

Der Skalierungsexponent der 1+1-dimensionalen, zufällig getriebenen Burgersgleichung

Christopher Aue

8. September 2011

Diplomarbeit



WESTFÄLISCHE
WILHELMS-UNIVERSITÄT
MÜNSTER



institut für
theoretische physik

Inhaltsverzeichnis

1	Einführung	1
2	Die N+1-dimensionale Burgersgleichung	3
2.1	Turbulente Strömungen	3
2.2	Die Struktur des turbulenten Flusses	4
2.3	Die zufällig getriebene Burgersgleichung und ihre Lösung	7
2.3.1	Transformation der Burgersgleichung	9
2.3.2	Mittelung von $\ln Z$	12
2.3.3	Näherung von $\overline{\ln Z}$	16
2.3.4	Bestimmung der Parameter von $\widetilde{\ln Z}$	21
2.3.5	Die Wahrscheinlichkeitsverteilung von $\mathbf{x}(t)$	26
2.3.6	Das Geschwindigkeitsfeld und seine Struktur	30
3	Simulation der 1+1-dimensionalen Burgersgleichung	37
3.1	Die Monte-Carlo-Methode	37
3.2	Zustandssumme und Wirkung der Burgersgleichung	41
3.3	Der Heat-Bath-Monte-Carlo-Algorithmus	42
3.4	Das Monte-Carlo-Gitter	44
3.5	Die Wirkung auf dem Gitter	44
3.6	Die Parameter der Simulation	46
3.7	Die Simulation	49
3.8	Bestimmung der Strukturfunktionen	49
4	Auswertung der Strukturfunktionen	55
4.1	Die gelaufenen Simulationen	55
4.2	Vorüberlegungen	60
4.3	Eine erste Idee zur Bestimmung des Exponenten	62
4.3.1	Linearer, unkorrelierter Fit	63
4.3.2	Linearer, korrelierter Fit	67

4.3.3	Spline-Fit	68
4.4	Eine zweite Idee zur Bestimmung des Exponenten	69
4.4.1	Nichtlinearer Fit	71
4.4.2	Festlegung der Startparameter	74
4.4.3	Auswertung des 45x256-Gitters	76
4.5	Idee 2.5: Direkter Fit	89
4.5.1	Auswertung des 45x256-Gitters	89
4.5.2	Auswertung des 1024x32-Gitters	102
5	Zusammenfassung und Ausblick	127
Anhang		131
A	Normalverteilung in n Dimensionen	133
B	1-step RSB-Matrizen	134
B.1	Summe $\mathbf{A} + \mathbf{B}$	134
B.2	Produkt \mathbf{AB}	135
B.3	Inverse Matrix	135
B.4	$\lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \text{Sp}(\ln \mathbf{A})$	136
C	Alle Strukturfunktionen	137
C.1	45x256-Gitter	137
C.2	1024x32-Gitter	139
	Literaturverzeichnis	141

1 Einführung



– aus “Understanding Comics” von Scott McCloud

Das Ziel dieser Arbeit ist – wie der Titel schon eloquent verrät – die Untersuchung des Skalierungsexponenten der eindimensionalen Burgersgleichung mit einem zufälligen Kraftterm. Durch diese Zufälligkeit haben wir es mit einem statistischen System zu tun. Um solche Systeme erklären zu können, bedient man sich einer ähnlichen Abstraktion wie im Comic. Statt eine einzelne Realisierung eines Systems zu beschreiben, konzentriert man sich darauf, universelle Merkmale zu finden, die für alle Realisierungen gelten. In dieser Arbeit ist das Analogon zum Kreis mit zwei Punkten und einem Strich der besagte Skalierungsexponent. Durch ihn und ein paar weitere Annahmen wie zum Beispiel Selbstähnlichkeit kann das turbulente Verhalten der Burgersgleichung im Wesentlichen erfasst werden.

Nach dieser kurzen Einführung widmet sich das zweite Kapitel den theoretischen Grundlagen der Burgersturbulenz. Die zugrunde liegende Theorie wird zu diesem Zweck von Anfang an hergeleitet, um die späteren Ergebnisse darauf hin bewerten zu können.

Das dritte Kapitel beschäftigt sich mit der Methode, wie wir die Burgersgleichung zu untersuchen versuchen. Wir machen uns die Monte-Carlo-Simulation zu Nutze,

aus deren erzeugten Konfigurationen wir sogenannte Strukturfunktionen ableiten können.

Das vierte Kapitel befasst sich dann mit der Auswertung dieser Strukturfunktionen. Aus diesen wollen wir den Exponenten auf eine möglichst solide Art und Weise extrahieren.

Das fünfte und letzte Kapitel fasst die Ergebnisse zusammen und gibt Anregungen, wie man weiter verfahren könnte.

Ein paar Hinweise zur Notation innerhalb dieser Arbeit:

- Matrizen und Vektoren werden in ihrer Gesamtheit mit einem aufrechten, fetten Buchstaben, z.B. \mathbf{A} , gekennzeichnet. Ihre einzelnen Komponenten kennzeichnet derselbe Buchstabe in nicht fetter, kursiver Schrift mit entsprechend zwei Indizes oder einem Index, z.B. A_{ij} . Beträge werden durch nicht fette, kursive Schrift ohne Index ausgedrückt, $x = |\mathbf{x}|$, Einheitsvektoren durch $\mathbf{e}_x = \frac{\mathbf{x}}{x}$.
- \mathbf{x} kennzeichnet, wenn nicht anders erwähnt, den Ort, t die Zeit.
- δ_{ij} ist das Kronecker-Delta, $\delta(x - x')$ die Delta-Distribution.
- partielle Ableitungen werden meist einfach mit $\partial_x \equiv \frac{\partial}{\partial x}$ bezeichnet.
- Mittelwerte haben einen Überstrich, $\overline{X} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N X_i$, Erwartungswerte spitze Klammern, $\langle X \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N X_i$.
- $\int D[f(t)]$ kennzeichnet das Funktionalintegral über die Funktion $f(t)$.

2 Die N+1-dimensionale Burgersgleichung

2.1 Turbulente Strömungen

Strömende Fluide treten im Wesentlichen in zwei Zuständen auf. Entweder sind sie laminar und fließen gleichmäßig oder sie sind turbulent und zeigen ein chaotisches Verhalten mit einer Vielzahl an kleinen Richtungsänderungen und Wirbeln. Häufig wird das turbulente Verhalten durch eine Störung des Flusses in Form eines Hindernisses, welches umflossen werden muss, hervorgerufen. Oder es treffen zwei Fluide mit unterschiedlicher Fließgeschwindigkeit aufeinander, wie es zum Beispiel beim Einleiten von Tinte in ein Wasserglas der Fall ist. Ebenso spielt die Viskosität – die Zähflüssigkeit – des Fluids eine Rolle. Gießt man Honig statt Tinte in ein Wasserglas, wird der Honig je nach Konsistenz eher keine Turbulenz zeigen. Um ein Fluid zu charakterisieren und einen quantitativen Wert dafür zu haben, mit dem man den Zustand des Fluids abschätzen kann, führt man deshalb eine Kenngröße – die sogenannte Reynoldszahl – ein. Sie ist definiert als:

$$Re = \frac{v_L L}{\nu}. \quad (2.1)$$

v_L steht für eine charakteristische Geschwindigkeit des Systems. Diese kann beispielsweise die Fließgeschwindigkeit des Fluids sein oder die Differenz der Fließgeschwindigkeit zweier Fluide, die aufeinander treffen. L kennzeichnet eine charakteristische Länge des Systems. Die Größe eines Hindernisses wäre solch eine Größe. Würde das Fluid mit einem Stab umgerührt, wäre der Durchmesser des Kreises, auf dem man den Stab bewegt, eine andere Möglichkeit einer charakteristischen Länge. ν ist die Viskosität des Fluids. Honig hat eine größere Viskosität als Wasser.

Es kann nun beobachtet werden, dass bis zu einem kritischen Wert Re_c für die Reynoldszahl der Fluss des Fluids laminar ist. Ab diesem Re_c beginnt das Fluid dann langsam Turbulenz zu entwickeln. Generell kann man mit (2.1) schlussfolgern,

dass für das Auftreten von Turbulenz ν klein und v_L und L groß sein müssen. Wie klein *klein* und wie groß *groß* tatsächlich sein müssen, hängt von den jeweils anderen Größen ab. Nach dieser Theorie könnte sogar Honig, welcher eine verhältnismäßig große Viskosität ν besitzt, Turbulenz zeigen, wenn v_L und L ebenfalls sehr groß gewählt würden. Für Wasser mit einem kleinen ν reichen kleinere Werte für v_L und L .

Für die konkrete mathematische Beschreibung von Turbulenz wird davon ausgegangen, dass die inkompressible Navier-Stokes-Gleichung

$$\partial_t \mathbf{v} + \mathbf{v} \nabla \mathbf{v} + \nabla p = \nu \nabla^2 \mathbf{v} + \mathbf{f} \quad (2.2a)$$

$$\nabla \mathbf{v} = 0 \quad (2.2b)$$

in der Lage ist, diese zu beschreiben. Diese Gleichung ergibt sich aus der Impulserhaltung angewendet auf das Kontinuum und da nicht davon auszugehen ist, dass Turbulenz die Impulserhaltung verletzt, sollte sie dafür zu gebrauchen sein. $\mathbf{v} = \mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$ ist das Geschwindigkeitsfeld, $p = p_0/\rho_0$ der mit der Dichte skalierte Druck, $\nu = \nu_0/\rho_0$ ist die ebenfalls mit der Dichte skalierte Viskosität und $\mathbf{f} = \mathbf{f}(\mathbf{x}, t)$ berücksichtigt eine äußere Kraft, welche auf das Fluid in Form eines Antriebes wirkt.

2.2 Die Struktur des turbulenten Flusses

Es wird davon ausgegangen, dass sich Turbulenz homogen, isotrop und selbstähnlich verhält. Dies bedeutet ganz einfach ausgedrückt, dass wir uns in dem System bewegen können wie es uns beliebt und das Fluid stets ähnlich aussehen wird. Insbesondere gilt für die Selbstähnlichkeit, dass wir in das System immer weiter hinein zoomen können und sich das generelle Bild nicht verändert. Große Wirbel zerfallen in kleinere Wirbel, diese wieder in etwas kleinere und so weiter. Durch die Wirbel wird Energie von großen Skalen an kleinere Skalen übertragen bis das System in einer Skala angelangt ist, in der die Energie in Form von Wärme das System verlässt. Für die Umverteilung der Energie ist der nichtlineare Term der Navier-Stokes-Gleichung zuständig [12]. Der Term mit ν wirkt als Dissipationsterm, welcher Energie aus dem System durch innere Reibung wieder abführt. Die gesamte Energie des Systems verringert sich dabei um einen endlichen Betrag ϵ . Zur Größe von ϵ kann

man sich überlegen:

$$\epsilon = \frac{W}{m} = \frac{\frac{dp}{dt}v}{\rho L^3} = \frac{(\rho L^2 v^2)v}{\rho L^3} = \frac{v^3}{L}.$$

Dabei gilt folgende Notation: W : Energie, m : Masse, p : Impuls, v : Geschwindigkeit, ρ : Dichte, L : Länge. Identifiziert man nun v mit der charakteristischen Geschwindigkeit v_L und L mit der charakteristischen Länge des Systems, folgt für die Energiedissipation:

$$\epsilon = \frac{v_L^3}{L} \stackrel{(2.1)}{=} \frac{\nu^3 Re^3}{L^4}. \quad (2.3)$$

Die kleinste Skala, für die nun Turbulenz auftritt, ist die Energiedissipationsskala η . Für ihre Größe findet man

$$\eta = \left(\frac{\nu^3}{\epsilon} \right)^{\frac{1}{4}} \stackrel{(2.3)}{=} \frac{L}{Re^{\frac{3}{4}}}. \quad (2.4)$$

Die Relation wird in [12] abgeleitet aus der Tatsache, dass im Fall eines stationären Flusses die Energie, welche vom Kraftterm dem System hinzugefügt wird, vom Dissipationsterm mit ν wieder abgeführt werden muss. An dem anderen Ende dieser Energiekaskade steht die Injektionsskala, welche wir an dieser Stelle für unsere Zwecke bereits mit der charakteristischen Länge L gleichsetzen. Die Injektionsskala wird durch die Korrelationslänge der Kraft definiert. Den Bereich der Energiekaskade nennt man Inertialbereich oder auch intermediäre Skala.

Die Regellosigkeit des turbulenten Flusses macht es natürlich schwierig, dessen Struktur mathematisch erfassen zu können. Hier kommt die Statistik zur Hilfe und wir definieren das p -te Moment einer (longitudinalen) Strukturfunktion

$$S_p(r) = \langle u(r, \mathbf{e}_r)^p \rangle \quad (2.5)$$

mit dem Geschwindigkeitsinkrement

$$u(r, \mathbf{e}_r) = [\mathbf{v}(\mathbf{x} + r\mathbf{e}_r) - \mathbf{v}(\mathbf{x})] \cdot \mathbf{e}_r. \quad (2.6)$$

$\langle \dots \rangle$ steht dabei für den Erwartungswert des Mittelwerts des Systems, welcher sich für große Zeiten t ergibt. Für einen Abstand r wird also an jedem Ort und zu jeder Zeit einfach die Geschwindigkeitsdifferenz entlang von \mathbf{e}_r berechnet und anschließend gemittelt. Dies wird für alle erdenklichen r gemacht und führt zur Strukturfunktion.

Durch die Variation von r wird so die Struktur über mehrere Skalen hinweg beschrieben. Insbesondere sollte diese Struktur invariant bleiben, wenn wir uns im Inertialbereich bewegen. Um die Form der Strukturfunktion für verschiedene Skalen beurteilen zu können, skalieren wir das Geschwindigkeitsfeld mit einem Faktor λ . Es muss sich dann die mathematische Struktur der $S_p(\mathbf{r})$ reproduzieren, um Selbstähnlichkeit annehmen zu können.

Skaleninvariante Funktionen sind die Potenzfunktion der Form

$$f(x) = bx^\zeta. \quad (2.7)$$

Werden solche Funktionen mit λ gemäß

$$x \rightarrow \lambda x \quad (2.8)$$

skaliert, folgt

$$f(x) \rightarrow f(\lambda x) = \lambda^\zeta f(x). \quad (2.9)$$

Diese Relation muss also für das Geschwindigkeitsfeld gelten, wenn es selbstähnlich sein soll:

$$\mathbf{v}(\mathbf{r}, t) \rightarrow \lambda^\zeta \mathbf{v}(\mathbf{r}, t). \quad (2.10)$$

Daraus folgt bei einer Skalierung des Systems für die Zeit

$$t \rightarrow \lambda^{1-\zeta} t. \quad (2.11)$$

Die Skalierung der von \mathbf{v} abhängigen Größen ergibt sich damit zu:

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}) \rightarrow \lambda^\zeta \mathbf{u}(\mathbf{r}), \quad (2.12a)$$

$$S_p(r) \rightarrow \lambda^{\zeta p} S_p(r). \quad (2.12b)$$

Die besondere Aufgabe besteht jetzt darin, den Skalierungsexponenten

$$q = \zeta p \quad (2.13)$$

zu bestimmen. Ist dies möglich, kann die Turbulenz über den gesamten Inertialbereich beschrieben werden.

Für die Navier-Stokes-Gleichung stellte Komogorov in seiner K41-Theorie [12] die

These

$$q = \frac{p}{3} \quad (2.14)$$

auf, welche er aus der berechneten Strukturfunktion $S_{p=3}(r) = -\frac{4}{5}\epsilon r$ und der experimentell bekannten Proportionalität $S_{p=2}(r) \propto (\epsilon r)^{\frac{2}{3}}$ sowie der Annahme von Selbstähnlichkeit ableitete. Durch dimensionelle Überlegungen kam er zudem zu dem Schluss, dass $S_p(r) \propto (\epsilon r)^q$ gilt.

Diese Aussagen gilt es nun zu beweisen oder zumindest weitere Indizien für ihre Richtigkeit zu finden. Die Idee ist, mit feldtheoretischen Methoden, insbesondere der Monte-Carlo-Simulation, die Sache anzugehen. Bei Aufstellung des Pfadintegrals für die Navier-Stokes-Gleichung kommt uns allerdings der nichtlokale Druckterm in die Quere und macht den Ansatz damit auch schon wieder zunichte [16]. Lassen wir den Druckterm einfach weg, erhalten wir die sogenannte Burgersgleichung, für die das Pfadintegral aufgestellt werden kann. Einer Monte-Carlo-Simulation steht damit nichts im Wege. Ebenso ist eine analytische Lösung möglich, was die Ergebnisse aus der Simulation mit der Theorie vergleichbar macht. Weiterhin kommt uns zugute, dass sämtliche hier beschriebenen Eigenschaften der Navier-Stokes-Gleichung vom Druckterm unabhängig sind und somit ebenso für die Burgersgleichung gelten. Die Burgersgleichung bietet uns damit die Möglichkeit, die angestrebte Methodik zumindest schon einmal zu testen. Vielleicht erlangen wir unterwegs zudem neue Erkenntnisse über die Burgersturbulenz selbst.

2.3 Die zufällig getriebene Burgersgleichung und ihre Lösung

$$\partial_t \mathbf{v} + \mathbf{v} \nabla \mathbf{v} = \nu \nabla^2 \mathbf{v} + \mathbf{f} \quad (2.15)$$

ist die $N + 1$ -dimensionale, getriebene Burgersgleichung, benannt nach Johannes Martinus Burgers [6]. Die Bezeichnung $N + 1$ bezieht sich darauf, dass N Raumdimensionen und eine Zeitdimension vorliegen. Die Gleichung ist bis auf die Tatsache, dass der Druckterm nicht auftritt, identisch zu der Navier-Stokes-Gleichung. Dadurch wird das durch die Gleichung beschriebene Fluid vollkommen kompressibel. Links des Gleichheitszeichens finden sich nach wie vor die zeitliche Änderung des Geschwindigkeitsflusses, $\partial_t \mathbf{v}$, sowie der nichtlineare Advektionsterm $\mathbf{v} \nabla \mathbf{v}$. Auf der

rechten Seite befinden sich der Dissipationsterm $\nu \nabla^2 \mathbf{v}$ und der Injektionsterm \mathbf{f} .

Die treibende Kraft wird für unsere Zwecke als zufallsverteilt angenommen. Zu ihr gibt es ein Potenzial, welches sich über die Beziehung

$$\mathbf{f} = -\nabla \phi \quad (2.16)$$

aus der Kraft ableitet. Es ist nun dieses Potenzial ϕ , durch das die Kraft seine Zufälligkeit erhält. Das Potenzial ist gaußverteilt mit den beiden Momenten

$$\langle \phi(\mathbf{x}, t) \rangle = 0 \quad (2.17)$$

$$\langle \phi(\mathbf{x}, t) \phi(\mathbf{x}', t') \rangle = \chi(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta(t - t'). \quad (2.18)$$

$\chi(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$ gibt die Korrelation zwischen zwei Orten an und wird für die Berechnung auf

$$\chi(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \equiv \chi_{\mathbf{x}\mathbf{x}'} = \epsilon L^2 N \exp \left(-\frac{(\mathbf{x} - \mathbf{x}')^2}{2NL^2} \right) \quad (2.19)$$

festgelegt. Sie zeigt also gauß'schen Zerfall mit einer Korrelationslänge L und befindet sich in der Größenordnung von $\epsilon L^2 N$. In Zeitrichtung gibt es keine Korrelation.

Die Wahrscheinlichkeitsverteilung des Potenzials $p(\phi)$ lautet dann

$$p(\phi) = \frac{1}{N_\chi} \exp \left(-\frac{1}{2} \int d\mathbf{x} d\mathbf{x}' \phi(\mathbf{x}, t) \chi_{\mathbf{x}\mathbf{x}'}^{-1} \phi(\mathbf{x}', t) \right) \quad (2.20)$$

mit N_χ als Normierungskonstante.

Das Geschwindigkeitsfeld, welches von einer solchen zufälligen Burgersgleichung beschrieben wird, ist exakt bestimmbar. Innerhalb dieses Abschnitts wird diese Lösung berechnet.

Die Vorgehensweise entspricht dabei im Wesentlichen derjenigen in [5] unter Zuhilfenahme von [29]. Dabei wird die Burgersgleichung zunächst in eine Form gebracht, die die Zustandssumme eines gerichteten Polymers (eine Kette aus linearen Segmenten) beschreibt. Diese Zustandssumme wird als Pfadintegral angegeben. Davon ausgehend müssen nun die Schritte, die im Laufe der Umformungen vollzogen wurden, rückwärtig auf das Pfadintegral angewandt werden, um schlussendlich die Lösung der Burgersgleichung in den Händen zu halten. Die Tatsache, dass wir es mit einem Ensemble aus *intrinsisch* zufälligen Systemen zu tun haben, verkompli-

ziert die Angelegenheit. Auf der anderen Seite spielt bei den Umformungen der Burgersgleichung die Hopf-Cole-Transformation [7, 17] eine Rolle und ersetzt die Nichtlinearität durch einen Logarithmus. Somit besteht das wesentliche Problem darin, den Logarithmus einer statistisch verteilten Zustandssumme zu mitteln. Hier kommt die Replika-Methode zur Rettung.

2.3.1 Transformation der Burgersgleichung

Beginnen wir damit, die Burgersgleichung (2.15) so umzuformen, dass sich in ihr das Problem des gerichteten Polymers widerspiegelt. Dazu wird erst einmal angenommen, dass sich neben dem Kraft- auch das Geschwindigkeitsfeld über ein Potenzial $h(\mathbf{x}, t)$ ausdrücken lässt: $\mathbf{v} = -\nabla h$. Anschließend wird die Burgersgleichung (2.15) integriert und führt zur Kardar-Parisi-Zhang-Gleichung:

$$\partial_t h = \frac{1}{2} [\nabla h]^2 + \nu \nabla^2 h + \phi. \quad (2.21)$$

Die Hopf-Cole-Transformation [7, 17]

$$h = 2\nu \ln Z \quad (2.22)$$

überführt diese Gleichung nun in

$$\partial_t Z = \nu \nabla^2 Z + \frac{1}{2\nu} \phi Z. \quad (2.23)$$

Diese Gleichung beschreibt – wie es das Z schon erahnen lässt – eine Zustandssumme; im vorliegenden Fall die eines Polymers. Sie ist von folgender Form:

$$Z(\mathbf{x}, t) = \int d\mathbf{x}_0 \rho(\mathbf{x}_0) \int_{\mathbf{x}_0}^{\mathbf{x}} D[\mathbf{x}(\tau)] \exp(-\mathcal{H}) \quad (2.24)$$

mit der Hamilton Funktion

$$\mathcal{H} = \int_0^t d\tau \left[\frac{c}{2} (\partial_\tau \mathbf{x})^2 + \frac{1}{2\nu} \phi \right]. \quad (2.25)$$

Die bisher unbestimmten Größen ρ und c werden im Folgenden erklärt, indem wir kurz auf das Polymerproblem [18] eingehen.

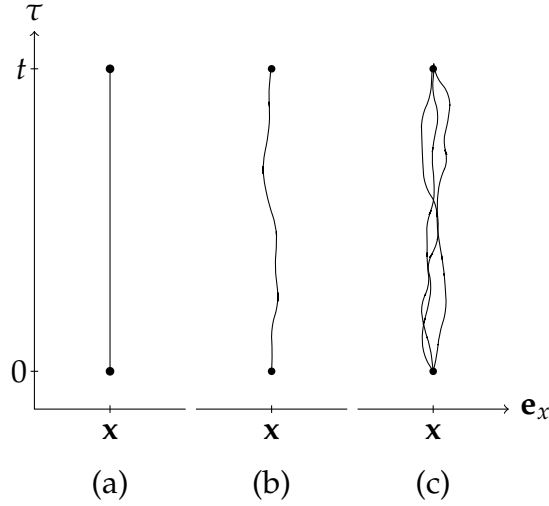


Abbildung 2.1: (a) Gerader Polymer für $V = 0$, (b) Polymer im zufälligen Potenzial, (c) Drei weitere mögliche Polymerpfade

Gleichung (2.24) beschreibt also sozusagen einen elastischen Draht $\mathbf{x}(\tau)$ bei der Temperatur $T = 1$ mit dem Elastizitätsmodul

$$c = \frac{1}{2\nu}. \quad (2.26)$$

Dieser Draht wird zunächst zwischen $\mathbf{x}_0 = \mathbf{x}(t = 0)$ und $\mathbf{x} = \mathbf{x}(t)$ gespannt und verbindet diese beiden Punkte im Fall eines verschwindenden Potenzial direkt entlang einer geraden Linie wie in Abbildung 2.1 (a) gezeigt. τ bezeichnet die Position entlang der Linie und läuft von 0 bis t . t ist dabei gleichzeitig die Länge \mathcal{T} des Drahtes. $\mathbf{x}(\tau)$ gibt die transversale Verschiebung des Drahts an der Position τ an und ist im Fall einer geraden Linie einfach konstant gleich \mathbf{x} .

Schalten wir nun das zufällige Potenzial $V = \frac{1}{2\nu}\phi$ an, wird der Draht jetzt in der Regel die beiden Endpunkte nicht länger linear verbinden. Stattdessen wird er sich winden, um seine Energie in dem Potenzial zu minimieren (Abb. 2.1 (b)). Dabei legt er sich allerdings nicht in Schlaufen oder gar Schleifen, sondern "strebt" immer in Richtung seiner Endpunkte.

Der Hamiltonian gibt die Energie des Polymers an. Er berechnet sich entsprechend (2.25), indem wir entlang des Polymers alle Potenzialbeiträge sowie alle Beträge, die aus dem "Verbiegen" des Drahtes stammen, aufsummieren. Damit beschreiben wir das Polymersystem nun als die Summe aller Zustände (2.24). Das rechte Integral

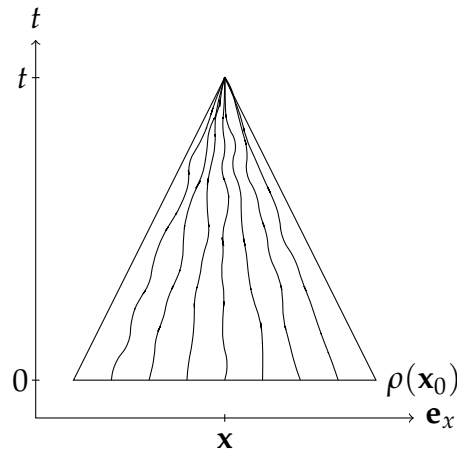


Abbildung 2.2: Ein paar Beispielpfade für das Polymersystem mit einem freien Ende

summiert über die Boltzmannengewichtung jeder einzelnen möglichen Realisierung des Drahtes, wovon beispielhaft drei Möglichkeiten in Abbildung 2.1 (c) dargestellt sind.

In einem weiteren Schritt wird das Ende x_0 des Drahtes auf einen anderen Punkt auf der $\tau = 0$ -Achse gemäß einer Dichte $\rho(x_0)$ gesetzt. Somit ist x_0 entsprechend der Dichte als ein *freies* Ende anzusehen, während x weiterhin ein *festes* Ende darstellt. Durch das Verschieben des freien Endes ändert sich zudem die Länge des Polymers, wie sich leicht in Abbildung 2.2 sehen lässt. Das linke Integral summiert nun zusätzlich über alle weiteren Drahtrealisierungen, die sich mit variiertem Position des freien Endes ergeben. Wie aus der Beschreibung deutlich wird, handelt es sich bei der Zustandssumme auch ganz anschaulich um ein Pfadintegral.

Der gerichtete Polymer und die Burgersgleichung sind mathematisch äquivalent. Doch was bedeuten unsere Überlegungen zum Polymer für das Burgersproblem? Zuerst einmal müssen wir umdenken, was unser Koordinatensystem angeht. t ist proportional zur Länge des Polymers, während es in der Burgersgleichung für die verstrichene Zeit steht. x kennzeichnet den festen Endpunkt beim Polymer und die "normalen" kartesischen Koordinaten in der Burgersgleichung. Die Anfangswerte für das Geschwindigkeitsfeld leiten sich aus der Dichteverteilung von x_0 her über

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}, t = 0) = -2\nu \nabla \rho(\mathbf{x}). \quad (2.27)$$

Zusammenfassend können wir einmal explizit aufschreiben, wie sich das Polymer-

system verhält, wenn wir uns im Burgerssystem räumlich und zeitlich bewegen. Zunächst hat das Geschwindigkeitsfeld zur Zeit $t = 0$ eine bestimmte Form. Darüber ist die Dichtefunktion $\rho(\mathbf{x})$, also die Basis des Dreiecks in Abbildung 2.2, für alle Zeiten t und Orte \mathbf{x} festgelegt. Setzen wir uns auf einen Punkt \mathbf{x} auf der $\tau = 0$ -Achse und lassen die Zeit laufen, entsteht – wie in Abbildung 2.2 – ein Dreieck mit dem Scheitelpunkt bei (\mathbf{x}, t) . Mit fortlaufender Zeit schiebt sich der Scheitelpunkt immer weiter in Richtung der t -Achse. Die Polymere werden immer länger. Verschieben wir nun den betrachteten Punkt \mathbf{x} , verschiebt sich der Scheitelpunkt entsprechend senkrecht zur t -Achse. Das Geschwindigkeitsfeld an einem beliebigen Ort und einer beliebigen Zeit errechnet sich dann gemäß

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}, t) = -2\nu \nabla \ln Z(\mathbf{x}, t) \quad (2.28)$$

aus dem Pfadintegral des Polymersystems.

Eine Kleinigkeit müssen wir aber noch beachten. Aufgrund der Fluktuation der Kraft sind wir hier am Mittelwert

$$\bar{\mathbf{v}} = -2\nu \nabla \overline{\ln Z} = -2\nu \nabla \int_{-\infty}^{\infty} D\phi p(\phi) \ln Z \quad (2.29)$$

interessiert. $\int D\phi$ kennzeichnet das Funktionalintegral über das Potenzial ϕ . Diese Gleichung gilt es nun im Folgenden zu lösen.

2.3.2 Mittelung von $\ln Z$

Die übliche Vorgehensweise, eine Größe über eine statistische Verteilung zu mitteln, besteht darin, zuerst die Größe für jede Realisierung des Systems zu bestimmen. In unserem Fall bedeutet dies also die Berechnung des Integrals über $D[\mathbf{x}(\tau)]$ in Gleichung (2.24). Dann würde über alle Realisierungen gemittelt mit der Berechnung des Integrals über $D\phi$ in Gleichung (2.29). Dies ist hier allerdings nicht möglich. Die zu mittelnde Größe ist hier der Logarithmus der Zustandssumme $\ln Z$ der einzelnen Realisierungen. Die Zustandssumme (2.24) hängt nun allerdings von einer Hamilton-Funktion (2.25) ab, die sich über ein zufälliges Potenzial ϕ berechnet. ϕ wiederum ist von \mathbf{x} abhängig und müsste entsprechend vom $D[\mathbf{x}(\tau)]$ -Integral berücksichtigt werden. Der genaue Wert von ϕ für eine einzelne Realisierung ist allerdings nicht bekannt, sondern lediglich seine Verteilung $p(\phi)$. Es führt daher kein

Weg daran vorbei, erst über die Fluktuation zu mitteln und alles Weitere aus diesem Ergebnis abzuleiten.

Ausgangspunkt sind die beiden mathematischen Identitäten

$$\ln Z = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{Z^n - 1}{n} \quad (2.30)$$

und

$$x = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \ln(1 + nx), \quad (2.31)$$

welche es ermöglichen, den Logarithmus vor das Mittelungsintegral zu ziehen:

$$\overline{\ln Z} = \int_{-\infty}^{\infty} D\phi p(\phi) \ln Z \quad (2.32)$$

$$\stackrel{(2.31)}{=} \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \ln \left(1 + n \int_{-\infty}^{\infty} D\phi p(\phi) \ln Z \right). \quad (2.33)$$

Mit $\int_{-\infty}^{\infty} D\phi p(\phi) = 1$ folgt:

$$\overline{\ln Z} = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \ln \int_{-\infty}^{\infty} D\phi p(\phi) (1 + n \ln Z) \quad (2.34)$$

$$\stackrel{(2.30)}{=} \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \ln \int_{-\infty}^{\infty} D\phi p(\phi) Z^n \quad (2.35)$$

$$= \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \ln \overline{Z^n}. \quad (2.36)$$

Dieses Zwischenergebnis kann so gedeutet werden, dass wir unser System mit der Zustandssumme Z von nun an durch ein System beschreiben, welches aus n identischen Kopien unseres Systems besteht und die Zustandssumme Z^n besitzt. Daher wird diese Vorgehensweise auch als Replika-Methode [22] bezeichnet.

Die Replika nummerieren wir mit dem Index r von 1 bis n und schreiben die Zustandssumme des Replikasystems als

$$Z^n = \prod_{r=1}^n \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{x}_{r,0} \rho(\mathbf{x}_{r,0}) \int_{\mathbf{x}_{r,0}}^{\mathbf{x}_r} D[\mathbf{x}_r(\tau)] \exp(-\mathcal{H}_n) \quad (2.37)$$

mit dem n -Replika-Hamiltonian

$$\mathcal{H}_n = \sum_{a=1}^n \int_0^t d\tau \left[\frac{c}{2} (\partial_\tau \mathbf{x}_a)^2 + \frac{1}{2\nu} \phi(\mathbf{x}_a) \right]. \quad (2.38)$$

Im Hamiltonian werden die Replika mit a und später auch mit b bezeichnet. Im Folgenden werden häufig folgende, kürzere Notationen für das Integral über die Replika verwendet werden:

$$\prod_{r=1}^n \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{x}_{r,0} \rho(\mathbf{x}_{r,0}) \int_{\mathbf{x}_{r,0}}^{\mathbf{x}_r} D[\mathbf{x}_r(\tau)] \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{r=1}^n D\mathbf{x}_r \equiv \int D^n \mathbf{x}_r. \quad (2.39)$$

Ein Blick auf Gleichung (2.35) verrät uns den nächsten Schritt: Z^n wird gemittelt über das gauß'sche Potenzial ϕ . Dazu müssen wir die Wahrscheinlichkeitsverteilung des Potenzials $p(\phi)$ nach Gleichung (2.20) an das Replikasystem anpassen. Jedem Replika liegt zwar das gleiche gauß'sche Potenzial mit identischen Momenten zu Grunde, allerdings kann dieses für zwei Replika a und b aufgrund seiner Zufälligkeit im Detail eine andere Realisierung zeigen. Es ergibt sich:

$$p_n(\phi) = \frac{1}{N_{\chi}^n} \exp \left(-\frac{1}{2} \sum_{a=1}^n \sum_{b=1}^n \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{x}_a d\mathbf{x}_b \phi(\mathbf{x}_a) \chi_{\mathbf{x}_a \mathbf{x}_b}^{-1} \phi(\mathbf{x}_b) \right). \quad (2.40)$$

Das \mathbf{x}_b ist eigentlich ein \mathbf{x}'_b . Den Strich lassen wir aber weg, um die Notation nicht zu überladen. Er ist nur relevant, wenn a und b gleich sind.

Die Ortskorrelation $\chi_{\mathbf{x}_a \mathbf{x}_b}$ als Teil des zweiten Moments der Wahrscheinlichkeitsverteilung ist allerdings unabhängig von den beiden Replika a und b , da wir im Mittel ein System aus n identischen Replika haben. Somit ist es unerheblich, welche zwei Replika zu deren Berechnung genutzt werden:

$$\chi_{\mathbf{x}_a \mathbf{x}_b} = \epsilon L^2 N \exp \left(-\frac{[\mathbf{x}_a(\tau) - \mathbf{x}_b(\tau)]^2}{2NL^2} \right). \quad (2.41)$$

Mit all diesen Überlegungen folgt

$$\overline{Z^n} = \int_{-\infty}^{\infty} D\phi p_n(\phi) \int D^n \mathbf{x}_r \exp \left(-\sum_{a=1}^n \int_0^t d\tau \left\{ \frac{c}{2} (\partial_{\tau} \mathbf{x}_a)^2 + \frac{1}{2\nu} \phi(\mathbf{x}_a) \right\} \right). \quad (2.42)$$

Die Verteilung $p_n(\phi)$ setzen wir nun ein und werten das ϕ -Integral aus:

$$\begin{aligned}
 &= \int D^n \mathbf{x}_r \exp \left(- \sum_{a=1}^n \int_0^t d\tau \frac{c}{2} (\partial_\tau \mathbf{x}_a)^2 \right) \times \\
 &\quad \times \frac{1}{N_\chi^n} \int_{-\infty}^{\infty} D\phi \exp \left(- \frac{1}{2} \sum_{a=1}^n \sum_{b=1}^n \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{x}_a d\mathbf{x}_b \phi(\mathbf{x}_a) \chi_{\mathbf{x}_a \mathbf{x}_b}^{-1} \phi(\mathbf{x}_b) \right) \times \\
 &\quad \times \exp \left(- \frac{1}{2\nu} \sum_{a=1}^n \int_0^t d\tau \phi(\mathbf{x}_a) \right) \\
 &= \int D^n \mathbf{x}_r \exp \left(\int_0^t d\tau \left[- \sum_{a=1}^n \frac{c}{2} (\partial_\tau \mathbf{x}_a)^2 + \frac{1}{2} \sum_{a=1}^n \sum_{b=1}^n \frac{\chi_{\mathbf{x}_a \mathbf{x}_b}}{4\nu^2} \right] \right). \quad (2.43)
 \end{aligned}$$

Dabei kommt im letzten Schritt die Funktionalvariante der im Anhang A erwähnten Formel (A.2) zur Lösung eines Gaußintegrals mit zusätzlichem linearen Term zur Anwendung.

Für $\chi_{\mathbf{x}_a \mathbf{x}_b}$ setzen wir nun die für unser Problem explizit angenommene Ortskorrelation aus Gleichung (2.41) ein. Ebenfalls führen wir einen Massenterm $\propto \mu$ ein, um Singularitäten behandeln zu können; μ wird am Ende der Rechnung wieder auf Null gesetzt:

$$\overline{\ln Z} = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \ln \prod_{r=1}^n \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{x}_{r,0} \rho(\mathbf{x}_{r,0}) \int_{\mathbf{x}_{r,0}}^{\mathbf{x}_r} D[\mathbf{x}_r(\tau)] \exp(-\mathcal{H}_{\text{eff}}) \quad (2.44)$$

mit

$$\mathcal{H}_{\text{eff}} = \int_0^t d\tau \left[\sum_{a=1}^n \frac{1}{2} \left(c (\partial_\tau \mathbf{x}_a)^2 + \mu \mathbf{x}_a^2 \right) - \frac{\epsilon L^2 N}{8\nu^2} \sum_{a=1}^n \sum_{b=1}^n \exp \left(- \frac{(\mathbf{x}_a - \mathbf{x}_b)^2}{2NL^2} \right) \right]. \quad (2.45)$$

Mit diesen zwei Anpassungen ist die Mittelung über das gauß'sche Potenzial komplett. Als nächster Schritt folgt die Auswertung der Integrale über \mathbf{x}_r . Dies ist hier analytisch nicht möglich. Der zweite Term im Hamiltonian mit der Exponentialfunktion sorgt dafür, dass der Hamiltonian nicht quadratisch ist und macht uns deshalb einen Strich durch die Rechnung. Wir nähern $\overline{\ln Z}$ deshalb durch eine quadratische Funktion an.

2.3.3 Näherung von $\overline{\ln Z}$

Die Näherung geschieht mit Hilfe eines Variationsverfahrens. Die Idee dahinter ist folgende: $\overline{\ln Z}$ ist über eine weitere Funktion, den Hamiltonian \mathcal{H}_{eff} (2.45), definiert. Soll $\overline{\ln Z}$ genähert werden, muss dies also auf den Hamiltonian zurückgeführt werden. Für \mathcal{H}_{eff} wird nun eine Form \mathcal{H}_0 angenommen, die sich erstens exakt berechnen lässt und zweitens seiner tatsächlichen Form soweit es geht nahe kommt. Anschließend wird damit für $\overline{\ln Z}$ eine Testfunktion $\widetilde{\overline{\ln Z}}$ aufgestellt. Diese Testfunktion besteht aus einem Term, der unsere zu nähernde Funktion $\overline{\ln Z}$ in Abhängigkeit von \mathcal{H}_0 beschreibt, plus einen Korrekturterm, der die Abweichung von \mathcal{H}_{eff} zu \mathcal{H}_0 berücksichtigt. Nachdem die Testfunktion $\widetilde{\overline{\ln Z}}$ bestimmt wurde, werden die Parameter von \mathcal{H}_0 so gewählt, dass $\widetilde{\overline{\ln Z}}$ $\overline{\ln Z}$ am besten beschreibt.

Unsere zu nähernde Funktion ist dergestalt, dass für sie

$$\overline{\ln Z} = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \ln \int_{-\infty}^{\infty} D^n \mathbf{x}_r e^{-\mathcal{H}_{\text{eff}}} \quad (2.46)$$

gilt (vgl. (2.44)). Das Integral über $e^{-\mathcal{H}_{\text{eff}}}$ ist nicht auswertbar und wir möchten es in ein Integral über $e^{-\mathcal{H}_0}$ mit einem quadratischen \mathcal{H}_0 überführen. Es fällt außerdem auf, dass vor dem Integral ein Logarithmus steht, welcher als Umkehrfunktion der Exponentialfunktion einen Ansatz für eine Vorgehensweise bieten kann.

Formen wir Gleichung (2.46) zunächst wie folgt mit einer an dieser Stelle noch beliebigen Funktion \mathcal{H}_0 um:

$$\begin{aligned} \overline{\ln Z} &= \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \ln \left(\int_{-\infty}^{\infty} D^n \mathbf{x}_r e^{-\mathcal{H}_{\text{eff}}} \frac{\int_{-\infty}^{\infty} D^n \mathbf{x}'_r e^{-\mathcal{H}_0}}{\int_{-\infty}^{\infty} D^n \mathbf{x}''_r e^{-\mathcal{H}_0}} \right) \\ &= \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \ln \left(\frac{\int_{-\infty}^{\infty} D^n \mathbf{x}_r e^{-(\mathcal{H}_{\text{eff}} - \mathcal{H}_0)} e^{-\mathcal{H}_0}}{\int_{-\infty}^{\infty} D^n \mathbf{x}''_r e^{-\mathcal{H}_0}} \int_{-\infty}^{\infty} D^n \mathbf{x}'_r e^{-\mathcal{H}_0} \right). \end{aligned} \quad (2.47)$$

Der Faktor

$$\frac{\int_{-\infty}^{\infty} D^n \mathbf{x}_r e^{-(\mathcal{H}_{\text{eff}} - \mathcal{H}_0)} e^{-\mathcal{H}_0}}{\int_{-\infty}^{\infty} D^n \mathbf{x}''_r e^{-\mathcal{H}_0}} \quad (2.48)$$

hat die Struktur eines Erwartungswertes

$$\langle X \rangle_0 = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} D^n \mathbf{x}_r X e^{-\mathcal{H}_0}}{\int_{-\infty}^{\infty} D^n \mathbf{x}''_r e^{-\mathcal{H}_0}} \quad (2.49)$$

bezüglich einer Boltzmannverteilung mit \mathcal{H}_0 und bei einer Temperatur $T = 1$. Dies setzen wir ein:

$$\overline{\ln Z} = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \ln \left(\left\langle e^{-(\mathcal{H}_{\text{eff}} - \mathcal{H}_0)} \right\rangle_0 \int_{-\infty}^{\infty} D^n \mathbf{x}_r e^{-\mathcal{H}_0} \right). \quad (2.50)$$

Dabei wurde $D^n \mathbf{x}'_r$ in $D^n \mathbf{x}_r$ umbenannt, da ab hier die Integrationsvariablen nicht länger unterschieden werden müssen. An diesem Punkt findet nun die Abschätzung statt. Aus der Konvexität der Exponentialfunktion folgt

$$\left\langle e^{-X} \right\rangle_0 \geq e^{-\langle X \rangle_0} \quad (2.51)$$

und damit

$$\overline{\ln Z} \geq \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \ln \left(e^{-\langle \mathcal{H}_{\text{eff}} - \mathcal{H}_0 \rangle_0} \int_{-\infty}^{\infty} D^n \mathbf{x}_r e^{-\mathcal{H}_0} \right) \quad (2.52)$$

$$= \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} [\ln Z_0 - \langle \mathcal{H}_{\text{eff}} \rangle_0 + \langle \mathcal{H}_0 \rangle_0] \equiv \widetilde{\ln Z}. \quad (2.53)$$

Die Testfunktion für $\overline{\ln Z}$ bezeichnen wir mit $\widetilde{\ln Z}$, den Testhamiltonian mit \mathcal{H}_0 und die sich aus diesem ergebende Testzustandssumme mit

$$Z_0 = \int_{-\infty}^{\infty} D^n \mathbf{x}_r e^{-\mathcal{H}_0}. \quad (2.54)$$

Die einzelnen Terme von (2.53) müssen nun berechnet werden.

Dafür muss zuerst ein passender Testhamiltonian gefunden werden. Wie bereits erwähnt, ist der zweite Term mit der Exponentialfunktion im effektiven Hamiltonian (2.45) der Knackpunkt, welcher dafür sorgt, dass der Hamiltonian nicht quadratisch ist. Deshalb nähern wir diesen Term nun durch eine quadratische Form mit der symmetrischen Korrelationsmatrix σ_{ab} an. Es ergibt sich der Testhamiltonian

$$\mathcal{H}_0 = \int_0^t d\tau \left[\sum_{a=1}^n \frac{1}{2} \left(c (\partial_\tau \mathbf{x}_a)^2 + \mu \mathbf{x}_a^2 \right) - \frac{1}{2} \sum_{a=1}^n \sum_{b=1}^n \mathbf{x}_a \sigma_{ab} \mathbf{x}_b \right]. \quad (2.55)$$

Seine mathematische Struktur lässt sich vereinfachen, indem in den Fourierraum gewechselt wird über

$$\mathbf{x}(\tau) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \tilde{\mathbf{x}}(\omega) e^{-i\omega\tau}. \quad (2.56)$$

$\tilde{\mathbf{x}}$ kennzeichnet die Fouriertransformierte von \mathbf{x} . Dadurch lässt sich nun die Zeitableitung auswerten. Die Terme in (2.55) und (2.45), welche allesamt quadratisch in $\mathbf{x}(\tau)$ sind, lassen sich analog zu

$$\mathbf{x}_a(\tau)\mathbf{x}_b(\tau) = \int \frac{d\omega}{\sqrt{2\pi}} \int \frac{d\omega'}{\sqrt{2\pi}} \tilde{\mathbf{x}}_a(\omega)\tilde{\mathbf{x}}_b(\omega') e^{-i(\omega+\omega')\tau}, \quad (2.57)$$

bestimmen. Des Weiteren nehmen wir hier vorläufig periodische Randbedingungen

$$\mathbf{x}(t) = \mathbf{x}(0) \Rightarrow \mathbf{x}(t)^2 = \mathbf{x}(0)^2 \stackrel{(2.57)}{\Rightarrow} \omega' = -\omega \quad (2.58)$$

an. Dies entspricht zwar nicht der Burgersgleichung, wo es ein freies Ende gibt (siehe Kapitel 2.3.1), vereinfacht hier aber die Rechnung und kann am Ende der Rechnung leicht korrigiert werden. Es folgt

$$\mathbf{x}_a(\tau)\mathbf{x}_b(\tau) = \int \frac{d\omega}{2\pi} \tilde{\mathbf{x}}_a(\omega)\tilde{\mathbf{x}}_b(-\omega), \quad (2.59)$$

$$[\partial_\tau \mathbf{x}_a(\tau)]^2 = \int \frac{d\omega}{2\pi} \omega^2 \tilde{\mathbf{x}}_a(\omega)\tilde{\mathbf{x}}_a(-\omega) \quad (2.60)$$

und

$$[\mathbf{x}_a(\tau) - \mathbf{x}_b(\tau)]^2 = \int \frac{d\omega}{2\pi} [\tilde{\mathbf{x}}_a(\omega) - \tilde{\mathbf{x}}_b(\omega)] [\tilde{\mathbf{x}}_a(-\omega) - \tilde{\mathbf{x}}_b(-\omega)]. \quad (2.61)$$

Sämtliche Terme sind damit unabhängig von τ . Das verbleibende τ -Integral ergibt die Länge des Polymers \mathcal{T} (vgl. Kapitel 2.3.1).

Wir haben den effektiven und den Testhamiltonian nun komplett in den Fourierraum überführt. Der Übersicht zuliebe bezeichnen wir $\tilde{\mathbf{x}}(\omega)$ ab jetzt nur noch mit $\tilde{\mathbf{x}}$ und $\tilde{\mathbf{x}}(-\omega)$ mit $\tilde{\mathbf{x}}^-$:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{eff}} = & \frac{\mathcal{T}}{2} \left\{ \sum_{a=1}^n \int \frac{d\omega}{2\pi} (c\omega^2 + \mu) \tilde{\mathbf{x}}_a \tilde{\mathbf{x}}_a^- \right. \\ & \left. - \frac{\epsilon L^2 N}{4\nu^2} \sum_{a=1}^n \sum_{b=1}^n \exp \left(- \frac{\int \frac{d\omega}{2\pi} [\tilde{\mathbf{x}}_a - \tilde{\mathbf{x}}_b] [\tilde{\mathbf{x}}_a^- - \tilde{\mathbf{x}}_b^-]}{2NL^2} \right) \right\}, \end{aligned} \quad (2.62)$$

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_0 &= \frac{\mathcal{T}}{2} \left\{ \sum_{a=1}^n \int \frac{d\omega}{2\pi} (c\omega^2 + \mu) \tilde{\mathbf{x}}_a \tilde{\mathbf{x}}_a^- - \sum_{a=1}^n \sum_{b=1}^n \int \frac{d\omega}{2\pi} d\tau \tilde{\mathbf{x}}_a \sigma_{ab} \tilde{\mathbf{x}}_b^- \right\} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{a=1}^n \sum_{b=1}^n \int \frac{d\omega}{2\pi} \tilde{\mathbf{x}}_a (G^{-1})_{ab}(\omega) \tilde{\mathbf{x}}_b^- \end{aligned} \quad (2.63)$$

mit

$$(G^{-1})_{ab}(\omega) = \mathcal{T} \left((c\omega^2 + \mu) \delta_{ab} - \sigma_{ab} \right). \quad (2.64)$$

Die Testzustandssumme wird damit zu einem Gaußintegral mit der elementaren Lösung¹

$$Z_0 = (2\pi)^{\frac{Nn}{2}} \left[\det \left(\int \frac{d\omega}{2\pi} \mathbf{G} \right) \right]^{N/2}. \quad (2.65)$$

Daraus folgt

$$\lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \ln Z_0 = N\pi + \frac{N}{2} \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \int \frac{d\omega}{2\pi} \text{Sp}(\ln \mathbf{G}). \quad (2.66)$$

Für $\langle H_0 \rangle_0$ gilt²

$$\begin{aligned}\langle H_0 \rangle_0 &= \frac{1}{2} \sum_{a=1}^n \sum_{b=1}^n \int \frac{d\omega}{2\pi} (G^{-1})_{ab} \langle \tilde{\mathbf{x}}_a \tilde{\mathbf{x}}_b^- \rangle_0 \\ &= \frac{N}{2} \sum_{a=1}^n \sum_{b=1}^n \int \frac{d\omega}{2\pi} (G^{-1})_{ab} G_{ab} \\ &= \frac{Nn}{2} \int \frac{d\omega}{2\pi}. \end{aligned} \quad (2.67)$$

$\langle H_{\text{eff}} \rangle_0$ nach Gleichung (2.62) besteht aus zwei Termen, die hier getrennt gemittelt werden. Die Lösung des ersten Terms kann direkt aufgeschrieben werden:

$$\begin{aligned}\left\langle \sum_{a=1}^n \int \frac{d\omega}{2\pi} (c\omega^2 + \mu) \tilde{\mathbf{x}}_a \tilde{\mathbf{x}}_a^- \right\rangle_0 &= \sum_{a=1}^n \int \frac{d\omega}{2\pi} (c\omega^2 + \mu) \langle \tilde{\mathbf{x}}_a \tilde{\mathbf{x}}_a^- \rangle_0 \\ &= N \sum_{a=1}^n \int \frac{d\omega}{2\pi} (c\omega^2 + \mu) G_{aa}. \end{aligned} \quad (2.68)$$

Die Berechnung des zweiten Terms gestaltet sich durch die Exponentialfunktion auf den ersten Blick etwas komplizierter. Der Trick ist dabei, $\exp(x)$ zu entwickeln und dann jeden Term einzeln zu mitteln. Die Mittelung ist gaußisch und damit sind alle

¹siehe Anhang A, Gleichung (A.1)

²Gleichung (A.3)

Momente ≥ 3 gleich Null. Somit können wir die Entwicklung nach der zweiten Ordnung guten Gewissens abbrechen:

$$\begin{aligned}
 & \exp \left(- \frac{\int \frac{d\omega}{2\pi} [\tilde{\mathbf{x}}_a - \tilde{\mathbf{x}}_b] [\tilde{\mathbf{x}}_a^- - \tilde{\mathbf{x}}_b^-]}{2NL^2} \right) \\
 &= \exp \left(\frac{\int \frac{d\omega}{2\pi} [\tilde{x}_a \tilde{x}_a^- + \tilde{x}_b \tilde{x}_b^- - 2\tilde{x}_a \tilde{x}_b^-]}{NL^2} \right)^{-\frac{N}{2}} \\
 &= \left[1 + \frac{\int \frac{d\omega}{2\pi} [\tilde{x}_a \tilde{x}_a^- + \tilde{x}_b \tilde{x}_b^- - 2\tilde{x}_a \tilde{x}_b^-]}{NL^2} + \mathcal{O}(\tilde{x}^3) \right]^{-\frac{N}{2}}. \tag{2.69}
 \end{aligned}$$

Der zweite Term wird damit zu

$$\begin{aligned}
 & \left\langle - \frac{\epsilon L^2 N}{4\nu^2} \sum_{a=1}^n \sum_{b=1}^n \exp \left(- \frac{\int \frac{d\omega}{2\pi} [\tilde{\mathbf{x}}_a - \tilde{\mathbf{x}}_b] [\tilde{\mathbf{x}}_a^- - \tilde{\mathbf{x}}_b^-]}{2NL^2} \right) \right\rangle_0 \\
 &= - \frac{\epsilon L^2 N}{4\nu^2} \sum_{a=1}^n \sum_{b=1}^n \left[1 + \frac{\int \frac{d\omega}{2\pi} \langle \tilde{x}_a \tilde{x}_a^- + \tilde{x}_b \tilde{x}_b^- - 2\tilde{x}_a \tilde{x}_b^- \rangle_0}{NL^2} \right]^{-\frac{N}{2}} \\
 &= - \frac{\epsilon L^2 N}{4\nu^2} \sum_{a=1}^n \sum_{b=1}^n \left[1 + \frac{\int \frac{d\omega}{2\pi} [G_{aa} + G_{bb} - 2G_{ab}]}{NL^2} \right]^{-\frac{N}{2}}. \tag{2.70}
 \end{aligned}$$

Somit erhalten wir

$$\langle H_{\text{eff}} \rangle_0 = \frac{\mathcal{T}N}{2} \left\{ \sum_{a=1}^n \int \frac{d\omega}{2\pi} (c\omega^2 + \mu) G_{aa} - \frac{\epsilon L^2}{4\nu^2} \sum_{a=1}^n \sum_{b=1}^n \left[1 + \frac{B_{ab}}{NL^2} \right]^{-\frac{N}{2}} \right\} \tag{2.71}$$

mit

$$B_{ab} = \int \frac{d\omega}{2\pi} [G_{aa} + G_{bb} - 2G_{ab}]. \tag{2.72}$$

Schlussendlich ergibt sich also insgesamt für die Testfunktion

$$\begin{aligned}
 \widetilde{\ln Z} &= \text{const.} + \frac{N}{2} \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \left\{ \int \frac{d\omega}{2\pi} \text{Sp} \ln \mathbf{G} \right. \\
 &\quad \left. - \mathcal{T} \left\{ \sum_{a=1}^n \int \frac{d\omega}{2\pi} (c\omega^2 + \mu) G_{aa} - \frac{\epsilon L^2}{4\nu^2} \sum_{a=1}^n \sum_{b=1}^n \left[1 + \frac{B_{ab}}{NL^2} \right]^{-\frac{N}{2}} \right\} \right\}. \tag{2.73}
 \end{aligned}$$

2.3.4 Bestimmung der Parameter von $\widetilde{\ln Z}$

Im Zuge der Abschätzung auf dem Weg zur Gleichung (2.53) ist $\widetilde{\ln Z}$ kleiner als oder gleich dem tatsächlichen $\ln Z$. Für die weiteren Schritte ist es zunächst sinnvoll, sich über die Struktur der Matrix σ Gedanken zu machen. In dieser sind die Parameter, welche unsere Lösung variieren, kondensiert. Zur Erinnerung: σ definiert die Korrelation der Replika untereinander.

Wir haben es hier mit einem System aus n identischen Kopien des Ausgangssystems zu tun. Ein naheliegender Ansatz wäre, dass sich diese Kopien paarweise vollkommen symmetrisch verhalten. Alle Nichtdiagonalelemente von σ wären dann gleich einem Wert σ ; den Diagonalelementen wird der Wert $\tilde{\sigma} = \sigma_0 + \sigma$ zugewiesen. Dies ist die richtige Lösung für kleine Reynoldszahlen und es ergäbe sich ein laminarer Fluss, wenn wir die Rechnung bis zum Ende fortführten [5].

Hier sind wir allerdings an der Lösung interessiert, welche turbulentes Verhalten zeigt. Dies wird für große Reynoldszahlen erwartet. Das Lösungsschema weicht dabei von der eben erwähnten, symmetrischen Lösung ab und wir müssen unsere Annahmen über σ anpassen. Die Änderung ist hierbei, dass sich die Replika nicht ausnahmslos identisch verhalten. Stattdessen gibt es neben der intrinsischen Unordnung eines einzelnen Replikums eine zusätzliche Unordnung zwischen verschiedenen Replika. Das führt zur sogenannten *k-step replica-symmetry-breaking* (*k-step RSB*)-Lösung, wovon wir hier den Fall für $k = 1$ betrachten. 1-step RSB führt allerdings nur für $N > 2$ zur richtigen Lösung. Für eine kleinere Anzahl von Dimensionen muss auf vollständigen Bruch der Replikasymmetrie zurückgegriffen werden. Allerdings scheint dies laut [5] nicht zu einer qualitativ abweichenden Lösung zu führen.

Bei 1-step RSB werden die Nichtdiagonalelemente von σ in zwei zusammenhängende Blöcke aufgeteilt und durch zwei Werte σ_0 und σ_1 parametrisiert. Dadurch verhalten sich nur noch Replika im selben Block zueinander symmetrisch. Die Größe der Blöcke wird durch einen weiteren Parameter m festgelegt. Bezüglich der 1-step RSB-Matrizen sei an dieser Stelle auf Anhang B verwiesen.

Um die Testfunktion gemäß (2.73) im 1-step RSB-Fall angeben zu können, müssen wir anhand von σ die Struktur von \mathbf{G} ableiten. An dieser Stelle sei vorweggenommen, dass es sich bei \mathbf{G} ebenfalls um eine 1-step RSB-Matrix mit demselben Parameter m handelt. Mit der Formel (B.5) für die Spur des Logarithmus einer 1-step

RSB-Matrix wird die Testfunktion (2.73) zu:

$$\begin{aligned} \widetilde{\ln Z} = & \text{const.} + \frac{N}{2} \int \frac{d\omega}{2\pi} \left[\frac{1}{m} \ln(\tilde{G} - \langle G \rangle) + \frac{G_0}{\tilde{G} - \langle G \rangle} - \frac{1-m}{m} \ln(\tilde{G} - G_1) \right] \\ & - \frac{N\mathcal{T}}{2} \int \frac{d\omega}{2\pi} (c\omega^2 + \mu) \tilde{G} \\ & - \frac{N\mathcal{T}\epsilon L^2}{8v^2} \left\{ m \left[1 + \frac{B_0}{NL^2} \right]^{-\frac{N}{2}} + (1-m) \left[1 + \frac{B_1}{NL^2} \right]^{-\frac{N}{2}} \right\} \end{aligned} \quad (2.74)$$

mit

$$\langle G \rangle = mG_0 + (1-m)G_1 \quad (2.75)$$

und

$$B_i = 2 \int \frac{d\omega}{2\pi} [\tilde{G} - G_i]. \quad (2.76)$$

Insgesamt gibt es nun also die vier Parameter \tilde{G} , G_0 , G_1 und m , welche variiert werden können. Für das optimale $\widetilde{\ln Z}$ gilt folglich

$$\begin{aligned} \frac{\partial \widetilde{\ln Z}}{\partial G_0} &= -\frac{N}{2} m \int \frac{d\omega}{2\pi} \left((G^{-1})_0 + \frac{\mathcal{T}\epsilon}{4v^2} \left(1 + \frac{B_0}{NL^2} \right)^{-\frac{N}{2}-1} \right) \equiv 0 \\ \Rightarrow (G^{-1})_0 &= -\frac{\mathcal{T}\epsilon}{4v^2} \left(1 + \frac{B_0}{NL^2} \right)^{-\frac{N}{2}-1}, \end{aligned} \quad (2.77)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \widetilde{\ln Z}}{\partial G_1} &= -\frac{N}{2} (1-m) \int \frac{d\omega}{2\pi} \left((G^{-1})_1 + \frac{\mathcal{T}\epsilon}{4v^2} \left(1 + \frac{B_1}{NL^2} \right)^{-\frac{N}{2}-1} \right) \equiv 0 \\ \Rightarrow (G^{-1})_1 &= -\frac{\mathcal{T}\epsilon}{4v^2} \left(1 + \frac{B_1}{NL^2} \right)^{-\frac{N}{2}-1}, \end{aligned} \quad (2.78)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \widetilde{\ln Z}}{\partial \tilde{G}} &= \frac{N}{2} \int \frac{d\omega}{2\pi} \left(\tilde{G}^{-1} - \mathcal{T}(c\omega^2 + \mu) + \frac{\mathcal{T}\epsilon}{4v^2} \left[m \left(1 + \frac{B_0}{NL^2} \right)^{-\frac{N}{2}-1} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + (1-m) \left(1 + \frac{B_1}{NL^2} \right)^{-\frac{N}{2}-1} \right] \right) \equiv 0 \\ \Rightarrow \tilde{G}^{-1} - m(G^{-1})_0 - (1-m)(G^{-1})_1 &= \mathcal{T}(c\omega^2 + \mu) \end{aligned} \quad (2.79)$$

und

$$\frac{\partial \widetilde{\ln Z}}{\partial m} \equiv 0.$$

Die Auswertung der Ableitung nach m verschieben wir auf später, da sich durch die bis dahin erreichten Ergebnisse die sich ergebende Formel wesentlich vereinfachen lässt.

Fassen wir zu Beginn der Bestimmung der Elemente von σ einmal die benötigten Gleichungen zusammen. σ ist eine 1-step RSB-Matrix mit dem Parameter m und den Einträgen

$$\sigma = \begin{cases} \tilde{\sigma} \\ \sigma_0 \\ \sigma_1. \end{cases} \quad (2.80)$$

\mathbf{G}^{-1} ist über Gleichung (2.64) mit σ verknüpft. Sie ist damit ebenfalls eine 1-step RSB-Matrix mit

$$\mathbf{G}^{-1} = \begin{cases} \tilde{G}^{-1} &= \mathcal{T}(c\omega^2 + \mu - \tilde{\sigma}) \\ (G^{-1})_0 &= -\mathcal{T}\sigma_0 \\ (G^{-1})_1 &= -\mathcal{T}\sigma_1. \end{cases} \quad (2.81)$$

Aus Gleichung (2.79) kann damit zudem folgende nützliche Relation abgeleitet werden:

$$\tilde{\sigma} = m\sigma_0 + (1 - m)\sigma_1 \equiv \langle \sigma \rangle. \quad (2.82)$$

Für die Berechnung der B_i benötigen wir die Inverse von \mathbf{G}^{-1} . \mathbf{G} ergibt sich entsprechend den Vorschriften in Anhang B.3. Mit Relation (2.82) folgt:

$$\mathbf{G} = \begin{cases} \tilde{G} &= \frac{1}{\mathcal{T}(c\omega^2 + \mu)} + mG_0 + (1 - m)G_1 \\ G_0 &= \frac{\sigma_0}{\mathcal{T}(c\omega^2 + \mu)^2} \\ G_1 &= \frac{\sigma_1 - \sigma_0}{\mathcal{T}(c\omega^2 + \mu)(c\omega^2 + \mu + m(\sigma_1 - \sigma_0))} + G_0. \end{cases} \quad (2.83)$$

Die Berechnung der B_i ist unser Ansatzpunkt für die Bestimmung der Einträge von σ . Über (2.77), (2.78) und (2.81) lassen sich aus den B_i direkt σ_0 und σ_1 bestimmen. Mit Gleichung (2.82) folgt dann $\tilde{\sigma}$. Folgende Gleichungen leiten sich aus der

Definition für B_i gemäß (2.76) ab:

$$B_1 - B_0 = -\frac{2}{m\mathcal{T}} \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{S}{(\mu + c\omega^2)(\mu + c\omega^2 + S)}, \quad (2.84)$$

$$mB_0 + (1-m)B_1 \stackrel{(2.83)}{=} \frac{2}{\mathcal{T}} \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{1}{(\mu + c\omega^2)} \quad (2.85)$$

mit

$$S = m(\sigma_1 - \sigma_0). \quad (2.86)$$

Daraus ergibt sich

$$B_0 = \frac{2}{\mathcal{T}} \int \frac{d\omega}{2\pi} \left\{ \frac{1}{\mu + c\omega^2} + \frac{1-m}{m} \frac{S}{(\mu + c\omega^2)(\mu + c\omega^2 + S)} \right\}, \quad (2.87)$$

$$B_1 = \frac{2}{\mathcal{T}} \int \frac{d\omega}{2\pi} \left\{ \frac{1}{\mu + c\omega^2} - \frac{S}{(\mu + c\omega^2)(\mu + c\omega^2 + S)} \right\} \quad (2.88)$$

und mit dem Integral

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{1}{a + b\omega^2} = \frac{\pi}{\sqrt{ab}} \quad (2.89)$$

folgt

$$B_0 = \frac{1}{\mathcal{T}m\sqrt{\mu c}} - \frac{1-m}{\mathcal{T}m\sqrt{c(\mu + S)}} \xrightarrow{\mu \rightarrow 0} \infty, \quad (2.90)$$

$$B_1 = \frac{1}{\mathcal{T}\sqrt{c(\mu + S)}} \xrightarrow{\mu \rightarrow 0} \frac{1}{\mathcal{T}\sqrt{cS}}. \quad (2.91)$$

An dieser Stelle setzen wir nun auch das erste Mal den Massenterm μ wieder auf Null. Damit folgt für den ersten Eintrag von σ über Gleichungen (2.77) und (2.81):

$$\sigma_0 \approx 0. \quad (2.92)$$

S vereinfacht sich damit zu

$$S = m\sigma_1. \quad (2.93)$$

Für das zweite Nichtdiagonalelement folgt mit (2.78) und (2.81) vorerst

$$\sigma_1 = \frac{\epsilon}{4\nu^2} \left[1 + \frac{1}{NL^2\mathcal{T}\sqrt{cm\sigma_1}} \right]^{-\frac{N}{2}-1}. \quad (2.94)$$

Die Umformung nach σ_1 sparen wir uns an dieser Stelle und verschieben seine

endgültige Bestimmung auf später.

Stattdessen widmen wir uns nun dem Parameter m , welcher sich unseren Bemühungen bis jetzt erfolgreich entziehen konnte. Dazu führen wir an dieser Stelle die verbliebene Ableitung von $\widetilde{\ln Z}$ nach m aus:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \widetilde{\ln Z}}{\partial m} = & \frac{N}{2} \frac{1}{2m^2} \int \frac{d\omega}{2\pi} \left(\ln \frac{\tilde{G} - \langle G \rangle}{\tilde{G} - G_1} + m \frac{G_1 - G_0}{\tilde{G} - \langle G \rangle} - \frac{G_0(G_1 - G_0)}{(\tilde{G} - \langle G \rangle)^2} \right) \\ & - \frac{N\mathcal{T}}{2} \frac{\epsilon L^2}{8\nu^2} \left\{ \left(1 + \frac{B_0}{NL^2} \right)^{-\frac{N}{2}} - \left(1 + \frac{B_1}{NL^2} \right)^{-\frac{N}{2}} \right\} \equiv 0. \end{aligned}$$

Mit den Formeln für \mathbf{G} aus (2.83), für $\sigma_0 = 0$ gemäß (2.92) und in dem Grenzfall $\mu \rightarrow 0$ folgt:

$$\begin{aligned} & \frac{\mathcal{T}\epsilon L^2}{8\nu^2} \left(1 + \frac{1}{NL^2\mathcal{T}\sqrt{cm\sigma_1}} \right)^{-\frac{N}{2}} \\ & = \frac{1}{4m^2\pi} \int d\omega \left(\frac{m\sigma_1}{c\omega^2 + m\sigma_1} + \ln \frac{c\omega^2 + m\sigma_1}{c\omega^2} \right). \end{aligned} \quad (2.95)$$

Mit dem Integral (2.89) und

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\omega \ln \left(\frac{c\omega^2 + m\sigma_1}{c\omega^2} \right) = 0 \quad (2.96)$$

ergibt sich

$$\frac{\epsilon}{4\nu^2} \left(1 + \frac{1}{NL^2\mathcal{T}\sqrt{cm\sigma_1}} \right)^{-\frac{N}{2}} = \frac{1}{2mL^2\mathcal{T}} \sqrt{\frac{\sigma_1}{mc}}. \quad (2.97)$$

Diese Gleichung in (2.94) eingesetzt liefert die endgültige Lösung von σ_1 :

$$\sigma_1 = \frac{\left(1 - \frac{2m}{N}\right)^2}{4cm^3L^4\mathcal{T}^2}. \quad (2.98)$$

Mit σ_1 und σ_0 können wir nun auch $\tilde{\sigma}$ nach (2.82) angeben:

$$\tilde{\sigma} = -(1 - m) \frac{\left(1 - \frac{2m}{N}\right)^2}{4cm^3L^4\mathcal{T}^2}. \quad (2.99)$$

m erfüllt die Gleichung

$$\left(1 - \frac{2m}{N}\right)^{1-\frac{N}{2}} = \frac{m^3 \mathcal{T}^2 \epsilon L^4}{\nu^2} = \frac{m^3 \mathcal{T}^2 Re^3}{2}, \quad (2.100)$$

welche sich ergibt, wenn man (2.98) in (2.97) einsetzt.

Damit ist die Abschätzung des effektiven Hamiltonians für das n -Replikasystem (2.45) komplett. Die zu klärende Frage ist nun, wie wir das Resultat für dieses System auf das Problem der Burgersturbulenz zurück übersetzen. Der Weg führt über die Bestimmung der Wahrscheinlichkeitsverteilung des Endpunktes des Polymers.

2.3.5 Die Wahrscheinlichkeitsverteilung von $\mathbf{x}(t)$

Unsere Aufgabe während der vergangenen Unterkapitel war es, die Boltzmannge-
wichtung von $\mathbf{x}(t)$, dem Endpunkt des Polymers, zu bestimmen. Dabei mussten wir
auf ein System mit n Replika ausweichen. Nachdem die Lösung für 1-step RSB ge-
funden wurde, können wir damit erst einmal die Wahrscheinlichkeitsverteilung für
die Menge aller Endpunkte im Replikasystem angeben:

$$p(\mathbf{x}_r(t)) = Z^{-1} \sum_{\pi} \exp \left(-\frac{1}{2} \sum_{a=1}^n \sum_{b=1}^n (Q^{-1})_{\pi(a)\pi(b)} \mathbf{x}_a(t) \mathbf{x}_b(t) \right) \quad (2.101)$$

mit

$$Q_{ab} = \int \frac{d\omega}{2\pi} G_{ab}(\omega). \quad (2.102)$$

Die Summe über π berücksichtigt alle $n!$ Permutationen der Replikaindizes a und b ,
die das System mit dem gleichen Ergebnis lösen und deshalb natürlich auch beachtet
werden müssen. Gemäß Gleichung (2.102) ist \mathbf{Q} eine 1-step RSB-Matrix mit den
Einträgen \tilde{Q} , Q_0 , Q_1 und dem Parameter m .

Mit dieser Verteilung können wir nun Rückschlüsse auf die Verteilung des End-
punktes $\mathbf{x}(t)$ eines Polymers in einem ausgewählten, aber zufälligen Potenzial ziehen;
wir geben damit also die Verteilung von $\mathbf{x}(t)$ in einem aus dem gesamten Ensemble
ausgewählten Sample an. Das Rezept [22] für diese Aufgabe lautet:

1. Man wählt einen "Mittelpunkt" \mathbf{x}_c , um den herum sich das System entwickelt,

über eine Gaußverteilung

$$p_c(\mathbf{x}_c) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi Q_0)^N}} \exp\left(-\frac{\mathbf{x}_c^2}{2Q_0}\right) \quad (2.103)$$

aus.

2. Um \mathbf{x}_c herum werden nun M Potenzialtöpfe α mit einer quadratischen Form verteilt. Das Minimum dieser Potenzialtöpfe befindet sich am Ort \mathbf{x}_α gemäß einer weiteren Gaußverteilung

$$p_\alpha(\mathbf{x}_\alpha) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi(Q_1 - Q_0))^N}} \exp\left(-\frac{(\mathbf{x}_\alpha - \mathbf{x}_c)^2}{2(Q_1 - Q_0)}\right). \quad (2.104)$$

Dabei sind die \mathbf{x}_α nicht miteinander korreliert.

3. Die Tiefe der Potenzialtöpfe V_α wird über eine weitere, vollkommen unkorrelierte Zufallsvariable, die verteilt ist über

$$p_V(V_\alpha) \propto e^{mV_\alpha}, \quad (2.105)$$

bestimmt. Es gilt $V_\alpha < 0$. Damit treten tiefe Potenziale exponentiell seltener auf. Es handelt sich hierbei um einen Poisson-Prozess, analog zu dem des radioaktiven Zerfalls $\propto e^{\lambda t}$. Genauso wie die Zeitpunkte eines Kernzerfalls in einem Zufallsprozess ausgewählt werden, werden die Werte der Potenziale festgelegt. Während der Atomkern eine mittlere Lebensdauer von $\tau = \frac{1}{\lambda}$ hat und somit zwei Zerfälle im Mittel diese Zeit auseinander liegen, werden die ausgesuchten Potenzialwerte im Mittel um den Wert $\frac{1}{m}$ auseinanderliegen.

4. Über seine Tiefe wird dem Potenzial eine Gewichtung W_α zugewiesen:

$$W_\alpha = \frac{e^{-V_\alpha}}{\sum_{\alpha=1}^M e^{-V_\alpha}}. \quad (2.106)$$

5. Die Potenziale haben eine Breite von

$$\sqrt{\theta} \equiv \sqrt{\tilde{Q} - Q_1}. \quad (2.107)$$

6. Für $\mathbf{x}(t)$ folgt daraus die Wahrscheinlichkeitsverteilung:

$$p(\mathbf{x}(t)) = \sum_{\alpha=1}^M W_{\alpha} \frac{1}{\sqrt{(2\pi\theta)^N}} \exp\left(-\frac{(\mathbf{x}(t) - \mathbf{x}_{\alpha})^2}{2\theta}\right). \quad (2.108)$$

$p(\mathbf{x}(t))$ kann auch als Zustandssumme des Samples angesehen werden. Die Potenziale α stellen die Zustände dar, über die gewichtet summiert wird.

Die endgültige Bestimmung von $p(\mathbf{x}(t))$ benötigt damit die Berechnung der Matrix \mathbf{Q} über (2.102) unter Zuhilfenahme der Gleichungen (2.83) für \mathbf{G} und den Endresultaten für σ aus dem letzten Abschnitt. Die Ergebnisse sind:

$$Q_0 = \frac{\sigma_0}{2\tau\sqrt{\mu c}} \xrightarrow{\mu \rightarrow 0} 0, \text{ da } \sigma_0 \rightarrow 0, \quad (2.109)$$

$$Q_1 - Q_0 = \frac{1}{2m\tau\sqrt{\mu c}} - \frac{1}{2m\tau\sqrt{c(\mu + m(\sigma_1 - \sigma_0))}} \xrightarrow{\mu \rightarrow 0} \infty, \quad (2.110)$$

$$\theta \equiv \tilde{Q} - Q_1 = \frac{1}{2\tau\sqrt{c(\mu + m(\sigma_1 - \sigma_0))}} \xrightarrow{\mu \rightarrow 0} \frac{1}{2\tau\sqrt{cm\sigma_1}} = \frac{mL^2}{1 - \frac{2m}{N}}. \quad (2.111)$$

Dies bedeutet, dass

- $p_c(\mathbf{x}_c)$ eine Standardabweichung vom Wert 0 hat und in eine δ -Funktion übergeht. \mathbf{x}_c liegt also für jedes System fest bei 0.
- $p_{\alpha}(\mathbf{x}_{\alpha})$ eine Standardabweichung von ∞ hat und somit in eine Gleichverteilung übergeht. Die Mittelpunkte \mathbf{x}_{α} der Potenziale werden somit den Raum gleichmäßig ausfüllen.

Wir wissen nun, wie wahrscheinlich sich der Endpunkt des Polymers an der transversalen Position $\mathbf{x}(t)$ befindet, wenn der Anfangspunkt \mathbf{x}_0 ebenfalls bei $\mathbf{x}(t)$ liegt. Es sei daran erinnert, dass wir in der Rechnung periodische Randbedingungen betrachtet haben. Nun wollen wir diese Einschränkung wieder rückgängig machen, indem wir uns überlegen, wie wir das Resultat anzupassen haben, wenn \mathbf{x}_0 frei ist. Dazu sei einmal direkt [5] zitiert: "As argued by Nelson and Vinokur in a different context, the difference between points far inside the chain and boundary points is the fact that the statistical weight of the former is given, in quantum-mechanical language, by the product of two propagators, while the end point only needs one. If the ground-state wave function of the corresponding quantum-mechanical Hamiltonian decays exponentially on a characteristic length scale l , this means that the

lateral fluctuations of the polymer's end point decay on length scale l , while the fluctuations for points in the bulk decay on a length scale $l/2$. The study of the system with periodic boundary conditions [...] only deals with these fluctuations in the bulk. The simple consequence of this analysis for our problem is that [...] the value of $[\theta$, defined in (2.111),] must be doubled [...]" Also:

$$\theta \equiv \frac{2mL^2}{1 - \frac{2m}{N}}. \quad (2.112)$$

Bevor wir uns nun schließlich an die Bestimmung des Geschwindigkeitsfeldes \mathbf{v} der Burgersturbulenz machen können, muss an dieser Stelle noch auf eine wichtige Sache eingegangen werden: Unter welchen Bedingungen liefert uns die bisherige Lösung, die schließlich eine Approximation darstellt, überhaupt zumindest annähernd exakte Resultate? Die Replika-Methode samt Variationsverfahren kann als eine Form der Hartree-Fock-Näherung angesehen werden, was bedeutet, dass sie für $N \rightarrow \infty$ exakt wird [22]. Eine weitere Einschränkung ist, dass für die genaue Bestimmung von \mathbf{v} sämtliche Momente von $p(\mathbf{x}(t))$, also $\langle p(\mathbf{x}(t))^\eta \rangle$, ebenso genau vorliegen müssen. Diese Momente sind nun in unterschiedlicher Ausprägung von den Energiezuständen V_α abhängig. Dabei beschreibt die Replika-Methode gerade die Energiezustände mit einem tiefen Potenzial am besten. Um dafür zu sorgen, dass hauptsächlich diese Potenziale zu den $\langle p(\mathbf{x}(t))^\eta \rangle$ beitragen, muss ihre Wahrscheinlichkeit e^{mV_α} "vergrößert" werden. Dies geschieht, wenn m gegen 0 strebt. Wenn wir uns Gleichung (2.100) ansehen, lässt sich damit zunächst aussagen, dass

$$\lim_{m \rightarrow 0} \lim_{N \rightarrow \infty} \left(1 - \frac{2m}{N}\right)^{1 - \frac{N}{2}} = \lim_{m \rightarrow 0} e^m = 1. \quad (2.113)$$

Damit folgt dann mit der rechten Seite von (2.100):

$$\lim_{m \rightarrow 0} m = \frac{2^{1/3}}{\mathcal{T}^{2/3} Re} \Rightarrow Re \rightarrow \infty. \quad (2.114)$$

Die Ergebnisse sind also erst einmal nur für große N und große Re weitgehend exakt.

In den genannten Grenzfällen gilt nun:

- θ nimmt folgenden Wert an:

$$\theta = \lim_{m \rightarrow 0} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{2mL^2}{1 - \frac{2m}{N}} = 2mL^2 = \frac{2^{4/3}L^2}{\mathcal{T}^{2/3}Re}. \quad (2.115)$$

- Die mit (2.104) bestimmten V_α haben weit auseinanderliegende Werte und haben im Mittel einen Abstand $\frac{1}{m} \simeq Re$ zueinander.
- Die von den V_α abhängigen Gewichtungen W_α sind dann ebenfalls weit gestreut. Für den Wert von $p(\mathbf{x}(t))$ aus (2.108) wird dann hauptsächlich das größte W_α verantwortlich sein.

2.3.6 Das Geschwindigkeitsfeld und seine Struktur

Um das Geschwindigkeitsfeld eines Samples mit Hilfe der Hopf-Cole-Transformation (2.28) bestimmen zu können, interpretieren wir $p(\mathbf{x}(t))$ aus (2.108) als Zustandssumme und folgern

$$\mathbf{v} = -2\nu \nabla \ln p(\mathbf{x}(t)) = \frac{2\nu \sum_{\alpha} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_{\alpha}) \exp \left(-V_{\alpha} - \frac{(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{\alpha})^2}{2\theta} \right)}{\theta \sum_{\alpha} \exp \left(-V_{\alpha} - \frac{(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{\alpha})^2}{2\theta} \right)}. \quad (2.116)$$

Die Struktur dieses Feldes lässt sich durch ein paar Überlegungen erfassen. Dabei betrachten wir das System im Folgenden grundsätzlich für $Re \rightarrow \infty$. Befinden wir uns an einem Ort \mathbf{x} , wird überwiegend der zum Index α gehörige Term mit der an diesem Ort größten Gewichtung W_α zur Geschwindigkeit beitragen, da der zweitgrößte Term eine Gewichtung hat, die um den Faktor $e^{\frac{1}{m}}$ kleiner ist. Die Summe in (2.116) fällt dann weg und in der Umgebung des Punktes wird sich das Feld radial entsprechend

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}_{\alpha} + \delta \mathbf{x}) \sim (2\nu/\theta)(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{\alpha}), \quad (2.117)$$

also linear, entwickeln. Bewegen wir uns nun im Raum, kann dieser größte Term an einem Ort \mathbf{x}^* abgelöst werden, wenn der gauß'sche Faktor eines zweiten Summanden mit Index β groß genug wird und die Differenz in der Gewichtung zum größten Summanden aufhebt. Das Geschwindigkeitsfeld macht an dieser Stelle dann einen Sprung. Diese Sprünge werden auch als Schock bezeichnet.

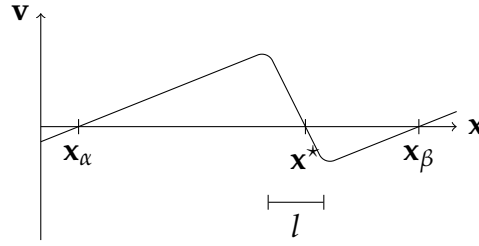


Abbildung 2.3: Um die Mittelpunkte x_v der Potenziale steigt das Geschwindigkeitsfeld linear an. Hat ein weiteres Potenzial einen größeren Einfluss, kommt es zu einem Sprung der Breite l .

Dieses Verhalten ist in Abbildung 2.3 gezeigt und lässt sich quantitativ über die beiden größten Potenziale V_α und V_β beschreiben, welche verknüpft sind über:

$$V_\beta = V_\alpha + \frac{1}{m}. \quad (2.118)$$

Damit nun der eben beschriebene Fall eintritt, muss der Exponentialfaktor der beiden Summanden gleich groß sein, also

$$\exp\left(-V_\beta - \frac{(x^* - x_\beta)^2}{2\theta}\right) \approx \exp\left(-V_\alpha - \frac{(x^* - x_\alpha)^2}{2\theta}\right). \quad (2.119)$$

Dafür muss mit Gleichung (2.118)

$$(x^* - x_\alpha)^2 \approx (x^* - x_\beta)^2 + \frac{2\theta}{m} \quad (2.120)$$

gelten. Wenn wir der Einfachheit wegen einmal annehmen, dass im Bereich bis x^* , wo der Summand mit Index α das Geschehen bestimmt, der Summand mit Index β als vernachlässigbar klein angenommen wird, können wir an dem Rand dieses Bereiches schreiben:

$$(x^* - x_\alpha)^2 \approx \frac{2\theta}{m}. \quad (2.121)$$

x_α ist der Ort, an dem das Zentrum des Potentials α liegt. x^* ist der Ort an dem dieses Potenzial den hauptsächlichen Einfluss verliert. Damit ist $x^* - x_\alpha$ ein Maß für den Abstand zwischen zwei Sprüngen, also die Größe einer "Zelle" mit einem linearen Geschwindigkeitsfeld. Diese Größe liegt damit in der Größenordnung $\sqrt{\theta/m} \propto L$. Die Breite der Sprünge l kann gefolgert werden, wenn man θ als Produkt aus dem

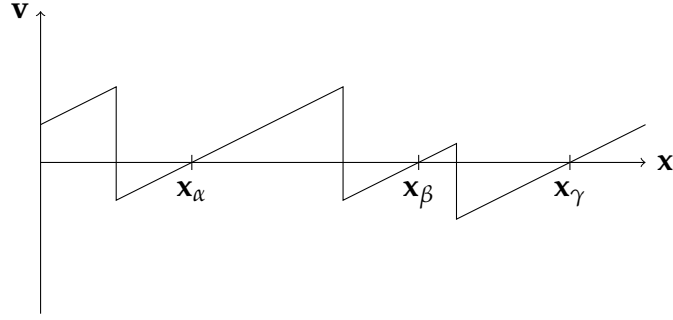


Abbildung 2.4: Ein typisches Geschwindigkeitsfeld, welches die Burgersgleichung für $Re \rightarrow \infty$ löst.

Abstand der Sprünge und eben der Breite der Sprünge interpretiert: $\theta \propto Ll$. Damit ist

$$l \propto \frac{L}{Re} \left(= \frac{\nu}{v_L} \right) \stackrel{Re \rightarrow \infty}{\ll} L. \quad (2.122)$$

Die Sprünge werden damit für steigende Reynoldszahlen immer schmäler und steiler und das Geschwindigkeitsfeld nähert sich, wie in Abbildung 2.4 dargestellt, einem Sägezahn-Profil an.

Mit diesem Wissen können wir nun die longitudinalen Strukturfunktionen nach Gleichung (2.5) abschätzen³. Diese wurden definiert als:

$$S_p(r) = \langle u(r)^p \rangle = \int du u(r)^p p_u(u(r)) \quad (2.123)$$

mit

$$u(r) = [\mathbf{v}(\mathbf{x} + r\mathbf{e}_r) - \mathbf{v}(\mathbf{x})] \cdot \mathbf{e}_r. \quad (2.124)$$

Für unsere Betrachtungen sollte r im Bereich der Energiekaskade zwischen den Längen L , der Korrelationslänge der Kraft, und η , der Energiedissipationsskala, liegen: $\eta \ll r \ll L$. Zum anderen sollte die innere Struktur der Sprünge keine Rolle spielen. Dies ist für $Re \rightarrow \infty$ aber bereits weitestgehend realisiert. Im linearen Bereich des Geschwindigkeitsfeldes folgt für die Geschwindigkeitsdifferenz

$$u = \frac{2\nu r}{\theta} \approx \frac{v_L}{L} r. \quad (2.125)$$

Befindet sich zwischen \mathbf{x} und $\mathbf{x} + r\mathbf{e}_r$ gerade eine Unstetigkeit, so ist dieser Sprung proportional zu $(\mathbf{x}^* - \mathbf{x}_\alpha) - (\mathbf{x}^* - \mathbf{x}_\beta) = \mathbf{x}_\beta - \mathbf{x}_\alpha \propto L$. Dies folgt gerade aus (2.116),

³Eine exakte Berechnung mit demselben Resultat ist in [5] zu finden.

wenn in der Umgebung des Sprungs die exp-Funktionen der beiden größten Summanden mit den Indizes α und β ungefähr gleich groß werden und man mit (2.117) die Geschwindigkeiten links und rechts des Sprungs, wo der Summand mit Index α bzw. β jeweils noch weitestgehend allein dominiert, voneinander abzieht. Dann gilt

$$u = \frac{2v_L}{\theta} \approx v_L. \quad (2.126)$$

Die Wahrscheinlichkeit w , dass ein Sprung auftritt, ist über die Länge einer Zellgröße gleichmäßig verteilt,

$$w = \frac{r}{L}, \quad (2.127)$$

und ist wegen $r \ll L$ sehr klein. Mit einer Wahrscheinlichkeit von $(1 - w) \approx 1$ tritt kein Sprung auf. Dies lässt sich nun in der Wahrscheinlichkeitsverteilung für die Geschwindigkeitsdifferenz zusammenfassen:

$$p_u(u) \sim (1 - w)\delta\left(u - \frac{v_L}{L}r\right) + \frac{w}{v_L}f\left(\frac{u}{v_L}\right), \quad (2.128)$$

wobei $f()$ eine bestimmte Skalierungsfunktion ist. Für die Strukturfunktionen ergibt sich damit nach Gleichung (2.123):

$$\begin{aligned} S_p(r) &\sim (1 - w)\left(\frac{v_L}{L}r\right)^p + wv_L^p \int du u^p f\left(\frac{u}{v_L}\right) \\ &\approx \left(\frac{v_L}{L}r\right)^p + \frac{v_L^p}{L}r \int du u^p f\left(\frac{u}{v_L}\right). \end{aligned}$$

S_p ist also von folgender Struktur:

$$S_p(r) = br^p + cr \quad (2.129)$$

mit

$$b = \left(\frac{v_L}{L}\right)^p \quad (2.130)$$

und

$$c = \frac{v_L^p}{L} \int du u^p f\left(\frac{u}{v_L}\right). \quad (2.131)$$

Für $r \ll L$ und $p < 1$ dominiert der linke Term und S_p läuft gegen den Grenzwert

$$S_{p \rightarrow 0}(r) = br^p. \quad (2.132)$$

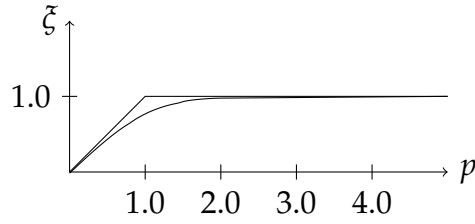


Abbildung 2.5: Exponent ζ der Burgersturbulenz in Abhängigkeit vom Geschwindigkeitsmoment p . Obere Kurve: asymptotisches Verhalten; untere Kurve: kontinuierliches Verhalten

Für $p > 1$ dominiert der rechte Term und S_p läuft gegen

$$S_{p \rightarrow \infty}(r) = cr. \quad (2.133)$$

Insgesamt lässt sich dieses asymptotische Verhalten zusammenfassen in

$$S_p(r) \propto r^{\zeta} \quad (2.134)$$

mit dem bifraktalen Exponenten

$$\zeta = \min(p, 1) \quad (2.135)$$

und ist dargestellt in der oberen Kurve in Abbildung 2.5.

Setzen wir die Gleichungen (2.134) und (2.129) gleich, folgt andererseits

$$\zeta = \frac{\ln(br^p + cx + \text{const.})}{\ln r}. \quad (2.136)$$

const berücksichtigt dabei den Proportionalitätsfaktor von (2.134). Es ist zu erwarten, dass sich der Exponent gerade für $p \sim 1$ eher entsprechend dieser Gleichung verhält, da in diesem Bereich natürlich beide Terme $\propto r^p$ und $\propto r$ einen wesentlichen Einfluss haben werden. Dieses Verhalten zeigt die untere Kurve in Abbildung 2.5.

Zum Abschluss der theoretischen Vorhersage müssen noch ein paar Worte darüber verloren werden, inwieweit diese für unser zu untersuchendes System zutrifft. Wir möchten die Burgersgleichung hier in nur einer Dimension und bei großen Reynoldszahlen untersuchen. Wie an den entsprechenden Stellen erläutert, wird die Theorie in den beiden Grenzfällen vieler Dimensionen N und großer Reynolds-

zahlen Re exakt. Wenn wir die Burgersgleichung im Eindimensionalen betrachten, können wir die Bedingung der großen Anzahl an Dimensionen offensichtlich nicht erfüllen. Wie sich laut [5] aus anderen Problemen, die auf die Replika-Methode zurückgegriffen haben, ablesen lässt, scheint allerdings auch die Vorhersage für wenige Dimensionen einigermaßen gut zu sein. Man könnte also wohlwollend davon ausgehen, dass es sich bei der Burgersturbulenz ähnlich verhält. Eine weiteres, bereits angesprochenes Problem ist, dass wir die 1-step RSB-Lösung nur für $N > 2$ akzeptieren können. Allerdings soll auch hierbei die Lösung für $N \leq 2$ qualitativ nicht großartig abweichen. Unser Ansatz für die Monte-Carlo-Simulation wird darüber hinaus einen Kraftterm berücksichtigen, welcher nicht über sein Potenzial, sondern direkt gaußverteilt ist. Dies stellt eine weitere Abweichung zu der Replika-Lösung dar. [5] gibt an, dass in diesem Fall wie bei $N < 2$ auch auf vollen Replikasymmetriebruch zurückgegriffen werden müsste. Auf der Habenseite kann angeführt werden, dass die Burgersgleichung ohne Kraftterm eine exakte Lösung [6] hat, welche sich mit der hier vorgestellten deckt und in *allen* Dimensionen gilt.

3 Simulation der 1+1-dimensionalen Burgersgleichung

In diesem Kapitel wollen wir uns daran machen, Lösungskonfigurationen der 1+1-dimensionalen, zufällig getriebenen Burgersgleichung mittels Monte-Carlo-Methoden zu generieren, um diese dann in Hinblick auf die Strukturfunktionen auszuwerten. Diese Aufgabe wurde bereits von Dirk Homeier, David Mesterházy und Peter Düben abgearbeitet [10, 11, 21]. Im Zuge dessen gebe ich einen Überblick über alle wesentlichen Teilaspekte, die für ein erfolgreiches Unterfangen beachtet werden müssen.

3.1 Die Monte-Carlo-Methode¹

Statistische Systeme wie die zufällig getriebene Burgersgleichung werden in ihrer Gänze durch ihre Zustandssumme

$$Z = \sum_{\mu} e^{-\beta E_{\mu}} \quad (3.1)$$

beschrieben. Diese Zustandssumme berücksichtigt – wie der Name schon andeutet – jeden einzelnen Zustand, den das System einnehmen kann. Die Menge aller möglichen Zustände folgt aus der Anzahl der unteilbaren Untersysteme, aus denen sich das System zusammensetzt, und der Anzahl der Zustände, die diese Untersysteme einnehmen können. In unserem Fall möchten wir das Geschwindigkeitsfeld der Burgersgleichung simulieren. Dazu diskretisieren wir das Geschwindigkeitsfeld in Raum- und Zeitrichtung und erzeugen somit ein Gitter mit einer endlichen Anzahl an Punkten. Das Geschwindigkeitsfeld ist nur noch auf den Schnittpunkten des Gitters definiert und kann dort theoretisch jeden beliebigen Wert zwischen $-\infty$ und

¹Einführung zum Beispiel in [23] oder [3]

∞ annehmen. Das gesamte Geschwindigkeitsfeld setzt sich also aus einer endlichen Zahl an Gitterpunkten – den Untersystemen – zusammen, die eine unendliche Zahl an Geschwindigkeitswerten – den Zuständen – einnehmen können. Die Zustands-summe für das Burgerssystem besteht also, um es auf den Punkt zu bringen, aus einer schier unendlichen Menge an Termen, die alle berücksichtigt werden müssten, um die Statistik zu beschreiben. All diese Terme zu berücksichtigen ist nicht praktikabel.

Stattdessen macht man sich einen Mechanismus zu Nutze, den auch die Natur umzusetzen scheint: Das Auftreten der Zustände ist nicht gleich wahrscheinlich. Stattdessen sorgt die zugrunde liegende Gesetzmäßigkeit des Systems dafür, dass überwiegend nur eine endliche und verhältnismäßig kleine Anzahl an Zuständen von dem System eingenommen wird. Können wir bei unserer Simulation hauptsächlich diese Zustände erzeugen, gibt uns das bereits eine gute Abschätzung über das tatsächliche Verhalten des Systems. Im thermischen Gleichgewicht erfolgt die Verteilung der Zustände nach der Boltzmann-Verteilung

$$p_\mu = Z^{-1} e^{-\beta E_\mu} . \quad (3.2)$$

Die Aufgabe besteht nun darin, in unserer Simulation dafür zu sorgen, dass sich im Gleichgewicht genau diese Verteilung einstellt.

Damit sich das System entwickeln kann, benötigen wir zunächst einen Mechanismus, der aus einem Zustand μ einen neuen Zustand ν erzeugt. Die Wahrscheinlichkeit für einen solchen Übergang sei hier mit $P(\mu \rightarrow \nu)$ bezeichnet. Wir bedienen uns eines sogenannten Markov-Prozesses, bei dem erstens die Übergangswahrscheinlichkeit $P(\mu \rightarrow \nu)$ für alle Zeiten konstant bleibt und zweitens nur abhängig vom Ausgangszustand μ und dem Zielzustand ν ist. Markov-Prozesse sind damit unabhängig von der Geschichte, die das System durchlaufen hat und wird. Ebenso muss gewährleistet sein, dass wir auf jeden Fall einen Zustand generieren und sei es nur, dass wir den alten Zustand μ reproduzieren:

$$\sum_\nu P(\mu \rightarrow \nu) = 1. \quad (3.3)$$

Der Markov-Prozess alleine sorgt nun noch nicht dafür, dass im Fall des thermischen Gleichgewichts genau die gewünschte Boltzmann-Verteilung erzeugt wird. Dafür müssen wir noch jeweils eine Eigenschaft der Boltzmann-Verteilung und des

thermischen Gleichgewichts beachten.

Zum einen hat die Boltzmann-Verteilung für jeden Zustand eine nichtverschwindende Wahrscheinlichkeit. Dies bedeutet ganz einfach, dass wir dafür sorgen müssen, dass jeder Zustand auch in endlicher Zeit erreicht werden kann. Wenn das der Fall ist, ist unsere Simulation *ergodisch*. Dabei bedeutet das allerdings nicht, dass einige Übergangswahrscheinlichkeiten nicht Null sein dürften, sondern dass jeder Zielzustand zumindest über *eine* Folge von Zuständen erreicht werden kann.

Zum anderen bedeutet thermisches Gleichgewicht gerade, dass die Anzahl der Untersysteme in einem bestimmten Zustand gleich bleibt; genauso viele Untersysteme verlassen den Zustand ν wie ihn neu einnehmen:

$$\sum_{\nu} p_{\mu} P(\mu \rightarrow \nu) = \sum_{\nu} p_{\nu} P(\nu \rightarrow \mu). \quad (3.4)$$

p_{μ} steht dabei für die Wahrscheinlichkeit, dass sich das System im Zustand μ befindet. Die Summe berücksichtigt dann alle Wege, wie aus μ der Zustand ν werden kann. Diese Bedingung alleine birgt allerdings ein Problem: Es können sich Grenzzyklen entwickeln. Dabei durchläuft das System Zustände, die sich nach einer bestimmten Anzahl an Zustandsänderungen periodisch wiederholen. Dabei besteht keine Garantie, dass dies die Zustände sind, die laut der Boltzmann-Verteilung am häufigsten vorkommen. Im Regelfall wird so also eine andere Verteilung erzeugt.

Um die Grenzzyklen aufbrechen zu können, ist es hilfreich zu verstehen, wie sich solche Zyklen bilden können. In Gleichung (3.4) fasst die linke Summe die Wahrscheinlichkeiten zusammen, dass der Zustand ν eingenommen wird. Die rechte Summe besteht aus Termen, die bestimmen, dass der Zustand ν verlassen wird. Dabei ist es möglich, dass die Zustände, die hauptsächlich zur linken Summe beitragen, vollkommen verschieden sind von denen, die hauptsächlich zur rechten Summe beitragen. Solange beide Summen den gleichen Wert liefern, ist (3.4) wunderbar erfüllt. Angenommen, wir starten in so einem Fall im Zustand α und unser System wird mit diesem Ausgangszustand fast immer den Zustand ν einnehmen, aber nur ganz selten von ν nach α wechseln. Man stelle sich diesen Mechanismus ebenfalls für ein paar Folgezustände vor, bis das System auf diesem Weg wieder bei α angekommen ist und das Spiel von Neuem beginnt: Ein Grenzzyklus hat sich ausgebildet.

Die Schlüsselzutat dafür ist offensichtlich ein Ungleichgewicht in den Übergangswahrscheinlichkeiten in den und aus dem Zustand ν . Sind die beiden Wahrschein-

lichkeiten gleich, kann kein Grenzzyklus entstehen, da sich das System im Mittel für beide Wege gleichermaßen entscheiden würde. Wir fordern also

$$p_\mu P(\mu \rightarrow \nu) = p_\nu P(\nu \rightarrow \mu). \quad (3.5)$$

Gleichung (3.4) ist damit nach wie vor erfüllt. Diese Bedingung nennt sich *Detailed Balance* und macht auch aus physikalischer Sichtweise Sinn. Physikalische Systeme sind invariant unter Zeitumkehr. Nur wenn Detailed Balance vorliegt, kann sich das System rückwärts wie vorwärts entsprechend der gleichen Dynamik entwickeln.

Mit der Bedingung für Detailed Balance (3.5) und der Forderung, dass wir im Gleichgewicht eine Boltzmann-Verteilung (3.2) erwarten, muss für die Übergangswahrscheinlichkeiten gelten:

$$\frac{P(\mu \rightarrow \nu)}{P(\nu \rightarrow \mu)} = \frac{p_\nu}{p_\mu} = e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)}. \quad (3.6)$$

Solange diese Bedingung erfüllt ist, können wir jede mögliche Kombination von Übergangswahrscheinlichkeiten wählen und können sicher gehen, dass sich unser System im Gleichgewicht entsprechend der Boltzmann-Statistik verhält.

Um die zufällig getriebene Burgersgleichung (2.15) nun mit einem Monte-Carlo-Algorithmus simulieren zu können, müssen wir ihren statistischen Charakter durch eine Form der Zustandssumme ausdrücken. Wir wollen hier im Gegensatz zum vorigen Kapitel den direkten Weg gehen und stellen die Zustandssumme für die Burgersgleichung in Anlehnung an ein Pfadintegral dar. Gewöhnlich wird bei diesem Prozess für eine stochastische partielle Differentialgleichung meist auf den Martin-Siggia-Rose-Formalismus [20] verwiesen, bei dem unphysikalische, konjugierte Felder über ein Fourier-Integral eingeführt werden. Hier umreißen wir die einfachere Methode nach Hochberg [15], welche nur mit den physikalischen Feldern arbeitet.

3.2 Zustandssumme und Wirkung der Burgersgleichung

Wir kürzen die Schreibweise der Burgersgleichung (2.15) ab und betrachten ab sofort nur noch eine Orts- und Zeitkoordinate:

$$\text{Burg}[v] \equiv \partial_t v + v \partial_x v - \nu \partial_x^2 v = f. \quad (3.7)$$

v und f bleiben dabei abhängig vom Ort x und der Zeit t . Die Zufallskraft f nehmen wir als gaußverteilt und zeitlich δ -korreliert an, wodurch im Folgenden das Integral über t' direkt ausgewertet werden kann:

$$\mathcal{P}[f] = \frac{1}{\sqrt{\det(2\pi\chi)}} \exp \left(-\frac{1}{2} \int dx dx' dt f(x,t) \chi_f^{-1}(x,x') f(x',t) \right). \quad (3.8)$$

Bei einer bestimmten Realisierung der Kraft schreiben wir für die eindeutige Lösung der Burgersgleichung die Identität

$$v_{\text{soln}} \equiv \int Dv v \delta[v - v_{\text{soln}}] \quad (3.9)$$

$$= \int Dv v \delta[\text{Burg}[v] - f] \sqrt{\mathcal{J} \mathcal{J}^\dagger}, \quad (3.10)$$

wobei im zweiten Schritt eine Variablensubstitution stattfindet, welche die Funktionaldeterminante

$$\mathcal{J} \equiv \det \left(\frac{\delta \text{Burg}[v]}{\delta v} \right) \quad (3.11)$$

eingführt. Da die Burgersgleichung lokal ist, liefert (3.11) allerdings lediglich einen konstanten Beitrag und wird deshalb im Folgenden nicht länger erwähnt². Für eine Observable gilt die Identität

$$Q(v_{\text{soln}}) \equiv \int Dv Q(v) \delta[\text{Burg}[v] - f]. \quad (3.12)$$

²siehe dazu Anhang A in [15]

Damit lässt sich nun der Erwartungswert über die gauß'sche Kraft bestimmen mit

$$\begin{aligned}\langle Q(v) \rangle &\equiv \int Df \mathcal{P}[f] Q(v_{\text{soln}}) \\ &= \frac{1}{\sqrt{\det(2\pi\chi_f)}} \int Dv Q(v) e^{-\frac{1}{2} \int dx dx' dt \text{Burg}[v] \chi_f^{-1} \text{Burg}[v']}. \end{aligned} \quad (3.13)$$

Dabei wurde das Integral über f direkt ausgewertet; v' steht für $v(x', t)$. Mit der Definition der Zustandssumme als Erwartungswert des erzeugenden Funktionalis,

$$Z \equiv \left\langle \exp \left(\int dx dt J(x, t) v(x, t) \right) \right\rangle, \quad (3.14)$$

wobei hier der Quellterm $J(x, t)$ verschwindet, folgt für die Zustandssumme

$$Z = \frac{1}{\sqrt{\det(2\pi\chi_f)}} \int Dv e^{-\frac{1}{2} \int dx dx' dt \text{Burg}[v] \chi_f^{-1} \text{Burg}[v']}. \quad (3.15)$$

Die Wirkung der Burgersgleichung lautet damit

$$S[\mathbf{v}] = \frac{1}{2} \int dx dx' dt \text{Burg}[v] \chi_f^{-1} \text{Burg}[v']. \quad (3.16)$$

3.3 Der Heat-Bath-Monte-Carlo-Algorithmus

Monte-Carlo-Simulationen werden meist in der Art implementiert, dass sich beim Generieren eines neuen Zustandes der Wert des simulierten Feldes nur an einem einzigen Gitterpunkt ändert. Dies trägt der Tatsache Rechnung, dass sich das System im Gleichgewicht nur in einer verhältnismäßig geringen Anzahl an Zuständen aufhält und die Gesamtenergie somit weitgehend gleich bleibt. Es gibt im Wesentlichen zwei Herangehensweisen an eine solche Simulation: Den Metropolis- und den Heat-Bath-Algorithmus. Auf Ersteren wollen wir an dieser Stelle nur eingehen, um die Vorteile des Heat-Bath-Algorithmus für unsere Angelegenheit hervorzuheben³.

Der Heat-Bath-Algorithmus⁴ aktualisiert jeden Gitterpunkt gemäß seiner Boltzmann-gewichtung, die sich entsprechend der zugrunde liegenden Dynamik aus seinen un-

³Eine kurze Gegenüberstellung ist in [19] zu finden.

⁴Zum ersten Mal angewendet durch Creutz [8, 9]

mittelbaren Gitternachbarn ergibt. Der neue Wert wird also direkt nach der Wahrscheinlichkeit (3.2) ausgewählt, nur benutzen wir hier die mathematisch äquivalente Version, welche die Wirkung S_{xt} am entsprechenden Gitterpunkt xt beinhaltet:

$$p_{xt} = Z^{-1} e^{-S_{xt}}. \quad (3.17)$$

Die beiden Schlüsselzutaten Ergodizität⁵ und Detailed Balance⁶ werden von so einer Verteilung offensichtlich erfüllt.

Ziel der Simulation eines statistischen Systems ist es immer, so effizient wie möglich eine möglichst große Anzahl an statistisch unabhängigen Realisierungen des Systems zu generieren. Metropolis baut darauf, zu selektieren, ob ein neuer Zustand, der während der Simulation vorgeschlagen wurde, angenommen oder zurückgewiesen wird. Bei einer hohen thermischen Fluktuation des Systems aufgrund einer hohen Temperatur werden fast alle Vorschläge angenommen. Ist die Temperatur allerdings gering und die Anzahl der theoretisch möglichen Zustände groß, wird der Algorithmus fast alle Vorschläge zurückweisen, da die Boltzmann-Wahrscheinlichkeit für die meisten Zustände viel zu gering ist. Das Gitter wird dann nur sehr zögerlich aktualisiert, was unserem formulierten Ziel entgegen steht. Bei Heat-Bath werden die neuen Zustände direkt aus einem Wärmebad – daher der Name – erzeugt und immer angenommen. Dabei kann es auch vorkommen, dass das System für längere Zeit in einem Bereich des Phasenraums “festsitzt”, allerdings wird in jedem Fall ein neuer unabhängiger Zustand schneller erzeugt. Dies folgt daraus, dass Metropolis ebenfalls so interpretiert werden kann, dass neue Zustände aus einem Wärmebad heraus erzeugt werden, allerdings nicht auf dem direkten Wege wie bei Heat-Bath [9]⁷.

Die Übergangswahrscheinlichkeit bei Heat-Bath ist im Gegensatz zu Metropolis nicht vom Ausgangszustand des Gitterpunktes abhängig, sondern nur vom Endzustand. Dadurch ist die Korrelation zwischen zwei Zuständen etwas geringer als

⁵Jeder Zustand hat eine nicht verschwindende Wahrscheinlichkeit und kann somit erreicht werden.

⁶Die Wahrscheinlichkeit für einen Übergang von Zustand μ in Zustand ν ist p_ν und von Zustand ν in Zustand μ ist p_μ . Relation (3.6) ist damit erfüllt:

$$\frac{P(\mu \rightarrow \nu)}{P(\nu \rightarrow \mu)} = \frac{p_\nu}{p_\mu} = \frac{Z e^{-S_{xt,\nu}}}{Z e^{-S_{xt,\mu}}} = e^{-S_{xt,\nu} - S_{xt,\mu}}.$$

⁷außerdem [4] zur Heat-Bath-Interpretation des Metropolis-Algorithmus

bei Metropolis, was ebenfalls dafür sorgt, dass mit weniger Schritten unabhängige Zustände erzeugt werden.⁸

3.4 Das Monte-Carlo-Gitter

Nachdem wir uns nun für den Heat-Bath-Algorithmus entschieden haben, müssen wir zuerst einmal das Gitter definieren, auf dem wir uns bewegen. Das Gitter sei rechteckig und habe in Ortsrichtung N_x Punkte und in Zeitrichtung N_t Punkte. Die Gitterpunkte liegen entlang einer Richtung um einen konstanten Abstand auseinander: in x -Richtung um $\Delta_x = \frac{1}{N_x}$ und in t -Richtung um $\Delta_t = \frac{1}{N_t}$. In Zeitrichtung setzen wir periodische Ränder an, in Ortsrichtung sind die Ränder frei. Auf diese Weise passen Systeme mit einer Korrelationslänge der Kraft bis zur Gittergröße in x -Richtung auf das Gitter, wodurch wir bei gleicher Korrelationslänge kleinere Gitter simulieren können als bei periodischen Randbedingungen. Das Geschwindigkeitsfeld nimmt an dem Gitterpunkt xt den Wert $v(x, t)$ an. Um kenntlich zu machen, dass wir es hier nicht mehr mit einem kontinuierlich definierten Feld zu tun haben, bezeichnen wir die Geschwindigkeit bei xt von nun an mit v_{xt} .

3.5 Die Wirkung auf dem Gitter

Die Zustandssumme, beziehungsweise die Wirkung der Burgersgleichung kann nun für die Anwendung auf dem Gitter vorbereitet werden. Dies bedeutet hauptsächlich, dass wir diese Größe diskretisieren müssen, was sich wiederum auf die Ableitungen und Integrale im Burgersterm der Wirkung (3.16) auswirkt. Der Burgersterm tritt zudem quadratisch auf. Wir möchten, dass die diskrete Wirkung bezogen auf einen Gitterpunkt ebenfalls eine quadratische Form annimmt. Zum einen sind solche Gaußverteilungen gut handzuhaben und zum anderen bietet eine quadratische Form noch eine Optimierungsmöglichkeit für den Algorithmus in Form der sogenannten *Overrelaxation*-Methode [1, 27, 30].

⁸Nach diesem vernichtenden Urteil für den Metropolis-Algorithmus kann man sich nun zu Recht fragen, ob er noch eine Existenzberechtigung besitzt. Gerade für Systeme mit einer geringen Anzahl an möglichen Zustandsänderungen wie dem Ising-Modell oder bei hohen Temperaturen spielen die genannten Argumente gegen Metropolis keine Rolle mehr und er kann seine Konkurrenz hinter sich lassen, wie man sich mit [23] überzeugen kann.

Aus (3.16) wird auf dem Gitter zunächst

$$S = \frac{1}{2} \Delta_x^2 \Delta_t \sum_t \sum_x \text{Burg}[v(x, t)] \sum_{x'} (\chi^{-1})_{xx'} \text{Burg}[v(x', t)]. \quad (3.18)$$

Die Ableitungen der linearen Terme in $\text{Burg}[v(x, t)]$ werden gewöhnlich diskretisiert:

$$\partial_t v(x, t) \rightarrow \frac{v_{x(t+1)} - v_{xt}}{\Delta_t}, \quad (3.19)$$

$$\partial_x^2 v(x, t) \rightarrow \frac{v_{(x+1)t} - 2v_{xt} + v_{(x-1)t}}{\Delta_x^2}. \quad (3.20)$$

Damit S höchstens quadratisch in v_{xt} wird, darf v_{xt} maximal linear in $\text{Burg}[v(x, t)]$ vorkommen. Damit wir das erreichen, diskretisieren wir die Ableitung im nichtlinearen Term symmetrisch:

$$v(x, t) \partial_x v(x, t) \rightarrow v_{xt} \frac{v_{(x+1)t} - v_{(x-1)t}}{2\Delta_x}. \quad (3.21)$$

An den freien Rändern in Ortsrichtung werden die Terme, die über die Gittergrenzen hinausragen, einfach weggelassen.

Betrachten wir, wie es in der Simulation geschieht, nur einen Gitterpunkt xt auf einmal, können wir die Terme der Wirkung mit v_{xt} -Anteilen von denen ohne einen solchen Anteil trennen. Damit spalten wir den Teil der Wirkung, auf den eine Veränderung des Geschwindigkeitswertes am Punkt xt Einfluss hat, von dem Teil, welcher von der Änderung unbeeinflusst bleibt, ab. Aktualisieren wir das Gitter Punkt für Punkt, brauchen wir somit nur den v_{xt} -Anteil minimieren. Wir können schreiben:

$$S = S_{xt}(v_{xt}) + R(v_{(xt)'} \neq (xt)). \quad (3.22)$$

In $S_{xt}(v_{xt})$ sortieren wir nun zusätzlich die Terme nach ihrer Ordnung in v_{xt} und gießen S damit in die Form

$$S \equiv \underbrace{A_{xt}}_{v_{\text{quadr}}} v_{xt}^2 \underbrace{- 2A_{xt}B_{xt}}_{v_{\text{lin}}} v_{xt} + \underbrace{A_{xt}B_{xt}^2 + R_{xt}}_{R(v_{(xt)'} \neq (xt))} = A_{xt}(v_{xt} - B_{xt})^2 + R_{xt}. \quad (3.23)$$

A_{xt} , B_{xt} und R_{xt} sind folglich von v_{xt} unabhängig. v_{quadr} und v_{lin} sind dabei die Faktoren des quadratischen bzw. linearen Terms. Die Wahrscheinlichkeit p_{xt} nach Gleichung (3.17) bekommt damit unsere gewünschte gauß'sche Form mit Standard-

abweichung

$$\sigma_{xt} = \frac{1}{\sqrt{A_{xt}}} = \frac{1}{\sqrt{v_{\text{quadr}}}} \quad (3.24)$$

und Mittelwert

$$\bar{v}_{xt} = B_{xt} = \frac{-v_{\text{lin}}}{2v_{\text{quadr}}}. \quad (3.25)$$

Für $v_{xt} = \bar{v}_{xt}$ wird die Wirkung minimal und damit die Wahrscheinlichkeit p_{xt} maximal.

Die Aufgabe im Simulationsprogramm war es nun, $S_{xt}(v_{xt})$ zu berechnen und wie hier zu sortieren. Mit den Faktoren von v_{xt}^2 und v_{xt} kann nun ein neuer Geschwindigkeitswert gemäß der sich aus diesen ergebenden Gaußverteilung erzeugt werden.

3.6 Die Parameter der Simulation

Die Simulation benötigt ein paar Parameter, um das System festzulegen, welches wir simulieren möchten. Zuerst einmal muss die treibende Kraft festgelegt werden. Diese sollte entsprechend der Theorie nur auf großen Skalen wirken, damit die Energie bis hinunter zur Dissipationsskala zerfallen kann. Die Kraft ist in der Wirkung (3.18) über die Korrelationsmatrix $\chi_{xx'}$ zugegen. Die Matrix wird entsprechend den Überlegungen in [14] festgelegt zu

$$\chi_{xx'} = \chi(\Delta x) = \epsilon e^{-\frac{|\Delta x|}{L}} \quad (3.26)$$

mit

$$\Delta x = x - x'. \quad (3.27)$$

Um zu überprüfen, in welchen Skalen diese Kraft eine Rolle spielt, wechseln wir in den Fourierraum über

$$\tilde{\chi}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} d(\Delta x) \chi(\Delta x) e^{-ik\Delta x}. \quad (3.28)$$

Einsetzen und ausintegrieren führt zu

$$\tilde{\chi}(k) = \frac{\epsilon}{\sqrt{2\pi}} \frac{2L}{1 + (kL)^2}. \quad (3.29)$$

Wir betrachten nun die drei Fälle

$$\begin{aligned} k \gg L^{-1} : \tilde{\chi}(k) &\rightarrow \frac{\epsilon}{\sqrt{2\pi}} 2k^{-2} L^{-1}, \\ k \simeq L^{-1} : \tilde{\chi}(k) &\rightarrow \frac{\epsilon}{\sqrt{2\pi}} k^{-1} \text{ und} \\ k \ll L^{-1} : \tilde{\chi}(k) &\rightarrow 0, \text{ weil } kL \rightarrow \infty. \end{aligned}$$

Die Kraft wirkt also wie gefordert hauptsächlich auf langen Skalen $\gtrsim L$. Dort nimmt sie die Form $\propto k^\beta L^{1+\beta}$ mit $\beta = -2$ an. Laut [14] ist bei solch einer Kraft für die Strukturfunktionen der Burgersgleichung ein bifraktaler Exponent zu erwarten. L wird in dem Simulationsprogramm relativ zur Gittergröße eingestellt und sollte damit auf jeden Fall positiv < 1 sein. Zur Berechnung von ϵ benötigen wir zuerst noch ν und Re .

Die Viskosität des Fluids ν müssen wir ebenfalls diskretisieren. Dies geschieht, indem wir die Einheit der Viskosität $\left[\frac{\text{m}^2}{\text{s}}\right]$ über unsere Gitterabstände Δ_x und Δ_t ausdrücken. Ein Faktor α bestimmt dann die Größe von ν und wird dem Programm ebenfalls mit auf den Weg gegeben:

$$\nu \equiv \alpha \frac{\Delta_x^2}{\Delta_t}. \quad (3.30)$$

Es verbleibt die Reynoldszahl Re . Diese wird dem Programm ebenfalls zugeführt und bedarf keiner weiteren Überlegungen.

Mit Re , ν und L können wir nun nach Gleichung (2.3) die charakteristische Geschwindigkeit v_L und die Energiedissipation ϵ berechnen.

Zu guter Letzt müssen wir noch die Gittergröße angeben. Hierbei muss vor allem darauf geachtet werden, dass sowohl die Dissipationslänge η als auch die Schockbreite l aufgelöst werden können. Damit η auf das Gitter passt, muss

$$\Delta_x \leq \eta \quad (3.31)$$

gelten. Mit Gleichung (2.4) folgt damit für die Gittergröße in x -Richtung die Bedingung

$$N_x \geq \frac{Re^{3/4}}{L}. \quad (3.32)$$

Schaut man sich die Gleichung (2.122) an, sieht man, dass die Schockbreite l durch ν reguliert werden kann. Diese Tatsache wollen wir nutzen, um die Schockbreite so zu wählen, dass sie auf dem Gitter aufgelöst werden kann. Als Richtwert nehmen wir

$$\Delta_x \leq l. \quad (3.33)$$

Daraus folgt eine weitere Bedingung für die Gittergröße in Ortsrichtung:

$$N_x \geq \frac{Re}{L}. \quad (3.34)$$

Dies ist die abschließende Bedingung an N_x , da Bedingung (3.32) darin bereits enthalten ist. Da die Korrelationslänge im Wesentlichen in der Größenordnung des Gitters liegen wird, bedeutet diese Relation, dass für große Reynoldszahlen entsprechend große N_x eingestellt werden müssen.

Laut den Arbeiten von P. Düben [11] und D. Mesterházy [21] wird dem Parameter α in Gleichung (3.30) eine große Kontrolle über die Erzeugung sinnvoller Geschwindigkeitsfelder zugeschrieben. Es muss gelten, dass

$$\alpha \lesssim 0.5. \quad (3.35)$$

Ansonsten kommt es zu starken Sprüngen des Geschwindigkeitsfeldes. Düben erwähnt darüber hinaus, dass ν und α dem Programm übergeben werden und sich daraus Δ_t gemäß Gleichung (3.30) bei ebenfalls festgelegtem Δ_x ergibt. Dirk Homeier ist ab einem gewissen Punkt dazu übergegangen, dem Programm α anstatt ν als Parameter zu übergeben. Ebenfalls wird die Gittergröße fest vorgegeben. ν wird dann nach Gleichung (3.30) berechnet. Das ist der aktuelle Stand des Simulationsprogramms. Dann gilt Bedingung (3.35) natürlich nicht mehr zwangsläufig, da ein großes N_t ein großes α , welches durchaus über 0.5 liegen kann, kompensieren kann. Deshalb erscheint mir die Bedingung für α etwas indirekt formuliert, denn im Grunde sagt sie aus, dass für ein bestimmtes ν und bei vorgegebenem Δ_x mindestens ein bestimmtes Δ_t vorliegen muss, damit die Simulation stabil laufen kann. In diesem Sinne lautet die Bedingung (3.35)

$$N_t \gtrsim 2\nu N_x^2. \quad (3.36)$$

α muss dann so festgelegt werden, dass (3.30) erfüllt ist.

Die Gittergröße muss damit also die beiden Bedingungen (3.34) und (3.36) erfüllen, wenn wir sinnvolle Geschwindigkeitsfelder simulieren möchten.

3.7 Die Simulation

Wir sind nun in der Lage, das Geschwindigkeitsfeld der Burgersgleichung zu simulieren. Als Anfangswert setzen wir das Geschwindigkeitsfeld an jedem Gitterpunkt auf Null. Nun gehen wir jeden einzelnen Gitterpunkt nacheinander durch, werten seine lokale Wirkung (3.18) aus und setzen dieser entsprechend einen neuen Geschwindigkeitswert. Die Wahrscheinlichkeit für den neuen Wert folgt einer Gaußverteilung mit Mittelwert (3.25) und Standardabweichung (3.24) und wird mit einem Zufallsgenerator für gauß'sche Verteilungen erzeugt. Durch die Korrelationsmatrix in der Wirkung wird dem System nun Energie zugeführt und es beginnt sich zu entwickeln. Sind wir am letzten Gitterpunkt angelangt, ist das Gitter vollständig aktualisiert. Jedes vollständig aktualisierte Gitter nennen wir eine *Konfiguration*. Jede 1000ste Konfiguration wird gespeichert, wobei insgesamt in der Regel bis zu 5 Millionen Konfigurationen erzeugt werden. An den freien Rändern zeigt das Feld für ein paar Gitterpunkte aufgrund der nicht definierten Ableitungen starke Abweichungen von dem Verhalten im Gitterinnern. Für die nun vollgende Auswertung wird dieser Rand nach Augenmaß einfach abgeschnitten.

3.8 Bestimmung der Strukturfunktionen

Nachdem nun die Simulation gelaufen ist und uns N Konfigurationen beschert hat, können wir uns daran machen, die von uns benötigten Observablen zu "messen". Wir möchten die Strukturfunktionen von der Ordnung p bestimmen. Sie sind nach Gleichung (2.129) von der Observablen $u(r)^p$ abhängig. Da wir im eindimensionalen Fall nur eine Raumrichtung haben, entfällt eine besondere Festlegung der longitudinalen Richtung \mathbf{e}_r .

Zur Berechnung der Strukturfunktion sei angenommen, dass das Moment p und der Abstand r , für die sie ausgewertet werden soll, gewählt wurden. Die Nennung von r wird im Folgenden explizit weggelassen und man möge im Kopf behalten, dass jede Geschwindigkeitsdifferenz u von r abhängig ist: $u^p \equiv u(r)^p$. Nun wird jede

Konfiguration i nacheinander ausgewählt und für jede Zeit t wird zufällig *ein* Ort x bestimmt: Das p -te Moment des Absolutbetrages⁹ der Geschwindigkeitsdifferenz

$$u_{t,i}^p = \left[\text{abs}(v_{(x+r)t,i} - v_{xt,i}) \right]^p \quad (3.37)$$

wird berechnet. Dadurch, dass nur ein Ort einfließt, bekommen alle Abstände r dieselbe Gewichtung, was ihre Statistik betrifft. Für einen gewählten Abstand können $N_x - 2R - r - 1$ Orte ausgewählt werden. Der Rand R folgt dabei aus den Überlegungen aus Abschnitt 3.7. Bei kleinen Abständen könnten also mehr Orte berücksichtigt werden, was die Statistik der entsprechenden Strukturfunktion verbessern würde. Im Vergleich zur Strukturfunktion mit einem anderen Abstand würde dadurch aber ein Fehler eingeführt. Um die Fehler vergleichbar zu machen, wird deshalb nur ein Ort berücksichtigt. Ebenso kann die Autokorrelationszeit auf diese Weise noch ein bisschen gesenkt werden.

Die N_t berechneten Werte $u_{t,i}^p$ werden in einem Mittelwert¹⁰

$$u_i^p = \frac{1}{N_t} \sum_{t=1}^{N_t} u_{t,i}^p \quad (3.38)$$

für die Konfiguration zusammengefasst, an ein Array A angehängt und somit gespeichert. Wenn alle Konfigurationen berücksichtigt wurden, besteht das Array A aus N Einträgen; für jede Konfiguration einer. Mit diesen Einträgen werden mit der Γ -Methode [28] der Mittelwert, der Fehler und die Autokorrelationszeit von u^p berechnet. Damit ist die Abschätzung des p -ten Moments der Geschwindigkeitsdifferenz im Abstand r komplett. Für weitere Momente und Abstände geht man analog vor.

Damit wir vollends verstehen, was die nun vorliegenden Strukturfunktionen aussagen, muss die Γ -Methode erklärt werden. Ich beschränke mich auf den konkreten Fall, den wir hier vorliegen haben, wobei wir die sogenannte primäre Observable u^p betrachten. So bietet die Γ -Methode zwar die Möglichkeit, verschiedene Runs

⁹Der Absolutbetrag ist in der Theorie indirekt versteckt: Die Geschwindigkeitsdifferenz auf den schockfreien Abschnitten ist wegen ihrer positiven Steigung nach Gleichung (2.117) immer positiv. Die Geschwindigkeitsdifferenz in der Umgebung von Schocks ist zwar negativ, wurde aber in (2.126) als positiver Betrag angesetzt. Der Absolutbetrag stellt zudem für Momente $p < 1$ sicher, dass diese in jedem Fall existieren, sollte die Geschwindigkeitsdifferenz negativ sein.

¹⁰Abweichend von der ansonsten konsistenten Kennzeichnung des Mittelwerts durch einen Überstrich verzichte ich hier darauf, um im Folgenden die Notation nicht zu überladen.

in die Auswertung mit einzubeziehen sowie von den primären Observablen abgeleitete Größen zu bestimmen, doch benötigen wir diese Dinge hier nicht, da wir beides nicht vorliegen haben. Die allgemein gültige Formulierung der Methode ist im gerade zitierten Paper zu finden.

Die Γ -Methode ist eng verwandt mit der Autokorrelationsfunktion, die wir mit $\Gamma(\delta)$ bezeichnen und worauf die Methode mit ihrem Namen direkt Bezug nimmt. Wir nähern uns der Sache an, indem wir zuerst den Mittelwert $\overline{u^p}$ von u_i^p für unsere N Konfigurationen angeben. Der Index i steht für die Konfiguration:

$$\overline{u^p} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N u_i^p. \quad (3.39)$$

Der Mittelwert wird zum *exakten* Erwartungswert $\langle u^p \rangle$ für $N \rightarrow \infty$:

$$\langle u^p \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N u_i^p. \quad (3.40)$$

$\overline{u^p}$ schätzt also $\langle u^p \rangle$ für eine endliche Zahl an Konfigurationen ab. $\langle u^p \rangle$ ist nach (2.5) unsere gesuchte Strukturfunktion.

Da wir nur eine endliche Anzahl an Konfigurationen vorliegen haben, können wir nur den Mittelwert berechnen. Der Fehler, den wir machen, wenn wir mit einer Simulation aus N Konfigurationen den Erwartungswert $\langle u^p \rangle$ durch den Mittelwert $\overline{u^p}$ abschätzen, wird allgemein als der *statistische Fehler* der Simulation bezeichnet. Er gibt also an, wie weit der Mittelwert $\overline{u^p}$ durchschnittlich vom tatsächlichen Erwartungswert $\langle u^p \rangle$ entfernt liegt.

Zur Berechnung dieses Fehlers stelle man sich eine große Anzahl M an unabhängigen, einzelnen Runs r vor. Jeder Run führt zu einem individuellen Mittelwert $\overline{u^p}_r$. Die Verteilung der Abweichung $\overline{u^p}_r - \langle u^p \rangle$ geht dann für eine große Anzahl an Runs aufgrund des Zentralen Grenzwertsatzes in eine zentrierte Normalverteilung mit einer noch zu spezifizierenden Varianz

$$\sigma^2(\overline{u^p}_r) = \langle \overline{u^p}_r \overline{u^p}_{r'} \rangle - \langle u^p \rangle^2 \quad (3.41)$$

über. Für den statistischen Fehler $\sigma^2(\overline{u^p})$ gilt mit diesem Setup¹¹

$$\sigma^2(\overline{u^p}) \equiv \lim_{M \rightarrow \infty} \frac{1}{M} \sum_{b=1}^M (\overline{u^p}_r - \langle u^p \rangle)^2 = \frac{1}{M} \sigma^2(\overline{u^p}_r). \quad (3.42)$$

Im vorliegenden Fall können wir generell nur auf einen Run zurückgreifen. Zur Bestimmung von $\sigma^2(\overline{u^p}_r)$ müssen wir also mit den Informationen aus einem Run auskommen. Es stellt sich heraus, dass man $\sigma^2(\overline{u^p}_r)$ mit der Autokorrelation in Beziehung setzen kann. Zuerst definieren wir dafür die Autokorrelationsfunktion. Sie hängt von den Messwerten der Observablen u_i^p ab:

$$\begin{aligned} \Gamma(\delta) &\equiv \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (u_i^p - \langle u^p \rangle)(u_{i+\delta}^p - \langle u^p \rangle) \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (u_i^p u_{i+\delta}^p - \langle u^p \rangle^2) \\ &= \langle u_i^p u_{i+\delta}^p \rangle - \langle u^p \rangle^2. \end{aligned} \quad (3.43)$$

Der Schätzer der Autokorrelationsfunktion, $\bar{\Gamma}(\delta)$, ist damit:

$$\begin{aligned} \bar{\Gamma}(\delta) &\equiv \frac{1}{N-\delta} \sum_{i=1}^{N-\delta} (u_i^p u_{i+\delta}^p - \overline{u^p}^2) \\ &\approx \overline{u_i^p u_{i+\delta}^p} - \overline{u^p}^2. \end{aligned} \quad (3.44)$$

Das Prinzip solcher Korrelationsfunktionen ist recht einfach zu verstehen. Weichen u_i^p und $u_{i+\delta}^p$ in die gleiche Richtung vom Mittelwert $\overline{u^p}$ ab, sind also korreliert, so wird der Summand i positiv. Weichen sie in entgegengesetzte Richtungen vom Mittelwert ab, sind also antikorreliert, so wird der Summand i negativ. Ergibt sich im Mittel ein Wert von 0, gleichen sich also korrelierte und antikorrelierte Summanden aus, liegt im Mittel keine Korrelation vor.

Es wird nun für große δ ein exponentieller Zerfall der Autokorrelation angesetzt:¹²

$$\Gamma(\delta) \propto e^{-\delta/\tau}. \quad (3.45)$$

Das δ , für das $\Gamma(\delta)$ auf $1/e$ abgefallen ist, definiert die *Autokorrelationszeit* τ . Diese

¹¹Herleitung in [13] auf Seite 11–12

¹²siehe [23], Kapitel 3.3.1 und 3.3.2

liefert einen Richtwert, wann aufeinander folgende Konfigurationen i und $i + \delta$ nicht länger in einem großen Maße miteinander korreliert sind. Zur Bestimmung von τ bedient man sich der integrierten Autokorrelation. Dafür wird (3.45) integriert und mit $\Gamma(\delta = 0)$ normiert. Es ergibt sich in unserem Fall für diskrete Konfigurationen die Summe¹³

$$\frac{1}{2} \sum_{\delta=-\infty}^{\infty} \frac{\Gamma(\delta)}{\Gamma(0)} = \frac{1}{2} + \sum_{\delta=1}^{\infty} \frac{\Gamma(\delta)}{\Gamma(0)} = \tau. \quad (3.46)$$

Nun können wir die Beziehung zwischen $\sigma^2(\overline{u^p_r})$ und $\Gamma(\delta)$ herstellen. Mit [13] gilt¹⁴

$$\sigma^2(\overline{u^p_r}) \approx \frac{1}{N} \left\{ \Gamma(0) + 2 \sum_{\delta=1}^{\infty} \Gamma(\delta) \right\}. \quad (3.47)$$

Zusammen mit den Gleichungen (3.46) und (3.42) führt dies zu

$$\sigma^2(\overline{u^p}) = \frac{2\tau}{N} \Gamma(0) = \frac{2\tau}{N} \sigma^2(u^p). \quad (3.48)$$

$\Gamma(0) = \sigma^2(u^p)$ ist die “naive” Varianz von u^p , wenn man keine Korrelation zwischen den Konfigurationen annimmt.

Bis hierher sind sämtliche Ergebnisse exakt, da sie für $N \rightarrow \infty$ gelten. Nun vollziehen wir den Sprung ins Endliche, indem wir $\Gamma(\delta)$ durch $\bar{\Gamma}(\delta)$ und τ durch $\bar{\tau}$ ersetzen. $\bar{\tau}$ erhalten wir, indem wir auch in (3.46) $\Gamma(\delta)$ durch seinen Schätzer ersetzen und zudem die Summe limitieren:

$$\bar{\tau} = \frac{1}{2} \bar{\Gamma}(0) + \sum_{\delta=1}^W \bar{\Gamma}(\delta). \quad (3.49)$$

¹³Im kontinuierlichen Fall wird die Summe zum Integral. Daran kann leichter abgelesen werden, dass $\int_{-\infty}^{\infty} d\delta e^{-\delta/\tau} = 2 \int_0^{\infty} d\delta e^{-\delta/\tau} = 2\tau$ gilt. Im Fall von Detailed Balance gilt zudem $\Gamma(\delta) = \Gamma(-\delta)$, wodurch wir nur eine Hälfte der Summe, dafür aber doppelt, betrachten brauchen.

¹⁴Seite 27–28: Die Herleitung nutzt zwar Binning, doch lässt sich dieses auf unabhängige Run direkt übertragen. Streng genommen gilt

$$\sigma^2(\overline{u^p_r}) = \frac{1}{N} \sum_{\delta=-\infty}^{\infty} \Gamma(\delta) \left[1 + \mathcal{O}\left(\frac{\tau}{N}\right) \right].$$

Für $\tau \ll N$ kann der $\mathcal{O}(\frac{\tau}{N})$ -Term vernachlässigt werden und wegen Detailed Balance gilt auch hier wieder $\Gamma(\delta) = \Gamma(-\delta)$.

Für den statistischen Fehler folgt damit:

$$\sigma^2(\overline{u^p}) = \frac{2\overline{\tau}}{N} \overline{\Gamma}(0) = \frac{2\overline{\tau}}{N} \sigma^2(u^p). \quad (3.50)$$

Da der statistische Fehler nun selbst geschätzt wird, verursacht dies weitere statistische Fehler. Für die Verteilung von $\overline{\Gamma}(\delta)$ um $\Gamma(\delta)$ folgt der Erwartungswert¹⁵:

$$\langle \overline{\Gamma}(\delta) \rangle \approx \Gamma(\delta) - \frac{2}{N} \left\{ \frac{1}{2} \Gamma(0) + \sum_{\delta=1}^{\infty} \Gamma(\delta) \right\} \quad (3.51)$$

und weicht entsprechend um den zweiten Summanden vom exakten $\Gamma(\delta)$ ab, was einen Fehler verursacht. In diesem zweiten Summanden finden wir mit (3.46) unsere Autokorrelationszeit τ wieder. Diese wurde ebenfalls genähert und vergrößert unseren Fehler von $\overline{\Gamma}(\delta)$ erneut und zwar entsprechend

$$\frac{\langle \overline{\tau} \rangle - \tau}{\tau} \sim -e^{-W/\tau}. \quad (3.52)$$

All diese Fehler pflanzen sich fort und schlagen sich in dem Fehler für $\overline{u^p}$ nieder. Am Ende gibt uns die Γ -Methode den ganz normalen Mittelwert unserer Observablen u^p mitsamt dem Fehler $\sigma^2(\overline{u^p})$ aus, welcher nach Gleichung (3.50) explizit von der Autokorrelationszeit abhängt: je größer τ , desto größer ist $\sigma^2(\overline{u^p})$. Wir werden also an dem Fehler sehen, wie gut die Statistik der Simulation ist. Die Autokorrelationszeit erhalten wir hier aber zusätzlich noch separat.

Implementiert wurde die Ausgabe der Strukturfunktionen von David Mesterházy in Matlab. Für Matlab liegt eine Routine vor, welche die Γ -Methode implementiert und die in [28] Erwähnung findet.

¹⁵Zur Berechnung $\overline{u^p}$ durch $\overline{u^p} + \langle u^p \rangle - \langle u^p \rangle$ ausdrücken.

4 Auswertung der Strukturfunktionen

Nachdem nun die Burgersgleichung simuliert und aus den erzeugten Konfigurationen eine Abschätzung für verschiedene Strukturfunktionen extrahiert wurde, wollen wir diese auf die theoretische Vorhersage aus Kapitel 2 – speziell Abschnitt 2.3.6 – hin untersuchen. Zurückgegriffen wird dabei auf Runs, die Dirk Homeier hat laufen lassen. Diese und die daraus resultierenden Strukturfunktionen wollen wir uns zuerst einmal ansehen. Danach stelle ich Überlegungen und Methoden vor, aus den gemessenen Strukturfunktionen analytisch exakte Funktionen abzuleiten, die mit der Theorie verglichen werden können.

4.1 Die gelaufenen Simulationen

Sämtliche Simulationen liefen mit den Angaben, wie sie in Kapitel 3 gemacht wurden. Der Overrelaxation-Algorithmus war noch nicht implementiert.

Es folgt eine tabellarische Übersicht über die vorliegenden Runs. Re , N_x , N_t , α und L werden der Simulation als Parameter übergeben. ν , η und l werden mit den Formeln (3.30), (2.4) und (2.122) berechnet und sind zum Teil gerundet. Die Längenangaben L , η und l sind direkt in Gitterabständen $\Delta_x = 1/N_x$ angegeben. Ebenso prüfen wir die Bedingungen (3.34) und (3.36) für die gewählte Gittergröße in den letzten beiden Spalten.

Re	N_x	N_t	$\nu (\alpha)$	L	η	l	$N_x \geq \frac{Re}{L}$	$N_t \gtrsim 2\nu N_x^2$
256	1024	32	1.9e-6 (1/16)	512	8	2	✓	✓
16	16	16	1/512 (1/64)	8	1	0.5	✗	✓
16	23	64	1/529 (1/64)	11.5	1.4	0.7	✗	✓
16	32	128	1/512 (1/64)	16	2	1	✓	✓

Re	N_x	N_t	$\nu (\alpha)$	L	η	l	$N_x \geq \frac{Re}{L}$	$N_t \gtrsim 2\nu N_x^2$
16	45	256	1/506 (1/64)	22.5	2.8	1.4	✓	✓
16	16	32	1/128 (1/16)	8	1	0.5	✗	✓
16	23	64	1/132 (1/16)	11.5	1.4	0.7	✗	✓
16	32	128	1/128 (1/16)	16	2	1	✓	✓
16	64	512	1/128 (1/16)	32	4	2	✓	✓
4	16	8	1/8 (4)	8	2.8	1	✓	✗
4	23	16	4/33 (4)	11.5	4.1	2.9	✓	✗
4	32	32	1/8 (4)	16	5.7	4	✓	✗
4	45	64	8/63 (4)	22.5	8	5.9	✓	✗

Damit können wir die Simulationen mit einem ✗ direkt aussortieren, da sie die an das Gitter gestellten Bedingungen nicht erfüllen.

Ein weiterer Punkt ist die Betrachtung der intermediären Skala $\eta \ll r \ll L$. Betrachtet man den Abschnitt 2.3.6 bezüglich der Herleitung der Strukturfunktion genauer, wird man feststellen, dass die Dissipationsskala dort nicht wirklich eine Rolle spielt. Die Bedingung $\eta \ll r$ können wir daher etwas lockerer auslegen und zum Beispiel nur als $2\eta < r$ auffassen. So können wir zumindest sicher gehen, dass r auf keinen Fall in den Dissipationsbereich kommt, und gerade bei den kleinen Gittern für die Auswertung noch ein paar Datenpunkte mehr berücksichtigen. Auf der anderen Seite fließt $r \ll L$ explizit in die Herleitung von $S_p(r)$ ein. Um diese Bedingung zu gewährleisten, wäre ein Unterschied von einer Größenordnung zwischen r und L vermutlich angemessen. Bei den vorliegenden Gittern lässt sich diese Bedingung allerdings nicht durchsetzen, da wir sonst keine Gitterpunkte zur Auswertung übrig ließen. Stattdessen scheinen wir bereits keinen großen Fehler zu machen, wenn wir für den Inertialbereich $r < 0.66L$ ansetzen.¹ Insgesamt machen wir für den Inertialbereich damit den Ansatz

$$2\eta < r < 0.66L. \quad (4.1)$$

Nur Simulationen, bei denen dieser Bereich mindestens $5\Delta_x$ groß ist, werden im

¹Diese Annahme nehme ich an dieser Stelle einmal vorweg. Die Strukturfunktion für $p = 4$ in der noch folgenden Abbildung 4.3 lässt durch ihre Linearität bis zu dieser Grenze diesen Schluss zu. Es ist genau diese Linearität, die wir für Strukturfunktionen hoher Ordnung erwarten.

Folgenden berücksichtigt. Dann verbleiben 6 Gitterpunkte, durch die wir die Strukturfunktion mit ihren mindestens drei Parametern² fitten können. Dadurch geben wir dem Fit noch etwas Spielraum für eine Mittelung durch diese Punkte. Für die verbleibenden Runs ergibt sich folgende Ausdehnung der genannten Skalen in Gitterabständen Δ_x :

Re	N_x	N_t	$\nu (\alpha)$	L	η	floor ($0.66L - 2\eta$)	≥ 5
256	1024	32	1.9e-6 (1/16)	512	8	321	✓
16	32	128	1/512 (1/64)	16	2	6	✓
16	45	256	1/506 (1/64)	22.5	2.81	9	✓
16	32	128	1/128 (1/16)	16	2	6	✓
16	64	512	1/128 (1/16)	32	4	13	✓

Alle verbliebenen Runs erfüllen diese Bedingung.

Zuletzt werfen wir noch einen Blick darauf, welche Daten zu den Simulationen vorliegen. Liegen die Strukturfunktionen verschiedener Ordnung als Mittelwert aller Konfigurationen vor, wird die $S_p(r)$ -Spalte entsprechend gekennzeichnet. Besteht Zugriff auf die einzelnen Konfigurationen der gelaufenen Simulation, bekommt die Konf.-Spalte einen Haken:

Re	N_x	N_t	$\nu (\alpha)$	L	$S_p(r)$	Konf.
256	1024	32	1.9e-6 (1/16)	0.5	✓	✓
16	32	128	1/512 (1/64)	0.5	✓	✓
16	45	256	1/506 (1/64)	0.5	✓	✓
16	32	128	1/128 (1/16)	0.5	✓	✗
16	64	512	1/128 (1/16)	0.5	✓	✗

Wie sich im Verlauf dieses Kapitels herausstellen wird, ist es nötig, dass wir auf die einzelnen Konfigurationen zugreifen können, um beispielsweise die Strukturfunktion nur für eine bestimmte Auswahl an Konfigurationen zu berechnen. Die beiden

²Es wird später zusätzlich noch ein vierter Parameter in Form eines Offsets eingeführt.

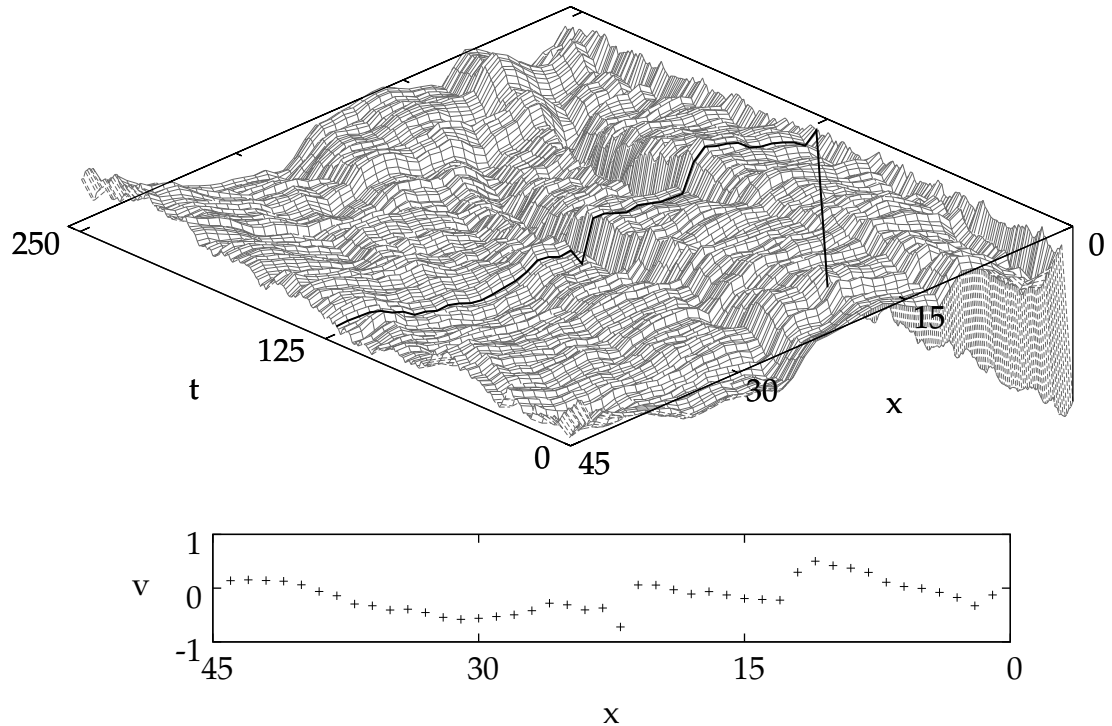


Abbildung 4.1: Eine typische Konfiguration des 45x256-Gitters. Oben ist die komplette Konfiguration zu sehen, wobei die “Zeitscheibe” bei $t = 125$ hervorgehoben ist. Diese Zeitscheibe ist unten separat dargestellt.

letzten Gitter scheiden dafür aus. Das 1024x32-Gitter ist recht groß, macht dafür die Berechnungen aber aufwändiger und zieht sie in die Länge. Deshalb werden im Folgenden sämtliche Methoden zuerst einmal mit dem 45x256-Gitter ausprobiert und vorgestellt. Das 32x128-Gitter werden wir nicht weiter betrachten, da es sich hierbei lediglich um eine schlechter aufgelöste Kopie des 45x256-Gitters handelt. Seine Strukturfunktionen folgen demselben Verlauf, weshalb neue Erkenntnisse nicht zu erwarten sind.

Wir schauen einmal kurz direkt in eine typische Konfiguration des 45x256-Gitters, um einen Eindruck zu vermitteln, an welchem Punkt die Auswertung beginnt. Sie ist in Abbildung 4.1 abgebildet. Gut erkennbar sind die Schocks der “Zeitscheibe” $t = 125$ in den Intervallen $[11, 13]$ und $[21, 22]$ und der linearen Bereich zwischen diesen. Die theoretische Vorhersage aus Abbildung 2.4 ist hier wiederzuerkennen, jedoch kann nicht die Rede davon sein, dass die Schocks das Geschehen für alle t

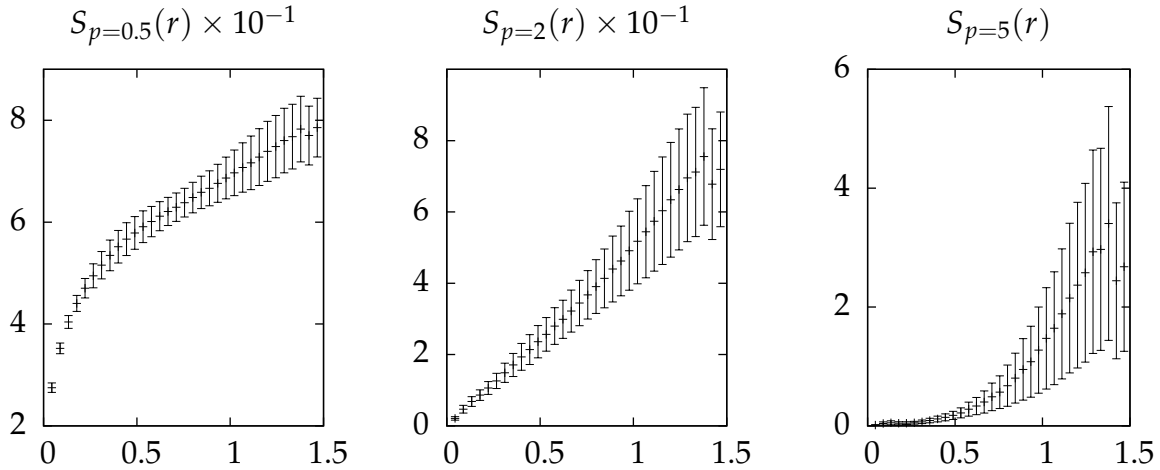


Abbildung 4.2: Eine Auswahl an Strukturfunktionen für das 45x256-Gitter mitsamt den Fehlern. In Anhang C.1 finden sich Abbildungen jeder einzelnen Strukturfunktion.

dominieren würden. Ebenfalls sichtbar ist das irreguläre Verhalten am Rand, zumindest bei $x = 0$.

Aus allen 5 Millionen Konfigurationen ergeben sich nun die Schätzer für die Strukturfunktionen $S_p(r)$. Diese wurden für die Ordnungen $p = 0.125, 0.25, 0.375, 0.5, 0.75, 1, 1.5, 2, 2.5, 3, 4, 5, 6$ und 7 ausgewertet. In x -Richtung werden an beiden Rändern 5 Gitterpunkte abgeschnitten. Demzufolge werden die Strukturfunktionen für Abstände $1 \leq r \leq 36$ berechnet. Dabei ist die Statistik für $r \geq 34$ entsprechend schwach und es zeigen sich zudem noch Randphänomene. Diese Abstände sind für uns aber ohnehin nicht mehr relevant. Der Abstand r wird auf die Korrelationslänge L normiert. Als Thermalisierungszeit setzen wir $5 \cdot 10^5$ Konfigurationen an. Dies entspricht, wie wir gleich sehen werden, in etwa dem zehnfachen der Autokorrelationszeit. Damit gehen wir auf Nummer sicher, dass sich das System im Gleichgewicht befindet.

Die Theorie um Gleichung (2.129) sagt voraus, dass sich $S_p(r)$ bei kleinen r für $p < 1$ wurzelförmig und für $p > 1$ linear verhält. Repräsentativ seien in Abbildung 4.2 die Strukturfunktionen $S_{p=0.5}$, $S_{p=2}$, und $S_{p=5}$ mitsamt den Fehlern aus der Γ -Methode gezeigt. Der Übergang vom wurzelförmigen zum theoretisch erwarteten linearen Verlauf findet in etwa bei $p = 2$ statt. Wirklich sehen kann man den linearen Bereich für $p > 2$ allerdings durchweg nicht. Zum Vergleich zeige ich in Abbildung 4.3 die Strukturfunktionen des 1024x32-Gitters. Dort ist gerade für $p = 5$ im intermediären

Bereich eine deutliche Linearität zu erkennen. Trotz besserer Aussichten darauf, dort die Ergebnisse zu bekommen, die wir erwarten, konzentrieren wir uns weiter auf das rechentechnisch simplere 45x256-Gitter.

Dort werfen wir noch einen Blick auf die Fehler. Diese sind generell recht groß und lassen viel Spielraum für einen Fit. Wie in Abschnitt 3.8 im Zusammenhang mit der Γ -Methode erwähnt, ist dies ein Zeichen dafür, dass die Statistik der Simulation noch zu wünschen übrig lässt. Es fällt auf, dass die einzelnen Werte für $S_p(r)$ schön entlang einer Linie aufgereiht sind und im Vergleich zu ihren Nachbarn kaum Schwankungen unterliegen. Ebenso legt sich der Fehler wie ein "glatter Schlauch" um diese Werte. Dies ist ein Indiz dafür, dass die Werte korreliert sein könnten.

Die Autokorrelationszeiten τ zu beiden Gittern sind in Abbildung 4.4 gezeigt. Sie bewegen sich – die Fehler mit eingerechnet – für alle Strukturfunktionen im für uns interessanten Bereich $r < 1$ zwischen 5000 und 60000 Konfigurationen. Für Strukturfunktionen höherer Ordnung zeigt sich die Tendenz, dass kleinere r eine kürzere Autokorrelationszeit als größere r haben. In diesem Fall zerfallen kleine Strukturen also schneller als große.

4.2 Vorüberlegungen

Das Ziel unserer Auswertung ist nun die Bestimmung des Exponenten ξ aus Gleichung (2.134)

$$S_p(r) = dr^\xi \quad (4.2)$$

mit dem Proportionalitätsfaktor d in der intermediären Skala. Diese Form für die Strukturfunktion motiviert sich aus der Tatsache heraus, die Strukturfunktion auf einen einzigen Term mit einem Exponenten zu reduzieren. ξ wird sich dann entsprechend Gleichung (2.136) verhalten und sich asymptotisch (2.135) annähern. Genauer sollte natürlich weiterhin

$$S_p(r) = br^p + cr \quad (4.3)$$

gelten, wovon (4.2) eine Näherung darstellt.

Wir wollen die Strukturfunktion noch testweise um einen möglichen Offset a erweitern. Das Verhalten von $S_p(r)$ im Dissipationsbereich η ist unklar. Ebenso kann es aufgrund der endlichen Statistik zu Abweichungen von der tatsächlichen Form der

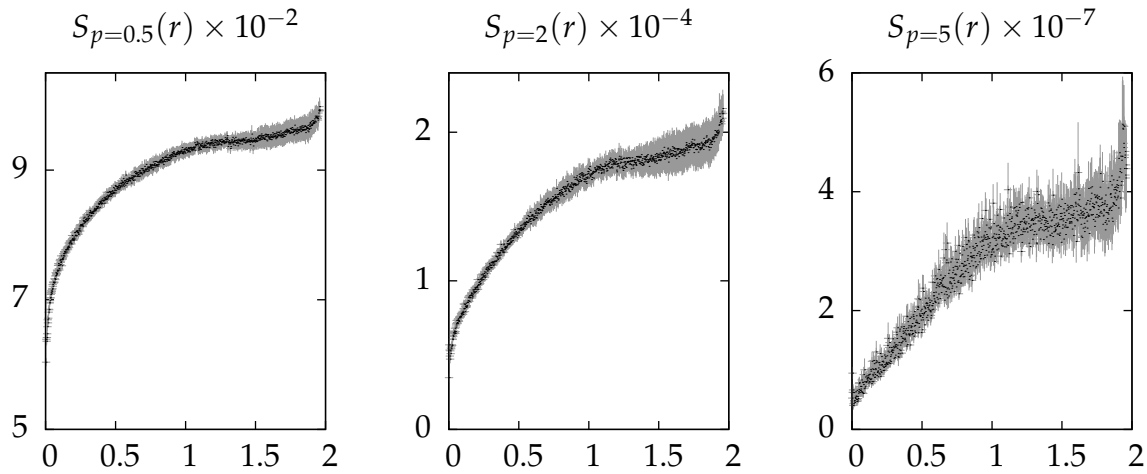


Abbildung 4.3: Eine Auswahl an Strukturfunktionen für das 1024x32-Gitter. Die $S_p(r)$ sind aufgrund der Auflösung mit kleinen schwarzen Punkten gekennzeichnet. Der Fehlerbereich ist grau ausgefüllt. In Anhang C.2 finden sich Abbildungen jeder einzelnen Strukturfunktion.

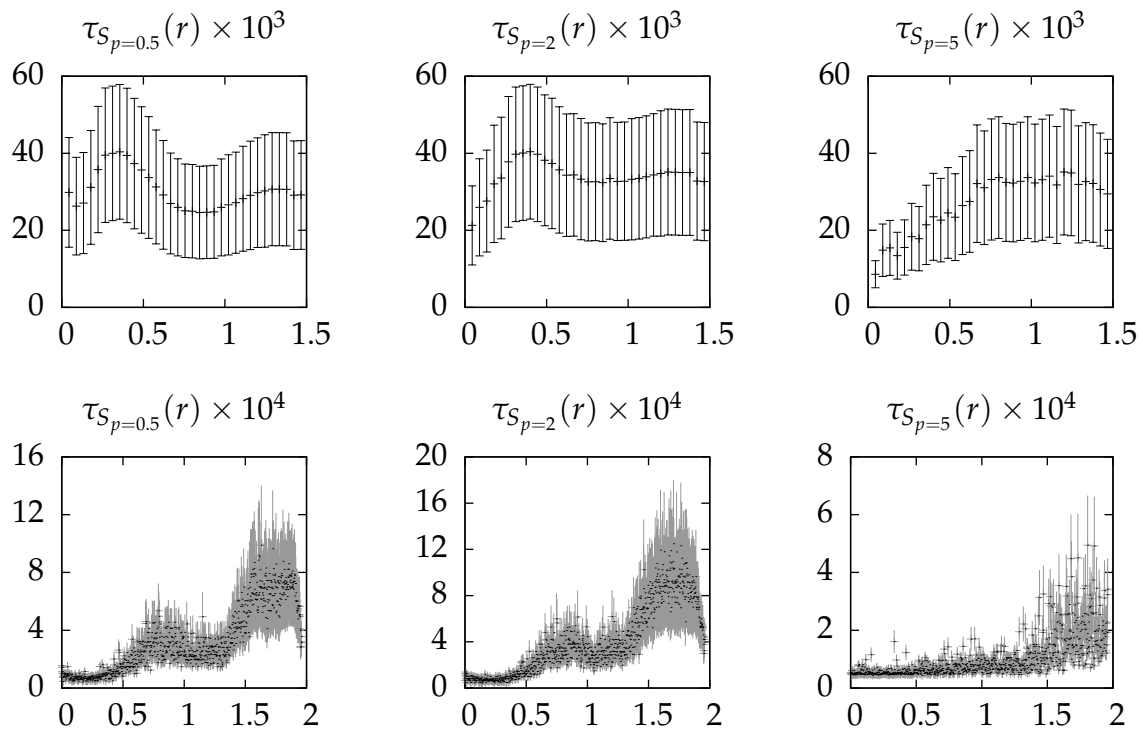


Abbildung 4.4: Eine Auswahl an Autokorrelationszeiten für das 45x256-Gitter (oben) und das 1024x32-Gitter (unten) mitsamt Fehlern.

Strukturfunktion kommen. Wir möchten dem Fit deshalb die Möglichkeit geben, auf diesen Umstand zu reagieren. Sämtliche $S_p(r)$ des 1024x32-Gitters in Abbildung 4.3 zeigen, dass die Einführung eines Offsets Sinn macht und gebraucht wird. Ebenso ersetzen wir den Exponenten p , welcher der theoretischen Erwartung entspricht, mit dem flexiblen Wert q , welcher neben a , b und c einen weiteren Fitparameter darstellt:

$$S_p(r) = a + br^q + cr \approx a + dr^{\tilde{\zeta}}. \quad (4.4)$$

Nun stellt sich die Frage, welche Form von $S_p(r)$ wir fitten sollen. Mit der Variante $a + dr^{\tilde{\zeta}}$ bestimmen wir den Exponenten $\tilde{\zeta}$. Aus $a + br^q + cr$ können wir den Exponenten q extrahieren. q und $\tilde{\zeta}$ unterscheiden sich dahingehend, dass laut der Theorie $q = p$ gelten sollte, während das Ergebnis für $\tilde{\zeta}$ entsprechend Gleichung (2.136) mit $\min(p, 1)$ übereinstimmen sollte. Für $c = 0$ ist die mathematische Struktur beider Ansätze identisch. Daher konzentriere ich mich hier erst einmal auf den Ansatz

$$S_p(r) = a + br^q + cr. \quad (4.5)$$

4.3 Eine erste Idee zur Bestimmung des Exponenten

Nachdem nun die Ausgangssituation klar ist, müssen wir uns überlegen, wie wir an den Exponenten herankommen. Einen direkten Fit von (4.5) wollen wir möglichst umgehen, um dem Problem des nicht linear vorkommenden Parameters q aus dem Weg zu gehen. Darüber hinaus soll der direkte Fit dieser Funktion in der Vergangenheit schon gescheitert sein. Stattdessen folgen wir dieser Überlegung:

$$\ln \left(\frac{d^2}{dr^2} S_p(r) \right) = (q - 2) \ln r + \ln (b(q - 1)q). \quad (4.6)$$

Durch eine Umformung dieser Art bekommen wir eine Geradengleichung mit Steigung $q - 2$, über die wir Zugriff auf q bekommen. $S_p(r)$ müssen wir dafür durch eine Funktion $\tilde{S}_p(r)$ abschätzen, um dann zu sehen, wie der Logarithmus der zweiten Ableitung aussieht. Dabei müssen wir darauf achten, dass $\frac{d^2}{dr^2} \tilde{S}_p(r)$ nicht negativ wird, da sonst der Logarithmus nicht definiert ist. Damit ist dieser Ansatz, sollte $\tilde{S}_p(r)$ der Theorie exakt folgen, nur für $p > 2$ sinnvoll. Dies schränkt den Nutzen dieser Methode deutlich ein, da gerade die erwartete Bifraktalität nicht untersucht werden kann.

Trotzdem wollen wir es auf diese Weise zunächst versuchen. Als Ansatzpunkt für $\tilde{S}_p(r)$ wählen wir zuerst einmal gewöhnliche Polynome. Zudem wollen wir Splines ausprobieren. Zum Testen der Methoden wähle ich im Folgenden die Strukturfunktion der Ordnung $p = 4$, dessen zweite Ableitung – unter der Voraussetzung, dass die Simulationen nicht zu sehr von der Theorie abweichen – auf jeden Fall positiv sein sollte.

4.3.1 Linearer, unkorrelierter Fit

Ich lege durch die Datenpunkte, die im intermediären Bereich liegen, das Polynom vom Grad n :

$$\tilde{S}_{p,n}(r) = \sum_{k=0}^n a_k r^k. \quad (4.7)$$

Die benutzte Fitroutine wurde von mir geschrieben und folgt einer gewöhnlichen χ^2 -Minimierung unkorrelierter Datenpunkte. Ein solcher χ^2 -Fit berechnet die Summe der quadratischen Abweichungen einer vorgeschlagenen Funktion $f(r)$ von den gemessenen Datenpunkten mit Wert y_i an der Stelle r_i :

$$\chi^2 \equiv \sum_{i=1}^M \frac{(y_i - f(r_i))^2}{\sigma_i^2}. \quad (4.8)$$

Die Funktion, welche diese Summe minimiert, ist laut Annahme die Funktion, welche die beste Näherung an die Datenpunkte darstellt. Sie ist damit das Ergebnis dieser Routine.³ M ist die Anzahl der Datenpunkte, durch die der Fit gelegt wird und σ_i^2 ist die Varianz des Datenpunkts y_i (N ist die Anzahl aller berücksichtigten Konfigurationen):

$$\sigma_i^2 = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N (y_{i,j} - \bar{y}_i)^2. \quad (4.9)$$

Es sei darauf hingewiesen, dass für den Fit nicht der Fehler verwendet wird, den die Γ -Methode berechnet. Stattdessen werden die σ_i verwendet, die hier in (4.9) definiert wurden.

Es ergibt sich der Fit aus Abbildung 4.5 unter Berücksichtigung des Inertialbereichs

³Die Herleitung zu diesem Ansatz kann für Polynome vom Grad 1 in [2] auf Seite 101 ff. nachgelesen werden. Die Routine selbst benutzt die Matrix-Lösung für höhergradige Polynome auf Seite 121 f.

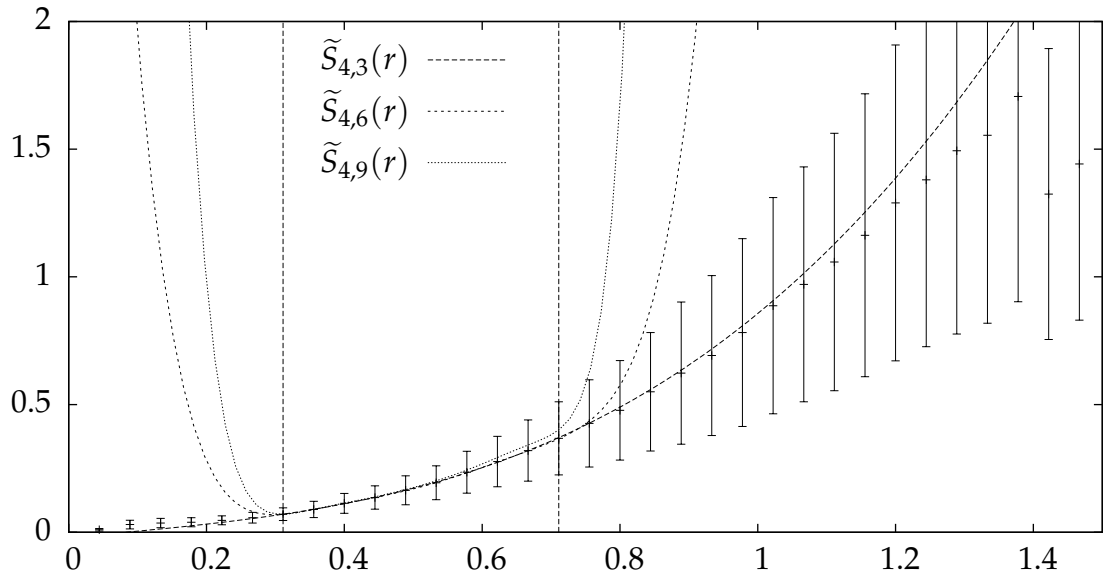


Abbildung 4.5: Fit von $S_{p=4}(r)$ für das 45x256-Gitter mit dem Polynomansatz (4.7). Der Fitbereich ist durch zwei vertikale Linien markiert.

gemäß (4.1). Es kann zunächst einmal festgehalten werden, dass gerade die Fits der Polynome von Ordnung 3 und 6 gut aussehen und auf den ersten Blick nicht entschieden werden kann, welcher Fit nun besser ist. Abgesehen davon fällt vor allem auf, dass das Polynom vom Grad 9, welches bei den vorliegenden 10 Datenpunkten exakt durch alle Punkte hindurchgehen sollte, dieses eben nicht macht und stattdessen deutlich sichtbar davon abweicht. Dieses Verhalten zeigt sich bei allen Strukturfunktionen und tritt auch durchweg erst bei höheren Polynomgraden auf. Dass der Fit von Polynomen mit kleinerer Ordnung generell sinnvoll aussieht, lässt darauf schließen, dass die Routine prinzipiell korrekt implementiert ist.

Wenn Ungenauigkeiten bei einer rechnergestützten Berechnung auftreten, liegt die Vermutung nahe, dass die Berechnung auf die natürlichen Grenzen der Computer – wie beispielsweise die Maschinengenauigkeit – gestoßen ist. Dies könnte hier der Fall sein, da mit höhergradigen Polynomen größere Potenzen berechnet werden müssen. Die Genauigkeit des Datentyps `double`, mit dem im Programm gerechnet wird, liegt in etwa bei 16 signifikanten Stellen. Sollten sich Werte während der Berechnung um mehrere Größenordnungen unterscheiden, kommt es deshalb zu Rundungsfehlern. Um das Problem zu umgehen, müssen wir deshalb versuchen, dass sämtliche Werte in benachbarten Größenordnungen liegen.

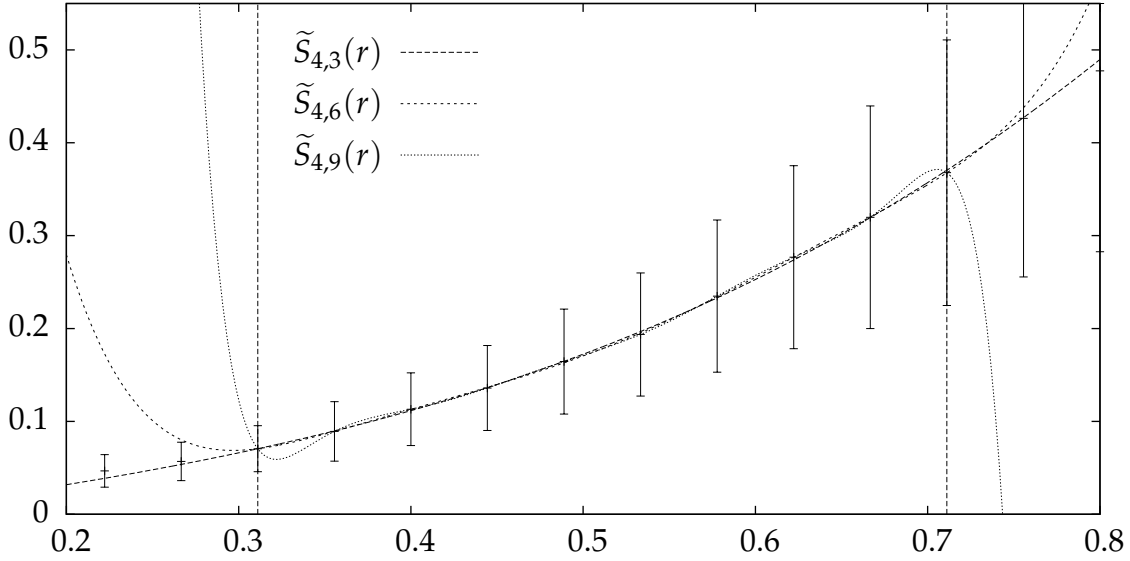


Abbildung 4.6: Fit von $S_{p=4}(r)$ für das 45x256-Gitter mit dem Polynomansatz (4.10) und $r_c = 0.511$.

Dies können wir erreichen, indem wir unseren Ansatz (4.7) für das Polynom um eine Verschiebung r_c erweitern:

$$\tilde{S}_{p,n}(r) = \sum_{k=0}^n a_k (r - r_c)^k. \quad (4.10)$$

Dadurch entwickeln wir das Polynom nicht länger um 0 herum, sondern um r_c . Legen wir r_c in das Intervall, in dem gefittet wird, ist die Funktion anschaulich gesprochen schon direkt vor Ort und muss nicht erst durch einen möglicherweise großen Wert von 0 hierher gebracht werden. Für r_c setzen wir daher einfach die Mitte des Fitbereichs an: $r_c = 0.511$.

Wie sich in Abbildung 4.6 zeigt⁴, können wir durch diesen Schritt den Fehler im Fit beheben. $\tilde{S}_{4,9}(r)$ zeigt nun das charakteristische "Überschießen" am Rand des Fitintervalls um jeden Punkt "erwischen" zu können. Dies entspricht zumindest der Erwartung, obgleich uns dieses Überschießen der Funktion nicht entgegen kommt. Die Funktion sollte möglichst glatt durch die Punkte hindurchgehen. Dieses Verhalten ist eher durch die kleineren Polynomgrade gegeben. Diese müssen wir nun

⁴Nachdem mit Abbildung 4.5 das Fitintervall in Bezug zur gesamten Strukturfunktion gesetzt wurde, werde ich im Folgenden nur noch den Bereich zeigen, der für den Fit relevant ist. Die gestrichelten vertikalen Linien markieren dabei stets den Fitbereich.

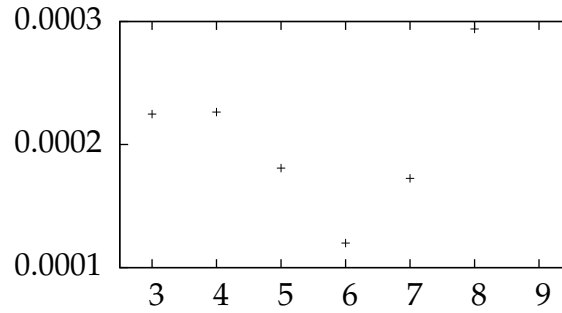


Abbildung 4.7: Auf der vertikalen Achse: Fitgüte des unkorrelierten Fits von $S_{p=4}(r)$ für das 45x256-Gitter mit dem Polynomansatz (4.10) und $r_c = 0.511$; auf der horizontalen Achse: Polynomgrad

irgendwie bewerten, um den günstigsten Fit für die weitere Auswertung auszuwählen. Dazu bemühen wir die Güte von Fits.

Die Fitgüte⁵ versucht zu quantifizieren, wie gut die gefittete Funktion zur tatsächlichen Verteilung, die die Datenpunkte erzeugt hat, passt. Die Daten haben eine *tatsächliche* Varianz σ^2 , die mit der gefitteten Funktion $f(r)$ durch die Varianz

$$s^2 = \frac{1}{m} \frac{\sum_{i=1}^M \frac{1}{\sigma^2} (y_i - f(r_i))^2}{\overline{\sigma^2}} \quad (4.11)$$

abgeschätzt wird. Dabei ist $m = M - (n + 1)$ die Anzahl der Freiheitsgrade des Fits, also die Anzahl der Datenpunkte minus die Anzahl der Parameter der Fitfunktion. Der reziproke Mittelwert

$$\overline{\sigma^2} = \left[\frac{1}{M} \sum_{i=1}^M \frac{1}{\sigma^2} \right]^{-1} \quad (4.12)$$

ist äquivalent zu σ^2 , wenn für alle $\sigma_i = \sigma$ gilt. Der Fit ist gut, wenn sich die beiden Varianzen σ^2 und s^2 decken, wodurch auch $\overline{\sigma^2} \approx s^2$ erfüllt ist. s^2 kann mit χ^2 in Beziehung gesetzt werden:

$$\frac{\chi^2}{m} = \frac{s^2}{\overline{\sigma^2}}. \quad (4.13)$$

Bei einem guten Fit gilt damit $\frac{\chi^2}{m} \approx 1$.

Die Berechnung der Fitgüte liefert im vorliegenden Fall das Bild in Abbildung 4.7.

⁵[2], Seite 194 f.

Das Minimum ist zwar beim Polynomgrad 6 auszumachen, allerdings ist der entsprechende Wert für die Güte viel kleiner als 1. Dies ist ein Zeichen dafür, dass der Fit mit einem χ^2 nach Gleichung (4.8) keine gute Beschreibung für den tatsächlichen Sachverhalt liefert. Im Zusammenhang mit der qualitativen Analyse der Strukturfunktionen mitsamt ihrer Fehler habe ich bereits darauf hingewiesen, dass die Datenpunkte danach aussehen, als seien sie korreliert. Dies könnte der Grund für die viel zu kleine Fitgüte sein. Wir wollen die Daten deshalb durch eine Funktion, die aus einem korrelierten Fit hervorgeht, beschreiben.

4.3.2 Linearer, korrelierter Fit

Das Grundgerüst des χ^2 -Fits bleibt dabei erhalten. Wir modifizieren allerdings das χ^2 selbst, indem wir Korrelationen zwischen den Datenpunkten durch eine Kovarianzmatrix C_{ij} mit einberechnen [26]:

$$\chi^2 \equiv \sum_{i,j=1}^M (y_i - f(r_i)) C_{ij}^{-1} (y_j - f(r_j)). \quad (4.14)$$

Die Einträge von C_{ij} berechnen sich über

$$C_{ij} = \frac{1}{N(N-1)} \sum_{k=1}^N (y_{i,k} - \bar{y}_i)(y_{j,k} - \bar{y}_j). \quad (4.15)$$

Für den unkorrelierten Fall sind alle Nichtdiagonalelemente 0 und auf der Diagonalen C_{ii} finden sich die σ_i^2 wieder.

Das Ergebnis des korrelierten Fits selbst unterscheidet sich quantitativ fast gar nicht vom unkorrelierten Fit. Die Fits sind von denen in Abbildung 4.6 nicht zu unterscheiden. Die Fitgüte ist in Abbildung 4.8 aufgetragen. Die Werte liegen in der Größenordnung von 1. Das Polynom vom Grad 6 hat hier ebenfalls die beste Güte. Dass der Wert hier noch unter 1 liegt, kann damit erklärt werden, dass χ^2/m generell natürlich noch Fehlern unterliegt. Insgesamt passt dieses Ergebnis aber wesentlich besser zu den Überlegungen zur Fitgüte und zeigt, dass der korrelierte Fit der Weg in die richtige Richtung war.

Es bleibt die Bestimmung des Exponenten über den Logarithmus der zweiten Ableitung. Ausgangspunkt ist das Polynom sechsten Grades $\tilde{S}_{4,6}(r)$ aus dem korrelier-

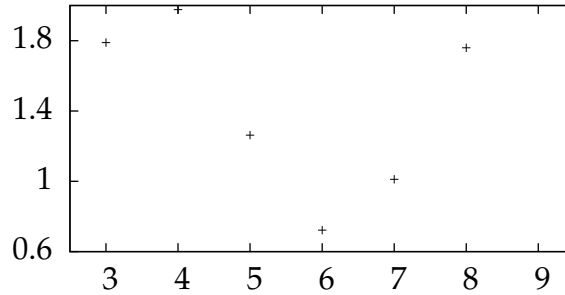


Abbildung 4.8: Auf der vertikalen Achse: Fitgüte des korrelierten Fits von $S_{p=4}(r)$ für das 45x256-Gitter mit dem Polynomansatz (4.10) und $r_c = 0.511$; auf der horizontalen Achse: Polynomgrad

ten Fit. $\ln\left(\frac{d^2}{dr^2}\tilde{S}_{4,6}(r)\right)$ ist in Abbildung 4.9 zu sehen und macht nicht besonders viel Mut, eine Gerade hindurchlegen zu können. Dieses Bild zeigt sich durchweg für Strukturfunktionen aller Ordnungen. Das Problem liegt darin, dass die zweite Ableitung nicht glatt genug ist und sich ihre "Täler" und "Berge" ebenso in dem Logarithmus wiederfinden.

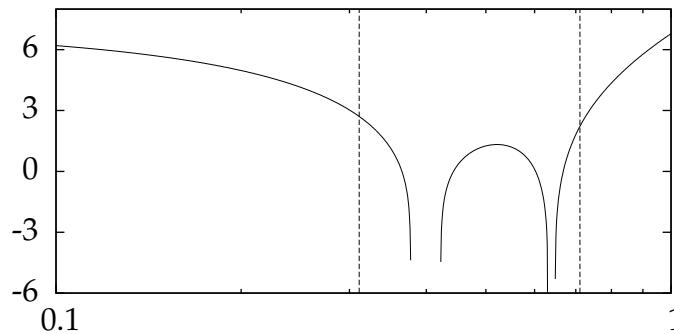


Abbildung 4.9: $\ln\left(\frac{d^2}{dr^2}\tilde{S}_{4,6}(r)\right)$ für das 45x256-Gitter.

4.3.3 Spline-Fit

Parallel zu den Polynomen habe ich auch noch einen C^3 -Spline⁶ ausprobiert. Dieser fittet zwischen zwei Datenpunkten ein Polynom dritten Grades und verbindet diese Teilabschnitte mit stetigen Randbedingungen, die für einen glatten Verlauf über den

⁶[2], Seite 228 ff.

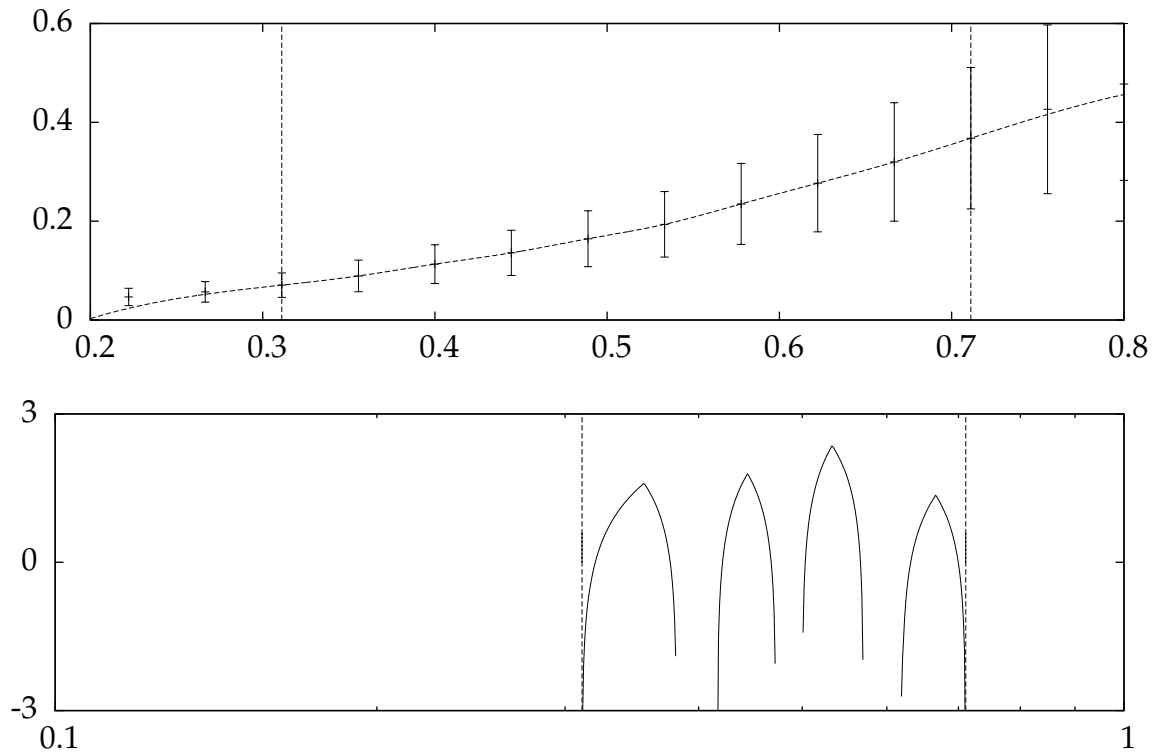


Abbildung 4.10: Oben: Fit eines kubischen Splines $\tilde{S}_{4,C^3}(r)$ durch die Datenpunkte; unten: $\ln\left(\frac{d^2}{dr^2}\tilde{S}_{4,C^3}(r)\right)$ für das 45x256-Gitter.

gesamten Fitbereich sorgen. Wie das Polynom neunten Grades geht es damit durch alle Punkte genau durch, dämmt aber das Überschießen der Funktion an den Rändern des Fitintervalls ein. Zwischen den Datenpunkten zeigt es sich aber ähnlich wellig und entsprechend sieht der Logarithmus der zweiten Ableitung aus; siehe Abbildung 4.10. Es bleibt uns damit nichts anderes übrig, als den Logarithmus-Ansatz (4.6) als nicht zielführend anzusehen und die Bestimmung des Exponenten auf einem anderen Wege zu probieren.

4.4 Eine zweite Idee zur Bestimmung des Exponenten

Der Polynomfit (4.10) bietet viele Freiheiten, die Funktion durch die Daten zu legen. Vor allem wird die Form der Funktion in keinsten Weise eingeschränkt und entspricht damit natürlich im Allgemeinen nicht der Strukturfunktion in der Form von (4.5). Dies ist im Grunde das Ergebnis unseres ersten Versuchs: Fitten wir ein ge-

wöhnliches Polynom durch die Datenpunkte, resultiert daraus nicht eine Funktion, die mit der Form (4.5) vereinbar ist. Wir müssen also die Funktion, welche wir fitten möchten, soweit einschränken, dass wesentliche Eigenschaften von (4.5) eingehalten werden. Dies bedeutet insbesondere, dass die Funktion glatt bleibt. Deshalb werde ich zuerst einmal untersuchen, wie dies zu gewährleisten ist. Dafür entwickle ich (4.5) um den Punkt r_c :

$$\begin{aligned} S_p(r) &= a + br^q + cr \\ &= (a + br_c^q + cr_c) + (qbr_c^{q-1} + c)(r - r_c) + \frac{q(q-1)br_c^{q-2}}{2}(r - r_c)^2 \\ &\quad + \frac{q(q-1)(q-2)br_c^{q-3}}{6}(r - r_c)^3 + \mathcal{O}(r^4). \end{aligned} \quad (4.16)$$

Dies entspricht

$$S_p(r) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k (r - r_c)^k \quad (4.17)$$

mit den ersten vier Koeffizienten

$$a_0 = a + br_c^q + cr_c, \quad (4.18a)$$

$$a_1 = qbr_c^{q-1} + c, \quad (4.18b)$$

$$a_2 = \frac{q(q-1)br_c^{q-2}}{2}, \quad (4.18c)$$

$$a_3 = \frac{q(q-1)(q-2)br_c^{q-3}}{6}. \quad (4.18d)$$

Ab dem quadratischen Term kommt nur noch das Verhalten des Terms br^q zum Tragen, da die beiden anderen Terme durch die Ableitungen herausgefiltert wurden. Die Koeffizienten von a_2 und a_3 lassen sich in Beziehung setzen:

$$a_3 = a_2 \frac{q-2}{3r_c}. \quad (4.19)$$

Allgemein findet man für die Koeffizienten der Entwicklung von br^q

$$a_k = a_{k-1} \frac{q - (k-1)}{kr_c}. \quad (4.20)$$

Dies ist eine wesentliche Eigenschaft von br^q und wird von Polynomen im Allgemei-

nen nicht erfüllt. Dies ist der Grund dafür, dass der erste Versuch, den Exponenten zu bestimmen, nicht zum Ziel geführt hat. Mit (4.20) können wir für $S_p(r)$ alle Koeffizienten in (4.17) mit $k \geq 4$ angeben. Mit den ersten vier Koeffizienten (4.18) ist $S_p(r)$ damit bereits vollständig bestimmt. Es ist deshalb sinnvoll, alle $a_{k \geq 4}$ in Abhängigkeit von a_2 und a_3 zu schreiben, indem für ein k die Gleichung (4.20) mit $k - 1$ immer wieder in sich selbst eingesetzt wird, bis nur noch a_2 und a_3 in der Formel stehen:

$$a_{k \geq 4} = a_3 \prod_{m=4}^k \frac{1}{m} \left(3 \frac{a_3}{a_2} - \frac{m-3}{r_c} \right). \quad (4.21)$$

Die Summe in (4.17) wird nur genau $S_p(r)$ entsprechen, wenn diese bis ∞ läuft. Dieses können wir naturgemäß nicht umsetzen und müssen die Entwicklung nach einer endlichen Anzahl an Termen n abbrechen. Damit nähern wir $S_p(r)$ an durch

$$\tilde{S}_p(r) = \sum_{k=0}^n a_k (r - r_c)^k. \quad (4.22)$$

Diese Funktion hat mit (4.18) und (4.21) vier freie Parameter a_0 , a_1 , a_2 und a_3 und kann damit an die Daten gefittet werden. Aus dem Resultat für a_2 und a_3 kann über Relation (4.19) der Exponent bestimmt werden zu:

$$q = 3r_c \frac{a_3}{a_2} + 2. \quad (4.23)$$

Die weiteren Parameter von $S_p(r)$ können dann sukzessiv über (4.18) aus a_2 , a_1 und a_0 abgeleitet werden.

4.4.1 Nichtlinearer Fit

Diese Herangehensweise birgt nun den Nachteil, dass die Fitparameter nicht länger gänzlich linear in $\tilde{S}_p(r)$ auftreten. Zum Fit soll weiterhin die χ^2 -Methode für korrelierte Daten nach Gleichung (4.14) mit $f(r) = \tilde{S}_p(r)$ genutzt werden. Allerdings lässt sich $\frac{\partial}{\partial a_k} \chi^2$ hier nicht mehr analytisch exakt lösen. Wir kommen nicht umhin, χ^2 numerisch zu minimieren. Dafür bieten sich uns zwei Möglichkeiten.

1. Wir berechnen $\frac{\partial}{\partial a_k} \chi^2$ und bestimmen die Nullstellen. Dies führt zu vier gekoppelten Gleichungen, die es simultan zu lösen gilt.

2. Wir bestimmen das Minimum von χ^2 auf direktem Wege, indem wir uns von einem Startpunkt aus so lange entlang der Funktion “bergab” bewegen, bis sich der Funktionswert nicht länger verändert, weil wir auf ein Minimum gestoßen sind.

Beide Möglichkeiten bieten ihre Tücken. Bei Variante 1 müssten für jede Gleichung die Nulllinien $\frac{\partial}{\partial a_k} \chi^2 = 0$ bestimmt werden und auf einen Schnittpunkt mit den Nulllinien einer anderen Gleichung hin verglichen werden. Schneiden sich die Nulllinien aller vier Gleichungen in einem Punkt, hätte man eine Lösung gefunden. Die Schwierigkeit liegt darin, wirklich alle Nulllinien aufzuspüren. Ebenso können Nulllinien, die nahe beieinander liegen, sich aber nicht schneiden, fälschlicherweise als Schnittpunkt von der Routine gedeutet werden.⁷

Variante 2 macht uns das Leben im Grunde nicht einfacher. Wir suchen das globale Minimum der Funktion. Die Routine kann zwischen lokalen und globalen Minima allerdings nicht entscheiden. Gibt es viele lokale Minima, resultiert die Routine in dem Minimum, welches sie als erstes aufspürt; unabhängig davon, ob hinter dem nächsten “Hügel” ein tieferes Minimum zu finden wäre. Ebenso kann es passieren, dass der Fit möglicherweise nicht konvergiert sondern sich schlimmstenfalls bis ins Unendliche entwickelt. Auch können Grenzzyklen auftreten, bei denen die Routine zwischen mehreren Punkten periodisch hin und her springt. Damit ist das Auffinden des gesuchten Minimums sehr sensibel davon abhängig, wo wir unsere Suche beginnen. Generell stellt diese Variante 2 aber das geringere Übel von beiden Möglichkeiten dar, da wir während der Suche neben dem Funktionswert auch die Steigung berücksichtigen können. Dies stellt sich als Vorteil heraus. Sie liefert ebenso robustere Resultate, weshalb wir Variante 2 hier verwenden werden.

Der Algorithmus zur Minimierung von χ^2 wird im Folgenden kurz umrissen. Die Implementierung folgt den Methoden in den Numerical Recipes [25], auf welche im Einzelnen verwiesen wird. χ^2 ist im vorliegenden Fall eine Funktion der vier Parameter a_k , $k = 1, 2, 3, 4$. Die Minimierung findet also in vier Dimensionen statt. Ausgangspunkt ist der Vektor \mathbf{a} mit den Einträgen a_k , welcher durch Vorüberlegungen so festgelegt werden muss, dass er bereits nah am gesuchten Minimum liegt. Es wird ebenso eine Menge aus vier linear unabhängigen Richtungsvektoren \mathbf{n}_k – beispielsweise die Einheitsvektoren \mathbf{e}_k – ausgewählt. Entlang dieser Richtungen \mathbf{n}_k wird χ^2 nun nacheinander *linear* minimiert. Der Punkt \mathbf{a} wandert dabei zu dem Minimum,

⁷Nähere Erläuterungen dazu finden sich in [25] auf Seite 379 f.

welches entlang der Richtung gefunden wurde, und dient als neuer Ausgangspunkt für die lineare Minimierung entlang der nächsten Richtung. Dieser Prozess wiederholt sich, bis die Änderung der Funktion kleiner als eine eingestellte Toleranz wird. Das Minimum ist damit – idealerweise – gefunden. Diese Vorgehensweise wird *Direction Set Method*⁸ genannt.

Es stellt sich heraus, dass konstante \mathbf{n}_k meist nicht effizient sind. Zum Beispiel sei ein langes, schmales Tal angenommen, welches im 45° -Winkel zu den Einheitsvektoren verläuft. Minimieren wir stets entlang der \mathbf{e}_k , wird die Minimierungsroutine dieses Tal in vielen kleinen Zickzack-Kurven herunterlaufen, anstatt sich direkt entlang des Tals zu entwickeln. Um sich solchen Gegebenheiten anzupassen, werden im Laufe der Prozedur die Richtungen aktualisiert. Dabei kann man sich für zwei Methoden entscheiden. Entweder es werden einige sehr gute Richtungen eingeführt, welche das Tal weit hinunter führen, oder es wird darauf geachtet, dass die Richtungen paarweise konjugiert sind. Paarweise konjugierte Richtungen stellen sicher, dass eine Minimierung entlang einer Richtung die Minimierung entlang einer anderen nicht beeinflusst. Andernfalls kann es dazu kommen, dass entlang einer bereits minimierten Richtung noch einmal minimiert werden muss. Sind die Richtungen konjugiert, benötigt die Minimierung im Falle eines exakt quadratischen Minimums in N Dimensionen damit nur genau N Schritte. Die in den Numerical Recipes vorgestellte und für unsere Zwecke übernommene Routine benutzt einen Mix aus beiden Methoden.⁹

Nachdem wir nun die mehrdimensionale Minimierung auf eine eindimensionale zurückgeführt haben, muss über die Minimierung in einer Dimension natürlich noch ein Wort verloren werden. Zuerst einmal möchten wir das Minimum isolieren, also ein Intervall festlegen, welches das Minimum auf jeden Fall beinhaltet. Dafür wird eine Intervallgrenze auf den Ausgangspunkt \mathbf{a} gesetzt. Wir bewegen uns auf der Funktion bergab und vergrößern das Intervall Schritt für Schritt immer weiter, bis der Funktionswert an der anderen Intervallgrenze wieder steigt.¹⁰ In diesem Intervall können wir uns nun daran machen, das Minimum genau zu bestimmen. Dabei wird eine Kombination aus parabolischer Interpolation und sogenannter Goldener-Schnitt-Suche verwendet. Die erste Variante legt durch die Intervallgrenzen und einen dritten Punkt innerhalb des Intervalls eine Parabel. Der Punkt, an dem die

⁸[25] S. 412 ff.

⁹Sämtliche Details hierzu finden sich in [25] auf den Seiten 414 bis 418.

¹⁰genaue Implementierung: [25], Seite 400 f.

Parabel ihr Extremum hat, wird je nach Situation als eine neue Intervallgrenze oder neue Näherung für das Minimum angesetzt.¹¹ Nun kann es passieren, dass die Parabel als Extremum kein Minimum sondern ein Maximum hat. Außerdem kann es vorkommen, dass es gar kein Minimum gibt, wenn die drei gewählten Punkte, durch die die Parabel hindurchgelegt wurde, auf einer Geraden liegen. In diesen Fällen fällt die Routine auf die Goldener-Schnitt-Suche zurück. Diese ist eine Intervallschachtelungsmethode und verkleinert das Intervall um ein Verhältnis, das dem goldenen Schnitt entspricht. Dieses Verhältnis ergibt sich aus den Überlegungen, das Minimum über Intervallschachtelung möglichst effizient zu finden.¹²

4.4.2 Festlegung der Startparameter

Wie erwähnt, ist der nichtlineare Fit sehr stark von seiner Ausgangsposition abhängig. Diese wird über Startwerte der Parameter a_k festgelegt. Dafür machen wir uns Gedanken zu sinnvollen Werten für a , b , c und q in der Strukturfunktion und bilden diese dann über die Gleichungen (4.18) auf die a_k ab. Laut Vorhersage gilt für die volle Strukturfunktion (4.5) $q = p$. Wird der lineare Term mit c weggelassen, soll $q = \min(p, 1)$ gelten. Diese beiden Aussagen nehmen wir zunächst als Ausgangspunkt für den Startwert von q . Wir werden aber sehen, dass wir hier Modifikationen vornehmen müssen, wollen wir den Fit bereits aus einer Position starten lassen, die möglichst deckungsgleich mit den Daten ist.

a wurde nur als mögliche Korrektur eingeführt und soll klein sein. Wir könnten a auf 0 setzen und dann sehen, ob der Fit von der Möglichkeit Gebrauch macht, den Offset anzupassen. Meist wurde der Fit dadurch nicht negativ beeinflusst. Da vom Offset allerdings stets Gebrauch gemacht wurde, bin ich dazu übergegangen, a direkt einen zu den Daten passenden Wert zu geben. Dazu wird eine Gerade durch den linken Rand der Datenpunkte – zum Beispiel die ersten 10% der Daten – gefittet. a setzen wir dann auf den Schnittpunkt dieser Geraden mit der $r = 0$ -Achse. Dies ist für einen Fit beispielhaft in Abbildung 4.11 gezeigt. Für c legen wir einfach eine Gerade durch alle Datenpunkte und geben c den Wert der Steigung dieser Geraden. Für $p < 1$ sollte der lineare Term eine geringe Rollen spielen und für $p > 1$ entspricht dieser Ansatz genau der Vorhersage. Dieser Ansatz kann noch

¹¹[25], Seite 402 ff.

¹²[25], Seite 397 ff.

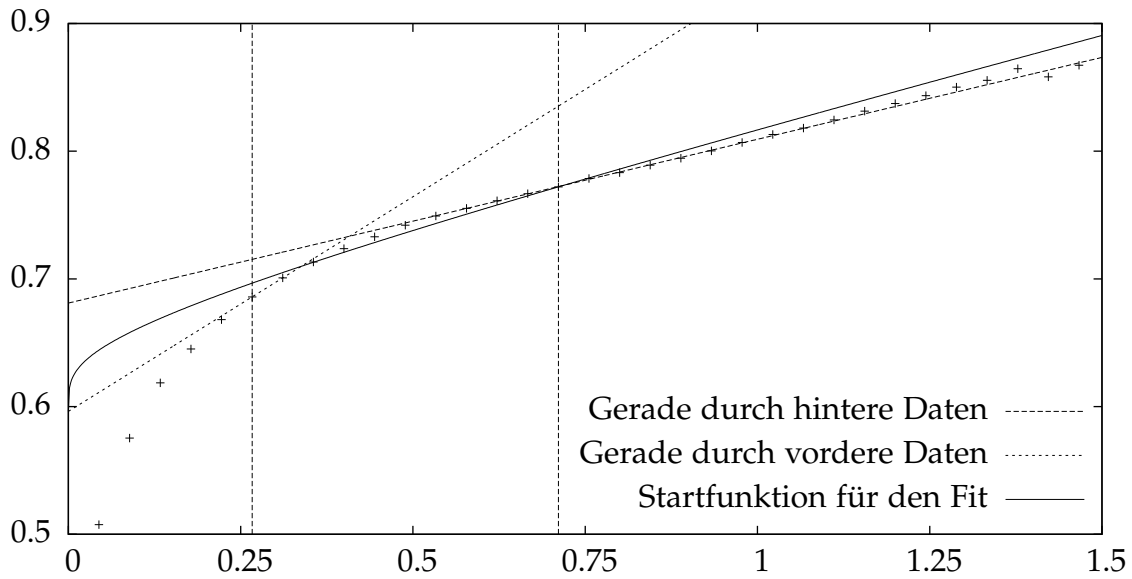


Abbildung 4.11: Illustration zu den Startparametern für den Fit des 0.25-ten Moments der Strukturfunktion des 45x256-Gitters. Die Startwerte des Fits lauten: $a = 0.596197$, $b = 0.0921712$, $c = 0.128267$, $p = 0.25$

etwas besser an den wahrscheinlichen Wert von c angepasst werden, wenn nur die Datenpunkte bei größeren r berücksichtigt werden. Zur Anschauung sei ebenfalls auf Abbildung 4.11 hingewiesen.

Es bleibt die Bestimmung von b . Dazu nehmen wir einen Datenpunkt und setzen diesen als den entsprechenden Wert für $S_p(r)$ an. (4.5) nach b umgeformt, führt zu:

$$b = \frac{S_p(r) - a - cr}{r^q}. \quad (4.24)$$

Für $S_p(r)$ nehmen wir einfach den Datenpunkt am rechten Rand des Inertialbereichs, der laut Definition (4.1) bei $r = 0.66$ endet. Wir werden sehen, dass es bei der Startfunktion vorkommen kann, dass sie zum Beispiel trotz eines Exponenten $q > 1$ nach unten gekrümmt ist. Dies liegt daran, dass für den Faktor b in solch einem Fall nach unseren Überlegungen ein negativer Wert bestimmt wurde.

Für $S_{p=0.25}(r)$ des 45x256-Gitters ergibt sich nun die in Abbildung 4.11 dargestellte Ausgangssituation. Diese ist nicht optimal, was vor allem auf den Offset a zurückzuführen ist. Wollen wir uns rigoros in den uns gesetzten Grenzen bewegen und den Inertialbereich nicht verlassen, haben wir leider keine bessere Möglichkeit, a aus

den Daten abzuschätzen. Dafür wäre es nötig, mehr Punkte am unteren Ende der Strukturfunktion zu berücksichtigen. Der Dissipationsbereich ist gut 3 Gitterabstände groß, erstreckt sich also über 4 Gitterpunkte. Unser Ansatz für den Beginn der intermediären Skala liegt bei 6 Gitterabständen, damit wir die Dissipationsskala auf jeden Fall umgehen. Nichtsdestotrotz wird sich zeigen, dass sich der Fit von dieser Startposition aus sinnvoll entwickeln kann.

4.4.3 Auswertung des 45x256-Gitters

Für die Auswertung habe ich nun die folgenden Funktionstypen an die Daten gefittet:

$$\text{abcq} : a + bx^q + cx, \quad (4.25a)$$

$$\text{bcq} : bx^q + cx, \quad (4.25b)$$

$$\text{abq} : a + bx^q, \quad (4.25c)$$

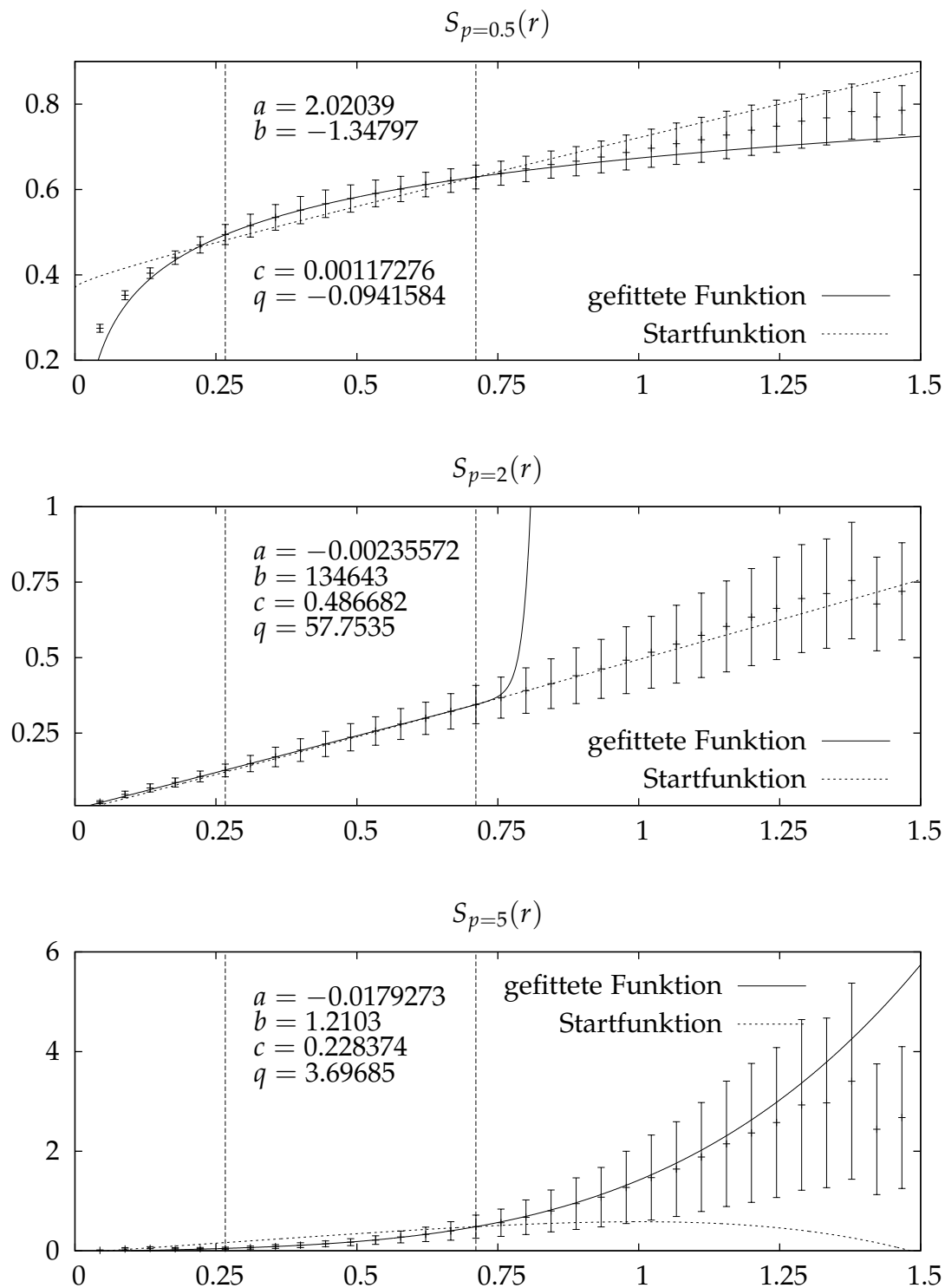
$$\text{bq} : bx^q. \quad (4.25d)$$

Um die Ansätze zu unterscheiden, werde ich auf die genannten Kürzel zurückgreifen.

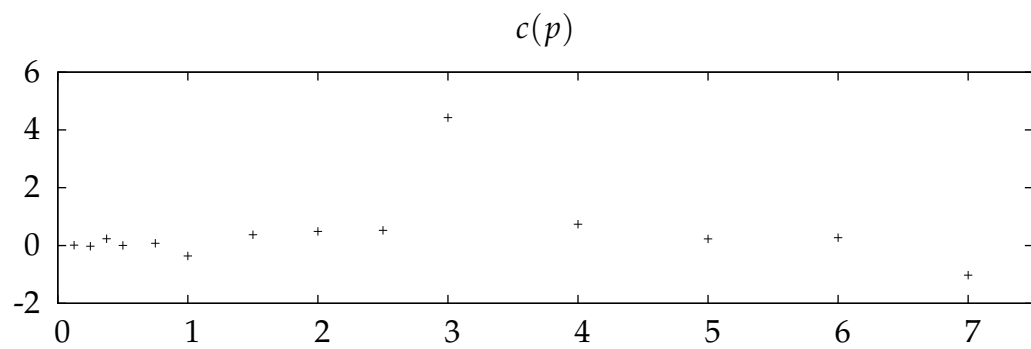
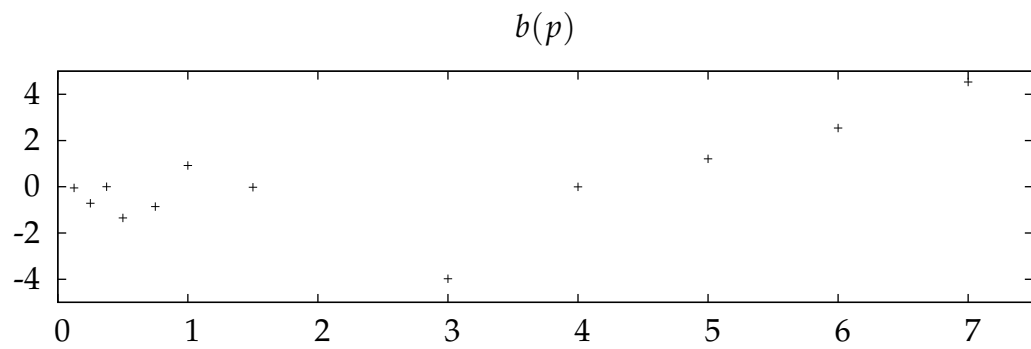
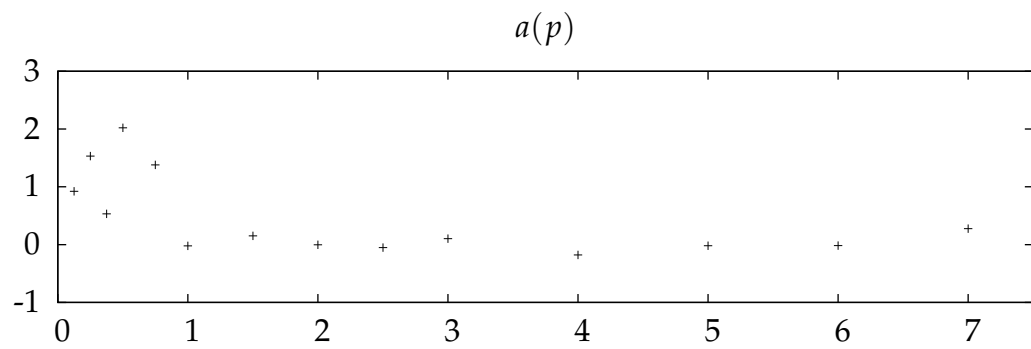
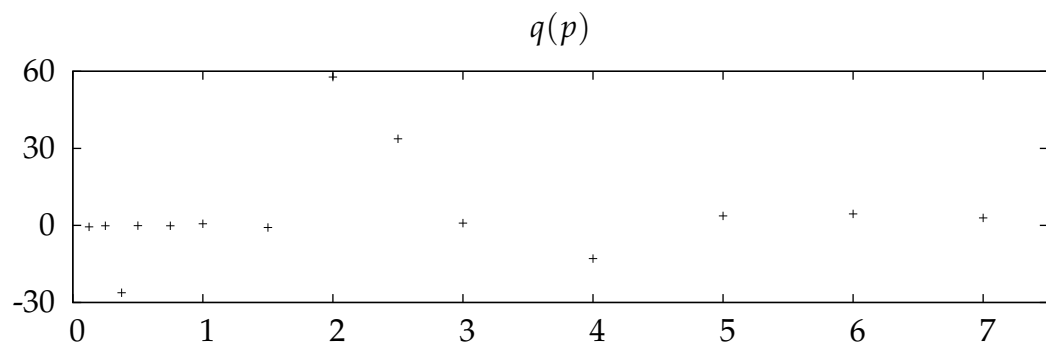
Ich stelle nun die Ergebnisse aus dem nichtlinearen Fit für das 45x256-Gitter vor. Die Polynomentwicklung nach Gleichung (4.22) wurde nach der Ordnung 30 abgebrochen. Höhere Ordnungen liegen theoretisch zwar näher an der tatsächlichen Strukturfunktion, ergeben aber numerisch keine genaueren Werte für die Parameter. Das Zentrum der Entwicklung r_c setze ich analog zu den Überlegungen in Abschnitt 4.3.1 wieder auf den Mittelpunkt des Fitintervalls. Der am Ende des vorhergehenden Abschnitts diskutierte Startparameter für q wurde bei allen Funktionstypen auf p gesetzt. Dies entspricht den Daten am besten. Für jeden Funktionstyp zeige ich Beispielfits, um uns zu vergewissern, dass die Fits sinnvolle Funktionen liefern: $S_{p=0.5}(r)$ steht dabei repräsentativ für alle $S_p(r)$ mit $p < 2$ und $S_{p=5}(r)$ für alle $S_p(r)$ mit $p > 2$. Ebenso stelle ich die Entwicklung des Exponenten und der weiteren Parameter mit steigender Ordnung der Strukturfunktion dar. Werte für Parameter, die zu groß werden, werden im Plot nicht dargestellt, können aber anhand der tabellarischen Übersicht über die Parameter ausfindig gemacht werden.

abcq-Fit

abcq - Beispielfits



abcq - Entwicklung der Parameter

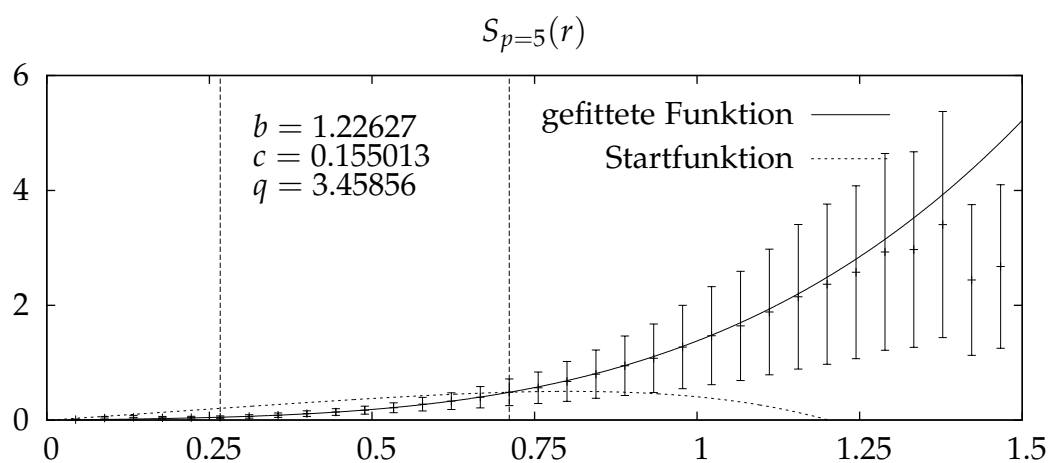
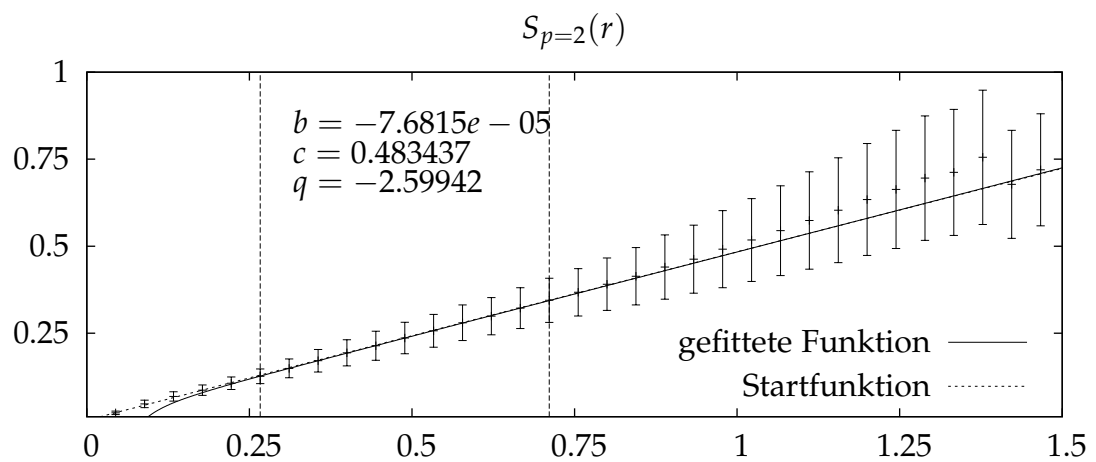
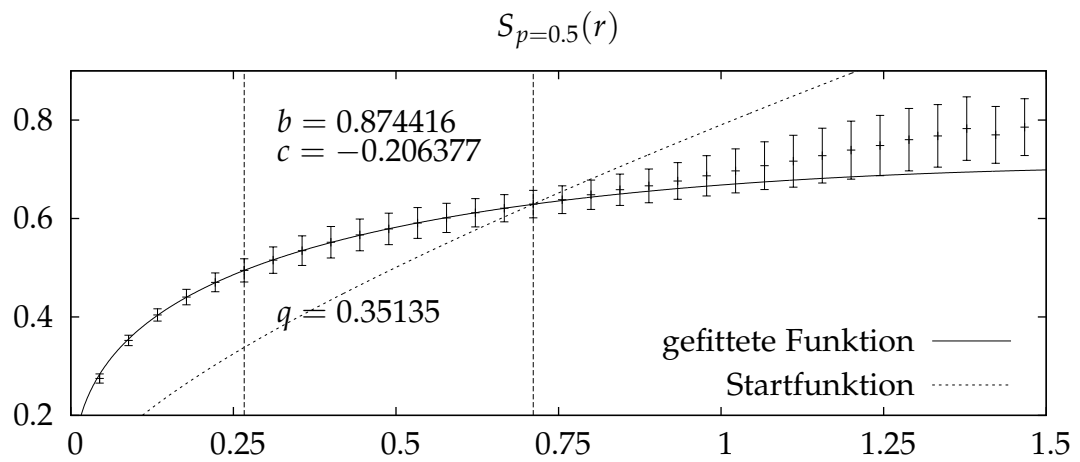


p	a	b	q	c
0.125	0.923695	-0.0504485	-0.558383	0.0126339
0.25	1.53269	-0.714251	-0.123454	-0.0223965
0.375	0.532304	-1.27927e-17	-26.2293	0.235278
0.5	2.02039	-1.34797	-0.0941584	0.00117276
0.75	1.37885	-0.859587	-0.136062	0.0778426
1	-0.0219477	0.920942	0.622674	-0.359413
1.5	0.151626	-0.0230233	-0.818377	0.372498
2	-0.00235572	134643	57.7535	0.486682
2.5	-0.0524462	-183.564	33.7427	0.52538
3	0.103389	-3.97837	0.90195	4.42573
4	-0.177687	-1.73581e-10	-12.9144	0.73878
5	-0.0179273	1.2103	3.69685	0.228374
6	-0.0161502	2.53898	4.46261	0.269889
7	0.27559	4.53373	2.94174	-1.02617

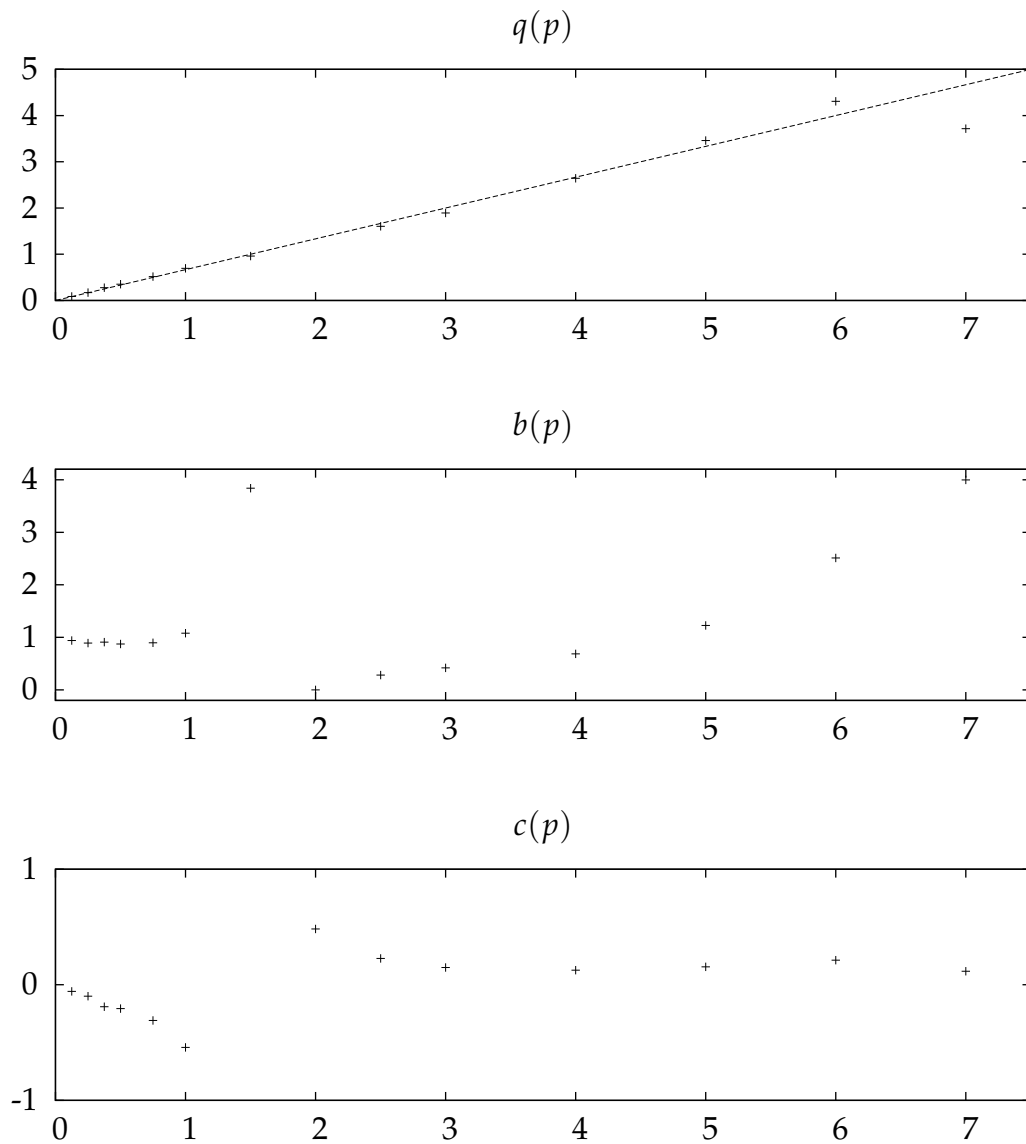
Der abcq-Fit liefert durchweg Funktionen, die dem Verlauf der Datenpunkte im Fitbereich folgen. Die Parameter sind weit gestreut. Der Exponent q scheint keiner Regelmäßigkeit zu folgen und deckt einen großen Wertebereich ab. Weder $q = p$ noch $q = \min(p, 1)$ sind erkennbar. Diese Regellosigkeit zeigt sich auch bei den weiteren Parametern. Eine Variation der Startparameter führt zu keinem qualitativ anderen Ergebnis. Insgesamt kann mit dem abcq-Fit in Bezug auf die Vorhersage keinerlei Aussage getroffen werden.

bcq-Fit

bcq - Beispielfits



bcq - Entwicklung der Parameter



p	a	b	q	c
0.125	0	0.939739	0.0875003	-0.0572316
0.25	0	0.891785	0.170014	-0.0983171
0.375	0	0.909537	0.278106	-0.190228
0.5	0	0.874416	0.35135	-0.206377
0.75	0	0.89791	0.516433	-0.308787
1	0	1.07995	0.694946	-0.541282

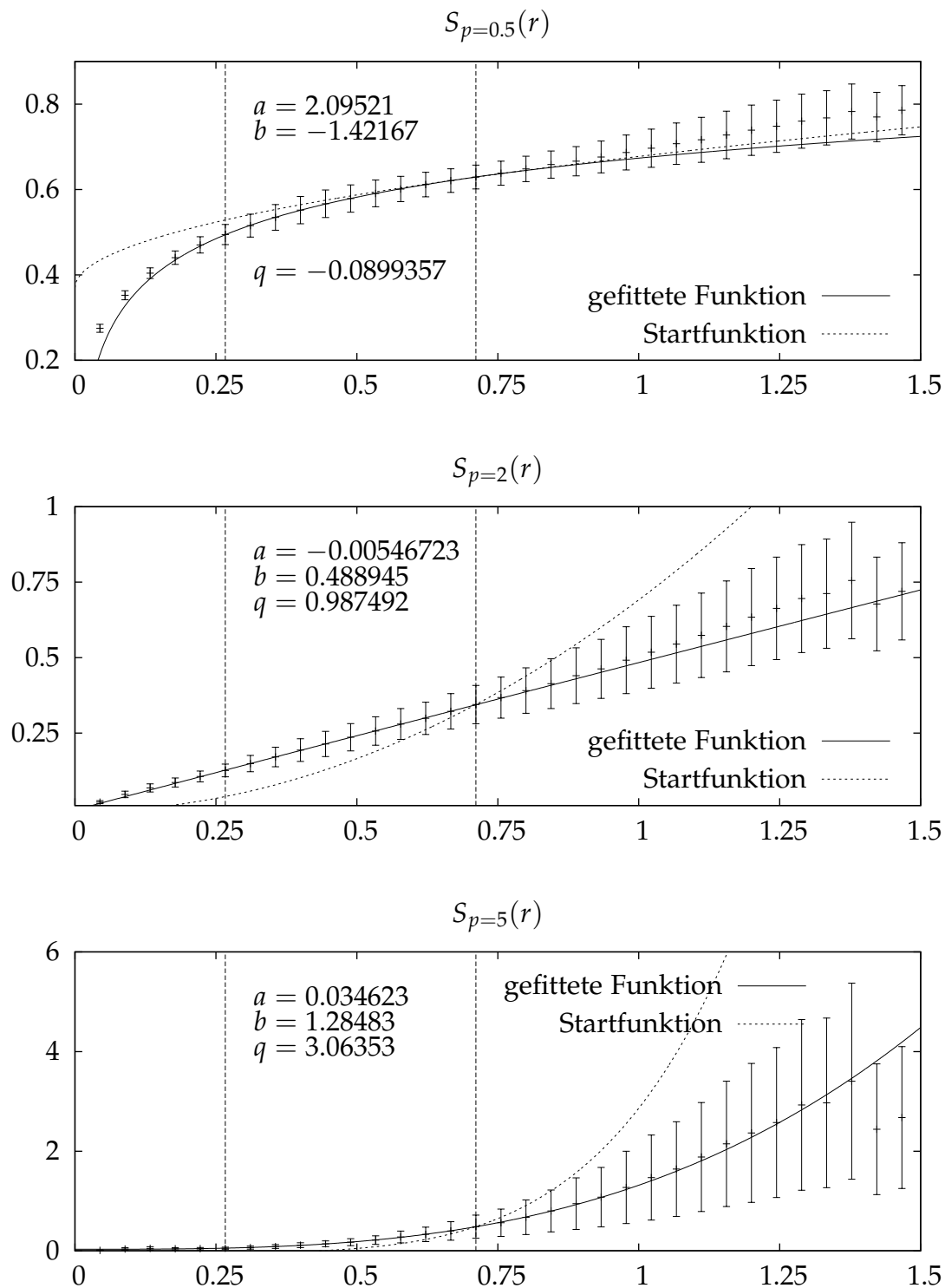
p	a	b	q	c
1.5	0	3.83876	0.961911	-3.34663
2	0	-7.6815e-05	-2.59942	0.483437
2.5	0	0.281536	1.60481	0.227953
3	0	0.418518	1.89375	0.149439
4	0	0.686233	2.64211	0.126247
5	0	1.22627	3.45856	0.155013
6	0	2.51254	4.30663	0.212623
7	0	3.99757	3.71697	0.116651

Der bcq-Fit liefert gute Funktionen, die auch über den Fitbereich hinaus die Daten erstaunlich gut beschreiben. Der Exponent q folgt bis auf den Ausreißer bei $p = 2$ einer Geraden mit einer Steigung von ungefähr $2/3$. Diese Gerade ist in den Graphen für die Entwicklung von q mit eingezeichnet. Der Ausreißer bei $p = 2$ lässt sich damit begründen, dass der gerade Verlauf der Funktion sowohl durch den linearen Term cr als auch durch den Potenzterm bx^p beschrieben werden kann. In diesem Fall hat der Fit den linearen Term vorgezogen und sich in der Folge mit $|b| \ll |c|$ entwickelt. Da bx^p nun praktisch vernachlässigbar ist, kann der Exponent jeden beliebigen Wert annehmen. Bei $p = 1.5$ zeigt sich bei c und b ebenfalls ein Ausreißer. Die Funktion hat auch hier schon überwiegend eine lineare Entwicklung. Diesmal hat q allerdings einen Wert nahe an 1. Damit teilen sich der lineare und der Potenzterm die lineare Entwicklung der Funktion. Dies äußert sich hier allerdings nicht darin, dass b und c gleich große positive Werte hätten. Stattdessen haben sie in etwa gleich große Werte mit entgegengesetztem Vorzeichen. Die Differenz von b und c ist die tatsächliche Steigung der Funktion. Für $p > 2$ bekommt der Potenzterm gegenüber dem linearen Term wieder mehr Gewicht, damit sich die positive Krümmung einstellen kann, die nötig ist, um die Daten zu beschreiben. Ebenfalls ist zu sehen, dass für $p < 1$ zunächst der Potenzterm dominiert und der lineare Term mit einem negativen c um ein Abflachen der Funktion für große r bemüht ist.

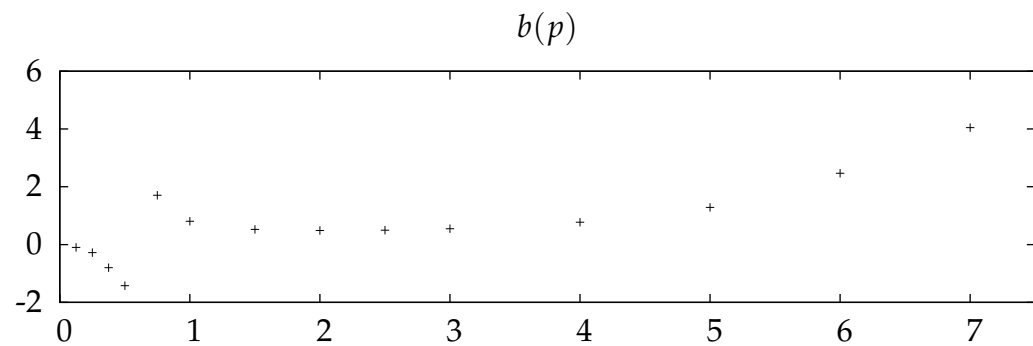
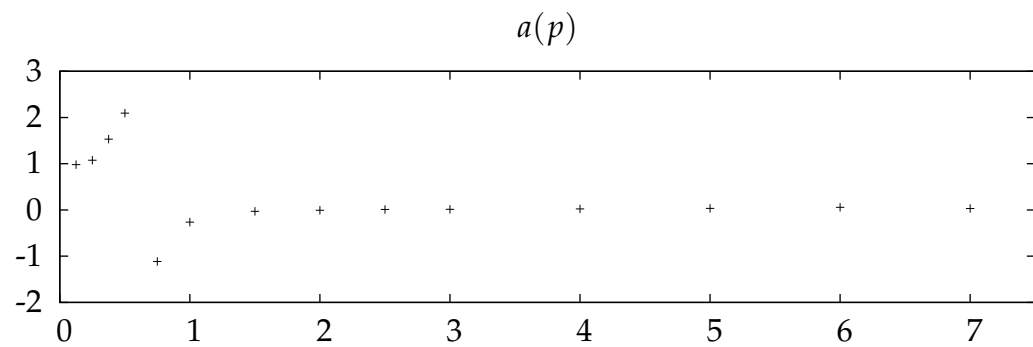
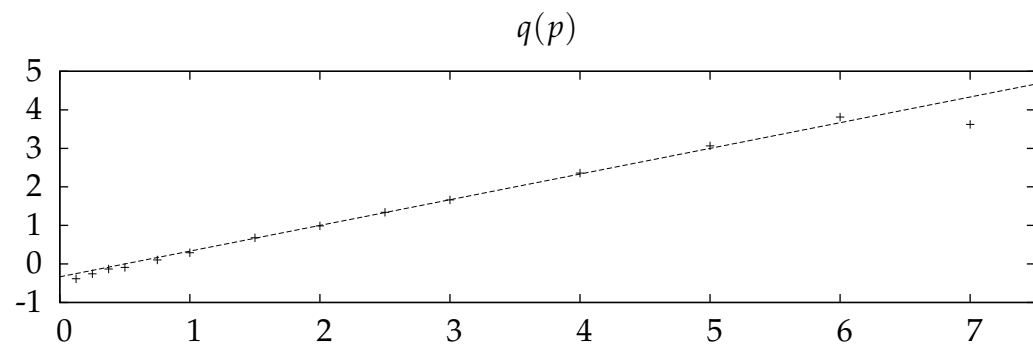
Insgesamt ist der bcq-Fit in der Lage, die Daten gut zu beschreiben. Es zeigt sich $q \approx \frac{2p}{3}$.

abq-Fit

abq - Beispielfits



abq - Entwicklung der Parameter



p	a	b	q	c
0.125	0.981521	-0.0965088	-0.382038	0
0.25	1.07631	-0.279185	-0.253943	0
0.375	1.53103	-0.801106	-0.130195	0
0.5	2.09521	-1.42167	-0.0899357	0
0.75	-1.11432	1.7086	0.105997	0
1	-0.261928	0.80551	0.291113	0

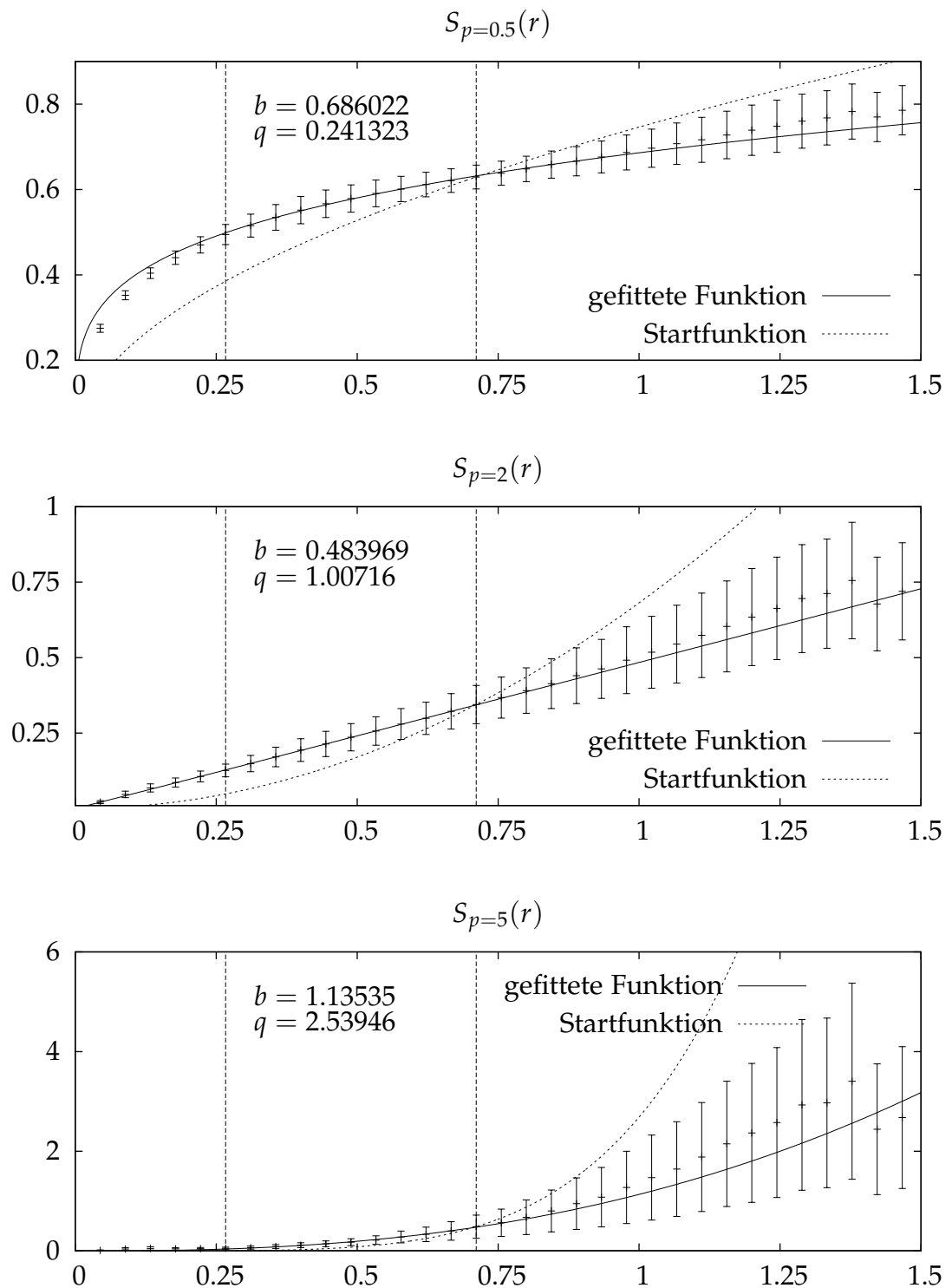
p	a	b	q	c
1.5	-0.0297901	0.5235	0.677965	0
2	-0.00546723	0.488945	0.987492	0
2.5	0.0103445	0.497002	1.34116	0
3	0.0135889	0.550389	1.66413	0
4	0.0215855	0.774887	2.35788	0
5	0.034623	1.28483	3.06353	0
6	0.0559838	2.46666	3.81283	0
7	0.0323101	4.04689	3.62275	0

Die Fits sehen hier erneut gut aus und legen sich über die Fitgrenzen hinweg passend durch die Daten. Für $p < 0.75$ entscheidet sich der Fit für einen sehr großen Offset $a \sim 1$ und ein negatives q . Dies hat wiederum ein negatives b zur Folge. Dieses Verhalten liegt leider außerhalb unserer Kontrolle, wie Fits mit modifizierten Startwerten zeigen. Ab circa $p = 2$ ergibt sich ungefähr ein verschwindendes a . Dies ist sinnvoll, wenn man sich die Strukturfunktionen ansieht. Ansonsten wird q wieder durch eine Gerade beschrieben, diesmal allerdings mit einem negativen Offset ≈ -0.33 . Die Gerade ist wieder in dem Graphen für q eingezeichnet.

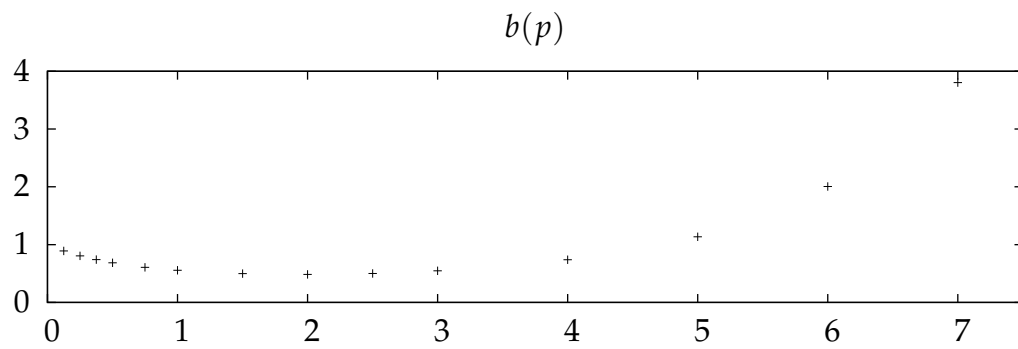
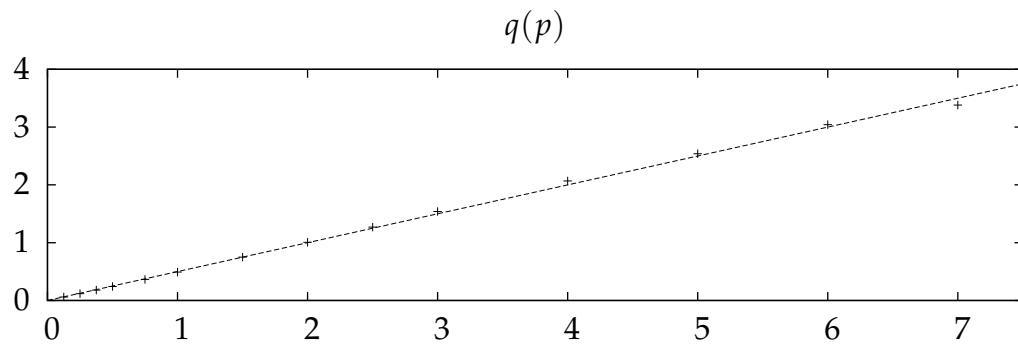
Damit beschreibt auch der abq-Fit die Daten adäquat; diesmal mit einem Exponenten $q \approx \frac{2p}{3} - \frac{1}{3}$.

bq-Fit

bq - Beispielfits



bq - Entwicklung der Parameter



p	a	b	q	c
0.125	0	0.890579	0.0589406	0
0.25	0	0.805664	0.118404	0
0.375	0	0.73976	0.180183	0
0.5	0	0.686022	0.241323	0
0.75	0	0.606982	0.364205	0
1	0	0.555236	0.491583	0
1.5	0	0.499029	0.74955	0
2	0	0.483969	1.00716	0
2.5	0	0.499837	1.27052	0
3	0	0.548028	1.53974	0
4	0	0.738264	2.06874	0
5	0	1.13535	2.53946	0

p	a	b	q	c
6	0	2.00509	3.04158	0
7	0	3.80416	3.38201	0

Auch der bq-Fit führt zu schlüssigen Fits. Da nur noch zwei Parameter variiert werden, sehen die Werte für diese ein Stück ruhiger aus als bei den anderen Funktionstypen. Der Verlauf von q ergibt sich in etwa zu $q \approx \frac{p}{2}$.

Vergleich der Funktionstypen

Lassen wir den abcq-Fit außen vor, sind wir in der Lage, einen Exponenten für das 45x256-Gitter zu extrahieren. Der bq-Fit führt zu $q \approx \frac{p}{2}$. Erweitern wir den Ansatz durch einen linearen Term im Zuge des bcq-Fits, erhalten wir $q \approx \frac{2p}{3}$. Die Änderung resultiert daraus, dass der bcq-Fit den linearen Anteil der Strukturfunktionen auf den vorhandenen linearen Term abwälzen kann, während beim bq-Fit dieser lineare Anteil zusätzlich vom Potenzterm getragen werden muss. Deshalb ist dem bcq-Exponenten vermutlich der Vorzug zu gewähren.

Interessant ist die Reaktion des Fits, wenn wir bq durch einen Offset a erweitern. Der abq-Fit zeigt für die Entwicklung von q eine ähnliche Steigung wie der bcq-Fit, allerdings ist die Gerade verschoben. Womöglich nutzt auch hier der Fit den weiteren freien Parameter, um die linearen Anteile der Funktion herauszufiltern und an a zu übergeben. Da der Offset aber eine andere Funktion als ein linearer Term hat, ist der Exponent gezwungen, ebenso anders zu reagieren.

Erwähnenswert ist noch folgende Tatsache: bq hat einen festen Offset von 0 und der Offset von abq ist für große p sehr klein. Dass sich trotzdem eine deutliche Verschiebung der Exponenten ergibt, zeigt, dass diese sehr sensibel auf eine Änderung des Offsets reagieren. Prinzipiell ist in jedem Fall ein positiver Exponent wahrscheinlich. Es ist deshalb ebenso wahrscheinlich, dass die Abweichung der Strukturfunktionen vom Potenzterm besser durch einen linearen Term beschrieben werden können als durch einen Offset. Dies zeigt jedenfalls der Vergleich mit dem bcq-Fit, welcher durchweg positive Exponenten liefert.

Der abcq-Fit hat gegenüber bq gleich zwei weitere freie Parameter und kann sich offenbar gar nicht entscheiden, welchem Parameter denn nun der lineare Anteil auf-

gebürdet werden soll. Vielmehr ist der Fit auf eine bestimmte Form des Potenzterms überhaupt nicht mehr angewiesen, um die Strukturfunktionen zu beschreiben. Die Folge ist ein völlig willkürliches Verteilen der Anteile auf alle sich gegenseitig beeinflussenden Parameter.

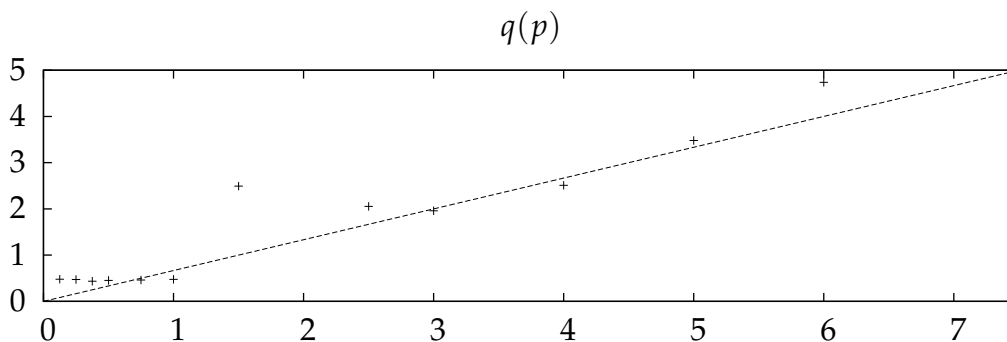
Insgesamt führt der Fit der Polynomentwicklung der Strukturfunktion nach Gleichung (4.22) zu sinnvollen Ergebnissen. Im nächsten Abschnitt wollen wir deshalb untersuchen, ob ein direkter Fit der Strukturfunktionen nicht doch möglich ist.

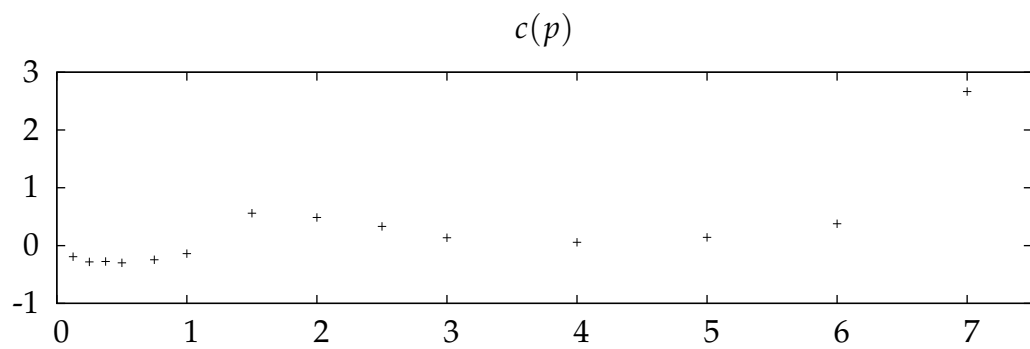
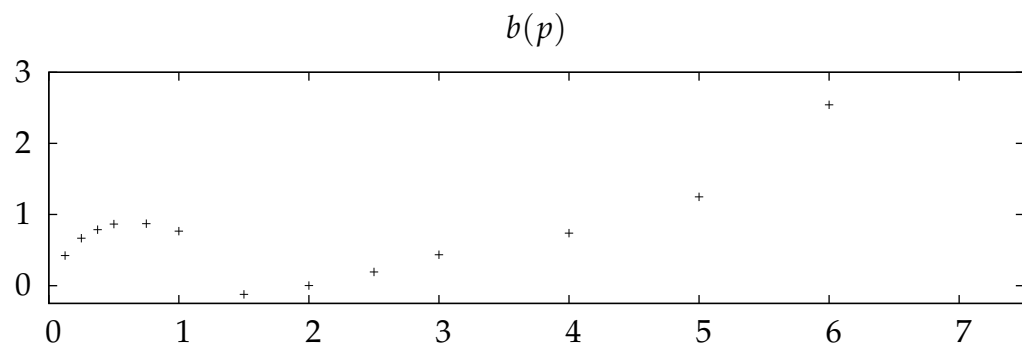
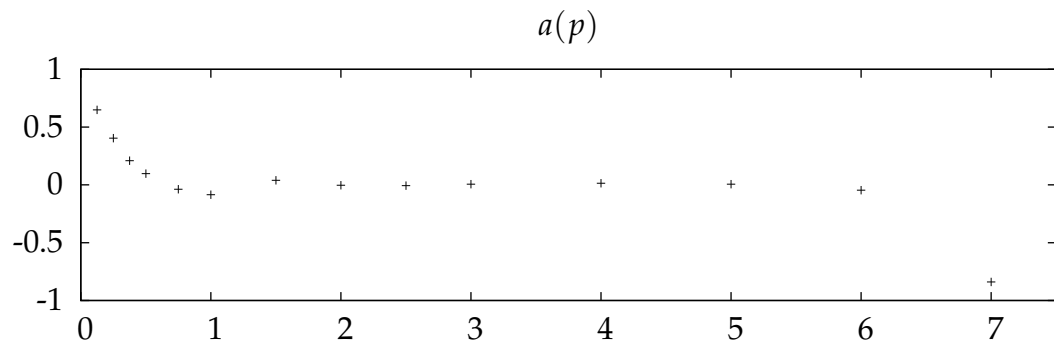
4.5 Idee 2.5: Direkter Fit

Beim direkten Fit werden die Parameter a , b , c und q selbst variiert. Aufgrund des Exponenten ist dieser Fit wiederum nicht in allen Parametern linear, aber wir können auf die bereits erarbeiteten Methoden zurückgreifen. Die Ergebnisse stelle ich ohne die Beispielfits dar, da sich daraus keine neuen Erkenntnisse ableiten lassen. Die Fits sehen aus wie beim Polynomentwicklungsfit.

4.5.1 Auswertung des 45x256-Gitters

abcq-Fit



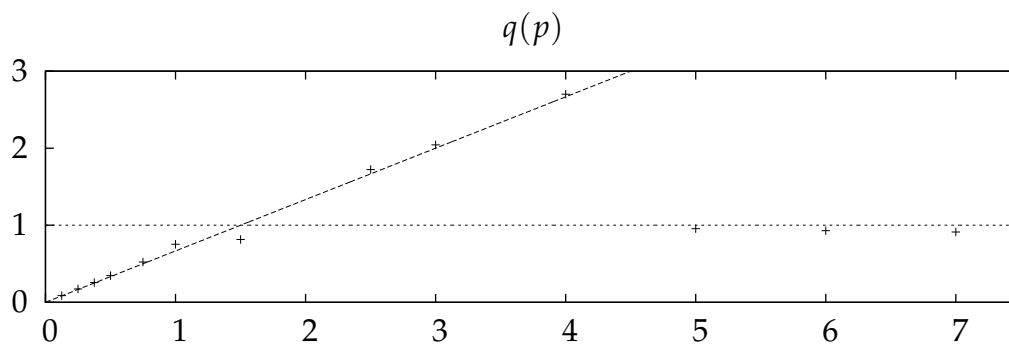


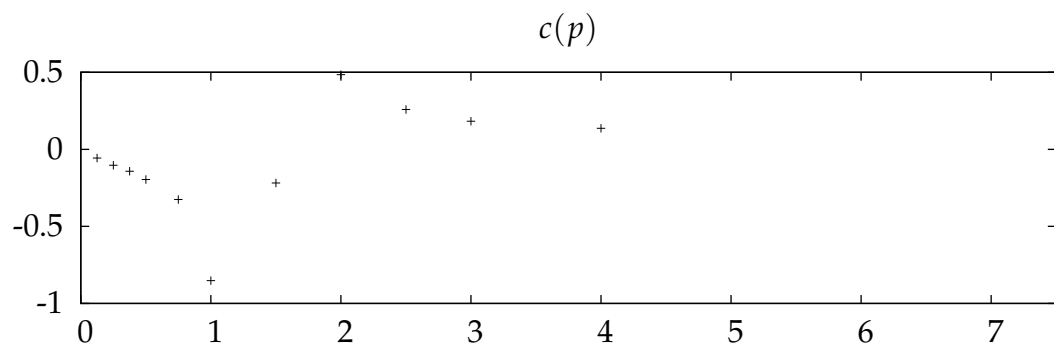
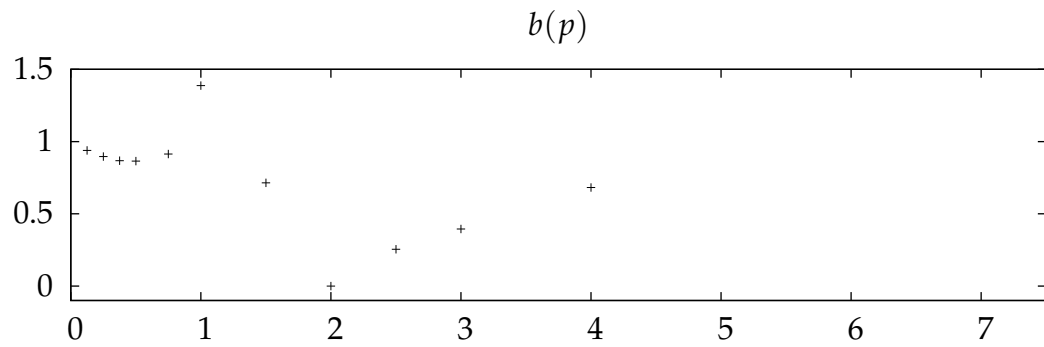
p	a	b	q	c
0.125	0.648692	0.422508	0.479516	-0.191584
0.25	0.404025	0.667969	0.473705	-0.282711
0.375	0.209584	0.787718	0.435222	-0.275175
0.5	0.0978136	0.866503	0.452864	-0.297308
0.75	-0.0376022	0.871295	0.460819	-0.244195
1	-0.0850934	0.766432	0.475333	-0.139608
1.5	0.0394234	-0.122562	2.49223	0.559845

p	a	b	q	c
2	-0.00233693	0.00109887	28.8573	0.486789
2.5	-0.00595727	0.193499	2.05302	0.331082
3	0.00668856	0.435344	1.95998	0.136147
4	0.0147323	0.739143	2.50934	0.0562462
5	0.00608659	1.24816	3.47842	0.141431
6	-0.0453727	2.54184	4.73743	0.377679
7	-0.839323	6219.18	1229.19	2.66543

Der abcq-Fit ist hier gar nicht mal so schlimm. Für $p = 3, 4, 5$ lässt sich sogar das Verhalten des Exponenten nach $q \approx \frac{2p}{3}$ wiedererkennen. Darüber hinaus zeigt sich aber auch wieder die Wechselhaftigkeit des Fits. Der Ausreißer bei $p = 2$ folgt auch hier wieder aus der Linearität der Strukturfunktion und der Möglichkeit des Fits, sich beliebig an diesen Umstand anpassen zu können.

bcq-Fit



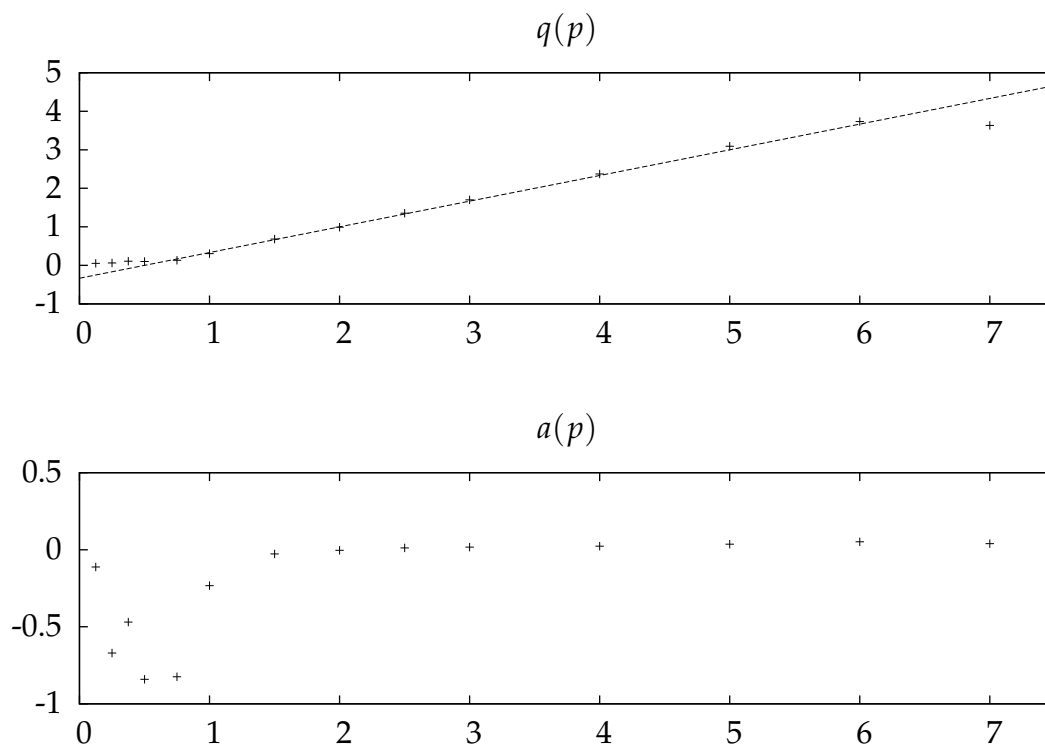


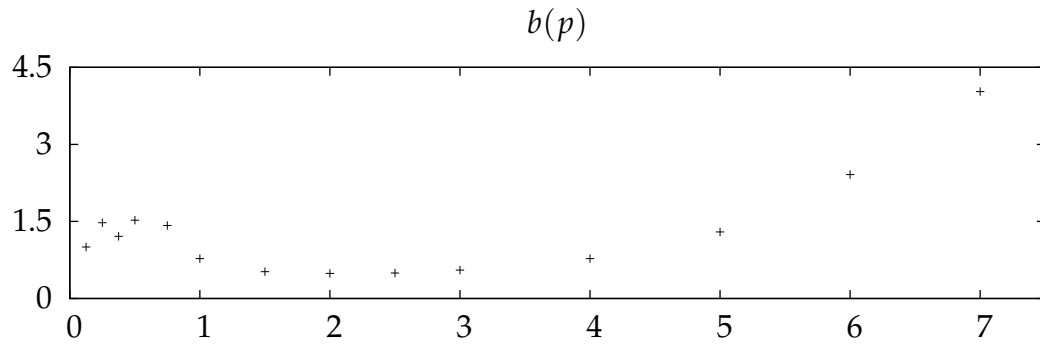
p	a	b	q	c
0.125	0	0.939056	0.0871358	-0.05641
0.25	0	0.89603	0.172499	-0.103023
0.375	0	0.867113	0.257023	-0.142279
0.5	0	0.864569	0.34633	-0.195799
0.75	0	0.914105	0.522952	-0.325566
1	0	1.38777	0.753646	-0.852331
1.5	0	0.714501	0.81487	-0.218336
2	0	-0.000677559	-0.768352	0.48459
2.5	0	0.254714	1.72166	0.25826
3	0	0.394552	2.04219	0.182348
4	0	0.681681	2.70136	0.136771
5	0	-11.6582	0.954834	12.4688
6	0	-12.5181	0.929714	13.7389

p	a	b	q	c
7	0	-27.4428	0.912734	29.9259

Dieser Fit zeigt das bemerkenswerte Resultat, dass sich die Bifraktalität des Exponenten erahnen lässt. Der Exponent folgt hier erneut über weite Strecken dem $q \approx \frac{2p}{3}$ -Verlauf, springt aber für große p auf einen Wert nahe bei 1. Allerdings konvergiert die Fitroutine dabei nicht, sondern bricht nach einer vorher eingestellten Maximalanzahl an Iterationen ab. Dass alle drei Strukturfunktionen in der Nähe von 1 landen, gibt aber Grund zur Hoffnung, dass dort ein richtiges Minimum zu finden ist. Bei $p = 1.5$ könnte man wohlwollend ein Abflachen des bisherigen Verlaufs erahnen. Ich werde nach der Analyse der verbleibenden Funktionstypen auf den bcq-Fit noch einmal zurückkommen.

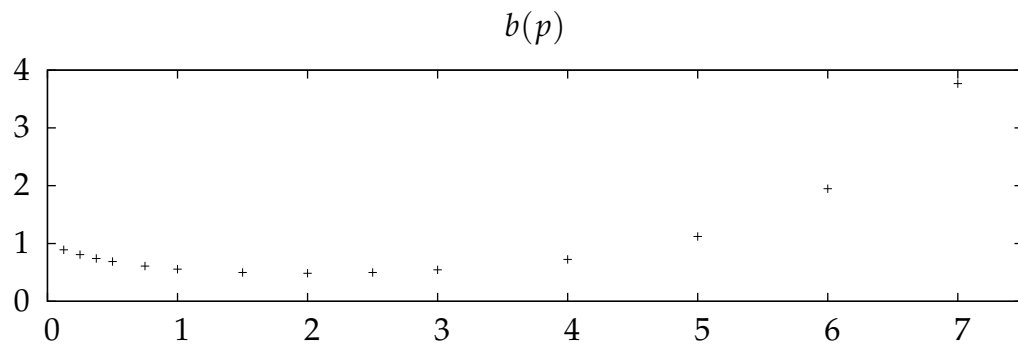
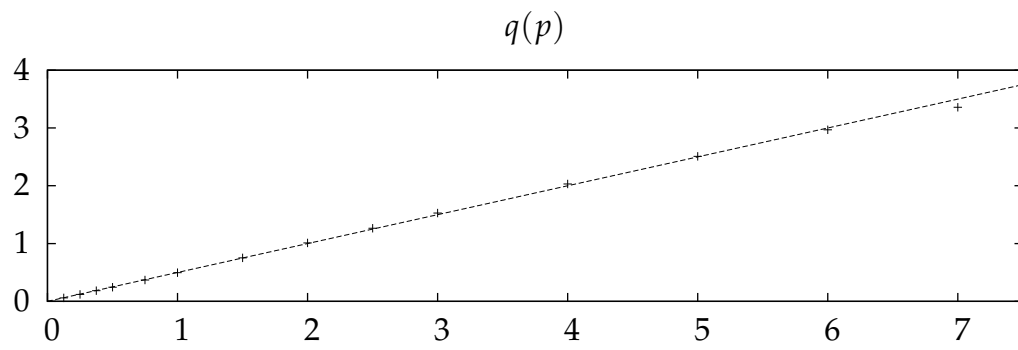
abq-Fit





p	a	b	q	c
0.125	-0.112355	1.00357	0.0532591	0
0.25	-0.670541	1.47532	0.0625554	0
0.375	-0.469002	1.20878	0.107179	0
0.5	-0.840924	1.52356	0.0994096	0
0.75	-0.824565	1.42106	0.130959	0
1	-0.233466	0.777679	0.304345	0
1.5	-0.0274044	0.521389	0.682747	0
2	-0.00400062	0.48772	0.992451	0
2.5	0.0122136	0.496645	1.35485	0
3	0.0172271	0.552019	1.70208	0
4	0.0228026	0.776279	2.37219	0
5	0.0361776	1.29534	3.09336	0
6	0.0517507	2.41127	3.7314	0
7	0.0392259	4.0274	3.63278	0

Der abq-Fit reproduziert das Ergebnis des Polynomentwicklungsfits mit einem “verschobenen” Exponenten $q \approx \frac{2p}{3} - \frac{1}{3}$. Hier wird allerdings ein negatives q für kleine p vermieden, indem a , statt große Werte anzunehmen, negativ wird. Der resultierende kleine Wert für q wird durch ein großes b ausgeglichen.

bq-Fit

p	a	b	q	c
0.125	0	0.891247	0.0602172	0
0.25	0	0.806764	0.12075	0
0.375	0	0.741201	0.183501	0
0.5	0	0.687305	0.244648	0
0.75	0	0.60857	0.368869	0
1	0	0.556653	0.496243	0
1.5	0	0.49962	0.751701	0
2	0	0.48549	1.01075	0
2.5	0	0.498502	1.26514	0
3	0	0.545017	1.52817	0
4	0	0.72533	2.03079	0
5	0	1.12119	2.50973	0

p	a	b	q	c
6	0	1.94708	2.96804	0
7	0	3.76621	3.35768	0

Der bq-Fit ist ein Spiegelbild des entsprechenden Polynomentwicklungsfits mit $q \approx \frac{p}{2}$.

Verbesserung des bcq-Fits

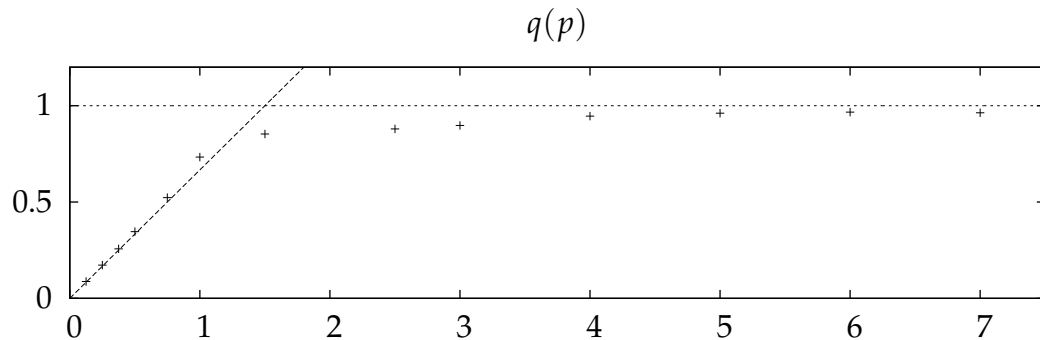
Der bcq-Fit hat die Hoffnung genährt, das bifraktale Verhalten des Exponenten extrahieren zu können. Sämtliche Fits legen den Schluss nahe, dass sich der Exponent generell gemäß

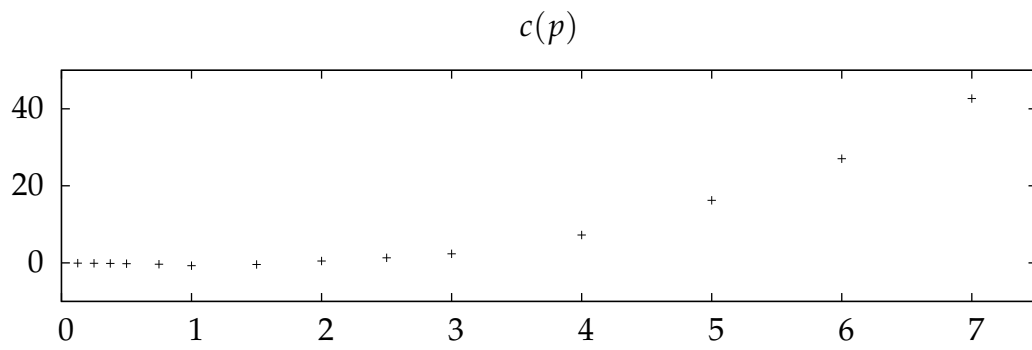
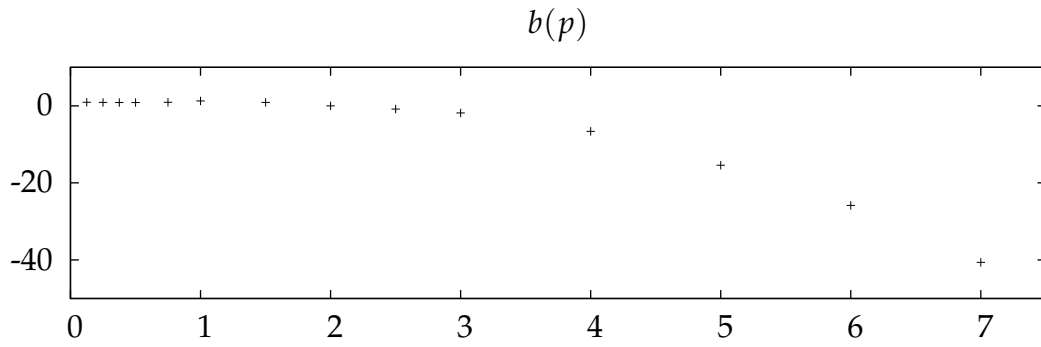
$$q \approx \frac{2p}{3} \quad (4.26)$$

verhält. Unter Berücksichtigung des bisherigen bcq-Fits wäre bezüglich der Bifraktalität

$$q \approx \min\left(\frac{2p}{3}, 1\right) \quad (4.27)$$

denkbar. An Stelle von $q = p$ wollen wir dem bcq-Fit diesen Ansatz nun direkt übergeben:





p	a	b	q	c
0.125	0	0.939056	0.0871358	-0.05641
0.25	0	0.89603	0.172499	-0.103023
0.375	0	0.867113	0.257023	-0.142279
0.5	0	0.864569	0.34633	-0.195799
0.75	0	0.914105	0.522952	-0.325566
1	0	1.27257	0.733071	-0.737603
1.5	0	0.909938	0.853236	-0.41331
2	0	-0.000720737	-0.726535	0.484659
2.5	0	-0.847583	0.879468	1.33774
3	0	-1.84226	0.897531	2.36021
4	0	-6.61235	0.945721	7.23563
5	0	-15.4078	0.961145	16.2569
6	0	-25.848	0.966498	27.056

p	a	b	q	c
7	0	-40.6341	0.962932	42.6456

Ein Startparameter für q in der Umgebung von Gleichung (4.27) führt zu demselben Ergebnis. Bei $p = 2$ findet sich unser obligatorischer Ausreißer. Es kann ein bifraktaler Exponent beobachtet werden, welcher Gleichung (4.27) folgt. Die Abhängigkeit der Bifraktalität von den Startwerten des Fits legt nahe, dass sich die bifraktale Lösung nur auf einen kleinen, lokalen Bereich des Lösungsraums beschränkt. Andernfalls entwickelt sich der Exponent linear gemäß Gleichung (4.26).

Die Parameter b und c teilen sich dabei die Aufgabe, die Steigung der linearen Strukturfunktionen zu bestimmen. Dies tun sie auf eine bereits beschriebene, in ihrer Art aber merkwürdigen Weise. b und c haben ein entgegengesetztes Vorzeichen und werden für zunehmende p betragsmäßig immer größer. Obwohl die Steigung im Vergleich zu den Werten für b und c ein kleiner Wert ist, ergibt sie sich aus der Summe dieser beiden Werte.

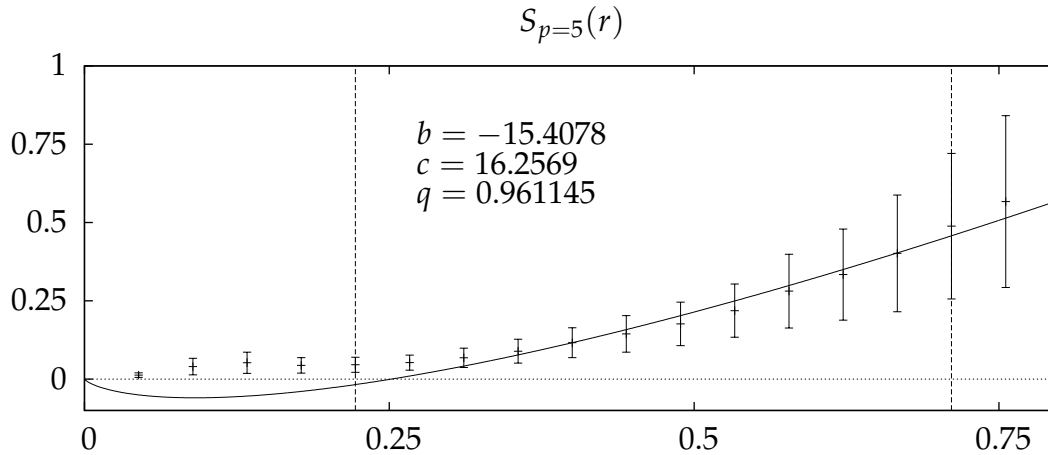
Für alle Fits, die einen Exponenten nahe 1 erzeugen, konvergiert das Fitverfahren erneut nicht. Eine kleine Tabelle zum siebten Moment:

Iterationen	χ^2	q	b	c	$b + c$
200 (standard)	0.00088874	0.962932	-40.6341	42.6456	2.0115
400	0.00088849	0.989161	-140.806	142.821	2.015
800	0.00088841	0.997104	-529.118	531.135	2.017

Erhöht man die Anzahl der erlaubten Iterationen, erweckt dies den Eindruck, dass q dadurch gegen 1 konvergiert. Gleichzeitig werden die Beträge von c und b immer größer, allerdings bleibt ihre Differenz nahezu erhalten. χ^2 verkleinert sich für eine zunehmende Anzahl an erlaubten Iterationen nur minimal, so dass nicht abzusehen wäre, dass sich die Funktion zu einem deutlichen Minimum hin entwickelt. Man könnte vermuten, dass das Minimum für unendlich viele Iterationen bei $q = 1$ und bei unendlichem c und b liegen wird. Dabei strebt $b + c$ allerdings ebenso gegen einen endlichen Grenzwert ≈ 2.02 . Es ist für $b + c$ eine verlangsamende Tendenz zu erkennen, auch wenn wir unsere kleine Messreihe in dieser Hinsicht nicht überstra-

pazieren sollten.

Gehen wir der Angelegenheit weiter auf den Grund, stellen wir fest, dass der bcq-Fit für große p ein bisschen schummelt, wenn er einen Exponenten nahe 1 liefert. Dazu sei der Fit des fünften Moments gezeigt:



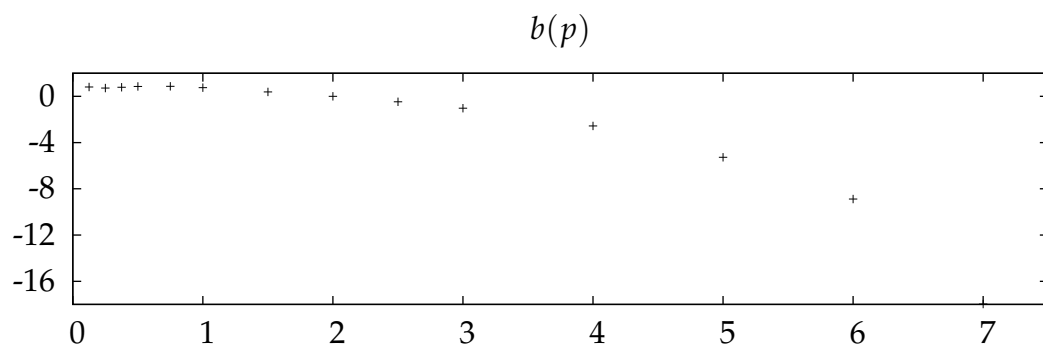
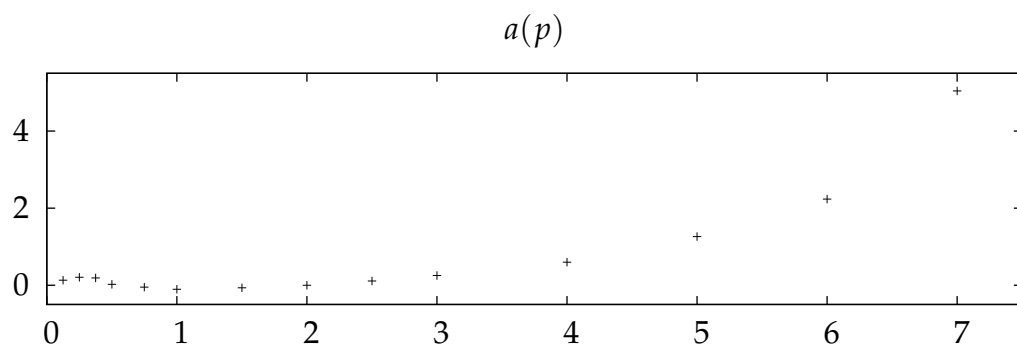
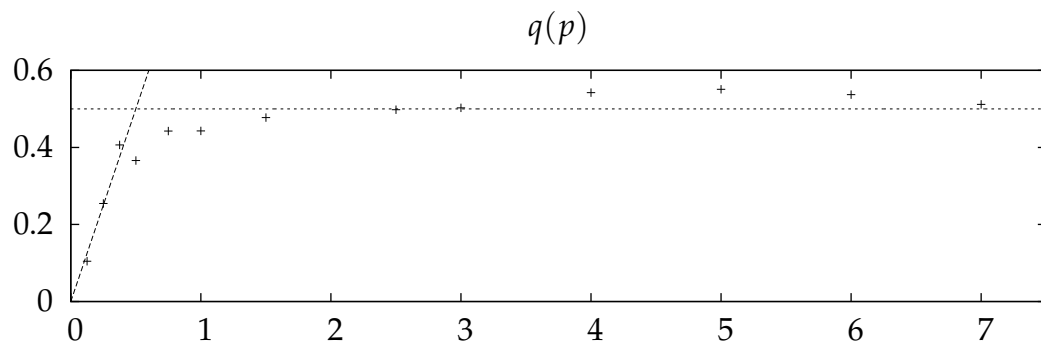
Das verschwindende a wird eingehalten, jedoch erzeugt sich die Funktion für den Fitbereich in der dargestellten Weise eine Art Ersatzoffset. Dies ist nicht gewünscht; vor allem, wenn wir fordern, dass sich der Fit generell nachvollziehbar verhalten soll. In die Berechnung der Strukturfunktion fließt der Absolutbetrag der Geschwindigkeitsdifferenz ein. Negative Werte sind damit nicht möglich. Dennoch können wir damit das konvergierende Verhalten von q bei einer größeren Zahl an Fit-Iterationen besser verstehen. Je größer b wird, desto näher kann q an 1 gewählt werden und trotzdem kann die Funktion ihre leichte Krümmung behalten, die sich halt nun einmal in den Datenpunkten findet.

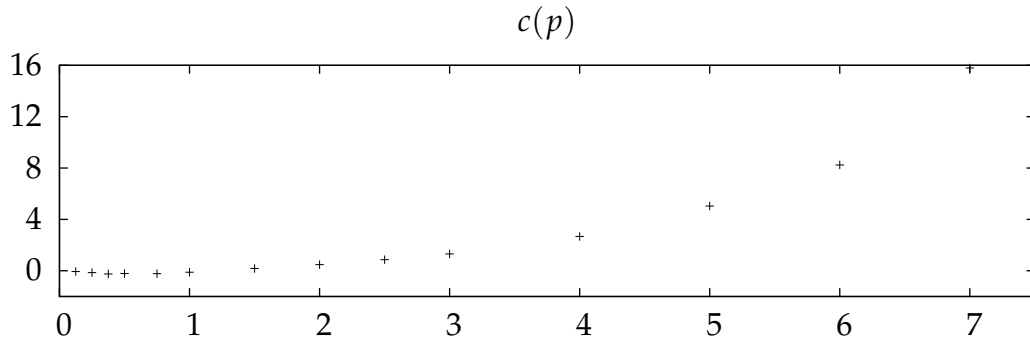
Das Ergebnis dieses bcq-Fits stellt nun die Frage, ob wir auch den bq-Fit in der Hinsicht einstellen können, dass er Bifraktalität zeigt. Dort kommt kein linearer Term vor, stattdessen müssen wir alles mit dem Potenzterm regeln. Ich mache den Versuch, den Startwert für b für $p < 1.5$ auf den Wert zu legen, der sich aus dem normalen bq-Fit ergibt. Für $p \geq 1.5$ setze ich b auf die Summe von b und c aus dem gerade erläuterten bcq-Fit. q erhält den Startwert $\min\left(\frac{2p}{3}, 1\right)$. Aber: Es reproduziert sich das Ergebnis des bisherigen bq-Fits mit $q \approx \frac{2p}{3}$ für alle p .

Allerdings kann der abcq-Fit zum Zeigen einer Bifraktalität animiert werden, indem wir die Rahmenbedingungen des bcq-Fits reproduzieren.

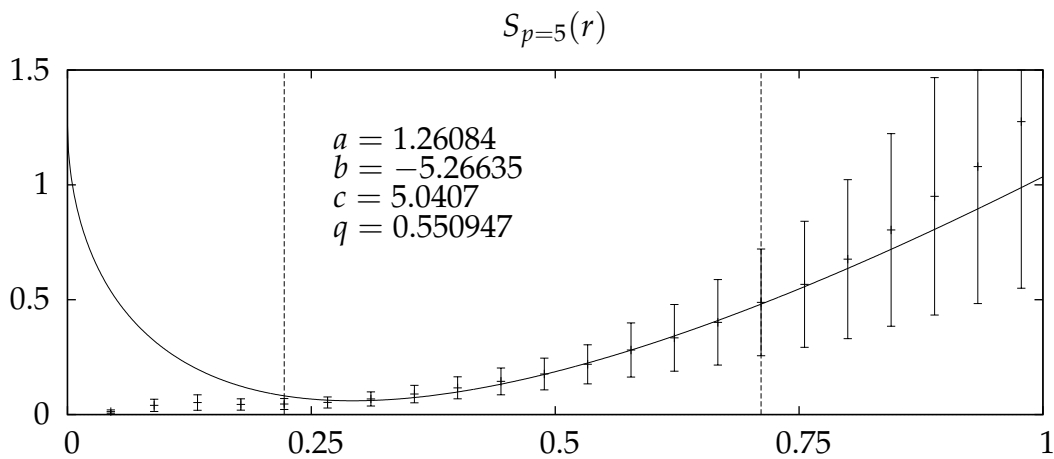
Verbesserung des abcq-Fits und Zusammenfassung

Zu den Startparametern: q wird ein Wert gemäß (4.27) übergeben, a wird auf 0 gesetzt und c und b werden mit den Überlegungen aus Abschnitt 4.4.2 wie gewohnt bestimmt. Ich verzichte auf die Wertetabellen und zeige lediglich die Parameter:





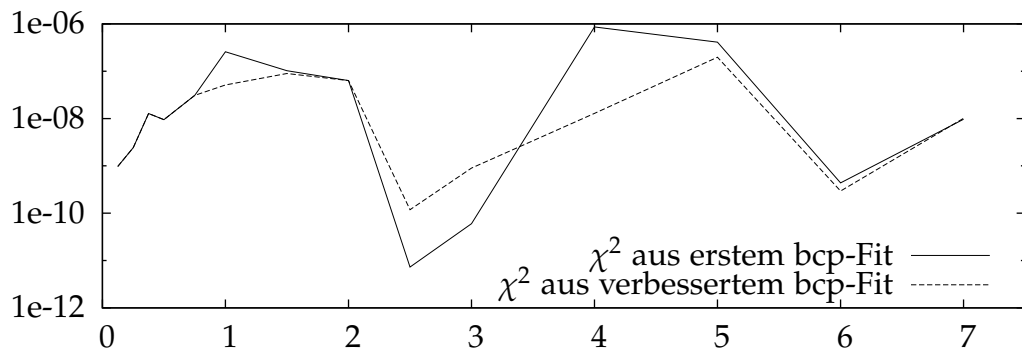
Das generelle Verhalten findet sich auch hier wieder, wenn auch der Exponent $\min(p, \frac{1}{2})$ zu folgen scheint. Die Abweichung liegt hier offensichtlich an dem Offset a . Die vorliegende Krümmung innerhalb der Datenpunkte kann natürlich durch eine Funktion mit einem Offset – aber dafür einem Exponenten $\neq 1$ – besser beschrieben werden. b und c entwickeln sich hier dennoch entgegengesetzt und haben in etwa dieselbe Summe wie b und c aus dem bcq-Fit. Ein Beispielfit sieht folgendermaßen aus:



a sollte nur eine Korrektur darstellen und dementsprechend möglichst klein sein. Auf keinen Fall sollte aus dem Offset ein Verhalten außerhalb des Fitbereichs folgen, welches so drastische Abweichungen von der Erwartung zeigt. Deshalb ist das Ergebnis aus dem bcq-Fit hier vorzuziehen. Bezüglich des Offsets a kann festgehalten werden, dass $a = 0$ der Funktion hilft, die richtige Krümmung zu finden. Zudem erwecken die Strukturfunktionen generell den Eindruck, dass ein Offset für ihre Beschreibung nicht unbedingt nötig ist, wie man sich mit Abbildung 4.2 vergewissern kann.

Die Tatsache, dass die Fits mit linearem Term zu einem bifraktalen Exponenten zu bewegen sind, legt die Vermutung nahe, dass jener Term – zumindest bei unserer Fitroutine – eine Voraussetzung dafür ist. Dieser lineare Term teilt sich mit dem Potenzterm die Linearität der Strukturfunktion zu großen Teilen.

Dass wir eine Lösung gefunden haben, die unserer Erwartung entspricht, heißt nun allerdings nicht, dass wir wirklich das tiefste Minimum von χ^2 durch den Fit gefunden haben. Es ist, wie gesagt, durchaus möglich, dass es für eine andere Parameterkombination ein kleineres χ^2 gibt. Ein Vergleich der Werte von χ^2 aus den beiden bcq-Fits zeigt allerdings, dass der verbesserte Ansatz meist das kleinere oder bei annähernd gleichen Parameterwerten ein gleich großes χ^2 hat. Gerade bei $p = 2.5$ und 3, wo der lineare Bereich anzufangen scheint, ist es allerdings andersherum:



Zur Bewertung der direkten Fits kann gesagt werden, dass diese zu besseren Ergebnissen führen als diejenigen aus der Polynomentwicklung. Durch die direkten Fits kann die gesuchte Bifraktalität beobachtet werden. Die Polynomentwicklungsfits vermögen dies nicht, wie ich feststellen musste. Deshalb ist der direkte Fit in jedem Fall vorzuziehen. Diesen wollen wir nun ebenfalls auf das 1024x32-Gitter anwenden.

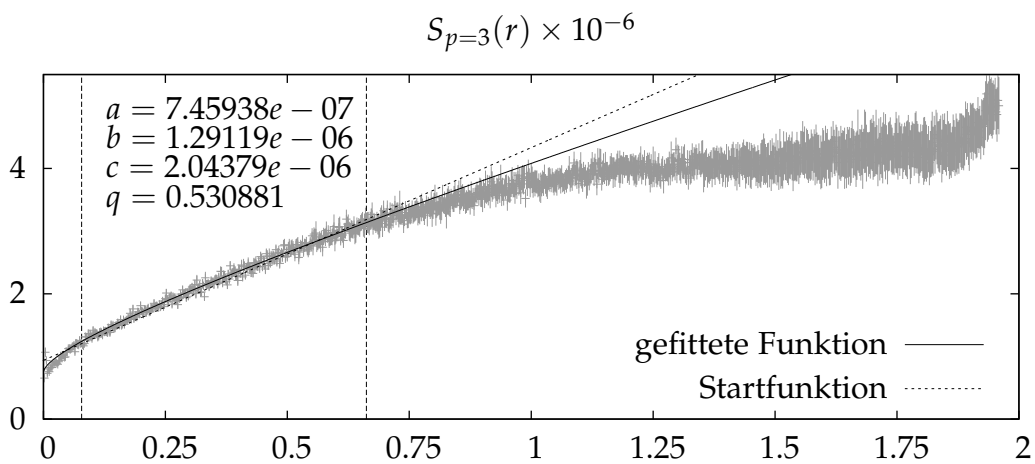
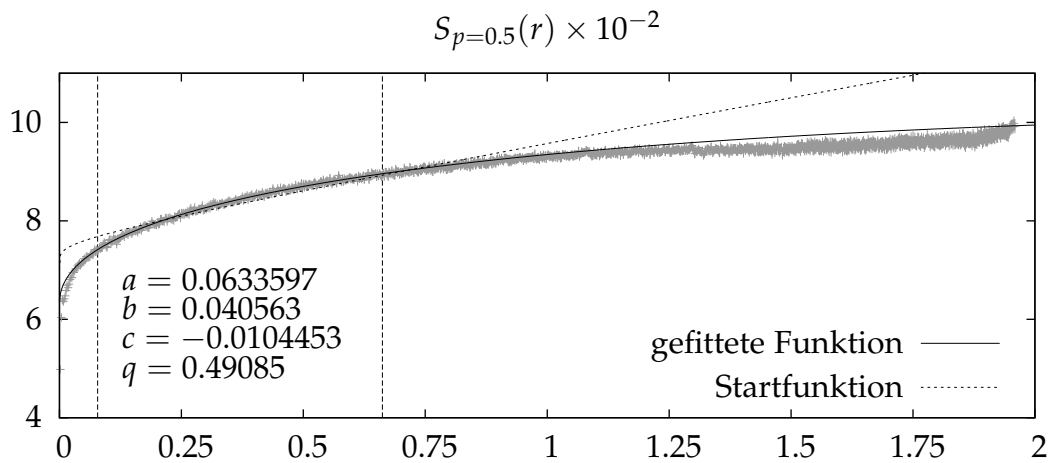
4.5.2 Auswertung des 1024x32-Gitters

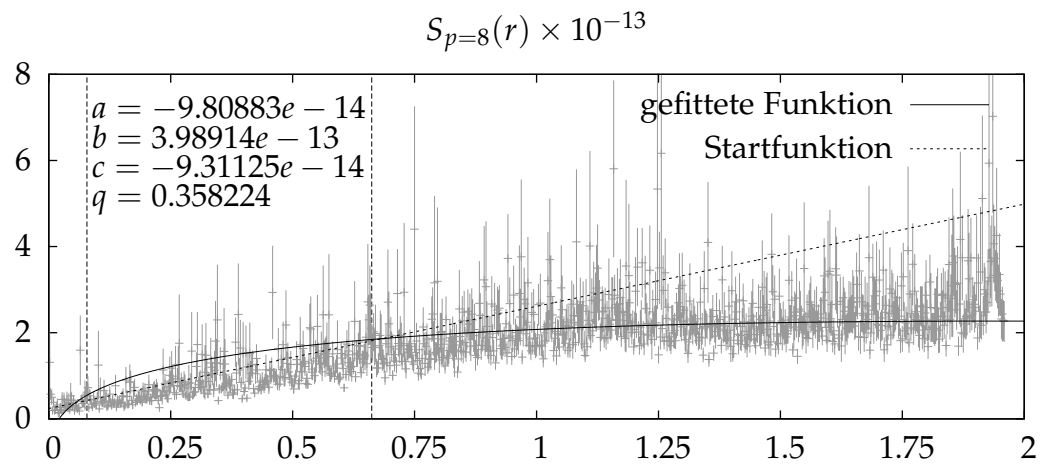
Die Strukturfunktionen gehen hier erst bei etwa $p = 3$ ins Lineare über. Deshalb habe ich zusätzlich zu den bereits erwähnten Stellen die Strukturfunktionen ebenso für $p = 3.5, 4.5, 8, 9, 10$ ausgewertet. Für $p > 3$ behalten die $S_p(r)$ hier auch einen ausgeprägten linearen Bereich. Aufgrund der Ergebnisse des 45x256-Gitters setze ich für den Startparameter von q deshalb direkt $\min(\frac{p}{3}, 1)$ an. Da das Gitter sehr

groß ist, können wir zudem den unteren Rand des intermediären Bereichs auf 5η anheben und noch mehr als genug Punkte für die Auswertung übrig behalten. Das Ergebnis:

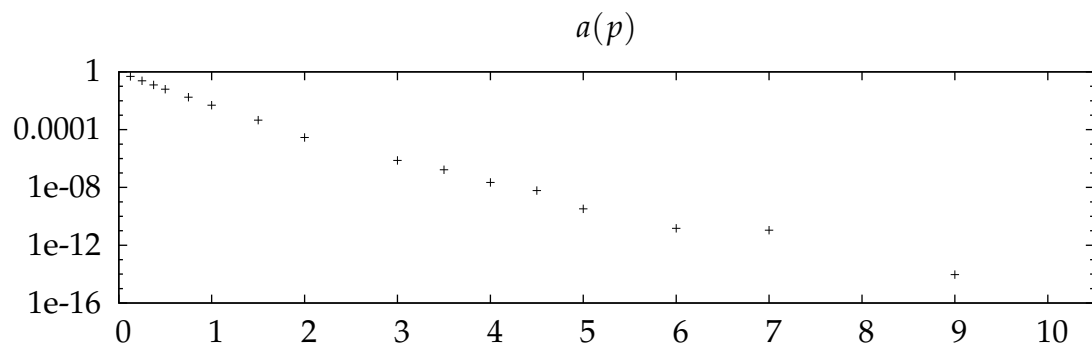
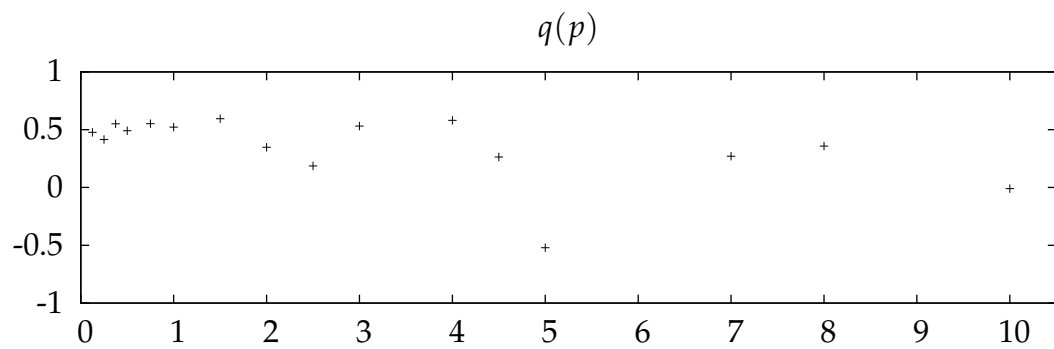
abcq-Fit

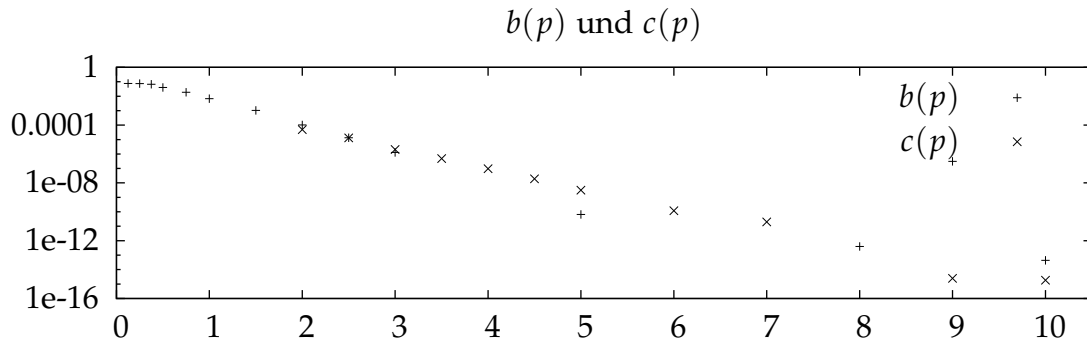
abcq - Beispielfits





abcq - Entwicklung der Parameter





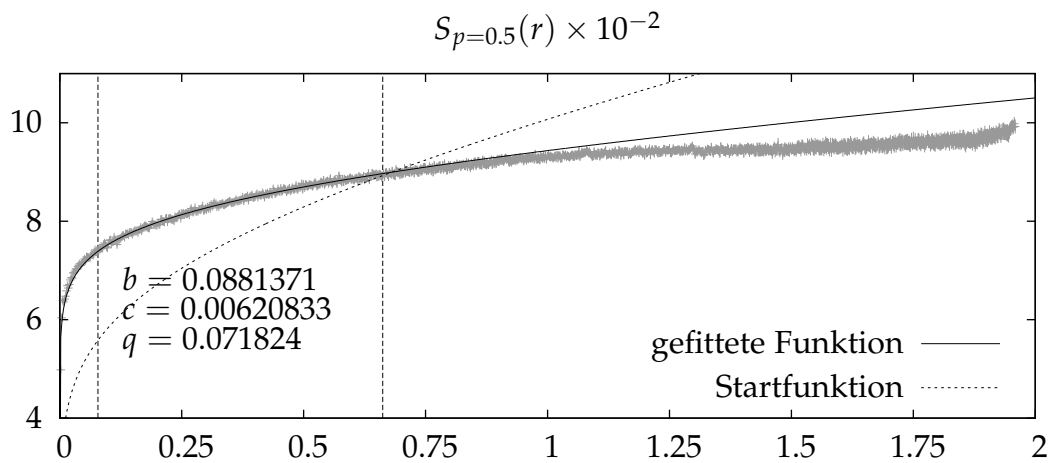
p	a	b	q	c
0.125	0.488978	0.0768864	0.477247	-0.0262769
0.25	0.23981	0.0743821	0.415065	-0.0176091
0.375	0.124574	0.067291	0.551636	-0.0269273
0.5	0.0633597	0.040563	0.49085	-0.0104453
0.75	0.0175895	0.0188309	0.552526	-0.0057905
1	0.00491417	0.00682393	0.521799	-0.00129356
1.5	0.00045643	0.00103567	0.594413	-0.000182362
2	2.84245e-05	0.000102306	0.34743	4.92466e-05
2.5	-1.09232e-07	1.33189e-05	0.186267	1.31965e-05
3	7.45938e-07	1.29119e-06	0.530881	2.04379e-06
3.5	1.6823e-07	-2.62851e-09	-1.07787	4.88593e-07
4	2.22101e-08	-6.35844e-09	0.581444	9.53657e-08
4.5	6.06238e-09	-5.36255e-09	0.263328	1.9001e-08
5	3.27601e-10	6.61534e-11	-0.520541	3.15622e-09
6	1.48559e-11	-1.03626e-10	5.87893	1.19475e-10
7	1.10538e-11	-2.13701e-11	0.270508	1.99202e-11
8	-9.80883e-14	3.98914e-13	0.358224	-9.31125e-14
9	9.34578e-15	3.09942e-07	36.3033	2.46417e-15
10	-4.36803e-14	4.32755e-14	-0.00960365	1.82195e-15

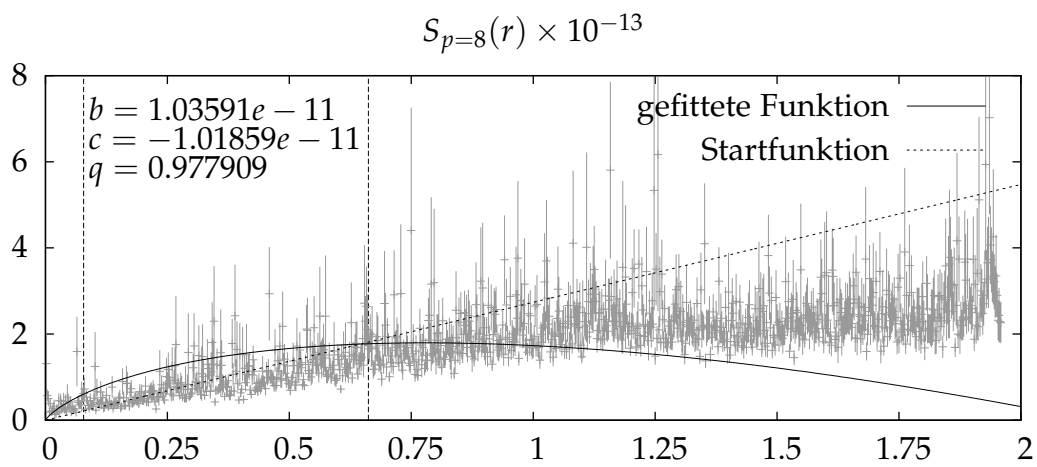
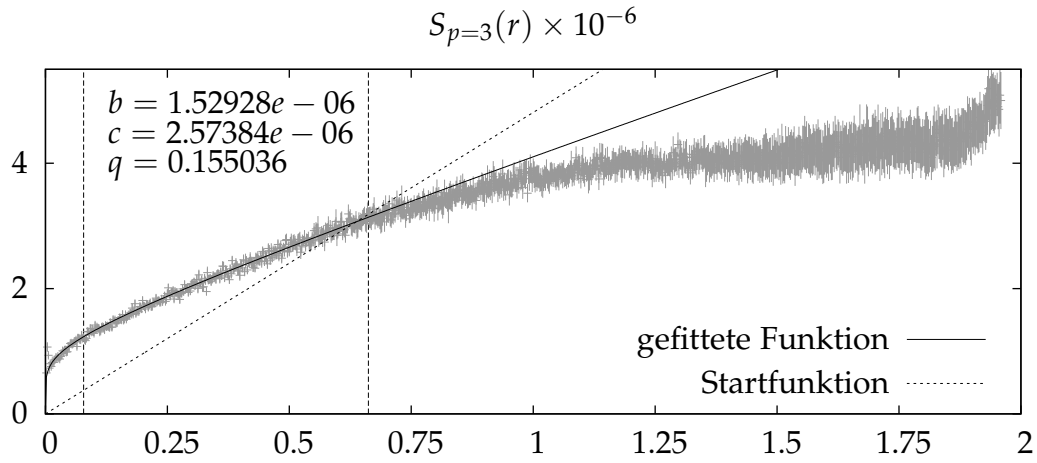
Die Fits für $p \leq 6$ sehen vernünftig aus. Der Fit von $S_{p=8}(r)$ steht stellvertretend für alle Fits mit $p > 6$. Diese weichen deutlich von der Linearität ab. Intuitiv wäre es vermutlich richtiger, wenn durch den unteren, dichter besetzten Bereich der Strukturfunktion eine Gerade gefittet würde. Aufgrund der deutlichen Abweichung von den Datenpunkten bestehen allerdings Zweifel, dass der Fit für große p bei den vorgegebenen Startparametern sinnvolle Funktionen liefert.

q bleibt über weite Strecken recht klein. Die Parameter a , b und c sind in logarithmischer Skala aufgetragen und verhalten sich in dieser weitgehend linear. a zeigt am deutlichsten eine Krümmung. b flacht für kleine p ab. Ansonsten dominiert das regellose Verhalten, welches wir schon von unserem ersten Versuch des abcq-Fits beim 45x256-Gitter kennen und sich am besten bei q ablesen lässt. Für die anderen Parameter kaschiert der exponentielle Verlauf die Schwankungen. Für $p > 6$ kommt es bei allen Parametern passend zu den zweifelhaften Fits zu sehr großen Abweichungen gegenüber dem Verhalten für $p \leq 6$.

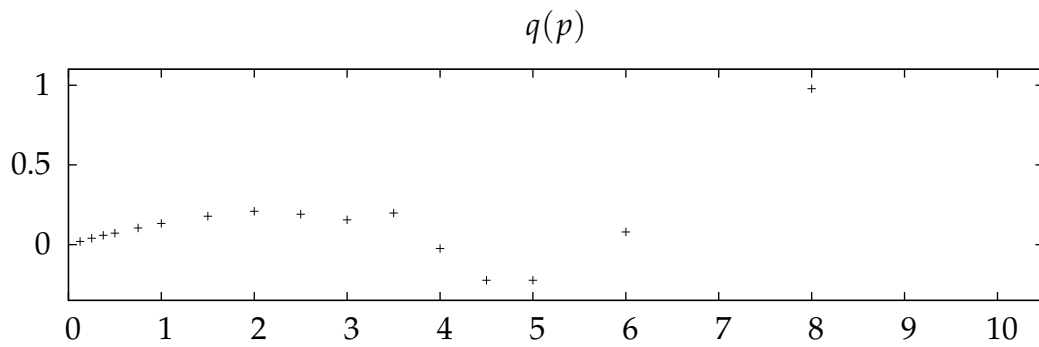
bcq-Fit

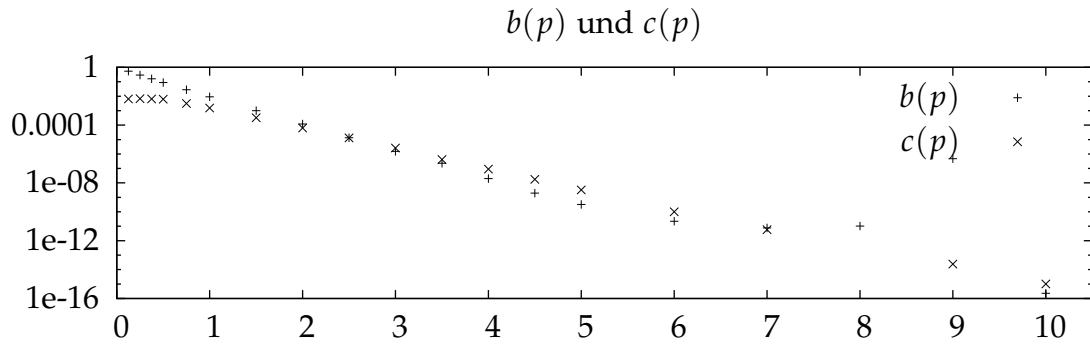
bcq - Beispielfits





bcq - Entwicklung der Parameter





p	a	b	q	c
0.125	0	0.535079	0.0198424	0.00642718
0.25	0	0.291279	0.0397492	0.00672651
0.375	0	0.16	0.0581055	0.00652199
0.5	0	0.0881371	0.071824	0.00620833
0.75	0	0.0278937	0.104487	0.00314043
1	0	0.00904441	0.132362	0.00152522
1.5	0	0.00100607	0.1783	0.000322375
2	0	0.000118048	0.209139	6.26139e-05
2.5	0	1.32975e-05	0.190831	1.3091e-05
3	0	1.52928e-06	0.155036	2.57384e-06
3.5	0	2.29714e-07	0.198414	4.1467e-07
4	0	1.97448e-08	-0.0247145	9.1148e-08
4.5	0	1.96509e-09	-0.223616	1.76144e-08
5	0	3.23684e-10	-0.223708	3.24328e-09
6	0	2.22107e-11	0.0794291	1.00883e-10
7	0	7.70095e-12	4.17281	5.77769e-12
8	0	1.03591e-11	0.977909	-1.01859e-11
9	0	4.74287e-07	37.4693	2.40144e-14
10	0	2.2744e-16	-0.386279	1.02065e-15

Die Fits sehen denen vom abcq-Fit sehr ähnlich.

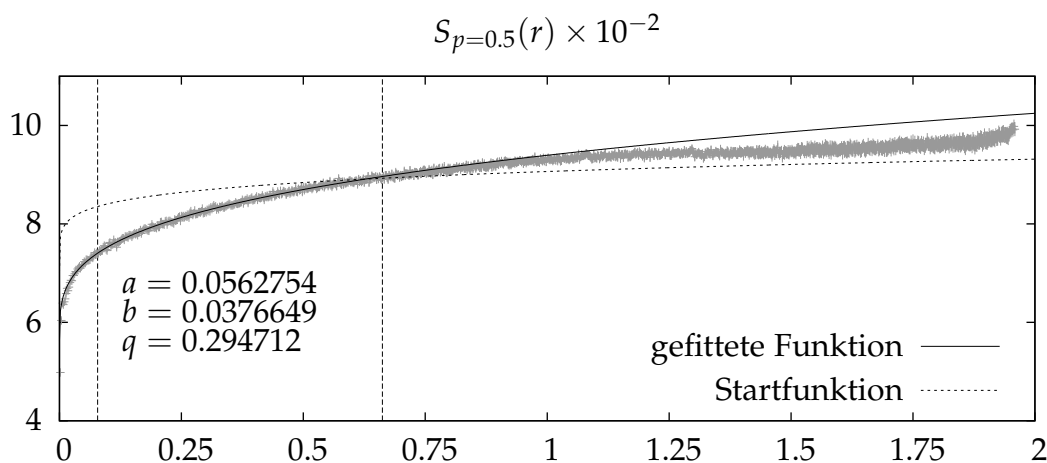
Der Exponent q bleibt über weite Strecken recht klein. Er steigt bis $p = 2$ an, bleibt bis $p = 3.5$ einigermaßen konstant und fällt danach auf unter Null ab. Bei $p = 8$ springt q auf 1. Dieses Verhalten kennen wir bereits vom 45x256-Gitter. b und c haben hierzu wieder passend einen Wert mit etwa gleichem Betrag aber unterschiedlichem Vorzeichen. Die deutlich sichtbare Krümmung des Fits ist darauf zurückzuführen, dass die Werte von b und c zwei Größenordnungen größer sind als die Werte der Daten.

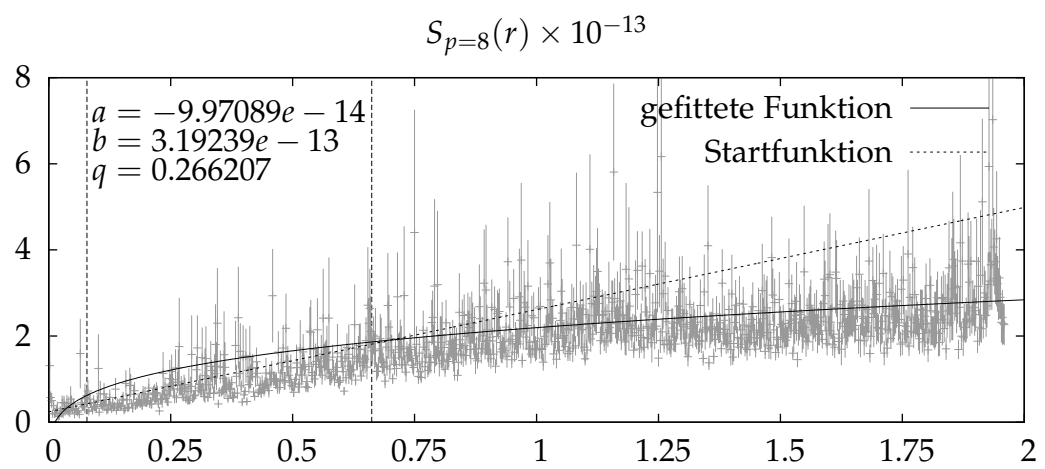
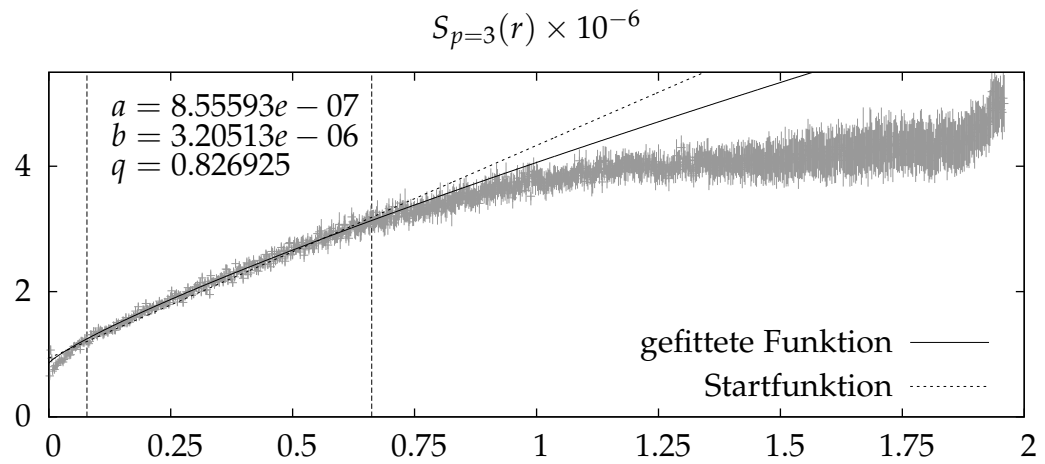
Generell ist das Verhalten von b und c interessant. Die Werteentwicklung im Bereich $p \leq 5$ zeigt, dass in der Gegend von $p = 2.5$ der Faktor des linearen Terms c den Faktor des Potenzterms b als größeren Wert ablöst. Schlussendlich liegt ungefähr eine Größenordnung zwischen beiden Werten. Dies ist ein deutliches Zeichen dafür, dass hier ein Übergang von einem wurzelförmigen zu einem linearen Verhalten stattfindet. Diese ist im q -Plot allerdings noch nicht unbedingt entsprechend unserer Erwartung zu sehen. Zwar reagiert der Exponent q in der Weise, dass er in dieser Region abflacht, aber er erreicht keineswegs einen Wert nahe 1. Da der Potenzterm für $p < 3.5$ wegen des kleinen b nicht länger sonderlich relevant ist, kann er es sich sogar erlauben, auf einen nicht sinnvollen Wert unter Null abzufallen.

Im Gegensatz zum abcq-Fit flacht hier c für kleine p ab und b behält seine Linearität.

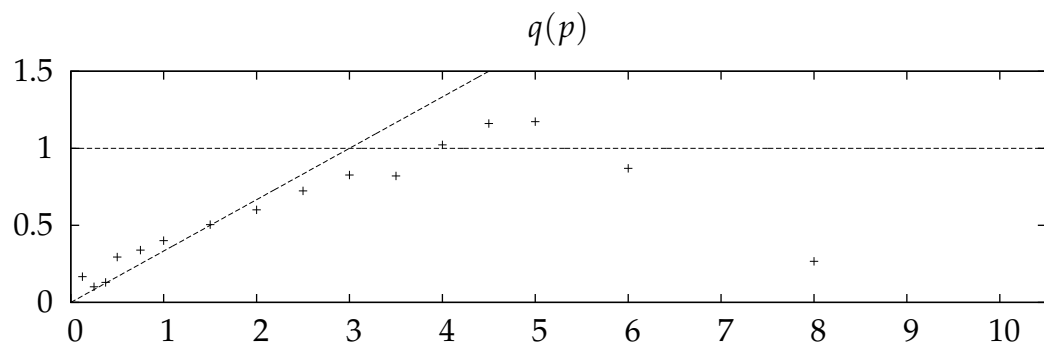
abq-Fit

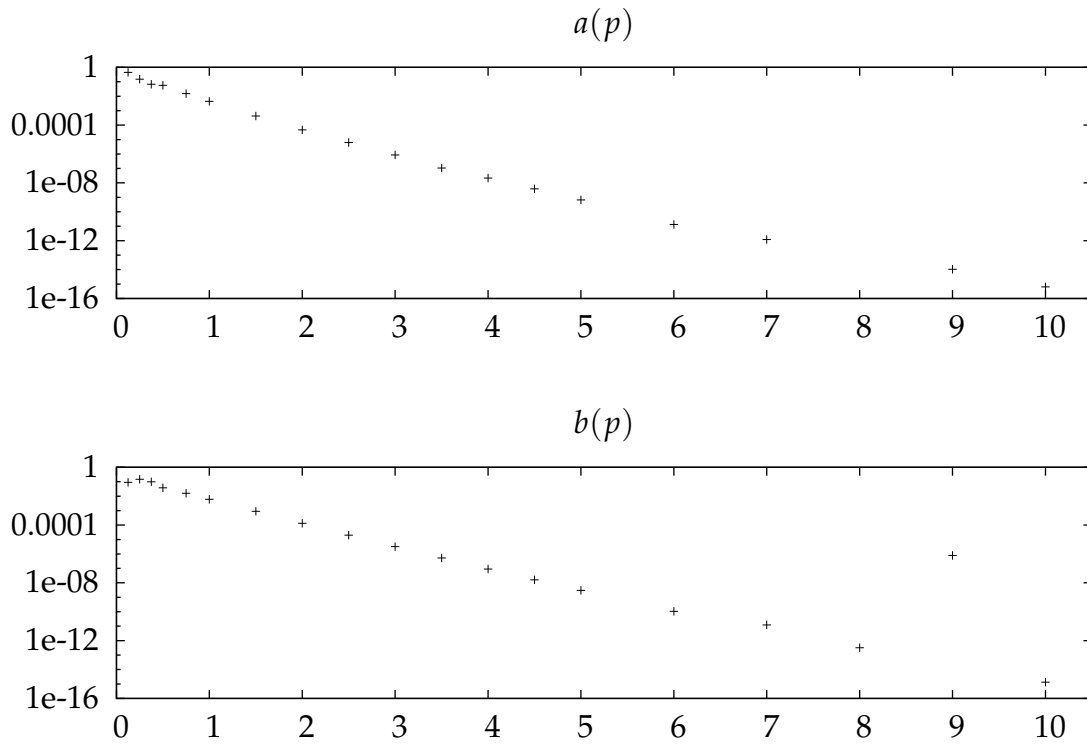
abq - Beispielfits





abq - Entwicklung der Parameter





p	a	b	q	c
0.125	0.449972	0.0910007	0.167304	0
0.25	0.149244	0.147497	0.101043	0
0.375	0.0673035	0.0981391	0.129454	0
0.5	0.0562754	0.0376649	0.294712	0
0.75	0.0150225	0.0158139	0.339036	0
1	0.00442299	0.00606709	0.400875	0
1.5	0.000422582	0.000891791	0.505025	0
2	4.63715e-05	0.000132158	0.600634	0
2.5	6.15688e-06	1.98997e-05	0.723259	0
3	8.55593e-07	3.20513e-06	0.826925	0
3.5	1.07949e-07	5.29759e-07	0.820938	0
4	2.14974e-08	8.96891e-08	1.02257	0
4.5	3.89299e-09	1.60792e-08	1.16112	0

p	a	b	q	c
5	6.64692e-10	2.99944e-09	1.17304	0
6	1.33238e-11	1.06574e-10	0.869778	0
7	1.20924e-12	1.21732e-11	2.6258	0
8	-9.97089e-14	3.19239e-13	0.266207	0
9	1.04695e-14	7.9042e-07	38.4762	0
10	6.38359e-16	1.33376e-15	3.19798	0

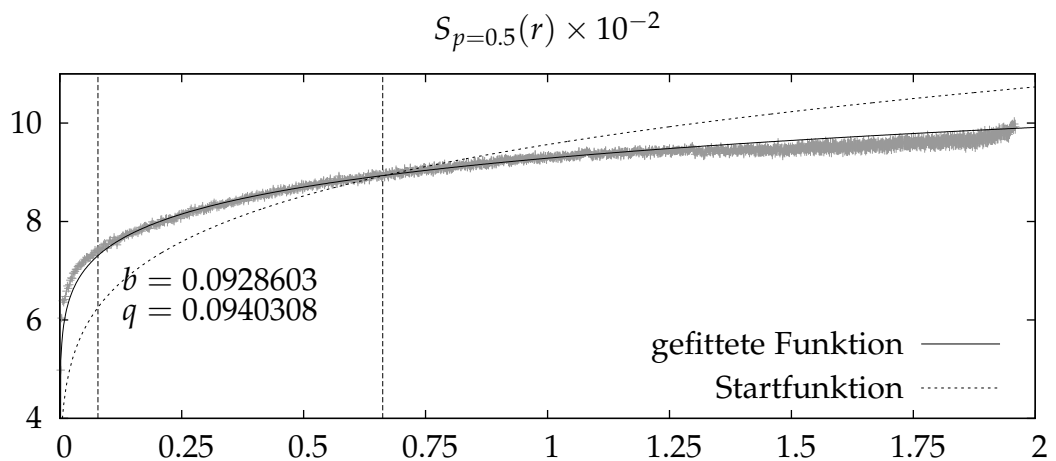
Der Trend des nicht ganz so optimalen Fits für große p setzt sich auch beim abq-Fit fort. Ansonsten passen die Fits.

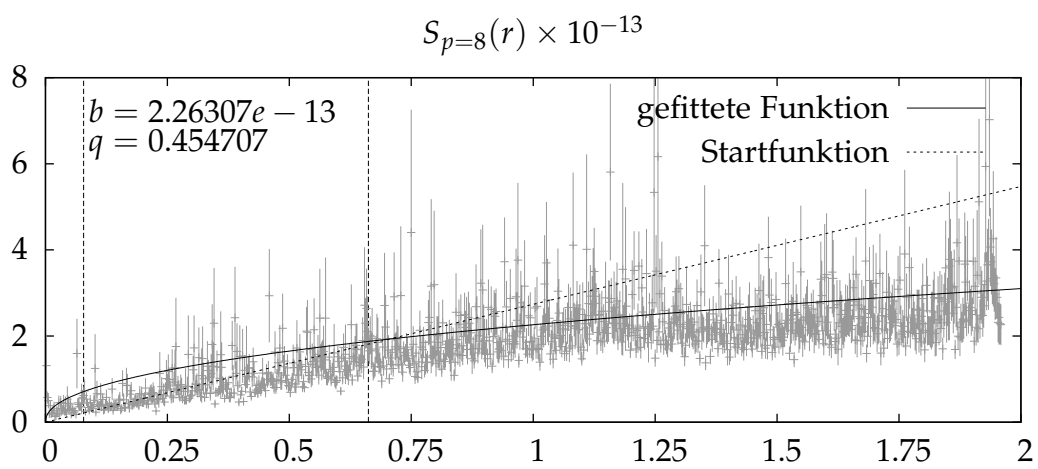
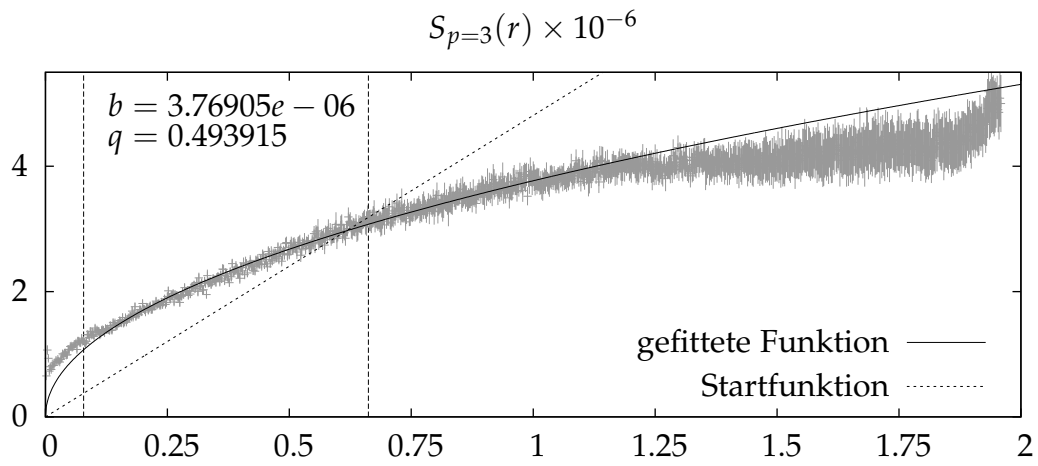
Mit der aus dem bcq-Fit abgeleiteten Vermutung einer Bifraktalität mit dem Übergang bei $p = 3$ kann man diese hier mit einiger Phantasie schon erkennen. Im Plot von q sind dafür die Geraden $q = p/3$ und $q = 1$ eingezeichnet. Für große p zeigt q dann erneut deutliche Schwankungen.

a verläuft entlang einer ähnlichen Kurve wie das a vom abcq-Fit. Diese ist aber wesentlich glatter und zeigt keine negativen Ausreißer. b hat einen zum b aus dem abcq-Fit analogen Verlauf mit abflachenden Werten für kleine p .

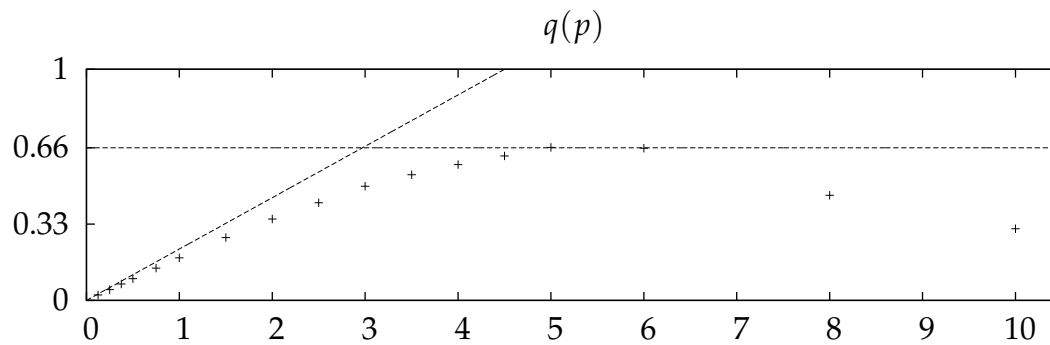
bq-Fit

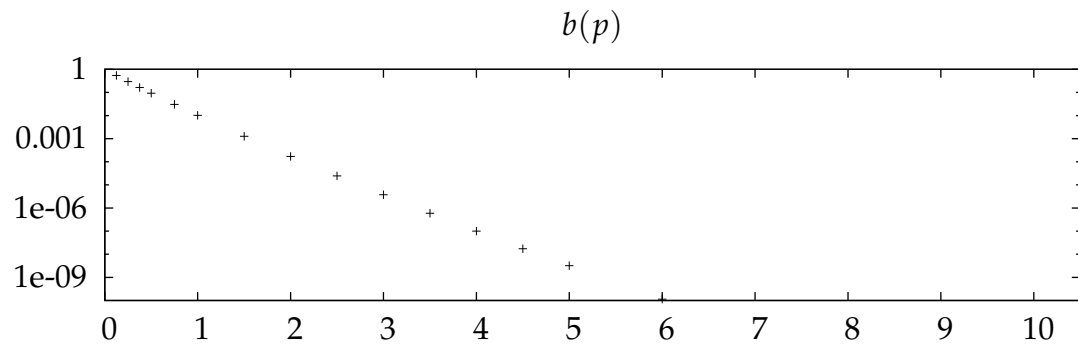
bq - Beispielfits





bq - Entwicklung der Parameter





p	a	b	q	c
0.125	0	0.539755	0.023576	0
0.25	0	0.296257	0.0470062	0
0.375	0	0.164906	0.0709762	0
0.5	0	0.0928603	0.0940308	0
0.75	0	0.0303327	0.139519	0
1	0	0.0102536	0.184238	0
1.5	0	0.00127058	0.271719	0
2	0	0.000170808	0.352079	0
2.5	0	2.44931e-05	0.422528	0
3	0	3.76905e-06	0.493915	0
3.5	0	5.97228e-07	0.543331	0
4	0	9.95163e-08	0.587528	0
4.5	0	1.73037e-08	0.625109	0
5	0	3.19996e-09	0.661951	0
6	0	1.13742e-10	0.658667	0
7	0	8.26871e-12	1.26807	0
8	0	2.26307e-13	0.454707	0
9	0	1.8787e-12	7.77636	0
10	0	1.02278e-15	0.309648	0

Außer für große p sind die Fits ok. Sie weichen allerdings vor allem am unteren Rand des Fitintervalls sichtbar vom Verlauf der Datenpunkte ab.

q zeigt in den Grenzwerten für kleine und für große $p \leq 6$ im Ansatz Bifraktalität und glättet den Übergang zwischen diesen beiden Extremen. Die bereits vermuteten Werte für q gemäß

$$q \approx \min\left(\frac{p}{3}, 1\right) \quad (4.28)$$

sind hier nur indirekt zu sehen. Der tatsächliche Verlauf folgt $\min(\frac{2p}{9}, \frac{2}{3})$ und entspricht (4.28) multipliziert mit einem Faktor $\frac{2}{3}$. Für große p zeigt die Kurve wieder springende Werte für q .

b zeigt, wie schon der bcq-Fit, keine abflachenden Werte für kleine p und folgt auch sonst dem bereits bekannten Verlauf.

Zwischenergebnis

Zu den Fits lässt sich abschließend sagen, dass diese für $p \leq 6$ passen und für $p > 6$ besser sein könnten. Die Ungenauigkeiten sind vermutlich auf die weite Streuung der Datenpunkte zurückzuführen und darauf, dass die Fitroutine Probleme hat, damit umzugehen.

Fehler aufgrund der Maschinengenauigkeit kann ich ausschließen. Ich habe bei diesem Gitter die Strukturfunktionen, welche sich untereinander um mehrere Größenordnungen unterscheiden, vor dem Fit individuell zuerst so skaliert, dass die Werte der Datenpunkte ~ 1 wurden. Nach dem Fit wurden die Parameter a , b und c mit dem Kehrwert des entsprechenden Faktors wieder zurückskaliert. Da die Parameter linear in die Strukturfunktion eingehen, führt eine Skalierung zu keinen Nebenefekten. Der Exponent p ist für die Krümmung der Strukturfunktion zuständig und in allen Skalen gleich. Er braucht und darf also nicht skaliert werden. Ohne die Skalierung war allgemein für große p die Maschinengenauigkeit spürbar und führte zu Abweichungen.

Die Strukturfunktionen sehen so aus, als würden sie generell einen deutlich von Null verschiedenen Offset haben. Diese Tatsache spiegelt sich darin wieder, dass die Fits danach geordnet werden können, ob die zugrunde liegenden Funktionstypen einen Offset haben oder nicht. Mit Offset flacht b für kleine p ab, ohne Offset nicht. Der Offset selbst folgt für abcq und abq einer vergleichbaren Kurve.

Der Vergleich von bq und abq legt die Vermutung nahe, dass der Exponent ohne Offset kleinere Werte annimmt und gestaucht wird. bcq fördert ebenfalls sehr kleine Exponenten zu Tage. Im Gegensatz zum 45x256-Gitter scheint hier der Offset im Vergleich zum linearen Term zunächst der wichtigere Parameter zu sein. Unterstützt wird diese These durch den angedeuteten bifraktalen Verlauf von q beim abq -Fit mit einem Exponenten ≈ 1 für große p .

Nehmen wir diesen Sachverhalt als Anstoß für eine Verbesserung der Ergebnisse, müssen wir den Offset auf jeden Fall berücksichtigen. Erschwert wird dies durch den vom 45x256-Gitter genährten Verdacht, dass der Exponent sehr sensibel auf eine Änderung des Offsets reagiert. Dies scheint hier ebenfalls der Fall zu sein, wie die unruhigen Kurven für q bei den Funktionstypen $abcq$ und abq im Vergleich zu bcq und bq zeigen. Möglicherweise können wir aus den gesammelten Daten eine glatte Funktion für a ableiten und als feste Werte in die Fitroutine einspeisen, um die Schwankungen von a zu reduzieren. Dabei sind wir nicht an der Interpolation zwischen 2 bestehenden Werten von a interessiert, sondern möchten die Werte von a sozusagen untereinander in ein festes Verhältnis setzen.

Verbesserung des $abcq$ - und abq -Fits

Um den Offset durch eine Funktion $a(p)$ zu beschreiben, benötigen wir zuerst Punkte a_p , durch die wir diese Funktion hindurch legen können. Es gilt nun, sinnvolle a_p zu finden. Die Überlegung dazu ist folgende: Der Offset ergibt sich definitionsgemäß bei $r = 0$, ist also ein Resultat des Verhaltens der Strukturfunktionen für kleine r . Dort ist das wurzelförmige Verhalten der Strukturfunktionen – also der Term r^p – maßgeblich. Dieser Potenzterm ist für kleine p zudem dominant gegenüber dem linearen Term. Für kleine p nehmen wir daher die schon existierenden Offsets aus dem abq -Fit. Große p erzeugen lineare Strukturfunktionen, für deren Beschreibung der Potenzterm ebenso linear wird. In diesem Fall können wir die a_p also besser direkt aus einem Geraden-Fit ableiten. Da der Fit einer Geraden ein lineares Problem ist, können wir dafür auf den analytisch exakten, korrelierten Polynomfit zurückgreifen. Nach Augenmaß zeigt sich, dass der Offset für $p \geq 4$ besser durch den Geradenfit beschrieben wird.

Wir haben damit nun Messdaten für den Offset generiert. In logarithmischer Skala

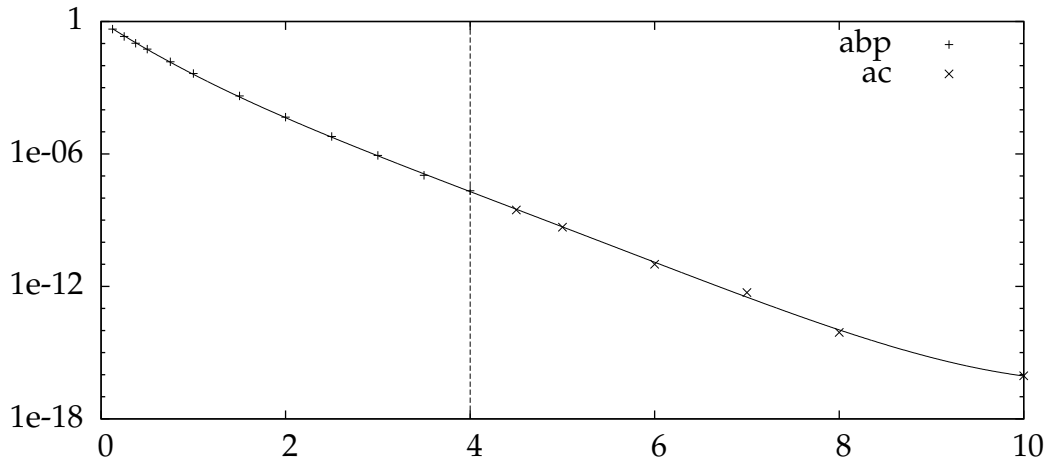


Abbildung 4.12: Die glatte Funktion für den Offset a . Als Ausgangsdaten werden für $p < 4$ die Offsets aus dem abq-Fit verwendet, ansonsten die aus dem Geraden-Fit (ac).

fitten wir durch diese jetzt Polynome niedriger Ordnung $n \leq 6$

$$P_n(p) = \sum_{k=0}^n a_k p^k. \quad (4.29)$$

Das Polynom, welches nach subjektiver Bewertung dem Verlauf von a am besten folgt und gleichzeitig am glattesten ist, wählen wir als unsere Abschätzung für a . Da wir uns in der logarithmischen Skala bewegen, müssen wir für den tatsächlichen Wert von a dieses Polynom noch exponentieren:

$$a(p) \approx e^{P_n(p)}. \quad (4.30)$$

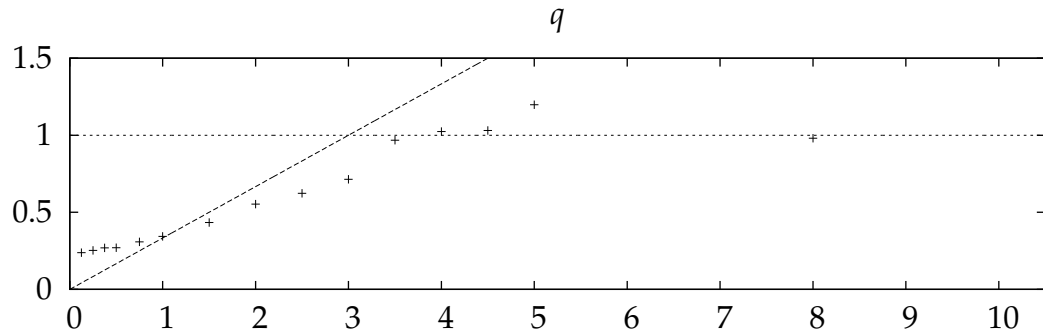
Wir wählen das Polynom vierten Grades, welches von folgender Form ist:

$$P_4(p) = -6.17826p + 0.765452p^2 - 0.102898p^3 + 0.00511644p^4. \quad (4.31)$$

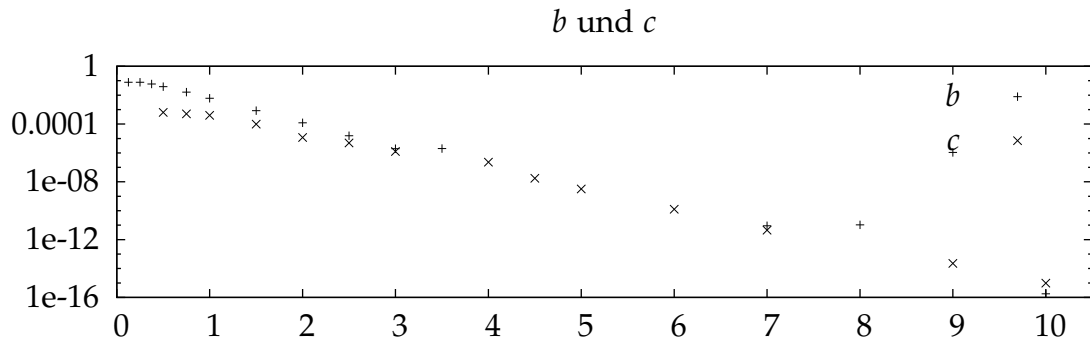
Die sich daraus ergebende Funktion $a(p)$ mitsamt den Ausgangsdaten ist in Abbildung 4.12 gezeigt.

Für die folgenden Fits wird $a(p)$ für das entsprechende p ausgewertet und dem Programm als fester Parameter, welcher während der Fitroutine konstant gehalten wird, übergeben. In dieser Weise führen wir den abq- und abcq-Fit nun erneut aus.

abcq-Fit mit festem a

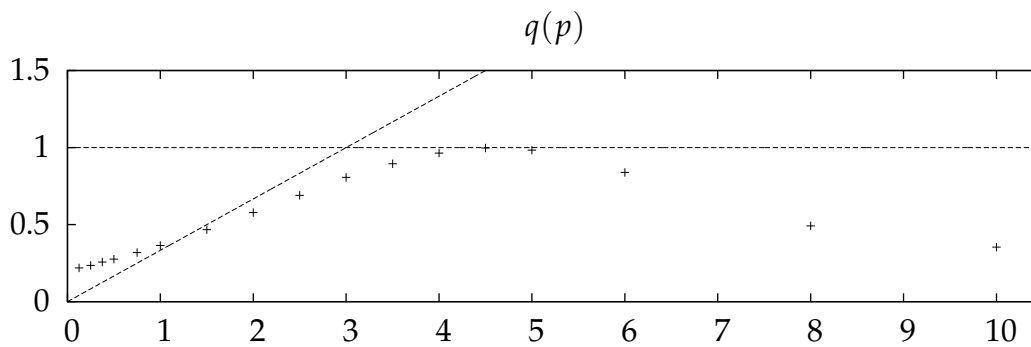


a folgt konsequenterweise der Kurve aus Abbildung 4.12.

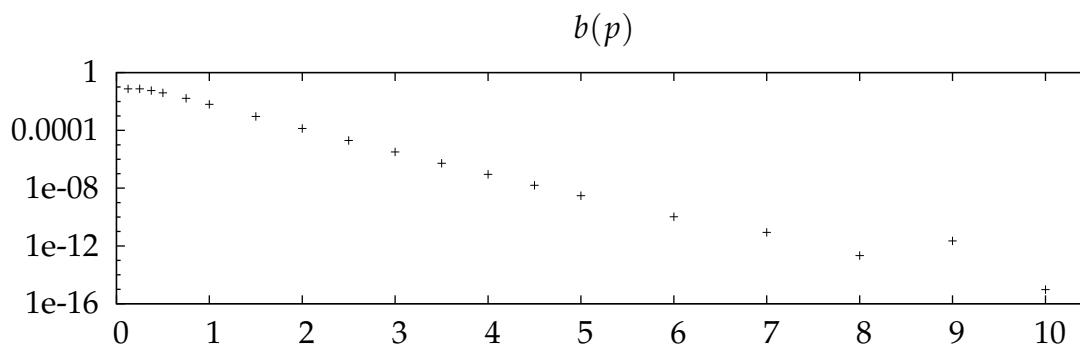


p	a	b	q	c
0.125	0.467422	0.077587	0.237595	-0.00440836
0.25	0.223507	0.0777268	0.252417	-0.00399441
0.375	0.109205	0.058972	0.269537	-0.00230132
0.5	0.0544588	0.0388391	0.270422	0.000641865
0.75	0.0143369	0.0160146	0.308306	0.000506562
1	0.00404372	0.00605889	0.343838	0.000399504
1.5	0.000383373	0.000834541	0.433644	9.91817e-05
2	4.3793e-05	0.000122991	0.55296	1.17918e-05
2.5	5.7317e-06	1.54319e-05	0.623247	4.91895e-06
3	8.23641e-07	1.97526e-06	0.714341	1.26915e-06
3.5	1.25483e-07	2.02986e-06	0.967721	-1.51243e-06

p	a	b	q	c
4	1.9723e-08	-1.39553e-07	1.02412	2.29272e-07
4.5	3.13606e-09	-1.48603e-09	1.03093	1.74425e-08
5	4.98463e-10	-2.41103e-10	1.19815	3.2255e-09
6	1.24615e-11	-1.36788e-10	5.64389	1.27563e-10
7	3.26562e-13	9.11894e-12	3.73158	4.49788e-12
8	1.0748e-14	1.04263e-11	0.980435	-1.02587e-11
9	6.01863e-16	1.09156e-06	39.4129	2.27869e-14
10	8.78297e-17	1.76069e-16	-0.418359	9.71128e-16

abq-Fit mit festem a 

a folgt konsequenterweise der Kurve aus Abbildung 4.12.



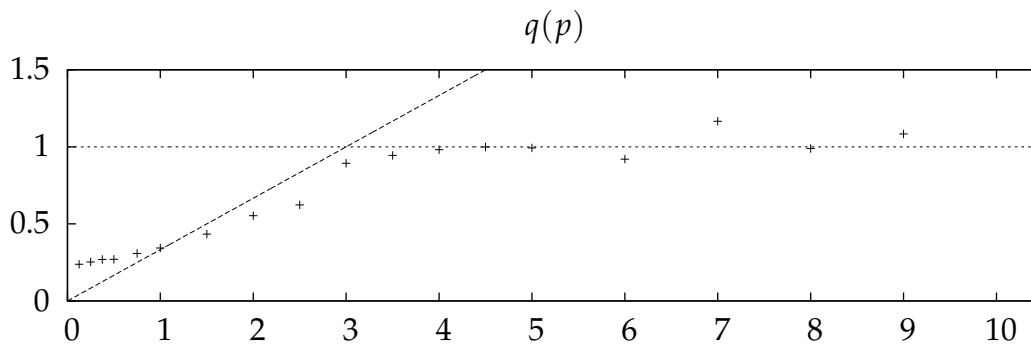
p	a	b	q	c
0.125	0.467422	0.0740138	0.219122	0
0.25	0.223507	0.074453	0.235631	0
0.375	0.109205	0.0570641	0.256808	0
0.5	0.0544588	0.0393744	0.275712	0
0.75	0.0143369	0.0164445	0.318253	0
1	0.00404372	0.0064044	0.364151	0
1.5	0.000383373	0.000923636	0.467737	0
2	4.3793e-05	0.00013399	0.577945	0
2.5	5.7317e-06	2.01378e-05	0.689448	0
3	8.23641e-07	3.21803e-06	0.806682	0
3.5	1.25483e-07	5.23849e-07	0.894718	0
4	1.9723e-08	8.97679e-08	0.964212	0
4.5	3.13606e-09	1.59564e-08	0.997223	0
5	4.98463e-10	2.97919e-09	0.983202	0
6	1.24615e-11	1.05597e-10	0.83837	0
7	3.26562e-13	8.69611e-12	1.5015	0
8	1.0748e-14	2.16877e-13	0.491694	0
9	6.01863e-16	2.22585e-12	8.19292	0
10	8.78297e-17	9.42294e-16	0.354206	0

Durch die Glättung und Festlegung von a wird die Bifraktalität nun bei beiden Funktionstypen deutlich sichtbar. Für kleine p gibt es bei beiden Fits eine ähnliche Abweichung vom $p/3$ -Verlauf. Beim abq-Fit zeigen sich für große p analog zum bq-Fit Sprünge des Exponenten. Vermutlich liegt die Tendenz bei diesen beiden Fits, sich so zu entwickeln, in dem fehlenden linearen Term begründet. Diese Fits können damit nicht weiter verbessert werden. Der abcq-Fit wird für große p wieder recht chaotisch, außer bei $p = 8$, wo sich ein Exponent nahe bei 1 einstellt. Ebenso findet sich bei $p = 3.5, 4$ und 4.5 ein Exponent ≈ 1 . Schaut man sich die Parameter zu diesen p s in der Tabelle an, stellt man fest, dass hier wieder unsere bereits bekannte Relation

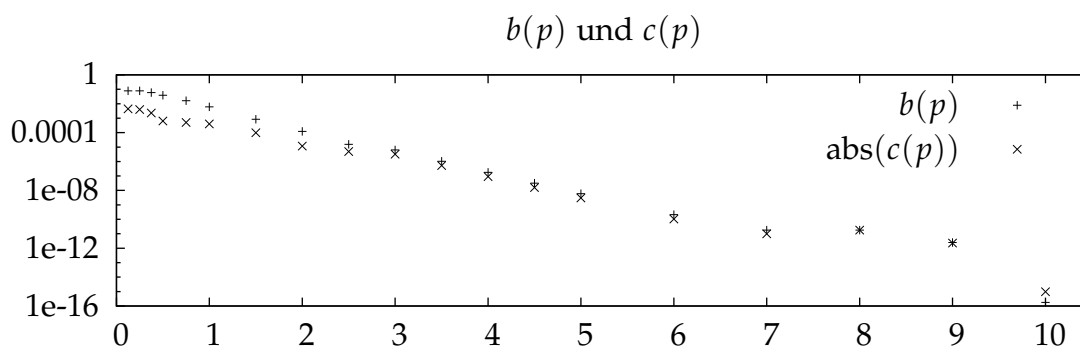
zwischen b und c auftritt.¹³ Diese Tatsache wollen wir nun nutzen, um unseren Fit ein letztes Mal zu verbessern.

Das b aus dem abcq-Fit folgt für $p \leq 3.5$ im Wesentlichen dem b aus dem abq-Fit. Für größere p wird b negativ, bleibt betragsmäßig aber mit dem b aus dem abq-Fit vergleichbar. Ich setze daher beim abcq-Fit den Startwert für den Parameter b auf den entsprechenden Wert vom abq-Fit. Die Idee ist jetzt, für c als Startwert $-b$ zu wählen und somit der immer wiederkehrenden Relation zwischen b und c Rechnung zu tragen, wenn wir einen Exponenten für große p nahe 1 beobachten. b und c bleiben aber freie Parameter.

abcq-Fit mit festem a , $c=-b$



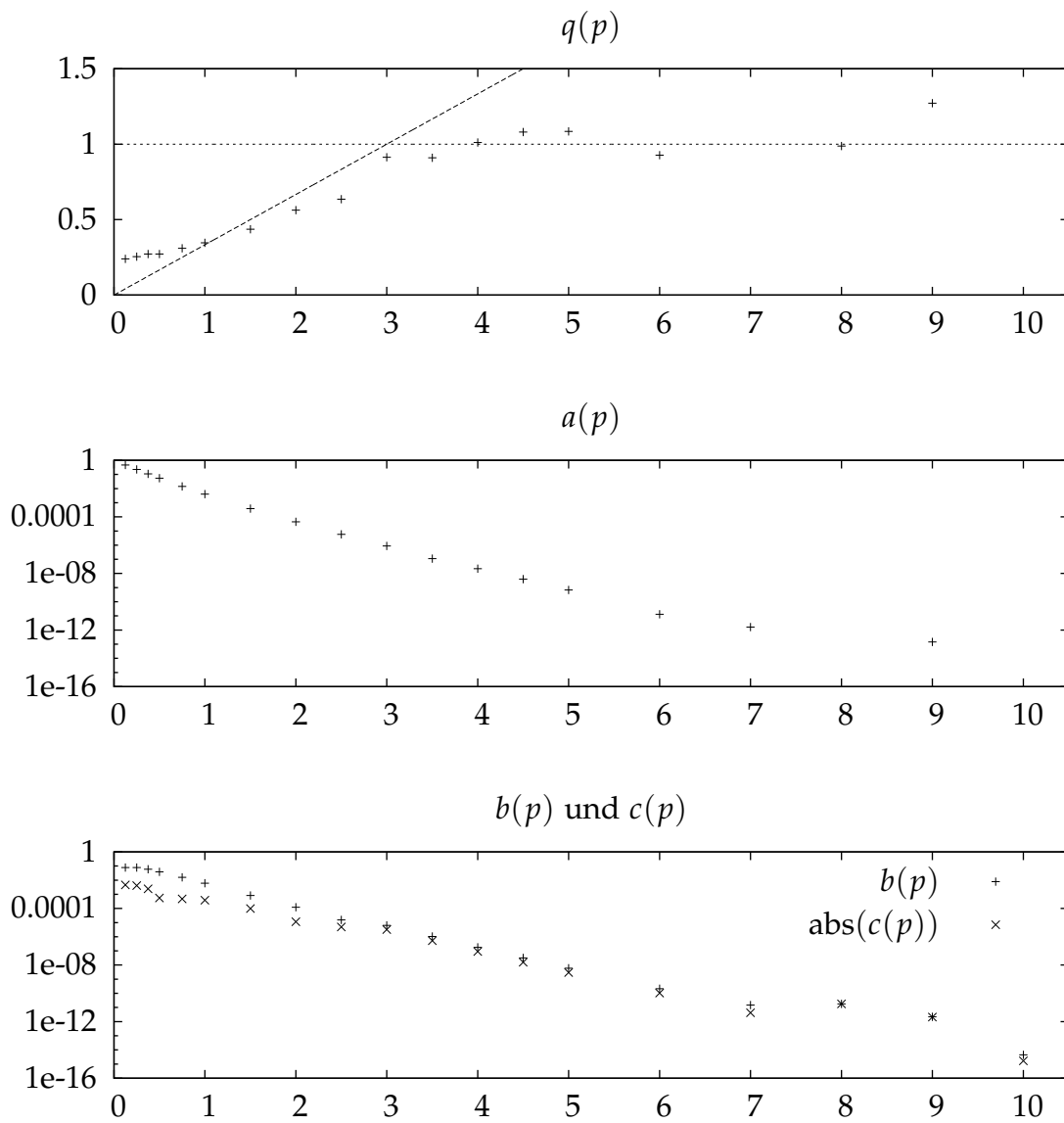
a folgt konsequenterweise der Kurve aus Abbildung 4.12.



¹³Die Fitroutine konvergiert hierbei wie beim 45x256-Gitter *nicht*.

p	a	b	q	c
0.125	0.467422	0.0775871	0.237595	-0.00440841
0.25	0.223507	0.0777268	0.252417	-0.0039944
0.375	0.109205	0.0589718	0.269536	-0.00230109
0.5	0.0544588	0.0388391	0.270422	0.000641889
0.75	0.0143369	0.0160145	0.308303	0.00050668
1	0.00404372	0.00605887	0.343837	0.000399529
1.5	0.000383373	0.000834543	0.433645	9.91802e-05
2	4.3793e-05	0.000123006	0.552998	1.17758e-05
2.5	5.7317e-06	1.54343e-05	0.623284	4.91624e-06
3	8.23641e-07	6.39776e-06	0.893604	-3.20546e-06
3.5	1.25483e-07	1.04584e-06	0.94441	-5.23308e-07
4	1.9723e-08	1.79505e-07	0.981806	-8.97583e-08
4.5	3.13606e-09	3.19105e-08	0.998478	-1.59564e-08
5	4.98463e-10	5.96233e-09	0.99238	-2.97914e-09
6	1.24615e-11	2.11817e-10	0.920015	-1.05402e-10
7	3.26562e-13	1.80455e-11	1.16579	-9.90076e-12
8	1.0748e-14	1.80052e-11	0.989403	-1.78265e-11
9	6.01863e-16	2.46262e-12	1.08336	-2.27601e-12
10	8.78297e-17	1.76053e-16	-0.418383	9.71157e-16

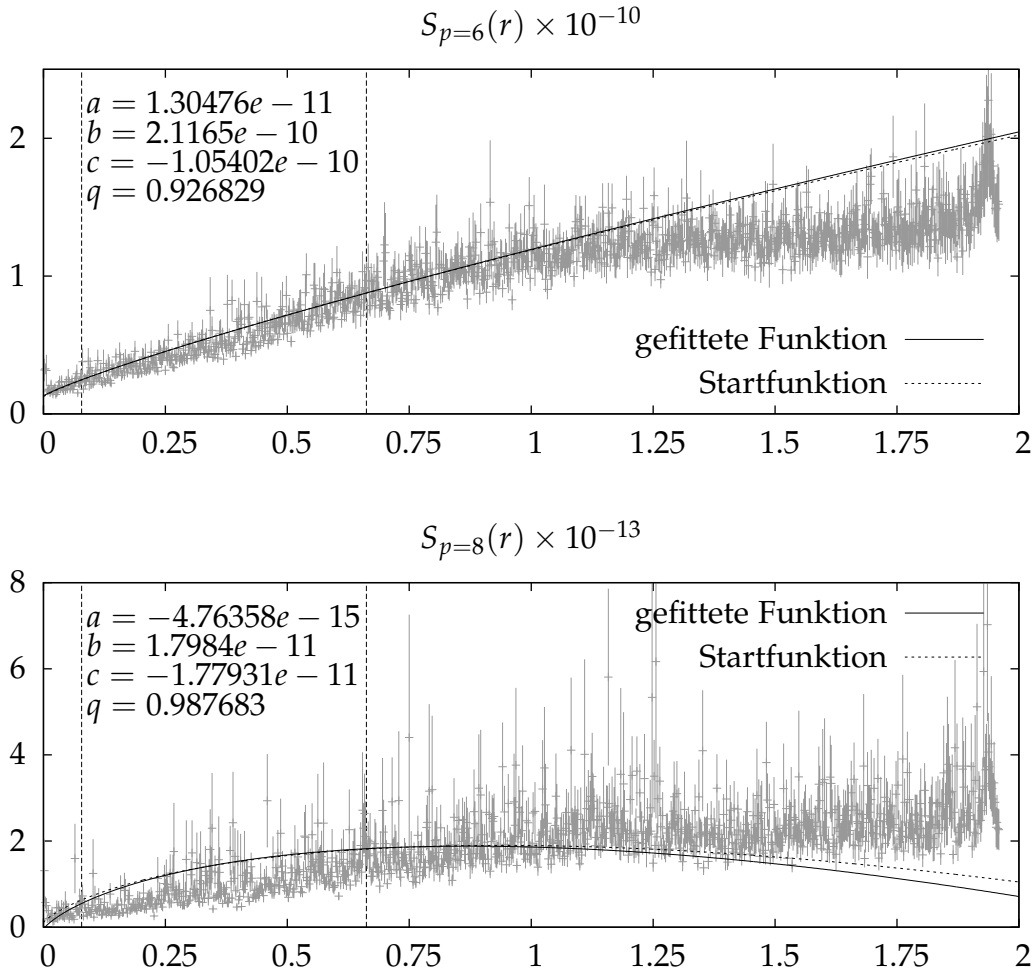
Für große p erhalten wir durch diesen Ansatz Werte für q , die nahe an 1 liegen. Einen Haken hat die Bestimmung allerdings noch: a wird konstant gehalten und darf sich nicht frei entwickeln. Wir sollten allerdings überprüfen, ob die Fitroutine für diese Parameterwerte wirklich zum Stillstand kommt. Ich lasse den Fit deshalb noch ein letztes Mal laufen, setze alle Startparametern – auch den für q – auf die Werte, die uns der letzte Fit geliefert hat, und stelle es jedem Parameter, insbesondere auch a , frei, sich zu verändern.

abcq-Fit wieder in allen Parametern frei

p	a	b	q	c
0.125	0.467655	0.0775367	0.239431	-0.00462057
0.25	0.223733	0.0776752	0.254245	-0.00419349
0.375	0.109377	0.0589301	0.271427	-0.00244669
0.5	0.0545653	0.0388133	0.272205	0.000551926
0.75	0.0143817	0.0160021	0.310249	0.000472225

p	a	b	q	c
1	0.00406095	0.00605356	0.345955	0.000387468
1.5	0.00038614	0.000833501	0.436603	9.77017e-05
2	4.4776e-05	0.000122585	0.562308	1.144e-05
2.5	5.86848e-06	1.53697e-05	0.635317	4.88842e-06
3	8.74017e-07	6.38615e-06	0.912982	-3.20585e-06
3.5	1.11142e-07	1.04989e-06	0.909294	-5.24541e-07
4	2.15038e-08	1.79382e-07	1.01126	-8.97022e-08
4.5	3.94375e-09	3.19502e-08	1.07998	-1.59468e-08
5	6.72803e-10	5.95757e-09	1.08417	-2.97502e-09
6	1.30476e-11	2.1165e-10	0.926829	-1.05402e-10
7	1.63781e-12	1.48235e-11	2.0234	-4.18067e-12
8	-4.76358e-15	1.7984e-11	0.987683	-1.77931e-11
9	1.43709e-13	2.20346e-12	1.27145	-2.08895e-12
10	-4.77737e-15	4.47764e-15	-0.077408	1.69691e-15

Durch das Freilassen von a werden natürlich wieder Schwankungen eingeführt. Diese halten sich aber in Grenzen und bestätigen unser bisheriges Ergebnis. Die Abweichungen des Exponenten für $p < 1$ führe ich auf den Offset zurück und können aufgrund dessen Notwendigkeit nicht beseitigt werden. Die Fittypen bcq und bq ohne Offset haben dort den erwarteten Verlauf bis nach Null herunter gezeigt. Für $p > 6$ ist der Exponent aufgrund der nach wie vor suboptimalen Fits mit Vorsicht zu genießen:



Zudem sei darauf hingewiesen, dass hier *jeder* Fit – auch diejenigen, welche in $q \approx 1$ resultieren – in endlich vielen Schritten konvergiert. Ich schließe daraus, dass dem Fit bei einer Nicht-Konvergenz mit dennoch sinnvollen Werten für die Parameter nicht genügend Freiheiten gelassen wurden, sich zu entwickeln.

Werfen wir zum Abschluss noch ein Blick auf die Werte von χ^2 aus den abcq-Fits:

p	aus erstem abcq-Fit		aus letztem abcq-Fit	
	q	χ^2	q	χ^2
0.125	0.477247	2.34056e-07	0.239431	2.39993e-07
0.25	0.415065	2.71155e-07	0.254245	2.73211e-07
0.375	0.551636	1.12274e-07	0.271427	1.12511e-07
0.5	0.49085	2.52675e-08	0.272205	2.63309e-08

p	aus erstem abcq-Fit		aus letztem abcq-Fit	
	q	χ^2	q	χ^2
0.75	0.552526	8.76754e-06	0.310249	8.79993e-06
1	0.521799	3.36323e-07	0.345955	3.43282e-07
1.5	0.594413	2.68708e-06	0.436603	2.70379e-06
2	0.34743	2.11175e-05	0.562308	2.06432e-05
2.5	0.186267	0.000241718	0.635317	0.000234728
3	0.530881	0.00416899	0.912982	0.00416647
3.5	-1.07787	0.0628961	0.909294	0.0620305
4	0.581444	0.000172545	1.01126	0.00017253
4.5	0.263328	0.00448909	1.07998	0.00449015
5	-0.520541	0.149986	1.08417	0.149441
6	5.87893	0.0224144	0.926829	0.022854
7	0.270508	0.0223151	2.0234	0.0221981
8	0.358224	16.0054	0.987683	15.9513
9	36.3033	0.00434354	1.27145	0.00851481
10	-0.00960365	3.29047	-0.077408	3.2915

Die Werte von χ^2 liegen sehr nah beieinander, obwohl die Parameter der Fits deutlich voneinander abweichen. Es ist eher unwahrscheinlich, dass sich zwischen diesen fast identischen Werten von χ^2 eine "bergige Landschaft" findet. Vielmehr ist es wahrscheinlich ein Zeichen dafür, dass χ^2 ein weitläufiges, nahezu ebenes Gebiet aufweist, in dem die Fitroutine abhängig von den Startwerten an unterschiedlichen Positionen zum Stillstand kommt. Dieses Plateau ist vermutlich auf die Koexistenz der Parameter a und q zurückzuführen. a und q haben stets eine starke, wechselseitige Reaktion aufeinander gezeigt und der χ^2 -Vergleich des bcq-Fits beim 45x256-Gitter zeigt deutlich unterschiedliche Werte für χ^2 oder deckungsgleiche Parameterwerte. Daher darf bezweifelt werden, dass die beim 1024x32-Gitter extrahierten Exponenten, welche den Offset a notwendigerweise berücksichtigen, hieb- und stichfest sind.

5 Zusammenfassung und Ausblick

Es galt zu überprüfen, ob die Strukturfunktionen der eindimensionalen, zufällig getriebenen Burgersgleichung, berechnet nach Gleichung (2.5), der Theorie nach Gleichung (2.129), $S_p(r) = br^p + cr \sim dr^{\tilde{\zeta}}$, mit einem asymptotischen Verhalten $\tilde{\zeta} \rightarrow p$ für $p \ll 1$ und $\tilde{\zeta} \rightarrow 1$ für $p \gg 1$ folgen. Im Zuge der Herleitung dieser Theorie stellte sich heraus, dass diese auf unseren zu untersuchenden Fall nur begrenzt anwendbar ist. Im Wesentlichen gibt es zwei Reibungspunkte:

- Die Theorie gilt in dieser Form nur für Dimensionen N größer als 2 und wird erst für $N \rightarrow \infty$ exakt. Wir betrachten hier den eindimensionalen Fall.
- Die Theorie nimmt eine treibende Kraft an, die über ihr Potenzial gaußverteilt ist. Bei uns ist die Kraft selbst gaußverteilt.

Zur Untersuchung standen mehrere Simulationen mit 5 Millionen Konfigurationen bereit, von denen sich im Wesentlichen zwei als analysierbar herausstellten:

Re	N_x	N_t	$\nu (\alpha)$	L
256	1024	32	1.9e-6 (1/16)	512
16	45	256	1/506 (1/64)	22.5

Die anderen Simulationen erfüllten nicht die an das Gitter gestellten Bedingungen (3.34) und (3.36) oder ließen aufgrund verloren gegangener Daten nicht die Methoden zu, die schlussendlich verwendet wurden. Die Autokorrelationszeiten liegen in der Größenordnung von etwa 5000 bis 60000 Konfigurationen. Diese Statistik lässt damit noch etwas zu wünschen übrig, wie auch die Fehler der Strukturfunktionen zeigen, die die Γ -Methode berechnet hat.

Für die Auswertung wurde der Ansatz für die Strukturfunktion (2.129) aufgrund endlicher Statistik und unbekanntem Verhalten in der Dissipationsskala um einen Offset erweitert.

Der Ansatz, aus $\ln \frac{d^2}{dr^2} \tilde{S}_p(r)$ mit einem Polynom n -ten Grades oder C^3 -Spline $\tilde{S}_p(r)$ den Exponenten abzuleiten, schlug fehl, da die Funktionen nicht glatt genug durch die Daten verliefen. Der zweite Ansatz, $S_p(r)$ in ein Polynom zu entwickeln, welches die generellen Eigenschaften von $S_p(r)$ übergeben bekam, führte zu den ersten brauchbaren Ergebnissen. Dies motivierte den Versuch, den Ansatz für die Strukturfunktion direkt zu fitten.

Beim direkten Fit zeigte sich zum ersten Mal die zaghafte Möglichkeit eines bifraktalen Exponenten. Dieser konnte schließlich zwar extrahiert werden, jedoch war dafür bei beiden Gittern die Festlegung des Offsets a nötig. Generell macht es der Offset dem Fit schwer, vernünftige Funktionen zu finden. Der Vergleich der Werte von χ^2 am Ende der Auswertung des 1024x32-Gitters lässt vermuten, dass jeder Wert von a durch einen angepassten Wert von q ausgeglichen werden kann. Dabei werden stets vernünftige Funktionen an die Daten gefittet. Für das 45x256-Gitter wurde a auf 0 festgelegt, indem schließlich hauptsächlich der bcq-Fit betrachtet wurde. Für das 1024x32-Gitter musste der Offset mit Hilfe des abq-Fits für kleine p und des Geradenfits für große p festgesetzt werden.

Damit wird die Bestimmung des Exponenten im Grunde auf die Bestimmung eines sinnvollen Offsets zurückgeführt. Hierdurch ergibt sich natürlich ein gewisser Handlungsspielraum, der aufgrund der sensiblen Abhängigkeit des Exponenten vom Offset einen möglicherweise großen Wertebereich des Exponenten zulässt. Eine tiefergehende Untersuchung des Parameterraums könnte über die Wechselwirkung von Exponent und Offset besser Aufschluss geben.

Im Falle eines Exponenten nahe 1 für große p ergibt sich durchgehend $b \approx -c$. Vermutlich ist diese Beziehung nicht auf die Burgersturbulenz zurückzuführen, sondern ein Artefakt der Fitroutine. b wird nach der Theorie über die Gleichung (2.130) berechnet. Ist diese Gleichung auf den eindimensionalen Fall übertragbar, sollte b stets positiv sein. Beim 45x256-Gitter war b negativ, beim 1024x32-Gitter positiv. Die Summe $b + c$ war dabei allerdings immer positiv. Diese Summe ist wahrscheinlich als der tatsächliche Faktor des linearen Terms anzusehen, da sich der lineare und Potenzterm die Linearität der Strukturfunktion teilen. Dadurch kann über den Faktor des Potenzterms keine Aussage getroffen werden.

Von der Festlegung des Offsets abgesehen benötigt die hier vorgeschlagene Bestimmung des Exponenten nur sehr wenige weitere Annahmen. Die Fitroutine folgt der

gängigen, korrelierten χ^2 -Minimierung. Ihr muss hauptsächlich die Form der erwarteten Funktion übergeben werden. Sämtliche Ansätze führen dabei allerdings in der Regel nicht zu eindeutigen Ergebnissen. Vielmehr besteht die Aufgabe darin, möglichst gute Startwerte für die Parameter zu finden, um in den Bereich der Parameterwerte zu kommen, für die die gesuchte Lösung erwartet wird. Ist der Offset festgelegt, zeigt sich die Methode recht robust und stabil, wenn es darum geht, für abweichende Startwerte die bereits gefundenen Lösungen zu reproduzieren. Dies ist ein weiteres Zeichen dafür, dass der freie Offset für die mehrdeutigen Fits verantwortlich ist. Für $p \geq 6$ mit weit gefächerten Datenpunkten kommt die Fitroutine aber offenbar an ihre Grenzen. Hier bietet sich noch Raum für Verbesserungen durch eine Routine, welche besser in der Lage ist, die lineare Tendenz der Punkte zu erkennen.

Das 45x256-Gitter führte zu dem Exponenten

$$q \approx \min\left(\frac{2p}{3}, 1\right),$$

das 1024x32-Gitter zu

$$q \approx \min\left(\frac{p}{3}, 1\right).$$

Dass sich diese beide Exponenten nicht decken, kann natürlich auf die bereits angesprochenen Schwierigkeiten mit dem Offset zurückgeführt werden. Ich habe allerdings nicht den Eindruck, dass sich die Diskrepanz mit dem Offset allein erklären lässt. Schaut man sich die Strukturfunktionen an, dann passen diese Exponenten sehr gut zu diesen. Ebenso lieferten auch die Fits der Funktionstypen ohne Offset Hinweise darauf, dass genau an den entsprechenden Stellen ein Übergang vom wurzelförmigen zum linearen Verlauf stattfindet. Ein möglicher, weiterer Grund könnte deshalb die verbesserungswürdige Statistik der Simulationen sein. Um dies zu überprüfen, wären neue Runs mit noch mehr Konfigurationen nötig. Der bessere Weg wäre allerdings, die Autokorrelationszeit durch Einführung des Overrelaxation-Algorithmus in das Simulationsprogramm zu senken. Auf dieser Basis könnten dann neue Runs mit besserer Statistik erzeugt werden.¹ Eine Fehlerrechnung könnte zudem möglicherweise zur Folge haben, dass beide Ergebnisse miteinander verträglich sind.

¹Im gleichen Atemzug könnte die Korrelationslänge L von 0.5 auf z.B. 0.8 angehoben werden, um bei gleicher Gittergröße eine größere Ausbeute an Gitterpunkten, die im Inertialbereich liegen, zu erhalten.

Ansonsten können Gründe für die untereinander abweichenden Exponenten mit den existierenden Informationen nur schwer gefunden werden. Auffälligster Unterschied zwischen den Simulationen ist die Reynoldszahl von 16 bzw. 256. Die Auflösung des Gitters könnte eine weitere Rolle spielen. Zum einen ist ν aufgrund dessen beim 1024x32-Gitter trotz größerem α vier Größenordnungen kleiner als beim 45x256-Gitter. Zum anderen bedeutet eine geringe Zeitauflösung, dass sich die Strukturen auf dem Gitter kaum verschieben, während sie bei einer großen Auflösung in der Zeit zu wandern beginnen. Die bezogen auf die Gittergröße relative Korrelationslänge der Kraft ist bei beiden Simulationen gleich.

Um die Exponenten einordnen zu können, sind deshalb mehr Simulationen nötig. Besonders welche mit steigenden Reynoldszahlen zwischen 16 und 256 könnten darüber Aufschluss geben, ob sich der Exponent von $\min\left(\frac{2p}{3}, 1\right)$ hin zu $\min\left(\frac{p}{3}, 1\right)$ entwickelt. Die Entwicklung des Exponenten für gleichbleibendes Re , aber unterschiedliche Viskositäten ν , könnte ebenso untersucht werden, wie diejenige für in Zeitrichtung variierte Gittergrößen.

Beide Exponenten weichen darüber hinaus von der Theorie nach Gleichung (2.135) ab. Die Ursache dafür kann in den genannten Grenzen der Theorie gesehen werden. Es wäre wünschenswert, wenn die Replika-Methode konkret auf die eindimensionale Burgersgleichung mit direkt gaußverteilter Kraft angewendet würde. Ansonsten ergeben sich natürlich alle bereits erwähnten Möglichkeiten für die Begründung der Abweichung.

Anhang

A Normalverteilung in n Dimensionen

Zur Normierung:

$$\int_{-\infty}^{\infty} d^n x \exp \left(-\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \int_{-\infty}^{\infty} x_i (A_{ij})^{-1} x_j \right) = \sqrt{(2\pi)^n \det A} \equiv N_A \quad (\text{A.1})$$

Mit zusätzlichem linearen Term:

$$\begin{aligned} \frac{1}{N_A} \int_{-\infty}^{\infty} d^n x \exp \left(-\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \int_{-\infty}^{\infty} x_i (A_{ij})^{-1} x_j + \sum_{i=1}^n x_i J_i \right) \\ = \exp \left(\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n J_i A_{ij} J_j \right) \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

Das zweite Moment:

$$\frac{1}{N_A} \int_{-\infty}^{\infty} d^n x x_i x_j \exp \left(-\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \int_{-\infty}^{\infty} x_i (A_{ij})^{-1} x_j \right) = A_{ij} \quad (\text{A.3})$$

B 1-step RSB-Matrizen

Eine $(n \times n)$ 1-step replica-symmetry-breaking(RSB)-Matrix \mathbf{A} ist symmetrisch und besteht aus:

- den Diagonalelementen \tilde{a} ,
- den Nichtdiagonalelementen gehörend zu Block 0 a_0 und
- den Nichtdiagonalelementen gehörend zu Block 1 a_1 .

Block 0 beginnt in der linken oberen Ecke der Matrix und hat eine Größe m , welche sich relativ auf die Ausdehnung n der gesamten Matrix bezieht. m liegt entsprechend im Intervall $[0, 1]$. Die Größe von Block 1 beträgt folglich $(1 - m)$. Gilt $m = 0$ bzw. $m = 1$, sind sämtliche Nichtdiagonalelemente gleich σ_1 bzw. σ_0 .

Für $m = 0.5$ ergibt sich bei einer (4×4) -Matrix folgende Gestalt:

$$\begin{pmatrix} \tilde{\sigma} & \sigma_1 & \sigma_0 & \sigma_0 \\ \sigma_1 & \tilde{\sigma} & \sigma_0 & \sigma_0 \\ \sigma_0 & \sigma_0 & \tilde{\sigma} & \sigma_1 \\ \sigma_0 & \sigma_0 & \sigma_1 & \tilde{\sigma} \end{pmatrix}.$$

Schlussendlich betrachten wir die Matrizen für $n \rightarrow 0$. Die Matrix wird in diesem Fall sozusagen *kontinuierlich* und lässt sich nicht mehr in gewohnter Weise darstellen. Die folgenden Rechenvorschriften gelten explizit für den Limes $n \rightarrow 0$. Allgemeine Versionen dieser Regeln für n -step RSB-Matrizen finden sich in Appendix II in [22] und Kapitel 2 in [24]. Die hier erwähnten Vorschriften ergeben sich aus den allgemeinen im Fall von 1-step RSB.

B.1 Summe $\mathbf{A} + \mathbf{B}$

Die Addition zweier RSB-Matrizen \mathbf{A} und \mathbf{B} von gleicher Größe n und mit dem gleichen Wert für m liefert eine neue RSB-Matrix \mathbf{C} , ebenfalls von Größe n mit dem

Parameter m . Die Einträge von \mathbf{C} lauten:

$$\tilde{c} = \tilde{a} + \tilde{b}, \quad (\text{B.1a})$$

$$c_0 = a_0 + b_0, \quad (\text{B.1b})$$

$$c_1 = a_1 + b_1. \quad (\text{B.1c})$$

B.2 Produkt AB

Das Produkt zweier RSB-Matrizen \mathbf{A} und \mathbf{B} von gleicher Größe n und mit dem gleichen Wert für m liefert eine neue RSB-Matrix \mathbf{C} , ebenfalls von Größe n mit dem Parameter m . Die Einträge von \mathbf{C} lauten:

$$\tilde{c} = \tilde{a}\tilde{b} - ma_0b_0 + (m-1)a_1b_1, \quad (\text{B.2a})$$

$$c_0 = \tilde{b}a_0 + \tilde{a}b_0 + (m-1)b_1a_0 + (m-1)a_1b_0 - 2ma_0b_0, \quad (\text{B.2b})$$

$$c_1 = \tilde{b}a_1 + \tilde{a}b_1 + (m-2)a_1b_1 - mb_0a_0. \quad (\text{B.2c})$$

B.3 Inverse Matrix

Die Inverse einer RSB-Matrix kann aus dem Produkt zweier Matrizen abgeleitet werden:

$$\mathbb{1} = \mathbf{A}\mathbf{A}^{-1}.$$

Es müssen also die Gleichungen (B.2) mit $\tilde{c} = 1$ und $c_0 = c_1 = 0$ nach den Einträgen von \mathbf{B} umgeformt werden. Somit ist die Inverse ebenfalls eine RSB-Matrix der Größe n mit dem Parameter m . Die Einträge von $\mathbf{A}^{-1} = \mathbf{B}$ lauten:

$$\tilde{b} = \frac{1}{\tilde{a} - \langle a \rangle} \left(1 + (1-m) \frac{a_0 - a_1}{\tilde{a} - a_1} - \frac{a_0}{\tilde{a} - \langle a \rangle} \right), \quad (\text{B.3a})$$

$$b_0 = -\frac{a_0}{(\tilde{a} - \langle a \rangle)^2}, \quad (\text{B.3b})$$

$$b_1 = \frac{1}{\tilde{a} - \langle a \rangle} \left(\frac{a_0 - a_1}{\tilde{a} - a_1} - \frac{a_0}{\tilde{a} - \langle a \rangle} \right) \quad (\text{B.3c})$$

mit

$$\langle a \rangle \equiv ma_0 + (1-m)a_1.$$

Die Komponenten von \mathbf{B} lassen sich auch wie folgt durch einander ausdrücken:

$$b_0 = -\frac{a_0}{(\tilde{a} - \langle a \rangle)^2}, \quad (\text{B.4a})$$

$$b_1 = \frac{a_0 - a_1}{(\tilde{a} - \langle a \rangle)(\tilde{a} - a_1)} + b_0, \quad (\text{B.4b})$$

$$\tilde{b} = \frac{1}{\tilde{a} - \langle a \rangle} + (1 - m)b_1 + mb_0. \quad (\text{B.4c})$$

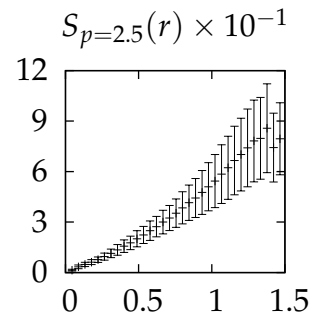
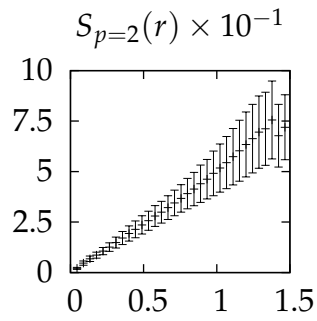
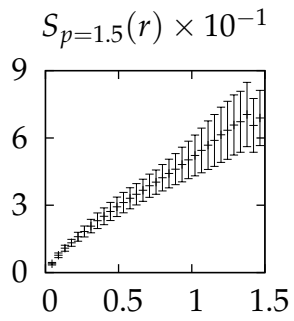
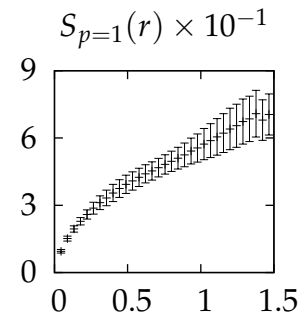
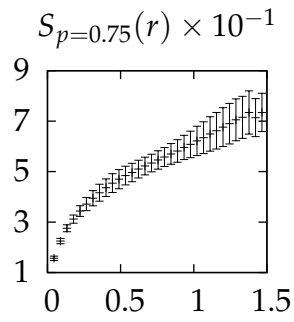
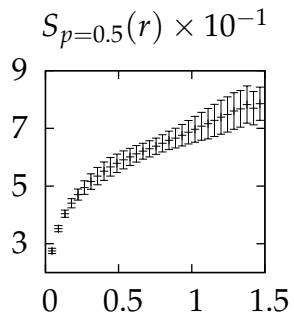
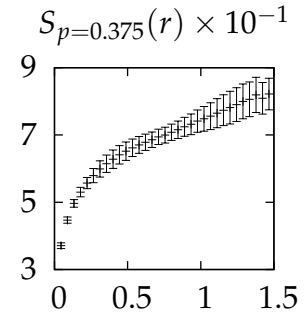
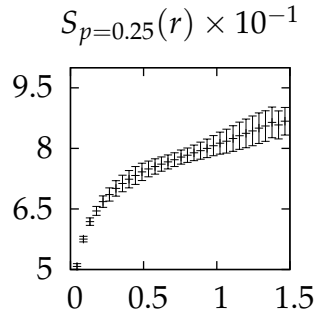
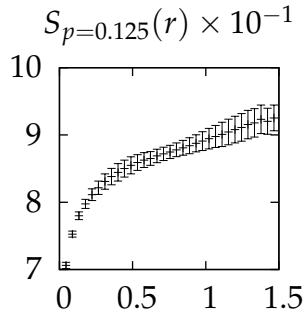
B.4 $\lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \text{Sp}(\ln \mathbf{A})$

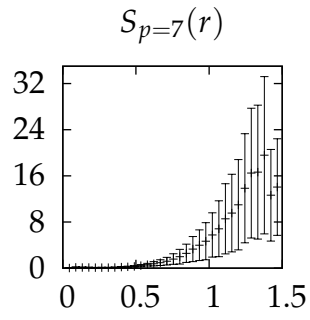
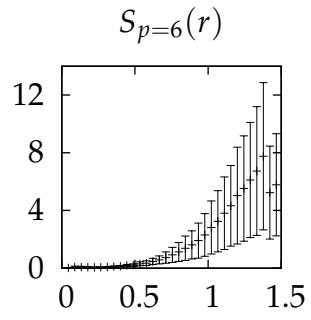
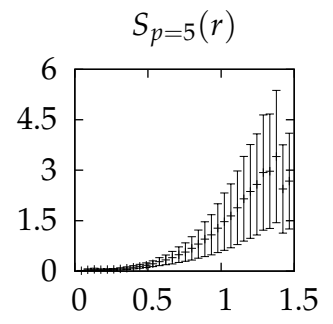
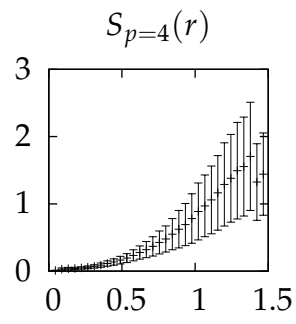
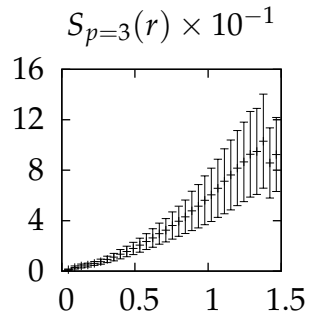
Die Spur vom Logarithmus einer 1-step RSB-Matrix führt im Grenzfall $\lim_{n \rightarrow 0}$ zu folgender Formel:

$$\lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \text{Sp}(\ln \mathbf{A}) \approx \frac{1}{m} \ln(\tilde{a} - \langle a \rangle) + \frac{a_0}{\tilde{a} - \langle a \rangle} - \frac{1 - m}{m} \ln(\tilde{a} - a_1). \quad (\text{B.5})$$

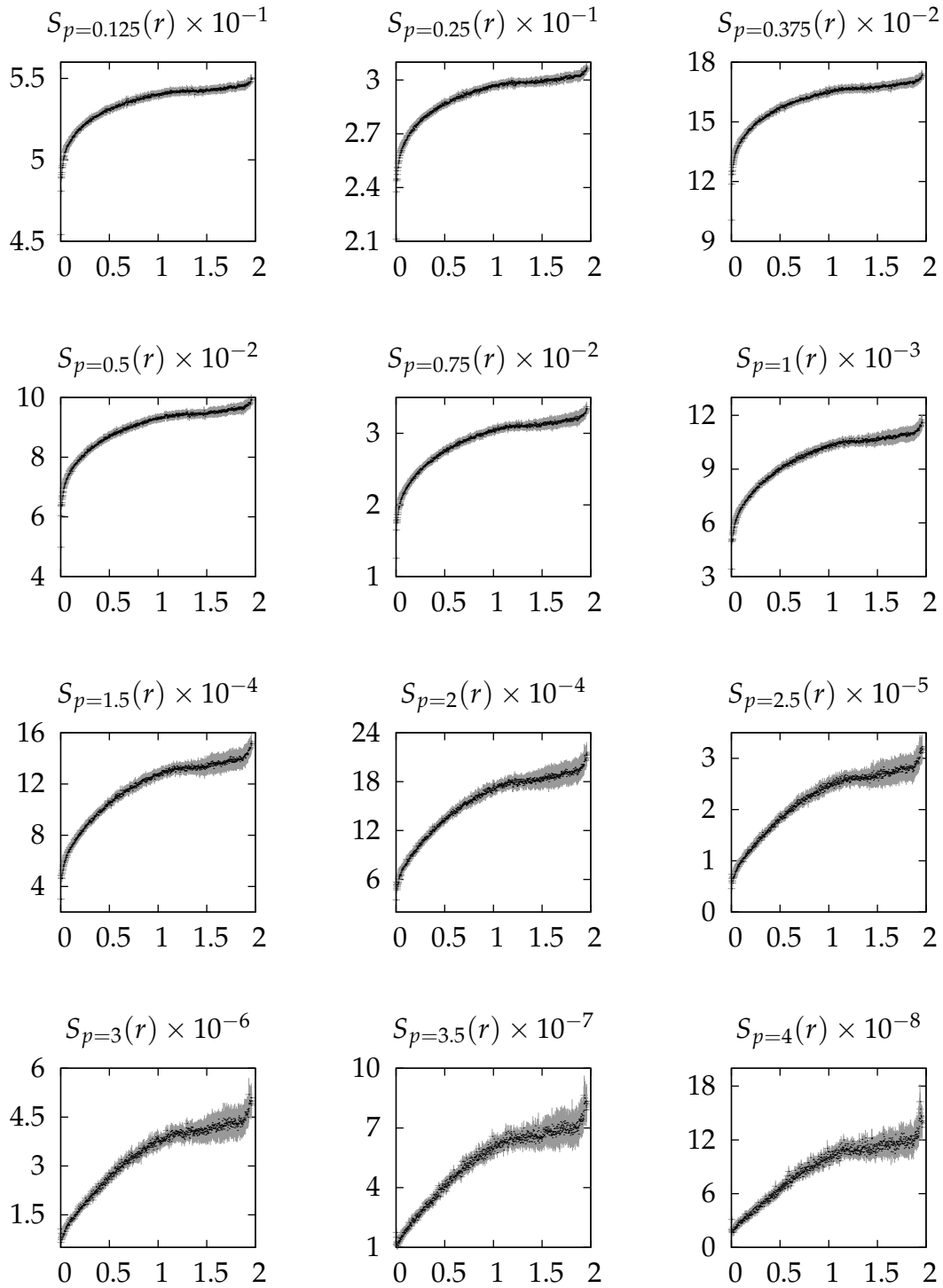
C Alle Strukturfunktionen

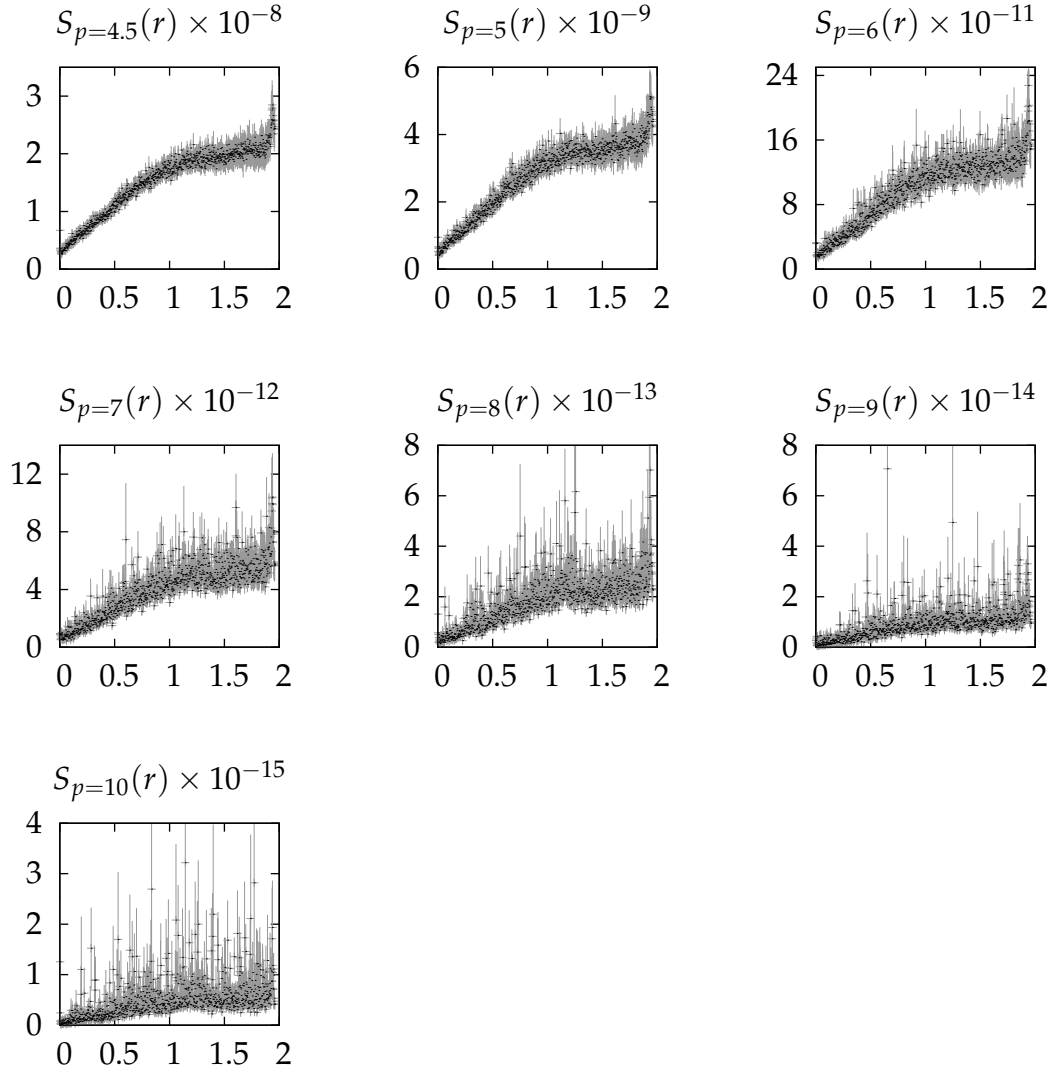
C.1 45x256-Gitter





C.2 1024x32-Gitter





Literaturverzeichnis

- [1] ADLER, Stephen L.: Over-relaxation method for the Monte Carlo evaluation of the partition function for multiquadratic actions. In: *Physical Review D* 23 (1981), Nr. 12, S. 2901–2904
- [2] BEVINGTON, Philip R. ; ROBINSON, D. K.: *Data Reduction and Error Analysis for the Physical Sciences*. The McGraw-Hill Companies, Inc., 1992
- [3] BINDER, Kurt: Monte Carlo Investigations of Phase Transitions and Critical Phenomena. In: DOMB, C. (Hrsg.) ; GREEN, M.S. (Hrsg.): *Phase Transitions and Critical Phenomena* Bd. 5b. New York : Academic Press Inc., 1976, S. 1–105
- [4] BINDER, Kurt: *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*. Berlin : Springer-Verlag, 1979. – Seiten 14–15
- [5] BOUCHAUD, Jean-Philippe ; MÉZARD, Marc ; PARISI, Giorgio: Scaling and intermittency in Burgers turbulence. In: *Physical Review E* 52 (1995), Nr. 4, S. 3656–3675
- [6] BURGERS, Johannes M.: *The nonlinear diffusion equation*. Dordrecht, Holland : D. Reidel Publishing Company, 1974
- [7] COLE, J.D.: On a quasi-linear parabolic equation occuring in aerodynamics. In: *Quart. Appl. Math.* 9 (1951), S. 225–236
- [8] CREUTZ, Michael: Confinement and the Critical Dimensionality of Space-Time. In: *Physical Review Letters* 43 (1979), Nr. 8, S. 553–556
- [9] CREUTZ, Michael: Monte Carlo study of quantized SU(2) gauge theory. In: *Physical Review D* 21 (1980), Nr. 8, S. 2308–2315
- [10] DÜBEN, Peter ; HOMEIER, Dirk ; JANSEN, Karl ; MESTERHÁZY, David ; MÜNSTER, Gernot ; URBACH, Carsten: Monte Carlo simulations of the randomly forced Burgers equation. In: *Europhysics Letters* 84 (2008), Nr. 4. – 40002

- [11] DÜBEN, Peter: *Numerische Anwendungen des Pfadintegralformalismus in hydrodynamischer Turbulenz*. 2009. – Diplomarbeit. – Westfälische Wilhelms-Universität Münster
- [12] FRISCH, Uriel: *Turbulence*. Cambridge : Cambridge University Press, 1995
- [13] HASENBUSCH, Martin: *Monte Carlo Simulationen in der statistischen Physik*. 2005. – <http://www-com.physik.hu-berlin.de/~hasenbus/vor2005.ps>
- [14] HAYOT, F. ; JAYAPRAKASH, C.: From scaling to multiscaling in the stochastic Burgers equation. In: *Physical Review E* 56 (1997), Nr. 4, S. 4259–4262
- [15] HOCHBERG, David ; MOLINA-PARÍS, Carmen ; PÉREZ-MERCADER, Juan ; VISSER, Matt: Effective Action for Stochastic Partial Differential Equations. In: *Physical Review E* 60 (1999), Nr. 6, S. 6343–6360
- [16] HOMEIER, Dirk: *Renormierungsgruppenflussgleichungen und hydrodynamische Turbulenz*. 2006. – Doktorarbeit. – Westfälische Wilhelms-Universität Münster
- [17] HOPF, Eberhard: The partial differential equation $u_t + uu_x = \mu u_{xx}$. In: *Comm. Pure Appl. Math.* 3 (1950), S. 201–230
- [18] KARDAR, Mehran ; ZHANG, Yi-Cheng: Scaling of Directed Polymers in Random Media. In: *Physical Review Letters* 58 (1987), Nr. 20, S. 2087–2090
- [19] KENNEDY, A.D. ; PENDLETON, B.J.: Improved Heatbath Method for Monte Carlo Calculations in Lattice Gauge Theories. In: *Physics Letters* 156B (1985), Nr. 5,6, S. 393–399. – insbesondere Seite 394
- [20] MARTIN, P.C. ; SIGGIA, E.D. ; ROSE, H.A.: Statistical Dynamics of Classical Systems. In: *Physical Review A* 8 (1973), Nr. 1, S. 423–437
- [21] MESTERHÁZY, David: *Investigation of Burgers Equation in the Path Integral Formalism*. 2008. – Bachelorarbeit. – Humboldt-Universität Berlin
- [22] MÉZARD, Marc ; PARISI, Giorgio: Replica field theory for random manifolds. In: *Journal de Physique I* 1 (1991), Nr. 6, S. 809–836
- [23] NEWMAN, Mark ; BERKEMA, Gerard: *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*. New York : Oxford University Press Inc., 1999
- [24] PARISI, Giorgio: Magnetic properties of spin glasses in a new mean field theory. In: *Journal of Physics A* 13 (1980), S. 1887–1895

- [25] PRESS, William H. ; TEUKOLSKY, Saul A. ; VETTERLING, William T. ; FLANNERY, Brian P.: *Numerical Recipes in C*. Cambridge : Cambridge University Press, 1999
- [26] TOUSSAINT, D.: Error Analysis of Simulation Results: A Sample Problem. In: DEGRAND, T. (Hrsg.) ; TOUSSAINT, D. (Hrsg.): *From Action to Answers*. Singapore : World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., 1990, S. 121–132
- [27] WHITMER, Charles: Over-relaxation methods for the Monte Carlo simulations of quadratic and multiquadratic actions. In: *Physical Review D* 29 (1984), Nr. 2, S. 306–311
- [28] WOLFF, Ulli: Monte Carlo errors with less errors. (2006). – arXiv:hep_lat/0306017v4
- [29] YEDIDIA, Jonathan: *Quenched Disorder: Understanding Glasses using a Variational Principle and the Replica Method*. 1992. – <http://nerdwisdom.files.wordpress.com/2007/08/santafe.pdf>
- [30] YOUNG, David M. Jr.: *Iterative Methods for Solving Partial Difference Equations of Elliptic Type*. 1950. – Doktorarbeit. – Harvard University

Diese Arbeit ist natürlich hauptsächlich auf meinen Mist gewachsen. Allerdings ...

... danke ich ...

... für die Betreuung dieser Arbeit, das Zeitnehmen und die Tipps:

Prof. Dr. G. Münster und Dr. Dirk Homeier.

... für die Durchhalteparolen, die emotionale Unterstützung und das Mich-bis-hier-hin-Zerren, die Anrufe, die E-mails und die Bürobesuche sowie das Abholen zum Sport, die Mittagessen und alles, was mir sonst irgendwie meinen Verstand bewahrt hat:

meinen Eltern, Felix, Milena, Richard und Andi.

... für die immer unterhaltsame und gerade zum richtigen Zeitpunkt aufkommende arbeitsintensive Stimmung im ehemals lautesten Büro auf dem Flur:

Kai, Thomas, Martin, Felix, Tobi, Sven und Feng.

... für das gewissenhafte und ausdauernde Korrekturlesen:

meiner Mutter und Felix.

“Diplomarbeit abgeben, bitte!”

† † †

Selbstständigkeitserklärung

Hiermit versichere ich, diese Diplomarbeit selbstständig angefertigt und keine als die angegebenen Hilfsmittel verwendet zu haben.

Christopher Aue

Münster, 8. September 2011