BestMasters

Julia Schäpers

# Orbits minimaler Wirkung

## Zur Theorie und Numerik großer Abweichungen

Springer Spektrum

# BestMasters

Mit **„BestMasters"** zeichnet Springer die besten Masterarbeiten aus, die an renommierten Hochschulen in Deutschland, Österreich und der Schweiz entstanden sind. Die mit Höchstnote ausgezeichneten Arbeiten wurden durch Gutachter zur Veröffentlichung empfohlen und behandeln aktuelle Themen aus unterschiedlichen Fachgebieten der Naturwissenschaften, Psychologie, Technik und Wirtschaftswissenschaften. Die Reihe wendet sich an Praktiker und Wissenschaftler gleichermaßen und soll insbesondere auch Nachwuchswissenschaftlern Orientierung geben.

Springer awards **"BestMasters"** to the best master's theses which have been completed at renowned Universities in Germany, Austria, and Switzerland. The studies received highest marks and were recommended for publication by supervisors. They address current issues from various fields of research in natural sciences, psychology, technology, and economics. The series addresses practitioners as well as scientists and, in particular, offers guidance for early stage researchers.

Weitere Bände in der Reihe http://www.springer.com/series/13198

Julia Schäpers

# Orbits minimaler Wirkung

## Zur Theorie und Numerik großer Abweichungen

Springer Spektrum

Julia Schäpers
Beelen, Deutschland

ISSN 2625-3577 ISSN 2625-3615 (electronic)
BestMasters
ISBN 978-3-658-25816-0 ISBN 978-3-658-25817-7 (eBook)
https://doi.org/10.1007/978-3-658-25817-7

Die Deutsche Nationalbibliothek verzeichnet diese Publikation in der Deutschen Nationalbibliografie; detaillierte bibliografische Daten sind im Internet über http://dnb.d-nb.de abrufbar.

Springer Spektrum


Springer Spektrum ist ein Imprint der eingetragenen Gesellschaft Springer Fachmedien Wiesbaden GmbH und ist ein Teil von Springer Nature
Die Anschrift der Gesellschaft ist: Abraham-Lincoln-Str. 46, 65189 Wiesbaden, Germany

*Ich danke Prof. Dr. Beyn für die Betreuung während dieser Arbeit. Durch die Gespräche mit ihm habe ich viele Anregungen erhalten. Dieses Buch widme ich meiner Familie, die mich während des Studiums unterstützt hat.*

# Inhaltsverzeichnis

# Einleitung

Störungen eines dynamischen Systems können zu Übergängen zwischen zwei stabilen stationären Zuständen dieses Systems führen, siehe [27]. Mit der Freidlin-Wentzell-Theorie, welche in [10] beschrieben ist, können diese Auswirkungen analysiert werden. Für stochastische Differentialgleichungen mit additivem oder multiplikativem Rauschen liefert diese ein sogenanntes Wirkungsintegral. Einen Minimierer dieses Wirkungsintegrals bezeichnet man als 'Pfad minimaler Wirkung' (minimum action path). Synonym sagen wir auch 'minimaler Wirkungspfad'.
Bestimmt man einen Pfad minimaler Wirkung, so zeigt sich, dass in der Umgebung dieses Pfades die wahrscheinlichsten Übergänge liegen, die unter stochastischen Störungen die Zustände des deterministischen Systems verbinden. Eine Methode, um einen Minimierer des Wirkungsintegrals zu bestimmen, nennt man 'Methode der minimalen Wirkung' oder auch 'minimale Wirkungsmethode' (minimum action method). In [9] und [16] werden zwei solcher Methoden vorgestellt, wobei wir auf das 'geometrische Prinzip der minimalen Wirkung' (geometric minimum action method), welches in [16] erläutert wird, in Unterkapitel 3.4.2 kurz eingehen.
Wir wählen hier den Ansatz, heterokline Orbits zu bestimmen, welche die stationären Zustände des deterministischen Systems verbinden, denn diese treten oft als Pfad minimaler Wirkung auf (ein solches Beispiel studieren wir in Kapitel 5). Daher ist das Ziel dieser Arbeit, eine numerische Methode zur Berechnung dieser Orbits zu entwickeln. Die Idee dazu entstand aus dem Projekt 'Putting minimum action methods into action', an welchem ich mitwirken durfte.
Die Arbeit ist wie folgt gegliedert: In Kapitel 1 wird das Prinzip der großen Abweichungen, welche das Grenzwertverhalten einer Familie


J. Schäpers, *Orbits minimaler Wirkung*, BestMasters,
https://doi.org/10.1007/978-3-658-25817-7_1

von Wahrscheinlichkeitsmaßen bezüglich einer sogenannten Ratenfunktion beschreibt, eingeführt. Das Kontraktionsprinzip, welches in Unterkapitel 1.2 bewiesen wird, ist ein wichtiges Hilfsmittel für die Freidlin-Wentzell-Theorie, auf die in Kapitel 2 eingegangen wird. Hier zeigen wir, dass die Lösung einer stochastischen Differentialgleichung mit additivem oder multiplikativem Rauschen (unter gewissen Voraussetzungen) das Prinzip der großen Abweichungen mit einer guten Ratenfunktion erfüllt. Diese gute Ratenfunktion entspricht dem bereits oben erläuterten Wirkungsintegral. Unterkapitel 3.1 motiviert, Bedingungen für Minimierer des Wirkungsintegrals zu untersuchen. Dies führt uns dann auf die Euler-Lagrange-Gleichung, welche wir in Unterkapitel 3.2 zunächst allgemein einführen und anschließend auf unsere Situation anwenden. Die zugehörigen Hamilton-Gleichungen, welche für spätere Anwendungen benötigt werden, leiten wir in Unterkapitel 3.3 her.
Da wir die Orbits des deterministischen Systems bestimmen wollen, erläutern wir zunächst in Unterkapitel 4.1 den Begriff des nichtentarteten Verbindungsorbitpaars und gehen insbesondere auf die Nichtentartung von Hamilton-Systemen ein. Die Berechnung eines Verbindungsorbitpaars führt uns auf ein Randwertproblem. Für den Fall, dass wir drei stationäre Zustände des deterministischen Systems haben, beweisen wir dazu einen in dieser Arbeit zentralen Approximationssatz, welcher selbstständig erarbeitet wurde. Dieser motiviert zu einer numerischen Methode, bei welcher zwei Verbindungsorbits zwischen jeweils zwei stationären Punkten zusammengefügt werden. Anwendungen dieser Methode werden in Kapitel 5 betrachtet.
Im Appendix sind Definitionen und Sätze aus verschiedenen Bereichen der Mathematik aufgelistet, welche wir in den vorherigen Kapiteln benötigen.

# 1 Das Prinzip der großen Abweichungen

In diesem Kapitel führen wir das Prinzip der großen Abweichungen (large deviations principle), kurz LDP, ein (vgl. Unterkapitel 1.1). Dazu definieren wir den Begriff einer (guten) Ratenfunktion. Außerdem werden zwei äquivalente Formulierungen des LDP erläutert. In Unterkapitel 1.2 stellen wir das Kontraktionsprinzip vor, welches wir im nächsten Kapitel bei der Freidlin-Wentzell-Theorie benötigen. Dieses Kapitel basiert vor allem auf [[8], Kapitel 1.2 und 4.2.1].

## 1.1 Einführung

Das LDP beschreibt das Grenzwertverhalten einer Familie von Wahrscheinlichkeitsmaßen $\{\mu_\epsilon\}_{\epsilon>0}$ auf einem messbaren Raum $(\mathcal{X}, \mathcal{B})$ für $\epsilon \to 0$ hinsichtlich einer Ratenfunktion. Hierbei ist $\mathcal{X}$ ein topologischer Raum, sodass offene und abgeschlossene Teilmengen von $\mathcal{X}$ definiert sind. Für $A \subset \mathcal{X}$ bezeichne $A^\circ$ das Innere von $A$, $\overline{A}$ den Abschluss von $A$ und $A^c$ das Komplement von $A$ (in $\mathcal{X}$). Ferner bezeichne $\mathcal{B}(\mathcal{X})$ die Borel-$\sigma$-Algebra über $\mathcal{X}$. Außerdem setzen wir $\inf \emptyset = \infty$.

**Definition 1.1.** *Eine unterhalbstetige Funktion $S : \mathcal{X} \to [0, \infty]$, d.h. die Subniveaumenge $\Phi_S(\alpha) := \{x \in \mathcal{X} : S(x) \leq \alpha\}$ ist für jedes $\alpha \in [0, \infty)$ eine abgeschlossene Teilmenge von $\mathcal{X}$, heißt* ***Ratenfunktion****. Eine* ***gute Ratenfunktion*** *$S$ ist eine Ratenfunktion, für welche die Subniveaumengen $\Phi_S(\alpha), \alpha \in [0, \infty)$ kompakte Teilmengen von $\mathcal{X}$ sind. Die Menge $\mathcal{D}_S := \{x \in \mathcal{X} : S(x) < \infty\}$ nennt man Endlichkeitsbereich (effective domain).*


J. Schäpers, *Orbits minimaler Wirkung*, BestMasters,
https://doi.org/10.1007/978-3-658-25817-7_2

Das folgende Lemma gibt ein Kriterium für die Unterhalbstetigkeit einer gegebenen Funktion.

**Lemma 1.2.** *Sei* $(\mathcal{X}, d)$ *ein metrischer Raum. Dann ist* $S : \mathcal{X} \to [0, \infty]$ *unterhalbstetig genau dann, wenn für jedes* $x_0 \in \mathcal{X}$ *und jede Folge* $\{x_n\}_{n\in\mathbb{N}}$ *mit* $x_n \to x_0$ *die Ungleichung*

$$\liminf_{n\to\infty} S(x_n) \geq S(x_0) \tag{1.1}$$

*gilt.*

**Beweis:**
„$\Rightarrow$“: Sei zunächst $S$ unterhalbstetig, $x_0 \in \mathcal{X}$ beliebig und $\{x_n\}_{n\in\mathbb{N}}$ eine Folge in $\mathcal{X}$, sodass $\lim_{n\to\infty} x_n = x_0$. Falls $S(x_0) = 0$, so ist die Behauptung klar. Betrachte also den Fall $S(x_0) > 0$. Da $S$ unterhalbstetig, ist $\Phi_S(\alpha)^c$ für jedes $\alpha \geq 0$ offen. Daher existiert zu jedem $\alpha \geq 0$ mit $S(x_0) > \alpha$ (d.h. $x_0 \in \Phi_S(\alpha)^c$) eine offene Menge $U \ni x_0$, sodass $S(x) > \alpha$ für alle $x \in U$. Da $\lim_{n\to\infty} x_n = x_0$, existiert ein $N \in \mathbb{N}$ mit $x_n \in U$ für alle $n \geq N$ und damit $S(x_n) > \alpha$ für $n \geq N$. Dies impliziert $\liminf_{n\to\infty} S(x_n) \geq \alpha$. Da dies für alle $\alpha < S(x_0)$ gilt, erhalten wir $\liminf_{n\to\infty} S(x_n) \geq S(x_0)$.
„$\Leftarrow$“: Umgekehrt gelte (1.1). Angenommen $S$ ist nicht unterhalbstetig. Dann existiert ein $x_0 \in \mathcal{X}$ und ein $\alpha < S(x_0)$, sodass für jede offene Menge $U \ni x_0$ ein Punkt $x \in U$ mit $\alpha \geq S(x)$ existiert. Also enthält der offene Ball $B_{\frac{1}{n}}(x_0)$ einen Punkt $x_n \in \mathcal{X}$, sodass $\alpha \geq S(x_n)$ für $n \in \mathbb{N}$. Wir erhalten dadurch eine Folge $\{x_n\}_{n\in\mathbb{N}}$ in $\mathcal{X}$ mit $\lim_{n\to\infty} x_n = x_0$ und $\liminf_{n\to\infty} S(x_n) \leq \alpha < S(x_0)$, was unserer Voraussetzung widerspricht. □

Eine gute Ratenfunktion erfüllt die folgende Eigenschaft:

**Lemma 1.3.** *Sei* $\mathcal{X}$ *ein Hausdorff-Raum. Eine gute Ratenfunktion* $S : \mathcal{X} \to [0, \infty]$ *nimmt ihr Infimum über jede nichtleere, abgeschlossene Menge* $A \subseteq \mathcal{X}$ *an.*

**Beweis:**
Sei $A \subseteq \mathcal{X}$ nichtleer und abgeschlossen. Betrachte $S_A := \inf\{S(x) : x \in A\}$. Falls $S_A = \infty$, so ist die Behauptung klar. Also können wir

$S_A < \infty$ annehmen. Wähle eine Folge $\{x_n\}_{n \in \mathbb{N}}$ in $A$ mit $S(x_n) \downarrow S_A$ (d.h. $\lim_{n\to\infty} S(x_n) = S_A$, $S(x_n) \geq S(x_{n+1})$ und $S(x_n) > S_A$ für alle $n \in \mathbb{N}$). Da $S$ eine gute Ratenfunktion und $A \subseteq \mathcal{X}$ abgeschlossen, sind die Mengen $\Phi_S(S(x_n)) \cap A$ für jedes $n \in \mathbb{N}$ kompakt. Sie sind auch nichtleer, denn $x_n \in \Phi_S(S(x_n)) \cap A$. Aus $S(x_n) \geq S(x_{n+1})$ erhalten wir $\Phi_S(S(x_{n+1})) \subseteq \Phi_S(S(x_n))$ für alle $n \in \mathbb{N}$. Damit folgt nach Lemma 7.1

$$\bigcap_{n=1}^{\infty} (\Phi_S(S(x_n)) \cap A) \neq \emptyset.$$

Also existiert ein $x_A \in A$ mit $S(x_A) \leq S(x_n)$ für alle $n \in \mathbb{N}$, woraus durch Limesbildung $S(x_A) = S_A$ folgt. □

Mit dem Begriff einer Ratenfunktion können wir das Prinzip der großen Abweichungen definieren.

**Definition 1.4.** *Wir sagen, dass eine Folge* $\{\mu_\epsilon\}_{\epsilon>0}$ *von Wahrscheinlichkeitsmaßen auf* $(\mathcal{X}, \mathcal{B})$ *das* ***Prinzip der großen Abweichungen*** *mit Ratenfunktion* $S$ *erfüllt, falls für alle* $\Gamma \in \mathcal{B}$

$$-\inf_{x\in\Gamma^\circ} S(x) \leq \liminf_{\epsilon\to 0} \epsilon \log \mu_\epsilon(\Gamma) \leq \limsup_{\epsilon\to 0} \epsilon \log \mu_\epsilon(\Gamma) \leq -\inf_{x\in\overline{\Gamma}} S(x) \tag{1.2}$$

*gilt.*

Im Folgenden sagen wir kurz „$\mu_\epsilon$ erfüllt das LDP mit Ratenfunktion $S$“. Wir bezeichnen die linke bzw. rechte Seite von (1.2) als untere bzw. obere Schranke. Beachte, dass in (1.2) $\mathcal{B}$ nicht unbedingt die Borel-$\sigma$-Algebra über $\mathcal{X}$ ist.

**Bemerkungen 1.5.** i) Eine Familie von Wahrscheinlichkeitsmaßen $\{\mu_\epsilon\}_{\epsilon>0}$ auf einem regulären topologischen Raum (z.B. ein metrischer Raum) kann nach Lemma 4.1.4 in [8] höchstens eine Ratenfunktion $S$ besitzen, sodass $\{\mu_\epsilon\}_{\epsilon>0}$ das LDP mit $S$ erfüllt.
ii) Angenommen $\{x\} \in \mathcal{B}$ für alle $x \in \mathcal{X}$ (zum Beispiel $\mathcal{B} = \mathcal{B}(\mathcal{X})$). Sind $\{\mu_\epsilon\}_{\epsilon>0}$ atomlose Maße (siehe Definition 7.2), so gilt $\mu_\epsilon(\{x\}) = 0$