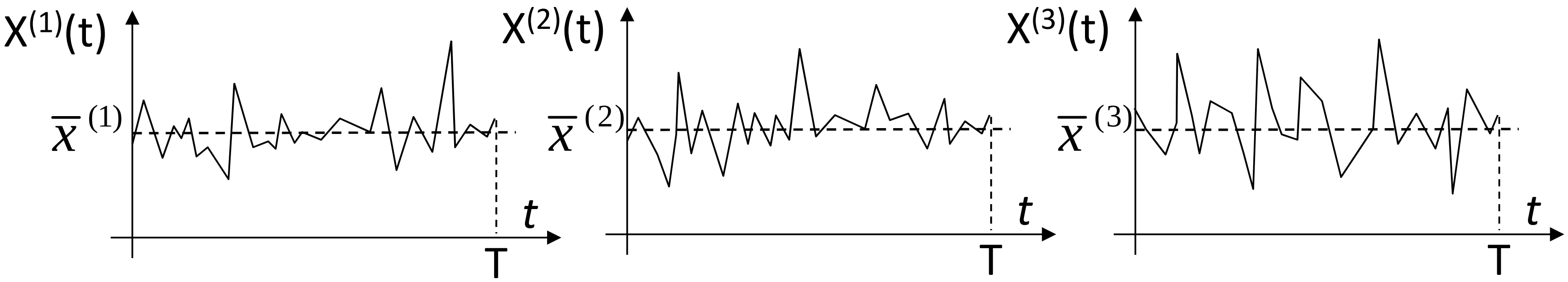
3. Stochastische Prozesse und Dynamik

3.1 Konzepte und Methoden

- Verschiedene Realisierungen einer Observablen:



- Anwendungen:
  - Hamilton'sche Statistische Mechanik
  - Quantenstatistik
  - Econophysics
  - Gebiete außerhalb der Physik (Bioliogie, Soziologie, Informatik,…)

Stochastische Variable X:

- Nimmt zufällige Werte $x(t)$ bei der Messung zur Zeit t an („Realisierung der stochastischen Variable“)
- $x \in R^N$ (manchmal auch $x \in C^N$)
  N: Dimension des Zustandsraumes der stochastischen Variable (Vektornotation weggelassen)
- Verhalten von X wird durch die Zeitreihe

  $$\{x(t_i)\} = \{x(t_1), x(t_2), \ldots, x(t_n)\}$$

  charakterisiert.
- Kontinuierlicher Grenzfall der Zeitreihe $(n \to \infty, T = const.)$: $x(t)$ („Kontinuierliche Realisierung“ von X)

Charakterisierung von X:

- Ensemble von M Realisierungen von X: $\{x_k(t)\}_{1 \le k \le M}$
- Für $M \to \infty$ Verbund-Wahrscheinlichkeitsdichten
- Hierarchie von Wahrscheinlichkeitsdichten, n-Punkt Verbundwahrscheinlichkeit

  $$w_n(x_1, t_1; x_2, t_2; \ldots; x_{n-1}, t_{n-1}; x_n, t_n):$$

  Wahrscheinlichkeitsdichte für die Realisierung des Werts x_1 bei t_1, x_2 bei t_2, ..., und x_n bei t_n.
- Reduzierte Verbundwahrscheinlichkeit („tracing over unobserved degrees of freedom")

$$w_{n-1}(x_1, t_1; x_2, t_2; \ldots; x_{n-1}, t_{n-1}) = \int dx_n w_n(x_1, t_1; x_2, t_2; \ldots; x_{n-1}, t_{n-1}; x_n, t_n)$$

$$\vdots$$

$\rightarrow$ 2-Punkt Verbundwahrscheinlichkeit: $w_2(x_1, t_1; x_2, t_2)$

$$\vdots$$

$\rightarrow$ (1-Punkt) Wahrscheinlichkeitsdichte: $w_1(x_1, t_1) = w(x, t)$

Transferwahrscheinlichkeiten:

Stochastische Dynamik wird durch (bedingte) Transferwahrscheinlichkeiten bestimmt. Allgemein:

$$P(x_i, t_i \mid x_{i-1}, t_{i-1}; \ldots; x_1, t_1)$$

Wahrscheinlichkeit x_i bei t_i zu erreichen wenn bei x_{i-1} bei t_{i-1} vorlag.

$\rightarrow$ Transferwahrscheinlichkeit mit „Gedächtnis“ (memory), wenn Transferwahrscheinlichheit von Vorgeschichte (x_{i-1}, t_{i-1};...; x_1, t_1) abhängt

$\rightarrow$ Zeitentwicklung:

$$w_i(x_1, t_1; x_2, t_2; \ldots; x_{i-1}, t_{i-1}; x_i, t_i) =$$

$$= P(x_i, t_i \mid x_{i-1}, t_{i-1}; \ldots; x_1, t_1) w_{i-1}(x_1, t_1; x_2, t_2; \ldots; x_{i-1}, t_{i-1})$$

Spezialfall: Transferwahrscheinlichkeit ohne memory

→ Markov Prozess: $P(x_i, t_i \mid x_{i-1}, t_{i-1}; \ldots; x_1, t_1) = P(x_i, t_i \mid x_{i-1}, t_{i-1})$

(diskretes Analogon zur DGL 1. Ordnung: z.B. Hamilton'sche Gleichungen, Schrödinger Gleichung)

→ Reduktion der Zeitentwicklung:

$$w_2(x_{i-1}, t_{i-1}; x_i, t_i) = P(x_i, t_i \mid x_{i-1}, t_{i-1}) w_1(x_{i-1}, t_{i-1})$$

Spezieller Markov-Prozess:
Zeittranslationsinvarianz: Übergangswahrscheinlichkeit hängt nur von der Zeitdifferenz $\tau = t_{i-1}$- t_i und nicht vom Absolutwert ab:

$$w_2(x_1, t_1; x_2, t_2) = P(x_1, x_2 - x_1; \tau) w_1(x_1, t_1)$$

Bewegungsgleichung für Wahrscheinlichkeitsdichte:

$$w_1(x_2, t_2) = \int dx_1 P(x_1, \underbrace{x_2 - x_1}_{\Delta x}; \tau) w_1(x_1, t_1)$$

Übergangsmomente der Transferwahrscheinlichkeit:

0. Moment (Normierung):

$$\int d(\Delta x) P(x, \Delta x; \tau) = 1$$

1. Moment (Erwartungswert der Sprungweite):

$$\left\langle \Delta x \right\rangle_\tau = \int d(\Delta x) \Delta x P(x, \Delta x; \tau)$$

2. Moment (mittlere quadratische Sprungweite):

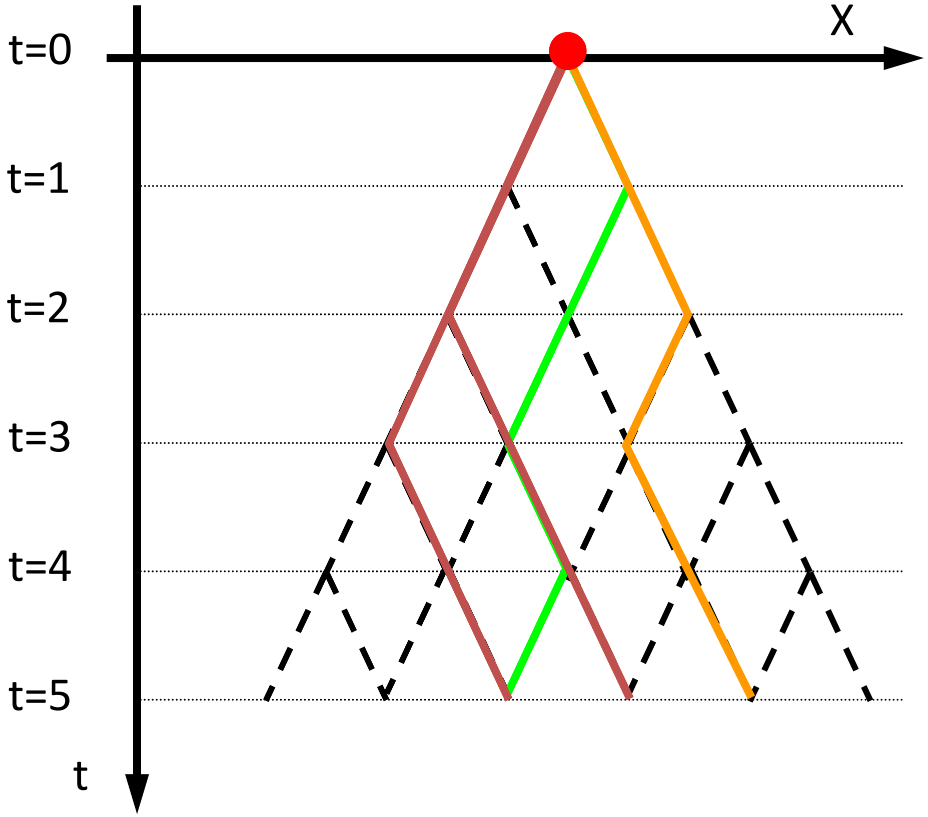
$$\left\langle (\Delta x)^2 \right\rangle_\tau = \int d(\Delta x) (\Delta x)^2 P(x, \Delta x; \tau)$$

Beispiel: Zufallsbewegung („Random walk“)

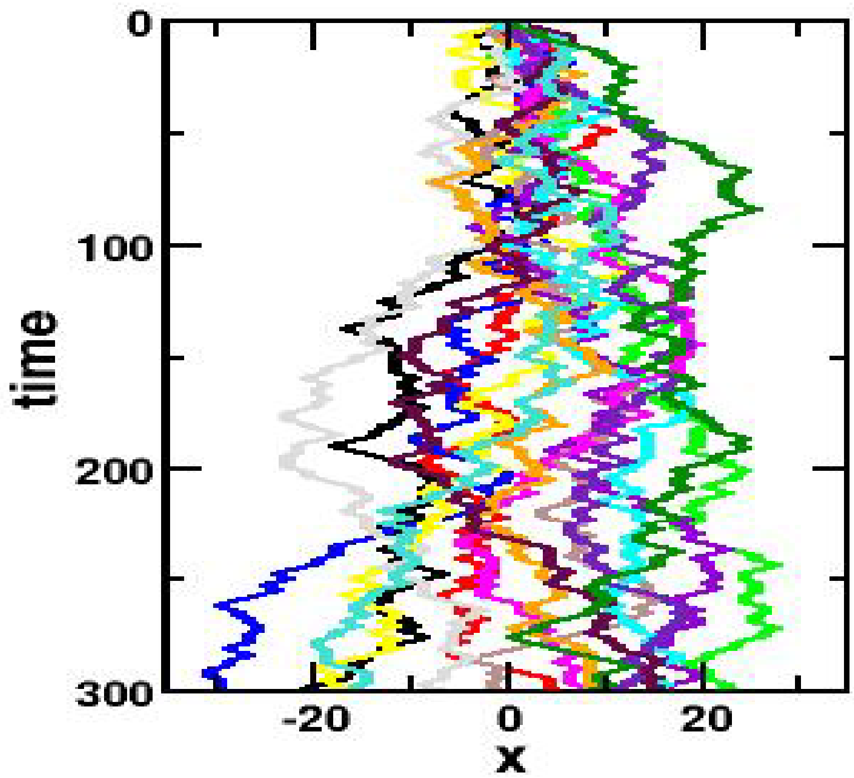
- Eindimensionale diskrete Bewegung
- Translationsinvariant im Ort: $P(x,\Delta x;\tau) = P(\Delta x;\tau)$

mit $P(\Delta x = +1; \tau = 1) = 0.5$

$P(\Delta x = -1; \tau = 1) = 0.5$



Nach vielen Versuchen (Ensemblemittel):



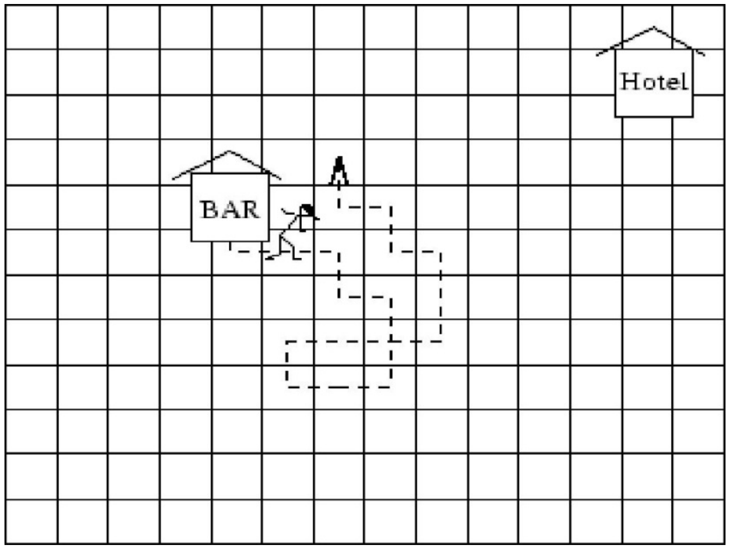
- 1. und 2. Moment:

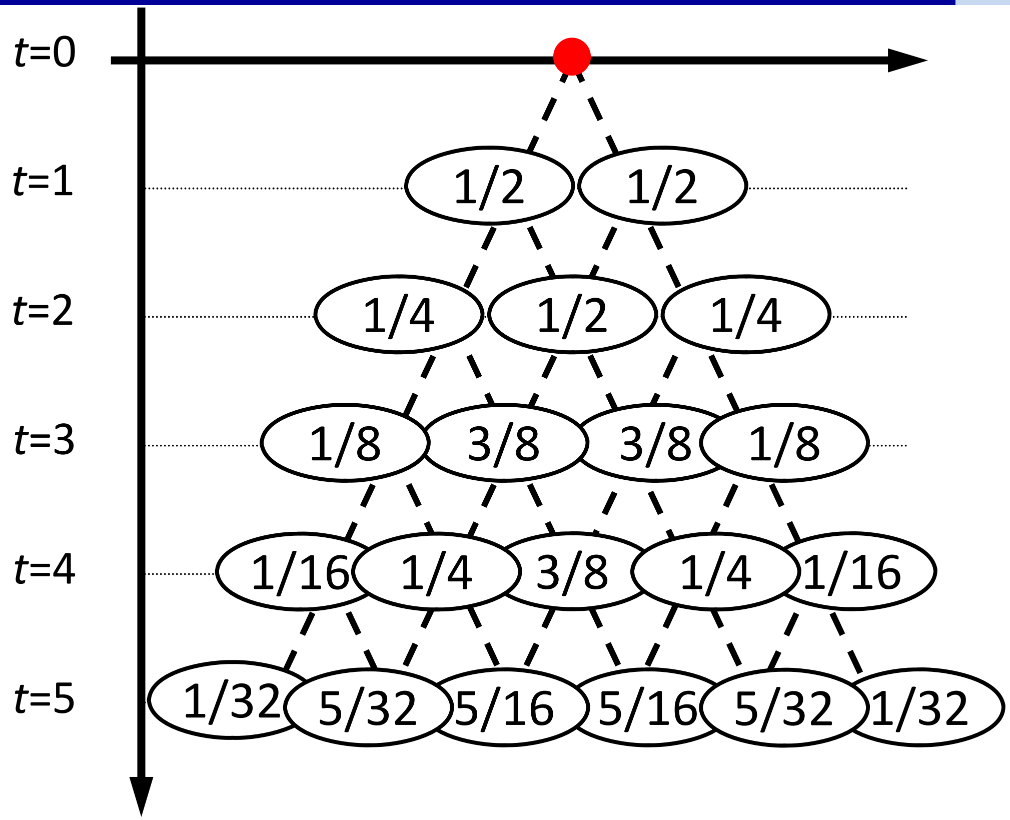
$$\langle x \rangle_t = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^{n} x_t^{(j)} = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^{n} \sum_{i=0}^{t} \Delta x_i^{(j)} = 0$$

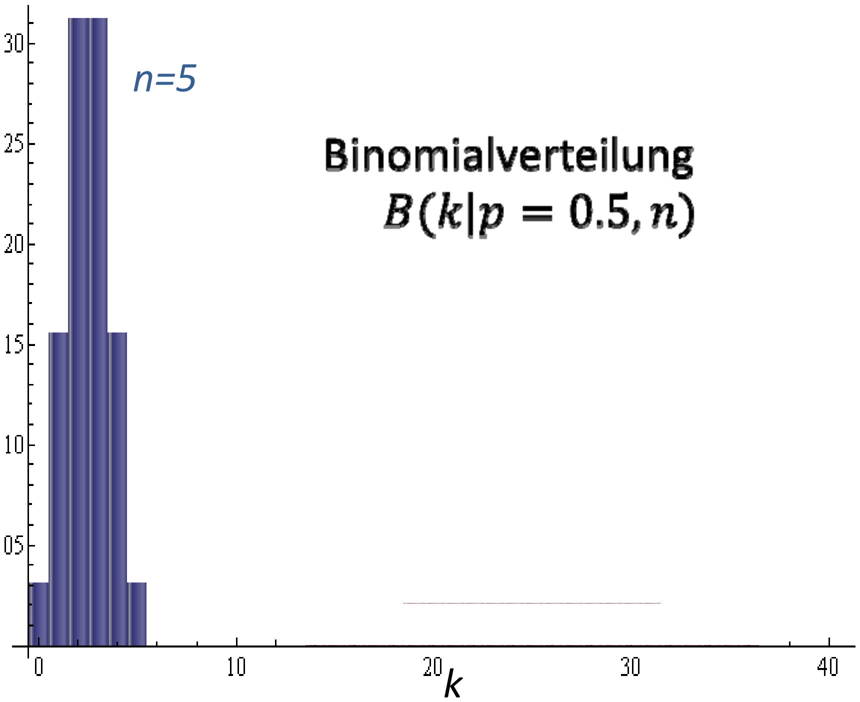
$$\langle x^2 \rangle_t = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^{n} \left(x_t^{(j)} \right)^2 = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^{n} \sum_{i=0}^{t} \sum_{m=0}^{t} \underbrace{\Delta x_i^{(j)} \Delta x_m^{(j)}}_{\delta_{im}} = t$$

$$\Rightarrow \langle x^2 \rangle_t = t$$ Diffusionsgesetz

- Random walk in 2 Dimensionen:







Für gerade Zahl von Zeitschritten t=2k und gerade Zahl von Gridpunkten $x_t = 2l$:

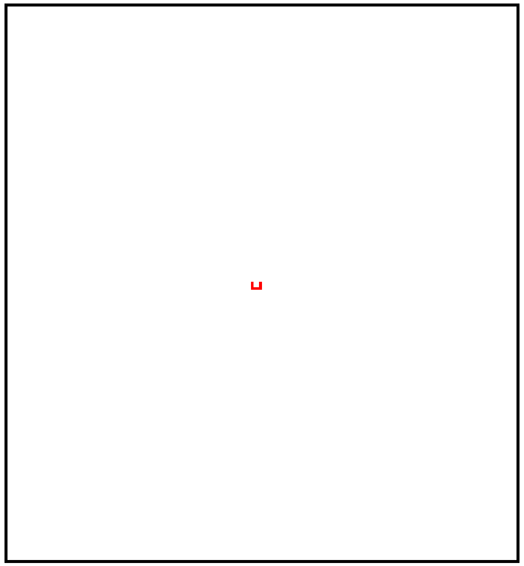
$$w(x,t) \equiv w(2l,2k) = \frac{2k!}{(k+l)!(k-l)!}\left(\frac{1}{2}\right)^{k+l}\left(\frac{1}{2}\right)^{k-l}$$

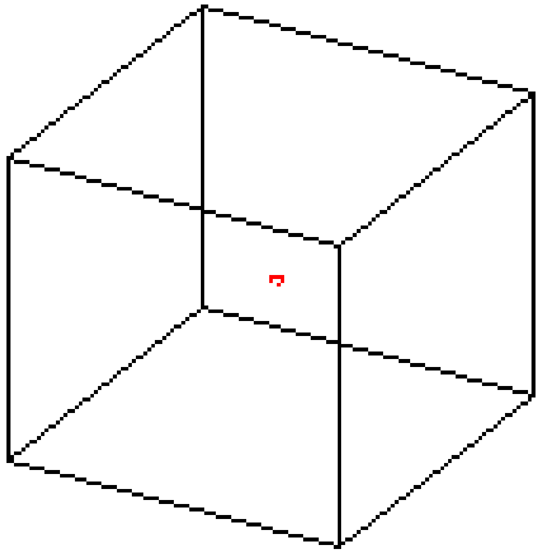
Für ungerade Zahl:

$$w(x,t) \equiv w(2l-1,2k-1) = \frac{(2k-1)!}{(k+l-1)!(k-l)!}\left(\frac{1}{2}\right)^{k+l-1}\left(\frac{1}{2}\right)^{k-l}$$

Äquivalenz von Trajektorien-Mittelwert und Zeitentwicklung der Wahrscheinlichkeitsdichten

Random walk: Computersimulationen in 2D und 3D

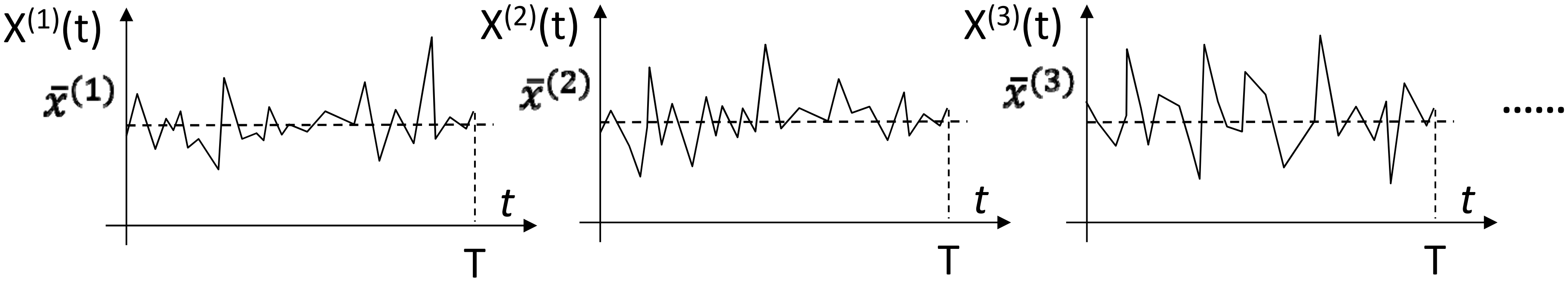




3.2 Eigenschaften stochastischer Prozesse

Stochastische Zeitentwicklung von kontinuierlichen Variablen

Ensemble von stochastischen Signalen



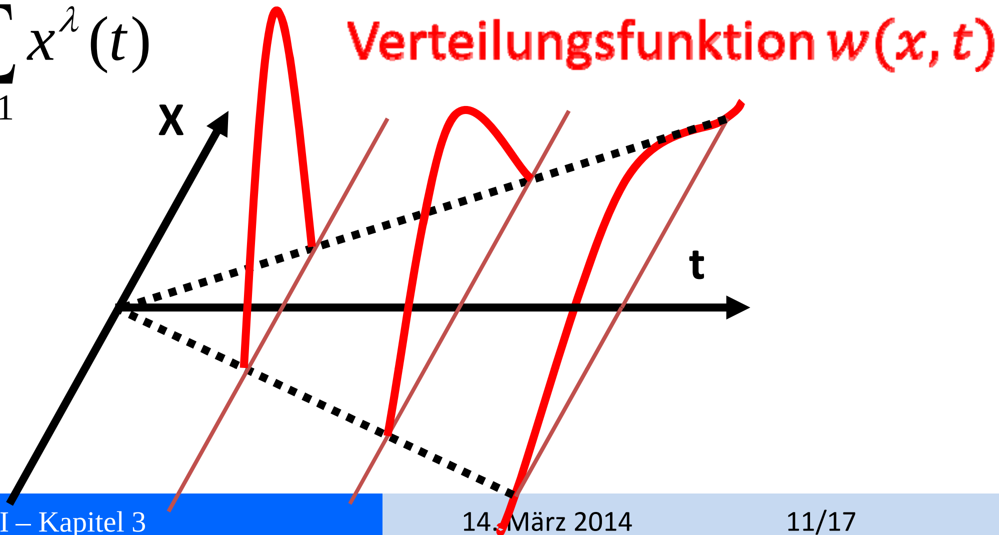
Zeitmittel: $$\overline{x}^{(i)} = \frac{1}{T}\int_0^T x^{(i)}(t)dt$$

Ensemblemittel: $$\langle x(t)\rangle = \frac{1}{n}\sum_{\lambda=1}^{n} x^{\lambda}(t)$$

Für $n \to \infty$:

Wahrscheinlichkeitsdichte $w(x,t)$

$$\langle x(t)\rangle = \int dx\, x\, w(x,t)$$



Definition: **stationärer Prozess**, wenn $w(x,t)=w(x)$

$$\Rightarrow \langle x(t) \rangle = const.$$

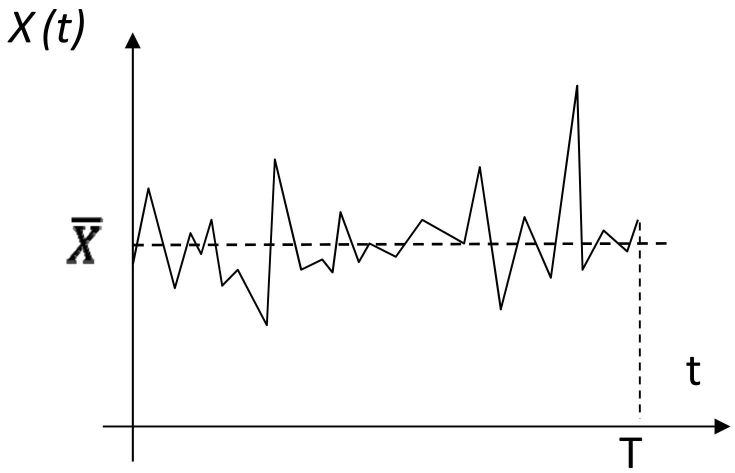
z.B.: Fluktuationen im Gleichgewicht

Definition: **ergodischer** Prozess,

wenn Zeitmittel = Ensemblemittel

$$\overline{x} \xrightarrow[T\to\infty]{} \langle x(t) \rangle$$

Fourierspektrum von Fluktuationen



Fourier Entwicklung

$$x(t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} a_n \exp(i\omega_n t) \qquad (0 \le t \le T) \quad \text{mit} \quad \omega_n = \frac{2\pi n}{T}$$

$$a_n = \frac{1}{T}\int_0^T x(t)\exp(-i\omega_n t)dt$$

Zeitmittel: $\bar{x} = a_0$

$$T \to \infty: \quad x(t) = \int_{-\infty}^{\infty} a(\omega) e^{i\omega t} d\omega, \quad a(\omega) = \frac{1}{\pi}\int_0^{\infty} x(t) e^{-i\omega t} dt$$

Physikalische Bedeutung für offene Systeme: Zeitskala der unbeobachteten Freiheitsgraden und Stärke der Kopplung an die Umgebung

Für stationäre Prozesse:

Ensemblemittel von a_n

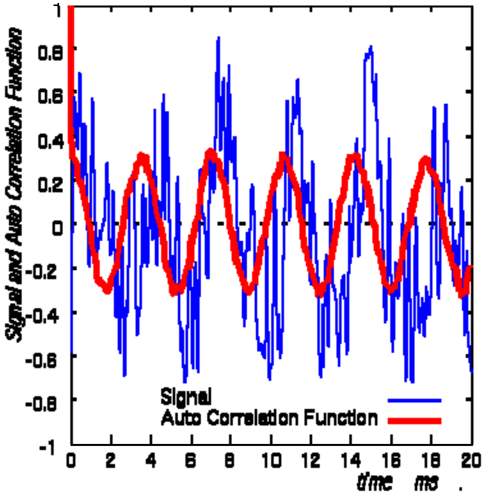
$$\langle a_n \rangle = \frac{1}{T}\int_0^T \underbrace{\langle x(t) \rangle}_{=\bar{x}} \exp(-i\omega_n t)dt = \langle a_n \rangle \delta_{n0} = \bar{x}$$

(Konstante)

Korrelationsfunktion:

$$c_{AB}(t,\tau) = \langle \mathrm{A}(\tau)\mathrm{B}(\tau+t) \rangle$$

$$\overline{c_{AB}(t)} = \frac{1}{T}\int_0^T d\tau \langle \mathrm{A}(\tau)\mathrm{B}(\tau+t) \rangle$$



Stationäres System:

$$\overline{c_{AB}(t)} = c_{AB}(t) = \mathrm{c}_{AB}(t,\tau=0)$$

Spektrum der Korrelationen:

$$\overline{c_{AB}(t)} = \frac{1}{T}\int_0^T d\tau \sum_{n=-\infty}^{\infty}\sum_{m=-\infty}^{\infty}\left\langle a_n^* b_m \right\rangle \exp\left[i(\omega_m - \omega_n)\tau + i\omega_m t\right]$$

$$= \sum_{n=-\infty}^{\infty}\sum_{m=-\infty}^{\infty}\left\langle a_n^* b_m \right\rangle \exp\left[i\omega_m t\right]\delta_{mn} = \sum_{n=-\infty}^{\infty}\left\langle a_n^* b_n \right\rangle \exp\left[i\omega_n t\right]$$

Spezialfall Autokorrelation: $A = B$

$$\overline{c_{AA}(t)} = \sum_{n=-\infty}^{\infty}\left\langle \left|a_n\right|^2 \right\rangle \exp\left[i\omega_n t\right]$$

Wiener-Khinchin Theorem:

Fourier-Transformation

$$C_{XX}(t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left\langle |a_n|^2 \right\rangle e^{i\omega_n t} \qquad \longleftrightarrow \qquad \left\langle |a_n|^2 \right\rangle = \frac{1}{2T} \int_{-T}^{T} C_{XX}(t) e^{-i\omega_n t} dt$$

Information über die Frequenzkomponenten, die den Prozess dominieren

$$C_{XX}(0) = \left\langle |x(0)|^2 \right\rangle = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left\langle |a_n|^2 \right\rangle$$

Kontinuierliches Limit im Limes $T \to \infty$:

$$C_{XX}(t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left\langle |a_n|^2 \right\rangle e^{i\omega_n t} \Rightarrow \frac{T}{2\pi} \int d\omega \left\langle |a_\omega|^2 \right\rangle e^{i\omega t}$$

$$C_{XX}(t) = \int_{-\infty}^{\infty} I_X(\omega) e^{i\omega t} d\omega$$

$$I_X(\omega) = \frac{T}{2\pi} \left\langle |a_\omega|^2 \right\rangle \qquad I_X(\omega): \quad \textbf{Spektrale Dichte der Fluktuationen}$$

$$I_X(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} C_{XX}(t) e^{-i\omega t}\, dt$$

Beispiel: stochastisch getriebener gedämpfter harmonischer Oszillator

$$\ddot{x} + \gamma \cdot \dot{x} + \omega_0^2 x = \underbrace{F(t)}_{\text{antreibende Kraft}} \qquad \text{(Masse: m=1)}$$

↓ Fourier Transformation

$$x(t) \to x(\omega), \quad F(t) \to F(\omega)$$

$$-\omega^2 x(\omega) + i\,\omega\,\gamma\, x(\omega) + \omega_0^2 x(\omega) = F(\omega)$$

$$\underbrace{\left\langle \left| x(\omega) \right|^2 \right\rangle}_{\sim I_X(\omega)} = \frac{1}{\left(\omega_0^2 - \omega^2\right)^2 + \omega^2 \gamma^2} \underbrace{\left\langle \left| F(\omega) \right|^2 \right\rangle}_{\sim I_F(\omega)}$$

↓ (inverse) Fourier Transformation

$$C_{xx}(t) = \int H(t+s) C_{FF}(s) ds \qquad \left(H(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\left(\omega_0^2 - \omega^2\right)^2 + \omega^2\gamma^2 \right)^{-1} e^{-i\omega t} d\omega \right)$$

Information über die unbeobachteten Freiheitsgrade $F(t)$ kann aus dem beobachteten Freiheitsgrad extrahiert werden.