Stochastische Prozesse 2

Stefan Hunn

Fakultät für Physik

21.Juni

Übersicht

zeitabhängige Zufallsvariablen

Zeitunabhängige Prozesse

$$\Omega = \text{Menge der möglichen exp. Ergebnisse}$$

$$X : \Omega \rightarrow R \text{ zeitunabh. Zufallvariable}$$

Zeitabhängige Prozesse

$$X : \Omega \times R \rightarrow R; \ \omega \times t \rightarrow X(t, \omega)$$

$$\text{Realisierung} \overset{kontinuierlich}{\longrightarrow} \text{Trajektorie } x(t)$$

$$\rho(x) = \rho(x, t) = \text{Dichteverteilung}$$

$$X(t) und \rho(x, t) = \text{Stochastischer Prozess}$$

Dynamik

Die $X(t_i)$ sind i. a. nicht unabhängig voneinander

$$\Rightarrow \quad \text{Dynamik der Zufallsvariablen}$$

$$\Rightarrow \text{gemeinsame Verteilung } \rho(x_1, t_1; x_2, t_2)$$

$$\rho(x_1, t_1; x_2, t_2) dx_1 dx_2 =$$

$$P(X(t_1) \in [x_1, x_1 + dx_1] und X(t_2) \in [x_2, x_2 + dx_2])$$

Rückblick

weißes Rauschen

keine Dynamik

$$d.h. \rho(x_1, t_1; x_2, t_2) = \rho(x_1, t_1) \cdot \rho(x_2, t_2)$$

$$< (X(t_1) - \mu_1)(X(t_2) - \mu_2) >= 0$$

$$mit \;\; \mu_i =< X(t_i) >= \int dx \rho(x, t_i) x$$

Bedingte Wahrscheinlichkeit

$$\rho(x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1}; ...; x_1, t_1) := \frac{\rho(x_n, t_n; ...; x_1, t_1)}{\rho(x_{n-1}, t_{n-1}; ....; x_1, t_1)}$$

Markov Eigenschaft

Markov-Prozess k-ter Ordnung

Für die bedingten Wahrscheinlichkeiten gilt:

$$\rho(x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1}; \ldots; x_1, t_1) = \rho(x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1}; \ldots; x_{n-k}, t_{n-k})$$

Markov-Prozess 1. Ordnung

$$\rho(x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1}; \ldots; x_1, t_1) = \rho(x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1})$$

- Übergang von $x_{n-1} \rightarrow x_n$ in der Zeit $t_n - t_{n-1}$ unabh. von der Vorgeschichte.
- Zukunft hängt nur von der Gegenwart ab!

Beispiel

Irrfahrt auf der Menge $1, 2, ..., N$ beginnt in 2 und bewegt sich entsprechend eines Münzwurfs nach links oder rechts. (Kopf $\longrightarrow$ links, Zahl $\longrightarrow$ rechts)
Zusatzregel: 1 und Kopf bzw. N und Zahl $\longrightarrow$ Gehe zurück zur 2.

Geschichte

Andrei Andreejewitsch Markov (1856-1922)
Anwendbarkeit fehlte!
Heute: Anwendungen in zahlreichen Gebieten der Wissenschaft.

Nur wenige Größen bestimmen den Prozess!

Markov-Prozess eindeutig bestimmt durch $\rho(x,t)$ und $\rho(x_2,t_2;x_1,t_1)$!

$$z.B.$$

$$\rho_3(x_3,t_3;x_2,t_2;x_1,t_1) = \rho_3(x_3,t_3|x_2,t_2;x_1,t_1)\cdot\rho_2(x_2,t_2;x_1,t_1)$$
$$= \rho_2(x_3,t_3|x_2,t_2)\cdot\rho_2(x_2,t_2|x_1,t_1)\cdot\rho(x_1,t_1)$$

Chapman-Kolmogorov-Gleichung

Chapman-Kolmogorov-Gleichung

$$\Rightarrow \rho_2(x_3, t_3; x_1, t_1) = \int dx_2 \rho_3(x_3, t_3; x_2, t_2; x_1, t_1)$$

$$= \int dx_2 \rho_2(x_3, t_3|x_2, t_2)\rho_2(x_2, t_2|x_1, t_1)\rho(x_1, t_1)$$

$$\rho_2(x_3, t_3|x_1, t_1) = \int dx_2 \cdot \rho(x_3, t_3|x_2, t_2)\rho(x_2, t_2|x_1, t_1)$$

- Jeder Markov-Prozess muss der CKG genügen.
- Markov-Prozess vollständig festgelegt durch $\rho_2(x_2, t_2; x_1, t_1)$ und $\rho_1(x, t)$. Es gilt:

$$\rho_1(x_3, t_3) = \int dx_2 \rho_2(x_3, t_3|x_2, t_2)\rho_1(x_2, t_2)$$

Beispiele für Markov-Prozesse

Wiener-Prozeß

$$\rho_2(x,t|y,\tau) = \frac{1}{\sqrt{2\pi(t-\tau)}} exp(-\frac{(x-y)^2}{2(t-\tau)})$$

$$\rho_1(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi t}} exp(\frac{-x^2}{2t}) \xrightarrow{t-->0} \delta - Fkt.$$

Ornstein-Uhlenbeck Prozeß

$$\rho_2(x,t|y,\tau) = \frac{1}{\sqrt{2\pi(1-e^{-2\Delta t})}} exp(\frac{-(x-y\cdot e^{-\Delta t})^2}{2(1-e^{-2\Delta t})})$$

$$\rho_1(x,t) = \rho(x) = \frac{1}{2\pi} e^{-\frac{1}{2}x^2}$$

Die Master-Gleichung

- Diskreter Fall: $x_1, x_2, \ldots$
- $\rho(x,t) =$ Ws. z.Zt t in x zu sein
- $\rho(y, t+\tau|x,t) = 1 - \tau\lambda(x) + o(\tau)$ für y=x
  $w(y,x,t)\tau + o(\tau)$ für $y \neq x$
- $1 = \sum_y \rho(y, t+\tau|x,t) \longrightarrow \lambda(x) = \sum_{y \neq x} w(y,x,t)$
- Die Größen $w(y,x,t)$ heißen Übergangsraten!

$$\rho(x, t+\tau) = \rho(x, t) \cdot \rho(x, t+\tau | x, t) + \sum_{y \neq x} \rho(y, t) \cdot \rho(x, t+\tau | y, t)$$

$$= \rho(x, t)(1 - \lambda(x)\tau) + \sum_{y \neq x} \rho(y, t) \cdot w(x, y, t)\tau$$

$$\frac{\rho(x, t+\tau) - \rho(x, t)}{\tau} = -\rho(x, t)\lambda(x) + \sum_{y \neq x} \rho(y, t) \cdot w(x, y, t)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(x, t) = \sum_{y \neq x} [\rho(y, t) w(x, y, t) - \rho(x, t) w(y, x, t)]$$

diskreter Fall: $x \longrightarrow x_1, x_2, \ldots$

$$\rho(x,t) \rightarrow \rho_i(t) \text{ und } w(x,y,t) \rightarrow w_{ij}(t)$$

$$\frac{d\rho_i(t)}{dt} = \sum_j [\underbrace{w_{ij}(t)\rho_j(t)}_{Fluss\ nach\ i} - \underbrace{w_{ji}(t)\rho_i(t)}_{Fluss\ aus\ i}]$$

$\Rightarrow$ DGL für die Dichtefunktion

- Gewinnterm $(x_j \rightarrow x_i)$ und Verlustterm $(x_i \rightarrow x_j)$
- Übergangswahrscheinlichkeit für kurze Zeiten bekannt.
- Praxis: Übergangsraten unabh. von t.

Eigenschaften der Mastergleichung

- Gleichgewicht: $\frac{\partial}{\partial t}\rho = 0$

$$\Rightarrow \textit{global balance}: \sum_j w_{ij}(t)\rho_i(t) = \sum_j w_{ji}(t)\rho_j(t)$$

- detailed balance: $\rho_i(t)w_{ij}(t) = \rho_j(t)w_{ji}(t)$
- $\rho_i(t) = \rho_i$: stationäre Verteilung
- typische Trajektorie: $x(t) = \mathit{const}$ unterbrochen von Sprüngen.
- viele Anwendungsgebiete: Chemie, statistische Physik, Populationsdynamik,..

Beispiele

- $w_{n-1,n} := r(n)$; $w_{n,n-1} := g(n)$; sonst $= 0$
- MG: $\frac{\partial}{\partial t}\rho(t,n) = r(n+1)\cdot\rho(n+1,t) + g(n-1)$
  $\cdot\,\rho(n-1,t) - (r(n)+g(n))\rho(n,t)$
- $\frac{d}{dt} < n >= \frac{d}{dt}\sum_n n\cdot\rho(n,t) =< g(n) > - < r(n) >$
- $\frac{d}{dt} < n^2 >=< (-2n+1)r(n) > + < (2n+1)g(n) >$

radioaktiver Zerfall

- Gewinnrate $g(n) = 0$, Zerfallsrate $r(n) = n\gamma$
- $\rightarrow \frac{d}{dt} < n(t) >= -\gamma < n(t) > \Rightarrow < n(t) >= Ne^{-\gamma t}$;

  mit Anfangsbed. $\rho(n, 0) = \delta_{nN}$

eindimensionaler random walk

- $\mathbf{r = g = 1}$
- $\dot{\rho}(n, t) = 2\rho(n-1, t) - 2\rho(n, t)$
- $\frac{d}{dt} < n >= 0$; $\frac{d}{dt} < n^2 >= 2$
- $<< n^2 >>=< n^2 >= 2t$; Varianz wächst linear in d. Zeit.

Die Fokker-Planck-Gleichung

Forderungen an die Übergangswahrscheinlichkeit:

Kurzzeiteigenschaften:

$$\int_I (x_2 - x_1)_i \rho_2(x_2, t+\tau | x_1, t) = A_i(x_1, t)\tau + o(\tau)$$

$$\int_I (x_2 - x_1)_i (x_2 - x_1)_j \rho_2(x_2, t+\tau | x_1, t) = D_{ij}(x_1, t)\tau + o(\tau)$$

$$\int_I (x_2 - x_1)_{i_1} \ldots . (x_2 - x_1)_{j_1} \rho_2(x_2, t+\tau | x_1, t) = o(\tau)$$

- Prozesse die diesen Gl. genügen heißen Diffusionsprozesse.
- in niedrigster Ordnung τ: Normalverteilung mit Mittelwert $A_i(x_1, t)$ und Varianz $D_{ij}(x_1, t)$.

Herleitung der Fokker-Planck-Gleichung

Sei $R(y)$ beliebig mit $\frac{\partial R}{\partial y}|_I = \frac{\partial^2 R}{\partial y^2}|_I = 0$

$$\int_I dy R(y) \frac{\partial \rho_2}{\partial t}(y, t|x, t')$$

$$= lim_{\tau 0} \frac{1}{\tau} \int_I dy R(y) [\int_I dz \rho_2(y, t+\tau|z, t) \rho_2(z, t|x, t') - \rho_2(y, t|x, t')$$

$$= \int_I dz \rho_2(z, t|x, t') [A_i(z, t) \frac{\partial R(z)}{\partial z_i} + \frac{1}{2} D_{ik}(z, t) \frac{\partial R(z)}{\partial z_i \partial z_k}]$$

$$\overset{part.Int.}{\longrightarrow}$$

$$\partial_t \rho_2(z, t|x, t') = [-\frac{\partial}{\partial z_i} A_i(z, t) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_k} D_{ik}(z, t) \cdot] \rho_2(z, t|x, t')]$$

- auch verallgemeinerte Diffusionsgleichung bzw. Smoluchowski-Gleichung.
- $A_i(z, t) =$ Driftterm, $D_{ik}(z, t) =$ Diffusionsterm

$$\partial_t \rho_2(z,t|x,t') =$$
$$[-\frac{\partial}{\partial z_i} A_i(z,t)\rho_2(z,t|x,t')] + [\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial z_i \partial z_k} D_{ik}(z,t)\cdot\rho_2(z,t|x,t')]$$

- Kurzzeiteigenschaften lassen sich leichter aus dem Zusammenhang bestimmen als die Überganswahrscheinlichkeit für alle t!
- DGL für kontinuierliche Werte ($\leftrightarrow$ Mastergl.)
- Mit $J(z,t) = A(z,t)\cdot\rho(z,t|x,t') - \frac{1}{2}\frac{d}{\partial z}[D(z,t)\cdot\rho(z,t|x,t')]$ folgt
$$\frac{\partial \rho(z,t|x,t')}{\partial t} = -\frac{\partial J(z,t)}{\partial z}$$

Kramers-Moyal-Entwicklung

$$\rho(x,t+\tau) = \sum_{n=0} \frac{1}{n!}(-\frac{d}{dx})^n [\rho(x,t) \underbrace{\int d\Delta \cdot \Delta^n \rho(x+\Delta, t+\tau|x,t)]}_{M_n(x,t,\tau)}$$

$$M_n(x,t,\tau) = \int dx'[x'(t+\tau) - x(t)]^n \rho(x', t+\tau|x,t)$$

Da $M_0 = 1$:

$$\rho(x,t+\tau) - \rho(x,t) = \sum_{n=1} \frac{1}{n!}(-\frac{d}{dx})^n [\rho(x,t) \cdot M_n(x,t,\tau)]$$

Kramers-Moyal-Entwicklung

- man kann zeigen: M_n können bzgl τ in Taylor-Reihe entwickelt werden.

$$\frac{M_n(x,t,\tau)}{n!} = D^{(n)}(x,t)\tau + O(\tau^2)$$

Kramers-Moyal-Entwicklung

$$\frac{\partial\rho(x,t)}{\partial t} = \sum_n (-\frac{\partial}{\partial x})^n [D^{(n)}(x,t)\rho(x,t)]$$

- **Pawula-Theorem**: Verschwindet 3. Ordnung so auch alle höheren Ordnungen.
- Erfüllt für gaußverteilte Langevin-Kraft(siehe gleich).
- $\rightarrow$ Fokker-Planck-Gleichung!

Die Fokker-Planck-Gleichung

$$\frac{\partial \rho(x,t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}[D^{(1)}(x,t) \cdot \rho(x,t)] + \frac{\partial^2}{\partial x^2}[D^{(2)}(x,t) \cdot \rho(x,t)]$$

- lineare, partielle DGL 2. Ordnung für $\rho(x,t)$
- vollständig bestimmt durch $D^{(1)}$ und $D^{(2)}$
- Explizit zeitabh. Lösungen nur in Ausnahmefällen!

Beispiele

Wiener-Prozeß

A=0 und D=1

$$\rightarrow \partial_t \rho(x,t) = \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\rho(x,t)$$

Wärmeleitungsgleichung

deterministisches System

$\dot{x} = f(x);\ \rho(z,t) = \delta(z - x(t)) = \rho(z,t|x,t')$
$\int dz(z-x)\rho(z,t+\tau|x,t) = f(x(t))\tau + o(\tau)$

- Also $A(x) = f(x)$ und $D(x) = 0$

$$\xrightarrow{F-P-G} \partial_t \rho(z,t|x,t') = -\frac{\partial}{\partial z} f(z)\rho(z,z|x,t')$$

Langevin-Gleichung

Ziel: Berücksichtigung von fluktuierenden Einflüssen.

z.B.: Brownsche Molekularbewegung.

$$\frac{\partial \dot{x}(t)}{\partial t} = -a \cdot \dot{x}(t) + \xi(t) \text{ Langevin-Gleichung}$$

wobei:

- $<\xi(t)>=0$; $<\xi(t)\xi(t\acute{})>=\delta(t-t\acute{})$ (weißes Rauschen) $\xi(t)$ Stochastische Kraft
- ξ Zufallsvariable $\leftrightarrow$ x Zufallsvariable

Langevin-Gleichung mit Potential

- Potential V(x,t)
- z.B.: Geladenes Brownsches Teilchen im elektrischen Feld.
- Erweiterung der Langevin-Gleichung um $-\frac{\partial V}{\partial x}$

Langevin-Gleichung mit Potential

$$\frac{\partial x(t)}{\partial t} = -a \cdot x(t) + \xi(t) - \frac{\partial V}{\partial x}$$

- DGL für x(t)
- oft uninteressant, da x(t) nur **eine** beliebige Realiesierung.
- Interessanter: Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho(x,t) \rightarrow$ FPG!

Beispiel: Oszillatorbad klassisch

Hamiltonian: $H = H_s + H_R + H_{sR}$

- $H_s = \frac{p^2}{2M} + V_0(q)$
- $H_R = \sum_j [\frac{p_j^2}{2m_j} + \frac{m_j w_j^2}{2} x_j^2]$
- $H_{sR} = \sum_j c_j \cdot x_j \cdot q$ (lineare Kopplung)

Bewegungsgleichungen:

$$\dot{q} = \frac{p}{M}$$

$$\dot{p} = -V_0(q) - \sum c_j x_j$$

$$\dot{x_j} = \frac{p_j}{m_j}$$

$$\dot{p_j} = -m_j w_j^2 \cdot x_j - c_j q$$

$$\ddot{q} = -\frac{1}{M} V_{eff}(q) - \int_0^t ds \gamma(t-s)\dot{q}(s) + \frac{1}{M}\xi(t)$$

- $\xi(t) = -\sum c_j[(x_j(0) + \frac{c_j q(0)}{m_j w_j^2}])cos(w_j \cdot t) + \frac{\dot{x}_j}{w_j} sin(w_j \cdot t)$

wobei:

- $\rho_R(p_i, x_i) = \frac{1}{Z_R} e^{-\beta H(q,p,p_i,x_i)}$
- $< \xi(t) >= 0$
- $< \xi(t)\xi(t') >= k_B T M \gamma(t-t')$
  Fluktuation-Dissipations-Theorem
- $\rightarrow \xi$ ist Gaußsche Kraft

Zusammenfassung

- **Markov-Prozeß:**
  $\rho(x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1}; \dots; x_1, t_1) = \rho(x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1})$.
- **Master-Gleichung:** DGL für $\rho(x, t)$.
  Übergangswahrscheinlichkeit für kleine t bekannt.
  $\frac{\partial}{\partial t}\rho_i(t) = \sum_j [\rho_j(t) w_{ij}(t) - \rho_i(t) w_{ji}(t)]$
- **Fokker-Planck-Gl.:** lineare partielle DGL für $\rho(x, t)$. Wird aus der Kramers-Moyal-Entw. und dem Pawula-Theorem hergeleitet.
- **Langevin-Gl.:** stochastische DGL für x(t). z.B. Brownsche Bewegung bzw. System gekoppelt an Oszillator-Bad.