Wh.: verallgemeinerte Langevin-Gl.

$$\dot{x}_i(t) = h_i(\{x(t)\}, t) \quad \text{deterministisch}$$

$$i = 1, \dots, M \qquad + \sum_{j=1}^{M} D_{ij}(\{\underline{x}(t)\}, t)\, f_j(t)$$

weißes Rauschen

$\langle f_i(t) \rangle = 0$

$\langle f_i(t) f_j(t') \rangle = \Gamma_i\, \delta_{ij}\, \delta(t-t')$

$D_{ij} = \text{const}$: additives Rauschen

D_{ij} Funktion von $\underline{x}(t)$

$\Rightarrow$ multiplikatives Rauschen

Ornstein-Uhlenbeck-Prozess

$$\dot{x}_i = -\sum_{j=1}^{M} \gamma_{ij} x_j(t) + f_i(t)$$

speziell: $\gamma_{ij} = 0$

$$\Rightarrow \dot{x}_i(t) = f_i(t)$$

Wiener Process

Man führt an: $W_i(\tau) = x_i(t+\tau) - x_i(t)$

$$= \int_t^{t+\tau} f_i(t')\,dt'$$

Bezug zur Brown'schen Bewegung

wir hatten:

$$\underline{\dot{v}} = -\gamma \underline{v} + \underline{f}$$ (nicht überdämpfte) Langevin-Gl.

Relaxationszeit d. Geschwindigkeit: $\tau = \gamma^{-1}$

Folgerung: Für $t \gg \tau$ kann der Term $\underline{\dot{v}}$ vernachlässigt werden!

$$\Rightarrow 0 = -\gamma \underline{v} + \underline{f}$$

$$\underline{v} = \underline{\dot{r}} = \boxed{\underline{\dot{r}} = \frac{1}{\gamma}\underline{f} \Leftrightarrow \gamma \underline{\dot{r}} = \underline{f}} \quad (*)$$

Die überdämpfte Langevin-Gl. entspricht also einem Wiener Prozess!

Mittelwert und Mittleres Verschiebungsquadrat des Ortes $\underline{r}$

(beachte: Die Geschw. $\underline{v}$ ist keine dyn. Variable mehr !)

$$\gamma \dot{\underline{v}}(t) = \underline{f}(t) \quad \text{und} \quad \underline{w}(\tau) = \overbrace{\gamma \underline{v}(t+\tau) - \gamma \underline{v}(t)}^{\underline{x}(t+\tau) - \underline{x}(t)}$$

$$= \int_t^{t+\tau} \underline{f}(t')\,dt'$$

$$\langle \underline{f} \rangle = 0 \implies \langle \underline{w}(\tau) \rangle = 0$$

gilt für alle τ

$$\implies \gamma\langle \underline{v}(t+\tau)\rangle - \gamma \langle \underline{v}(t) \rangle = 0$$

$$\implies \langle \underline{v}(t) \rangle = 0$$

$$\left\langle \left(\Delta \underline{v}(t) \right)^2 \right\rangle$$

$$= \left\langle \left(\underline{v}(t) - \underline{v}(0) \right)^2 \right\rangle$$

$$\overset{\circledast}{=} \frac{1}{\gamma^2} \int_0^t dt' \int_0^t dt'' \underbrace{\langle \underline{f}(t') \cdot \underline{f}(t'') \rangle}$$

$3\Gamma\,\delta(t-t')$

$$= \frac{3}{\gamma^2}\Gamma \int_0^t dt' \underbrace{\int_0^t dt''\,\delta(t'-t'')}_{1}$$

$$\boxed{\begin{array}{c}\text{FDT}\\ \Gamma = \frac{2\gamma k_B T}{m}\end{array}}$$

Stokes-Einstein

$$= \frac{3}{\gamma^2}\Gamma t = 6\frac{k_B T}{\gamma m} t = \underline{\underline{6Dt}}$$

Wir erhalten also eine lineare Abhängigkeit von der Zeit für alle t !!

(Unterschied zum nicht-überdämpften Fall:

dort $\langle(\Delta \underline{r}(t))^2\rangle \sim t^2$ für $t \to 0$)

Hieraus erhält man auch Aussage über die Korrelation von $\underline{W}(t)$

$$\langle(\underline{W}(t))^2\rangle = 3\Gamma t$$

mit $\underline{W}$ 3-dim Vektor

$$\langle \underline{W}(t)\cdot\underline{W}(t+\tau)\rangle = 3\Gamma t$$

Begründung
$\Longrightarrow$ Übung

I.7. Stochastische Integrale

Problemstellung und Motivation:

- Manchmal benötigt man die verallgemeinerte Langevin-Gl. in integraler Form

  z.B. bei der Auswertung durch numerische Simulation

- Die integrale Form wird auch bei Berechnung sogenannter Kramers-Moyal-Koeffizienten (Herleitung der Fokker-Planck-Gl.) benötigt

Ausgangspunkt

$$\dot{x}_i(t) = h_i(\{\underline{x}(t)\},t) + \sum_{j=1}^{M} D_{ij}(\{\underline{x}(t)\},t)\, f_j(t)$$

Formale Integration

$$x_i(t+\tau) - x_i(t)$$

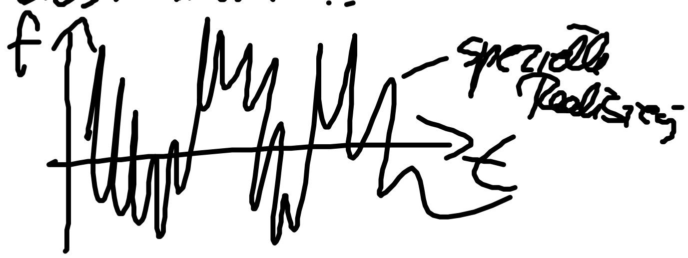
$$= \int_t^{t+\tau} dt'\, h_i(\{\underline{x}(t')\}, t') \qquad (*)$$

$$+ \int_t^{t+\tau} dt' \sum_j D_{ij}(\{\underline{x}(t')\}, t')\, f_j(t')$$

Problem:

$f_i(t)$ ist unkorrelierte Zufallsvariable !!

$$\langle f_i(t) f_j(t') \rangle = \delta_{ij}\,\delta(t-t')$$



Zufallscharakter von f überträgt sich auf x

⇒ Frage:

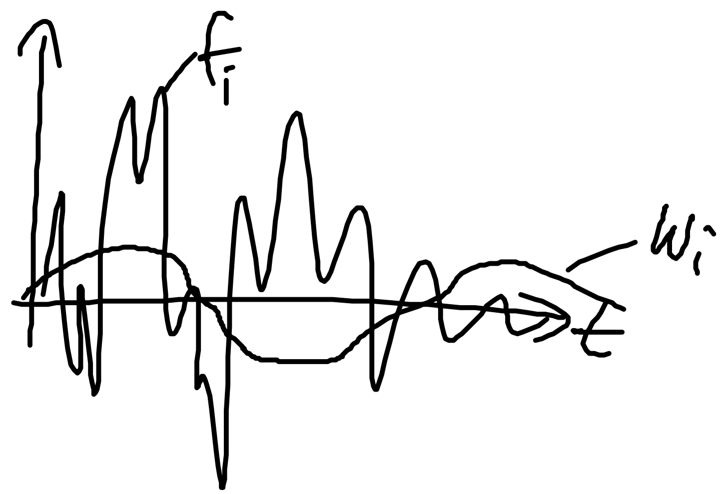
Welchen Wert von x soll man bei der Auswertung der Funktion $D_{ij}(\underline{x}(t), t)$ nehmen?

Schreibe ⊛ zunächst um unter Benutzung des Wiener Inkrements

$$W_i(\tau) = \int_t^{t+\tau} dt'\, f_i(t')$$

Bemerkungen:

a) $W(t)$ ist "glattere" Funktion als $f(t)$, da man integriert hat



- Aus der Def.-Gl. von W folgt formal: $d\,W_i(t) = f_i(t)\,dt$

Aber beachte: $\dot{W}_i(t) = f_i(t)$ existiert, streng genommen nicht!!

Denn

$$\dot{W}_i = \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{W_i(t+\varepsilon) - W_i(t)}{\varepsilon}$$

bilde Differenzenquotient

$$\sim \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{\sqrt{\langle (W_i(t+\varepsilon) - W_i(t))^2 \rangle}}{\varepsilon} = \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{\sqrt{\varepsilon}}{\varepsilon}$$

verhält sich wie

$$= \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} \to \infty$$

benutze: $\langle W_i^2(t+\varepsilon) \rangle \sim t+\varepsilon$

$\langle W_i^2(t) \rangle \sim t$

$-2 \langle W_i(t+\varepsilon) W_i(t) \rangle \sim -2t$

Strenggenommen ist also das Wiener Inkrement nicht differenzierbar

("das reflektiert den irregulären Charakter der Braun'schen Bewegung")

$\boxed{dW_i = f_i\,dt}$

Umschreiben von $(*)$

$$x_i(t+\tau) - x_i(t) = \int_t^{t+\tau} dt'\, h_i(\underline{x}(t'), t') + \int_t^{t+\tau} \sum_{j=1}^{M} D_{ij}(\underline{x}(t'), t')\, dW_j(t')$$

Bemerkung:

Das zweite Integral ist ein "Riemann-Stieltjes" Integral mit W als Gewichtsfunktion

Diskretisierung des 2. Integrals

$$A_{ij} = \int_t^{t+\tau} D_{ij}(\underline{x}(t'), t')\, dW_j(t')$$

Zerlege das Integrationsintervall zunächst mittels $N+1$ Stützstellen in N Teilintervalle

$$t' \le t_1' \le t_2' \le \dots \le t'+\tau$$

1. Stützstelle — (N+1)-te Stützstelle

• Approximiere A_{ij} durch die Summe der Beiträge

$$D_{ij}(\tilde{t}_m)\left(W_j(t_{m+1}) - W_j(t_m)\right)$$

$\tilde{t}_m$ ist ein Zwischenwert im Intervall $[t_m, t_{m+1}]$

• Ziehe den Grenzwert $N \to \infty$ bei festem τ
d.h. die Teilintervalle werden unendlich klein

<u>Beachte</u>:

Für gewöhnliche Integrale ist das Ergebnis unabhängig von der Wahl des Zwischenwerts $\tilde{t}_m$

— nicht aber für stochastische Integrale

Es gibt zwei Wege zur Wahl von $\tilde{t}_m$

a) Definition nach Ito

Wir zeichnen in jedem Teilintervall den linken Randpunkt aus!

$$A_{ij}^{Ito} = A_{ij}^{I}$$

$$= \lim_{N \to \infty} \sum_{m=0}^{N} D_{ij}(\{\underline{x}(t_m)\}, t_m) \cdot (W_j(t_{m+1}) - W(t_m))$$

b) Definition nach Stratonovich

$$A_{ij}^{Stratonovich} = A_{ij}^{S}$$

$$= \lim_{N \to \infty} \sum_{m=0}^{N} \left[\frac{1}{2} D_{ij}(\{\underline{x}(t_m)\}, t_m) + \frac{1}{2} D_{ij}(\{\underline{x}(t_{m+1})\}, t_{m+1}\right] \cdot (W(t_{m+1}) - W(t_m))$$

Bei der Auswertung der Funktion D_{ij} wird also ein Mittelwert der Beiträge am oberen und unteren

Rand gebildet!

<u>Bemerkung</u>:

Für $D_{ij} = \text{const}$ (additives Rauschen)
gilt offensichtlich $A_{ij}^{I} = A_{ij}^{S}$

Dies war z.B. der Fall bei der Diskussion der Brown'schen Bewegung

Beispiel für ein stochastisches Integral, bei dem die Ito- und Stratonovich-Definition zu unterschiedl. Resultaten führt:

$$A = \int_0^{\hat{\tau}} W(t') \, dW(t')$$

$\Delta = t_{n+1} - t_n$

Auswertung nach Ito

$$A^{I} = \underset{\substack{N\to\infty \\ \lim_{\Delta\to 0}}}{\lim} \sum_{m=0}^{N} W(t_m)\left[W(t_{m+1}) - W(t_m)\right]$$

$$A^{I} = \lim_{\Delta\to 0} \sum_{m=0}^{N} \Big(W(t_m)W(t_{m+1}) - W(t_m)W(t_m)\Big)$$

$$= \lim_{\Delta\to 0} \sum_{m=0}^{N} \frac{1}{2}\Big(W^2(t_{m+1}) - W^2(t_m) - W^2(t_{m+1}) - W^2(t_m) + 2\,W(t_m)W(t_{m+1})\Big)$$

führe ein: $\Delta W(t_m) = W(t_{m+1}) - W(t_m)$

$$\Rightarrow A^{I} = \lim_{\Delta\to 0} \sum_{m=0}^{N} \frac{1}{2}\Big(W^2(t_{m+1}) - W^2(t_m) - (\Delta W(t_m))^2\Big)$$

$$= \lim_{\Delta \to 0} \sum_{m=0}^{N} \frac{1}{2}\left(W^2(t_{m+1}) - W^2(t_m)\right)$$

$$- \lim_{\Delta \to 0} \sum_{m=0}^{N} \frac{1}{2}\left(\Delta W(t_m)\right)^2$$

In der ersten Summe heben sich fast alle Terme heraus bis auf $m=0$ und $m=N$ (beachte $t_{m=0}=0$, $t_{m=N}=\tau$)