzeichen eines diffusiven Prozesses auf. Auf kurzen Zeitintervallen hingegen zeigt sich, dass die Schwerpunktstrajektorie immer wieder Bahnsegmente durchläuft, in denen die Bewegung regulär erscheint. Diese Segmente sind von kreisförmiger Gestalt, wie man anhand der Kurzzeit-Aufnahmen 6.2 (a1) oder (b1) beobachten kann. Bei Vergrößerung der Energie wie in Abb.



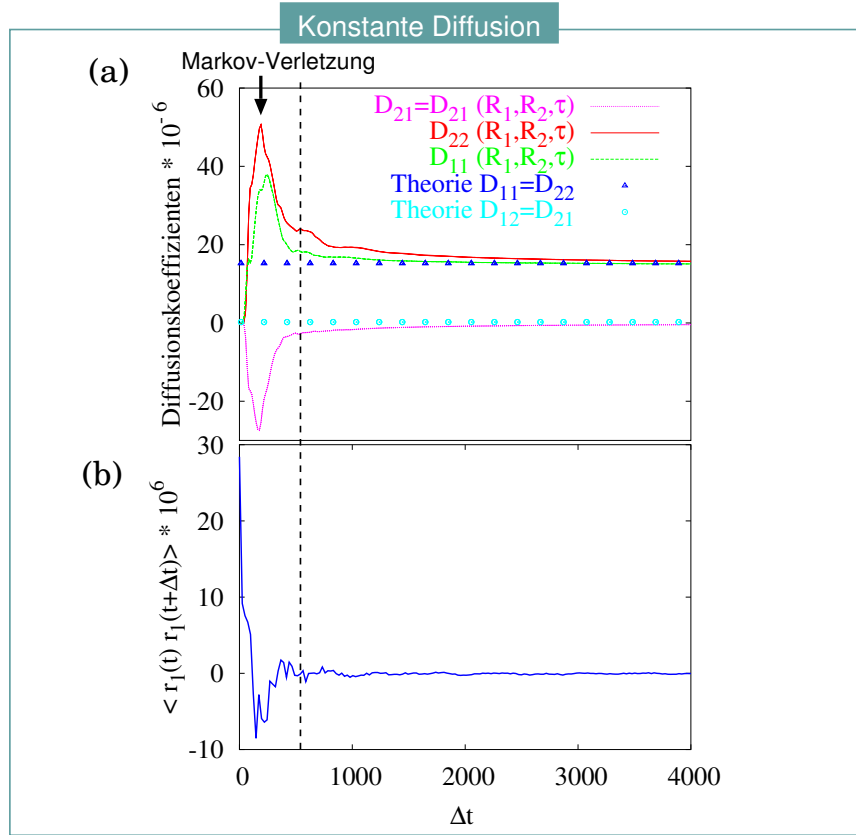
**Abbildung 6.2:** Phasenraumporträts der chaotische Schwerpunktsbewegung in der  $(R_1, R_2)$ -Ebene des langsamen Ortsraums für unterschiedliche Energien: Für  $E = -22.3 \cdot 10^{-6}$  [a.u.] : (a1) nach Ablauf der Zeit  $T = 2 \cdot 10^7$  [a.u.] und (a2) Zeit  $T = 5 \cdot 10^8$  [a.u.]. Für  $E = -44.7 \cdot 10^{-6}$  [a.u.]: (b1) nach Ablauf der Zeit  $T = 4 \cdot 10^7$  [a.u.] und (a2) Zeit  $T = 7 \cdot 10^8$  [a.u.]. In beiden Fällen ist die Magnetfeldstärke  $B_z = 10^{-5}$  [a.u.].

6.2 (b1) sind diese Segmente weniger ausgeprägt. Die Phasenraumporträts 6.2 (b1) und (b2) wurden für eine doppelt so große Energie  $E = -44.7 \cdot 10^{-6}$  [a.u.] erstellt. Das hier beobachtete Verhalten ist grundsätzlich sehr ähnlich zu dem bereits besprochenen Fall (zu einer Energie  $E = -22.3 \cdot 10^{-6}$  [a.u.]).

Diese Untersuchungen bestätigen also die Beobachtungen von Schmelcher und Cederbaum [46], nach denen der Schwerpunkt in der  $R_1$ - $R_2$ -Ebene des langsamen Ortsraums eine Zufallsbewegung entsprechend einem Brownschen Teilchen ausführt.

### 6.2.1 Vergleich der Diffusionskoeffizienten

Die Beobachtungen auf der Basis des Phasenraumporträts 6.2 (a1) - (b2) legen eine Interpretation der chaotischen Schwerpunktsbewegung im Sinne eines diffusiven Prozesses nahe.



**Abbildung 6.3:** Vergleich gemäß der Theorie vorhergesagter und numerisch ermittelter Diffusionskoeffizienten für die chaotische Schwerpunktsbewegung. Aufgetragen sind die zugehörigen Diffusionskoeffizienten, s. Legende von (a) und die zugehörige Autokorrelationsfunktion bezüglich der Relativkoordinate ( $\tau = \varepsilon\tau_s$  ist langsam). Parameter:  $E = -40.23 \cdot 10^{-6}$  [a.u.] und  $B_z = 10^{-5}$  [a.u.].

Unter Verwendung des Eliminationsverfahrens konnten in Abschnitt 6.1.2 die chaotischen Freiheitsgrade der schnellen Relativbewegung beseitigt werden, und man gewann eine Diffusionsgleichung (6.16) zur Beschreibung der Schwerpunktsbewegung. Demnach sind die bisherigen qualitativen Beobachtungen konsistent mit der theoretischen Vorhersage. Im Folgenden wollen wir einen Schritt weiter gehen und auf der Grundlage von quantitativen Untersuchungen im Detail die Güte dieser Vorhersage überprüfen. Hierzu ist es notwendig, die theoretisch vorhergesagten Diffusionskoeffizienten mit der tatsächlich beobachtbaren Diffusion zu vergleichen. Die theoretischen Koeffizienten ergeben sich durch Berechnung des Zeitintegrals über die Autokorrelationsfunktion der Relativkoordinate nach Gl. (6.17). Völlig unabhängig von Modellannahmen kann die tatsächliche Diffusion mittels des empirischen Verfahrens nach Siegert et al.[21] wie folgt

$$D_{ij}^{(2)}(\mathbf{R}, \Delta t) \approx \frac{1}{2\Delta t} \langle (R_i(t + \Delta t) - R_i(t))(R_j(t + \Delta t) - R_j(t)) \rangle_{\mathbf{r}_0 \in \Omega_E} \Big|_{\mathbf{R}} \quad (6.19)$$

bestimmt werden. Auch hier wird das Verfahren nach Gl. (6.19) kombiniert mit der *Gittermethode* (siehe Kapitel 3).

In Abb. 6.3 (a) sind die einzelnen Diffusionskoeffizienten  $D_{ij}^{(2)}$  exemplarisch zu einer Energie  $E = -40.23 \cdot 10^{-6}$  [a.u.] mit Hilfe des Schätzers (6.19) für das Schwerpunktsystem numerisch ermittelt worden. Die Diagonalelemente der Diffusionsmatrix  $D_{11}^{(2)}$  und  $D_{22}^{(2)}$  sind ungleich Null und konvergieren gemeinsam gegen den konstanten Wert  $15.8 \cdot 10^{-6}$  [a.u.]. Die Nichtdiagonalelemente  $D_{12}^{(2)}$  und  $D_{21}^{(2)}$  hingegen ergeben sich identisch zu Null (rosa Kurven). Demnach liegen keine Kreuzkorrelationen im Schwerpunktsystem vor. Jeder Koeffizient  $D_{ij}^{(2)}$  wurde jeweils zu sechs unterschiedlichen Ortswerten  $\mathbf{R}$  berechnet. Die zugehörigen Kurven in Abb. 6.3 (a) liegen so dicht übereinander, dass eine Unterscheidung nicht möglich ist. Die Drift ist hierbei Null. Hiermit erscheint eine Interpretation der Schwerpunktsbewegung im chaotischen Regime im Sinne eines voll diffusiven Prozesses mit konstanter Diffusion möglich. Dieses Ergebnis stimmt mit der Beobachtung von Schmelcher et. al. [46] überein. Sie bestimmten, wie bereits in der Einleitung dieses Kapitel beschrieben, die Diffusion durch die Berechnung des Abstandsquadrats entsprechend  $\frac{1}{T} \langle (\mathbf{R}(0) - \mathbf{R}(T)) \rangle_{\mathbf{r}_0 \in \Omega_E} | \mathbf{R}$ . Die Existenz der Drift kann bei dieser Methode nur indirekt überprüft werden.

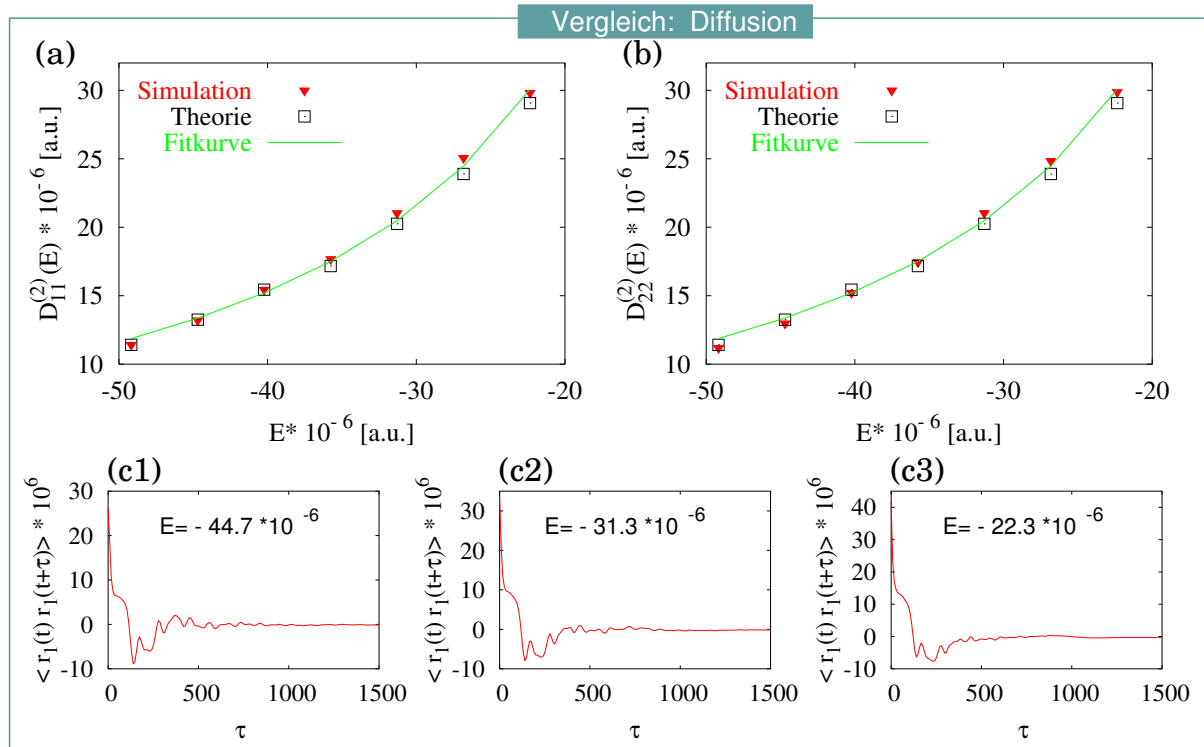
Auf der Basis der aus der Theorie bestimmten Koeffizienten kann also die Diffusion richtig vorhergesagt werden. Die zugehörigen Werte liegen sehr dicht auf den Diffusionswerten von  $D_{ij}^{(2)}(\mathbf{R}, \Delta t)$  im konvergierten Bereich. Die theoretisch zu erwartenden Diffusionskoeffizienten  $D_{11}^{(2)}$  und  $D_{22}^{(2)}$  sind in guter Näherung identisch und in Abb. 6.3 (a) als blaue Dreiecksymbole aufgetragen. In Übereinstimmung mit den Ergebnissen aus dem empirischen Verfahren (Gl. (6.19)) verschwinden die gemischten Diffusionselemente in Abb. 6.3 (a) (türkise Rechtecksymbole), wie nach dem Eliminationsverfahren zu erwarten ist.

Für Zeiten  $\Delta t < 400$  sind signifikante Abweichungen von dem konstanten Wert der Diffusion nach Abb. 6.3 (a) zu beobachten. Grund hierfür ist, dass die schnellen Korrelationen für derart kurze Zeitintervalle noch nicht hinreichend zerfallen sind. Dies ersieht man aus dem Vergleich mit der Darstellung der Autokorrelationsfunktion (siehe Abb. 6.3 (b)), welche zum selben Energiewert bestimmt wurde.

### Diffusionsberechnung in Abhängigkeit von der Energie

Nachdem zuvor für einen festen Wert der Gesamtenergie der Vergleich exemplarisch durchgeführt wurde, soll nun die Energie variiert und in ihrer Abhängigkeit die Diffusion ermittelt werden. Die damit verfolgte Absicht ist, die Qualität der theoretischen Vorhersage hinsichtlich der Schwerpunktsbewegung über einen zusammenhängenden Bereich des chaotischen Regimes zu prüfen.

In Abbildung 6.4 (a) - (b) ist der Diffusionskoeffizient  $D_{11}^{(2)}$  und  $D_{22}^{(2)}$  in Abhängigkeit von der Gesamtenergie bestimmt worden. Dabei wurde der Energiebereich von  $E = -44.7 \cdot 10^{-6}$  [a.u.] bis  $E = -22.3 \cdot 10^{-6}$  [a.u.] gewählt. Man findet eine nahezu identische Beziehung zur Energie der Diffusionskoeffizienten  $D_{11}^{(2)}$  und  $D_{22}^{(2)}$ . Dies war nach der vorangegangenen exemplarischen Untersuchung zu erwarten. Die Abhängigkeit der Diffusionskonstante

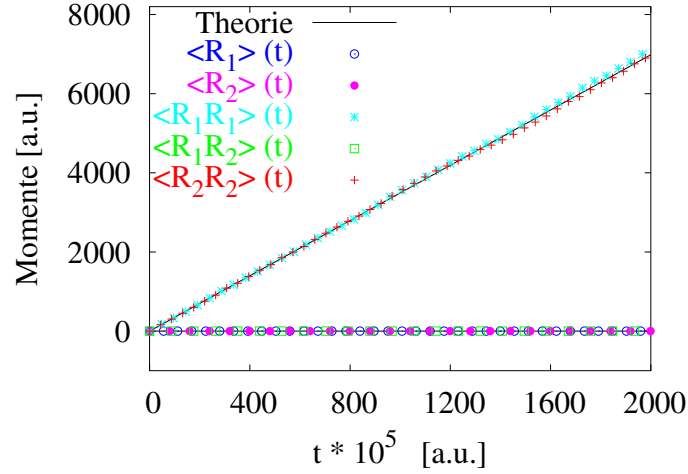


**Abbildung 6.4:** Vergleich gemäß der Theorie vorhergesagter und numerisch ermittelter Diffusionskoeffizienten als Funktion der Energie für die chaotische Schwerpunktsbewegung: (a) Diffusionskoeffizient  $D_{11}^{(2)}$  und (b)  $D_{22}^{(2)}$ . Exemplarische: (c1) - (c3) Autokorrelationsfunktion bezüglich der Relativkoordinate ( $\tau = \varepsilon \tau_s$  ist langsam) zu drei unterschiedlichen Energien. (Parameter:  $B_z = 10^{-5}$  [a.u.] )

von der Energie ist näherungsweise durch ein Potenzgesetz beschreibbar. Mit wachsender Energie wächst hierbei die zugehörige Diffusionskonstante. Die auf der Grundlage des Eliminationsverfahrens vorhergesagten Diffusionskoeffizienten zeichnen in guter Näherung den beobachteten Verlauf zwischen Energie und tatsächlicher Diffusion nach (siehe 6.4 (a) - (b)). Allerdings werden ab einer Energie von  $E = -29 \cdot 10^{-6}$  [a.u.] kleine Abweichungen sichtbar. Die Ursache hierfür ist, dass mit wachsender Energie das diffusive Verhalten immer stärker von einer *Zufallsbewegung* abweicht [46] und damit immer schlechter durch eine Markov-Approximation beschreibbar ist.

In diesem Zusammenhang erscheint es interessant, den schnellen Korrelationszerfall zu unterschiedlichen Energien miteinander zu vergleichen. In den Abbildungen 6.4 (c1) - (c3) ist die Autokorrelationsfunktion der Relativkoordinate zu drei unterschiedlichen Gesamtenergien dargestellt. Man ersieht hierbei, dass sich die Zerfallszeit der Autokorrelationen für eine Gesamtenergie  $E = -44.7 \cdot 10^{-6}$  [a.u.] (Abb. 6.4 (c1)) bei Übergang zu einer Energie  $E = -31.3 \cdot 10^{-6}$  [a.u.] (Abb. 6.4 (c2)) kaum verändert. Die Zerfallszeit ist die Zeit, in welcher die schnellen Autokorrelationen hinreichend abgeklungen sind. Für die zuvor diskutierten Fälle (c1) und (c2) beträgt sie schätzungsweise  $\tau_z = 350$ . Bei einer Gesamt-





**Abbildung 6.5:** Vergleich gemäß der Theorie vorhergesagter Momente nach Gl. (6.20) - (6.22) mit den numerisch berechneten Momenten der Schwerpunktsystems ( $\mathbf{R}$ ). Betrachtete Parameter:  $E = -36 \cdot 10^{-6}$  [a.u.] und  $B_z = 10^{-5}$  [a.u.] (mit  $\mathbf{R} = 0$  als Anfangsbedingung).

energie von  $E = -22.3 \cdot 10^{-6}$  [a.u.] (Abb. 6.4 (c3)) hingegen kann ungefähr eine Zerfallszeit  $\tau_z = 420$  ermittelt werden. Diese Beobachtung macht die auftretenden Abweichung zwischen theoretisch vorhergesagter und empirisch ermittelter Diffusion für größere Energien verständlich.

### 6.2.2 Zeitliche Entwicklung: Momente

Im vorangegangenen Abschnitt 6.2.1 wurde mittels einer Reihe von Untersuchungen nachgewiesen, dass die auf der Basis des Eliminationsverfahrens vorhergesagten Diffusionskoeffizienten durch die Beobachtung bestätigt werden. In diesem letzten Abschnitt wollen wir die langsam veränderlichen Größen, wie die Momente des Schwerpunktsystems, studieren. Unter Verwendung der zugehörigen reduzierten Bewegungsgleichung (6.17) können theoretisch die langsamen zweiten Momente, gemäß

$$\langle R_i^2 \rangle (t) = 2Dt \quad i = 1, 2 \quad \text{mit} \quad (6.20)$$

$$\langle R_i R_j \rangle (t) = 0 \quad i \neq j \quad (6.21)$$

und die ersten Momente mit

$$\langle R_i \rangle (t) = 0 \quad i = 1, 2 \quad (6.22)$$

vorhergesagt werden. Mit  $D = D_{11}^{(2)}$  bzw.  $D = D_{22}^{(2)}$  ist hier die Diffusionskonstante bezeichnet (wobei  $D_{11}^{(2)} \approx D_{22}^{(2)}$  nach vorhergehende Abschnitten gilt). Nach Gl. (6.21) - (6.22) sollten die gemischten Momente und die einfachen Momente verschwinden.

In Abb. 6.5 sind die langsamen Momente für eine Energie  $E = -36 \cdot 10^{-6}$  [a.u.] durch Simulation der Bewegungsgleichungen (6.7) - (6.10) des Wasserstoff-Atoms im homogenen Magnetfeld numerisch bestimmt worden. Als Anfangsbedingung wurde  $\mathbf{R} = 0$  gewählt. Tatsächlich beobachtet man, dass die Momente  $\langle R_1^2 \rangle$  und  $\langle R_2^2 \rangle$  wie nach Gl. (6.20) linear mit der Zeit anwachsen. Ihre Steigung ist in sehr guter Näherung durch die vorhergesagte Diffusionskonstante  $D$  gegeben. Alle anderen Momente verschwinden in Übereinstimmung mit der theoretischen Vorhersage nach Gl. (6.21) - (6.22). Das diffusive Verhalten der chaotischen Schwerpunktsbewegung wird hier also in Form des linearen Anwachsens der quadratischen Momente sichtbar.

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass das Verfahren zur Elimination schneller chaotischer Freiheitsgrade auch im Falle des Wasserstoff-Atoms im homogenen Magnetfeld eine gute Vorhersage der reduzierten langsamen Dynamik ermöglicht.

# Kapitel 7

## Zusammenfassung und Ausblick

Eine Vielzahl von Naturphänomenen hat seinen Ursprung in der Wechselwirkung von Systemen, deren Prozesse auf unterschiedlichen Zeitskalen ablaufen. Zahllose Beispiele aus nahezu dem gesamten Spektrum der Wissenschaftsdisziplinen sind bekannt. Ein interessantes Beispiel aus der Meteorologie ist das Ozean-Atmosphären-System, welches sowohl unserer Wetter als auch unser Klima bestimmt. Weitere Beispiele lassen sich im Zusammenhang mit der Molekulardynamik nennen.

Eine wichtige und große Klasse von Systemen stellen die konservativen Hamiltonschen Systeme mit Zeitskalentrennung dar. Hier gilt unser Interesse den gekoppelten niedrig-dimensionalen Systemen, deren schnelles Subsystem chaotisch ist. Bei den beschriebenen Systemen interessiert häufig lediglich die zeitliche Entwicklung einiger langsamer Variablen. Das volle System jedoch enthält infolge der einkoppelnden schnellen chaotischen Freiheitsgrade viele Informationen, deren Detailkenntnis zur Beschreibung der langsamen Dynamik nicht erforderlich ist, die aber deren Berechnung erheblich erschweren. Im Rahmen des hier vorgeschlagenen Eliminationsverfahrens werden die schnellen chaotischen Freiheitsgrade beseitigt und durch einen geeigneten stochastischen Prozess modelliert. Ist das schnelle Subsystem nicht chaotisch, so entspricht das Eliminationsverfahren in der 0-ten Ordnung anderen Verfahren wie der adiabatische Elimination oder dem *averaging*. Da a priori keine Trennung im Sinne von *schnellen* und *langsamen* Freiheitsgraden vorliegt, wird eine derartige Trennung hier angenommen. In der Regel sind u.U. aufwändige nichtlineare Transformationen der Systemvariablen erforderlich, um eine derartige Trennung zu erreichen.

Eine effektiv reduzierte Beschreibung im Sinne einer Fokker-Planck-Gleichung ergibt sich hier durch eine formale Störungsrechnung in Ordnungen des Zeitskalenparameters  $\varepsilon$  unter Verwendung einer Markov-Approximation. Es wird hierbei eine ausgeprägte Zeitskalentrennung mit  $0 < \varepsilon \ll 1$  vorausgesetzt. Dem schnellen chaotischen System kommt in diesem Zusammenhang die Rolle eines endlich-dimensionalen Energiereservoirs zu. Die sich ergebenden Dämpfungs- und Diffusionsterme erfassen auf dieser Beschreibungsebene in effektiver Weise den Einfluss der schnellen chaotischen Freiheitsgrade auf die langsame Dynamik. Zwischen ihnen besteht ein Zusammenhang, welcher physikalisch als Fluktuations-Dissipations-Relation interpretiert werden kann.

Bemerkenswert ist hier die enorme Kleinheit der gefundenen Dämpfung. Sie erscheint in quadratischer Ordnung des Zeitskalenparameters  $\varepsilon$ , während die zugehörigen Diffusionskoeffizienten von linearer Ordnung in  $\varepsilon$  sind. Ohne die *natürliche Skalierung* der Gesamtenergie mit  $1/\varepsilon$ , welche im Hinblick auf eine entsprechende Reskalierung des schnellen Hamiltonians sinnvoll erscheint, wäre auch die Diffusion übereinstimmend von der Ordnung  $\varepsilon^2$ . Im Gegensatz hierzu ergeben sich die Dämpfungs- und Diffusionskoeffizienten im nicht-Hamiltonschen Fall lediglich in linearer Ordnung. Die Ursache für diesen Unterschied liegt in der symplektischen Struktur der Hamiltonschen Bewegungsgleichungen. Sie führt bei der Kopplung zweier Hamiltonscher Systeme zur einer Vermischung der Ordnungen des Zeitskalenparameters  $\varepsilon$ .

In der vorliegenden Arbeit wurde durch detaillierte numerische und analytische Untersuchungen einer Reihe von Hamiltonschen Systemen die Genauigkeit und Güte des vorgestellten Eliminationsverfahrens bei der Vorhersage der langsamen Dynamik, insbesondere im Langzeitlimes, demonstriert.

In einem ersten Schritt wurden lineare Systeme, wie die *pseudo-Hamiltonschen Kubomodelle* in Kapitel 3 betrachtet. Infolge ihrer Linearität erlauben sie, im Gegensatz zu nichtlinearen Systemen, eine vollständig analytische Behandlung. Um den hinreichenden Zerfall der schnellen Korrelationen zu gewährleisten, wurde der *Kubo-Oszillator* als schnelles Subsystem gewählt. Bei diesem handelt es sich um ein energieerhaltendes stochastisches System. Das einkoppelnde Rauschen ist *Gaußsch*. Damit entspricht die Dynamik des schnellen Subsystems idealerweise einem Markov-Prozess, wodurch die im Zusammenhang mit dem Eliminationsverfahren benötigte Markov-Approximation exakt ist.

Die theoretisch vorhergesagten Dämpfungs- und Diffusionskoeffizienten konnten sowohl anhand empirischer Verfahren zur Bestimmung von Drift- und Diffusionskoeffizienten als auch analytisch mittels einer heuristisch durchgeführten Diracschen Störungsrechnung verifiziert werden. Die Untersuchungen der Momente, der Autokorrelationsfunktion und der stationären Dichte des langsamen harmonischen Oszillators, welcher hier als langsames System verwendet wurde, bestätigten vollständig sowohl im Kurzzeit- als auch im Langzeitlimes die Prognosen, die sich auf der Basis des Eliminationsverfahrens ergaben.

Durch die lineare Ankopplung des langsamen harmonischen Oszillators mit einer wachsenden Anzahl von Kubo-Oszillatoren konnte der Übergang zum thermodynamischen Limes ausgeführt werden. Übereinstimmend mit den Vorhersagen des Eliminationsverfahrens wuchs die Dämpfung mit zunehmender Zahl der schnellen Freiheitsgrade bzw. Dimensionen bei nahezu unveränderter Diffusion. Aufgrund der Linearität der betrachteten Kubomodelle konnte die stationäre Dichte des langsamen Systems analytisch berechnet werden. Für das Ein- und Zweikubosystem konnte sie durch die reduzierten stationären Dichten, welche auf der Basis der reduzierten Bewegungsgleichung gewonnen wurden, reproduziert werden. Im thermodynamischen Limes konvergierte diese Dichte gegen die *Boltzmann-Verteilung*, wodurch das schnelle System bestehend aus unendlich vielen Kubo-Oszillatoren als *thermisches Wärmebad* interpretiert werden konnte. Klassisch wird ein Wärmebad mittels einer unendlich großen Zahl von harmonischen Oszillatoren unterschiedlicher Frequenzen konstruiert. Dabei sind die Frequenzen so verteilt, dass das Leistungsspektrum *Gaußsch* ist. Bei gleicher Frequenz aller Oszillatoren würde sich kein thermisches Wärmebad ergeben.

Im Gegensatz hierzu weisen die betrachteten Kubo-Oszillatoren, welche das Wärmebad erzeugen, die gleiche Frequenz auf.

Abweichend von der idealisierten Konstellation, welche man bei den stochastischen Kubomodellen vorfindet, ist Hamiltonsches Chaos im Allgemeinen nicht als Markov-Prozess beschreibbar. Typischerweise ist es charakterisiert durch einen gemischten Phasenraum mit koexistierenden regulären und chaotischen Regionen. Die regulären Inseln sind verantwortlich für die im Mittel algebraisch zerfallenden Wiederkehr-Verteilungen für große Zeiten. Damit ergibt sich die Frage nach der Gültigkeit und Anwendbarkeit der Markov-Approximation, da ein hinreichend schneller Zerfall der Korrelationen im chaotischen Subsystem nicht immer gewährleistet ist. Mit Hilfe von Untersuchungen der Wiederkehr-Verteilungen der schnellen Schanz-Abbildung bei Ankopplung unterschiedlicher langsamer Abbildungen in Kapitel 4 wurde qualitativ gezeigt, dass sich unabhängig von der Dynamik der langsamen Komponente eine Ankopplung verbunden mit einer geeigneten Zeitskalentrennung positiv auf die Zerfallseigenschaften der schnellen Korrelationen auswirkt. Die Ankopplung an ein langsames System führt gewissermaßen zu einer Verminderung bzw. Zerstörung ursprünglich vorhandener Korrelationen des schnellen Systems, wodurch der Zerfall begünstigt wird.

Bei einer Reihe gekoppelter Hamiltonscher Systeme in Kapitel 5 erwies sich das betrachtete Eliminationsverfahren selbst unter schwierigen Bedingungen, wie z.B. bei ausgeprägt gemischtem Phasenraum, als erfolgreich. Die gekoppelten Systeme unterschieden sich lediglich in der Wahl des schnellen chaotischen Subsystems, während der harmonische Oszillator als langsames System beibehalten wurde. Als schnelle Subsysteme wurden das Quartische System, sein 6-dimensionales Analogon und das Hénon-Heiles-System gewählt. Das schnelle und langsame System wurden über eine harmonische Kopplung miteinander verbunden. Besonders bemerkenswert ist, dass selbst bei der Ankopplung des Hénon-Heiles-System das Langzeitverhalten des langsamen Systems in sehr guter Näherung vorhergesagt werden konnte. Dieses Ergebnis ist deshalb so bemerkenswert, weil das Hénon-Heiles-System selbst bei der maximalen Energie weiterhin einen ausgeprägt gemischten Phasenraum aufweist. Zusätzlich konnte anhand dieses Beispielsystems der Nachweis erbracht werden, dass das Eliminationsverfahren unabhängig sowohl von der Symmetrie des schnellen Potentials als auch von der Art der Ankopplung, welche hier entweder über die symmetrische oder asymmetrische schnelle Variablen realisiert wird, uneingeschränkt anwendbar ist. Die Untersuchungen wurden durch Vergleich der numerisch bestimmten stationären Dichte des langsamen Oszillators und der zugehörigen reduzierten Dichte, welche sich aus der reduzierten Bewegungsgleichung ergab, durchgeführt.

Aus dem Vergleich des Verhältnisses des Dämpfungs- und Diffusionsfaktors des langsamen harmonischen Oszillators bei Ankopplung des *Quartischen Systems* und seines 6-dimensionalen Analogons kann eine Veränderung der zugehörigen Fluktuations-Dissipations-Relation zu Gunsten der Dämpfung aufgedeckt werden, genau wie im Falle der stochastischen Kubomodelle. Dies spiegelt sich in einer veränderten Verteilung der stationären Dichte des langsamen Oszillators wider. Ihr Verlauf wird durch die zugehörigen reduzierten stationären Dichten, die man auf der Basis des Eliminationsverfahrens gewinnt, nahezu perfekt nachgezeichnet. Außerdem konnte mit derselben Güte sowohl das Langzeit-

als auch das Kurzzeitverhalten des langsamen Systems exemplarisch anhand der dynamischen Entwicklung der zugehörigen mittleren kinetischen Energie vorhergesagt werden. Die Abweichungen auf kurzen Zeitskalen konnten auf nicht-Markovsche Effekte zurückgeführt werden. Die Ursache ist der nicht hinreichende Zerfall der schnellen Korrelationen auf kurzen Zeitintervallen.

Eine systematische Untersuchung derartiger Abweichungen auf der Basis der Diffusionskoeffizienten führte zu dem Schluss, dass die Vorhersagen, welche auf der Grundlage des Eliminationsverfahrens getroffen werden, um so besser sind, je ausgeprägter die Zeitskalentrennung ist.

Abschließend konnte gezeigt werden, dass das Verfahren zur Elimination schneller chaotischer Freiheitsgrade in Hamiltonschen Systemen auch bei der Anwendung auf realitätsnahe physikalischer Systeme, wie das Wasserstoff-Atom im homogenen Magnetfeld in Kapitel 6, zu guten Resultaten führt. Infolge des großen Massenverhältnisses von Kern- und Elektronenmasse findet man eine ausgeprägte Zeitskalentrennung zwischen Relativ- und Schwerpunktsbewegung. Für die langsame chaotische Schwerpunktsbewegung wurde durch Elimination der schnellen chaotischen Freiheitsgrade der Relativbewegung eine Diffusionsgleichung abgeleitet. Die in diesem Zusammenhang über ein großes Energieintervall des chaotischen Regimes vorhergesagten Diffusionskoeffizienten wiesen eine gute Übereinstimmung mit den tatsächlich beobachteten Koeffizienten auf. Außerdem erfolgte die Vorhersage der zeitlich veränderlichen Momente der langsamen Schwerpunktsbewegung hier mit einer hohen Genauigkeit.

## Ausblick

Die Ergebnisse, welche in dieser Arbeit durch systematische Untersuchung einiger Hamiltonscher Systeme gewonnen wurden, belegen die erfolgreiche Beschreibung der langsamen Dynamik auf der Grundlage des hier betrachteten Verfahrens zur Elimination schneller chaotischer Freiheitsgrade. Diese Systeme wurden numerisch simuliert. Es erscheint wünschenswert und erfolgversprechend dieses Verfahren in einem nächsten Schritt auf realistische physikalische Beispiele, wie z.B. Molekülsysteme anzuwenden.

In der vorliegenden Arbeit wurde das Eliminationsverfahren häufig hinsichtlich der linearen Kopplung betrachtet. Der Grund hierfür war, dass das Eliminationsverfahren für diesen Kopplungstyp auf vereinfachte Ausdrücke der zugehörigen reduzierten Bewegungsgleichung führt, während für eine allgemeinere Kopplung komplizierte Ausdrücke zu erwarten sind. Um eine breitere Anwendung des Verfahrens zu erreichen, ist es notwendig, das Eliminationsverfahren auch für den allgemeineren Fall der nichtlinearen Kopplung zu betrachten. Eine nichtlineare Kopplung hätte eine veränderte Dämpfung zur Konsequenz. Im Gegensatz zur viskosen Dämpfung, welche sich bei linearer Kopplung ergibt, wäre hierbei eine wesentlich komplexere Dämpfung zu erwarten.

Es gibt einige Ansätze und Arbeiten, ein derartiges Verfahren für den quantenmechanischen Fall zu konstruieren [50]. Sie belegen das Interesse und die Erfordernis eines solchen Eliminationsverfahrens, um eine Reihe quantenmechanischer Systeme in geeigneter Weise zu beschreiben. Eine Verallgemeinerung des hier vorgeschlagenen Eliminationsverfahrens

auf den quantenmechanischen Fall ist ein lohnenswertes Zukunftsprojekt.

Um eine präzisere Abschätzung des Fehlers zu erreichen, welcher durch die Verwendung der Markov-Approximation resultiert, ist es erforderlich, weitergehende Untersuchungen sowohl numerisch auf der Basis der Wiederkehr-Verteilungen als auch auf analytischem Wege durchzuführen. Ein erster Schritt in diese Richtung wurde in dieser Arbeit in Zusammenhang mit den Untersuchungen in Kapitel 4 unternommen. Aufbauend darauf können weitere Untersuchungen durchgeführt werden. Insbesondere eine quantitative Analyse könnte einen tieferen Einblick in das Problem ermöglichen.

Ein weitere offene Fragestellung besteht darin, den Zusammenhang zwischen dem Maß an Chaos gemessen an den Lyapunov-Exponenten bzw. an der KS-Entropie und der *Stärke des Rauschens* bei der stochastischen Modellierung zu ermitteln. Dazu sind weitergehende Untersuchungen, insbesondere Dimensions- und Entropiebetrachtungen durchzuführen.





# Anhang A

## Numerische Integratoren

Im Rahmen dieser Arbeit wurden eine Reihe von Systemen numerisch simuliert. Hierbei kamen unterschiedliche numerische Integratoren zur Anwendung.

### Numerische Integratoren für stochastische Systeme mit symplektischer Struktur

Bei den Pseudo-Hamiltonschen Kubomodellen aus Kapitel 3 handelt es sich um ganz spezielle stochastisch angetriebene Systeme. Das Gaußsche Rauschen wird tangential in den Kubo-Oszillator eingekoppelt, wodurch die zugehörigen Bewegungsgleichungen eine symplektische Struktur aufweisen. Sie entsprechen Langevin-Gleichungen mit multiplikativem Rauschanteil. Diese Gleichungen sind im Sinne von Stratonovich zu interpretieren. Für diese spezielle Klasse von Systemen gibt es nur wenige numerische Integrationsverfahren, die hinreichend genau arbeiten. Besonders zu empfehlen sind die Verfahren für stochastische Systeme mit symplektischer Struktur, die Milstein et al. [51] in seinem kürzlich erschienen Artikel vorschlägt.

Bei der Simulation der Pseudo-Hamiltonschen Kubomodelle wurde hier die *midpoint method* [51] mit großem Erfolg angewendet. Dabei handelt es sich um ein vollständig implizites Integrationsverfahren für energieerhaltende, stochastische Systeme. Ist das betrachtete System vollständig symmetrisch, wie es bei den Kubomodellen der Fall ist, dann kann für verhältnismäßig große Integrationsschrittweiten der Zeit eine nahezu perfekte Energieerhaltung festgestellt werden. Die betrachteten Bewegungsgleichungen der Kubomodelle sind von der Form

$$dX = a(t, X)dt + \sum_{\mu=1}^m b_{\mu}(t, X)\xi_{\mu}(t)\sqrt{dt}, \quad (1.1)$$

wobei  $X$  stellvertretend für die kanonisch konjugierten Variablen  $(Q, P, q, p)$  steht. Die *midpoint method* ist in der folgenden Weise gegeben:

$$X_{j+1} = X_j + a\left(t_j + \frac{dt}{2}, \frac{X_j + X_{j+1}}{2}\right)dt + \sum_{\mu=1}^m b_{\mu}\left(t_j, \frac{X_j + X_{j+1}}{2}\right)(\xi_{\mu})_j\sqrt{dt}. \quad (1.2)$$

Für das konjugierte Orts- und Impulsvariablen-Paar ergibt sich:

$$Q_{j+1} = Q_j + a_Q \left( t_j + \frac{dt}{2}, \frac{Q_j + Q_{j+1}}{2}, \frac{P_j + P_{j+1}}{2}, \frac{q_j + q_{j+1}}{2}, \frac{p_j + p_{j+1}}{2} \right) dt \\ + \sum_{\mu=1}^m b_{\mu}^Q \left( t_j, \frac{Q_j + Q_{j+1}}{2}, \frac{P_j + P_{j+1}}{2}, \frac{q_j + q_{j+1}}{2}, \frac{p_j + p_{j+1}}{2} \right) (\xi_{\mu})_j \sqrt{dt} \quad (1.3)$$

$$P_{j+1} = P_j + a_P \left( t_j + \frac{dt}{2}, \frac{Q_j + Q_{j+1}}{2}, \frac{P_j + P_{j+1}}{2}, \frac{q_j + q_{j+1}}{2}, \frac{p_j + p_{j+1}}{2} \right) dt \\ + \sum_{\mu=1}^m b_{\mu}^P \left( t_j, \frac{Q_j + Q_{j+1}}{2}, \frac{P_j + P_{j+1}}{2}, \frac{q_j + q_{j+1}}{2}, \frac{p_j + p_{j+1}}{2} \right) (\xi_{\mu})_j \sqrt{dt}. \quad (1.4)$$

Das implizite gekoppelte Gleichungssystem (1.3) - (1.4) kann im Falle des Einkubo- und Zweikubosystems aus Kapitel 3 so umgeformt werden, dass die Variablen in ihrer expliziten Darstellung erscheinen.

### Numerische Integratoren für konservative Hamiltonsche Systeme

In dieser Arbeit wurden eine Reihe von energierhaltenden Hamiltonschen Systemen in Kapitel 5 und 6 vorgestellt. Zur ihrer Simulation wurde stets ein numerisches *Runge-Kutta*-Integrationsverfahren 7-ter Ordnung, welches speziell für Systeme mit symplektischer Struktur geeignet ist, verwendet.

# Anhang B

## Zustandsdichte Quartischer Systeme: Elliptische Integrale

Für die Auswertung der theoretischen Ausdrücke für Diffusion- und Dämpfungskoeffizient benötigt man neben den Koeffizienten  $d_0$  und  $d_1$  die Zustandsdichte des isolierten Quartischen Systems (bzw. seines 6-dimensionalen Analogons), das als schnelles Subsystem verwendet wird.

### Zustandsdichte des Quartischen Systems

Man kann nun zeigen, dass die Zustandsdichte des Quartischen Systems auf ein elliptisches Integral zurückgeführt werden kann. Dazu beginnen wir mit der Definition der Zustandsdichte:

$$\begin{aligned} Z^{(0)}(E) &= \int dq_0 \int dq_1 \int dp_0 \int dp_1 \delta(E - \mathcal{H}_s) \\ &= \int dq_0 \int dq_1 \int dp_0 \int dp_1 \delta\left(E - \frac{1}{2}(q_0^2 + p_0^2 + q_1^2 + p_1^2 + q_0^2 q_1^2)\right). \end{aligned} \quad (2.1)$$

Mit  $p_0 = r \sin \varphi$  und  $p_1 = r \cos \varphi$  erhält man:

$$\begin{aligned} Z^{(0)}(E) &= \int dq_0 \int dq_1 \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\infty dr r \delta\left(\underbrace{\left(E - \frac{1}{2}(q_0^2 + q_1^2 + q_0^2 q_1^2)\right)}_{=:\hat{E}} - \underbrace{\frac{r^2}{2}}_{\Rightarrow \hat{r} = \frac{r}{\sqrt{2}}}\right) \\ &= 4\pi \int dq_0 \int dq_1 \int_0^\infty d\hat{r} \hat{r} \delta(\hat{E}^2 - \hat{r}^2) \\ &= 4\pi \int dq_0 \int dq_1 \int_0^\infty d\hat{r} \hat{r} \frac{1}{2\hat{E}} \delta(\hat{E} - \hat{r}) \Theta(\hat{E}) \\ &= 2\pi \int dq_0 \int dq_1 \Theta(\hat{E}) \\ &= 2\pi \int_0^{\sqrt{2E}} dq_0 \int_0^{\sqrt{\frac{2E - q_1^2}{1 + q_1^2}}} dq_1 \end{aligned}$$

$$= 2\pi \int_0^{\sqrt{2E}} dq_1 \sqrt{\frac{2E - q_1^2}{1 + q_1^2}}. \quad (2.2)$$

Das elliptische Integral (2.2) kann mittels konventioneller numerischer Integrationsverfahren berechnet werden. Hier wurde zur Berechnung von (2.2) *mathematica* verwendet.

### Zustandsdichte des 6-dimensionalen Quartischen Systems

In ähnlicher Weise kann die Zustandsdichte im Falle des 6-dimensionalen Quartischen Systems berechnet werden. Auch hier findet man ein elliptisches Integral:

$$Z^{(0)}(E) = 2\pi \int_0^{\sqrt{2E}} dq_2 \int_0^{\sqrt{\frac{2E - q_2^2}{1 + q_2^2}}} dq_1 \int_0^{\sqrt{\frac{2E - (q_1^2 + q_2^2 + q_1^2 q_2^2)}{1 + q_1^2 + q_2^2}}} dq_0 \sqrt{\widehat{E}^2 - \vartheta q_0^2}. \quad (2.3)$$

Mit  $\widehat{E}^2 := (2E - (q_1^2 + q_2^2 + q_1^2 q_2^2))$  und  $\vartheta := (1 + q_1^2 + q_2^2)$  sind hier einige Abkürzungen eingeführt worden. Das elliptische Integral (2.3) lässt sich hier ebenfalls mit Hilfe numerischer Integrationsverfahren auswerten.

# Anhang C

## Herleitung: Diffusionsgleichung der Schwerpunktsbewegung

In Kapitel 6 wurde die Diffusionsgleichung, welche man für die chaotische Schwerpunktsbewegung mit Hilfe des hier vorgestellten Eliminationsverfahrens erhält, erwähnt. Hier soll die Herleitung dieser reduzierten Gleichung erfolgen. Als Ausgangspunkt wählen wir den Hamiltonian des Wasserstoff-Atoms im homogenen Magnetfeld in der Aufteilung nach Gl. (6.12) - (6.15).

Die Liouville-Operatoren (2.18) - (2.19) ergeben sich hier zu:

$$i\mathcal{L}_k \cdot = \{\tilde{\mathcal{H}}_k, \cdot\} = - \underbrace{\sum_{j=1}^3 \frac{\partial \tilde{\mathcal{H}}_k}{\partial r_j} \frac{\partial}{\partial p_j}}_{i\mathcal{L}_{k,s}} + \underbrace{\sum_{j=1}^3 \frac{\partial \tilde{\mathcal{H}}_k}{\partial K_j} \frac{\partial}{\partial R_j}}_{i\mathcal{L}_{k,l}} \quad (3.1)$$

$$i\mathcal{L}_l \cdot = \{\tilde{\mathcal{H}}_l, \cdot\} = \sum_{j=1}^3 \frac{\partial \tilde{\mathcal{H}}_l}{\partial K_j} \frac{\partial}{\partial R_j} \quad (3.2)$$

$$i\hat{\mathcal{L}}_l \cdot = i\mathcal{L}_l + i\mathcal{L}_{k,l} = \sum_{j=1}^3 \frac{\partial}{\partial K_j} (\tilde{\mathcal{H}}_l + \tilde{\mathcal{H}}_k) \frac{\partial}{\partial R_j} \quad (3.3)$$

$$i\mathcal{L}_s \cdot = \{\tilde{\mathcal{H}}_s, \cdot\} = \sum_{j=1}^3 \left( \frac{\partial \tilde{\mathcal{H}}_s}{\partial p_j} \frac{\partial}{\partial r_j} - \frac{\partial \tilde{\mathcal{H}}_s}{\partial r_j} \frac{\partial}{\partial p_j} \right) \quad (3.4)$$

$$i\hat{\mathcal{L}}_s^{(\varepsilon)} \cdot = i\mathcal{L}_s + \varepsilon i\mathcal{L}_{k,s} \quad (3.5)$$

Unter Berücksichtigung des Magnetfeldes  $\mathbf{B} = (0, 0, B_z)$  (wobei  $B_z$  konstant ist) kann der langsame und der Wechselwirkungs-Hamiltonian gemäß:

$$\tilde{\mathcal{H}}_l = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^3 K_j^2 \quad \text{und} \quad \tilde{\mathcal{H}}_k = -eB_z(K_2 r_1 - K_1 r_2) \quad (3.6)$$

umgeformt werden. Wir betrachten die Nakajima-Zwanzig-Gleichung in Bornscher Nähe-

–ung entsprechend Gl. (2.33):

$$\frac{\partial \bar{\rho}_t}{\partial t} = \underbrace{-\langle i\hat{\mathcal{L}}_l \rangle^{(\varepsilon)} \bar{\rho}_t}_{\text{Frequenzterm}} + \underbrace{\int_0^t \langle i\mathcal{L}_{k,l} e^{-i\hat{\mathcal{L}}_s^{(\varepsilon)} t'/\varepsilon} \mathcal{Q}_\varepsilon i\hat{\mathcal{L}}_l \rangle^{(\varepsilon)} \bar{\rho}_{t-t'} dt'}_{\text{Gedächtnisterm}}. \quad (3.7)$$

Der Frequenzterm ergibt sich zu:

$$-\langle i\hat{\mathcal{L}}_l \rangle^{(\varepsilon)} \bar{\rho}_t = -\sum_{j=1}^3 K_j \frac{\partial}{\partial R_j} \bar{\rho}_t - eB_z \left( \underbrace{\frac{\partial}{\partial R_1} \langle r_2 \rangle^{(\varepsilon)}}_{=0} \bar{\rho}_t - \underbrace{\frac{\partial}{\partial R_2} \langle r_1 \rangle^{(\varepsilon)}}_{=0} \bar{\rho}_t \right) = -\sum_{j=1}^3 K_j \frac{\partial}{\partial R_j} \bar{\rho}_t \quad (3.8)$$

Die Terme  $\frac{\partial}{\partial R_1} \langle r_2 \rangle^{(\varepsilon)}$  bzw.  $\frac{\partial}{\partial R_1} \langle r_1 \rangle^{(\varepsilon)}$  ergeben sich hier zu Null, da die adiabatische Dichte  $\rho_{ad}^{(\varepsilon)}(\mathbf{r}, \mathbf{p} | \mathbf{R}, \mathbf{K}) = \frac{1}{Z^{(\varepsilon)}(E)} \delta(\varepsilon \mathcal{H} - E)$  infolge des Gesamthamiltonian  $\mathcal{H}$  nach Gl. (6.6) nicht explizit von  $\mathbf{R}$  abhängt. Im Folgenden wollen wir zur Vereinfachung folgende Notation einführen:

$$\text{Tr}_s [\dots] := \int \int \dots d\mathbf{r} d\mathbf{p} \quad \text{und} \quad \langle \dots \rangle^{(\varepsilon)} := \text{Tr}_s \left[ \dots \rho_{ad}^{(\varepsilon)} \right]. \quad (3.9)$$

Die Abkürzung (3.9) ist gewissermaßen die *schnelle Spur* und bezeichnet die Integration über den schnellen Phasenraum  $(\mathbf{r}, \mathbf{p})$  der Relativbewegung.

Der Integralkern des Gedächtnisterms aus Gl. (3.7) kann hier wie folgt umgeschrieben werden:

$$\begin{aligned} I_{t-t'}^G &:= \langle i\mathcal{L}_{k,l} e^{-i\hat{\mathcal{L}}_s^{(\varepsilon)} t'/\varepsilon} \mathcal{Q}_\varepsilon i\hat{\mathcal{L}}_l \rangle^{(\varepsilon)} \bar{\rho}_{t-t'} \\ &= \text{Tr}_s \left[ \left( \sum_j \frac{\partial \tilde{\mathcal{H}}_k}{\partial K_j} \frac{\partial}{\partial R_j} \right) e^{-i\hat{\mathcal{L}}_s^{(\varepsilon)} t'/\varepsilon} (1 - \mathcal{P}_\varepsilon) i\hat{\mathcal{L}}_l \rho_{ad}^{(\varepsilon)} \right] \bar{\rho}_{t-t'} \\ &= \sum_j \frac{\partial}{\partial R_j} \left\{ \text{Tr}_s \left[ \frac{\partial \tilde{\mathcal{H}}_k}{\partial K_j} e^{-i\hat{\mathcal{L}}_s^{(\varepsilon)} t'/\varepsilon} i\hat{\mathcal{L}}_l \rho_{ad}^{(\varepsilon)} \right] - \text{Tr}_s \left[ \frac{\partial \tilde{\mathcal{H}}_k}{\partial K_j} e^{-i\hat{\mathcal{L}}_s^{(\varepsilon)} t'/\varepsilon} i\hat{\mathcal{L}}_l \rho_{ad}^{(\varepsilon)} \text{Tr}_s \left[ i\hat{\mathcal{L}}_l \rho_{ad}^{(\varepsilon)} \right] \right] \right\} \bar{\rho}_{t-t'} \\ &= \sum_j \frac{\partial}{\partial R_j} \text{Tr}_s \left[ \left\{ \frac{\partial \tilde{\mathcal{H}}_k}{\partial K_j} e^{-i\hat{\mathcal{L}}_s^{(\varepsilon)} t'/\varepsilon} - \text{Tr}_s \left[ \frac{\partial \tilde{\mathcal{H}}_k}{\partial K_j} e^{-i\hat{\mathcal{L}}_s^{(\varepsilon)} t'/\varepsilon} \rho_{ad}^{(\varepsilon)} \right] \right\} i\hat{\mathcal{L}}_l \rho_{ad}^{(\varepsilon)} \right] \bar{\rho}_{t-t'}. \end{aligned} \quad (3.10)$$

Der Index in Gl. (3.10) ist  $j = 1, 2$ . Für beide Fälle ist eine völlig analoge Rechnung durchzuführen. Daher reicht es hier z.B. den Fall  $j = 1$  zu betrachten:

$$\begin{aligned} \Rightarrow & \frac{\partial}{\partial R_1} \text{Tr}_s \left[ \left\{ \frac{\partial \tilde{\mathcal{H}}_k}{\partial K_1} e^{-i\hat{\mathcal{L}}_s^{(\varepsilon)} t'/\varepsilon} - \text{Tr}_s \left[ \frac{\partial \tilde{\mathcal{H}}_k}{\partial K_1} e^{-i\hat{\mathcal{L}}_s^{(\varepsilon)} t'/\varepsilon} \rho_{ad}^{(\varepsilon)} \right] \right\} i\hat{\mathcal{L}}_l \rho_{ad}^{(\varepsilon)} \right] \bar{\rho}_{t-t'} \\ &= eB_z \frac{\partial}{\partial R_1} \text{Tr}_s \left[ \left\{ \underbrace{r_2 e^{-i\hat{\mathcal{L}}_s^{(\varepsilon)} t'/\varepsilon}}_{r_2(t)} - \underbrace{\text{Tr}_s \left[ r_2 e^{-i\hat{\mathcal{L}}_s^{(\varepsilon)} t'/\varepsilon} \rho_{ad}^{(\varepsilon)} \right]}_{\langle r_2(t) \rangle^{(\varepsilon)}} \right\} i\hat{\mathcal{L}}_l \rho_{ad}^{(\varepsilon)} \right] \bar{\rho}_{t-t'} \\ &= eB_z \frac{\partial}{\partial R_1} \text{Tr}_s \left[ \delta_{ad}^{(\varepsilon)} r_2(t) i\hat{\mathcal{L}}_l \rho_{ad}^{(\varepsilon)} \right] \bar{\rho}_{t-t'} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= eB_z \frac{\partial}{\partial R_1} \text{Tr}_s \left[ \delta_{ad}^{(\varepsilon)} r_2(t) \left( \sum_j \frac{\partial \tilde{\mathcal{H}}_l}{\partial K_j} \frac{\partial}{\partial R_j} \right) \rho_{ad}^{(\varepsilon)} \right] \bar{\rho}_{t-t'} \\
&= eB_z \frac{\partial}{\partial R_1} \text{Tr}_s \left[ \delta_{ad}^{(\varepsilon)} r_2(t) \left( \sum_j \frac{\partial \tilde{\mathcal{H}}_l}{\partial K_j} \frac{\partial}{\partial R_j} \right) \rho_{ad}^{(\varepsilon)} \right] \bar{\rho}_{t-t'} \\
&= (eB_z)^2 \frac{\partial}{\partial R_1} \text{Tr}_s \left[ \delta_{ad}^{(\varepsilon)} r_2(t) \left( r_2 \frac{\partial}{\partial R_1} - r_1 \frac{\partial}{\partial R_2} \right) \rho_{ad}^{(\varepsilon)} \right] \bar{\rho}_{t-t'} \\
&= (eB_z)^2 \left\{ \frac{\partial^2}{\partial R_1^2} \text{Tr}_s \left[ \delta_{ad}^{(\varepsilon)} r_2(t) r_2 \rho_{ad}^{(\varepsilon)} \right] \bar{\rho}_{t-t'} - \frac{\partial}{\partial R_1} \text{Tr}_s \left[ \frac{\partial}{\partial R_1} \delta_{ad}^{(\varepsilon)} r_2(t) \cdot r_2 \rho_{ad}^{(\varepsilon)} \right] \bar{\rho}_{t-t'} \right. \\
&\quad \left. - \frac{\partial^2}{\partial R_1 \partial R_2} \text{Tr}_s \left[ \delta_{ad}^{(\varepsilon)} r_2(t) r_1 \rho_{ad}^{(\varepsilon)} \right] \bar{\rho}_{t-t'} + \frac{\partial}{\partial R_1} \text{Tr}_s \left[ \frac{\partial}{\partial R_2} \delta_{ad}^{(\varepsilon)} r_2(t) \cdot r_1 \rho_{ad}^{(\varepsilon)} \right] \bar{\rho}_{t-t'} \right\}. \quad (3.11)
\end{aligned}$$

$\underbrace{\hspace{15em}}_{=0, \text{ wegen } (*)}$   
 $\underbrace{\hspace{15em}}_{=0, \text{ wegen } (**)}$

Das die Terme (\*) und (\*\*) sich zu Null ergeben, ersieht man, wenn man diese Terme einer partiellen Integration unterwirft:

$$(*) \Rightarrow \text{Tr}_s \left[ \frac{\partial}{\partial R_1} \delta_{ad}^{(\varepsilon)} r_2(t) \cdot r_2 \rho_{ad}^{(\varepsilon)} \right] \bar{\rho}_{t-t'} = -\text{Tr}_s \left[ \delta_{ad}^{(\varepsilon)} r_2(t) \cdot r_2 \frac{\partial}{\partial R_1} \rho_{ad}^{(\varepsilon)} \right] \bar{\rho}_{t-t'} \quad (3.12)$$

$$(**) \Rightarrow \text{Tr}_s \left[ \frac{\partial}{\partial R_2} \delta_{ad}^{(\varepsilon)} r_2(t) \cdot r_1 \rho_{ad}^{(\varepsilon)} \right] \bar{\rho}_{t-t'} = -\text{Tr}_s \left[ \delta_{ad}^{(\varepsilon)} r_2(t) \cdot r_1 \frac{\partial}{\partial R_2} \rho_{ad}^{(\varepsilon)} \right] \bar{\rho}_{t-t'} \quad (3.13)$$

und sich anschließend die folgenden Teilterme ansieht:

$$\frac{\partial}{\partial R_1} \rho_{ad}^{(\varepsilon)} = \frac{\partial}{\partial R_1} \left( \frac{1}{Z^{(\varepsilon)}} \delta(\varepsilon \tilde{\mathcal{H}} - E) \right) = 0 \quad (3.14)$$

$$\frac{\partial}{\partial R_2} \rho_{ad}^{(\varepsilon)} = \frac{\partial}{\partial R_2} \left( \frac{1}{Z^{(\varepsilon)}} \delta(\varepsilon \tilde{\mathcal{H}} - E) \right) = 0. \quad (3.15)$$

Wenn man beachtet, dass  $r_j = \delta_{ad}^{(\varepsilon)} r_j$  gilt, dann vereinfacht sich der Integralkern des Gedächtnisterms Gl. (3.11) wie folgt:

$$\begin{aligned}
\text{Gl. (3.11)} &= (eB_z)^2 \left\{ \frac{\partial^2}{\partial R_1^2} \text{Tr}_s \left[ \delta_{ad}^{(\varepsilon)} r_2(t) \delta_{ad}^{(\varepsilon)} r_2 \rho_{ad}^{(\varepsilon)} \right] \bar{\rho}_{t-t'} \right. \\
&\quad \left. - \frac{\partial^2}{\partial R_1 \partial R_2} \text{Tr}_s \left[ \delta_{ad}^{(\varepsilon)} r_2(t) \delta_{ad}^{(\varepsilon)} r_1 \rho_{ad}^{(\varepsilon)} \right] \bar{\rho}_{t-t'} \right\}. \quad (3.16)
\end{aligned}$$

Ganz analog erhält man den zweiten Term des Integralkerns (3.10) (für  $j = 2$ ):

$$\begin{aligned}
\Rightarrow & \frac{\partial}{\partial R_2} \text{Tr}_s \left[ \left\{ \frac{\partial \tilde{\mathcal{H}}_k}{\partial K_2} e^{-i\tilde{\mathcal{L}}_s^{(\varepsilon)} t'/\varepsilon} - \text{Tr}_s \left[ \frac{\partial \tilde{\mathcal{H}}_k}{\partial K_2} e^{-i\tilde{\mathcal{L}}_s^{(\varepsilon)} t'/\varepsilon} \rho_{ad}^{(\varepsilon)} \right] \right\} i \hat{\mathcal{L}}_1 \rho_{ad}^{(\varepsilon)} \right] \bar{\rho}_{t-t'} \\
&= (eB_z)^2 \left\{ \frac{\partial^2}{\partial R_2^2} \text{Tr}_s \left[ \delta_{ad}^{(\varepsilon)} r_1(t) \delta_{ad}^{(\varepsilon)} r_1 \rho_{ad}^{(\varepsilon)} \right] \bar{\rho}_{t-t'} \right. \\
&\quad \left. - \frac{\partial^2}{\partial R_1 \partial R_2} \text{Tr}_s \left[ \delta_{ad}^{(\varepsilon)} r_2(t) \delta_{ad}^{(\varepsilon)} r_1 \rho_{ad}^{(\varepsilon)} \right] \bar{\rho}_{t-t'} \right\}. \quad (3.17)
\end{aligned}$$

Damit vereinfacht sich der Integralkern (3.10) des Gedächtnisterms zu:

$$I_{t-t'}^G = (eB_z)^2 \left\{ \frac{\partial^2}{\partial R_1^2} \text{Tr}_s \left[ \delta_{ad}^{(\varepsilon)} r_2(t) \delta_{ad}^{(\varepsilon)} r_2 \rho_{ad}^{(\varepsilon)} \right] \bar{\rho}_{t-t'} - 2 \frac{\partial^2}{\partial R_1 \partial R_2} \text{Tr}_s \left[ \delta_{ad}^{(\varepsilon)} r_2(t) \delta_{ad}^{(\varepsilon)} r_1 \rho_{ad}^{(\varepsilon)} \right] \bar{\rho}_{t-t'} \right. \\ \left. + \frac{\partial^2}{\partial R_2^2} \text{Tr}_s \left[ \delta_{ad}^{(\varepsilon)} r_1(t) \delta_{ad}^{(\varepsilon)} r_1 \rho_{ad}^{(\varepsilon)} \right] \bar{\rho}_{t-t'} \right\} \quad (3.18)$$

$$= (eB_z)^2 \left\{ \frac{\partial^2}{\partial R_1^2} \langle \delta_{ad}^{(\varepsilon)} r_2(t) \delta_{ad}^{(\varepsilon)} r_2 \rangle^{(\varepsilon)} \bar{\rho}_{t-t'} - 2 \frac{\partial^2}{\partial R_1 \partial R_2} \langle \delta_{ad}^{(\varepsilon)} r_2(t) \delta_{ad}^{(\varepsilon)} r_1 \rangle^{(\varepsilon)} \bar{\rho}_{t-t'} \right. \\ \left. + \frac{\partial^2}{\partial R_2^2} \langle \delta_{ad}^{(\varepsilon)} r_1(t) \delta_{ad}^{(\varepsilon)} r_1 \rangle^{(\varepsilon)} \bar{\rho}_{t-t'} \right\}. \quad (3.19)$$

Wir betrachten hier den Fall  $\mathbf{K} = 0$  und  $L_z = 0$ . Damit verschwindet der Frequenzterm (3.8). Als nächstes wird eine Markov-Approximation für den Korrelationszerfall der schnellen Relativbewegung angesetzt. Man erhält dadurch eine Diffusionsgleichung der folgenden Form für die langsame Schwerpunktsbewegung:

$$\frac{\partial \bar{\rho}_t(\mathbf{R})}{\partial t} = \varepsilon \left( \frac{\partial^2}{\partial R_1^2} \tilde{D}_{22}^{(2,\varepsilon)}(\mathbf{R}) \bar{\rho}_t - 2 \frac{\partial^2}{\partial R_1 \partial R_2} \tilde{D}_{12}^{(2,\varepsilon)}(\mathbf{R}) \bar{\rho}_t + \frac{\partial^2}{\partial R_2^2} \tilde{D}_{11}^{(2,\varepsilon)}(\mathbf{R}) \bar{\rho}_t \right). \quad (3.20)$$

Die zugehörigen Diffusionskoeffizienten haben die folgende Gestalt:

$$\tilde{D}_{\mu\nu}^{(2,\varepsilon)}(\mathbf{R}) = \kappa_R^2 \int_0^\infty \langle \delta_{ad}^{(\varepsilon)} r_\mu(t) \delta_{ad}^{(\varepsilon)} r_\nu \rangle^{(\varepsilon)} dt \quad \text{mit} \quad \mu, \nu = 1, 2. \quad (3.21)$$

Die Magnetfeldstärke übernimmt hier mit  $\kappa_R = (eB_z)$  die Rolle die Kopplungsstärke. Nun brechen wir die Störungsrechnung nach linearer Ordnung des Zeitskalenparameters  $\varepsilon$  ab und erhalten damit:

$$\tilde{D}_{\mu\nu}^{(2)}(\mathbf{R}) = \kappa_R^2 \int_0^\infty \langle r_\mu(t) r_\nu \rangle^{(0)} dt + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \quad \text{mit} \quad \mu, \nu = 1, 2. \quad (3.22)$$







# Literaturverzeichnis

- [1] E. Fick and G. Sauermaun, *The Quantum Statistics of Dynamic Processes* (Berlin: Springer, 1990).
- [2] R. Kubo, M. Toda and N. Hashitsume, *Statistical Physics: Nonequilibrium Statistical Mechanics*, (Berlin: Springer, 1991).
- [3] N. G. van Kampen, *Elimination of fast variables*, Phys. Rep. **124**, 69-160 (1985).
- [4] J. Guckenheimer and P. Holmes, *Nonlinear Oscillations, Dynamical Systems, and Bifurcation of Vektor Fields* (New York: Springer, 1993).
- [5] Y. Kifer, *Averaging in dynamic-systems and large deviations*, Invent. Math. **110**, 337-370 (1992).
- [6] K. Hasselmann, *Stochastic climate models: part I theory* Tellus (1976).
- [7] L. Arnold 2001 Hasselmann'program revisited: the analysis of stochasticity in deterministic climate models *Stochastic Climate Models*, eds. P. Imkeller and J.-S. von Storch (Cambridge, MA: Birkhauser).
- [8] W. Just, H. Kantz, C. Rödenbeck, and M. Helm, *Stochastic Modelling: Replacing fast degrees of freedom by stochastic processes*, J. Phys. A: Math. Gen. **34**, 3199 (2001).
- [9] H. Kantz, W. Just, N. Baba, K. Gelfert, and A. Riegert, *Fast chaos versus noise: entropy analysis and a Fokker-Planck model for the slow dynamics*, *Physica D* **187**, 200-213 (2004).
- [10] W. Just, K. Gelfert, N. Baba, A. Riegert and H. Kantz, *Elimination of fast chaotic degrees of freedom: On the accuracy of the Born approximation*, *J. Stat. Phys.* **112**, 277-292 (2003).
- [11] A. Riegert, H. Kantz, W. Just, and N. Baba, *Modelling fast Hamiltonian chaos by suitable stochastic processes*, preprint (2004).
- [12] E. Reinbold, W. Just, J. Becker, and H. Benner, *Stochastic Resonance in Chaotic Spin-Wave Dynamics*, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 3101-3104 (1997).

- [13] G. M. Zaslavsky, M. Y. Zakharov, R. Z. Sagdeev, *Stochastic Web and Diffusion of Particles in a Magnetic-Field*, *Zhurnal Eksperimentalnoi I Teoreticheskoi Fiziki* **91**, 500-516 (1986).
- [14] B. V. Chirikov and D. L. Shepelyansky, *Correlation Properties of Dynamical Chaos in Hamiltonian Systems*, *Physica D* **13**, 395-400 (1984).
- [15] H. Gabert, *Projection Operator Technique*, Springer Tacts in Modern Physics 95, Springer Verlag (1982).
- [16] G. Röpke, *Statische Mechanik für das Nichtgleichgewicht*, VEB Deutscher Verlag der Wissenschaft Berlin (1987).
- [17] J. R. Dorfman, *An Introduction to Chaos in Nonequilibrium Statistical Mechanics*, Cambridge Lecture Notes in Physics, Cambridge University Press (1999).
- [18] R. Zwanzig, *Ensemble method in the theory of irreversibility*, *J. Chem. Phys.* **33**, 1338-1341 (1960).
- [19] C. Jarzynsky, *Thermalization of a Particle via Coupling to Low-Dimensional Chaos*, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 2937 (1995).
- [20] H. Risken, *The Fokker-Planck equation*, (Springer, Berlin, 1989).
- [21] S. Siegert, R. Friedrich, and J. Peinke, *Analysis of data sets of stochastic systems*, *Phys. Lett. A* **243**, 275 (1998).
- [22] M. Ragwitz and H. Kantz, *Indispensable Finite Time Corrections for Fokker-Planck-Equations from Times Series Data*, *Phys. Lett. A* **89**, 149402 (2002).
- [23] M. Weiss, L. Hufnagel, and R. Ketzmerick, *Can simple renormalization theories describe the trapping of a chaotic trajectories in mixed systems?*, *Phys. Rev. E* **67**, 046209 (2003).
- [24] J. D. Meiss and E. Ott, *Markov-Tree Model of Intrinsic Transport in Hamiltonian Systems*, *Phys. Rev. Lett.* **55**, 2741-2744 (1985).
- [25] F. F. Karney, *Long-Time Correlations in the Stochastic Regime*, *Physica D* **8**, 360-380 (1983).
- [26] Kou-Chul Lee, *Long-Time Tails in a Chaotic System*, *Phys. Rev. Lett.* **60**, 1991-1994 (1988).
- [27] G. M. Zaslavsky, and M. K. Tippet, *Connetion between Recurrence-Time Statistics and Anomalous Transport*, *Phys. Rev. Lett.* **67**, 3251-3254 (1991).
- [28] F. Vivaldi, G. Casati, and I. Guarneri, *Origin of Long-Time Tails in Strongly Chaotic Systems*, *Phys. Rev. Lett.* **51**, 727 (1983).

- [29] Ying-Cheng Lai, M. Ding, C. Greborgi, and R. Blümel, *Algebraic decay and fluctuations of the decay exponent in Hamiltonian systems*, *Phys. Rev. A* **46**, 4661 (1992).
- [30] R. Ketzmerick, G. Petschel, and T. Geisel, *Slow Decay of Temporal Correlations in Quantum Systems with Cantor Spectra*, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 695 (1992).
- [31] J. M. Greene, R. S. MacKay, and J. Stark, *Boundary Circles for Area-Preserving Maps*, *Physica D* **21**, 267-285 (1986).
- [32] J. D. Meiss, *Symplectic maps, variational principles, and transport*, *Rev. Mod. Phys.* **64**, 795-848 (1992).
- [33] G. M. Zaslavsky, *Chaos, fractional kinetics, and anomalous transport*, *Phys. Rep.* **371**, 461-580 (2002).
- [34] B. V. Chirikov and D. L. Shepelyansky, *Asymtotic Statistics of Poincare Recurrence in Hamiltonian Systems with Divided Phase Space*, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 528 (1999).
- [35] H. Schanz, M.-F. Otto, R. Ketzmerick, and T. Dittrich, *Classical and Quantum Hamiltonian Ratchets*, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 070601-1 (2001).
- [36] A. Carnegie and I. C. Percival, *Regular and chaotic motion in some quartic potentials*, *J. Phys. A: Math. Gen.* **17**, 801-813 (1983).
- [37] W-H. Steeb, C. M. Villet and A. Kunick, *Chaotic behaviour of a Hamiltonian with a quartic potential*, *J. Phys. A: Math. Gen.* **18**, 3269-3273 (1985).
- [38] R.A. Pullen and A.R. Edmonds, *Comparsion of classical and quantal spectra for a totally bound potential*, *J. Phys. A: Math. Gen.* **14**, L477-L484 (1981).
- [39] T. Geisel, A. Zacherl and G. Radons, *Generic 1/f Noise in Chaotic Hamiltonian Dynamics*, *Phys. Rev. Lett.* **59**, 2503 (1987).
- [40] M. Henon and C. Heiles, *The Applicability of the Third Integral Of Motion: Some Numerical Experiments*, *The Astronomical Journal* **69**, 73 (1964)
- [41] A. Wolf, J. B. Swift, H. L. Swinney, and J. A. Vastano, *Determining Lyapunov Exponent from Time Series*, *Physica D* **16**, 285-317 (1985).
- [42] D. Delande and J. C. Gay, *Quantum Chaos and Statistical Properties of Energy Levels: Numerical Study of the Hydrogen Atom in a Magnetic Field*, *Phys. Rev. Lett.* **57**, 2006 (1986).
- [43] G. Wunner, U. Woelk, I. Zech, G. Zeller, T. Ertl, F. Greyer, W. Schweitzer, and H. Ruder, *Rydberg atoms in uniform magnetic fields: Uncovering the transition from regularity to irregularity in a quantum system*, *Phys. Rev. Lett.* **57**, 3261 (1986).

- [44] H. Friedrich and D. Wintgen, *The Hydrogen Atom in a uniform Magnetic Field- An Example of Chaos*, *Phys. Rep.* **183**, 37-79 (1989).
- [45] A. Holle, G. Wiesbusch, J. Main, B. Hager, H. Rottke, and K. H. Welge, *Diamagnetism of the Hydrogen Atom in the Quasi-Landau Regime*, *Phys. Rev. Lett.* **57**, 2594 (1986).
- [46] P. Schmelcher und L. S. Cederbaum, *Regularity and chaos in the center of mass motion of the hydrogen atom in a magnetic field*, *Z. Physica D - Atoms, Molecules and Clusters* **24**, 311-323 (1992).
- [47] H. Kantz and E. Olbrich, *The transition from deterministic chaos to a stochastic process*, *Physica A* **153**, 105-117 (1998).
- [48] C. Rödenbeck, C. Beck, and H. Kantz, *Dynamical Systems with Time Scale Separation: Averaging, Stochastic Modelling and Central Limit Theorem*, in: P. Imkeller, J.-S. von Storch, eds., *Stochastic Climate Model* (Birkhäuser, Boston, 2001).
- [49] M. V. Berry and J. M. Robbins, *Chaotic classical and half-classical adiabatic reactions: geometric magnetism and deterministic friction*, *Proc. R. Soc. Lond. A* **442**, 659-672 (1993).
- [50] A. R. Kolovsky, *Number of degrees of freedom for a thermostat*, *Phys. Rev. E* **50**, 3569 (1994).
- [51] G. N. Milstein Y. M. Repin and M. V. Tretyakov, *Numerical methods for stochastic systems preserving symplectic*, *Siam J. Num. Anal.* **40**, 1583-1604 (2004).







# Danksagung

Ich möchte mich bei all den wundervollen Menschen und Freunden bedanken, die besonders in der Endphase durch moralische Unterstützung zur Entstehung dieser Arbeit beigetragen haben.

Ganz besonders möchte ich mich bei Prof. Dr. Holger Kantz bedanken, der mir nicht nur die Gelegenheit zu dieser Arbeit gegeben hat, sondern diese mit vielen wertvollen und anregenden Diskussionen begleitet hat. Bei Dr. Anja Riegert möchte ich mich sowohl für die fruchtbare Zusammenarbeit als auch für das Korrekturlesen bedanken. Mein weiterer Dank gilt Dr. Wolfram Just, Dr. Rainer Klages und Dr. Katrin Gelfert, die bei einigen schwierigen Fragen wertvolle Anregungen gaben.

Bei Prof. Dr. Mütter möchte ich mich für seine Bereitschaft bedanken, das Zweitgutachten zu übernehmen. Mein Dank gilt auch Prof. Dr. Becks, der sich bereit erklärt hat meiner Prüfungskommission beizuwohnen.

Für die enorme Ausdauer und Geduld beim Korrekturlesen meiner Arbeit möchte ich mich ganz herzlich bei Thomas Wellens, Claudia Naumann, Ivica Zerec, und Jochen Damzog bedanken.

Bei Johanna Wunderer möchte ich mich für das Mutmachen und ihre Fähigkeit, mich meiner Arbeit zu entreißen und mich zu einen Spaziergang zu entführen, bedanken.

Für die sehr angenehme und schöne Atmosphäre am Institut möchte ich mich bei Tobias, Javier, Nadine, Frank, Alex, Gernot, Andi, Flo, Andreas (*Abu*), Hubert Scherrer, Torsten Goerke, Thorsten Schuster, Eduardo, Adilson, Thomas Pattard, Frau Dohrmann, Herr Queddenbaum, Björn, Nils, Christian, Peter und allen Mitgliedern meiner Arbeitsgruppe bedanken.

Ein besonderer Dank gilt meinen Eltern, die mit ihren Gebeten meine Arbeit positiv begleitet haben.

Meine Schwester Zeliha hat durch ihre positive Einstellung mir häufig Mut gemacht. Dafür möchte ich mich bedanken. Auch allen anderen Mitgliedern meiner wundervollen Familie bin ich zu Dank verpflichtet.

Schließlich möchte ich mich besonders bei Jochen Damzog für all seine Geduld, Unterstützung, seinen Optimismus und Liebenswürdigkeit bedanken. Ohne ihn wären so einige Hürden nicht überwunden worden.