

Stochastische Theorie von Transportprozessen in ungeordneten und fraktalen Systemen

Dissertation A
zur Erlangung des akademischen Grades
Dr. rer. nat.

dem
Wissenschaftlichen Rat der
Universität Leipzig
Fakultät für Mathematik und Naturwissenschaften

eingereicht von
Dipl.-Phys. Uwe Renner, geboren am 9.7.1964 in Cottbus

angefertigt im
Wissenschaftsbereich Quantenfeldtheorie
des Fachbereichs Physik der Universität Leipzig

betreut von
Prof. Dr. habil. Günter Vojta
Universität Leipzig

Beschluß über die Verleihung des akademischen Grades
Doktor eines Wissenschaftszweiges vom

BIBLIOGRAPHISCHE BESCHREIBUNG

Renner, Uwe

Stochastische Theorie von Transportprozessen in ungeordneten und fraktalen Systemen

Leipzig, Universität Leipzig, Diss.,
Juli 1992,
97 S., 44 Lit., 19 Abb.

REFERAT

Es wird die anomale Diffusion in ungeordneten und fraktalen Systemen betrachtet. Die Verwandtschaft beider, ausgedrückt durch die von zwei verschiedene Wanderungsdimension, liegt im besonderen Skalenverhalten der Wahrscheinlichkeitsdichte für den Aufenthalt des Teilchens bzw. des mittleren Verschiebungsquadrates. Zur detaillierten Untersuchung des Diffusionsprozesses wird ein Formalismus zur Beschreibung von Sprungprozessen in stetiger Zeit verwendet. Im Fall ungeordneter Systeme wird die Wartezeitverteilung und damit die Wahrscheinlichkeitsdichte für den Aufenthalt des Teilchens bestimmt. Die Dimension der Trajektorie in solchen Strukturen kann auf einfache Weise ermittelt werden. Außerdem wird eine Verbindung zum fraktionalen Kalkül hergestellt.

Für endlich ramifizierte Fraktale wird ein allgemeiner Formalismus zur Bestimmung der Wartezeitverteilung und der Wanderungsdimension vorgestellt. Dieser ist in sich geschlossen von der Aufstellung einer Funktionalgleichung im LAPLACE-Raum bis hin zur Darstellung im ursprünglichen Zeitbereich durch LAGUERRE- Polynome. Als wesentliche Methode wird die Renormierung der Wartezeitverteilung verwendet. Ausgegangen wird von der Generatorstruktur des Fraktals. Die Information über die Transfereigenschaft zwischen den Gitterpunkten ist hierbei vollkommen ausreichend. Zur Verdeutlichung der Vorgehensweise sind zahlreiche Beispiele enthalten.

Die Ursachen eines anomalen Verhaltens bei chemische Reaktionen, ausgedrückt durch einen nicht exponentiellen Charakter des zeitlichen Zerfalls der Stoffe, wird ebenfalls untersucht. Dabei bedient sich der Autor einer stochastischen Betrachtungsweise. Ausgangspunkt ist die Bestimmung der Wartezeitverteilung für den Umwandlungsprozeß, um diese in einer einheitlichen Theorie von Diffusion und Umwandlung im Mehrzustandsformalismus berücksichtigen zu können. Auch hierbei wird eine Renormierungsmethode verwendet. Die verzögerte Ausbreitung eines Stoffes aufgrund von reversible Reaktionszyklen kann bei Fraktalen explizit gezeigt werden.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Zur Geometrie von Fraktalen	2
1.2	Anomale Diffusion	3
1.3	Gliederung dieser Arbeit	9
2	Grundlagen	11
2.1	Theorie stochastischer Sprungprozesse in stetiger Zeit (CTRW-Theorie) . . .	11
2.2	CTRW mit mehreren inneren Zuständen	14
3	Ungeordnete Systeme	17
3.1	Isotrope Wanderung	17
3.2	Räumlich-zeitliche Korrelation	25
3.3	Anisotrope Wanderung	27
3.4	Diffusion im fraktionalen Kalkül	31
3.4.1	Motivation	31
3.4.2	Darstellung der Ableitung	31
3.4.3	Beziehung zur CTRW-Theorie	33
4	Fraktale und Renormierung	35
4.1	Aufstellung der Funktionalgleichung	35
4.2	Die renormierte Grenzverteilung $w(t)$	43
4.3	Mittlere Schrittzahlen	46
4.4	Beispiele	47
4.4.1	Die Gerade	47
4.4.2	SIERPIŃSKI-Dreieck, Basis $b = 2$, Dimension $d = 2$	48
4.4.3	SIERPIŃSKI-Tetraeder, $b = 2$, d beliebig	49
4.4.4	SIERPIŃSKI-Dreieck, $b = 3$, $d = 2$	49
4.5	Die Entwicklungskoeffizienten von $w(u)$	50
4.6	Zur allgemeinen Lösung der Funktionalgleichung	53
4.7	Darstellung von $w(t)$ durch Exponentialreihen	54
4.8	Entwicklung nach LAGUERRESchen Polynomen	57
4.9	Zusammengesetzte und stochastische Fraktale	58
4.10	Mehrzustandsrenormierung	61

5	Chemische Reaktionen	64
5.1	Allgemeines	64
5.2	Die Zerfallsreaktion $A \rightarrow B$	65
5.3	Zweizustandsreaktionen $A \leftrightarrow B$	67
5.4	Die Annihilations-Reaktion $A + B \rightarrow 0$	71
5.4.1	Die Funktionalgleichung für $w(u)$	72
5.4.2	Die Reaktion $A + A \rightarrow 0$	72
5.5	Reaktionen auf Gittern	74
6	Ausblick	77
A	Weitere Beispiele	78
A.1	Fraktalbäume	78
A.2	Erweiterung des vorigen Beispiels	79
A.3	Die KOCH-Kurve	80
A.4	Die modifizierte KOCH-Kurve	82
A.5	Ein teppichähnliches Fraktal	83
A.6	Geradenabschnitte mit variabler Länge L	84
A.7	CTRW mit Flügen	86
A.8	Modell für turbulenten Transport	87
	Literaturverzeichnis	89
	Abbildungsverzeichnis	92

BEZEICHNUNGEN UND SYMBOLE

d	euklidische Dimension
\bar{d}	fraktale Dimension
d_w	Wanderungsdimension
\tilde{d}	spektrale Dimension
\mathbf{r}, \mathbf{q}	Ortsvektoren
r, q	Betrag der Ortsvektoren
\mathbf{k}	FOURIER-transformierte Ortsvariable
k	Betrag von \mathbf{k}
$f(\mathbf{k}) = \iiint d^d \mathbf{r} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} f(\mathbf{r})$	FOURIER-Transformierte der Original-Funktion $f(\mathbf{r})$ im Raum der Dimension d
t	Zeitvariable
u	LAPLACE-transformierte Zeitvariable
$f(u) = \int_0^\infty dt e^{-ut} f(t)$	LAPLACE-Transformierte der Original-Funktion $f(t)$
s	Variable bei der MELLIN-Transformation
$f(s) = \int_0^\infty dt t^{s-1} f(t)$	MELLIN-Transformierte der Original-Funktion $f(t)$
$w(\mathbf{r}, t)$	Dichte der Wartezeitverteilung, meist auch nur Wartezeitverteilung genannt
$w(t)$	ortsunabhängige Wartezeitverteilungsdichte
$w_{ij}(\mathbf{r}, t)$	Dichte der Mehrzustandswartezeitverteilung für Übergänge vom Zustand j in den Zustand i
$P(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}_0, t_0)$	Dichte des Propagators der Aufenthaltswahrscheinlichkeit mit Angabe des Startpunktes \mathbf{r}_0 und der Anfangszeit t_0
$P_{ij}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}_0, t_0)$	gleiche Größe im Mehrzustandsformalismus
*	Faltungssymbol
\propto	proportional
\sim	asymptotisch gleich
$\langle \dots \rangle$	Klammern zur Mittelung bzw. zur Projektion auf die Zustände

Kapitel 1

Einleitung

Die stochastische Beschreibung von Diffusionsprozessen, d.h. der zufälligen, irregulären Ausbreitung von Teilchen in homogenen Raumstrukturen, ist in vieler Hinsicht eine wohlverstandene Theorie [1]. Hierzu bedient man sich in einfacher Weise der gewöhnlichen Diffusionsgleichung oder in entwickelter Form der Theorie stochastischer Differentialgleichungen.

Die Diffusion in fraktalen und ungeordneten Systemen[2, 3] unterscheidet sich von der gewöhnlichen Diffusion nach dem FICKSchen Gesetz. So hat z.B. eine räumliche Ableitung oder Gradientenbildung der Wahrscheinlichkeitsdichte im herkömmlichen Sinne keinen definierten Ausdruck. Auch das asymptotisch zeitliche Verhalten des mittleren Verschiebungsquadrates weicht von der gewöhnlichen zeitlichen Proportionalität ab. Es folgt allgemeiner der Form $\langle r^2 \rangle \sim t^\gamma$. Eine Abweichung vom klassischen Fall mit $\gamma = 1$ wird als anomal bezeichnet. Die Bremsung der Diffusion ($\gamma < 1$) in den hier betrachteten Systemen kommt durch die besondere Raumstruktur zustande. Jedoch reicht die HAUSDORFF-Dimension zur Charakterisierung des Diffusionsprozesses nicht aus. Schleifen und labyrinthartige Verzweigungen beeinflussen die freie Ausbreitung der Teilchen. Deren Wanderung unterliegt einem Zufallsprozeß sowohl hinsichtlich der räumlichen Ausbreitung als auch der zeitlichen Dauer. Es können bestimmte Wegabschnitte mehrfach besucht werden, was in der Bestimmung der geometrischen Dimension unberücksichtigt bleibt. Dieser Wanderungseffekt wird durch die Wanderungsdimension $d_w = 2/\gamma$ erfaßt.

Die fraktale Trajektorie des diffundierenden Teilchens, wie sie schon bei der gewöhnlichen BROWNSchen Diffusion vorliegt, wird durch die Struktur des Mediums selbst noch weiter modifiziert. Es liegt nahe, eine solche Bahn durch einfache Fraktalmodelle zu untersuchen. Der räumlich-zeitliche Zufallsprozeß in ungeordneten als auch fraktalen System unterliegt in beiden Fällen einer Skalensymmetrie, der Ähnlichkeit bzw. Selbstähnlichkeit. Durch Skalierung der Raum- bzw. Zeitskala erhält man dieselbe Prozeßgröße, etwa die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte, an einem anderen Ort zu einer anderen Zeit. Wegen dieser Symmetrieeigenschaft und den damit verbundenen ähnlichen Ergebnissen werden ungeordnete und fraktale Systeme hier nebeneinander behandelt. Fraktale sind idealisierte mathematische Modelle, die u.a. zur Beschreibung ungeordneter Systeme dienen.

Zur Untersuchung der stochastischen Ausbreitung wird das Modell des CTRW¹ verwendet. Eine solche Vorgehensweise hat den Vorteil einer globalen Beschreibung durch den Elementarprozeß für einen Schritt. Dieser wird entsprechend der Modellvorstellung bestimmt.

¹Erklärung erfolgt in Kapitel 2.

Der Formalismus ist auch auf fraktale Strukturen anwendbar. Zumindest wird dies für den zeitlichen Prozeß in der vorliegenden Arbeit gezeigt.

Seit einiger Zeit wird versucht, den Diffusionsprozeß durch einen Kalkül mit gebrochenzahliger Ableitung zu beschreiben. Die Ordnung der Ableitung steht in einem engen Zusammenhang mit den Elementarprozessen. Für den POISSON-Prozeß mit seinem MARKOV-Charakter ist eine zeitliche Ableitung des Prozesses von 1. Ordnung charakteristisch. Ableitungen mit niedrigerer Ordnung berücksichtigen die Vergangenheit, d.h. den Wert der Prozeßgröße bei zurückliegenden Zeiten. Man sagt auch, daß das Teilchen ein Gedächtnis besitzt. Die zugehörigen Wahrscheinlichkeitsdichten gehören einer reichhaltigen Klasse von Funktionen an, den FOX-Funktionen.

Die reine Wanderung des Teilchens ist oft durch andere Prozesse begleitet. Eine der Ursachen ist die energetische Umgebung des Teilchens. Durch Potentialbarrieren kann die Wanderung zusätzlich behindert werden. Das Teilchen kann aber auch in einen Potentialtopf geraten bzw. eine Bindung mit einem Partner eingehen. Solche Bindungen erfolgen z.B. durch chemische Reaktionen, bei dem das Teilchen hinterher neue energetische Eigenschaften besitzt. Umwandlungen werden zweckmäßig durch den Mehrzustandsformalismus beschrieben. Entsprechend den möglichen energetischen Bindungsformen mit den zur Verfügung stehenden Reaktionspartnern werden dem betrachteten Teilchen Zustände zugeordnet. Gleichmaßen kann man dabei der Wanderung selbst Rechnung tragen. Die gleichzeitige Behandlung von Umwandlung und Diffusion ist anwendbar auf die Beschreibung diffusionskontrollierter chemischer Reaktionen.

1.1 Zur Geometrie von Fraktalen

In der Natur gibt es Strukturen, die sich durch eine scheinbare Komplexität auszeichnen. Schaut man jedoch genauer hin, so findet man oft ein einfaches Konstruktionsprinzip. Durch Vergrößern bzw. Verkleinern entsteht bei geeigneter Wahl des Betrachtungsmaßstabes für bestimmte Punkte des Gebildes dasselbe Bild. Man bezeichnet diese Symmetrie als Selbstähnlichkeit bzw. Skaleninvarianz. MANDELBROT [4] gab solchen Objekten den Namen *Fraktale*. Sie stellen ein modernes Paradigma zur Beschreibung realer Strukturen dar.

Es besteht ein prinzipieller Unterschied zur üblichen geometrischen Konstruktion durch periodisches Aneinanderfügen gleichartiger Bestandteile. Diese Translationsinvarianz findet vielfache Anwendung, so z.B. in der Kristallphysik. Sie ermöglicht eine einfache Beschreibung des Zustandes von Teilchen, da die Kenntnis über die Elementarzelle ausreicht.

Der Name Fraktale steht auch für ein weiteres Charakteristikum, die Dimension des Objektes. Diese ist i.a. gebrochenzahlige. Hier werden nur solche Fraktale betrachtet, bei denen globale und lokale Dimension gleich sind. Eine genaue Definition der Dimension erfolgt mit der Maßtheorie [5]. Wie man leicht zeigen kann, besitzen gewöhnliche Fraktale im euklidischen Einbettungsraum das LEBESGUE-Maß 0. Dies ist aber eine unbefriedigende Charakterisierung für den Inhalt. Von HAUSDORFF stammt eine umfassendere Theorie. Ein spezieller Fall der allgemeinen Definition der HAUSDORFF-Dimension ist die MANDELBROT-Dimension \bar{d} , die zumeist nur fraktale Dimension genannt wird:

$$\bar{d} = - \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\ln \mu(\epsilon)}{\ln \epsilon}. \quad (1.1)$$

Hierbei ist $\mu(\epsilon)$ die minimale Anzahl der Elemente mit dem Durchmesser ϵ , die zur Überdeckung der betrachteten Menge nötig ist. Zerfällt beim Verkleinern von ϵ um einen Skalenfaktor α die Anzahl immer in dieselbe Anzahl μ neuer Elemente, so vereinfacht sich dies im Grenzfall unendlicher Verfeinerung zu

$$\bar{d} = \frac{\ln \mu}{\ln \alpha}. \quad (1.2)$$

Diese Definition ist ausreichend für einfach konstruierte Fraktale. Ihnen dient meist ein Generator als Grundbaustein.

Fraktale sind Modelle zur Beschreibung natürlicher Objekte. Hierbei besticht die oft einfache Konstruktionsbeschreibung, was auch der theoretischen Behandlung förderlich ist. Doch kein Modell ist perfekt. Die strenge Ähnlichkeitssymmetrie erfordert es, daß sich die Struktur ins unendlich Kleine sowie ins Große erstreckt. Es gibt jedoch eine natürliche obere und untere Grenze. Zum einen besitzen reale Objekte endliche Ausmaße, zum anderen ist deren atomarer Aufbau die Ursache, warum man die Konstruktion nicht beliebig verfeinern kann. Die fraktale Konstruktion ist somit durch einen unteren bzw. oberen *cut-off* begrenzt.

Jedes Meßergebnis hängt auch vom Einfluß der Meßapparatur ab. Ein Grundproblem bei jeder Messung ist die Auflösung des Gerätes, mit dem man das Meßobjekt zu untersuchen hat. Um ein zufriedenstellendes Ergebnis zu erreichen, ist es notwendig, das Geschehen, etwa die Diffusion, über viele Größenordnungen zu verfolgen. Der interessierende Bereich richtet sich dabei nach der erforderlichen Genauigkeit. Unterhalb bzw. in der Nähe der Auflösungsgrenze, die entscheidend von der Größe der Sonde abhängt, sind keine zufriedenstellenden Ergebnisse zu erwarten. Das Verhältnis der Größen von Sonde r_s und Untersuchungsobjekt r_o bestimmt den Gültigkeitsbereich der Messung. Bei Fraktalen mit dem Skalierungsfaktor α sind demnach rund

$$n = \frac{\ln \frac{r_o}{r_s}}{\ln \alpha}$$

Stufen als Skalenbereich relevant. Inwieweit ein reales Fraktal, gekennzeichnet durch eine endliche Zahl von Stufen, mit dem idealen in Übereinstimmung steht, kann durch eine Zugehörigkeitsfunktion im Rahmen der Theorie unscharfer Mengen beschrieben werden. Hierbei wird das reale Fraktal als eine solche Menge aufgefaßt [6].

1.2 Anomale Diffusion

Physikalische Prozesse werden durch den räumlich-zeitlichen Zustand eines Systems charakterisiert. Es ist nicht verwunderlich, daß Größen wie Wahrscheinlichkeitsdichten oder deren Momente für Fraktale ungewöhnliches Verhalten aufweisen. Man kann sich fragen, welchen Einfluß nichtreguläre Strukturen wie ungeordnete Medien oder Fraktale auf das räumlich-zeitliche Geschehen haben. Dies wirft sofort die Frage auf, welche Auswirkungen der zugrunde liegende Raum überhaupt auf den Prozeßablauf hat. Wir wollen hier vor allem diffusive Prozesse betrachten, d.h. die Ausbreitung von Teilchen im Raum infolge von Zufallswanderungen. Für die klassische Beschreibung der Diffusion im euklidischen Raum der Dimension d gibt es eine ausgebaute Theorie. Die mathematische Beschreibung erfolgt hier durch partielle Differentialgleichungen vom parabolischen Typ für die Wahrscheinlichkeitsdichte $P(x_1, \dots, x_d, t)$. Es stellt sich heraus, daß bei der gewöhnlichen Diffusion für das

mittlere Verschiebungsquadrat die Proportionalität

$$\langle r^2 \rangle \propto t \quad (1.3)$$

gilt. Abweichungen von der zeitlichen Linearität werden als anomal bezeichnet. Bei solchen Prozessen ist dann für große Zeiten

$$\langle r^2 \rangle \sim t^\gamma \quad (1.4)$$

mit $\gamma \neq 1$. Eine Bremsung der Diffusion ist durch $\gamma < 1$ gekennzeichnet, eine Beschleunigung durch $\gamma > 1$. Normale Diffusion bedeutet somit $\gamma = 1$. Üblicherweise schreibt man

$$\gamma = \frac{2}{d_w}.$$

Dabei ist d_w die Wanderungsdimension des Teilchens. Deren Berechnung wird eine der Zielstellungen dieser Arbeit sein.

Die Bremsung der Diffusion kommt u.a. dadurch zustande, daß es eine große Anzahl an Wegen gibt, die eine radiale Ausbreitung behindern. Das können Schleifen in Strukturen sein, aber auch faserförmige Kanäle mit Enden, die keine weitere Verzweigung bieten und das Teilchen somit zwingen, den eingeschlagenen Weg wieder rückwärts zu gehen. Allgemein bewirken Unordnungseffekte eine Anomalie im Prozeßablauf. Diese behindern die symmetrische Ausbreitung in alle zur Verfügung stehenden Richtungen. Solche Unordnungseffekte können auch durch Energiebarrieren verursacht sein. Zur Modellierung dieser Zustände bieten sich hierarchische Systeme an. Dabei wird jedem möglichen Raumpunkt eine Barriere nach einem hierarchischen Bildungsprinzip zugeordnet.

Der Zusammenhang zwischen den räumlichen und zeitlichen Prozessen wird durch den Verlauf der Wahrscheinlichkeitsdichte für große Zeiten am Startpunkt r_0 mit folgender Proportionalität vermittelt:

$$P(r_0, t) \sim t^{-\tilde{d}/2}. \quad (1.5)$$

Damit wird die spektrale Dimension \tilde{d} definiert. Man bedenke, daß wegen der räumlichen Normierung der Wahrscheinlichkeitsdichte die Struktur des Mediums den zeitlichen Verlauf mitbestimmt. Im Gegensatz dazu geht bei der Bestimmung der Wanderungsdimension dieser Einfluß durch die Momentenbildung weitgehend verloren. Zwischen diesen Dimensionen besteht eine einfache Kopplung:

$$\tilde{d} = 2 \frac{\bar{d}}{d_w}. \quad (1.6)$$

Diese Beziehung kann man aus einfachen Skalierungsüberlegungen erhalten.

Beschreibung durch Diffusionsgleichungen

Eine Möglichkeit zur Beschreibung eines anomalen Diffusionsverhaltens ist die Aufstellung und Lösung passender Diffusionsgleichungen. Die gesuchte Wahrscheinlichkeitsdichte $P(r, t)$ soll eine mittlere Dichte für das System am Ort r zur Zeit t darstellen. Allgemein muß jedoch, sofern nicht Teilchen durch Reaktion entstehen oder verschwinden, die Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} P(r, t) + \operatorname{div} j(r, t) = 0 \quad (1.7)$$

erfüllt sein. Dabei ist $j(\mathbf{r}, t)$ die jeweilige Stromdichte am Punkt \mathbf{r} zur Zeit t . Wir wollen hier nur den radialen Einfluß untersuchen und gehen daher vom Vektor \mathbf{r} zum polaren Abstand r über. Je nachdem, welche Vorstellung man von der Stromdichte hat, kann man verschiedene Ansätze machen, von denen einige kurz erwähnt seien.

1. Eine mögliche Wahl besteht in der Abhängigkeit:

$$j(r, t) = D r^{-\vartheta} \frac{\partial}{\partial r} P(r, t).$$

Dabei wird angenommen, daß der Diffusionsstrom mit zunehmenden Abstand algebraisch mit einer Konstanten ϑ abnimmt. Die Konstante D ist stoffspezifisch. Diese Wahl führt im Raum der Dimension d auf eine Diffusionsgleichung für die Einhüllende $P(r, t)$ der Wahrscheinlichkeitsdichte [7]:

$$\frac{\partial}{\partial t} P(r, t) - D r^{1-d} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^{d-1-\vartheta} \frac{\partial}{\partial r} P(r, t) \right) = 0.$$

Partielle Lösungen erhält man durch Separation in $P(r, t) = R(r) T(t)$. Eine allgemeine Lösung ist

$$P_1(r, t) = c_1 (Dt)^{-\frac{d}{2+\vartheta}} \exp \left(-\frac{r^{2+\vartheta}}{(2+\vartheta)^2 Dt} \right).$$

Eine andere mögliche Beschreibung erfolgt durch die Differentialgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} P(r, t) - D r^{1-d} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^{d-1} \frac{\partial}{\partial r} r^{-\vartheta} P(r, t) \right) = 0,$$

deren Lösung u.a.

$$P_2(r, t) = c_2 (Dt)^{-\frac{d+\vartheta}{2+\vartheta}} r^\vartheta \exp \left(-\frac{r^{2+\vartheta}}{(2+\vartheta)^2 Dt} \right)$$

ist. Die Konstanten c_1 und c_2 bestimmen sich aus der Normierung von $P(r, t)$.

2. Nimmt man hingegen an, daß das Verhalten des Diffusionsstroms durch die zeitliche Änderung der Diffusionskonstanten beeinflusst wird, d.h. $D = D(t)$ nicht mehr zeitlich konstant ist, so erhält man

$$P_3(r, t) = c_3 \left(\int_0^t d\tau D(\tau) \right)^{-\frac{d}{2}} \exp \left(-\frac{r^2}{4} \left(\int_0^t d\tau D(\tau) \right)^{-1} \right).$$

Die Konstante c_3 ist wiederum durch Normierung festzulegen. Wählt man insbesondere $D(t) = Dt^{-\frac{\vartheta}{2+\vartheta}}$, so ergibt dies

$$P_4(r, t) = c_4 t^{-\frac{d}{2+\vartheta}} \exp \left(-\frac{r^2}{2(2+\vartheta)Dt^{\frac{2}{2+\vartheta}}} \right).$$

In allen Fällen erhält man für das mittlere Verschiebungsquadrat bei großen Zeiten:

$$\langle r^2 \rangle \sim t^{\frac{2}{2+\vartheta}}.$$

Wie man sieht, kommt man mit verschiedenen Ansätzen zum gleichen Resultat. Das ist auch nicht verwunderlich. Denn in all diesen Fällen wurde die Skalierungseigenschaft

$$P(r, t) = \alpha^d P(\alpha r, \beta t)$$

mit $2 + \vartheta = \frac{\ln \alpha}{\ln \beta}$ erfüllt. Welcher Ansatz nun der für das System typische ist, wird aber nicht ersichtlich. Der Skalierungsansatz scheint jedoch eine allgemeinere Eigenschaft zu sein, deshalb wollen wir uns später mit diesem noch näher beschäftigen.

Eine mehr den Vorstellungen eines fraktalen Raumes angepaßte Form der Beschreibung von Diffusionsprozessen stammt von FOURCADE und TREMBLAY [8]. Sie beschreiben das Diffusionsrauschen durch eine Analysis im fraktalen Raum der Dimension \bar{d} bei radialer Symmetrie. Eine Übertragung dieser Methoden wie der fraktalen FOURIER-Transformation auf allgemeine Transportprozesse ist für eine näherungsweise Lösung denkbar. So kann man Lösungsmöglichkeiten der CHAPMAN-KOLMOGOROV-Gleichung

$$P(\mathbf{r}, t) = \int d^{\bar{d}} \mathbf{q} P(\mathbf{r} - \mathbf{q}, t - \tau) P(\mathbf{q}, \tau)$$

in diesen Räumen untersuchen. Für die räumliche FOURIER-Transformierte

$$P(k, t) = (2\pi)^{\frac{\bar{d}}{2}} k^{\frac{\bar{d}}{2}-1} \int_0^\infty dr r^{\frac{\bar{d}}{2}} J_{\frac{\bar{d}}{2}-1}(kr) P(r, t)$$

mit $J_\alpha(x)$ als BESSEL-Funktion der Ordnung α erhält man im isotropen Fall die Funktionalgleichung

$$P(k, t) = P(k, t - \tau) P(k, \tau).$$

Diese wird z.B. durch

$$P(k, t) = \exp(ct f(k)),$$

wobei $f(k)$ beliebig ist, erfüllt. Insbesondere sind die LÉVY-Verteilungen mit

$$P(k, t) = \exp(-ct k^{d_w})$$

Lösungen. Für diese erhält man nach Rücktransformation:

$$P(r, t) = \frac{\pi^{-\bar{d}/2} 2^{1-\bar{d}}}{d_w (ct)^{\bar{d}/d_w}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma\left(\frac{2n+\bar{d}}{d_w}\right)}{n! \Gamma\left(n + \frac{\bar{d}}{2}\right)} \left(-\frac{r^2}{4(ct)^{2/d_w}}\right)^n.$$

Dabei ist $\Gamma(x) = \int_0^\infty y^{x-1} \exp(-y) dy$ die Gamma-Funktion. Für $d_w = 1$ erhält man durch Ausführen der Summation den Fall der CAUCHY-Verteilung:

$$P(r, t) = \frac{\Gamma\left(\frac{\bar{d}+1}{2}\right) ct}{\pi^{\frac{\bar{d}+1}{2}} \left((ct)^2 + r^2\right)^{\frac{\bar{d}+1}{2}}}.$$

Der Fall $d_w = 2$ führt auf die GAUSS-Verteilung. Verteilungen mit $d_w > 2$ sind nicht mehr LÉVY-stabil, d.h. die räumlichen Momente $\langle r^j \rangle$ sind für $j > 2$ nicht mehr endlich. Jedoch ist für $j < d_w < 2$:

$$\langle r^j \rangle \sim t^{\frac{j}{d_w}}.$$

Die bisher betrachteten Methoden eignen sich zur groben qualitativen Beschreibung des Diffusionsverhaltens in kontinuierlichen Räumen. Insbesondere wird der zeitlich asymptotische Verlauf der Wahrscheinlichkeitsdichte und ihrer Momente gut beschrieben. Eine Anwendung auf konkrete Strukturen wie Fraktale ist jedoch nicht so einfach möglich. Hierzu eignet sich besser das folgende Verfahren.

Der Mastergleichungs-Formalismus

In vielen Fällen ist eine diskrete Gitter-Approximation naheliegend. So besteht die Hoffnung, daß bei Verfeinerung des Gitters immer genauere Ergebnisse erreicht werden. Es bezeichnen die \mathbf{r}_i die jeweiligen Gitterpunkte, und die w_{ij} sind die Sprungraten zu den nächsten Nachbarn, d.h. die Zahl der Übergänge pro Zeiteinheit vom Punkt \mathbf{r}_j nach \mathbf{r}_i . Der Diffusionsprozeß wird dann durch die MARKOVsche Mastergleichung

$$P(\mathbf{r}_i, t) = \sum_{j(i)} \{w_{ij}P(\mathbf{r}_j, t) - w_{ji}P(\mathbf{r}_i, t)\} \quad (1.8)$$

beschrieben. Die Summation bezieht sich daher auf diese nächsten Nachbarn j von i . Der erste Term der Summe beschreibt den Zufluß von Teilchen, der zweite hingegen den Verlust.

Für die Anwendung auf Fraktale wurde der Formalismus u.a. geprägt durch HILFER, BLUMEN, GUYER [9, 10, 11]. Mit ihm kann man z.B. die spektrale Dimension \tilde{d} , definiert durch

$$P(\mathbf{s}_0, t) \sim (wt)^{-\frac{\tilde{d}}{2}}, \quad (1.9)$$

und somit die Wanderungsdimension $d_w = 2\bar{d}/\tilde{d}$ am Startpunkt \mathbf{s}_0 berechnen. Dies geschieht durch Ortsraumrenormierung. Dabei vergleicht man das Ausgangsgitter mit dem durch selbstähnliche Dezimierung von Gitterpunkten erhaltenen Gitter. Zum einen ändern sich die Übergangsraten, zum anderen die Wahrscheinlichkeitsdichte $P(\mathbf{r}_i, t)$ für die verbleibenden Gitterpunkte. Am zweckmäßigsten schreibt man die Mastergleichung für den Startpunkt auf. Die erfolgten Änderungen kann man wegen derselben Form der Gleichungen für das dezimierte Gitter wie für das Ausgangsgitter direkt ablesen. Zur konkreten Anwendung ist es günstig, die Mastergleichung in zeitlich LAPLACE-transformierter Form

$$u P(\mathbf{r}_i, u) - P(\mathbf{r}_i, t = 0) = \sum_{j(i)} \{w_{ij}P(\mathbf{r}_j, u) - w_{ji}P(\mathbf{r}_i, u)\}$$

mit $P(\mathbf{r}_i, t = 0) = \delta(\mathbf{r}_i - \mathbf{s}_0)$ als Anfangsbedingung zu betrachten. Der Punkt \mathbf{s}_0 ist ein geeigneter Startpunkt.

Als Anschauungsbeispiel eignet sich das SIERPIŃSKI-Dreieck zur Basis $b = 2$ (Abb.1.1). Hier kann man alle Übergangsraten gleich w setzen. Das Gitter ist in zwei Punktarten \mathbf{s} und \mathbf{d} eingeteilt. Dabei kennzeichnen die \mathbf{d} -Punkte die nach der Renormierung zu löschenden Punkte. Die \mathbf{s} -Punkte bleiben nach einer solchen Prozedur erhalten. Der obere Index beschreibt die Zugehörigkeit zur unteren bzw. oberen Hälfte der Figur. Durch die untere Indizierung erfolgt eine Durchnummerierung der Punkte in der jeweils betrachteten Hälfte. Dann erhält man für \mathbf{s}_0 die Gleichung

$$\frac{u + 4w}{w} P(\mathbf{s}_0, u) - \frac{1}{w} = \sum_{k=1}^2 \{P(\mathbf{d}_1^k, u) + P(\mathbf{d}_2^k, u)\}.$$

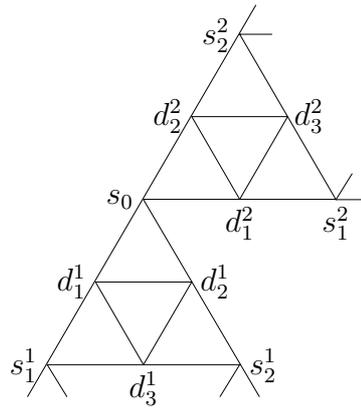


Abbildung 1.1: SIERPIŃSKI-Dreieck, $b=2$

Man kann nun die Ausdrücke $P(\mathbf{d}_i^j, u)$ durch die $P(\mathbf{s}_i^j, u)$ eliminieren. Dies geschieht am einfachsten dadurch, daß man die Gleichungen für die einzelnen Gitterpunkte in Matrixform überführt. Dann erhält man für $u \rightarrow 0$:

$$4P(\mathbf{s}_0, 0) - \frac{5}{3} \frac{1}{w} = \sum_{k=1}^2 \{P(\mathbf{s}_1^k, 0) + P(\mathbf{s}_2^k, 0)\}.$$

Nach Dezimierung der \mathbf{d}_i^j -Punkte erhält man die renormierte Gleichung:

$$4P^R(\mathbf{s}_0, 0) - \frac{1}{w^R} = \sum_{k=1}^2 \{P^R(\mathbf{s}_1^k, 0) + P^R(\mathbf{s}_2^k, 0)\}.$$

Man beachte nun, daß beim Renormierungsprozeß drei alte Dreiecke durch ein neues repräsentiert werden. Die Teilchen, die sich in den alten befanden, werden vom neuen aufgenommen, damit die Gesamtwahrscheinlichkeit erhalten bleibt. Es ist daher $P^R(\mathbf{s}_i, 0) = 3P(\mathbf{s}_i, 0)$. Dann ist $w^R = \frac{w}{5}$ und somit $\tilde{d} = 2 \frac{\ln 3}{\ln 5}$ bzw.

$$d_w = \frac{\ln 5}{\ln 2}.$$

Auffallend ist der 5-fache Zeitbedarf für den Übergang im renormierten Schema, wohingegen bei normalen Prozessen nur der 4-fache Wert benötigt wird. Die angegebene Methode kann auch für viele weitere Gitter verwendet werden. Ergebnisse zur Spektral- und der Wanderungsdimension können bei analogen Rechnungen als Kontrolle dienen. Jedoch erhält man nur Informationen für $t \rightarrow \infty$ (bzw. $u \rightarrow 0$). Ansonsten ist die verwendete Methode nicht exakt, da der Vergleich der Übergangsraten im Fall größerer u -Werte nicht möglich ist. Ein Ausweg besteht in der Verwendung zeitabhängiger Übergangsraten. Dies führt dann auf die Anwendung einer nicht-MARKOVschen Mastergleichung mit einem zeitlichen Gedächtniskern. Dann muß man für diesen entsprechende Renormierungsbedingungen finden. Ein solcher Weg soll hier jedoch nicht weiter verfolgt werden. In dieser Arbeit wird eine andere Methode zur Berechnung von d_w verwendet. Sie bietet noch zusätzlich Aussagen über den zeitlichen Prozeß. Es besteht jedoch eine enge Beziehung zur Theorie der nicht-MARKOVschen Mastergleichung.

1.3 Gliederung dieser Arbeit

Anliegen dieser Arbeit ist es, ein tieferes Verständnis von stochastischen Prozessen in ungeordneten und fraktalen Systemen zu vermitteln. Beide Strukturklassen rufen aufgrund ihrer räumlichen Beschaffenheit eine Anomalie im zeitlichen Prozeß hervor. Das Diffusionsverhalten ist gegenüber dem Normalfall, d.h. der Diffusion entsprechend dem FICKSchen Gesetz, verlangsamt. Das Zustandekommen dieses ungewöhnlichen Verhaltens soll in der vorliegenden Dissertation näher untersucht werden. Dazu werden Methoden der *Skalierung* und *Renormierung* angewandt.

Mathematische Grundlage hierzu bildet der gut ausgebaute Formalismus des CTRW. Im **Kapitel 2** werden die dazu nötigen Begriffe definiert. Als statistische Theorie basiert der Formalismus auf den Fundamenten der Wahrscheinlichkeitsrechnung. Die Physik widerspiegelt sich dabei in der Interpretation der Grundgrößen wie etwa der Wartezeitverteilung.

Für den Fall ungeordneter Systeme wird im **Kapitel 3** gezeigt, daß eine anomale Diffusion mehrere Ursachen haben kann. Häufig wird zur Beschreibung des zeitlichen Geschehens der POISSON-Prozeß gewählt. Als stationärer Prozeß gewährleistet dieser den MARKOV-Charakter der Wanderung. Abweichungen von diesem Prozeß erzeugen anomale Diffusion. Auch die Struktur skaleninvarianter Systeme ermöglicht weitere Prozeßverläufe. Je nach Verteilung der Wartepunkte wird die Ausbreitung der Teilchen beeinflusst. Dabei wird gezeigt, welche Auswirkung ein Abweichen von der gewöhnlichen BROWNSchen Trajektorie hat. Als Ergebnis von Skalierungsuntersuchungen kann eine Wartezeitverteilung auch für solche anomalen Prozesse angegeben werden. Mit dieser wird dann die eigentlich interessierende Wahrscheinlichkeitsdichte für den Aufenthalt des Teilchens bestimmt. Diffusion wird üblicherweise durch partielle Differentialgleichungen vom parabolischen Typ für die Wahrscheinlichkeitsdichte beschrieben. Die hier erhaltenen Wahrscheinlichkeitsdichten gehorchen *fraktionalen* Diffusionsgleichungen und sind spezielle FOX-Funktionen. Es wird der Zusammenhang zwischen Ordnung der Ableitung und den räumlich-zeitlichen Prozessen erstmalig hergestellt. Damit ist eine erneute Motivierung zur weiteren Untersuchung fraktionaler Differentialgleichungen gegeben.

Als prozeßbestimmende Größe kann die Wartezeitverteilung im Fall endlich ramifizierter Fraktale durch einen neu entwickelten Formalismus auf einfache Weise im **Kapitel 4** bestimmt werden. Das betrifft sowohl die Aufstellung einer Funktionalgleichung im LAPLACE-Raum, als auch die Lösungsentwicklung der Wartezeitverteilung im ursprünglichen Zeitbereich nach LAGUERRESchen Polynomen. Diese Darstellung ist eine spezielle Form von Momentenentwicklung², d.h. die Entwicklungskoeffizienten der konstruierten Reihe lassen sich durch die Momente der Verteilung ausdrücken. Zur praktischen Umsetzung des Verfahrens ist nur die Kenntnis über die Struktur des fraktalen Generatorbausteins nötig. Die vorgestellte Methode ist auch auf allgemeinere Strukturtypen anwendbar, wie im Fall ungeordneter und stochastischer Fraktale gezeigt wird. Das ausführlich beschriebene Verfahren ist weiter ausbaufähig. Schließlich wird die Renormierung von Mehrzustandsprozessen untersucht.

Chemische Reaktionen oder allgemeiner Umwandlungsreaktionen sind spezielle Prozeßtypen. Dem im System vorhandenen Stoff wird ein bestimmter Zustand zugeordnet. Zu-

²Die Darstellung GAUSS-artiger Verteilungen durch HERMITESche Polynome ist hinlänglich bekannt. Dort ist die entsprechende Entwicklung auch als GRAM-CHARLIER-Reihe geläufig.

standsänderungen der einfachsten Art werden im **Kapitel 5** beschrieben. Eine Behandlung von Reaktionen in räumlichen Strukturen und auf Gittern ist durch den CTRW im Mehrzustandsformalismus möglich. Es wird gezeigt, wie dadurch auftretende Anomalien im chemischen Zerfallsverhalten verstanden werden können. Erstmals wird versucht, den chemischen Umwandlungsprozeß in allen Zeitordnungen als renormierbaren Prozeß zu beschreiben. Der exponentielle Zerfallsprozeß ist hierbei eine Lösung. Anomale Zerfallsprozesse mit algebraischen Abfall sind aber auch möglich. Die oft untersuchte Annihilationsreaktion wird hier unter dem Renormierungsaspekt hinsichtlich der Zeit untersucht. Es wird unter speziellen Bedingungen die Wartezeitverteilung bestimmt. Der Raumeinfluß kann durch freie Parameter berücksichtigt werden. Schließlich kann für einfache Umwandlungen mit einem beweglichen Zustand die Bremsung der Ausbreitung auf Fraktalen, ausgedrückt durch die Wanderungsdimension, ermittelt werden. Dabei wird ein universeller Bremsungsfaktor zum reinen Zeitskalierungsfaktor für die Wanderung bestimmt.

Kapitel 2

Grundlagen

2.1 Theorie stochastischer Sprungprozesse in stetiger Zeit (CTRW-Theorie)

In diesem Abschnitt soll eine Methode zur Beschreibung von Transportprozessen betrachtet werden, die durch Einfachheit und Klarheit in ihrer Darstellung besticht. Die mathematischen Grundlagen beruhen auf den elementaren Aussagen der Wahrscheinlichkeitstheorie. Die hier beschriebene Vorgehensweise ist in der Literatur [12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20] umfassend untersucht worden und bildet die Grundlage der gesamten Arbeit. Daher werden die wichtigsten Ergebnisse zusammengefaßt dargestellt. Gleichzeitig werden die zum Verständnis nötigen Definitionen der Grundgrößen angegeben.

Wie schon die englische Bezeichnung $CTRW = \textit{Continuous Time Random Walk}$ besagt, wird der Transport durch eine stetige Zeitvariable beschrieben. Der Prozeß kann sowohl in einem diskreten Gitterraum mit den Ortsvektoren $\mathbf{r} = r_1 \mathbf{a}_1 + r_2 \mathbf{a}_2 + r_3 \mathbf{a}_3$ und den Basisvektoren \mathbf{a}_i ($i = 1, 2, 3$) als auch in einem kontinuierlichen Raum erfolgen. Dann sind aber alle ortsabhängigen Wahrscheinlichkeiten als entsprechende Dichten zu interpretieren. Gefragt wird nach der Wahrscheinlichkeit

$$P(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}_0, t_0),$$

ein Teilchen am Orte \mathbf{r} zur Zeit t zu finden, wenn es am Orte \mathbf{r}_0 zur Zeit t_0 startete. Die Bewegung soll durch Sprünge erfolgen, wobei sowohl die Zeit t zwischen zwei Sprüngen als auch der Sprungvektor \mathbf{s} in Richtung und Betrag zufällig sind. Als neue Grundgröße wird die Dichte der Wartezeitverteilung

$$w(\mathbf{s}, t; \mathbf{r}_0, t_0)$$

eingeführt. Somit ist $w(\mathbf{s}, t; \mathbf{r}_0, t_0)\Delta t$ für sehr kleine, aber endliche Δt die Wahrscheinlichkeit dafür, daß im Zeitintervall $[t \dots t + \Delta t]$ genau ein Sprung um \mathbf{s} erfolgt. Diese kann i.a. vom jeweiligen Ort \mathbf{r} (wegen auftretender Inhomogenitäten) als auch vom Zeitpunkt t selbst (Nichtstationarität) abhängen. Ein Endpunkte \mathbf{r} kann in unterschiedlicher Schrittzahl n von einem Startpunkt \mathbf{r}_0 erreicht werden. Es sei

$$R_n(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}_0, t_0)\Delta t$$

die Wahrscheinlichkeit, daß ein Teilchen den Ort \mathbf{r} im Zeitintervall $[t \dots t + \Delta t]$ in genau n

Schritten erreicht, wenn es zur Zeit t_0 am Orte \mathbf{r}_0 startet. Man nennt

$$R_n(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}_0, t_0)$$

die n -Schritt-Übergangswahrscheinlichkeitsdichte. Soll der Zielpunkt \mathbf{r} in $n + 1$ Schritten erreicht werden, so kann in n Schritten jeder erreichbare Zwischenpunkt angesprungen werden und im letzten Schritt der Sprung zum Zielpunkt \mathbf{r} erfolgen, vorausgesetzt, das Teilchen kommt genau zur Zeit t dort an. Andererseits kann auch zuerst der einfache Sprung und dann der n -fache Sprung erfolgen. Über alle diese unabhängigen Möglichkeiten muß sum-

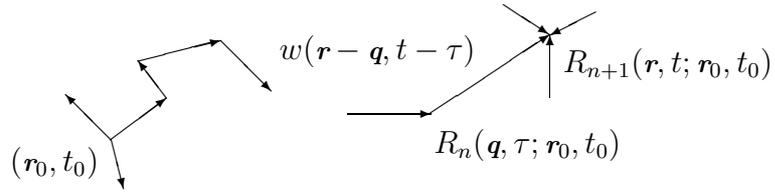


Abbildung 2.1: CTRW-Schema

miert bzw. integriert werden, um die Gesamtwahrscheinlichkeit zu erhalten. Es gilt somit für $n + 1$ Sprünge:

$$R_{n+1}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}_0, t_0) = \sum_{\mathbf{q}} \int_0^t d\tau w(\mathbf{r} - \mathbf{q}, t - \tau; \mathbf{q}, \tau) R_n(\mathbf{q}, \tau; \mathbf{r}_0, t_0). \quad (2.1)$$

Des weiteren wollen wir der Einfachheit halber die Ortsabhängigkeit der Wartezeitverteilung sowie die Abhängigkeit von der Prozeßzeit selbst als vernachlässigbar voraussetzen, d.h. wir schreiben nur noch $w(\mathbf{s}, t)$. Die Gleichung (2.1) bekommt dann die Form

$$R_{n+1}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}_0, t_0) = \sum_{\mathbf{q}} \int_0^t d\tau w(\mathbf{r} - \mathbf{q}, t - \tau) R_n(\mathbf{q}, \tau; \mathbf{r}_0, t_0), \quad (2.2)$$

was eine einfache Faltung darstellt. Durch zeitliche LAPLACE-Transformation und räumlich-diskrete bzw. kontinuierliche FOURIER-Transformation gelangt man zu

$$R_{n+1}(\mathbf{k}, u; \mathbf{r}_0, t_0) = w(\mathbf{k}, u) R_n(\mathbf{k}, u; \mathbf{r}_0, t_0). \quad (2.3)$$

Nun kann $R_n(\mathbf{k}, u; \mathbf{r}_0, t_0)$ rekursiv bestimmt werden. Man erhält:

$$R_n(\mathbf{k}, u; \mathbf{r}_0, t_0) = w(\mathbf{k}, u)^{n-1} R_1(\mathbf{k}, u; \mathbf{r}_0, t_0). \quad (2.4)$$

Es ist $R_1(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}_0, t_0)$ die Wahrscheinlichkeitsdichte dafür, in genau einem Schritt am Ort \mathbf{r} zur Zeit t anzukommen, wenn das Teilchen sich zur Zeit t_0 am Ort \mathbf{r}_0 befand. Der Einfachheit halber fixiert man $R_1(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}_0, t_0)$ so, daß die Messung mit dem ersten Sprung zur Zeit t_0 am Orte \mathbf{r}_0 einsetzt. Dann ist $R_1(\mathbf{k}, u; \mathbf{r}_0, t_0) = w(\mathbf{k}, u)$, also

$$R_n(\mathbf{k}, u; \mathbf{r}_0, t_0) = w(\mathbf{k}, u)^n. \quad (2.5)$$

Hiermit kann man die Wahrscheinlichkeitsdichte $R(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}_0, t_0)$ dafür bestimmen, daß das Teilchen überhaupt zur Zeit t am Orte \mathbf{r} ankommt. Da dies in den verschiedensten Schrittzahlen erfolgen kann und die somit zurückgelegten Wege unabhängig sind, muß man über alle diese Möglichkeiten summieren. Im Fall $n = 0$ wird kein Schritt gemacht. Dann kann man das Teilchen nur am Startpunkt antreffen. Die zugehörige Dichte ist δ -förmig und damit $R_0(\mathbf{k}, u) = 1$. Man erhält aus

$$R(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}_0, t_0) = \sum_{n=0}^{\infty} R_n(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}_0, t_0). \quad (2.6)$$

nach LAPLACE- und FOURIER- Transformation durch Aufsummation der geometrischen Reihe

$$R(\mathbf{k}, u; \mathbf{r}_0, t_0) = \frac{1}{1 - w(\mathbf{k}, u)}. \quad (2.7)$$

Nun läßt sich auch die gesuchte Aufenthaltswahrscheinlichkeit $P(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}_0, t_0)$ bestimmen. Ist das Teilchen erst einmal in \mathbf{r} zur Zeit t angekommen, so soll es dort noch bis zum Meßzeitpunkt verweilen. Wir führen daher die Verweilwahrscheinlichkeit $\Phi(t)$ ein, d.h. die Wahrscheinlichkeit, daß das Teilchen bis zur Zeit t keinen Sprung macht. Die Wahrscheinlichkeitsdichte $w(t)$ dafür, daß es einen Sprung genau zum Zeitpunkt t macht (gleichgültig, wie weit und wohin) errechnet sich aus:

$$w(t) = \sum_{\mathbf{s}} w(\mathbf{s}, t). \quad (2.8)$$

Damit ist

$$\Phi(t) = 1 - \int_0^t d\tau w(\tau). \quad (2.9)$$

Schließlich kann man $P(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}_0, t_0)$ ausdrücken durch

$$P(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}_0, t_0) = \int_0^t d\tau R(\mathbf{r}, t - \tau; \mathbf{r}_0, t_0) \Phi(\tau). \quad (2.10)$$

Eine einfache Darstellung von $P(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}_0, t_0)$ durch die Grundgröße $w(\mathbf{s}, t)$ erhält man, wenn man zur LAPLACE- und zur FOURIER-Darstellung übergeht. Für die Gleichung (2.10) heißt das:

$$P(\mathbf{k}, u; \mathbf{r}_0, t_0) = R(\mathbf{k}, u; \mathbf{r}_0, t_0) \Phi(u). \quad (2.11)$$

Weiterhin erhält man mit (2.9) noch:

$$\Phi(u) = \frac{1 - w(u)}{u} \quad (2.12)$$

Beachtet man den schon berechneten Ausdruck aus (2.7), so gelangt man zur Grundgleichung der CTRW-Theorie:

$$P(\mathbf{k}, u; \mathbf{r}_0, t_0) = \frac{1 - w(u)}{u} \frac{1}{1 - w(\mathbf{k}, u)}. \quad (2.13)$$

Wie man sieht, ist die Bestimmung von $w(\mathbf{s}, t)$ bzw. $w(\mathbf{k}, u)$ die eigentliche Aufgabe zur Berechnung von $P(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}_0, t_0)$, d.h. die Kenntnis über einen Sprung ist hier ausreichend.

Die übliche Vorstellung des CTRW geht davon aus, daß sich ein Teilchen von Ort zu Ort durch Sprünge fortbewegt. Dabei wartet es an diesen Punkten entsprechend der Wartezeitverteilung und springt zum Nachbarpunkt unendlich schnell, d.h. ohne Zeit für den Sprung selbst zu beanspruchen. Die Rechtfertigung hierfür ist, daß bei kurzen Sprungdistanzen die Wartezeiten, hervorgerufen durch atomare Verzögerungsprozesse wie dem Entweichen aus einem Potentialtopf, groß gegenüber den eigentlichen Flugzeiten zwischen den Orten sind.

Sind die Abstände zwischen den Raumpunkten von nicht zu unterschätzender Bedeutung, so kann man die Flugphasen im Raum nicht vernachlässigen. Man beobachtet bei nicht zu kleinem Betrachtungsmaßstab eine fortwährende, wirre Ausbreitung des Teilchens. Nach ihrem Entdecker wird sie auch als BROWNSche Bewegung bezeichnet. Von diesem Standpunkt aus ist jeder große Sprung zusammengesetzt aus immer kleineren Sprüngen. Diese Sprungpunkte markieren einen Weg. Durch Verfeinerung des Zeitrasters bilden diese Punkte die Spur oder Trajektorie des Teilchens. In diesem Bild ist es zweckmäßiger von einer *Wanderung* entlang dieser Trajektorie zu sprechen. Die Raumstruktur hat dabei einen ent-

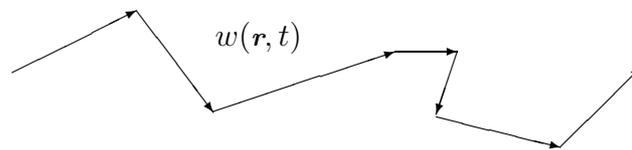


Abbildung 2.2: BROWNSche Wanderung

scheidenen Einfluß auf die Zusammensetzung des resultierenden Sprunges. Diese kann mit einer Zerlegung des Gebietes in immer kleinere Abschnitte kombiniert werden. Es gibt somit eine Verteilung, die zum Ausdruck bringt, wie lange sich ein Teilchen in solchen Abschnitten aufhält. Ein solches Verhalten kann man auch als Warten bezeichnen, wenn es nach einer gewissen Zeit t das Gebiet verläßt. Eine solche Wartezeit ist charakteristisch nur in den Grenzen dieses Gebietes. Vom Standpunkt der ursprünglichen Interpretation des CTRW braucht man für diese nur einen repräsentierenden Punkt, etwa den Massenmittelpunkt, um sagen zu können, es wird von Punkt zu Punkt gesprungen. Die Bestimmung dieser Wartezeitverteilungen erfolgt durch geeignete geometrische Modellbildung. Die Form der Gebiete kann dabei sehr verschieden ausfallen, so z.B. faserförmig. Ein Zusammenfügen dieser kann sowohl punkthaft als auch flächig erfolgen. An der mathematischen Form der Theorie zur Beschreibung der Wanderung ändert sich jedoch nichts, nur in der Art der Interpretation der Wartezeitverteilung. In dieser Arbeit wird überwiegend das Bild der kontinuierlichen Wanderung verwendet. Die Raumstruktur wird dabei in differentielle Elemente zerlegt.

2.2 CTRW mit mehreren inneren Zuständen

Wir wollen annehmen, daß das wandernde Teilchen sich an den Gitterpunkten in bestimmten Zuständen (z.B. Energiezuständen) befinden kann. Um dies zu berücksichtigen, führen wir zur Charakterisierung des jeweiligen Zustandes Indizes ein. Dabei wird zunächst vorausgesetzt, daß deren Anzahl endlich ist, so z.B. N . Außerdem soll der Anfangszustand berücksichtigt werden, aus dem das Teilchen startet. Wir drücken somit die Wahrscheinlich-

keitsdichte dafür, daß das Teilchen sich Startzeit t_0 am Ort \mathbf{r}_0 im Zustand j befand und sich zur Meßzeit t am Ort \mathbf{r} im Zustand i aufhält, durch $P_{ij}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}_0, t_0)$ aus. Der Übergang von einem Ort zum anderen und damit von einem Zustand in den neuen (bzw. gleichen) wird durch die Wartezeitverteilung $w_{mn}(s, t)$ gekennzeichnet. Dabei erfolgt ein Übergang vom Zustand n in den Zustand m nach der Zeit t , wobei um s gesprungen wird. Ähnlich dem Vorgehen im letzten Abschnitt führt man eine Dichte $R_{ij}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}_0, t_0)$ dafür ein, das Teilchen unmittelbar nach genau n Schritten am Orte \mathbf{r} zur Zeit t im Zustand i anzutreffen, wenn es sich zur Startzeit t_0 am Orte \mathbf{r} im Zustand j befand. Dann erhält man für $n + 1$ Schritte:

$$R_{ij}^{(n+1)}(\mathbf{s}, t; \mathbf{r}_0, t_0) = \sum_{\mathbf{q}} \int_0^t d\tau \sum_{l=1}^N w_{il}(\mathbf{q}, \tau) R_{lj}^{(n)}(\mathbf{s} - \mathbf{q}, t - \tau; \mathbf{r}_0, t_0). \quad (2.14)$$

Man erkennt, daß über alle Zwischenzustände l summiert wird. Die Verknüpfung der einzelnen Elemente durch die Summationsvorschrift entspricht genau der Matrixmultiplikation. Daher kann man auch schreiben:

$$\mathbf{R}^{(n+1)}(\mathbf{s}, t, \mathbf{r}_0, t_0) = \sum_{\mathbf{q}} \int_0^t d\tau \mathbf{w}(\mathbf{q}, t) \mathbf{R}^{(n)}(\mathbf{s} - \mathbf{q}, t - \tau; \mathbf{r}_0, t_0). \quad (2.15)$$

Dabei sind $\mathbf{R}^{(n)}$ und \mathbf{w} die Matrizen, gebildet aus den Elementen R_{ij} und w_{ij} . In dieser Schreibweise ähnelt die Darstellung der aus dem vorigen Abschnitt. Wir gehen wieder zur LAPLACE- und FOURIER-Transformation über und erhalten:

$$\mathbf{R}^{(n+1)}(\mathbf{k}, u) = \mathbf{w}(\mathbf{k}, u) \mathbf{R}^{(n)}(\mathbf{k}, u). \quad (2.16)$$

Diese Rekursionsvorschrift hat als Lösung:

$$\mathbf{R}^{(n)}(\mathbf{k}, u) = \mathbf{w}(\mathbf{k}, u)^n \mathbf{R}^{(0)}(\mathbf{k}, u). \quad (2.17)$$

Dabei ist $\mathbf{R}^{(0)}(\mathbf{k}, u)$ die Verteilung, bei der noch kein Sprung gemacht wurde, also die Anfangsverteilung. Startet das Teilchen genau zum Zeitnullpunkt vom Koordinatenursprung, so ist $\mathbf{R}^{(0)}(\mathbf{k}, u)$ die $N \times N$ -Einheitsmatrix. Die Wahrscheinlichkeit, daß sich das Teilchen genau zur Zeit t am Orte \mathbf{s} befindet, gleichgültig wie viele Sprünge es gemacht hat, ist gegeben durch

$$R_{ij}(\mathbf{s}, t; \mathbf{r}_0, t_0) = \sum_{n=0}^{\infty} R_{ij}^{(n)}(\mathbf{s}, t; \mathbf{r}_0, t_0) \quad (2.18)$$

und somit ist¹

$$\mathbf{R}(\mathbf{k}, u) = \frac{1}{\mathbf{I} - \mathbf{w}(\mathbf{k}, u)}. \quad (2.19)$$

Um nun die gesuchte Aufenthaltswahrscheinlichkeit $P_{ij}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}_0, t_0)$ zu bestimmen, muß man bedenken, daß der Meßzeitpunkt nicht genau mit einem Sprungereignis zusammentreffen muß. Das Teilchen kann sich zwischen den Sprungzeitpunkten mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit $\Phi_i(t)$ am Orte \mathbf{r} im Zustand i aufhalten, bzw. verweilen. Man erhält also:

$$P_{ij}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}_0, t_0) = \int_0^t d\tau \Phi_i(t - \tau) R_{ij}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}_0, t_0). \quad (2.20)$$

¹Hier und im weiteren wird aus stilistischen Gründen zur Bezeichnung der Inversen \mathbf{A}^{-1} einer Matrix \mathbf{A} symbolisch oft auch $\frac{1}{\mathbf{A}}$ geschrieben. Über dem Bruchstrich dürfen nur solche Matrizen stehen, die mit \mathbf{A} kommutieren.

Es ist aber:

$$\Phi_i(t) = 1 - \int_0^t d\tau \sum_{\mathbf{q}} \sum_{l=1}^N w_{li}(\mathbf{q}, \tau). \quad (2.21)$$

Dabei kann natürlich bei einem räumlichen Sprung in denselben Zustand gesprungen werden. Transformiert heißt das:

$$\Phi_i(u) = \frac{1}{u} \left(1 - \sum_{l=1}^N w_{li}(\mathbf{k} = 0, u) \right). \quad (2.22)$$

Wir führen noch die Abkürzung $w_i(u) = \sum_{l=1}^N w_{li}(\mathbf{k} = 0, u)$ ein und erhalten mit $\mathbf{w}_D(u)$ als Diagonalmatrix gebildet aus den $w_i(u)$

$$P_{ij}(\mathbf{k}, u) = \frac{1 - w_i(u)}{u} R_{ij}(\mathbf{k}, u) \quad (2.23)$$

oder in Matrixform

$$\mathbf{P}(\mathbf{k}, u) = \frac{\mathbf{I} - \mathbf{w}_D(u)}{u} \frac{1}{\mathbf{I} - \mathbf{w}(\mathbf{k}, u)}. \quad (2.24)$$

Der Mehrzustandsformalismus gestattet die gleichzeitige Behandlung verschiedener Sorten (etwa Atome), welche ihrerseits mehrere innere Zustände besitzen können. Durch diese feinere Unterteilung erhöht sich die Übersichtlichkeit der Darstellung des Transfersgeschehens. Man braucht die Matrix nur in dem Sinne zu erweitern, daß jeder Sorte eine Matrix mit Elementen, die den inneren Zuständen entsprechen, zugeordnet wird. Betrachten wir z.B. ein zweisortiges Problem mit den Sorten A und B. Die erstere habe nur einen inneren Zustand und die andere zwei innere Zustände. Dann erhalten wir eine Matrixdarstellung der Form:

$$\mathbf{W} = \begin{pmatrix} \mathbf{w}^{AA} & \mathbf{w}^{AB} \\ \mathbf{w}^{BA} & \mathbf{w}^{BB} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{w}_{11}^{AA} & \mathbf{w}_{11}^{AB} & \mathbf{w}_{12}^{AB} \\ \mathbf{w}_{11}^{BA} & \mathbf{w}_{11}^{BB} & \mathbf{w}_{12}^{BB} \\ \mathbf{w}_{21}^{BA} & \mathbf{w}_{21}^{BB} & \mathbf{w}_{22}^{BB} \end{pmatrix}.$$

Kapitel 3

Ungeordnete Systeme

Unordnungseffekte können eine Anomalie im Diffusionsverhalten zur Folge haben. Diese treten beispielsweise in porösen Stoffen mit feiner Kanalstruktur auf. Vielfach zeigt sich dabei ein skaleninvariantes Verhalten der Struktur. Betrachtet man die Feinstruktur nicht all zu sehr im Detail, so kann man für solche Systeme Aussagen über die ablaufenden Prozesse machen. Allgemein interessieren uns hier nur mittlere Aussagen wie das radiale Verhalten. Daher wird die Winkelabhängigkeit als vernachlässigbar angesehen. Aufgrund dieser Eigenschaften bietet sich eine *Skalierungsmethode* zur Bestimmung der Wahrscheinlichkeitsdichte und der daraus abgeleiteten Größen an. Der Einfachheit halber setzen wir eine Entkopplung von räumlichen und zeitlichen Prozessen voraus. Welchen Einfluß eine Korrelation dieser haben kann, soll kurz angedeutet werden.

Gewöhnlich beschreibt man die Diffusion durch entsprechende partielle Differentialgleichungen. Die CTRW-Theorie bringt jedoch mehr Verständnis in die ablaufenden Prozesse, weshalb diese Methode hier vorgezogen wird. Eine Verbindung zur differentiellen Beschreibung bringt der fraktionale Kalkül. Die hiermit aufgestellten Gleichungen sind kanonische Erweiterungen der klassischen Theorie.

Zum Schluß untersuchen wir noch eine Klasse anisotroper Diffusionsprozesse mit Skaleninvarianz für die jeweiligen Raumrichtungen. Die vollständige Darstellung aller Möglichkeiten ist dabei zu umfangreich und wird daher nicht weiter verfolgt. Einige spezielle Eigenschaften sollen jedoch erwähnt werden.

3.1 Isotrope Wanderung

Viele Naturgesetze gelten über einen großen Raum- bzw. Zeitbereich. Dies findet seine Widerspiegelung in der Ähnlichkeitsformulierung ihrer Meßgrößen. Bekannt ist dies bei der Navier-Stokes-Gleichung, wo dieser Sachverhalt bedeutsam bei der Modellierung mit maßstäblich verkleinerten Originalen ist. Aber auch das dritte Keplersche Gesetz ist ein Beispiel hierfür. So wird man dies auch von der Wahrscheinlichkeitsverteilung erwarten können, wenn sich die räumliche Beschaffenheit über große Bereiche hinsichtlich der Skalierung nicht ändert.

Unter *isotroper Wanderung* wird ein Prozeß verstanden, bei dem die ausgewählte Richtung einem Gleichverteilungsgesetz gehorcht. Jeder spezieller Weg, den ein Teilchen zurücklegt, wird als eine Realisierung betrachtet.

Hat man eine Beschreibung für den Ort r und den Zeitpunkt t und möchte eine für den Ort $r' = \alpha r$ und den Zeitpunkt $t' = \beta t$, so wird man fordern:

$$P(r, t) = \gamma P(\alpha r, \beta t).$$

Der Faktor γ wird durch die Normierung der Wahrscheinlichkeitsdichte festgelegt zu $\gamma = \alpha^d$. Somit ist dann auch:

$$P(r, t) = \alpha^d P(\alpha r, \beta t). \quad (3.1)$$

Diese grundlegende Eigenschaft kann man z.B. für die GAUSS- bzw. CAUCHY-Verteilung bestätigen. Die Gleichung (3.1) kann man als Funktionalgleichung ansehen und in Abhängigkeit von den Parametern lösen. Jedoch wird die Lösungsmenge so groß sein, daß man Einschränkungen machen muß. Außerdem findet man durch Bildung des j -ten Moments auf beiden Seiten von Gleichung (3.1) und Vergleich mit dem angenommenen asymptotischen Verlauf

$$\langle r^j \rangle \sim t^{\frac{j}{d_w}} \quad (3.2)$$

die Beziehung:

$$\beta = \alpha^{d_w}. \quad (3.3)$$

Durch LAPLACE- und FOURIER-Transformation von Gl.(3.1) erhält man:

$$P(k, u) = \beta P(\alpha k, \beta u). \quad (3.4)$$

Aus der CTRW-Theorie ist für $P(k, u)$ folgende Darstellung bekannt:

$$P(k, u) = \frac{1}{u} \frac{1}{1 + \frac{w(u) - w(k, u)}{1 - w(u)}}. \quad (3.5)$$

Von $w(l, t)$ verlangen wir eine Separation in $w(l, t) = p(l) w(t)$ bzw. $w(k, u) = p(k) w(u)$. Dies bedeutet eine Unabhängigkeit der räumlichen und zeitlichen Sprungereignisse. Berücksichtigt man dies in Gl.(3.5), so folgt daraus:

$$P(k, u) = \frac{1}{u} \frac{1}{1 + \frac{w(u)}{1 - w(u)}(1 - p(k))}.$$

Mit der Substitution

$$\phi(u) = \frac{u w(u)}{1 - w(u)}$$

gelangt man schließlich zu:

$$P(k, u) = \frac{1}{u + \phi(u)(1 - p(k))}. \quad (3.6)$$

Wegen (3.4) gilt folgende Beziehung:

$$\beta P(\alpha k, \beta u) = \frac{\beta}{\beta u + \phi(\beta u)(1 - p(\alpha k))} = P(k, u).$$

Dies gibt dann durch Vergleich mit (3.6) die Gleichung

$$\beta(u + \phi(u))(1 - p(k)) = \beta u + \phi(\beta u)(1 - p(\alpha k)).$$

Diese Beziehung läßt sich in einen nur von u bzw. k abhängigen Anteil zerlegen:

$$\frac{\beta\phi(u)}{\phi(\beta u)} = \frac{1 - p(\alpha k)}{1 - p(k)} = \kappa. \quad (3.7)$$

Die linke und rechte Seite müssen konstant κ sein, da u und k unabhängige Variablen sind. Somit haben wir zwei unabhängige Gleichungen, die eine zur Bestimmung von $\phi(u)$, die andere zur Bestimmung von $p(k)$. Man erhält folgende Lösung

$$p(k) = 1 - (gk)^\sigma f(k), \quad (3.8)$$

wobei $f(k) = f(\alpha k)$ sein muß. Setzt man $f(k) = h(q)$ mit $q = \frac{\ln k}{\ln \alpha}$, so ist $h(q) = h(q + 1)$, d.h. $h(q)$ ist periodisch in q mit der Periode 1. Nun läßt sich σ durch Einsetzen von (3.8) in (3.7) bestimmen. Es ist $\alpha^\sigma = \kappa$, also

$$\sigma = \frac{\ln \kappa}{\ln \alpha}.$$

Aus (3.7) läßt sich nun auch $\phi(u)$ bestimmen. Eine Lösung für $\beta\phi(u) = \kappa\phi(\beta u)$ ist

$$\phi(u) = \text{const. } u^{1-\mu} \chi(u),$$

mit $\mu = \frac{\ln \kappa}{\ln \beta}$ und $\chi(u) = \chi(\beta u)$, wie man durch Einsetzen bestätigt. Vernachlässigt man Oszillationen, wie sie durch $\chi(u)$ beschrieben werden, so kann man $\chi(u) \equiv 1$ setzen. Nimmt man des weiteren an, daß $f(k)$ über einen großen k -Bereich konstant ist (zumindest für kleine Werte k), so erhält man für $P(k, u)$ folgenden Ausdruck:

$$P(k, u) = \frac{1}{u + \text{const. } u^{1-\mu} k^\sigma}. \quad (3.9)$$

Der Fall $\mu = 1$ führt zu den bekannten LÉVY-Verteilungen. Die hier erhaltene Funktionenklasse mit den Parametern σ und μ ist aber noch reichhaltiger und soll im weiteren näher untersucht werden. Außerdem läßt sich $w(u)$ bestimmen zu

$$w(u) = \frac{1}{1 + (bu)^\mu}. \quad (3.10)$$

Wenden wir uns nun der Rücktransformation von Gleichung (3.10) zu. Durch Ausklammern des Ausdruckes $(bu)^\mu$ auf der rechten Seite erhalten wir:

$$w(u) = \sum_{i=0}^{\infty} (-1)^i (bu)^{-\mu(i+1)}.$$

Gliedweise Rücktransformation liefert schließlich:

$$w(t) = \left(\frac{t}{b}\right)^\mu t^{-1} \sum_{i=0}^{\infty} \frac{(-1)^i}{\Gamma(\mu(i+1))} \left(\frac{t}{b}\right)^\mu.$$

Diese Reihe ist absolut konvergent. Aus numerischen Untersuchungen kommt zu der Erkenntnis, daß der zulässige μ -Parameterbereich auf $0 < \mu \leq 1$ beschränkt ist. Nur so sichert man die Positivität von $w(t)$. Für den Fall $\mu = 1$ erhalten wir den gewöhnlichen exponentiellen Abfall:

$$w(t) = b^{-1} \exp(-b^{-1}t).$$

Hierbei hat b die Bedeutung einer mittleren Wartezeit $\langle t \rangle = T$. Ansonsten erhalten wir asymptotisch für kleine t einen algebraischen Abfall mit $t^{\mu-1}$, der Fall großer Zeiten wird später betrachtet. Die Rücktransformation von (3.9) ist nicht so einfach möglich. Lösungen erhält man jedoch durch Anwendung der FOX-Funktionen [21, 22, 23]. Anstatt der zeitlichen LAPLACE-Transformation betrachten wir die MELLIN-transformierte Größe. Der Übergang ist dabei gegeben durch

$$P(k, s) = \frac{1}{\Gamma(1-s)} \int_0^\infty du u^{-s} P(k, u)$$

bzw. mit dem betrachteten Beispiel

$$P(k, s) = \frac{1}{\Gamma(1-s)} \int_0^\infty du u^{-s} \frac{u^{\mu-1}}{u^\mu + (ck)^\sigma}. \quad (3.11)$$

Die Integration läßt sich einfach durchführen. Man erhält:

$$P(k, s) = \frac{1}{\mu} (ck)^{-\frac{\sigma}{\mu}s} \frac{\Gamma(1-\frac{s}{\mu})\Gamma(\frac{s}{\mu})}{\Gamma(1-s)}. \quad (3.12)$$

Die FOX-Funktionen

$$H_{PQ}^{MN}(z) = H_{PQ}^{MN} \left(z \left| \begin{matrix} (a_j, \alpha_j)_{j=1, \dots, P} \\ (b_j, \beta_j)_{j=1, \dots, Q} \end{matrix} \right. \right) \quad (3.13)$$

werden am einfachsten durch ihre MELLIN-Transformierten charakterisiert. Es ist

$$H_{PQ}^{MN}(s) = \frac{A(s) B(s)}{C(s) D(s)} \quad (3.14)$$

mit

$$\begin{aligned} A(s) &= \prod_{j=1}^M \Gamma(b_j + \beta_j s) & B(s) &= \prod_{j=1}^N \Gamma(1 - a_j - \alpha_j s) \\ C(s) &= \prod_{j=M+1}^Q \Gamma(1 - b_j - \beta_j s) & D(s) &= \prod_{j=N+1}^P \Gamma(a_j + \alpha_j s) \end{aligned}$$

wobei $0 \leq N \leq P, 1 \leq M \leq Q, (a_j, \alpha_j) : 1 \leq j \leq P, (b_j, \beta_j) : 1 \leq j \leq Q$ gilt. Außerdem sei die Menge der Polstellen von $A(s)$ und $B(s)$ disjunkt und

$$\delta = \sum_{j=1}^Q \beta_j - \sum_{j=1}^P \alpha_j > 0.$$

Letzte Bedingung sichert die Analytizität von $H_{PQ}^{MN}(z)$. Dann ist

$$H_{PQ}^{MN}(z) = - \sum_{s \in P(A)} \operatorname{res} \left(\frac{A(-s) B(-s)}{C(-s) D(-s)} z^s \right). \quad (3.15)$$

Summiert wird über alle Polstellen von $A(-s)$. In unserem Fall ist

$$A(s) = \Gamma\left(\frac{s}{\mu}\right), \quad B(s) = \Gamma\left(1 - \frac{s}{\mu}\right), \quad C(s) = \Gamma(1 - s), \quad D(s) = 1$$

und somit $\delta = 1$, $M = 1$, $N = 1$, $P = 2$, $Q = 2$. So erhalten wir:

$$P(k, t) = \frac{1}{\mu} H_{22}^{11} \left((ck)^{\frac{\sigma}{\mu}} t \middle|_{(0, \frac{1}{\mu})(0, 1)}^{(0, \frac{1}{\mu})(1, 0)} \right). \quad (3.16)$$

Für die FOX-Funktionen gilt allgemein folgende Beziehung:

$$H_{PQ}^{MN} \left(z \middle|_{(b_j, \beta_j)_{j=1, \dots, Q}}^{(a_j, \alpha_j)_{j=1, \dots, P}} \right) = \eta H_{PQ}^{MN} \left(z^\eta \middle|_{(b_j, \eta \beta_j)_{j=1, \dots, Q}}^{(a_j, \eta \alpha_j)_{j=1, \dots, P}} \right). \quad (3.17)$$

Gl.(3.16) lautet dann:

$$P(k, t) = \frac{1}{\sigma} H_{22}^{11} \left(ck t^{\frac{\mu}{\sigma}} \middle|_{(0, \frac{1}{\sigma})(0, \frac{\mu}{\sigma})}^{(0, \frac{1}{\sigma})(1, 0)} \right). \quad (3.18)$$

Wenden wir uns nun der räumlichen Rücktransformation zu. Diese ist für isotrope Verhältnissen gegeben durch:

$$P(r, t) = (2\pi)^{-\frac{d}{2}} r^{1-\frac{d}{2}} \int_0^\infty dk k^{\frac{d}{2}} J_{\frac{d}{2}-1}(rk) P(k, t).$$

Hierbei ist $J_{\frac{d}{2}-1}$ die BESSEL-Funktion der Ordnung $\frac{d}{2} - 1$. Durch MELLIN-Transformation dieser Gleichung bezüglich r erhält man:

$$P(h, t) = (2\pi)^{-\frac{d}{2}} J_{\frac{d}{2}-1} \left(h + 1 - \frac{d}{2} \right) P(d - h, t).$$

Die MELLIN-Transformierte $J_{\frac{d}{2}-1}(h)$ läßt sich leicht bestimmen. Für $P(h, t)$ auf der rechten Seite verwendet man Gl.(3.18) und beachtet, daß jetzt k die Variable der Transformation ist. Man erhält:

$$P(h, t) = \frac{(ct^{\frac{\mu}{\sigma}})^{-d}}{\sigma(4\pi)^{\frac{d}{2}}} (2ct^{\frac{\mu}{\sigma}})^h \frac{\Gamma(\frac{h}{2}) \Gamma(1 - \frac{d}{\sigma} + \frac{h}{\sigma}) \Gamma(1 - (1 - \frac{d}{\sigma}) - \frac{h}{\sigma})}{\Gamma(1 - (1 - \frac{d}{2}) - \frac{h}{2}) \Gamma(1 - \frac{\mu}{\sigma} + \frac{\mu}{\sigma} h)}.$$

Es ist also

$$\begin{aligned} A(h) &= \Gamma\left(\frac{h}{2}\right) \Gamma\left(1 - \frac{d}{\sigma} + \frac{h}{\sigma}\right) & B(h) &= \Gamma\left(1 - \left(1 - \frac{d}{\sigma}\right) - \frac{h}{\sigma}\right) \\ C(h) &= \Gamma\left(1 - \left(1 - \frac{d}{2}\right) - \frac{h}{2}\right) & D(h) &= \Gamma\left(1 - \frac{\mu}{\sigma} + \frac{\mu}{\sigma} h\right) \end{aligned}$$

und folglich $\delta = 1 - \frac{\mu}{\sigma}$, $M = 2$, $N = 1$, $P = 2$, $Q = 3$. Somit gelangen wir zu

$$P(r, t) = \frac{1}{\sigma} (4\pi c^2 t^{2\frac{\mu}{\sigma}})^{-\frac{d}{2}} H_{23}^{21} \left(\frac{r}{2ct^{\frac{\mu}{\sigma}}} \middle|_{(0, \frac{1}{2})(1 - \frac{d}{\sigma}, \frac{1}{\sigma})(1 - \frac{d}{2}, \frac{1}{2})}^{(1 - \frac{d}{\sigma}, \frac{1}{\sigma})(1 - \mu \frac{d}{\sigma}, \frac{\mu}{\sigma})} \right),$$

mit $\sigma > \mu$. Wir finden einen zeitlich asymptotischen Verlauf der Form:

$$P(r_0, t) \sim t^{-\mu \frac{d}{\sigma}}$$

Vergleichen wir den Exponenten mit der Definition der spektralen Dimension \tilde{d} , definiert durch

$$P(r_0, t) \sim t^{-\frac{\tilde{d}}{2}},$$

so führt das auf die Beziehung:

$$\tilde{d} = 2d \frac{\mu}{\sigma}.$$

Da in dieser Gleichung das Verhältnis $\frac{\mu}{\sigma}$ eingeht, wird der Parameter κ herausgekürzt und beeinflußt somit das Ergebnis nicht. Auch die Momente $\langle r^j \rangle$ lassen sich leicht berechnen. Denn es ist

$$\langle r^j \rangle = \frac{2\pi^{\frac{d}{2}}}{\Gamma(\frac{d}{2})} P(h = j + d, t)$$

und demnach

$$\langle r^j \rangle = \frac{2^{j+1} \Gamma(\frac{d+j}{2}) \Gamma(1 + \frac{j}{\sigma}) \Gamma(-\frac{j}{\sigma})}{\sigma \Gamma(\frac{d}{2}) \Gamma(1 + j\frac{\mu}{\sigma}) \Gamma(-\frac{j}{2})} (ct^{\frac{\mu}{\sigma}})^j,$$

d.h.

$$\langle r^j \rangle \sim t^{j\frac{\mu}{\sigma}}.$$

Vergleicht man dies mit der Relation (3.2), so ergibt sich

$$d_w = \frac{\sigma}{\mu} > 1,$$

was mit Gl.(3.3) nach Einsetzen der Ausdrücke für σ und μ übereinstimmt. Auch hier geht der Parameter κ nicht ein. Damit die Momente monoton steigen, muß $\sigma \leq 2$ gewählt werden, und damit diese endlich bleiben, $j < \sigma$. Der Fall $\sigma = 2$ macht da eine Ausnahme, für ihn sind alle Momente endlich. Anomale Diffusion kann sowohl durch ein $\sigma \neq 2$ als auch $\mu \neq 1$ verursacht werden. Eine Abweichung beider Parameter vom Normalfall ist gleichfalls denkbar.

Betrachten wir nochmals die Rücktransformation von $w(u)$. Jetzt soll dies über die MELLIN-Transformierte geschehen. Es ist mit (3.10):

$$w(s) = \frac{1}{\Gamma(1-s)} \int_0^\infty du u^{-s} \frac{1}{1+(bu)^\mu}.$$

Man erhält:

$$w(s) = \frac{b^{s-1}}{\mu} \frac{\Gamma(\frac{1-s}{\mu}) \Gamma(1 - \frac{1-s}{\mu})}{\Gamma(1-s)}.$$

Wir wollen das Ergebnis durch die FOX-Funktion ausdrücken. Es ist:

$$A(s) = \Gamma\left(1 - \frac{1}{\mu} + \frac{s}{\mu}\right); \quad M = 1 \qquad B(s) = \Gamma\left(1 - \left(1 - \frac{1}{\mu}\right) - \frac{s}{\mu}\right); \quad N = 1$$

$$C(s) = \Gamma(1-s); \quad Q = 1 \qquad D(s) = 1; \quad P = 2.$$

Die Lösung lautet:

$$w(t) = \frac{1}{b} H_{22}^{11} \left(\left(\frac{t}{b} \right)^\mu \Big|_{(1-\frac{1}{\mu}, 1)(1, 0)}^{(1-\frac{1}{\mu}, 1)(0, \mu)} \right). \quad (3.19)$$

Für $w(t)$ kann man im Fall großer Zeiten t und $0 < \mu < 1$ eine asymptotische Entwicklung angeben. Dafür benutzt man anstelle der Polstellen von A die von B und ändert das Vorzeichen in (3.15):

$$w(t) \sim b^{-1} \left(\frac{t}{b} \right)^{-1} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{\Gamma(-\mu n)} \left(\frac{t}{b} \right)^{-\mu n}.$$

Für sehr große Zeiten erhält man einen Abfall der Form

$$w(t) \sim t^{-1-\mu}, \quad (3.20)$$

für kleine Zeiten hingegen einen mit $t^{\mu-1}$.

Es ist nun auch möglich, die n -Schritt-Wartezeitverteilung $w^{(n)}(t)$ zu bestimmen. Für die LAPLACE-transformierte Größe gilt allgemein:

$$w^{(n)}(u) = w(u)^n.$$

In unserem Beispiel ist dann

$$w^{(n)}(u) = (1 + (bu)^\mu)^{-n}. \quad (3.21)$$

Auch hier ist die Rücktransformation einfacher, wenn man zur MELLIN-Transformierten übergeht. Diese ist:

$$w^{(n)}(s) = \frac{b^{s-1}}{\mu} \frac{\Gamma(\frac{1-s}{\mu}) \Gamma(n - \frac{1-s}{\mu})}{\Gamma(1-s) \Gamma(n)}$$

Die Momente $\langle t^j \rangle$ für diese Verteilung berechnen sich aus

$$\langle t^j \rangle = w^{(n)}(s = 1 + j) = \frac{b^j \Gamma(-\frac{j}{\mu}) \Gamma(n + \frac{j}{\mu})}{\mu \Gamma(-j) \Gamma(n)},$$

mit $j < \mu \leq 1$. Schließlich kann man die Verteilungen explizit angeben:

$$w^{(n)}(t) = \frac{b^{-1}}{(n-1)!} H_{22}^{11} \left(\left(\frac{t}{b} \right)^\mu \Big|_{(n-\frac{1}{\mu}, 1)(0, \mu)}^{(1-\frac{1}{\mu}, 1)(1, 0)} \right). \quad (3.22)$$

Die Reihenentwicklung hierfür lautet:

$$w^{(n)}(t) = \frac{t^{-1}}{\Gamma(n)} \left(\frac{t}{b} \right)^{\mu n} \sum_{i=0}^{\infty} \frac{(-1)^i}{i!} \frac{\Gamma(n+i)}{\Gamma(\mu(i+1))} \left(\frac{t}{b} \right)^{\mu i}.$$

Die Rücktransformation von $p(k)$ zu $p(l)$ ist gegeben durch:

$$\begin{aligned} p(l) &= (2\pi)^{-\frac{d}{2}} l^{1-\frac{d}{2}} \int_0^\infty dk k^{\frac{d}{2}} J_{\frac{d}{2}-1}(kl) p(k) \\ &= (2\pi)^{-\frac{d}{2}} l^{1-\frac{d}{2}} \int_0^\infty dk k^{\frac{d}{2}} J_{\frac{d}{2}-1}(kl) (1 - (gk)^\sigma f(k)) \end{aligned} \quad (3.23)$$

Die Verteilungsfunktion im Einbettungsraum der Dimension d erhält man aus:

$$L(l) = \frac{2\pi^{\frac{d}{2}}}{\Gamma(\frac{d}{2})} \int_0^l dx x^{d-1} p(x)$$

Man setzt nun $p(l)$ aus (3.23) ein und erhält mit der Rekursionseigenschaft der BESSEL-Funktion

$$\frac{d}{dz} (z^a J_a(z)) = z^a J_{a-1}(z)$$

den Ausdruck

$$\begin{aligned} L(l) &= \frac{2^{1-\frac{d}{2}}}{\Gamma(\frac{d}{2})} l^{\frac{d}{2}} \int_0^\infty dk k^{\frac{d}{2}-1} J_{\frac{d}{2}}(kl) (1 - (gk)^\sigma f(k)) \\ &= 1 - g^\sigma \frac{2^{1-\frac{d}{2}}}{\Gamma(\frac{d}{2})} l^{\frac{d}{2}} \int_0^\infty dk k^{\frac{d}{2}+\sigma-1} J_{\frac{d}{2}}(kl) f(k) \end{aligned}$$

bzw.

$$L(l) = 1 - \left(\frac{g}{l}\right)^\sigma \frac{2^{1-\frac{d}{2}}}{\Gamma(\frac{d}{2})} \int_0^\infty dz z^{\frac{d}{2}+\sigma-1} J_{\frac{d}{2}}(z) f\left(\frac{z}{l}\right)$$

Für große Werte l ist $f(\frac{z}{l})$ nahezu konstant. Daher gilt für solche Werte:

$$L(l) = 1 - \left(\frac{l}{\varepsilon}\right)^{-\sigma}. \quad (3.24)$$

Die Wahrscheinlichkeit $\Pr(s > l)$, daß ein Sprung mit einer Länge $s > l$ erfolgt, ist gegeben durch:

$$\Pr(s > l) = 1 - L(l) = \left(\frac{l}{\varepsilon}\right)^{-\sigma}.$$

Dies ist der Fall einer hyperbolischen Verteilung der räumlichen Verzweigungspunkte. Die Gesamtheit dieser Haltepunkte kann in Abhängigkeit von σ Verklumpungen im Einbettungsraum aufweisen. MANDELBROT [4] spricht hierbei von LÉVY-Staub. Dieser ist i.a. eine *fraktale* Menge. Wie nun gezeigt wird, ist der Parameter σ gleichbedeutend der HAUSDORFF-Dimension der Trajektorie, die solche Punkte miteinander verbindet:

$$D_{tr} = - \lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{\ln N(\eta)}{\ln \eta} \quad (3.25)$$

$N(\eta)$ ist die Anzahl der Elemente bezüglich des Maßstabes η , in unserem Fall also die Gesamtzahl der Sprünge in der Kugel mit dem Radius η . Man erhält:

$$N(\eta) = \sum_{n=0}^{\infty} p^{(n)}(\eta). \quad (3.26)$$

Dabei ist $p^{(n)}(\eta)$ die Wahrscheinlichkeit nach genau n Schritten einen Gesamtsprung der Länge η zu machen, d.h. es ist

$$p^{(n)}(\eta) = \frac{2\pi^{\frac{d}{2}}}{\Gamma(\frac{d}{2})} \int_0^\eta dr r^{d-1} p^{(n)}(r). \quad (3.27)$$

Wir ersetzen $p^{(n)}(r)$ durch deren FOURIER-Transformierte und erhalten

$$p^{(n)}(\eta) = \frac{2^{1-\frac{d}{2}}}{\Gamma(\frac{d}{2})} \int_0^\eta dr r^{d-1} \int_0^\infty dk k^{\frac{d}{2}} J_{\frac{d}{2}-1}(kr) p^{(n)}(k). \quad (3.28)$$

Die Größe $p^{(n)}(k)$ läßt sich sehr einfach aus dem Faltungssatz gewinnen. Es ist:

$$p^{(n)}(\mathbf{k}) = p(\mathbf{k})^n.$$

Wenn man (3.28) in die Ausgangsgleichung (3.26) einsetzt, dann gelangt man nach Summation zu:

$$N(\eta) = \frac{2^{1-\frac{d}{2}}}{\Gamma(\frac{d}{2})} \int_0^\eta dr r^{d-1} \int_0^\infty dk k^{\frac{d}{2}} J_{\frac{d}{2}-1}(kr) \frac{1}{1-p(k)} \quad (3.29)$$

Mit der Rekursionseigenschaft der BESSEL-Funktion kann dies vereinfacht werden zu:

$$N(\eta) = \frac{2^{1-\frac{d}{2}}}{\Gamma(\frac{d}{2})} \int_0^\infty d(\eta k) (\eta k)^{\frac{d}{2}-1} J_{\frac{d}{2}}(\eta k) \frac{1}{1-p(k)}.$$

Unter spezieller Berücksichtigung von (3.8) heißt das:

$$N(\eta) = \frac{2^{1-\frac{d}{2}}}{\Gamma(\frac{d}{2})} (\eta g)^\sigma \int_0^\infty dy y^{\frac{d}{2}-\sigma-1} J_{\frac{d}{2}}(y) \left(f\left(\frac{y}{\eta}\right) \right)^{-1}.$$

Bei einer Wahl von $\eta_m = \text{const.} \alpha^{-m}$ ergibt sich die Beziehung

$$N(\eta_m) = \text{const.} \alpha^{-\sigma m}$$

und somit ist für $m \rightarrow \infty$

$$D_{tr} = \sigma. \quad (3.30)$$

Ergänzend sei bemerkt, daß wegen $d_w = \frac{\sigma}{\mu}$ mit $\mu \leq 1$ die Relation $d_w \geq \sigma$ gilt. Das hat seine Ursache darin, daß zur Bestimmung der Wanderungsdimension mehrfach aufgesuchte Punkte (sich schneidende Trajektorien) auch mehrfach erfaßt werden. Bei der Bestimmung von σ ist dies nicht der Fall. Die Gleichheit von d_w und σ gilt im Fall $\mu = 1$, dem zeitlichen POISSON-Prozeß.

3.2 Räumlich-zeitliche Korrelation

Entsprechend ihrer Energieverteilung im System können die Teilchen nur solche Geschwindigkeiten annehmen, die einer solchen Verteilung gehorchen. Es besteht damit eine Abhängigkeit zwischen dem zurückgelegten Wegabschnitt und der dafür benötigten Zeit. Bisher wurde diese Korrelation unberücksichtigt gelassen, d.h. es wurde zugelassen, daß die Ereignisse Sprungdistanz und benötigte Zeit unabhängig voneinander sind. Dies fand seine Widerspiegelung in der Separation der Wartezeitverteilung $w(\mathbf{s}, t) = p(\mathbf{s}) w(t)$ für einen Sprung. Um nun auch die Korrelation zu erfassen, gehen wir von der Ausgangsgleichung (3.5) aus. Die Skalierungsbeziehung (3.4) führt dann auf die Relation:

$$\frac{1-w(\beta u)}{1-w(u)} = \frac{1-w(\alpha k, \beta u)}{1-w(k, u)}.$$

Wir führen als Abkürzungen ein:

$$M(u) = \frac{w(u)}{1 - w(u)}, \quad L(k, u) = \frac{w(u)}{1 - w(k, u)}.$$

Somit ist folgende Funktionalgleichung zu lösen:

$$\frac{M(u)}{M(\beta u)} = \frac{L(k, u)}{L(\alpha k, \beta u)}.$$

In der Annahme, daß der Limes $u \rightarrow 0$ existiert, erhält man für L die Bedingung:

$$\frac{L(k, 0)}{L(\alpha k, 0)} = \lim_{u \rightarrow 0} \frac{M(u)}{M(\beta u)}.$$

Nimmt man an, daß $M(u)$ für kleine u einem Potenzgesetz gehorcht, also

$$M(u) = \text{const. } u^{-\mu} (1 + \dots)$$

mit $0 < \mu \leq 1$, so ist

$$\lim_{u \rightarrow 0} \frac{M(u)}{M(\beta u)} = \beta^\mu$$

und demnach $L(k, 0) = \beta L(\alpha k, 0)$, d.h. $L(k, 0) = \text{const. } k^{-\sigma}$ mit

$$\sigma = \mu \frac{\ln \beta}{\ln \alpha} \geq 0.$$

Für $k \rightarrow 0$ ist dann noch

$$L(0, u) = M(u),$$

da wegen der Normierung $w(k=0, u) = w(u)$ gilt. Wir machen den Ansatz:

$$L(k, u) = \frac{M(u)}{1 + a u^{-\mu} k^\sigma + C(k, u)}$$

mit $C(0, u) = 0$. Diesen Ansatz prüfen wir mit der Funktionalgleichung und erhalten die Bedingung:

$$C(k, u) = C(\alpha k, \beta u). \quad (3.31)$$

Damit läßt sich für $w(k, u)$ auch schreiben:

$$\begin{aligned} w(k, u) &= 1 - \frac{w(u)}{L(k, u)} \\ &= w(u) \left(1 - \frac{1 - w(u)}{w(u)} (a u^{-\mu} k^\sigma + C(k, u)) \right). \end{aligned}$$

Im Fall der Separation $w(k, u) = w(u) p(k)$ fanden wir $w(k, u) = w(u)(1 - \text{const. } k^\sigma)$ mit $w(u) = (1 + (bu)^\mu)^{-1}$, d.h. hier ist

$$C(k, u) \equiv 0$$

Man kann auch sagen, falls $C(k, u) \equiv 0$ ist, dann sind die Sprünge räumlich-zeitlich unkorreliert. Für korrelierte Prozesse erhält man eine Korrektur in $P(k, u)$:

$$P(k, u) = \frac{1}{u + \text{const. } u^{1-\mu} k^\sigma + uC(k, u)}. \quad (3.32)$$

Die genaue Form der Korrelation bleibt hier noch unbestimmt. Zu deren Bestimmung ist die Kenntnis der Geschwindigkeitsverteilung notwendig. Entsprechend dieser wird die Länge des zurückgelegten Weges mit der dafür gebrauchten Zeit gekoppelt. Da sich die Verhältnisse zumindest in der Anfangsphase ständig ändern, müssen hier Nichtgleichgewichtsprozesse betrachtet werden. Deren Untersuchung soll aber nicht Aufgabe dieser Arbeit sein.

3.3 Anisotrope Wanderung

Wir wollen nun den Fall untersuchen, bei dem die Isotropie der Bewegung gestört ist. Dies bewirkt zumindest eine unterschiedliche Skalierung hinsichtlich der Koordinatenachsen und somit verschiedene räumliche Skalierungsfaktoren. Die Wahrscheinlichkeitsdichte soll wiederum einem Skalengesetz gehorchen:

$$\gamma P(\alpha_1 x_1, \alpha_2 x_2, \alpha_3 x_3, \beta t) = P(x_1, x_2, x_3, t).$$

Der Faktor γ wird durch die Normierung festgelegt. Damit ist dann:

$$\alpha_1 \alpha_2 \alpha_3 P(\alpha_1 x_1, \alpha_2 x_2, \alpha_3 x_3, \beta t) = P(x_1, x_2, x_3, t). \quad (3.33)$$

Führen wir nun auf beiden Seiten der Gleichung eine FOURIER- und LAPLACE-Transformation durch, dann gelangt man zu :

$$\beta P(\alpha_1 k_1, \alpha_1 k_2, \alpha_1 k_3, \beta u) = P(k_1, k_2, k_3, u).$$

Der Formalismus der CTRW-Theorie läßt sich auch für diesen Fall anwenden. Es ist:

$$P(k_1, k_2, k_3, u) = \frac{1}{u} \frac{1}{1 + \frac{w(u) - w(k_1, k_2, k_3, u)}{1 - w(u)}}. \quad (3.34)$$

Wir machen wieder den Separationsansatz:

$$w(k_1, k_2, k_3, u) = p(k_1, k_2, k_3) w(u)$$

und gelangen wie im isotropen Fall zu

$$w(u) = \frac{1}{1 + (bu)^\mu} \quad (3.35)$$

mit $\mu = \frac{\ln \kappa}{\ln \beta}$ und zu der Funktionalgleichung für $p(k_1, k_2, k_3)$:

$$1 - p(\alpha k_1, \alpha k_2, \alpha k_3) = \kappa (1 - p(k_1, k_2, k_3)).$$

Wir fordern, da $p(x_1, x_2, x_3)$ reell sein soll, die Bedingung

$$p(k_1, k_2, k_3) = p(-k_1, -k_2, -k_3) \quad (3.36)$$

und beschränken uns damit im weiteren auf positive k_i ; $i = 1, 2, 3$. Es sei nun

$$p(k_1, k_2, k_3) = 1 - f(k_1, k_2, k_3).$$

Man erhält somit die Funktionalgleichung

$$f(\alpha_1 k_1, \alpha_2 k_2, \alpha_3 k_3) = \kappa f(k_1, k_2, k_3).$$

Da die Bewegung in die einzelnen Richtungen unabhängig erfolgen soll, verlangen wir die additive Separation in der Form:

$$f(k_1, k_2, k_3) = d_1 k_1^{\sigma_1} + d_2 k_2^{\sigma_2} + d_3 k_3^{\sigma_3}.$$

Das ergibt folgendes System von Bedingungen:

$$\ln \kappa = \sigma_1 \ln \alpha_1 = \sigma_2 \ln \alpha_2 = \sigma_3 \ln \alpha_3.$$

Allgemeiner kann man folgende Lösung angeben:

$$f(k_1, k_2, k_3) = (d_1 k_1^{\sigma_1} + d_2 k_2^{\sigma_2} + d_3 k_3^{\sigma_3}) h(k_1, k_2, k_3)$$

mit der Forderung:

$$h(k_1, k_2, k_3) = h(\alpha_1 k_1, \alpha_2 k_2, \alpha_3 k_3).$$

Setzt man noch $z_i = \frac{\ln k_i}{\ln \alpha_i}$ und $h(k_1, k_2, k_3) = g(z_1, z_2, z_3)$, so ergibt sich die Forderung

$$g(z_1, z_2, z_3) = g(z_1 + 1, z_2 + 1, z_3 + 1).$$

Es soll nun der Einfachheit halber $h(k_1, k_2, k_3) \equiv 1$ gehalten werden. Somit ist:

$$p(k_1, k_2, k_3) = 1 - (d_1 k_1^{\sigma_1} + d_2 k_2^{\sigma_2} + d_3 k_3^{\sigma_3}).$$

Dann erhält man für die transformierte Wahrscheinlichkeitsdichte den Ausdruck:

$$P(k_1, k_2, k_3, u) = \frac{1}{u + u^{1-\mu} (c_1 k_1^{\sigma_1} + c_2 k_2^{\sigma_2} + c_3 k_3^{\sigma_3})},$$

wobei die Konstanten $\frac{d_i}{b^\mu}$ durch c_i ersetzt wurden. Die räumliche Rücktransformation ist gegeben durch

$$P(x_1, x_2, x_3, t) = (2\pi)^{-3} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dk_3 dk_2 dk_1 e^{i(k_1 x_1 + k_2 x_2 + k_3 x_3)} P(k_1, k_2, k_3, t)$$

und wegen (3.36):

$$P(x_1, x_2, x_3, t) = \pi^{-3} \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} dk_3 dk_2 dk_1 \cos(k_1 x_1) \cos(k_2 x_2) \cos(k_3 x_3) P(k_1, k_2, k_3, t).$$

Die zeitliche Rücktransformation ist analog dem isotropen Fall. Damit ist

$$\begin{aligned}
 P(x_1, x_2, x_3, t) &= \frac{\pi^{-3}}{\mu} \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} dk_3 dk_2 dk_1 \cos(k_1 x_1) \cos(k_2 x_2) \cos(k_3 x_3) \times \\
 &\quad \times H_{22}^{11} \left((c_1 k_1^{\sigma_1} + c_2 k_2^{\sigma_2} + c_3 k_3^{\sigma_3})^{\frac{1}{\mu}} t \Big|_{(0, \frac{1}{\mu})(0,1)}^{(0, \frac{1}{\mu})(1,0)} \right). \quad (3.37)
 \end{aligned}$$

Zur weiteren Auswertung des Integrals geht man wieder zur MELLIN- Transformation über:

$$P(s_1, s_2, s_3, t) = \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} dx_1 dx_2 dx_3 x_1^{s_1-1} x_2^{s_2-1} x_3^{s_3-1} P(x_1, x_2, x_3, t).$$

Man erhält wegen

$$\int_0^{\infty} dx_i x_i^{s_i-1} \cos(k_i x_i) = k_i^{-s_i} \Gamma(s_i) \cos\left(\frac{s_i \pi}{2}\right)$$

mit $0 < s_i < 1$

$$\begin{aligned}
 P(s_1, s_2, s_3, t) &= \pi^{-3} \prod_{i=1}^3 \left(\Gamma(s_i) \cos\left(\frac{s_i \pi}{2}\right) \right) \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} dk_1 dk_2 dk_3 k_1^{-s_1} k_2^{-s_2} k_3^{-s_3} \times \\
 &\quad \times H_{22}^{11} \left((c_1 k_1^{\sigma_1} + c_2 k_2^{\sigma_2} + c_3 k_3^{\sigma_3}) t^\mu \Big|_{(0,1)(0,\mu)}^{(0,1)(1,0)} \right)
 \end{aligned}$$

Es wurde zusätzlich noch (3.17) verwendet. Durch die Substitutionen

$$v_i = c_i k_i^{\sigma_i} t^\mu, \quad \varepsilon_i = \frac{1-s_i}{\sigma_i}$$

mit $i = 1, 2, 3$ gelangt man zu

$$\begin{aligned}
 P(s_1, s_2, s_3, t) &= \pi^{-3} \prod_{i=1}^3 \left(\Gamma(s_i) \cos\left(\frac{s_i \pi}{2}\right) \frac{1}{\sigma_i} (c_i t^\mu)^{\frac{s_i-1}{\sigma_i}} \right) \times \\
 &\quad \times \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} dv_1 dv_2 dv_3 v_1^{\varepsilon_1-1} v_2^{\varepsilon_2-1} v_3^{\varepsilon_3-1} H_{22}^{11} \left(v_1 + v_2 + v_3 \Big|_{(0,1)(0,\mu)}^{(0,1)(1,0)} \right).
 \end{aligned}$$

Um die Integration ausführen zu können, ist es notwendig, weitere Transformationen durchzuführen:

$$\begin{aligned}
 w_1 &= v_1 + v_2 + v_3 \\
 w_2 &= v_2 + v_3 \\
 w_3 &= v_3.
 \end{aligned}$$

Es ist mit

$$I = \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} dv_1 dv_2 dv_3 v_1^{\varepsilon_1-1} v_2^{\varepsilon_2-1} v_3^{\varepsilon_3-1} H_{22}^{11} \left(v_1 + v_2 + v_3 \Big|_{(0,1)(0,\mu)}^{(0,1)(1,0)} \right)$$

folglich auch

$$I = 2^3 \int_0^{\infty} dw_1 \int_0^{w_1} dw_2 \int_0^{w_2} dw_3 w_3^{\varepsilon_3-1} (w_2 - w_3)^{\varepsilon_2-1} (w_1 - w_2)^{\varepsilon_1-1} H_{22}^{11} \left(w_1 \Big|_{(0,1)(0,\mu)}^{(0,1)(1,0)} \right).$$

Weiterhin machen wir die Substitutionen

$$w_3 = w_2 z_3, \quad w_2 = w_1 z_2, \quad w_1 = z_1$$

und erhalten

$$I = 2^3 \int_0^\infty dz_1 \int_0^1 dz_2 \int_0^1 dz_3 z_3^{\varepsilon_3-1} z_2^{\varepsilon_2+\varepsilon_3-1} z_1^{\varepsilon_1+\varepsilon_2+\varepsilon_3-1} (1-z_3)^{\varepsilon_2-1} (1-z_2)^{\varepsilon_1-1} H_{22}^{11} \left(z_1 \middle| \begin{matrix} (0,1)(1,0) \\ (0,1)(0,\mu) \end{matrix} \right).$$

Die Integrationen lassen sich nun leicht ausführen unter Beachtung der Definitionen der Beta-Funktion und der FOX-Funktion:

$$I = 2^3 \frac{\Gamma(\varepsilon_1)\Gamma(\varepsilon_2)\Gamma(\varepsilon_3)\Gamma(1-(\varepsilon_1+\varepsilon_2+\varepsilon_3))}{\Gamma(1-\mu(\varepsilon_1+\varepsilon_2+\varepsilon_3))}.$$

Zusammenfassend erhält man:

$$\begin{aligned} P(s_1, s_2, s_3, t) &= \left(\frac{2}{\pi}\right)^3 \prod_{i=1}^3 \left(\Gamma(s_i) \cos\left(\frac{s_i\pi}{2}\right) \frac{1}{\sigma_i} (c_i t^\mu)^{\frac{s_i-1}{\sigma_i}} \right) \times \\ &\times \frac{\Gamma\left(\frac{1-s_1}{\sigma_1}\right) \Gamma\left(\frac{1-s_2}{\sigma_2}\right) \Gamma\left(\frac{1-s_3}{\sigma_3}\right) \Gamma\left(1 + \left(\frac{1-s_1}{\sigma_1} + \frac{1-s_2}{\sigma_2} + \frac{1-s_3}{\sigma_3}\right)\right)}{\Gamma\left(1 + \mu\left(\frac{1-s_1}{\sigma_1} + \frac{1-s_2}{\sigma_2} + \frac{1-s_3}{\sigma_3}\right)\right)}. \end{aligned}$$

Zur besseren Übersicht ist noch folgende Beziehung nützlich:

$$\Gamma(s_i) \cos\left(\frac{s_i\pi}{2}\right) = 2^{s_i-1} \sqrt{\pi} \frac{\Gamma\left(\frac{s_i}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{1-s_i}{2}\right)}.$$

Damit gelangt man schließlich zu:

$$\begin{aligned} P(s_1, s_2, s_3, t) &= \left(\frac{2}{\sqrt{\pi}}\right)^3 \prod_{i=1}^3 \left(\Gamma\left(\frac{s_i}{2}\right) \frac{2^{s_i-1}}{\sigma_i} (c_i t^\mu)^{\frac{s_i-1}{\sigma_i}} \right) \times \\ &\times \frac{\Gamma\left(\frac{1-s_1}{\sigma_1}\right) \Gamma\left(\frac{1-s_2}{\sigma_2}\right) \Gamma\left(\frac{1-s_3}{\sigma_3}\right) \Gamma\left(1 + \left(\frac{1-s_1}{\sigma_1} + \frac{1-s_2}{\sigma_2} + \frac{1-s_3}{\sigma_3}\right)\right)}{\Gamma\left(\frac{1-s_1}{2}\right) \Gamma\left(\frac{1-s_2}{2}\right) \Gamma\left(\frac{1-s_3}{2}\right) \Gamma\left(1 + \mu\left(\frac{1-s_1}{\sigma_1} + \frac{1-s_2}{\sigma_2} + \frac{1-s_3}{\sigma_3}\right)\right)}. \end{aligned}$$

Im Fall $\mu = 1$ und $\sigma_1 = \sigma_2 = \sigma_3 = 2$ vereinfacht sich dieser Ausdruck erheblich und man gelangt nach Rücktransformation wie erwartet zur GAUSS-Verteilung.

Für die Momente in die einzelnen Richtungen erhält man:

$$\langle x_i^j \rangle \sim t^{j \frac{\mu}{\sigma_i}}; \quad i = 1, 2, 3 \quad (3.38)$$

Dann ist die Wanderungsdimension entlang der Achse x_i bei Normierung entlang der anderen Achsen:

$$d_{w_i} = \frac{\sigma_i}{\mu}. \quad (3.39)$$

3.4 Diffusion im fraktionalen Kalkül

3.4.1 Motivation

Grundlage unserer bisherigen Betrachtungen war ein Modell, das die Isotropie der Wanderung lokal voraussetzte, d.h. das Teilchen sprang auf seinem Weg an jedem möglichen Verzweigungspunkt in eine dem Gleichverteilungsgesetz der Winkel gehorchende Richtung. Benachbarte Verzweigungspunkte sind nach einer Abstandsverteilung $p(s)$ miteinander durch Poren verbunden. Jedes konkrete Medium (Gestein, Koks-Kohle, ...) wird als eine Realisierung nach diesen Gesetzen angesehen, wobei die spezielle Wahl von $p(s)$ eine Ähnlichkeits-Symmetrie bezüglich der radialen Achse verlangt. Zur statistischen Auswertung sind wegen der Verschiedenheit der Einzelproben mehrere vom selben Typ, d.h. derselben Porigkeit, nötig. Die gemachten Aussagen gelten nur hinsichtlich des Ensembles, nicht aber für eine bestimmte Probe.

Im Ergebnis dieser Überlegungen erhielten wir eine Lösung für die Wahrscheinlichkeitsdichte $P(k, u)$ in FOURIER- und LAPLACE-transformierter Form (3.9). Für den Fall $\sigma = 2$ und $\mu = 1$ besteht eine direkte Beziehung zur geöhnlichen Diffusionsgleichung. Auch wenn eine Erweiterung der gewöhnlichen Diffusionsgleichungen auf solche mit gebrochenzahliger Ordnung auf dem ersten Blick als gewagt erscheinen mag, ermöglicht diese neue Sichtweise ein besseres Verständnis der ablaufenden Prozesse. In diesem Abschnitt wird der Zusammenhang zwischen der Ordnung der Ableitung und der Art des Prozesses hergestellt, wobei grundlegende Ergebnisse von SCHNEIDER, WYSS und PESECKIS [21, 22, 23, 24] Verwendung fanden. Dies wird durch die CTRW-Theorie aufgrund ihrer elementaren Betrachtungsweise der Prozesse ermöglicht. Als wesentlich stellt sich dabei heraus, daß im allgemeinen die Bildung der zeitlichen Ableitung vom Zeitnullpunkt der Messung abhängt, was aber heißt, daß diese Prozesse dann *nicht* mehr stationär sind. Falls die Trajektorie eine von zwei verschiedene Dimension hat, ist auch die räumliche Ableitung *nicht* mehr lokal. Es besteht eine Korrelation zum Startpunkt der Wanderung. Die Ordnung der räumlichen und zeitlichen Ableitung hat somit eine physikalische Bedeutung. Einen direkten Bezug des fraktionalen Kalküls zur Diffusion auf kammförmigen Fraktalen stellte NIGMATULLIN [25] her.

Der Kalkül steht in engem Zusammenhang mit vielen speziellen Funktionen [26]. Dabei ist auffallend, daß diese vielfach aus elementareren Funktionen erzeugt werden können. So z.B. ist:

$$J_{-\alpha-\frac{1}{2}}(z) = \frac{(2z)^{\alpha+\frac{1}{2}}}{\sqrt{\pi}} D_{z^2}^{\alpha} \frac{\cos(z)}{z}.$$

Die Hoffnung besteht nun darin, daß man kompliziertere Beziehung durch Anwendung des Kalküls der gebrochenzahligen Ableitungen in einer übersichtlicheren Form schreiben kann wie etwa als Beziehung zwischen Ursache und Wirkung. Bei den vorliegenden Betrachtungen wird die fraktionale Differentiation im Sinne von RIEMANN verwendet. Noch allgemeinere Typen von Ableitungs- bzw. Integrationsoperatoren werden bei SNEDDON [27] betrachtet.

3.4.2 Darstellung der Ableitung

Ausgangspunkt ist das iterierte CAUCHY-Integral, wie es bei der Lösung der gewöhnlichen Differentialgleichung n-ter Ordnung $y^{(n)}(x) = f(x)$ mit den Anfangsbedingungen

$y = 0, y' = 0, \dots, y^{(n-1)} = 0$ für $x = x_0$ auftritt. Die Lösung hierfür ist:

$$y(x) = \frac{1}{(n-1)!} \int_{x_0}^x dz (x-z)^{n-1} f(z).$$

Unter der Ableitung der Ordnung α einer Funktion $f(x)$ im RIEMANNschen Sinne wird die Bildung

$$D_{x-x_0}^\alpha f(x) = \frac{1}{\Gamma(-\alpha)} \int_{x_0}^x dz (x-z)^{-\alpha-1} f(z), \quad \Re(\alpha) < 0 \quad (3.40)$$

verstanden. Dabei wird auf den Punkt x_0 Bezug genommen. Dieser kann eine Anfangszeit aber auch ein bestimmter Ort des Raumes sein. Die Beschränkung für den Realteil $\Re(\alpha)$ zur Sicherung der Konvergenz des Integrals kann durch eine andere Schreibweise umgangen werden:

$$D_{x-x_0}^\alpha f(x) = \frac{d^m}{dx^m} D_{x-x_0}^{\alpha-m} f(x), \quad (3.41)$$

mit $m-1 \leq \Re(\alpha) < m$; $m = 1, 2, 3, \dots$. Man beachte, daß hier der Anfangspunkt x_0 wesentlich in der Definition der Ableitung ist. Andernfalls treten Widersprüche bei den Ergebnissen auf. Für die Anwendung ist interessant, wie sich die FOURIER- bzw. LAPLACE-Transformation der Ableitung einer Funktion darstellt. Wegen der Identität in FOURIER-Darstellung für $d = 1$

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{ikx} \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-iky} f(y) = \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{ikx} f(k)$$

gilt für die Ableitung der Ordnung α (mit $+\infty$ als Bezugspunkt) die Beziehung

$$D_{x-\infty}^\alpha f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{ikx} \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-iky} D_{y-\infty}^\alpha f(y).$$

Ausführlich heißt das:

$$D_{x-\infty}^\alpha f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{ikx} \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-iky} \frac{(-1)^{-\alpha}}{\Gamma(-\alpha)} \int_y^{\infty} dz (z-y)^{-\alpha-1} f(z).$$

Mit der Substitution von z durch $z = y + q$ gelangt man zu

$$D_{x-\infty}^\alpha f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{ikx} \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-iky} \frac{(-1)^{-\alpha}}{\Gamma(-\alpha)} \int_0^{\infty} dq q^{-\alpha-1} f(y+q).$$

Nun ersetzt man y durch $y = h - q$ und erhält:

$$\begin{aligned} D_{x-\infty}^\alpha f(x) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{ikx} \int_{-\infty}^{\infty} dh e^{-ikh} f(h) \frac{(-1)^{-\alpha}}{\Gamma(-\alpha)} \int_0^{\infty} dq q^{-\alpha-1} e^{ikq} \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{ikx} (ik)^\alpha f(k). \end{aligned}$$

Der Differential-Operator $\mathcal{D}^{(n)}\{\alpha\}$ für $n = d$ mit dem diskreten Satz $\{\alpha\}$ an Ableitungen soll folgende Form haben:

$$\begin{aligned}\mathcal{D}^{(n)}\{\alpha\}f(x_1, \dots, x_n) &= \sum_{m=1}^n D_{x_m-\infty}^{\sigma_m} f(x_1, \dots, x_n) \\ &= (2\pi)^{-n} \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{m=1}^n (dk_m e^{ix_mk_m}) \left(\sum_{p=1}^n (ik_p)^{\alpha_p} \right) f(k_1, \dots, k_n).\end{aligned}$$

Analog erhält man für die zeitliche LAPLACE-Transformation mit Hilfe des Faltungssatzes:

$$g(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} du e^{ut} \int_0^{\infty} dz e^{-uz} g(z); \quad g(t) \equiv 0 \quad \text{für } t < 0$$

bzw.

$$\begin{aligned}D_t^\alpha g(t) &= \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} du e^{ut} \int_0^{\infty} dz e^{-uz} D_z^\alpha g(z) \\ &= \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} du e^{ut} u^\alpha g(u).\end{aligned}$$

3.4.3 Beziehung zur CTRW-Theorie

Bei der Betrachtung möglicher Verteilungen in isotropen Medien erhielten wir durch Anwendung der CTRW-Theorie für die LAPLACE- und FOURIER-transformierte Wahrscheinlichkeitsdichte:

$$P(k, u) = \frac{u^{\mu-1}}{u^\mu + (ck)^\sigma} P(k, t_0). \quad (3.42)$$

Dabei charakterisierte μ den rein zeitlichen Prozeß, beschrieben durch die Wartezeitverteilung $w(t)$, der Parameter σ hingegen die HAUSDORFF-Dimension der Trajektorie. Der Quotient $d_w = \frac{\sigma}{\mu}$ ist die Wanderungsdimension für das Teilchen. Wir schreiben die Beziehung (3.42) in eine etwas andere Form:

$$u^{\mu-1}(uP(k, u) - P(k, t_0)) = -(ck)^\sigma P(k, u).$$

In der Sprache der gebrochenzahligen Ableitung erhält man nach Rücktransformation mit $0 < \mu \leq 1$, $1 < \sigma \leq 2$ für $d = 1$:

$$D_t^{\mu-1} \frac{\partial}{\partial t} P(x, t) = \kappa^\sigma D_{x-\infty}^{\sigma-2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} P(x, t). \quad (3.43)$$

Die Übertragung auf beliebige Dimensionen ist hier nicht möglich. Für $\mu = 1$ und $\sigma = 2$ ist dies die Verallgemeinerung der gewöhnlichen Diffusionsgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x, t) = \kappa^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} P(x, t).$$

mit κ^2 als Diffusionskoeffizienten. Wie wir schon früher festgestellt haben, entspricht gerade dem POISSON-Prozeß ein $\mu = 1$. Abweichungen in μ haben ein anderes Zeitverhalten zur Folge. Die Ursachen hierfür können jedoch verschiedenartig sein, wobei die Nichtstationarität zumeist die Ursache ist. Abweichungen von der BROWNSchen-Trajektorie mit $\sigma = 2$ können ebenfalls berücksichtigt werden. Deren Ursachen liegen u.a. in der Struktur des Stoffes (z.B. fraktale Porensysteme). Strukturen mit $\sigma \neq 2$ sind i.a. korreliert. Daher ist es auch nicht verwunderlich, daß die räumliche Ableitung bis $+\infty$ als Bezugspunkt erstreckt wird. Wie man sieht, liegt in (3.43) eine Trennung in räumlicher (rechter Seite) und zeitlicher Ableitung (linke Seite) vor, d.h. ein räumlicher Konzentrationsunterschied bewirkt einen zeitlichen Ausgleichsprozeß entsprechend der Raumstruktur und der Fähigkeit des Teilchens, auf diesen zu reagieren. Allgemeiner kann man annehmen, daß das Teilchen in jede Richtung unterschiedlich springen kann. Für die FOURIER-Transformierte der Verteilung $p(x_1, x_2, x_3)$ kann man folgende Form annehmen:

$$p(k_1, k_2, k_3) = 1 - (d_1 k_1^{\sigma_1} + d_2 k_2^{\sigma_2} + d_3 k_3^{\sigma_3}).$$

Die Wartezeitverteilung $w(t)$ ist dieselbe wie im vorigen Fall. Damit erhält man:

$$P(k_1, k_2, k_3, u) = \frac{1}{u + u^{\mu-1} (c_1 k_1^{\sigma_1} + c_2 k_2^{\sigma_2} + c_3 k_3^{\sigma_3})}. \quad (3.44)$$

Nach etwas Umstellen gelangen wir mit $1 < \sigma \leq 2$ zu:

$$D_t^{\mu-1} \frac{\partial}{\partial t} P(x_1, x_2, x_3, t) = \sum_{i=1}^3 \kappa_i^{\sigma_i} D_{x_i-\infty}^{\sigma_i-2} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} P(x_1, x_2, x_3, t) \quad (3.45)$$

Kapitel 4

Fraktale und Renormierung

Die Berechnung der LAPLACE-transformierten Form der Wartezeitverteilungsdichte $w(u)$ für die Wanderung auf Fraktalen ist Hauptanliegen in diesem Kapitel. Aufbauend auf den Arbeiten von MACHTA, VAN DEN BROECK und STRAUSS [28, 29, 30, 31, 32] wird eine Verallgemeinerung zu deren Bestimmung angegeben werden. Eine Ortsabhängigkeit von $w(u)$ beschränkt sich auf die Auswahl charakteristischer Gitterpunkte. Durch Anwendung der dynamischen Renormierungsmethode gelingt es, für *endlich* ramifizierte Fraktale eine allgemeine Form der Funktionalgleichung zur Bestimmung von $w(u)$ anzugeben. Die Hauptidee besteht dabei in der Zusammensetzung eines Sprunges aus selbstähnlichen kleineren Sprüngen. Da dies beliebig oft möglich ist, gelangt man zu einem renormierten Grenzprozeß, der charakteristisch für das ganze Fraktal ist. Das Herangehen wird durch eine Auswahl an Beispielen verdeutlicht. Aus der Kenntnis der Zeit- und Raumskalierung ist man in der Lage, die Wanderungsdimension zu bestimmen, die hier für die jeweiligen Beispiele mit angegeben werden. Eine Erweiterung der besprochenen Methoden auf andere fraktale Strukturklassen ist ohne weiteres durchführbar. Derer werden zum Abschluß einige untersucht.

4.1 Aufstellung der Funktionalgleichung

Fraktale lassen wegen ihres selbstähnlichen, zumeist hierarchischen, Aufbaus eine skaleninvariante Beschreibung des Diffusionsprozesses zu. Dies soll hier mittels der CTRW-Theorie erfolgen. Dabei beschränken wir uns auf den zeitlichen Prozeß. Zur Erfassung des strukturellen Einflusses nehmen wir eine Diskretisierung des Fraktals vor. Dies geschieht durch Auswahl repräsentativer Punkte in selbstähnlicher Weise. Mittels dieser kann man durch unendliche Verfeinerung wieder das mathematische Fraktal aufbauen. Dabei besteht die Hoffnung den fraktalen Prozeß im Grenzfall zu beschreiben.

Die diffusive Wanderung soll entsprechend der Kontinuität des Ablaufes nur zu den nächsten Nachbarn erfolgen. Zwischen den benachbarten Gitterpunkten besteht ein effektiver Weg, dargestellt durch einen Verbindungsgraphen. Der Einfachheit halber wird dieser zumeist als eine Gerade gezeichnet. Man beachte aber, daß das Teilchen in Wirklichkeit eine fraktale Unterstruktur durchläuft. Es sei angenommen, daß die Dichte der Wartezeitverteilung $w(t)$ für ein solches Basiselement bekannt ist. Die nächste Stufe der Konstruktion ist somit aus solchen Elementen aufgebaut. Man will nun die resultierende Verteilung für die Wanderung in der neuen Konstruktionsstufe mit Hilfe der bekannten Verteilung der

vorhergehenden Stufe bestimmen. Dieser Ersetzungsprozeß wird unendlich oft mit Hilfe des selbstähnlichen Kompositionsschemas fortgesetzt. Im Grenzfall wird somit der resultierende Prozeß für das Fraktal erzeugt.

Im Bilde des effektiven Verbindungsgraphen ist uninteressant, was genau auf diesem stattfindet. Daher kann man von Spüngen zwischen den adjazenten Gitterpunkten sprechen. Ist unser Teilchen von einem Gitterpunkt zu einem benachbarten gelangt, so kann man auch sagen, es habe einen Schritt gemacht. Die Dichte der Verteilung $w^{(N)}(t)$ für N aufeinanderfolgende Schritte berechnet sich aus der N -fachen Faltung von $w(t)$:

$$w^{(N)}(t) = \overbrace{w(t) * \dots * w(t)}^{N\text{-fach}}.$$

Wegen des Faltungssatzes der LAPLACE-Transformation ist aber

$$w^{(N)}(u) = w(u)^N. \tag{4.1}$$

Aufgrund dieser Eigenschaft ist eine einfache Zuordnung von Schrittzahl und zugehöriger Verteilung möglich. Im folgenden wird daher gleich im zeitlichen LAPLACE-Bild gerechnet. Wir ersetzen somit die linke Seite von (4.1) gleich durch deren rechte.

Nun ist die Struktur im allgemeinen verzweigt, und entsprechend muß $w(u)$ für den Sprung in eine bestimmte Richtung noch durch die Zahl der nächsten Nachbarn an den jeweiligen Verzweigungspunkten dividiert werden. Um die resultierende Dichte $w_r(t)$ zu erhalten, müssen alle möglichen unabhängigen Kombination zum Erreichen des Endpunktes E addiert werden.

Es sollen nun einfache Beispiele betrachtet werden. Als ein solches bietet sich die Gerade an, bei der schon durch andere Rechnungen Ergebnisse zum Vergleich vorliegen [28, 29, 30, 31]. Das Teilchen soll von S starten und nach E gelangen, ohne diesen Punkt vorher

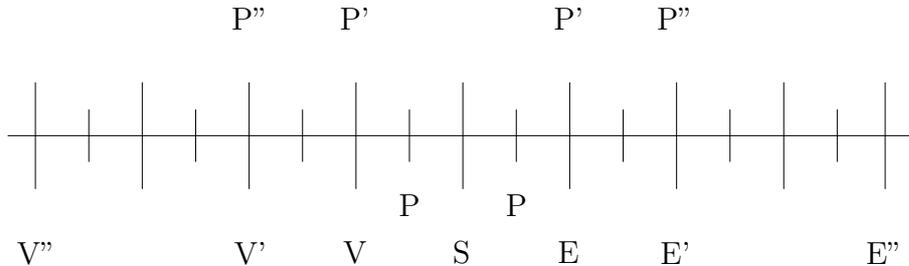
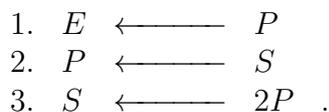


Abbildung 4.1: Geraden-Renormierung

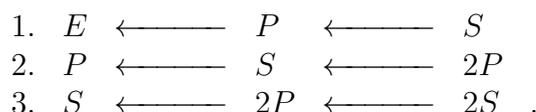
besucht zu haben. Dabei soll der bezüglich S spiegelsymmetrisch zu E liegende Punkt V nicht erreicht werden. Um nun die resultierende Wartezeitverteilung von S nach E zu erhalten, müssen für alle in Frage kommenden Wege in Abhängigkeit von der Schrittzahl die entsprechenden Wegezahlen bestimmt werden. Da jeder Punkt nur zwei nächste Nachbarn besitzt, wird in eine Richtung (rechts oder links) mit $\frac{w(u)}{2}$ gesprungen. Für jeden N -Schritt-Weg ist dann die zugehörige LAPLACE-transformierte Wartezeitverteilung

$$\left(\frac{w(u)}{2}\right)^N.$$

Um eine Übersicht über das Sprunggeschehen zu erhalten, kann man sich folgendes Schema (ähnlich einem Reaktionsschema) anfertigen:



Das Schema besagt folgendes. Der Endpunkt E kann in einem Schritt nur von P erreicht werden, der Punkt P nur von S , dieser aber von zwei P -Punkten. Das Schema kann man nun für zwei Schritte fortsetzen:



Man sieht, dass der Endpunkt E nach zwei Schritten von S auf genau einem Weg erreicht wird, was aber klar ist. Ein P wird auf zwei verschiedenen Wegen erreicht, zum einen, indem man zum Startpunkt zurückkehrt, zum anderen wird dieser vom gegenüberliegenden erreicht. Die Koeffizienten vor den Symbolen geben also die Zahl der Wege zu den auf der linken Seite stehenden Punkten an. Der Endpunkt E kann nur über P erreicht werden, d.h. sind $N - 1$ Schritte gemacht, so gibt es nur noch einen Weg von P nach E im letzten Schritt. Es sei nun die Zahl der Wege von S nach E für k Schritte bekannt, dann lässt sich rekursiv die Zahl der Wege in $k + 1$ Schritten bestimmen, d.h. es ist für k Schritte

$$E \xleftarrow{k} a_k S + b_k P \xleftarrow{k+1} a_k 2P + b_k S$$

bzw.

$$E \xleftarrow{k+1} a_{k+1} S + b_{k+1} P.$$

Man erhält ein System von Rekursionsgleichungen:

$$1. \quad a_{k+1} = b_k, \quad 2. \quad b_{k+1} = 2a_k.$$

Uns interessiert aber nur die Wegzahl von S nach E also a_k . Indem man die zweite Gleichung in die erste einsetzt, erhält man die Differenzgleichung:

$$a_{k+2} - 2a_k = 0.$$

Zur Lösung macht man den Ansatz $a_k = \text{const.} \cdot \gamma^k$. Wenn man diesen in die vorige Gleichung einsetzt erhält man $\gamma = \pm\sqrt{2}$. Als allgemeine Lösung findet man

$$a_k = \alpha_1 (+\sqrt{2})^k + \alpha_2 (-\sqrt{2})^k.$$

Die Konstanten α_1 und α_2 werden durch die Anfangsbedingungen, d.h. durch die Wegzahl für 2 und 3 Schritte bestimmt. Wie wir schon wissen, ist $a_2 = 1$, und wie man sich ebenso schnell überzeugt, $a_3 = 0$. Man erhält ein lineares Gleichungssystem zur Bestimmung von α_1 und α_2

$$a_2 = 1 = \alpha_1 (+\sqrt{2})^2 + \alpha_2 (-\sqrt{2})^2, \quad a_3 = 0 = \alpha_1 (+\sqrt{2})^3 + \alpha_2 (-\sqrt{2})^3$$

mit der Lösung $\alpha_1 = \alpha_2 = \frac{1}{4}$. Schließlich erhält man als Ergebnis für die Wegezahl $g(N)$ in N Schritten:

$$g(N) = \frac{1}{4} \left((+\sqrt{2})^N + (-\sqrt{2})^N \right).$$

Ist N eine gerade Zahl, also $N = 2M$ (M zählt Doppelschritte), so ist $g(M) = 2^{M-1}$, ist hingegen N ungerade, so ist $g(N) = 0$. Es sind also nur Doppelschritte möglich, wie man sich auch aus der Zeichnung überzeugt. Nun gilt es die einzelnen Wegbeiträge mit wachsender Doppelschrittzahl aufzusummieren. Man erhält:

$$\frac{1}{2}w_r(u) = \sum_{M=1}^{\infty} g(M) \left(\frac{w(u)}{2} \right)^{2M} = \sum_{M=1}^{\infty} 2^{M-1} \left(\frac{w(u)}{4} \right)^M.$$

Auf der linken Seite muß der Vorfaktor $\frac{1}{2}$ stehen, da ja nur nach einer Seite gesprungen wird, beide Richtungen aber gleich wahrscheinlich sind. Man erhält schließlich:

$$w_r(u) = \frac{w(u)^2}{2 - w(u)^2}.$$

Mittels dieser resultierenden Wartezeitverteilung kann man im weiteren die Sprünge von S nach E' und damit von S nach $E'' \dots$ betrachten. All diese Sprünge gehen aus der Skalierung mit einem Faktor 2 auseinander hervor. Sie sind selbstähnlich konstruiert. Die erhaltene Funktionalgleichung ist stellvertretend in allen aufeinanderfolgenden Skalen. Nach dem allgemeinen Renormierungsgedanken nimmt man nun an, daß $w_r(u)$ denselben Sachverhalt beschreibt wie $w(u)$, aber für die skalierte Struktur. Das erfordert, da die Physik dieselbe ist, auch dieselbe Form beider, aber mit anderen Zeitskalen. Man setzt also (Näheres im Abschnitt 4.2)

$$w_r(u) = w(\lambda u)$$

und erhält eine Funktionalgleichung für $w(u)$:

$$w(\lambda u) = \frac{w(u)^2}{2 - w(u)^2}. \tag{4.2}$$

Mit deren Lösung wollen wir uns in einem späteren Abschnitt beschäftigen. Diese Methode ist auch zur Behandlung einfacher fraktaler Strukturen wie das SIERPIŃSKI-Dreieck Abb.(4.2) geeignet, da bei diesem die Zahl der nächsten Nachbarn an jedem Punkt konstant gleich 4 ist.

Um einen Überblick zu bekommen, auf welche Weise jeder Punkt erreicht wird, macht man sich ein Schema entsprechend Abb.(4.2) für einen Schritt. Dabei soll V aus Symmetriegründen nicht erreicht werden. Es sei nun die Anzahl der Wege in k Schritten von den einzelnen Punkten zum Endpunkte E bekannt. Dann läßt sich als Schema angeben:

$$E \xleftarrow{k} a_k S + b_k P + c_k Q \xleftarrow{k+1} 4a_k P + b_k(S + P + Q) + 2c_k P$$

bzw.

$$E \xleftarrow{k+1} a_{k+1} S + b_{k+1} P + c_{k+1} Q.$$

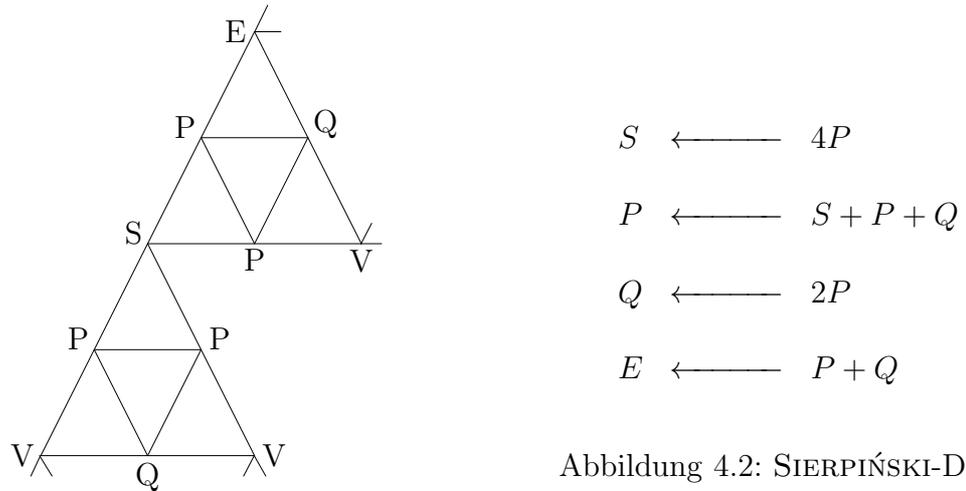


Abbildung 4.2: SIERPIŃSKI-Dreieck

Damit erhält man das System von Rekursionsgleichungen:

$$a_{k+1} = b_k, \quad b_{k+1} = 4a_k + b_k + 2c_k, \quad c_{k+1} = b_k.$$

Wir interessieren uns nur für a_k und lösen nach diesem auf. Es ist somit die Differenzgleichung

$$a_{k+2} = a_{k+1} + 6a_k$$

zu lösen. Mit dem Ansatz $a_k = \text{const. } \gamma^k$ erhält man $\gamma = \frac{1}{2} \pm \frac{5}{2}$ und als allgemeine Lösung:

$$a_k = \alpha_1 3^k + \alpha_2 (-2)^k.$$

Wie man sich leicht überzeugt lauten die Anfangsbedingungen: $a_2 = 1$, $a_3 = 3$. Damit erhält man als Lösung für die Wegzahl $g(N)$ von S nach E in N Schritten [32]:

$$g(N) = 3^{N-2}.$$

Nun läßt sich auch die resultierende Wartezeitverteilung $w_r(u)$ berechnen. Es ist

$$\frac{1}{4} w_r(u) = \sum_{N=2}^{\infty} g(N) \left(\frac{w(u)}{4} \right)^N = \sum_{N=2}^{\infty} 3^{N-2} \left(\frac{w(u)}{4} \right)^N.$$

Als Funktionalgleichung für $w(u)$ erhält man:

$$w(\lambda u) = \frac{w(u)^2}{4 - 3w(u)}. \tag{4.3}$$

Selbiges Gitter kann man auch in beliebigen Einbettungsdimensionen d betrachten (in $d = 3$ den SIERPIŃSKI-Tetraeder, $d > 3$ Hypertetraeder). Ein solcher Tetraeder besitzt $d + 1$ Eckpunkte. Werden zwei dieser Tetraeder an einem Eckpunkt zusammengebracht, so besitzt dieser $2d$ nächste Nachbarn. Mit diesen Hypertetraedern kann man nun ein Fraktal erzeugen. Das Sprunggeschehen in diesem Gitter wird durch das folgende Schema gekennzeichnet:

$$\begin{aligned}
 S &\longleftarrow 2dP \\
 P &\longleftarrow S + (d - 1)P + (d - 1)Q \\
 Q &\longleftarrow 2P + (2d - 4)Q.
 \end{aligned}$$

Ist nun die Wegzahlen in k Schritten bekannt, d.h.

$$E \xleftarrow{k} s_k S + p_k P + q_k Q,$$

so sind diese auch für $k + 1$ bekannt, denn es ist

$$E \xleftarrow{k+1} s_k 2dP + p_k(S + (d-1)P + (d-1)Q) + q_k(2P + (2d-4)Q)$$

und ebenso

$$E \xleftarrow{k+1} s_{k+1}S + p_{k+1}P + q_{k+1}Q.$$

Man erhält als System von Rekursionsgleichungen:

$$s_{k+1} = p_k, \quad p_{k+1} = 2d s_k + (d-1)p_k + 2q_k, \quad q_{k+1} = 2(d-2)q_k + (d-1)p_k.$$

Uns interessiert aber nur s_k , nach dem wir nun aufzulösen haben. Es ist:

$$s_{k+3} - (3d-5)s_{k+2} + 2(d^2-5d+3)s_{k+1} + 4d(d-2)s_k = 0.$$

Wir machen wieder den Ansatz $s_k = \text{const. } \gamma^k$ und erhalten

$$\gamma^3 - (3d-5)\gamma^2 + 2(d^2-5d+3)\gamma + 4d(d-2) = 0.$$

Wurzeln dieser kubischen Gleichung sind:

$$\gamma_1 = -2, \quad \gamma_2 = \frac{3(d-1) + \sqrt{d^2 - 2d + 9}}{2}, \quad \gamma_3 = \frac{3(d-1) - \sqrt{d^2 - 2d + 9}}{2}.$$

Für die Wegzahl $g(N)$ von S nach E in N Schritten erhält man die allgemeine Lösung:

$$g(N) = a_1 \gamma_1^{N-2} + a_2 \gamma_2^{N-2} + a_3 \gamma_3^{N-2}.$$

Die Verschiebung in der Potenz wurde deshalb gewählt, weil mindestens 2 Schritte nötig sind, um den Endpunkt zu erreichen. Als Anfangsschrittzahlen erhält man:

$$g(2) = 1, \quad g(3) = 3(d-1), \quad g(4) = 2d + (d-1)(7d-9).$$

Mit etwas Aufwand kann man die unbekanntenen Koeffizienten berechnen:

$$a_1 = 0, \quad a_2 = \frac{1}{2} \frac{\sqrt{d^2 + 2d - 9} - 3(d-1)}{\sqrt{d^2 - 2d + 9}}, \quad a_3 = \frac{1}{2} \frac{\sqrt{d^2 + 2d - 9} + 3(d-1)}{\sqrt{d^2 - 2d + 9}}.$$

Schließlich erhält man als Lösung:

$$g(N) = \frac{1}{\sqrt{d^2 - 2d + 9}} \left(\left(\frac{3(d-1) + \sqrt{d^2 - 2d + 9}}{2} \right)^{N-1} - \left(\frac{3(d-1) - \sqrt{d^2 - 2d + 9}}{2} \right)^{N-1} \right).$$

Man kann nun die Funktionalgleichung aufstellen:

$$\frac{1}{2d} w(\lambda u) = \sum_{N=2}^{\infty} g(N) \left(\frac{w(u)}{2d} \right)^2.$$

Nach etwas Rechnung erhält man:

$$w(\lambda u) = \frac{w(u)^2}{2d - 3(d - 1)w(u) + (d - 2)w(u)^2}.$$

Speziell für $d = 2$ bekommt man die schon oben bestimmte Beziehung.

Bei Gitterstrukturen, bei denen die Koordinationszahl nicht an jedem Punkt gleich ist, kann man auf obige Art nicht so schnell zum Ergebnis kommen, da ja die Wartezeitverteilung sich entsprechend den möglichen Richtungen aufteilt. Es soll daher ein allgemeineres Vorgehen beschrieben werden, wobei das Ziel, die Aufstellung der Funktionalgleichung, bestehen bleibt. Wir erinnern uns daran, daß bei einer Koordinationszahl z die LAPLACE-transformierte Wartezeitverteilung für den Sprung in eine Richtung $\frac{w(u)}{z}$ beträgt. Das zu untersuchende Gitter möge aus M Gitterpunkten bestehen. Wir können entsprechend des Vorhandenseins von Verbindungen ein Schema für einen Sprung der folgenden Art aufschreiben:

$$\begin{array}{l} B_1 \longleftarrow b_{11}B_1 + b_{12}B_2 + \dots + b_{1M}B_M \\ B_2 \longleftarrow b_{21}B_1 + b_{22}B_2 + \dots + b_{2M}B_M \\ \dots\dots\dots \\ B_M \longleftarrow b_{M1}B_1 + b_{M2}B_2 + \dots + b_{MM}B_M \end{array}$$

Die Koeffizienten sollen die Wahrscheinlichkeit angeben, mit der ein Sprung erfolgt. Ist kein Sprung möglich, so ist der entsprechende Koeffizient 0. Das Schema kann man für 2 und mehr, z.B. $N - 1$, Sprünge fortsetzen. Die Wahrscheinlichkeit für einen Sprung ist das Produkt aus der Anzahl der Zuflüsse der betrachteten Punktorte (verschiedene Gitterpunkte können aufgrund von Symmetrien dieselbe Bezeichnung tragen) mal der Wahrscheinlichkeit, genau in die betrachtete Richtung zu springen. Diese ist jedoch bei Gleichberechtigung aller möglichen Richtungen $\frac{1}{z}$, mit z als Koordinationszahl im Sprungpunkt. Betrachten wir speziell den Sprung vom Punkt J zu I . Um nun von J nach I in zwei Schritten zu gelangen, können alle erreichbaren Zwischenpunkte angesprungen werden, was unterschiedliche Wege ergibt. Um die Gesamtwahrscheinlichkeit für einen Sprung in zwei Schritten von J nach I zu erhalten, müssen die Teilwahrscheinlichkeiten für jeden Weg addiert werden:

$$b_{IJ}^{(2)} = \sum_{K=1}^M b_{IK} b_{KJ}.$$

Das ist nun aber gerade die Bildungsweise des Produktes zweier Matrizen. Unser Schema schreiben wir nun in der Form:

$$\begin{bmatrix} B_1 \\ B_2 \\ \vdots \\ B_M \end{bmatrix} \longleftarrow_1 \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} & \dots & b_{1M} \\ b_{21} & b_{22} & \dots & b_{2M} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{M1} & b_{M2} & \dots & b_{MM} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} B_1 \\ B_2 \\ \vdots \\ B_M \end{bmatrix}.$$

Links stehen die Zielpunkte und rechts die Startpunkte. Für zwei Sprünge ist dann:

$$\begin{bmatrix} B_1 \\ B_2 \\ \vdots \\ B_M \end{bmatrix} \longleftarrow_2 \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} & \dots & b_{1M} \\ b_{21} & b_{22} & \dots & b_{2M} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{M1} & b_{M2} & \dots & b_{MM} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} & \dots & b_{1M} \\ b_{21} & b_{22} & \dots & b_{2M} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{M1} & b_{M2} & \dots & b_{MM} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} B_1 \\ B_2 \\ \vdots \\ B_M \end{bmatrix}$$

und für $N - 1$ Sprünge:

$$\begin{bmatrix} B_1 \\ B_2 \\ \vdots \\ B_M \end{bmatrix} \xleftarrow{N-1} \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} & \dots & b_{1M} \\ b_{21} & b_{22} & \dots & b_{2M} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{M1} & b_{M2} & \dots & b_{MM} \end{bmatrix}^{N-1} \begin{bmatrix} B_1 \\ B_2 \\ \vdots \\ B_M \end{bmatrix}.$$

Bei allen Koeffizienten steht der Faktor $w(u)$. Diesen können wir herausziehen, indem wir b_{IJ} aufteilen in:

$$b_{IJ} = w(u) a_{IJ}.$$

Der Koeffizient a_{IJ} ist dann die von der Gitterstruktur abhängige Transfer-Wahrscheinlichkeit von J nach I und kann für ein bestimmtes Gitter leicht abgelesen werden. Wir nennen die aus den a_{IJ} gebildete Matrix \mathbf{A} Transfermatrix. Damit ist die Wahrscheinlichkeit nach $N - 1$ Schritten gegeben durch:

$$w(u)^{N-1} \mathbf{A}^{N-1}.$$

Wir betrachten stets ein Teilchen, das von genau einem Gitterpunkt startet, d.h. wir müssen den soeben erhaltenen Ausdruck von rechts mit einem Spaltenvektor \mathbf{y} multiplizieren, dessen Elemente sämtlich null sind, außer dem Element, das den Startpunkt S charakterisiert. Es sei dies etwa das erste Element. Ihm ordnen wir den Wert 1 zu. Nach genau N Schritten soll das Teilchen einen Endpunkt E erreichen. Wir müssen von allen vorhandenen Gitterpunkten die herausgreifen, über die der letzte Sprung erfolgt. Es müssen alle Möglichkeiten zusammengezählt werden. Das geschieht, indem man von links mit einem Zeilenvektor \mathbf{x}^T sowie $w(u)$ multipliziert. In diesem Zeilenvektor sind nur die Elemente von 0 verschieden über die im letzten Schritt ein Sprung erfolgt. Sie sind gleich der Wahrscheinlichkeit für diesen Sprung in die bestimmte Richtung

$$w(u) \mathbf{x}^T w(u)^{N-1} \mathbf{A}^{N-1} \mathbf{y}.$$

Der Endpunkt kann auf unabhängigen Wegen in unterschiedlicher Schrittzahl erreicht werden, von minimal einem Schritt angefangen. Man muß nur noch über alle diese Schrittzahlen summieren, um die resultierende Wartezeitverteilung $\frac{1}{z} w_r(u)$ für einen Sprung im renormierten Gitter von S nach E zu erhalten. Hierbei wird vorausgesetzt, daß die Endpunkte alle gleichberechtigt sind.

Die Vorgehensweise ändert sich nicht, wenn man die Betrachtungen für eine beliebige Konstruktionsstufe n macht und eine resultierende Wartezeitverteilung in der $(n + 1)$ -ten Stufe berechnet. Es ist schließlich:

$$w^{(n+1)}(u) = z w^{(n)}(u) \mathbf{x}^T \frac{1}{\mathbf{E} - w^{(n)}(u) \mathbf{A}} \mathbf{y}. \quad (4.4)$$

Betrachtet man jetzt nur noch die Wanderung in der $(n + 1)$ -ten Stufe, so besteht wegen des selbstähnlichen Konstruktionsaufbaus der einzige Unterschied im Abstand der neuen Bezugspunkte. Diese gehen aus den alten durch Skalierung mit dem Faktor α hervor. Da im Prinzip wieder dasselbe Gitter zugrunde liegt, beschreiben die Wartezeitverteilungen $w^{(n)}(u)$ und $w^{(n+1)}(u)$ denselben Prozeß. Man erwartet jedoch für den resultierenden Prozeß eine neue Bezugszeit T' , die aus der alten durch

$$T' = \lambda T$$

hervorgeht. Diese wird je nach Struktur größer als die ursprüngliche sein.

Der zeitliche Skalierungsfaktor λ läßt sich einfach durch Potenzreihenentwicklung von $w^{(n)}(u)$ für kleine u berechnen, der zugehörige geometrische Skalierungsfaktor α direkt aus dem Generator bestimmen. Somit kann man die Wanderungsdimension d_w aus dem asymptotischen Verhalten der Momente für große Zeiten

$$\langle r^j \rangle \sim t^{\frac{j}{d_w}}$$

ermitteln. In diesem Fall ist:

$$d_w = \frac{\ln \lambda}{\ln \alpha}. \quad (4.5)$$

Zur Berechnung von λ war nur die Zusammenhangseigenschaft des Gitters bedeutsam, nicht aber die genaue Lage im Raum. Die Wanderungsdimension d_w hingegen berücksichtigt zusätzlich die radiale Skalierung der Struktur. Eine eindeutige Zuordnung zwischen Fraktal und Wanderungsdimension ist nicht möglich. Zwar besitzt jedes Fraktal eine bestimmte Wanderungsdimension, diese bestimmt aber nicht eindeutig ein konkretes Fraktal.

4.2 Die renormierte Grenzverteilung $w(t)$

Im vorigen Abschnitt erhielten wir eine Bestimmungsgleichung (4.4) für die resultierende Wartezeitverteilung in der neuen Konstruktionsstufe $n + 1$. Dabei wurde immer vorausgesetzt, daß die zur Berechnung zugrunde gelegte Wartezeitverteilung in der n -ten Stufe bekannt ist. Ausgegangen wird von einer i.a. beliebigen Anfangsverteilung $w^{(0)}(t)$, die Sprünge zu den nächsten Nachbaratomen beschreibt. Eine solche Verteilung ist z.B. die Gamma-Verteilung

$$w^{(0)}(t) = \frac{\tau^\kappa}{\Gamma(\kappa)} t^{\kappa-1} e^{-\tau t} \quad \text{bzw.} \quad w^{(0)}(u) = \left(1 + \frac{u}{\tau}\right)^{-\kappa}$$

mit den Parametern τ und $\kappa = \tau T$. Die Exponential-Verteilung ($\kappa = 1$) ist somit ein Spezialfall. Es wird nun vorausgesetzt, daß man $w^{(n)}(u)$ in Potenzreihenform schreiben kann:

$$w^{(n)}(u) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k^{(n)} (Tu)^k. \quad (4.6)$$

Dann existieren auch alle Momente der Verteilung. Die Grundannahme ist nun, daß für $n \rightarrow \infty$ die $a_k^{(n)}$ feste Werte a_k annehmen und $w(u)$ damit eine im Grenzübergang fixierte Funktion ist. Wir setzen nun

$$w^{(n)}(u) [\mathbf{E} - w^{(n)}(u) \mathbf{A}]^{-1} = \sum_{k=0}^{\infty} \mathbf{B}_k^{(n)} (Tu)^k$$

mit der Hilfsmatrix $\mathbf{B}_k^{(n)}$. Durch Koeffizientenvergleich liest man hieraus ab:

$$a_k^{(n)} \mathbf{E} = \mathbf{B}_k^{(n)} - \mathbf{A} \sum_{i=0}^k a_i^{(n)} \mathbf{B}_{k-i}^{(n)}.$$

Es ist wegen der Normierung von $w^{(n)}(u)$ in jeder Konstruktionsstufe $a_0 = a_0^{(n)} = 1$ und damit

$$\mathbf{B}_0^{(n)} = \mathbf{B}_0 = [\mathbf{E} - \mathbf{A}]^{-1}.$$

Im Fall $k = 1$ gilt

$$\mathbf{B}_1^{(n)} = \mathbf{B}_1 a_1^{(n)} = -[\mathbf{E} - \mathbf{A}]^{-2} a_1^{(n)}$$

mit $\mathbf{B}_1 = -[\mathbf{E} - \mathbf{A}]^{-2}$. Für alle weiteren $k > 1$ erhält man:

$$\mathbf{B}_k^{(n)} = a_k^{(n)} [\mathbf{E} - \mathbf{A}]^{-2} + \mathbf{B}_0 \mathbf{A} \sum_{i=1}^{k-1} a_i^{(n)} \mathbf{B}_{k-i}^{(n)}.$$

Außerdem ist mit der Bestimmungsgleichung

$$a_k^{(n+1)} = z \mathbf{x}^T \mathbf{B}_k^{(n)} \mathbf{y}$$

und mit $\lambda = z \mathbf{x}^T [\mathbf{E} - \mathbf{A}]^{-2} \mathbf{y}$ heißt das

$$a_k^{(n+1)} = \lambda a_k^{(n)} + z \mathbf{x}^T \mathbf{B}_0 \mathbf{A} \sum_{i=1}^{k-1} a_i^{(n)} \mathbf{B}_{k-i}^{(n)} \mathbf{y}.$$

So ist für $k = 1$

$$a_1^{(n+1)} = \lambda a_1^{(n)} \tag{4.7}$$

und damit

$$a_1^{(n)} = \lambda^n a_1^{(0)} = -\lambda^n,$$

d.h. wir müssen auf der linken Seite der Funktionalgleichung die soeben bestimmte Beziehung (4.7) einsetzen. Dies ist auch notwendig, damit überhaupt eine nichttriviale Grenzverteilung existiert. Zumindest für kleine u kann man auf der linken Seite der Funktionalgleichung u durch λu mit demselben $a_1^{(n)}$ auf beiden Seiten ersetzen. Dies ist für jedes n zwingend. Daher braucht der jeweilige Schritt n nicht weiter angegeben werden.

Die Frage ist nun, ob es eine allgemeine Ersetzungsregel gibt, d.h. eine Transformationsregel, die es ermöglicht, den Ausdruck auf der linken Seite der Funktionalgleichung durch dieselbe Funktion $w(u)$ auszudrücken. Zumindest für $n \rightarrow \infty$ soll diese *Renormierung* exakt sein. Die Vermutung liegt nahe, daß dies durch einfache Umskalierung von u möglich ist. Wir würden somit nur die Bezugszeit im folgenden Konstruktionsschritt abändern. Dann müssen wir aber zeigen, daß

$$a_k^{(n+1)} \sim \lambda^k a_k^{(n)},$$

ist, d.h. die asymptotische Gleichheit. Somit kann man den oberen Index n weglassen, da sich in der Beziehung zwischen linker und rechter Seite nichts mehr ändert. Man kann dies direkt für $a_2^{(n)}$ zeigen. Es ist:

$$a_2^{(n+1)} = \lambda a_2^{(n)} + z a_1^{(n)} \mathbf{x}^T \mathbf{B}_0 \mathbf{A} \mathbf{B}_1^{(n)} \mathbf{y}.$$

Das führt zu

$$a_2^{(n+1)} = \lambda a_2^{(n)} - \lambda^{2n} \delta$$

mit der Substitution

$$\delta = z \mathbf{x}^T \mathbf{B}_0 \mathbf{A} \mathbf{B}_1 \mathbf{y}.$$

Als Lösung erhält man

$$a_2^{(n)} = \lambda^n \left(a_2^{(0)} - \frac{\delta}{\lambda} \frac{\lambda^n - 1}{\lambda - 1} \right).$$

Die asymptotische Auswertung zeigt:

$$\frac{a_2^{(n+1)}}{a_2^{(n)}} \sim \lambda^2.$$

Es liegt nun die Vermutung nahe, daß

$$a_k^{(n)} \sim c_k \lambda^{kn} \quad \text{bzw.} \quad \mathbf{B}_k^{(n)} \sim \mathbf{C}_k \lambda^{kn}$$

für jedes k mit den konstanten Vorfaktoren c_k bzw. \mathbf{C}_k gilt, wenn nur n hinreichend groß gewählt wird. Dann ist für diese n

$$a_{k+1}^{(n+1)} = \lambda a_{k+1}^{(n)} + \delta_{k+1} \lambda^{(k+1)n},$$

mit

$$\delta_k = z \sum_{i=1}^{k-1} c_{k-i} \mathbf{x}^T \mathbf{B}_0 \mathbf{A} \mathbf{C}_i \mathbf{y},$$

wobei die Ausdrücke mit $i \leq k$ bekannt sind. Man erhält als asymptotische Lösung bei festem Index $k+1$

$$a_{k+1}^{(n)} \sim \frac{\delta_{k+1}}{\lambda - 1} \lambda^{(k+1)n} = c_{k+1} \lambda^{(k+1)n}.$$

Da die Behauptung nun induktiv von k auf $k+1$ bewiesen ist, gilt allgemein die Eigenschaft

$$\frac{a_k^{(n+1)}}{a_k^{(n)}} \sim \lambda^k.$$

Wir können daher auf der linken Seite der ursprünglichen Funktionalgleichung für viele Konstruktionsschritte n diesen Index weglassen, wenn wir die Variable u durch die renormierte Variable λu ersetzen, d.h. es ist:

$$w(\lambda u) = z w(u) \mathbf{x}^T \frac{1}{\mathbf{E} - w(u) \mathbf{A}} \mathbf{y}. \quad (4.8)$$

Es sei jedoch bemerkt, daß die mit dieser Methode erhaltene Lösung für $w(u)$ nicht die einzige ist. Obiges Verfahren ist auch anwendbar auf Entwicklungen der Form:

$$w^{(n)}(u) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k^{(n)} (Tu)^{\nu k}, \quad 0 < \nu < 1.$$

Dann hat jedoch T nicht mehr die Bedeutung der mittleren Wartezeit. Der durch die Anfangsverteilung $w^{(0)}(t)$ festgelegte Parameter ν bestimmt auch bei den folgenden Konstruktionsritten n die jeweilige Form der Entwicklung. Eine solche Anfangsverteilung ist z.B.

$$w^{(0)}(t) = \frac{1}{\tau} \frac{\beta \Gamma(\gamma)}{\Gamma\left(\frac{\alpha}{\beta}\right) \Gamma\left(\gamma - \frac{\alpha}{\beta}\right)} \frac{\left(\frac{t}{\tau}\right)^{\alpha-1}}{\left(1 + \left(\frac{t}{\tau}\right)^\beta\right)^\gamma}$$

mit den Parametern τ , α , β , γ und $\nu = \beta\gamma - \alpha$. Anstatt $w(Tu)$ ist dann $w((Tu)^\nu)$ Lösung mit

$$\nu = \frac{\ln\left(z \mathbf{x}^T [\mathbf{E} - \mathbf{A}]^{-2} \mathbf{y}\right)}{\ln \lambda}.$$

Der zeitliche Skalierungsfaktor λ bestimmt sich in Abhängigkeit von ν .

4.3 Mittlere Schrittzahlen

Die Wahrscheinlichkeit, in genau n Schritten einen bestimmten Endpunkt zu erreichen, ist gegeben durch:

$$p_n = \mathbf{x}^T \mathbf{A}^{n-1} \mathbf{y}.$$

Daraus ergibt sich die mittlere Schrittzahl zu den z gleichwertigen Endpunkten:

$$\langle N \rangle = z \sum_{n=1}^{\infty} n p_n = z \mathbf{x}^T \left(\sum_{n=1}^{\infty} n \mathbf{A}^{n-1} \right) \mathbf{y},$$

d.h.

$$\langle N \rangle = z \mathbf{x}^T \frac{1}{(\mathbf{E} - \mathbf{A})^2} \mathbf{y}. \quad (4.9)$$

Andererseits lautet die renormierte Funktionalgleichung :

$$w(\lambda u) = z w(u) \mathbf{x}^T \frac{1}{\mathbf{E} - w(u) \mathbf{A}} \mathbf{y}.$$

Differentiation nach $w(u)$ ergibt:

$$\frac{dw(\lambda u)}{dw(u)} = z \mathbf{x}^T [\mathbf{E} - w(u) \mathbf{A}]^{-1} \mathbf{y} + z w(u) \mathbf{x}^T \mathbf{A} [\mathbf{E} - w(u) \mathbf{A}]^{-2} \mathbf{y}.$$

Beachtet man

$$\frac{dw(\lambda u)}{dw(u)} = \frac{\frac{dw(\lambda u)}{du}}{\frac{dw(u)}{du}}$$

und die Entwicklung von $w(u)$ für kleine u

$$w(u) = 1 - Tu + \dots,$$

so erhält man im Limes $u \rightarrow 0$

$$\begin{aligned}\frac{\lambda}{z} &= \mathbf{x}^T [\mathbf{E} - \mathbf{A}]^{-2} \mathbf{y} + \mathbf{x}^T \mathbf{A} [\mathbf{E} - \mathbf{A}]^{-2} \mathbf{y} \\ &= \mathbf{x}^T [\mathbf{E} - \mathbf{A}]^{-2} \mathbf{y},\end{aligned}$$

d.h. denselben Ausdruck wie für $\langle N \rangle$:

$$\lambda = \langle N \rangle = z \mathbf{x}^T \frac{1}{(\mathbf{E} - \mathbf{A})^2} \mathbf{y}. \quad (4.10)$$

Der Renormierungsfaktor λ hat somit die Bedeutung der mittleren Schrittzahl. Soll die Wanderung in der neuen Konstruktionsstufe mit dem Schrittmaß 1 erfolgen, so sind mit dem alten Schrittmaß aus der vorigen Konstruktionsstufe im Mittel $\langle N \rangle$ Schritte nötig.

Mittlere Schrittzahlen können einfach durch Computersimulation ermittelt werden. Für nicht so reguläre Strukturen hat man somit eine Möglichkeit zur Bestimmung der Wanderungsdimension.

4.4 Beispiele

Das beschriebene Vorgehen soll an einigen Beispielen demonstriert werden. Symmetrien im Prozeßablauf finden dabei verstärkte Beachtung, wodurch sich die Transfermatrizen auf eine notwendige Größe reduzieren.

4.4.1 Die Gerade

Als Grundgrößen erhält man:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ \frac{1}{2} & 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{y} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{x}^T = \left[0, \frac{1}{2} \right], \quad z = 2.$$

Damit lautet die Funktionalgleichung

$$\begin{aligned}w(\lambda u) &= 2 \left[0, \frac{1}{2} w(u) \right] \begin{bmatrix} 1 & -w(u) \\ -\frac{1}{2} w(u) & 1 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \\ &= \frac{w(u)^2}{2 - w(u)^2}.\end{aligned}$$

Dieses Ergebnis erhielten wir schon früher. Außerdem ist $\alpha = 2$, $\lambda = 4$ und damit $d_w = 2$.

Lösung der Funktionalgleichung

Nur in sehr wenigen bzw. konstruierten Fällen, wird es möglich sein die Funktionalgleichung mit Hilfe bekannter Funktionen zu lösen. Ein solches Beispiel erhält man für die Gerade. Mit $g(u) = w(u)^{-1}$ bedeutet dies:

$$g(\lambda u) = 2g(u)^2 - 1.$$

Man erinnert sich an die Verdopplungsformel für die \cos - bzw. \cosh - Funktion, die in beiden Fällen diesselbe Form hat: $\cosh(2x) = 2\cosh(x)^2 - 1$. Wir ersetzen hier x durch die noch zu wählende Funktion $\chi(u)$, welche der Bedingung $\chi(\lambda u) = 2\chi(u)$ genügen muß. Diese Funktionalgleichung hat als Lösung

$$\chi(u) = (cu)^\gamma f(u),$$

mit $f(\lambda u) = f(u)$. Die Lösung hierfür ist eine Entwicklung der Form

$$f(u) = \sum_k f_k \exp\left(2\pi i k \frac{\ln u}{\ln \lambda}\right)$$

und beschreibt skaleninvariantes Verhalten. Dies soll hier aber nicht interessieren. Wir setzen deshalb $f(u) \equiv 1$ und erhalten

$$w(u) = \frac{1}{\cosh(cu)^\gamma}$$

mit $\gamma = \frac{\ln 2}{\ln \lambda}$. Von all diesen Funktionen suchen wir solche mit endlichen mittleren Wartezeiten T . Es muß daher

$$T = -\lim_{u \rightarrow 0} \frac{d}{du} w(u)$$

sein. Dies wird nur durch $\gamma = \frac{1}{2}$ erfüllt. Man erhält schließlich:

$$w(u) = \frac{1}{\cosh \sqrt{2Tu}}.$$

4.4.2 SIERPIŃSKI-Dreieck, Basis $b = 2$, Dimension $d = 2$

Die Behandlung des SIERPIŃSKI-Dreiecks ist ebenfalls sehr einfach:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{y} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{x}^T = \left[0, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}\right], \quad z = 4,$$

$$\begin{aligned} w(\lambda u) &= 4w(u) \begin{bmatrix} 0, \frac{1}{4}, \frac{1}{4} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & -w(u) & 0 \\ -\frac{1}{4}w(u) & 1 - \frac{1}{4}w(u) & -\frac{1}{4}w(u) \\ 0 & -\frac{1}{2}w(u) & 1 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \\ &= \frac{w(u)^2}{4 - 3w(u)} \end{aligned}$$

Es ist $\alpha = 2$, $\lambda = 5$ und damit $d_w = \frac{\ln 5}{\ln 2}$.

4.4.3 SIERPIŃSKI-Tetraeder, $b = 2$, d beliebig

Eine Verallgemeinerung des vorigen Beispiels auf beliebige Dimensionen d des euklidischen Einbettungsraumes ist auch möglich. Da wir dieses Beispiel schon früher durch Bestimmung mittels Wegezählen behandelt haben, wird die Einfachheit der Matrix-Methode besonders deutlich:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ \frac{1}{2d} & \frac{d-1}{2d} & \frac{d-1}{2d} \\ 0 & \frac{1}{d} & \frac{d-2}{d} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{y} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{x}^T = \left[0, \frac{1}{2d}, \frac{d-1}{2d} \right], \quad z = 2d.$$

Dies in die allgemeine Gleichung eingesetzt ergibt

$$w(\lambda u) = \frac{w(u)^2}{2d - 3(d-1)w(u) + (d-2)w(u)^2},$$

mit $\lambda = d + 3$. Die Wanderungsdimension beträgt wegen $\alpha = 2$:

$$d_w = \frac{\ln(d+3)}{\ln 2}.$$

Der Hauptaufwand in der Berechnung liegt bei der Invertierung der Matrix. Mit einem Algebra-Programm kann diese Arbeit auf das Eingeben der Matrixelemente von \mathbf{x} , \mathbf{A} , \mathbf{y} reduziert werden.

4.4.4 SIERPIŃSKI-Dreieck, $b = 3$, $d = 2$

Bisher betrachteten wir nur Strukturen mit gleicher Anzahl an nächsten Nachbarn. Strukturen mit verschiedenen Koordinationszahlen z erschweren die Berechnung der effektiven Wahrscheinlichkeit für einen Weg derart, daß diese nur mit immensen Aufwand zu verwirklichen ist. Die hier benutzte Methode kennt solche Schwierigkeiten nicht. Der Formalismus wichtet die einzelnen Wege aufgrund der Eigenschaft der Matrixmultiplikation von selbst. In dem hier betrachteten Beispiel ist der Punkt R ein solcher Ausnahmepunkt, bei dem die Koordinationszahl $z = 6$ verschieden von den anderen mit $z = 4$ ist.

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{1}{6} & 0 \\ 0 & \frac{1}{4} & 0 & \frac{1}{6} & \frac{1}{4} \\ 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & \frac{1}{4} & \frac{1}{6} & \frac{1}{4} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{y} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{x}^T = \left[0, 0, \frac{1}{4}, 0, \frac{1}{4} \right]$$

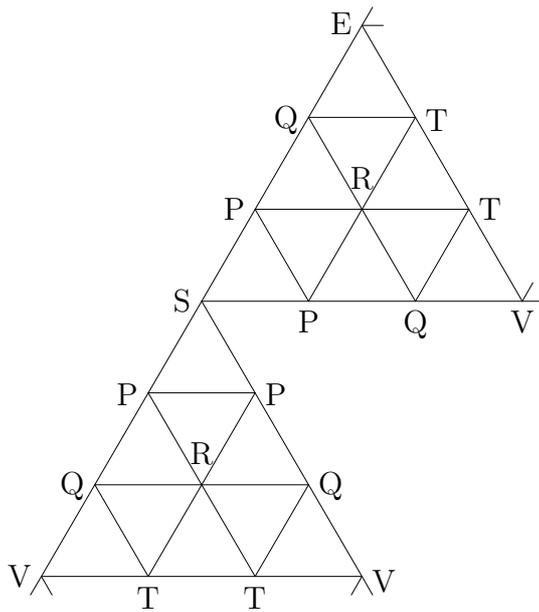
Als Funktionalgleichung erhält man

$$w(\lambda u) = \frac{w(u)^3(w(u) + 6)}{w(u)^4 + 12w(u)^3 - 6w(u)^2 - 96w(u) + 96}.$$

Dabei ist $\lambda = \frac{90}{7}$ und somit

$$d_w = \frac{\ln \frac{90}{7}}{\ln 3} \approx 2.325.$$

Weitere Beispiele findet man im Anhang.



Zuflußschema:

$$\begin{aligned}
 S &\leftarrow 4\frac{1}{4}P \\
 P &\leftarrow \frac{1}{4}S + \frac{1}{4}P + \frac{1}{4}Q + \frac{1}{6}R \\
 Q &\leftarrow \frac{1}{4}P + \frac{1}{6}R + \frac{1}{4}T \\
 R &\leftarrow 2\frac{1}{4}P + 2\frac{1}{4}Q + 2\frac{1}{4}T \\
 T &\leftarrow \frac{1}{4}Q + \frac{1}{6}R + \frac{1}{4}T
 \end{aligned}$$

Abbildung 4.3: SIERPIŃSKI-Dreieck, $b = 3$

4.5 Die Entwicklungskoeffizienten von $w(u)$

Vielfach ist die Bestimmung der Momente $\langle t^i \rangle$ von Interesse. Mit den Momenten, die eventuell experimentell ermittelt werden, lassen sich andererseits die Entwicklungskoeffizienten von $w(u)$ bestimmen. Beide sind direkt verknüpft durch

$$\langle t^i \rangle = \int_0^\infty dt t^i w(t) = (-1)^i \lim_{u \rightarrow 0} \frac{d^i}{du^i} w(u)$$

und somit

$$\langle t^i \rangle = (-1)^i i! T^i a_i.$$

Nun müssen auch die Momente wegen der Positivität von $w(t)$ selbst positiv sein, also

$$(-1)^i i! T^i a_i = \int_0^\infty dt t^i w(t) > 0,$$

das heißt aber

$$(-1)^i a_i = |a_i| > 0.$$

Damit erhalten wir eine Bedingung an die a_i . Die a_i haben alternierende Vorzeichen.

Wenden wir uns nun der direkten Berechnung der Entwicklungskoeffizienten zu. Man gehe dabei zur z -Transformation über. Diese ist gegeben durch:

$$a(z) = \sum_{k=0}^\infty a_k z^{-k},$$

wobei z komplex ist. Als Umkehrformel gilt folgende Beziehung:

$$a_k = \frac{1}{2\pi i} \oint dz z^{k-1} a(z), \quad k \geq 0.$$

Für $k < 0$ ist $a_k = 0$. Bei der Integration ist zu beachten, daß der Integrationsweg im Konvergenzgebiet von $a(z)$ liegt. Ist also $w(u)$ bekannt, so gelangt man durch Übergang von Tu zu $\frac{1}{z}$ zur z -transformierten Größe, d.h. es ist $a(z) = w\left(\frac{1}{z}\right)$ und

$$a_k = \frac{1}{2\pi i} \oint dz z^{k-1} w\left(\frac{1}{z}\right).$$

Die Berechnung der a_k soll nun anhand der Geraden gezeigt werden. Es war:

$$w(u) = \frac{1}{\cosh \sqrt{2Tu}}.$$

Man erhält somit

$$a_k = \frac{1}{2\pi i} \oint dz z^{k-1} \frac{1}{\cosh \sqrt{\frac{2}{z}}}.$$

Die Aufgabe besteht nun darin die Pole des Integranden zu bestimmen und die Residuen an diesen Stellen zu berechnen. Die Polstellen liegen bei

$$z_p = -2 \left(\left(p - \frac{1}{2} \right) \pi \right)^{-2}, \quad p \in \mathbb{N}.$$

Die Residuen bestimmen sich zu:

$$\lim_{z \rightarrow z_p} \frac{z - z_p}{\cosh \sqrt{\frac{2}{z}}} = \frac{4}{\pi} \frac{(-1)^{p-1}}{2p-1} z_p.$$

Damit ist

$$a_k = (-1)^k \frac{2^{3k+2}}{\pi^{2k+1}} \sum_{p=1}^{\infty} \frac{(-1)^{p-1}}{(2p-1)^{2k+1}}.$$

Nur selten ist $w(u)$ völlig bekannt. Daher sollen die Entwicklungskoeffizienten a_k mit Hilfe der Funktionalgleichung durch Koeffizientenvergleich bestimmt werden. Dazu entwickelt man $w(u)$ wie üblich und ordnet nach gleichen Potenzen in u . Zwei Beispiele sollen das Herangehen verdeutlichen.

Die LAPLACE-transformierte Wartezeitverteilung für die Gerade genügt einer Funktionalgleichung der Form:

$$w(\lambda u) = \frac{w(u)^2}{2 - w(u)^2}.$$

Nun formen wir wie folgt um:

$$w(\lambda u)(2 - w(u)^2) = w(u)^2.$$

Durch Koeffizientenvergleich erhält man aus der Potenzreihenentwicklung

$$w(u) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k (Tu)^k$$

die folgende Beziehung zwischen den Koeffizienten:

$$2a_l\lambda^l = \sum_{i+j=l} a_i a_j + \sum_{i+j+k=l} \lambda^i a_i a_j a_k.$$

Es ist wieder $a_0 = 1, a_1 = -1$. Man liest für $l = 1$ sofort $\lambda = 4$ ab. Eine explizite Formel zur Berechnung der a_l für $l > 1$ ist:

$$a_l = \frac{1}{4^l - 4} \left\{ \sum_{i=1}^{l-1} a_i \left(2a_{l-i} + 4^i \sum_{m=0}^{l-i} a_m a_{l-m-i} \right) \right\}.$$

Man kann nun schrittweise die Entwicklungskoeffizienten aus den zuvor bestimmten errechnen. So ist:

$$a_0 = 1, \quad a_1 = -1, \quad a_2 = \frac{5}{6}, \quad a_3 = -\frac{61}{90}.$$

Die so erhaltenen Entwicklungskoeffizienten stimmen mit den schon früher ermittelten überein. Wie man nebenbei erkennt, hat man durch Kombination beider Verfahren eine Möglichkeit zur Berechnung ungerader Potenzen von π :

$$\pi^{2k+1} = (-1)^k \frac{2^{3k+2}}{a_k} \sum_{p=0}^{\infty} \frac{(-1)^p}{(2p+1)^{2k+1}}.$$

Für das SIERPIŃSKI-Dreieck erhielten wir als Funktionalgleichung:

$$w(\lambda u) = \frac{w(u)^2}{4 - 3w(u)}.$$

Diese stellen wir um zu:

$$w(\lambda u)(4 - 3w(u)) = w(u)^2.$$

Nun entwickelt man $w(u)$ und $w(\lambda u)$ in die übliche Form und vergleicht die Koeffizienten bei gleichen Potenzen. Man erhält:

$$4\lambda^k a_k = \sum_{i+j=k} a_i a_j + 3 \sum_{i+j=k} \lambda^i a_i a_j = \sum_{i+j=k} a_i a_j (1 + 3\lambda^i).$$

Daraus liest man ab, daß mit $k = 0$ wieder die Normierungsbedingung $a_0 = 1$ erfüllt ist. Weiter erkennt man für $k = 1$:

$$4\lambda a_1 = a_0 a_1 (1 + 3\lambda^0) + a_1 a_0 (1 + 3\lambda^1) = 5a_1 + 3\lambda a_1.$$

Wir wählen wieder $a_1 = -1$, um einen Bezug zur mittleren Wartezeit T zu haben. Unabhängig davon können wir den zeitlichen Skalierungsfaktor λ bestimmen. Es ist $\lambda = 5$. Auch die weiteren Entwicklungskoeffizienten lassen sich bestimmen, denn es gilt:

$$\begin{aligned} 4a_k\lambda^k &= \sum_{i=0}^k a_i a_{k-i} (1 + 3\lambda^i) \\ &= a_0 a_k (1 + 3\lambda^0) + a_k a_0 (1 + 3\lambda^k) + \sum_{i=1}^{k-1} a_i a_{k-i} (1 + 3\lambda^i). \end{aligned}$$

Nach Zusammenfassung der a_k und Einsetzen von λ erhält man mit $k \geq 2$:

$$a_k = \frac{1}{5^k - 5} \sum_{i=1}^{k-1} a_i a_{k-i} (1 + 5^i 3).$$

Die ersten vier Entwicklungskoeffizienten sind:

$$a_0 = 1, \quad a_1 = -1, \quad a_2 = \frac{4}{5}, \quad a_3 = -\frac{46}{75}.$$

4.6 Zur allgemeinen Lösung der Funktionalgleichung

Wir erhielten folgende allgemeine Form der Funktionalgleichung:

$$w(\lambda u) = z w(u) \mathbf{x}^T \frac{1}{\mathbf{E} - w(u) \mathbf{A}} \mathbf{y}.$$

Die Lösung erwarten wir in Form der Potenzreihenentwicklung

$$w(u) = \sum_{i=0}^{\infty} a_i (Tu)^i$$

mit $a_0 = 1$, $a_1 = -1$ für kleine u . Das Ziel besteht nun darin, mit Hilfe der Funktionalgleichung auch die anderen Koeffizienten a_i ($i \geq 2$) der Entwicklung zu bestimmen. Dazu führen wir die Hilfsmatrizen \mathbf{B}_i ein durch:

$$w(u) [\mathbf{E} - w(u) \mathbf{A}]^{-1} = \sum_{i=0}^{\infty} \mathbf{B}_i (Tu)^i. \quad (4.11)$$

Dann erhält man durch Koeffizientenvergleich:

$$\lambda^k a_k = z \mathbf{x}^T \mathbf{B}_k \mathbf{y}. \quad (4.12)$$

Gleichung (4.11) stellt man um zu:

$$w(u) \mathbf{E} = [\mathbf{E} - w(u) \mathbf{A}] \sum_{i=0}^{\infty} \mathbf{B}_i (Tu)^i.$$

Mit $u = 0$ ergibt sich die Bedingung $\mathbf{B}_0 = [\mathbf{E} - \mathbf{A}]^{-1}$. Nun läßt sich \mathbf{B}_1 berechnen. Es ist $\mathbf{B}_1 = -[\mathbf{E} - \mathbf{A}]^{-2}$. Der Koeffizientenvergleich liefert allgemein

$$a_k \mathbf{E} = \mathbf{B}_k - \mathbf{A} \sum_{i=0}^k \mathbf{B}_i a_{k-i}.$$

Wir wollen nun diese Gleichung nach \mathbf{B}_k auflösen, d.h. durch die schon bestimmten \mathbf{B}_i mit $i < k$ ausdrücken. Man erhält:

$$(\mathbf{A} \mathbf{B}_0 + \mathbf{E}) a_k = [\mathbf{E} - \mathbf{A}] \mathbf{B}_k - \mathbf{A} \sum_{i=1}^{k-1} \mathbf{B}_i a_{k-i}.$$

Setzt man den Ausdruck für \mathbf{B}_0 auf der linken Seite ein, so erhält man nach Umformen der vorigen Gleichung

$$\mathbf{B}_k = -\mathbf{B}_1 a_k + \mathbf{B}_0 \mathbf{A} \sum_{i=1}^{k-1} \mathbf{B}_i a_{k-i}, \quad k \geq 2. \quad (4.13)$$

Es muß nun noch a_k bestimmt werden. Beachtet man, daß $\lambda = -z \mathbf{x}^T \mathbf{B}_1 \mathbf{y}$ ist und mit (4.12) und (4.13) auch

$$\lambda^k a_k = -z a_k \mathbf{x}^T \mathbf{B}_1 \mathbf{y} + z \sum_{i=1}^{k-1} a_{k-i} \mathbf{x}^T \mathbf{B}_0 \mathbf{A} \mathbf{B}_i \mathbf{y}$$

gilt, so erhält man

$$a_k = \frac{z}{\lambda^k - \lambda} \sum_{i=1}^{k-1} a_{k-i} \mathbf{x}^T \mathbf{B}_0 \mathbf{A} \mathbf{B}_i \mathbf{y}, \quad (k \geq 2). \quad (4.14)$$

Damit kann man \mathbf{B}_k berechnen. Wie man leicht sieht, wird a_k aus den schon bekannten Ausdrücken a_i und \mathbf{B}_i ($i < k$) bestimmt. Es lassen sich so schrittweise alle Koeffizienten der Reihe für $w(u)$ erhalten.

4.7 Darstellung von $w(t)$ durch Exponentialreihen

Der Sinn dieses Vorgehens besteht darin, die Lösung als „Überlagerung“ von POISSON-Prozessen darzustellen. Wir schreiben $w(t)$ daher in der Form:

$$w(t) = \sum_{j=0}^{\infty} q_j \exp(-c_j t)$$

Durch LAPLACE-Transformation erhält man:

$$w(u) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{q_j}{c_j + u}.$$

Nach der Umkehrformel gilt allgemein:

$$w(t) = \sum_{u_k} \operatorname{res} \left(w(u) e^{ut} \right) |_{u_k}.$$

Es ist über die Residuen des in Klammern stehenden Ausdruckes zu summieren. Für $w(u)$, in der angegebenen Form, liegen die Singularitäten bei $u_k = -c_k$ und da c_k positiv ist, muß u_k negativ werden. Nun läßt sich q_k bestimmen. Man erhält:

$$q_k = \lim_{u \rightarrow -c_k} (u + c_k) w(u).$$

Derweilen ist es zweckmäßig, anstatt $w(u)$ die reziproke Funktion $g(u) = \frac{1}{w(u)}$ zu betrachten, d.h. anstatt die Singularitäten von $w(u)$ die Nullstellen von $g(u)$ zu bestimmen. So ist

$$q_k = \lim_{u \rightarrow -c_k} \frac{u + c_k}{g(u)} = \frac{1}{g'(-c_k)}.$$

Wir erhalten eine Darstellung von $w(t)$ in Form einer Exponentialreihe:

$$w(t) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\exp(-c_k t)}{g'(-c_k)} \quad (4.15)$$

Für den Fall der Geraden kennen wir $w(u)$ explizit:

$$w(u) = \frac{1}{\cosh \sqrt{2Tu}}, \text{ d.h. } g(u) = \cosh \sqrt{2Tu}.$$

Die Nullstellen u_k von $g(u)$ liegen bei

$$u_k = -\frac{\pi^2}{2T} \left(k + \frac{1}{2}\right)^2$$

Für die Ableitung von $g(u)$ an der Stelle $u_k = -c_k$ erhält man

$$g'(-c_k) = (-1)^k \frac{T}{\left(k + \frac{1}{2}\right)\pi}.$$

Die Lösung lautet schließlich:

$$w(t) = \frac{\pi}{T} \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \left(k + \frac{1}{2}\right) \exp\left(-\frac{\pi^2}{2T} \left(k + \frac{1}{2}\right)^2 t\right). \quad (4.16)$$

Die Konvergenz der Reihe verschlechtert sich bei kleiner werdenden Zeiten t . Man beachte auch, daß bisher nur einfache Polstellen von $w(u)$ bzw. Nullstellen von $g(u)$ auftreten durften. Sind diese jedoch von höherer Ordnung, so erhält man [33]:

$$w(t) = \sum_{u_k} \frac{1}{(n_k - 1)!} \lim_{u \rightarrow u_k} \frac{d^{n_k-1}}{du^{n_k-1}} \left\{ w(u) (u - u_k)^{n_k} e^{ut} \right\}. \quad (4.17)$$

Dabei zählt k die Pole und n_k ist deren Ordnung. Jedoch wurde bei den hier betrachteten Beispielen kein solcher Fall beobachtet.

Allgemein kann man die Funktionalgleichung nicht mittels bekannter Funktionen lösen und man ist auf eine numerische Auswertung angewiesen. Da $w(u)$ durch Lösung der Funktionalgleichung als Potenzreihe bekannt ist, läßt sich auch $g(u)$ in Potenzreihenform

$$g(u) = \sum_{m=0}^{\infty} g_m (Tu)^m$$

bestimmen. Es ist $g(u)w(u) = 1$ und mit $a_0 = 1$, d.h. $g_0 = 1$, erhält man durch Koeffizientenvergleich

$$g_m = -a_m - \sum_{i=1}^{m-1} g_i a_{m-i}.$$

Die g_m können so schrittweise aus den schon bestimmten ermittelt werden. Man hat nun numerisch die Nullstellen u_k von $g(u)$ zu bestimmen sowie die Ableitungen $g'(u)$ an den Nullstellen:

$$g'(u_k) = \sum_{m=1}^{\infty} m g_m T (Tu_k)^{m-1}$$

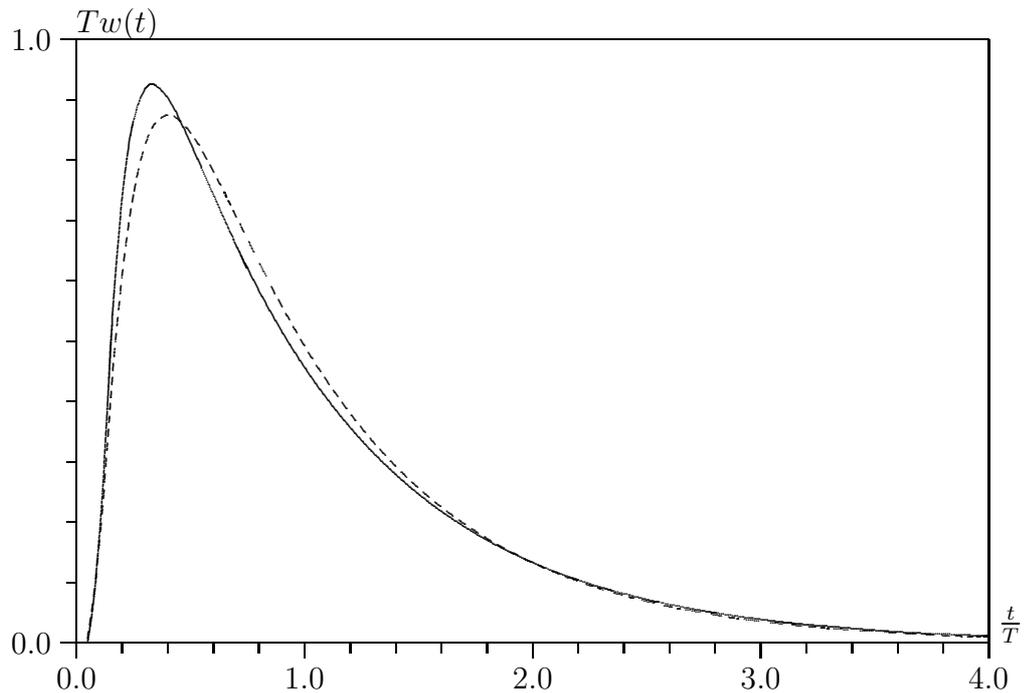


Abbildung 4.4: Dargestellt sind die Dichten der Wartezeitverteilung $w(t)$ für das SIERPIŃSKI-Dreieck mit der Konstruktionsbasis $b = 2$ (gestrichelte Linie) und für die Gerade (durchgehende Linie).

In manchen Fällen ist es günstig, nicht die Funktionalgleichung für $w(u)$, sondern für $g(u)$ zu lösen. Für das einfache SIERPIŃSKI-Dreieck erhält man als neue Funktionalgleichung:

$$g(\lambda u) = 4g(u)^2 - 3g(u).$$

Die Koeffizienten g_m werden schrittweise bestimmt durch Koeffizientenvergleich. Man erhält:

$$g_m = \frac{4}{5^m - 5} \sum_{k=1}^{m-1} g_k g_{m-k}.$$

Die Nullstellen von $g(u)$ lassen sich numerisch durch Intervallschachtelung bestimmen. Zur Erreichung einer möglichst hohen Genauigkeit sind jedoch viele Entwicklungskoeffizienten g_m nötig. Die Suche nach den Nullstellen wird durch den flachen Schnitt der u -Achse durch die Funktion $g(u)$ erschwert. Diese Ungenauigkeiten haben einen großen Einfluß auf $w(t)$ für kleine Zeiten. Zur Überprüfung der Methode wurde die exakte Lösung für die Gerade mit der numerischen Lösung von

$$g(\lambda u) = 2g(u)^2 - 1$$

verglichen. Dabei wurde im Rahmen der Rechengenauigkeit eine völlige Übereinstimmung beider Ergebnisse festgestellt. Den Verlauf der Wartezeitverteilung für das SIERPIŃSKI-Dreieck und für die Gerade verdeutlicht die Abb.(4.4).

4.8 Entwicklung nach LAGUERRESchen Polynomen

Das im vorigen Abschnitt beschriebene Verfahren zur Bestimmung von $w(t)$ ist durch die Suche nach den Nullstellen für $g(u) = w(u)^{-1}$ fast nur numerisch durchführbar. Einfacher wäre eine Methode, bei der man die schon erhaltene Information über die Momente von $w(t)$ bzw. die Entwicklungskoeffizienten

$$a_i = \frac{(-1)^i \langle t^i \rangle}{i! T^i}$$

von $w(u)$ nutzen kann. Eine solche Momentenentwicklung[34] ist durch die Anwendung der LAGUERRESchen Polynome $L_n^\nu(t)$ [35, 36] möglich. Diese besitzen folgende Darstellung:

$$L_n^\nu(t) = \frac{t^{-\nu} e^t}{n!} \frac{d^n}{dt^n} (t^{n+\nu} e^{-t}). \quad (4.18)$$

In polynomialer Schreibweise heißt das:

$$L_n^\nu(t) = \sum_{m=0}^n (-1)^m \binom{n+\nu}{n-m} \frac{t^m}{m!}. \quad (4.19)$$

Die Dichte $w(t)$ soll sich nach diesen Polynomen entwickeln lassen:

$$w(t) = t^\mu e^{-(1-\alpha)t} \sum_{n=0}^{\infty} q_n^\nu L_n^\nu(t). \quad (4.20)$$

Eine geeignete Wahl der Parameter α, ν und μ wird später festgelegt. Wir betrachten nur dimensionslose Größen. Der Übergang zu dimensionsbehafteten Ausdrücken erfolgt durch $w(t) \rightarrow T w(t/T)$ mit einer zeitlichen Konstanten T . Die LAGUERRESchen Polynome sind orthogonal, d.h. es ist

$$\int_0^\infty dt t^\nu e^{-t} L_n^\nu(t) L_m^\nu(t) = 0, \quad m \neq n.$$

Die Normierung ist gegeben durch:

$$\int_0^\infty dt t^\nu e^{-t} (L_n^\nu(t))^2 = \frac{\Gamma(\nu + n + 1)}{n!}.$$

Für die Entwicklungskoeffizienten q_n^ν gilt damit:

$$q_n^\nu = \frac{n!}{\Gamma(\nu + n + 1)} \int_0^\infty dt t^{\nu-\mu} e^{-\alpha t} L_n^\nu(t) w(t). \quad (4.21)$$

Dann ist mit der Definition (4.19)

$$q_n^\nu = \frac{n!}{\Gamma(\nu + n + 1)} \sum_{m=0}^n \frac{(-1)^m}{m!} \binom{n+\nu}{n-m} \int_0^\infty dt t^{\nu-\mu+m} e^{-\alpha t} w(t).$$

Wir können das Integral durch die LAPLACE-Transformierte von $w(t)$ ausdrücken, wodurch

$$q_n^\nu = \frac{n!}{\Gamma(\nu + n + 1)} \sum_{m=0}^n \frac{(-1)^m}{m!} \binom{n+\nu}{n-m} (-1)^{\nu-\mu+m} \frac{d^{\nu-\mu+m}}{du^{\nu-\mu+m}} w(u) \Big|_{u=\alpha}$$

entsteht. Aus der Entwicklung von $w(u)$ in Potenzreihenform

$$w(u) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k u^k$$

ist mit $\mu = \nu$ der gesuchte Entwicklungskoeffizient q_n^ν gegeben durch:

$$q_n^\nu = \frac{n!}{\Gamma(\nu + n + 1)} \sum_{m=0}^n \binom{n + \nu}{n - m} \sum_{i=m}^{\infty} \binom{i}{m} a_i \alpha^{i-m}.$$

Für $\alpha = 0$ erhält man einen sehr einfachen Fall. Dann ist:

$$q_n^\nu = \frac{n!}{\Gamma(\nu + n + 1)} \sum_{m=0}^n \binom{n + \nu}{n - m} a_m. \quad (4.22)$$

Die q_n^ν lassen sich somit als Linearkombination der a_i bzw. der Momente $\langle t^i \rangle$ mit $i \leq n$ darstellen. Für große Zeiten t ist sogar die Wahl $\nu = 0$, d.h. die Entwicklung nach den gewöhnlichen LAGUERRESchen Polynomen $L_n(t)$, angebracht. Es ist

$$w(t) = e^{-t} \sum_{n=0}^{\infty} q_n L_n(t), \quad (4.23)$$

mit den zugehörigen Entwicklungskoeffizienten

$$q_n = \sum_{m=0}^n \binom{n}{m} a_m. \quad (4.24)$$

Die somit erhaltene Darstellung von $w(t)$ durch ihre Momente stimmt mit den im vorigen Abschnitt erzielten Ergebnissen überein. Zur praktischen numerischen Auswertung sind bei kleinen Zeiten t hinreichend viele LAGUERRESche Polynome zu berücksichtigen, da sich die Konvergenz für diese Werte verschlechtert.

4.9 Zusammengesetzte und stochastische Fraktale

Jeder Konstruktionsvorschrift entspricht eine bestimmte Abbildung $f^{(n)}$ mit dem Abbildungsindex n aus der Wartezeitverteilung der vorigen Stufe $n - 1$:

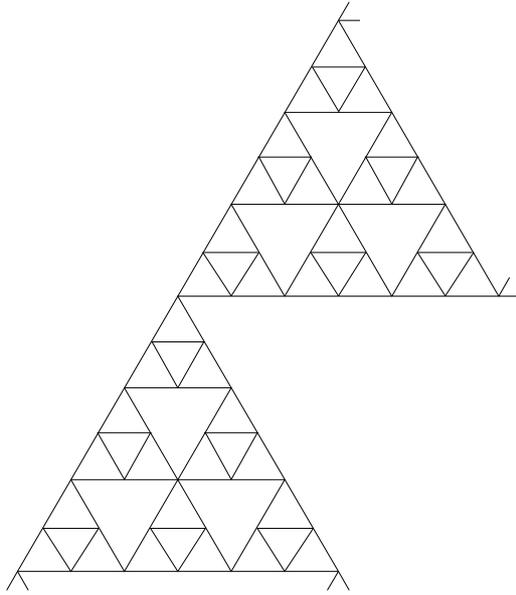
$$w^{(n)}(u) = f^{(n)}(w^{(n-1)}(u)).$$

Die mittleren Wartezeiten $T^{(n)}$ transformieren sich dabei mit:

$$T^{(n)} = \lambda_n T^{(n-1)} = -\frac{\partial}{\partial u} f^{(n)}(w^{(n-1)}(u)) \Big|_{u=0}$$

Bleibt die Abbildung $f = f^{(n)}$ immer dieselbe, so vereinfacht sich dies zu:

$$w^{(n)}(u) = f(w^{(n-1)}(u)).$$



Zwei Arten der Zerlegung der Dreiecksstruktur werden abwechselnd angewandt. Das ist zum einen die Vorschrift zur Konstruktion des SIERPIŃSKI-Dreiecks zur Basis $b = 3$, zum anderen die für die Basis $b = 2$. Diese 3-2-Regel erzeugt ein Fraktal mit der HAUSDORFF-Dimension $\bar{d} = 1 + \frac{\ln 3}{\ln 6}$. Die Wanderungsdimension beträgt in diesem Beispiel wegen $\lambda = \lambda_3 \lambda_2 = \frac{90}{7} 5$

$$d_w(3-2) = \frac{\ln \frac{90}{7} + \ln 5}{\ln 3 + \ln 2}.$$

Abbildung 4.5: 3-2-Regel

Konstruiert man die Gesamtstruktur periodisch hintereinander mit den N Abbildungen

$$f^{(N)} f^{(N-1)} \dots f^{(2)} f^{(1)},$$

so ergibt sich ein resultierendes $\lambda^{(N)}$ mit:

$$\lambda^{(N)} = \prod_{i=1}^N \lambda_i. \quad (4.25)$$

Hierbei ist N zugleich die Periode. Jeder solchen Zerlegung entspricht ein räumlicher Skalenfaktor α_i . Der resultierende Skalenfaktor $\alpha^{(N)}$ berechnet sich aus:

$$\alpha^{(N)} = \prod_{i=1}^N \alpha_i. \quad (4.26)$$

Es ergibt sich somit eine resultierende Wanderungsdimension:

$$d_w = \frac{\ln \lambda^{(N)}}{\ln \alpha^{(N)}} = \frac{\sum_{i=1}^N \ln \lambda_i}{\sum_{i=1}^N \ln \alpha_i}. \quad (4.27)$$

Sind alle $\alpha_i = \alpha$, so vereinfacht sich dies zu:

$$d_w = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N d_{w_i}.$$

Dabei sind die d_{w_i} die jeweiligen Wanderungsdimensionen, wenn die Struktur nur mit der Vorschrift i erzeugt wird. Die effektive Wanderungsdimension d_w ist somit das arithmetische Mittel aus den d_{w_i} . Außerdem skalieren die Massen jeweils mit dem Faktor μ_i . So errechnet sich die fraktale Dimension zu:

$$\bar{d} = \frac{\sum_{i=1}^N \ln \mu_i}{\sum_{i=1}^N \ln \alpha_i}. \quad (4.28)$$

Die Zerlegung der Struktur bleibt nicht auf periodische Bildungen beschränkt. Man kann diese ins Unendliche fortsetzen. Hat man z.B. einen Satz von Abbildungen $\{f^{(1)}, \dots, f^{(m)}\}$, so kann man eine beliebige Folge dieser bilden, die auch nichtperiodisch sein kann.

Dabei muß die Wahl der Abbildungen nicht nach deterministischen Prinzipien erfolgen. Sind z.B. f_1 und f_2 zwei zufällig auszuwählende Funktionen und N die Anzahl der gemachten Zerlegungen, so soll die Funktion f_1 mit der Häufigkeit M gewählt werden. Die zugehörigen geometrischen Skalenfaktoren seien α_1 bzw. α_2 . Der resultierende Zeitskalenfaktor ist dann

$$\lambda^{(N)} = \lambda_1^M \lambda_2^{N-M}$$

und der resultierende geometrische Skalenfaktor

$$\alpha^{(N)} = \alpha_1^M \alpha_2^{N-M}.$$

Damit errechnet man eine Wanderungsdimension von:

$$d_w^{(N)} = \frac{M \ln \lambda_1 + (N - M) \ln \lambda_2}{M \ln \alpha_1 + (N - M) \ln \alpha_2}.$$

Hierbei wird zunächst vorausgesetzt, das nach N Schritten dasselbe Auswahlprinzip abläuft. Erfolgt nun die Zerlegung immer weiter, dann ist im Grenzfall

$$p = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{M(N)}{N} \quad (4.29)$$

die Wahrscheinlichkeit, mit der die Vorschrift f_1 gewählt wurde. Für das wandernde Teilchen bedeutet das zugleich, daß es mit dieser Wahrscheinlichkeit von Stufe zu Stufe in eine Struktur mit der Vorschrift 1 wechselt. Die effektive Wanderungsdimension ist demnach:

$$d_w = \frac{p \ln \lambda_1 + (1 - p) \ln \lambda_2}{p \ln \alpha_1 + (1 - p) \ln \alpha_2}. \quad (4.30)$$

Die Wahl der Funktionen muß nicht auf zwei beschränkt bleiben. Man kann auch aus einem Satz von Funktionen $\{f_1, \dots, f_k\}$ bei jeder Zerlegung wählen. Dann ist mit dem zugehörigen Satz $\{p_1, \dots, p_k\}$ an Wahrscheinlichkeiten

$$d_w = \frac{\sum_{i=1}^k p_i \ln \lambda_i}{\sum_{i=1}^k p_i \ln \alpha_i} \quad (4.31)$$

mit der Bedingung $\sum_{i=1}^k p_i = 1$. Es erfolgt jeweils im Zähler und Nenner eine Mittelung der logarithmischen λ - bzw. α -Werte. Daher kann man auch einfach schreiben:

$$d_w = \frac{\langle \ln \lambda \rangle}{\langle \ln \alpha \rangle}. \quad (4.32)$$

Die hier gemachten Betrachtungen gelten nur für eine gleiche Belegung der einzelnen Abschnitte einer Konstruktionsstufe. Eine inhomogene Zerlegung ist eine mögliche Erweiterung der hier beschriebenen Methode. Dann treten zusätzlich Kopplungen unterschiedlicher Strukturtypen auf. Das hat ein Spektrum an möglichen Wanderungsdimensionen zur Folge, je nachdem welche Folge von Strukturtypen durchlaufen wird. Eine genauere Untersuchung ist mit dem *Multifraktal*-Konzept möglich, soll hier aber nicht weiter ausgebaut werden.

4.10 Mehrzustandsrenormierung

Das wandernde Teilchen soll nun die Fähigkeit besitzen, verschiedene Zustände j mit $j = 1, \dots, N$ anzunehmen. Dabei beschränken wir uns auf lokale Umwandlungen, d.h. Prozesse die an einem Gitterpunkt geschehen. Das Indexpaar ij mit $i \neq j$ beschreibt Umwandlungen von j in i . Die zugehörige Dichte der Wartezeitverteilung sei $w_{ij}(t)$. Zwischen diesen Gitterpunkten kann das Teilchen springen. Die Wartezeit für zwei aufeinanderfolgende Sprünge ist verteilt mit der Dichte $w_{ii}(t)$, wenn sich das Teilchen im Zustand i befindet. Ist ein solcher Sprung nicht möglich, dann ist die entsprechende Verteilung identisch Null. Wir betrachten somit die Folge der Ereignisse bestehend aus Warten auf einen Sprung und Warten auf eine Zustandsänderung.

Die Aufgabe besteht nun darin, alle möglichen Sequenzen von Warte- und Umwandlungsphasen so zu erfassen, daß ein resultierender Sprung zwischen den Gitterpunkten in der vergrößerten Konstruktion entsteht. Wir beginnen die Betrachtung bei einer beliebigen Stufe n der Konstruktion. Die Betrachtungsweise ist analog der gewöhnlichen Renormierung im zustandslosen Raum. Es werden nur die Wartezeitverteilungen $w_{ii}(t)$ für die Ortsveränderung renormiert. Die Verteilungen für die Umwandlungen bleiben in jeder Konstruktionsstufe dieselben. Selbstverständlich können Teilchen, die im Zustand i starten, auch im Zustand j am betrachteten Endpunkt E der Wanderung ankommen. Dieser Fall ist aber im renormierten Schema das Produkt einer renormierten Wanderung mit einer darauffolgenden Zustandsänderung. Somit ist ein solcher Prozeß zusammengesetzt und braucht nicht gesondert betrachtet werden.

Im folgenden werden wieder die LAPLACE-transformierten Dichten der Verteilungen betrachtet. Analog dem zustandsfreien Fall soll nun die Transfer-Matrix für die Wanderung mit mehreren Zuständen erzeugt werden. Zwischen den Gitterpunkten kann der Übergang nur mit der aus den Diagonalelementen $w_{ii}(u)$ gebildeten Matrix \mathbf{w}_D erfolgen. An den Gitterpunkten selbst kann die Umwandlung nur mit der Matrix $\mathbf{w} - \mathbf{w}_D$ geschehen. Durch direkte Produktbildung aus Punktraum und Zustandsraum kann man die zugehörige Transfermatrix aufbauen. Dazu muß man aber eine Zerlegung in lokale Umwandlung und räumlichen Sprung vornehmen. Die Transfermatrix hat dann die allgemeine Form:

$$\mathbf{A}_w = \mathbf{I}_A \times (\mathbf{w} - \mathbf{w}_D) + \mathbf{A} \times \mathbf{w}_D. \quad (4.33)$$

Die Matrix \mathbf{I}_A ist die zur räumlichen Transfermatrix \mathbf{A} zugehörige Einheitsmatrix. Der erste Term der Summe stellt daher die lokale Umwandlung dar, der zweite hingegen die räumliche Änderung. Um nun die resultierende Wartezeitverteilung der Wanderung $w_{ii}^{(n+1)}(u)$ in der auf n folgenden Stufe zu erhalten, muß zum einen auf den Startpunkt mit \mathbf{y} und den Zielpunkt mit \mathbf{x}^T projiziert werden, zum anderen auf Ausgangs- und Endzustand i Bezug genommen werden. Damit ergibt sich für die jeweilige Zustandswanderung die Gleichung

$$w_{ii}^{(n+1)}(u) = z w_{ii}^{(n)}(u) \langle i; \mathbf{x}^T \mid [\mathbf{I} - \mathbf{A}_w]^{-1} \mid \mathbf{y}; i \rangle \quad (4.34)$$

mit $i = 1, \dots, N$. Dabei ist $\mathbf{I} = \mathbf{I}_A \times \mathbf{I}_w$ und z die Koordinationszahl des Startpunktes. Als Beispiel soll nun der Zweizustandsprozeß auf der Geraden betrachtet werden. Die Transfer-

matrix hierfür lautet:

$$\mathbf{A}_w = \begin{pmatrix} 0 & w_{12} & w_{11} & 0 \\ w_{21} & 0 & 0 & w_{22} \\ \frac{1}{2}w_{11} & 0 & 0 & w_{12} \\ 0 & \frac{1}{2}w_{22} & w_{21} & 0 \end{pmatrix}.$$

Das Teilchen möge in S im Zustand 1 starten und an E wieder im Zustand 1 ankommen. Dann ist die zugehörige Funktionalgleichung für $w_{11}(u)$

$$w_{11}^* = w_{11} (0, 0, 1, 0) [\mathbf{I} - \mathbf{A}_w]^{-1} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (4.35)$$

Ausführlich heißt das:

$$w_{11}^* = \frac{w_{11}(2w_{11} + 2w_r w_{22} - w_{11} w_{22}^2)}{4 - 2w_{11}^2 - 8w_r + 4w_r^2 - 4w_r w_{11} w_{22} - 2w_{22}^2 + w_{11}^2 w_{22}^2}. \quad (4.36)$$

Dabei ist $w_r = w_{12} w_{21}$ der Schleifenterm für die Umwandlung. Durch Vertauschen der Indizes erhält man die Funktionalgleichung für $w_{22}(u)$. Zur weiteren Behandlung entwickeln wir die w_{ij} linear nach u , d.h. es ist:

$$w_{ij}(u) = p_{ij} (1 - T_{ij} u + \dots).$$

Durch Setzen von $u = 0$ erhält man die neuen Übergangswahrscheinlichkeiten p_{11}^* und p_{22}^* . Durch Linearisierung der Gleichung (4.36) unter Beachtung der Ergebnisse für p_{11}^* und p_{22}^* erhält man das folgende System von Gleichungen:

$$\begin{aligned} \frac{T_{11}^*}{T_{11}} &= \alpha + \beta \frac{T_{22}}{T_{11}} \\ \frac{T_{22}^*}{T_{22}} &= \gamma \frac{T_{11}}{T_{22}} + \delta. \end{aligned}$$

Die Konstanten $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ beinhalten Terme mit lokalen Übergangswahrscheinlichkeiten und konstanten Verhältnissen von T_{ij}/T_{ii} für $i \neq j$, die elementar vorgegeben sind. Zur Gültigkeit dieser Beziehung in jeder Konstruktionsstufe muß das Verhältnis von T_{11} und T_{22} konstant bleiben, d.h. es ist mit

$$x = \frac{T_{11}^*}{T_{22}^*} = \frac{T_{11}}{T_{22}}$$

die Beziehung

$$x^2 - \frac{\alpha - \delta}{\gamma} x - \frac{\beta}{\gamma} = 0$$

zu erfüllen. Hierbei ist nur die positive Lösung bedeutsam. Die zeitlichen Renormierungsfaktoren sind dann gegeben durch:

$$\lambda_1 = \alpha + \frac{\beta}{x}, \quad \lambda_2 = \gamma x + \delta.$$

Die zugehörigen Wanderungsdimensionen sind:

$$d_w(1) = \frac{\ln \lambda_1}{\ln 2}, \quad d_w(2) = \frac{\ln \lambda_2}{\ln 2}.$$

Auf eine ausführliche Angabe von x soll hier aufgrund des Umfangs verzichtet werden. Prinzipiell sind alle schon früher untersuchten Modelle mit dieser Methode berechenbar.

Kapitel 5

Chemische Reaktionen

Chemische Reaktionen sind Musterbeispiele zur Beschreibung von Prozessen. Da ist zum einen der „rein“ chemische Umwandlungsprozeß, zum anderen der Transportprozeß, welcher dafür sorgt, daß die Stoffe zueinandergeführt bzw. abtransportiert werden. Die Kopplung beider Prozesse ist somit untrennbar und bedarf einer einheitlichen Beschreibung. Hierfür eignet sich der Mehrzustandsformalismus aus der CTRW-Theorie. Dazu ist jedoch eine Kenntnis der Elementarprozesse notwendig. Die Wanderung allein wurde schon früher in der Arbeit beschrieben. Da Umwandlungsprozesse ein sehr komplexes Erscheinungsbild besitzen, werden hier wie üblich die einfachsten Typen betrachtet und die zugehörigen Wartezeitverteilungen bestimmt. Ihre Beeinflussung durch den Transport soll für einfache Beispiele untersucht werden. Chemische Umwandlungen in stochastischer Betrachtungsweise werden zunehmend in der Literatur untersucht [37, 38, 39, 40].

5.1 Allgemeines

Die CTRW-Theorie ist ein brauchbares Instrument zur Beschreibung des Systems chemischer Reaktionen in isotropen Medien wie auch in Gittermodellen. Das System wird gekennzeichnet durch die Konzentration einer Stoffsorte am zu untersuchenden Ort \mathbf{r} zur Bestimmungszeit t . Eine Reaktion beschreibt die Umwandlung des betrachteten Stoffes in einen anderen bzw. den Zugewinn desselben. Dabei muß man jedoch beachten, daß die reagierenden Teilchen erst durch die Wanderung zusammentreffen. Die chemische Reaktion für sich ist dagegen ein von der Wanderung zeitlich unabhängiger lokaler Prozeß. Zur Darstellung aller möglichen Umwandlungen bietet sich der Mehrzustandsformalismus an. Jeder Zustand wird durch einen Index charakterisiert. Diese Zustände können sowohl angeregte energetische Zustände eines Stoffes als auch völlig neue Stoffe darstellen. Die prinzipiellen Umwandlungsmöglichkeiten werden durch das Reaktionsschema erfaßt. Es ist klar, daß nicht jeder Umwandlungsversuch erfolgreich sein muß, was von der Energiedifferenz der beiden Zustände, der Temperatur, der gegenseitigen Molekülorientierung und anderen Parametern abhängt. Im Vordergrund dieses Kapitels stehen Punktmoleküle. Wir wollen hier vorerst nur die Gesamtkonzentration der einzelnen Komponenten im Raum betrachten, d.h. wir interessieren uns für

$$c_i(t) = \int d^d \mathbf{r} c_i(\mathbf{r}, t). \quad (5.1)$$

Unter Berücksichtigung der Grundgleichung für den Propagator \mathbf{P} im Mehrzustandsformalismus erhält man in transformierter Form:

$$\mathbf{P}(\mathbf{k} = 0, u) = \frac{\mathbf{I} - \mathbf{w}_D(u)}{u} \frac{1}{\mathbf{I} - \mathbf{w}(\mathbf{k} = 0, u)}.$$

Es sei der Kürze wegen

$$\mathbf{P}(u) = \mathbf{P}(\mathbf{k} = 0, u), \quad \mathbf{w}(u) = \mathbf{w}(\mathbf{k} = 0, u),$$

da nun keine räumliche Abhängigkeit besteht. Damit gilt:

$$\mathbf{P}(u) = \frac{\mathbf{I} - \mathbf{w}_D(u)}{u} \frac{1}{\mathbf{I} - \mathbf{w}(u)}.$$

Den Konzentrationsvektor $\mathbf{c}(t) = (c_1(t), c_2(t), \dots)$ zum Zeitpunkt t erhält man aus der inversen LAPLACE-Transformation von:

$$\mathbf{c}(u) = \mathbf{P}(u) \mathbf{c}_0. \tag{5.2}$$

Dabei ist \mathbf{c}_0 der Vektor der Anfangskonzentrationen.

5.2 Die Zerfallsreaktion $A \rightarrow B$

Die genaue Art der Wartezeitverteilung muß man aus dem Reaktionsschema bestimmen, was jedoch für kompliziertere Reaktionen schwer machbar ist. Hier soll eine neue Methode zu deren Bestimmung vorgestellt werden. Die Vorgehensweise ist eine rein stochastische und setzt keine quantenmechanische Betrachtungsweise zum Elementarprozeß voraus. Die einfachste Form einer Umwandlung ist die Zerfallsreaktion $A \rightarrow B$ mit Absorption von B . Da dieser Prozeß wohl bekannt ist, soll er als Musterprozeß zur Überprüfung der hier betrachteten Methode untersucht werden. Der Prozeß möge an einem festen Raumpunkt geschehen. Nach genau der Zeit t soll die Möglichkeit zur Umwandlung bestehen. Die zugehörige Dichte

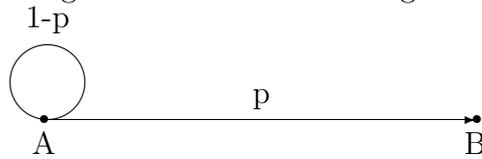


Abbildung 5.1: Zerfallsschema $A \rightarrow B$

der Wartezeitverteilung sei $w(t)$. Dabei geht der Stoff A bei jedem Schritt mit der Wahrscheinlichkeit p in den Stoff B über. Mit der Wahrscheinlichkeit $1 - p$ bleibt die Gelegenheit unausgenutzt. Der Betrag von p hängt z.B. vom energetischen Zielzustand als auch von der Struktur der Umgebung ab. So können etwa k Zyklen mit der Wahrscheinlichkeit $1 - p$ durchlaufen werden bevor die Umwandlung erfolgt. Der resultierende Prozeß setzt sich somit aus allen möglichen Zyklen und dem abschließend erfolgreichen Übergang zusammen. Für die LAPLACE-Transformierte von $w(t)$ erhält man dann die Renormierungsgleichung

$$1 w(\lambda u) = p w(u) \sum_{k=0}^{\infty} ((1 - p)w(u))^k,$$

d.h.

$$w(\lambda u) = \frac{p w(u)}{1 - (1 - p)w(u)}. \quad (5.3)$$

Deren allgemeine Lösung gewinnt man aus dem Ansatz $w(u) = g(u)^{-1}$. Dann ist $pg(\lambda u) = p - 1 + g(u)$, und mit $g(u) = 1 + f(u)$ gelangt man zur Funktionalgleichung

$$pf(\lambda u) = f(u),$$

deren Lösung

$$f(u) = \text{const. } u^\nu \chi(u)$$

mit

$$\nu = -\frac{\ln p}{\ln \lambda} \quad (5.4)$$

und $\chi(\lambda u) = \chi(u)$ ist. Damit erhält man:

$$w(u) = \frac{1}{1 + (bu)^\nu \chi(u)}. \quad (5.5)$$

Wir setzen im weiteren $\chi(u) \equiv 1$ und bekommen:

$$w(u) = \frac{1}{1 + (bu)^\nu}. \quad (5.6)$$

Die Wartezeitverteilungen im Original-Bereich sind uns schon bekannt, es sind spezielle FOX-Funktionen. Deren asymptotischer Verlauf ist für große Zeiten t und $0 < \nu < 1$:

$$w(t) \sim t^{-1-\nu}. \quad (5.7)$$

Dies steht in Übereinstimmung mit den in [37] betrachteten Wartezeitverteilungen. Man beachte den exponentiellen Abfall für $\nu = 1$, was ein völlig anderes Verhalten für große Zeiten ist. Eine Erweiterung in (5.7) auf $\nu = 1$ ist somit unzulässig.

Im zeitlich diskreten Fall, bei gleichen Zeitabständen für die Sprünge, ist $\langle N \rangle = \frac{1}{p}$ die mittlere Schrittzahl, die zur Umwandlung nötig ist. Damit erhält man die Beziehung:

$$\lambda = \langle N \rangle^{\frac{1}{\nu}}.$$

Den klassischen POISSON-Fall bekommt man mit einem Zeitskalenfaktor $\lambda = \langle N \rangle$. Je nachdem, welche Zeiteinheit man wählt, erzielt man unterschiedliche $\langle N \rangle$ und λ . Diese sind aber so voneinander abhängig, daß (5.4) für alle Zeiteinheiten gilt (analog der Bestimmung der fraktalen Dimension \bar{d}).

Zerfallsprozesse werden gewöhnlich durch Differentialgleichungen beschrieben. Für den POISSON-Zerfall erhält man die gewöhnliche Differentialgleichung erster Ordnung:

$$\frac{d}{dt} c_A(t) = -\frac{1}{T} c_A(t).$$

Hier ist $b = T$ die mittlere Zeit, nach der eine Reaktion erfolgt. Sie ist in vielen Fällen durch die ARRHENIUS-Formel [41] $T = T_0 \exp(\Delta U/k_B \vartheta)$ gegeben, wobei $\Delta U = U(B) - U(A)$ der

Potentialunterschied der beiden Zustände A und B , k_B die BOLTZMANN-Konstante und ϑ die absolute Temperatur ist. Die Zeit T_0 ist eine stoffspezifische Konstante. Man bezeichnet ΔU auch als Aktivierungsenergie.

Im allgemeineren Fall ist wegen

$$c_A(u) = \frac{1 - w(u)}{u} c_0$$

durch Einsetzen des Ergebnisses für $w(u)$

$$u^{\nu-1}(u c_A(u) - c_0) = b^{-\nu} c_A(u)$$

die fraktionale Differentialgleichung

$$D_{t-t_0}^{\nu-1} \frac{\partial}{\partial t} c_A(t) = b^{-\nu} c_A(t) \tag{5.8}$$

erfüllt.

5.3 Zweizustandsreaktionen $A \leftrightarrow B$

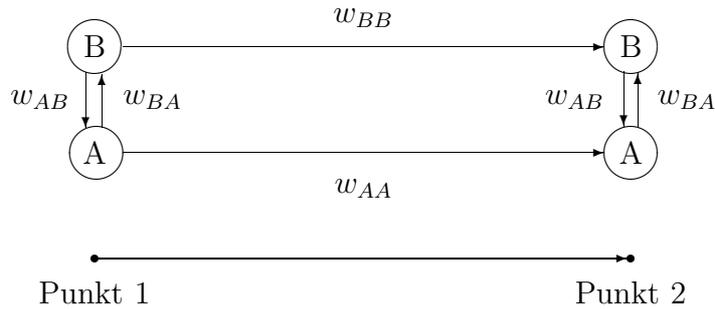
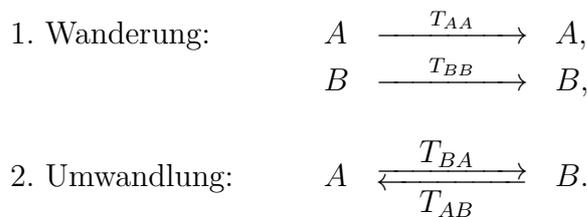


Abbildung 5.2: Zweizustandsreaktion

Die Reaktion soll zwischen den beiden Zuständen A und B erfolgen. Eine Umwandlung erfolgt nur an den Gitterpunkten, die Wanderung hingegen nur zwischen diesen. Das Prozeßgeschehen ist auch aus dem folgenden Reaktionsschema ersichtlich.



Der Prozeßverlauf ist somit zerlegt in das Warten auf einen Sprung und das Warten auf eine Umwandlung. Die Wanderung der einzelnen Sorten im Raum bzw. Gitter ohne Stoffumwandlung wird durch die mittlere Wartezeit T_{AA} bzw. T_{BB} charakterisiert und ist daher

strukturabhängig. Für den eigentlichen chemischen Prozeß, d.h. die Umwandlung von A in B (Hinreaktion), ist eine mittlere Reaktionszeit T_{BA} nötig, für die Umwandlung von B nach A (Rückreaktion) dagegen T_{AB} . Für die Zweizustandsreaktionen (Zustände $A = 1$ und $B = 2$) erhält man ausführlich:

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} P_{11}(u) & P_{12}(u) \\ P_{21}(u) & P_{22}(u) \end{bmatrix} &= \frac{1}{u} \begin{bmatrix} 1 - w_{11}(u) - w_{21}(u) & 0 \\ 0 & 1 - w_{22}(u) - w_{12}(u) \end{bmatrix} \times \\ &\times \begin{bmatrix} 1 - w_{11}(u) & -w_{12}(u) \\ -w_{21}(u) & 1 - w_{22}(u) \end{bmatrix}^{-1}. \end{aligned}$$

Im Gleichgewichtsfall $u \rightarrow 0$ sollen für die Übergangswahrscheinlichkeiten folgende Bilanzen gelten:

$$w_{11}(0) = 1 - w_{21}(0), \quad w_{22}(0) = 1 - w_{12}(0).$$

Eine allgemeine Behandlung der Zweizustandsreaktionen ist jedoch zu aufwendig, daher sollen einige Spezialfälle betrachtet werden.

I. Für diese Rechnungen wird als Ansatz jeweils der POISSON-Prozeß gewählt:

$$\text{Transport:} \quad w_{ii}(u) = \frac{w_{ii}(0)}{1 + T_{ii}u}; \quad i = 1, 2$$

$$\text{Reaktion:} \quad w_{ij}(u) = \frac{w_{ij}(0)}{1 + T_{ij}u}; \quad i, j = 1, 2 \quad (i \neq j).$$

Die mittleren Wartezeiten für den Transport T_{ii} seien außerdem klein gegenüber den mittleren Umwandlungszeiten T_{ij} . Wir setzen: $T_{11} = T_{22} = 0$. Nach etwas Rechnung erhält man:

$$\begin{aligned} P_{11}(u) &= \frac{1}{u} - P_{21}(u) & P_{12}(u) &= \frac{1}{u} \frac{T_{21}}{T_{12} + T_{21} + uT_{12}T_{21}} \\ P_{21}(u) &= \frac{1}{u} \frac{T_{12}}{T_{12} + T_{21} + uT_{12}T_{21}} & P_{22}(u) &= \frac{1}{u} - P_{12}(u). \end{aligned}$$

Die Rücktransformation ist sehr einfach möglich:

$$\begin{aligned} P_{11}(t) &= 1 - \frac{T_{12}}{T_{12} + T_{21}} \left(1 - \exp \left(- \left(\frac{1}{T_{12}} + \frac{1}{T_{21}} \right) t \right) \right) \\ P_{12}(t) &= \frac{T_{21}}{T_{12} + T_{21}} \left(1 - \exp \left(- \left(\frac{1}{T_{12}} + \frac{1}{T_{21}} \right) t \right) \right) \\ P_{21}(t) &= \frac{T_{12}}{T_{12} + T_{21}} \left(1 - \exp \left(- \left(\frac{1}{T_{12}} + \frac{1}{T_{21}} \right) t \right) \right) \\ P_{22}(t) &= 1 - \frac{T_{21}}{T_{12} + T_{21}} \left(1 - \exp \left(- \left(\frac{1}{T_{12}} + \frac{1}{T_{21}} \right) t \right) \right). \end{aligned}$$

Nun können auch die Konzentrationen bestimmt werden. Es sei hierbei der Übersichtlichkeit wegen $c_2(0) = 0$. Man erhält:

$$c_1(t) = c_1(0) \left\{ 1 - \frac{T_{12}}{T_{12} + T_{21}} \left(1 - \exp \left(- \left(\frac{1}{T_{12}} + \frac{1}{T_{21}} \right) t \right) \right) \right\}, \quad (5.9)$$

$$c_2(t) = c_1(0) \left\{ \frac{T_{12}}{T_{12} + T_{21}} \left(1 - \exp \left(- \left(\frac{1}{T_{12}} + \frac{1}{T_{21}} \right) t \right) \right) \right\}. \quad (5.10)$$

Das sind aber dieselben Ergebnisse, wie sie aus der gewöhnlichen Reaktionskinetik bekannt sind. Man erkennt hier die Bedeutung der T_{ij} . Diese entsprechen den reziproken Reaktionsgeschwindigkeiten. Für den Gleichgewichtsfall $t \rightarrow \infty$ sind die entsprechenden Konzentrationen berechenbar:

$$c_1(\infty) = c_1(0) \frac{1}{1 + \frac{T_{12}}{T_{21}}}, \quad c_2(\infty) = c_1(0) \frac{1}{1 + \frac{T_{21}}{T_{12}}}. \quad (5.11)$$

Eine etwas allgemeinere Beschreibung der Umwandlungsreaktionen erhält man aus dem Ansatz:

$$\begin{aligned} w_{11}(u) &= w_{11}(0) & w_{12}(u) &= \frac{w_{12}(0)}{1 + (T_{12}u)^\delta} \\ w_{21}(u) &= \frac{w_{21}(0)}{1 + (T_{21}u)^\varepsilon} & w_{22}(u) &= w_{22}(0). \end{aligned}$$

Die Parameter δ und ε kennzeichnen den Zerfallsprozeß. Man beachte, daß die Größen T_{12} und T_{21} keine mittleren Wartezeiten darstellen, falls die Parameter δ bzw. ε verschieden von 1 sind. Speziell ist:

$$P_{21}(u) = \frac{1}{u} \frac{1}{1 + (T_{21}u)^\varepsilon + T_{21}^\varepsilon T_{12}^{-\delta} u^{\varepsilon-\delta}}.$$

Für den Fall $\varepsilon = \delta$ existiert eine nichttriviale Gleichgewichtskonzentration mit ($c_2(0) = 0$):

$$c_1(\infty) = \frac{c_1(0)}{1 + \left(\frac{T_{12}}{T_{21}} \right)^\varepsilon}, \quad c_2(\infty) = \frac{c_1(0)}{1 + \left(\frac{T_{21}}{T_{12}} \right)^\varepsilon}. \quad (5.12)$$

Die Konzentration $c_1(t)$ nimmt dann ab mit:

$$c_1(t) \sim t^{-\varepsilon}. \quad (5.13)$$

II. Im letzten Fall wurde der Transport unberücksichtigt gelassen, d.h. der mögliche Reaktionspartner ist immer verfügbar. Braucht aber der Stoff eine gewisse Zeit, um seinen Partner anzutreffen (d.h. zum Wandern), so ändert sich auch das Reaktionsverhalten entsprechend. Wir wollen jetzt nur die Umwandlung von A in B betrachten (Zerfallsreaktion) und die Rückreaktion als vernachlässigbar (z.B. wegen Absorption des Reaktionsproduktes)

ansehen. Somit ist $w_{12}(0) = 0$. Dann erhält man bei gleicher Wahl der $w_{ij}(u)$:

$$P_{11}(u) = \frac{1}{u} - \frac{w_{21}(0)(1 + T_{11}u)}{(1 + T_{21}u)(w_{21}(0) + T_{11}u)} \quad P_{12}(u) = 0$$

$$P_{21}(u) = \frac{w_{21}(0)(1 + T_{11}u)}{(1 + T_{21}u)(w_{21}(0) + T_{11}u)} \quad P_{22}(u) = \frac{1}{u} .$$

Nach Rücktransformation gelangt man zu:

$$P_{11}(t) = \frac{w_{21}(0) \left(\frac{T_{21}}{T_{11}} - 1 \right)}{w_{21}(0) \frac{T_{21}}{T_{11}} - 1} \exp\left(-\frac{t}{T_{21}}\right) - \frac{1 - w_{21}(0)}{w_{21}(0) \frac{T_{21}}{T_{11}} - 1} \exp\left(-\frac{w_{21}(0)}{T_{21}}t\right),$$

$$P_{12}(t) = 0,$$

$$P_{21}(t) = 1 - P_{11}(t),$$

$$P_{22}(t) = 1.$$

Entsprechend ist mit $c_2(0) = 0$:

$$\frac{c_1(t)}{c_1(0)} = \frac{w_{21}(0) \left(\frac{T_{21}}{T_{11}} - 1 \right)}{w_{21}(0) \frac{T_{21}}{T_{11}} - 1} \exp\left(-\frac{t}{T_{21}}\right) - \frac{1 - w_{21}(0)}{w_{21}(0) \frac{T_{21}}{T_{11}} - 1} \exp\left(-\frac{w_{21}(0)}{T_{21}}t\right),$$

$$c_2(t) = c_1(0) - c_1(t).$$

Die Übergangswahrscheinlichkeit $w_{21}(0)$ muß man mit quantentheoretische Methoden bestimmen. Ist diese 1, dann erfolgt eine reine Zerfallsreaktion, andernfalls besteht die Möglichkeit zur weiteren Wanderung und der Zerfall wird folglich verzögert.

III. Wir betrachten nun den Zerfall von A unter anomaler Diffusion mit $w_{12}(0) = 0$. Es ist für die Wanderung:

$$w_{11}(u) = \frac{w_{11}(0)}{1 + (T_{11}u)^\mu}, \quad 0 < \mu < 1.$$

Die eigentliche Umwandlung wird durch den POISSON-Prozeß beschrieben. Für die einzelnen Komponenten des Propagators erhält man:

$$P_{11}(u) = \frac{1}{u} \left(1 - \frac{w_{21}(u)}{1 - w_{11}(u)} \right) \quad P_{12}(u) = 0$$

$$P_{21}(u) = \frac{1}{u} \frac{w_{21}(u)}{1 - w_{11}(u)} \quad P_{22}(u) = \frac{1}{u} .$$

Insbesondere ist dann:

$$P_{21}(u) = \frac{1}{u} \frac{w_{21}(0)}{1 + T_{21}u} \left(1 + \frac{1 - w_{21}(0)}{w_{21}(0)} \frac{1}{1 + \frac{(T_{11}u)^\mu}{w_{21}(0)}} \right).$$

Die Konzentration von 1 nimmt für große Zeiten t ab mit:

$$c_1(t) \sim t^{-\mu}. \quad (5.14)$$

IV. Zusätzlich zur Anomalie der Diffusion kann man auch einen allgemeineren Umwandlungsprozeß betrachten. Eine mögliche Wahl ist:

$$w_{21}(u) = \frac{w_{21}(0)}{1 + (T_{21}u)^\nu}, \quad 0 < \nu < 1.$$

Die Anomalie in der Reaktion kommt z.B. daher, daß an den Gitterpunkten unterschiedliche energetische Verhältnisse vorliegen, unter denen der Stoff zerfällt. Für das Element $P_{21}(u)$ des Propagators erhält man:

$$P_{21}(u) = \frac{1}{u} \frac{w_{21}(0)}{1 + (T_{21}u)^\nu} \left(1 + \frac{1 - w_{21}(0)}{w_{21}(0)} \frac{1}{1 + \frac{(T_{11}u)^\mu}{w_{21}(0)}} \right).$$

Für große Zeiten t erfolgt der Abfall der Konzentration des Stoffes 1 entsprechend

$$c_1(t) \sim t^{-\min(\mu, \nu)}, \quad (5.15)$$

d.h. der Prozeß mit der größten Verzögerung bestimmt schließlich das Gesamtgeschehen für $t \rightarrow \infty$. Ist man an der genauen Lösung interessiert, so kann man diese aus dem Faltungssatz bestimmen. Hierbei treten wieder die schon früher besprochenen FOX-Funktionen auf.

5.4 Die Annihilations-Reaktion $A + B \rightarrow 0$

Die Reaktion erfolgt so, daß das Reaktionsprodukt 0 aus A und B aus dem System entfernt wird (z.B. durch Absorption) oder als gasförmig entweicht. Größen zur Beschreibung der Reaktion von A mit B zu 0 erhalten den Index $A0$, die entsprechenden von B mit A zu 0 den Index $B0$. Für die einzelnen Komponenten des Propagators erhält man in LAPLACE-transformierter Form:

$$\begin{aligned} P_{00}(u) &= \frac{1}{u} & P_{0A}(u) &= \frac{1}{u} \frac{w_{0A}(u)}{1 - w_{AA}(u)} & P_{0B}(u) &= \frac{1}{u} \frac{w_{0B}(u)}{1 - w_{BB}(u)} \\ P_{A0}(u) &= 0 & P_{AA}(u) &= \frac{1}{u} - P_{0A}(u) & P_{AB}(u) &= 0 \\ P_{B0}(u) &= 0 & P_{BA}(u) &= 0 & P_{BB}(u) &= \frac{1}{u} - P_{0B}(u). \end{aligned}$$

Die Dichte der Wartezeitverteilung $w_{0A}(t)$ hängt z.B. davon ab, ob gleichzeitig der Reaktionspartner B vorhanden ist (und umgekehrt). Da sich A nur in Gegenwart von B umwandeln kann bzw. B nur in Gegenwart von A soll der zeitliche Prozeß für die Umwandlung

identisch sein. Es ist somit nach der Separation des rein zeitlichen Anteils $w_A(u)$ bzw. $w_B(u)$ durch

$$w_{0A}(u) = p_B(A) w_A(u), \quad w_{0B}(u) = p_A(B) w_B(u)$$

die Beziehung

$$w_A(u) = w_B(u) = w(u)$$

gegeben. Die gemeinsame Verteilung $w(u)$ der Wartezeiten für die Umwandlung hängt somit von der speziellen Wahl der Stoffe A und B ab. Wenn A den Partner B trifft, muß dies nicht zwingend zur Umwandlung führen. Die Wahrscheinlichkeit dafür sei $p_B(A)$. Das gleiche gilt für den umgekehrten Fall. Außerdem müssen für die Übergangswahrscheinlichkeiten folgende Bilanzen erfüllt werden:

$$w_{0A}(0) + w_{AA}(0) = 1, \quad w_{0B}(0) + w_{BB}(0) = 1.$$

Wird der Transport zeitlich vernachlässigt, so ist $c_A(u) = \frac{1}{u}(1 - w(u))c_A(0)$. Damit erhält man für die gesuchte Konzentration:

$$c_A(t) = c_A(0) \int_t^\infty d\tau w(\tau). \quad (5.16)$$

5.4.1 Die Funktionalgleichung für $w(u)$

Der Stoff A zerfalle in Gegenwart von B mit der Wahrscheinlichkeit $p_B(A)$, der Stoff B hingegen mit $p_A(B)$. Dann lautet die Funktionalgleichung

$$w(\lambda u) = p_B(A)p_A(B) \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{j=0}^{\infty} (1 - p_B(A))^i w_A(u)^{i+1} (1 - p_A(B))^j w_B(u)^{j+1}$$

und wegen $w_B(u) = w_A(u)$

$$w(\lambda u) = \frac{p_B(A)p_A(B)w(u)^2}{(1 - (1 - p_B(A))w(u))(1 - (1 - p_A(B))w(u))}. \quad (5.17)$$

Nimmt man an, daß $w(t)$ ein erstes Moment besitzt, dann ist λ eindeutig bestimmt durch

$$\lambda = \frac{1}{p_B(A)} + \frac{1}{p_A(B)}.$$

Andernfalls ist mit der Entwicklung $w(u) = 1 - cu^\gamma + \dots$ für kleine u :

$$\lambda = \left(\frac{1}{p_B(A)} + \frac{1}{p_A(B)} \right)^{\frac{1}{\gamma}}.$$

5.4.2 Die Reaktion $A + A \rightarrow 0$

Als Spezialfall kann man den Fall betrachten, daß die Stoffe A und B gleich sind. Das können z.B. wandernde H^+ - oder J^- - oder andere Ionen sein. Treffen diese zusammen (unter Beteiligung eines entsprechenden Reaktionspartners), so werden diese mit der Wahrscheinlichkeit

$p(A) = p_A(A)$ als gasförmig aus dem System ausgeschieden. Die Wartezeitverteilung genügt dann der Funktionalgleichung:

$$w(\lambda u) = \frac{p(A)^2 w(u)^2}{(1 - (1 - p(A))w(u))^2}. \quad (5.18)$$

Mit $g(u) = \frac{1}{w(u)}$ heißt das:

$$p(A)^2 g(\lambda u) = (g(u) + p(A) - 1)^2.$$

Selbst dieser Fall ist noch zu schwierig, um in voller Allgemeinheit gelöst zu werden. Im Fall $p(A) = \frac{1}{2}$ erhält man die Möglichkeit, eine explizite Lösung der Funktionalgleichung anzugeben:

$$w(u) = \frac{1}{(\cosh(Tu)^\alpha)^2}.$$

Im Fall endlicher mittlerer Wartezeiten T ist $\alpha = \frac{1}{2}$, d.h.

$$w(u) = \frac{1}{(\cosh \sqrt{Tu})^2}. \quad (5.19)$$

Zum Zwecke der Rücktransformation geht man vorteilhafterweise zur MELLIN-transformierten Größe über. Es ist wegen

$$w(s) = \frac{1}{\Gamma(1-s)} \int_0^\infty du u^{-s} w(u)$$

$$w(s) = 4 \frac{b^{s-1}}{\alpha} 2^{\frac{s-1}{\alpha}} \left(1 - 2^{2+\frac{s-1}{\alpha}}\right) \frac{\Gamma(\frac{1-s}{\alpha})}{\Gamma(1-s)} \zeta\left(\frac{1-s}{\alpha} - 1\right); \quad s \leq 1.$$

Dabei ist $\zeta(z)$ die RIEMANNsche Zetafunktion. Im Fall $\alpha = \frac{1}{2}$ kann man die Lösungen explizit angeben. Wegen

$$\zeta(z) \Gamma(z) \cos\left(\frac{\pi z}{2}\right) = 2^{z-1} \pi^z \zeta(1-z),$$

mit $z = 1 - 2s$ erhält man

$$w(s) = \frac{2}{T} \left(\frac{T}{\pi^2}\right)^s (2^{2s} - 1) (2\Gamma(s+1) - \Gamma(s)) \zeta(2s).$$

Jetzt betrachten wir eine allgemeine Klasse von Funktionen:

$$f(t) = \left(\frac{t}{c}\right)^\alpha \sum_{n=1}^{\infty} n^{-\nu} \exp\left(-n^\beta \left(\frac{t}{c}\right)^\gamma\right).$$

Die MELLIN-Transformierte hierfür ist leicht berechenbar. Es ist:

$$f(s) = \frac{c^s}{\gamma} \zeta\left(\frac{\beta}{\gamma}s + \frac{\alpha\beta}{\gamma} + \nu\right) \Gamma\left(\frac{s}{\gamma} + \frac{\alpha}{\gamma}\right).$$

Durch direkten Vergleich erhält man:

$$w(t) = \frac{2}{T} \sum_{k=0}^{\infty} \left\{ \left(2 \frac{t}{T} \left(\frac{k\pi}{2} \right)^2 - 1 \right) \exp \left(- \frac{t}{T} \left(\frac{k\pi}{2} \right)^2 \right) - \left(2 \frac{t}{T} (k\pi)^2 - 1 \right) \exp \left(- \frac{t}{T} (k\pi)^2 \right) \right\}.$$

Man erkennt, daß sich die Terme für gerades k wegheben und deshalb vom ersten nur die mit ungeradem k übrigbleiben. Somit ist:

$$w(t) = \frac{2}{T} \sum_{k=0}^{\infty} \left(2 \frac{t}{T} \left(k + \frac{1}{2} \right)^2 \pi^2 - 1 \right) \exp \left(- \frac{t}{T} \left(k + \frac{1}{2} \right)^2 \pi^2 \right). \quad (5.20)$$

Hierfür gibt es noch eine andere Form der Lösung:

$$w(t) = \frac{4}{T} \pi^{-\frac{1}{2}} \left(\frac{t}{T} \right)^{-\frac{3}{2}} \sum_{n=1}^{\infty} n^2 \left(\exp \left(- \frac{T}{t} n^2 \right) - 8 \exp \left(- \frac{T}{t} 4n^2 \right) \right).$$

Man erhält sie aus der asymptotischen Entwicklung. Es zeigt sich, daß diese mit der eigentlichen Entwicklung völlig übereinstimmt. Die Konzentration besitzt eine zeitliche Entwicklung der Form

$$c_A(t) = 2c_A(0) \sum_{k=0}^{\infty} \left(2 \frac{t}{T} + \frac{1}{\left(k + \frac{1}{2} \right)^2 \pi^2} \right) \exp \left(- \frac{t}{T} \left(k + \frac{1}{2} \right)^2 \pi^2 \right). \quad (5.21)$$

Kennzeichnend ist ein zunächst langsamer Abfall der Konzentration. Nach einer gewissen Zeit erfolgt der Abfall jedoch sehr schnell. Der anfangs verlangsamte Abfall hat seine Ursache im Suchen eines passenden Partners.

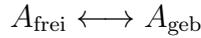
5.5 Reaktionen auf Gittern

Viele Umwandlungsprozesse geschehen in strukturierten Stoffen wie etwa in Katalysatoren. Diese Strukturen werden oft durch Gitter modelliert. Durch deren chemische Aktivität erhofft man sich in der Regel eine größere Ausbeute an Reaktionsprodukten. Aber auch der Stofftransport in ihnen hat einen entscheidenden Einfluß auf den Reaktionsverlauf. Bei zu niedriger Geschwindigkeit beim Abtransport der Reaktionsprodukte kann es zu Verstopfungen in Form von Ausscheidungen (Segregation) kommen. Die Zeiten für die Wanderung (Diffusion) in der Struktur sind deshalb eine nicht zu unterschätzende Größe. Eine Analyse des Gesamtprozesses mit Beachtung der Teilchenwanderung vertieft somit das Verständnis über Reaktionen.

Reaktionskontrollierte Wanderung auf der Geraden

Wie wir schon wissen, hat die Struktur des Raumes einen bestimmenden Einfluß auf die Wanderung. Es soll nun die Wanderung eines Stoffes A unter Einwirkung von Reaktionen auf der Geraden untersucht werden. Dabei kann A die Zustände A_{frei} und A_{geb} annehmen. Der erste Zustand ist dadurch charakterisiert, daß eine freie Wanderung möglich ist, der

zweite Zustand ist der gebundene Zustand, hervorgerufen durch eine feste Bindung mit dem Gitter. Es wird somit das Reaktionsschema



betrachtet. Die Wahrscheinlichkeit, daß das Teilchen am Gitterpunkt eine Bindung eingeht, sei p , mit $1 - p$ wandert es weiter. Die Wartezeit, mit der das Teilchen garantiert gebunden bleibt, sei z.B. exponentiell verteilt gemäß der Dichte $w_r(t)$ mit einer mittleren Wartezeit T_r . Eine erneute Bindung nach einer Bindung ist explizit erlaubt und unabhängig davon, ob das Teilchen vorher gebunden war. Der Umwandlungsprozeß ist unabhängig von der Wanderung. Die Wartezeit für einen Sprung zum nächsten Nachbarn sei durch die Dichte $w(t)$ mit einem mittleren Wert T gekennzeichnet. Der resultierende Wanderungsprozeß wird durch die Umwandlungsphasen auf dem Wege zum Endpunkt beeinflusst.

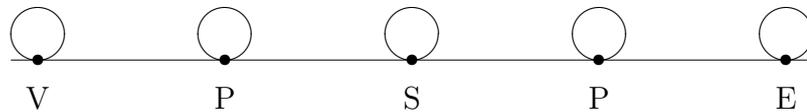


Abbildung 5.3: Dargestellt ist das Schema einer Wanderung mit Umwandlung auf der Geraden. Die Kreise kennzeichnen die Umwandlungszyklen. Der Startpunkt ist S, der Zielpunkt der Wanderung E. Der Punkt V soll nicht erreicht werden.

Die effektive Wanderungsdimension soll nun bestimmt werden. Für die resultierende Wartezeitverteilung gilt dann in LAPLACE-transformierter Form die Renormierungsgleichung

$$\frac{1}{2} w(\lambda u) = \frac{1-p}{2} w(u) \mathbf{x}^T [\mathbf{I} - \mathbf{A}_w]^{-1} \mathbf{y} \quad (5.22)$$

mit

$$\mathbf{A}_w = \begin{pmatrix} p w_r(u) & (1-p) w(u) \\ \frac{1-p}{2} w(u) & p w_r(u) \end{pmatrix}, \quad \mathbf{y} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{x} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Explizit erhält man

$$w(\lambda u) = \frac{(1-p)^2 w(u)^2}{2(1-p w_r(u))^2 - (1-p)^2 w(u)^2}. \quad (5.23)$$

Durch Entwicklung von $w(u)$ und $w_r(u)$ nach kleine u läßt sich λ unmittelbar bestimmen. Es ist:

$$\lambda = 4 \left(1 + \frac{p}{1-p} \frac{T_r}{T} \right). \quad (5.24)$$

Der Faktor

$$\mu = 1 + \frac{p}{1-p} \frac{T_r}{T} \quad (5.25)$$

verzögert den Prozeß. Hier ist ersichtlich, daß sowohl die Reaktionswahrscheinlichkeit p als auch das Verhältnis von mittlerer Reaktionszeit zur mittleren Wanderungszeit ohne Reaktion die Wanderungsdimension

$$d_w = 2 + \frac{\ln \mu}{\ln 2}$$

beeinflußt. Sie setzt sich additiv aus der Dimension für die freie Wanderung und dem Umwandlungsterm zusammen. Im nichtreaktiven Fall ($p = 0$) erhält man den wohlbekannten Wert für die Wanderungsdimension $d_w = 2$. Bei $p = 1$ (nur Reaktion) ist eine Wanderung unmöglich, somit ist $d_w = \infty$ auch verständlich.

Umwandlungen auf dem SIERPIŃSKI-Dreieck

Vorige Behandlungsweise soll nun auf dem SIERPIŃSKI-Dreieck untersucht werden. Auch hier soll eine Reaktion durch einen Umwandlungszyklus an den Gitterpunkten erfolgen. Der Transfer bestimmt sich aus der Matrix

$$\mathbf{A}_w = \begin{pmatrix} p w_r(u) & (1-p) w(u) & 0 \\ \frac{1-p}{4} w(u) & p w_r(u) + \frac{1-p}{4} w(u) & \frac{1-p}{4} w(u) \\ 0 & \frac{1-p}{2} w(u) & p w_r(u) \end{pmatrix}.$$

Die Funktionalgleichung für die effektive Wanderung lautet damit

$$\frac{1}{4} w(\lambda u) = \frac{1-p}{4} w(u) (0, 1, 1) [\mathbf{I} - \mathbf{A}_w]^{-1} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

oder explizit

$$w(\lambda u) = \frac{(1-p)^2 w(u)^2}{(1-p w_r(u)) (4(1-p w_r(u)) - 3(1-p) w(u))}. \quad (5.26)$$

Die zeitliche Skalierung erfolgt mit dem Faktor

$$\lambda = 5 \left(1 + \frac{p}{1-p} \frac{T_r}{T} \right),$$

d.h. es ist

$$d_w = \frac{\ln 5}{\ln 2} + \frac{\ln \mu}{\ln 2}.$$

Auch hier kann man die Zerlegung $\lambda = 5\mu$ mit demselben μ wie oben machen. Es liegt die Vermutung nahe, daß die Größe μ charakteristisch für den betrachteten Umwandlungsprozeß ist. Erfolgen an jedem Gitterpunkt Umwandlungszyklen im oben besprochenen Sinne, so ist mit dem zeitlichen Skalierungsfaktor für die freie Wanderung λ^{frei} der resultierende Zeitskalierungsfaktor

$$\lambda = \lambda^{\text{frei}} \mu. \quad (5.27)$$

In der Tat folgt diese Beziehung aus der Funktionalgleichung

$$w(\lambda u) = z (1-p) w(u) \mathbf{x}^T ((1-p w_r(u)) \mathbf{E} - (1-p) w(u) \mathbf{A})^{-1} \mathbf{y}. \quad (5.28)$$

durch Differentiation nach $w(u)$ an der Stelle $u = 0$. Dann ist allgemein:

$$\lambda^{\text{frei}} = z \mathbf{x}^T (\mathbf{E} - \mathbf{A})^{-1} \mathbf{y}, \quad \mu = 1 + \frac{p}{1-p} \frac{T_r}{T}.$$

Die Bedeutung von \mathbf{x} , \mathbf{y} und \mathbf{A} wurde ausführlich im Kapitel 4 besprochen.

Kapitel 6

Ausblick

Diese Arbeit erhebt nicht den Anspruch an Vollständigkeit. Vielmehr ergeben sich neue Fragen und auch Möglichkeiten zur Behandlung anderer Probleme. Es sollen daher einige weitergehende Themen angeführt werden.

- Der Komplex *Unordnung* ist nicht mit dem hier besprochenen Modell der isotropen Wanderung erschöpft, sondern nur eine Näherung durch die Forderung nach Skalensymmetrie. Eine allgemeinere Behandlung besteht in der Anwendung von Methoden der *stochastischen Geometrie*. Dann sind auch solche Probleme wie die Diffusion in Schüttungen wie Kugelpackungen oder in Fasersystemen genauer lösbar.
- Mit der Formulierung der CTRW-Theorie als *Propagator*-Formalismus scheint eine Erweiterung auf andere statistische Gebiete der Physik als aussichtsreich. Wegen der Wahrscheinlichkeitsinterpretation der Wellenfunktion ergibt sich ein reichhaltiges *quantentheoretisches* Anwendungsgebiet.
- Die Kopplung von Diffusion und Umwandlung ist mit dem hier beschriebenen Mehrzustandsformalismus möglich. Da nur die einfachsten Reaktionstypen ermittelt wurden, besteht die Aufgabe, auch für kompliziertere Prozesse die Wartezeitverteilung zu bestimmen. Auch Probleme der *Strukurbildung* auf Strukturen wie die Segregation sind noch wenig untersucht worden.
- In der Arbeit wurde das Diffusionsverhalten auf Fraktalen mit endlichem Verzweigungsgrad untersucht und ein Formalismus zur Bestimmung der Wartezeitverteilung angegeben. Eine Behandlung der hierarchischen Diffusion auf Fraktalen ist vorstellbar. Unlösbar ist zur Zeit die Erweiterung auf unendlich ramifizierte Gitter. Die Anwendung des *Multifraktal*-Konzepts auf Diffusionsprobleme steht erst am Anfang.
- Immer wieder traten in dieser Arbeit Funktionalgleichungen auf. Eine allgemeine Theorie zu deren Lösung wäre eine lohnende Aufgabe. Die damit definierten Funktionen verdienen eine genauere Analyse.
- Werden die zu untersuchenden Strukturen immer komplizierter, ist oft eine analytische Behandlung nicht mehr möglich. Computersimulationen können bei deren Untersuchung helfen.

Anhang A

Weitere Beispiele

Zur Verdeutlichung der allgemeinen Methode zur Aufstellung von Funktionalgleichungen und ihrer breiten Anwendbarkeit auf verschiedene Modelle seien weitere Beispiele angeführt. Dabei soll deutlich werden, daß auch komplizierte, wenn auch endlich ramifizierte Fraktalstrukturen behandelbar sind. Die meisten Modellrechnungen können leicht mit einem algebrafähigen Programm nachvollzogen werden. Lediglich bei den rekursiven Methoden ist man auf „Handarbeit“ angewiesen.

A.1 Fraktalbäume

Eine Ähnlichkeit zu wirklich existierenden Strukturen ist offensichtlich. In der Natur treten diese als feinfaserige Gebilde auf. Markante Objekte sind hierbei biologische Wachstumsergebnisse wie Pilzgeflechte (Myzel), Wurzelballen, Baumkronen ... Die Ursachen für diese filigranen Erscheinungsformen sind oft Konkurrenzprozesse mit der Umwelt. Auch in der unbelebten Natur findet man analoge Formen in Gestalt von Rissen. Die durch elektrochemische Anlagerungsprozesse herstellbaren „Zinkbäume“ sind fast schon Lehrbeispiele. Aufgrund ihres breiten Auftretens ist ein Verständnis von Transportprozessen in diesen Objekten von fundamentaler Bedeutung. Das hier beschriebene Modell ist die wohl einfachste Form einer großen Klasse gleichartiger Erscheinungen. Das Sprungverhalten wird gekenn-

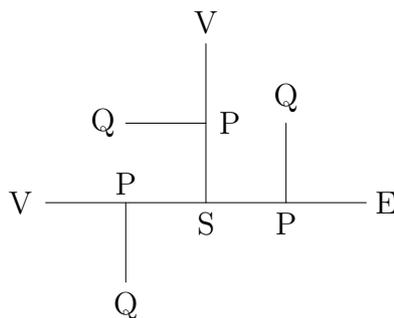


Abbildung A.1: Fraktalbaum, $z = 3$

zeichnet durch folgendes Schema:

$$\begin{aligned} S &\longleftarrow z\frac{1}{z}P \\ P &\longleftarrow \frac{1}{z}S + (z-2)Q \\ Q &\longleftarrow \frac{1}{z}P. \end{aligned}$$

Demnach hat die Transfermatrix \mathbf{A} die Form:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ \frac{1}{z} & 0 & z-2 \\ 0 & \frac{1}{z} & 0 \end{bmatrix}.$$

Als Funktionalgleichung erhält man

$$\begin{aligned} w(\lambda u) &= [0, w(u), 0] \begin{bmatrix} 1 & -w(u) & 0 \\ -\frac{1}{z}w(u) & 1 & -(z-2)w(u) \\ 0 & -\frac{1}{z}w(u) & 1 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \\ &= \frac{w(u)^2}{z - (z-1)w(u)^2}. \end{aligned}$$

Aus der Potenzreihenentwicklung für kleine u erhält man $\lambda = 2z$ und in der Einbettungsdimension $d = 2$ die Wanderungsdimension

$$d_w = 1 + \frac{\ln z}{\ln 2}.$$

A.2 Erweiterung des vorigen Beispiels

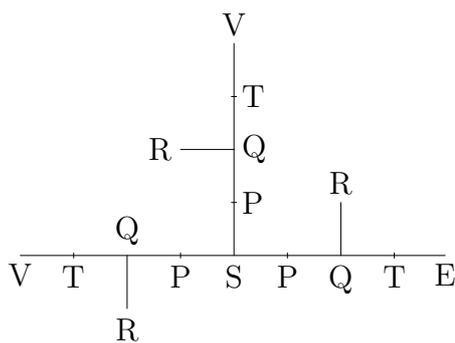


Abbildung A.2: Erweiterter Fraktalbaum

Voriges Beispiel kann man noch dahingehend erweitern, indem man zusätzlich Zwischen-

punkte einsetzt. Entsprechendes Sprungschema ist das folgende:

$$\begin{aligned}
 S &\longleftarrow z\frac{1}{2}P \\
 P &\longleftarrow \frac{1}{z}S + \frac{1}{z}Q \\
 Q &\longleftarrow \frac{1}{2}P + (z-2)R + \frac{1}{2}T \\
 R &\longleftarrow \frac{1}{z}Q \\
 T &\longleftarrow \frac{1}{z}Q .
 \end{aligned}$$

Hieraus bestimmt man wieder die Transfermatrix:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 0 & \frac{z}{2} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{z} & 0 & \frac{1}{z} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 & z-2 & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & \frac{1}{z} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{z} & 0 & 0 \end{bmatrix} .$$

Die Aufstellung der Funktionalgleichung geschieht wie üblich:

$$w(\lambda u) = \left[0, 0, 0, 0, \frac{z}{2}w(u) \right] [\mathbf{E} - w(u)\mathbf{A}]^{-1} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} .$$

Nach etwas Rechnung erhält man schließlich

$$w(\lambda u) = \frac{w(u)^4}{4z - (6z-4)w(u)^2 + (2z-3)w(u)^4}$$

und damit $\lambda = 4(z+2)$. Die Wanderungsdimension beträgt jetzt:

$$d_w = 1 + \frac{\ln(z+2)}{\ln 4} .$$

A.3 Die KOCH-Kurve

Die Bewegung auf der KOCH-Kurve ähnelt auf dem ersten Blick der Bewegung auf der Geraden. Wir müssen aber bedenken, daß jedes Geradenstück auf der Zeichnung in Wirklichkeit

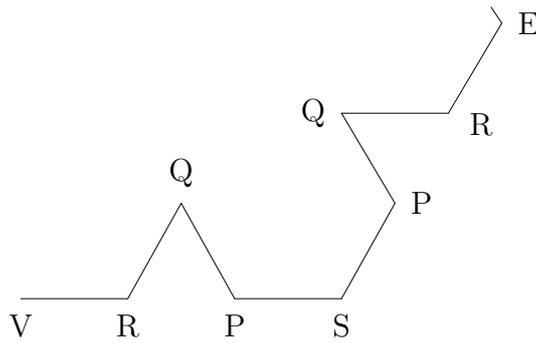


Abbildung A.3: KOCH-Kurve

aufgrund der Selbstähnlichkeit einen Ausschnitt des größeren Fraktals darstellt. Für dieses Beispiel ergibt sich folgendes Sprungschema:

$$\begin{aligned}
 S &\longleftarrow 2\frac{1}{2}P \\
 P &\longleftarrow \frac{1}{2}S + \frac{1}{2}Q \\
 Q &\longleftarrow \frac{1}{2}P + \frac{1}{2}R \\
 R &\longleftarrow \frac{1}{2}Q
 \end{aligned}$$

und die Transfermatrix lautet

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} & 0 \end{bmatrix},$$

d.h. die Funktionalgleichung ist:

$$w(\lambda u) = [0, 0, 0, w(u)] [\mathbf{E} - w(u)\mathbf{A}]^{-1} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Die rechte Seite schließlich ausgeführt ergibt

$$w(\lambda u) = \frac{w(u)^4}{8 - 8w(u)^2 + w(u)^4}$$

mit $\lambda = 16$, d.h.

$$d_w = \frac{\ln 16}{\ln 3} = 4 \frac{\ln 2}{\ln 3} \approx 2.52.$$

Dasselbe Ergebnis erhält man auch, wenn man sich vorstellt, daß auf Geradenstücken (eigentlich Fraktalabschnitte) gesprungen wird. Dafür gilt:

$$w(\lambda u) = \frac{w(u)^2}{2 - w(u)^2},$$

also $\lambda = 4$. Jedoch ist wegen der Einknickung die Sprungweite nur noch $\sqrt{3}$ und somit

$$d_w = \frac{\ln 4}{\ln \sqrt{3}} = 4 \frac{\ln 2}{\ln 3}.$$

A.4 Die modifizierte KOCH-Kurve

Es wurden jetzt noch zusätzliche Verbindungen eingebaut. Diese sollen eine schnellere radiale Ausbreitung ermöglichen. Das Sprunggeschehen wird dann durch folgendes Schema

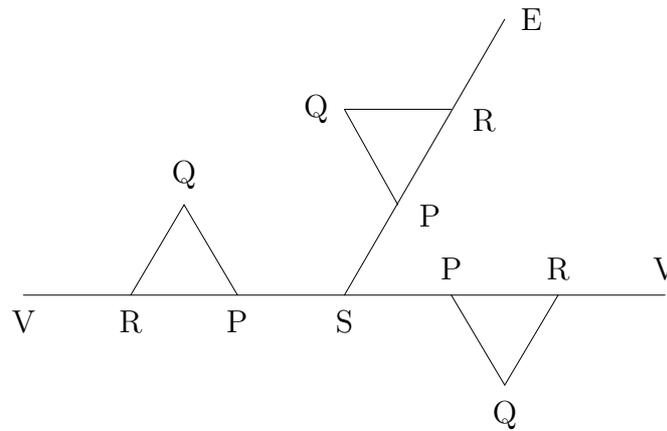


Abbildung A.4: Modifizierte KOCH-Kurve

charakterisiert:

$$S \longleftarrow 3\frac{1}{3}P$$

$$P \longleftarrow \frac{1}{3}S + \frac{1}{2}Q + \frac{1}{3}R$$

$$Q \longleftarrow \frac{1}{3}P + \frac{1}{3}R$$

$$R \longleftarrow \frac{1}{3}P + \frac{1}{2}Q.$$

Man erhält als Transfermatrix

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ \frac{1}{3} & 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{3} \\ 0 & \frac{1}{3} & 0 & \frac{1}{3} \\ 0 & \frac{1}{3} & \frac{1}{2} & 0 \end{bmatrix}$$

und damit die Funktionalgleichung

$$w(\lambda u) = [0, 0, 0, w(u)] [\mathbf{E} - w(u)\mathbf{A}]^{-1} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

bzw.

$$w(\lambda u) = \frac{w(u)^3(w(u) + 2)}{w(u)^4 - 2w(u)^3 - 14w(u)^2 + 18}.$$

Wie man bemerkt, hat der Zähler keine einfache Potenzform wie in den vorigen Beispielen. Man gelangt schließlich zu $\lambda = \frac{40}{3}$. Die radiale Ausbreitung skaliert in der nächsten Konstruktionsstufe um den Faktor 3. Als Wanderungsdimension berechnet man daher:

$$d_w = \frac{\ln 40}{\ln 3} - 1 \approx 2.36.$$

A.5 Ein teppichähnliches Fraktal

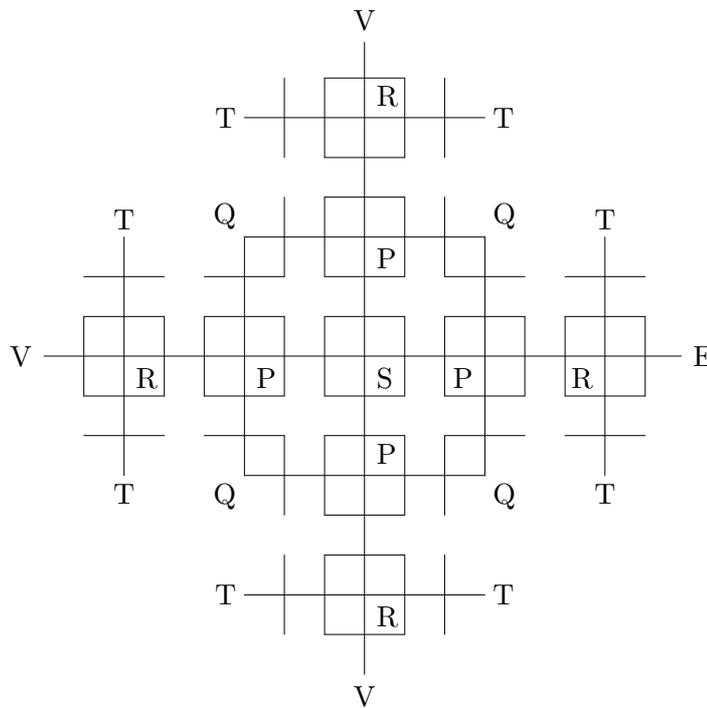


Abbildung A.5: Teppichähnliches Fraktal

Dieses dekorative Beispiel soll verdeutlichen, daß auch kompliziertere Modelle ausgewertet werden können. Die Transfermatrix hierfür lautet:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{4} & 0 & 1 & \frac{1}{4} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{4} & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{4} & 0 \end{bmatrix}.$$

Durch den bekannten Formalismus gelangt man zur Funktionalgleichung:

$$w(\lambda u) = \frac{w(u)^3}{16 - 21w(u)^2 + 6w(u)^4}.$$

Dabei ist:

$$T_p = \left(1 + \sqrt{1 - w(u)^2}\right)^p + \left(1 - \sqrt{1 - w(u)^2}\right)^p$$

$$D_{s-1} = \frac{1}{\sqrt{1 - w(u)^2}} \left(\left(1 + \sqrt{1 - w(u)^2}\right)^s + \left(1 - \sqrt{1 - w(u)^2}\right)^s \right).$$

Aus der Entwicklung für kleine u erhält man schließlich durch Vergleich der Vorfaktoren des linearen Gliedes

$$\lambda = \frac{ps + p + s}{s + 1} (p + s + 1)$$

und als Wanderungsdimension

$$d_w = \frac{\ln \lambda}{\ln(2p + s)}.$$

A.8 Modell für turbulenten Transport

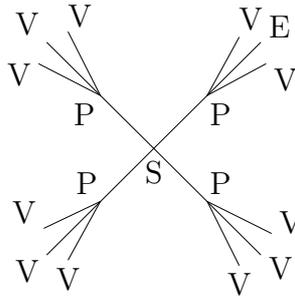


Abbildung A.8: Modell für Turbulenz

Ein Stromfaden zerteile sich in $z - 1$ neue. Die einzelnen Fäden mit ihren Verzweigungen sind jedoch nicht alle in der Abbildungsebene darstellbar. Daher sei nur das Erzeugungsschema in der Abb.7 angegeben. Es besteht ein wesentlicher Unterschied zum Baum-Modell, bei dem es „tote“ Enden gibt, d.h. Punkte ohne weitere Verzweigung. Jetzt ist außerdem eine schnellere radiale Ausbreitung möglich, wenn mehr Zweige von der Quelle weg als hin zeigen. Werden in der ersten Stufe z Endpunkte P mit einem Schritt erreicht, so sind es in der nächsten Renormierungsstufe $z(z - 1)$. Die Funktionalgleichung für $w(u)$ lautet:

$$\frac{1}{z(z - 1)} w(\lambda u) = \left[0, \frac{1}{z} w(u) \right] [\mathbf{E} - w(u)\mathbf{A}]^{-1} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix},$$

mit

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ \frac{1}{z} & 0 \end{bmatrix}.$$

Schließlich erhält man:

$$w(\lambda u) = \frac{(z - 1)w(u)^2}{z - w(u)^2}.$$

Dies ergibt:

$$\lambda = \frac{2z}{z-1}.$$

Für $z = 2$ entspricht das dem Fall der Geraden. Es soll nun $z > 2$ sein. Dann ist: $2 < \lambda < 4$. Bei geeigneter Wahl des räumlichen Skalierungsfaktors (etwa $\alpha = 2$) kann man erreichen, daß die Wanderung beschleunigt wird. Eine solche schnellere Ausbreitung des Teilchens erfolgt auch in turbulenten Systemen.

Literaturverzeichnis

- [1] J. Honerkamp: *Stochastische Dynamische Systeme*, VCH Verlagsgesellschaft, 1990.
- [2] J.W. Haus, K.W. Kehr: Diffusion in regular and disordered lattices, *Phys. Rep. 150*, S. 263–416, 1987.
- [3] S. Havlin, D. Ben-Avraham: Diffusion in disordered media, *Adv. Phys. 36*, S. 695–798, 1987.
- [4] B. B. Mandelbrot: *Die fraktale Geometrie der Natur*, Akademie-Verlag Berlin, 1987.
- [5] K. J. Falconer: *The geometry of fractal sets*, Cambridge University Press, 1985.
- [6] Ch. Zylka, G. Vojta: Real fractals and multifractals as fuzzy sets, *Preprint, Universität Leipzig, Naturwissenschaftlich-Theoretisches Zentrum*, 1990.
- [7] B. O’Shaughnessy, I. Procaccia: Diffusion on fractals, *Phys. Rev. A32*, S. 3073–3083, 1985.
- [8] B. Fourcade, A.- M. S. Tremblay: Diffusion noise of fractal networks and percolation clusters, *Phys. Rev. B34*, S. 7802–7812, 1986.
- [9] R. Hilfer, A. Blumen: Renormalisation on Sierpiński-type fractals, *J. Phys. A: Math. Gen. 17*, S. 537–545, 1984.
- [10] R. Hilfer: *Renormierungsansätze in der Theorie ungeordneter Systeme*. Verlag Harri Deutsch–Thun, Frankfurt am Main, 1986.
- [11] R. A. Guyer: Diffusive motion on a fractal; $G_{nm}(t)$, *Phys. Rev. A32*, S. 2324–2335, 1985.
- [12] D. Bedeaux et al: On the relation between master equations and random walks and their solutions, *J. Math. Phys. 12*, S. 2116–2123, 1971.
- [13] E. W. Montroll, H. Scher: Random walk on lattices. IV. Continuous-time walks and influence of absorbing boundaries, *J. Stat. Phys. 9*, S. 101–135, 1973.
- [14] H. Scher, M. Lax: Stochastic transport in a disordered solid. I. Theory. *Phys. Rev. B7*, S. 4491–4502, 1973.
- [15] H. Scher, M. Lax: Stochastic transport in a disordered solid. II. Impurity Conduction, *Phys. Rev. B7*, S. 4502–4519, 1973.

- [16] G. Pfister, H. Scher: Dispersive (non-Gaussian) transient transport in disordered solids, *Advances in Physics* 27, S. 747–798, 1978.
- [17] E. W. Montroll, B. J. West (Hrsg.): *On an enriched collection of stochastic processes*, Kap. 2, North-Holland Publishing Company, 1979.
- [18] J. Klafter, A. Blumen, M. F. Shlesinger: Stochastic pathway to anomalous diffusion, *Phys. Rev. A* 35, 1987.
- [19] D. Hui-fang: Asymptotic behaviors of the waiting-time distribution function $\psi(t)$ and asymptotic solutions of continuous-time random-walk problems, *Phys. Rev. B* 36, 1987.
- [20] D. Hui-fang: Electronic excited-state transport with infrared divergence in disordered systems, *Phys. Rev. B* 36, S. 6279–6287, 1987.
- [21] W. R. Schneider, W. Wyss: Fractional diffusion and wave equations, *J. Math. Phys.* 30, S. 134–144, 1989.
- [22] W. R. Schneider: Fractional diffusion, Workshop 88 – Dynamics and Stochastic Processes, Theory and Applications, Lecture Notes in Physics, Springer, Heidelberg, 1989.
- [23] W. Wyss: The fractional diffusion equation, *J. Math. Phys.* 27, S. 2782–2785, 1986.
- [24] F. E. Peseckis: Statistical dynamics of stable processes, *Phys. Rev. A* 36, S. 892–902, 1987.
- [25] R. R. Nigmatullin: The realization of the generalized transfer equation, *phys. stat. sol. (b)* 133, S. 425–430, 1986.
- [26] J. L. Lavoie, T. J. Osler, R. Tremblay: Fractional derivatives and special functions, *SIAM Review* 18, S. 240–268, 1976.
- [27] I. N. Sneddon: *The Use of Operators of Fractional Integration in Applied Mathematics*, Applied Mechanics Series, PWN-Polish Scientific Publishers, Warszawa-Poznan, 1979.
- [28] J. Machta: Generalized diffusion coefficient in one-dimensional random walks with static disorder, *Phys. Rev. B* 24, S. 5260–5269, 1981.
- [29] C. Van den Broeck: Waiting times for random walks on regular and fractal lattices, *Phys. Rev. Lett.* 62, S. 1421–1424, 1989.
- [30] C. Van den Broeck: Renormalization of first-passage times for random walks on deterministic fractals, *Phys. Rev. A* 40, S. 7334–7345, 1989.
- [31] C. Van den Broeck: *Random Walks on Fractals*, S. 57–64, in: *Irreversible Processes and Selforganization*, proceedings of the Fourth International Conference on Irreversible Processes and Selforganization (Hrsg.: W. Ebeling, H. Ulbricht), *Teubner-Texte zur Physik*, Band 23, BSB B.G. Teubner Verlagsgesellschaft Leipzig, 1989.
- [32] H. Strauß: Diplomarbeit, Universität Leipzig, 1989.

- [33] M. A. Lawrentjew, B. W. Schabat: *Methoden der komplexen Funktionentheorie*, VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin, 1967.
- [34] N. Ahlbehrendt, V. Kempe: *Analyse stochastischer Systeme*, Akademie-Verlag, Berlin, 1984.
- [35] A. Kratzer, W. Franz: *Transzendente Funktionen*, Akademische Verlagsgesellschaft Geest & Portig K.-G., Leipzig, 1963.
- [36] I. S. Gradstein, I. M. Ryshik: *Tafeln I/II*, Verlag Harri Deutsch–Thun, Frankfurt am Main, 1981.
- [37] L. W. Anacker, R. Kopelman: Steady-state chemical kinetics on fractals: Segregation of reactants, *Phys. Rev. Lett.* *58*, S. 189–291, 1987.
- [38] L. W. Anacker, R. P. Parson, R. Kopelman: Diffusion-controlled reaction kinetics on fractal and euclidean lattices: Transient and steady-state annihilation, *J. Phys. Chem.* *89*, S. 4758–4761, 1985.
- [39] A. Blumen, G. H. Köhler: Reactions in and on fractal media, *Proc. R. Soc. Lond. A* *423*, S. 189–200, 1989.
- [40] R. Kopelman: Fractal reaction kinetics, *Science, Reprint Series, Vol. 241*, S. 1620–1626, 1989.
- [41] W. Stiller: *Arrhenius Equation and Non-Equilibrium Kinetics*, Band 21 der *Teubner-Texte zur Physik*, BSB B.G. Teubner Verlagsgesellschaft Leipzig, 1989.
- [42] R. B. Stinchcombe: Diffusion in a fractal model with flights, *J. Phys. A Math. Gen.* *18*, S. 1169–1173, 1985.
- [43] F.-J. Fritz, B. Huppert, W. Willems: *Stochastische Matrizen*, Hochschultext, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 1979.
- [44] D. B. Zagier: *Zetafunktionen und quadratische Körper*, Hochschultext, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 1981.

Abbildungsverzeichnis

1.1	SIERPIŃSKI-Dreieck, $b=2$	8
2.1	CTRW-Schema	12
2.2	BROWNSche Wanderung	14
4.1	Geraden-Renormierung	36
4.2	SIERPIŃSKI-Dreieck	39
4.3	SIERPIŃSKI-Dreieck, $b = 3$	50
4.4	Wartezeitverteilungsdichten für Gerade und SIERPIŃSKI-Dreieck	56
4.5	3-2-Regel	59
5.1	Zerfallsschema $A \rightarrow B$	65
5.2	Zweizustandsreaktion	67
5.3	Wanderung mit Reaktion auf der Geraden	75
A.1	Fraktalbaum, $z = 3$	78
A.2	Erweiterter Fraktalbaum	79
A.3	KOCH-Kurve	81
A.4	Modifizierte KOCH-Kurve	82
A.5	Teppichähnliches Fraktal	83
A.6	Variable Geradenlänge	84
A.7	Überfliegen von Abschnitten	86
A.8	Modell für Turbulenz	87

Diese Arbeit wurde von mir selbständig und nur unter Zuhilfenahme der im Verzeichnis angegebenen Literatur verfaßt.

Leipzig, 12. Juli 1992