Wh.: Ausgangsgleichung zur Berechnung der Kramers-Moyal-Koeffizienten

$$x_i(t+\tau) - x_i(t) \qquad \text{integrale Langevin-Gl.}$$

$$= \int_t^{t+\tau} dt' \left[h_i(\{\underline{x}(t')\},t') + D_{ij}(\{\underline{x}(t')\},t') f_j(t') \right]$$

1. Kramers-Moyal-Koeff.

$$K_i^{(1)} = \lim_{\tau \to 0} \frac{1}{\tau} \langle x_i(t+\tau) - x_i(t) \rangle \Big|_{\underline{x}(t)\ \text{scharf!}}$$

Entwickle dazu die Funktion h_i und D_{ij} um den scharfen Wert herum!

Ergebnis für $K_i^{(1)}$

hängt von der Ausführung des stochast. Integrals!

Stratonovich:

$$K_i^{(1)} = h_i(\{\underline{x}(t)\},t) \qquad \text{Drift-Koeffizient}$$

$$+ \frac{\Gamma}{2} \underbrace{\frac{\partial D_{ij}}{\partial x_k}}_{D_{ij,k}} (\{\underline{x}(t)\},t)\, D_{kj}(\{\underline{x}(t)\},t)$$

Dabei wurde benutzt:

$$\int_t^{t+\tau} dt' \, D_{ijk}(t') \int_t^{t'} dt'' \, D_{kl}(t'') \underbrace{\langle f_j(t') f_l(t'') \rangle}_{\Gamma \, \delta_{jl} \, \delta(t'-t'')}$$

Stratonovitch:

$$\int_t^{t'} dt'' \, a(t'') \, \delta(t'-t'') = \frac{1}{2} a(t')$$

Bemerkungen zum Ergebnis für $K_i^{(1)}$

i) Der 2. Term in $K_i^{(1)}$ ist nur ungleich Null, falls D_{ij} tatsächlich von $\underline{x}(t)$ abhängt, also nur für multiplikatives Rauschen !!

man nennt diesen Term dann:

"rauschinduzierter Drift"

ii) Speziell:

nicht-überdämpfte Langevin-Gl.

in einer Dimension:

$$\dot{v} = -\gamma v + f(t)$$

$\Rightarrow$ v ist die dyn. Variable

$$\Rightarrow \quad h_i \to -\gamma v$$
$$D_{ij} \to 1$$

$$\Rightarrow h_i^{(1)} = h_v^{(1)} = -\gamma v$$

Kein rauschinduzierter Drift!

iii) Geht man nochmal zurück zur Ausgangsgleichung,

d.h. zur integrierten Langevin-Gl.,
so erkennt man:

Der rauschinduzierte Drift resultiert
aus der Tatsache, dass

$$\left\langle \int_t^{t+\tau} dt' \, D_{ij}(\underline{x}(t'), t') f_j(t') \right\rangle$$

$$\neq 0$$ in der Stratonovich-Interpretation!

(iv) Was passiert mit dem neuinduzierten Drift, wenn wir Ito-Integrationsregeln anwenden? ??

Betrachte nochmal:

$$\int_t^{t+\tau} D_{ijk}(\{x(t)\}, t') \int_t^{t'} dt'' D_{kl}(\{x(t)\}, t'') \underbrace{\langle f_i(t') f_l(t'') \rangle}_{\Gamma \delta_{jl} \delta(t'-t'')}$$

Umgang mit der Delta-Funktion bei Ito

$$\int_t^{t'} dt'' \, a(t'') \, \delta(t'-t'') = 0$$

(s. z.B. Gardiner)

etwas formaler:

ohne Rauschmittel kann das Doppelintegral geschrieben werden als

$$\int_t^{t+\tau} D_{ijk}(\{x(t)\}, t') \underbrace{d W_j(t')}_{f_j(t') dt'}$$ — Wiener Increment

t'

$$\underbrace{\int_t D_{kl}(\{\underline{x}(t)\}, t'') \, dW_l(t'')}_{E_{kl}(t')}$$

also ist $E_{kl}(t') = 0$ für $t > t'$!

Daher nennt man
$E_{kl}(t')$ eine <u>nicht-antizipierende</u>
Funktion!

$$\Rightarrow \int_t^{t+\tau} \underbrace{D_{ijk}(\{\underline{x}(t)\}, t') E_{kl}(t')}_{\text{ebenfalls nicht-antizipierend!!}} \, dW_j(t')$$

Im Ito-Kalkül gilt:

$$\left\langle \int_{t_0}^{t} G(t') \, dW(t') \right\rangle = 0$$ falls G nicht antizipierend!

Erinnerung:
sei speziell $G(t') = W(t')$

$$\Rightarrow \left\langle \int_{t_0}^{t} W(t')\, dW(t') \right\rangle$$

$$\xrightarrow[\text{Diskretisieren}]{} \sum_m W_m \langle \underbrace{W_{m+1} - W_m}_{0} \rangle$$

$$\Rightarrow \text{in Itô: } \left\langle \int_t^{t+\tau} D_{ijk}(t')\, E_{kl}(t')\, dW_j(t') \right\rangle = 0 \,!!$$

Damit ergibt sich nach Itô:

$$K_i^{(1)}\Big|_{Itô} = h_i(\{x(t)\}, t)$$

2. Term (rauschinduzierter Drift) verschwindet!!

Wir legen uns als Physiker auf das Stratonovich Ergebnis fest!

Betrachte nun den 2. Kramers-Moyal-Koeffizienten
("(verallgemeinerten) Diffusionskoeffizienten")

Definition (entsprechend der früher angegebenen allgemeinen Definition)

$$K_{ij}^{(2)} = \frac{1}{2} \lim_{\tau \to 0} \frac{1}{\tau} \left\langle \left(x_i(t+\tau) - x_i(t)\right)\left(x_j(t+\tau) - x_j(t)\right) \right\rangle_{x(t)\ \text{scharf}}$$

Ausgangspunkt ist wieder die integrierte Langevin-Gl., wobei man wieder den Integranden um den scharfen Wert $\underline{x}(t)$ entwickelt

Benutze:

- Integrale, in denen nur $f(t)$ (gekoppelt mit einer deterministischen Funktion) vorkommt, verschwinden im Rauschmittel!

- Mehrfachintegrale, in denen $f(t)$ gar nicht vorkommt, sind proportional τ^m mit m Zahl der Integrale

~~es zählt~~ Damit sind nur Einfachintegrale relevant!

- Integrale, in denen $f(t)$ mehr als zweimal vorkommt:

Diese Integrale entkoppeln im Raummittel, falls $f(t)$ eine Gauß'sche Zufallsvariable ist!

z.B. $\langle f(t_1) f(t_2) \dots f(t_{2m-1}) \rangle = 0$

ungerade Zahl von f

gerade Zahl von f:

Es zerfällt alles in Doppelintegrale!

Man erhält:

$$\boxed{K_{ij}^{(2)} = \frac{\Gamma}{Z} D_{ik}(\{\underline{x}(t)\},t) \cdot D_{kj}(\{\underline{x}(t)\},t)}$$

Dieses Ergebnis ist <u>unabhängig</u> von der Integrationsregel (Ito oder Stratonovich)

Beachte schließlich (ohne Beweis)

Für gaußverteilte Zufallsvariable $f(t)$ folgt:

$$\boxed{K^{(n)}_{i_1 i_2 \dots i_n} = 0 \quad \text{für } n \geq 3}$$

I.9. Verbindung zur Fokker-Planck-Gleichung Kramers-Moyal-Entwicklung

Ziel: Relation zw. der verallgemeinerten Langevingleichung für Variablenvektor $\vec{x}(t)$ und einer Gleichung für die Wahrscheinlichkeitsdichte.

Betrachte der Einfachheit halber zunächst System mit einer dyn. Variable $x(t)$ (kontinuierlich)

Zur Erinnerung (Kap I.4)

Chapman-Kolmogorov-Gleichung (für Markov-Prozesse)

$$p(x_3,t_3|x_1,t_1) = \int dx_2 \; p(x_3,t_3|x_2,t_2)\, p(x_2,t_2|x_1,t_1)$$

bedingte Wahrsch.

Integral bzw. Summation über alle Zwischenzustände

$t_3 > t_2 > t_1$

Pauli-Master-Gleichung

entwickle dazu $p(x_3,t_3|x_2,t_2)$
nach $\Delta t = t_3 - t_2$
und nehme folgende Notation: $x_3 \to x$, $t_3 \to t$
$x_1 \to x'$, $t_1 \to t'$

$$\frac{\partial}{\partial t} p(x,t|x',t') = \int dx'' \Big[\underbrace{W(x;x'',t)}_{\text{Gewinnterm}} P(x'',t|x',t') - W(x'';x,t) \underbrace{P(x,t|x',t')}_{\text{Verlustterm}} \Big]$$

Übergangsrate = Wahrsch. pro Zeiteinheit

multipliziere mit $p(x',t')$ und
integriere über x'

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial t} p(x,t) = \int dx'' \Big[W(x;x'',t) P(x'',t) - W(x'';x,t) P(x,t) \Big]$$

Master-Gleichung!

Betrachte nochmal die Pauli-Master-Gl.

Man sieht: Die zeitl. Änderung der Übergangswahrsch. $p(x,t \mid x',t')$ wird im Prinzip durch die Funktionen (Übergangsrate) $W(x;x'',t)$

bei <u>allen</u> x'' bestimmt

<u>Idee nun:</u>

Um die momentane Änderung von $p(x,t \mid x',t')$ mit t zu erhalten, genügt es, den ersten Term im Integranden (Gewinnterm $\sim W(x;x'',t)$) nur für solche Werte von x''

zu betrachten, die "dicht" an x liegen!!

Wir machen also eine Taylorentwicklung in $\Delta = x - x''$ $\left(\Leftrightarrow x'' = x - \Delta\right)$

$\Rightarrow$ "Kramers-Moyal-Entwicklung"

Konkret:

$$W(x; x'', t)\, P(x'', t \mid x', t')$$

$$= W(x + \Delta - \Delta; x - \Delta, t)\, P(x - \Delta, t \mid x', t') \qquad (\Delta = x - x'')$$

$$= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!} \Delta^k \left(\frac{\partial}{\partial x}\right)^k \Big(W(x + \Delta; x, t)\, P(x, t \mid x', t') \Big) \Big|_{\delta = 0}$$

Setze dies in die Pauli-Master-Gleichung ein und ersetze

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx'' \underset{\substack{\uparrow \\ \text{bei festem } x}}{=} -\int_{\infty}^{-\infty} d\Delta = \int_{-\infty}^{\infty} d\Delta$$

und betrachte den Term mit $k=0$ separat

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x,t|x',t') = \int d\Delta \Big[\overbrace{W(x+\Delta; x,t)\, P(x,t|x',t')}^{k=0\text{-Term aus der Taylorentw.}} - W(\underbrace{x-\Delta}_{x''}; \overset{\text{Verlustterm}}{x,t})\, P(x,t|x',t') \Big]$$

$$+ \sum_{k\geq 1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!} \left(\frac{\partial}{\partial x}\right)^k \int d\Delta\, (\Delta)^k\, W(x+\Delta; x,t) \cdot P(x,t|x',t')$$

Betrachte den 1. Integral

$$\int d\Delta \Big[W(x+\Delta; x,t) - W(x-\Delta; x,t) \Big] P(x,t|x',t') = 0$$

es gilt, da von $-\infty$ bis ∞ integriert wird

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\Delta\, W(x+\Delta; x,t) = \int^{\infty} d\Delta\, W(x-\Delta; x,t)$$

$\Rightarrow$ Dieser Term ist Null!

also:

$$\frac{\partial}{\partial t} p(x,t \mid x',t') = \sum_{k\geq 1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!} \left(\frac{\partial}{\partial x}\right)^k \int_{-\infty}^{\infty} d\Delta \, (\Delta)^k \, w(x+\Delta; x,t)\, p(x,t \mid x',t')$$

Definiere:

$$\tilde{K}^{(n)} = \frac{1}{n!} \int d\Delta \, \Delta^n \, w(x+\Delta; x,t) = K^{(n)}(x,t)$$

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial t} p(x,t \mid x',t') = \sum_{n\geq 1}^{\infty} \left(-\frac{\partial}{\partial x}\right)^n \tilde{K}^{(n)}(x,t)\, p(x,t \mid x',t')$$

Zeige nun, dass die Koeffizienten $\tilde{K}^{(n)}(x,t)$ unseren bereits in Kap. I 8. definierten Koeffizienten $K^{(n)}$ entsprechen !

$$K^{(n)}(x,t) = \frac{1}{n!} \lim_{\tau \to 0} \frac{1}{\tau} \left\langle \left(x(t+\tau) - x(t)\right)^n \right\rangle \Big|_{x(t)}$$

(eine dyn. Variable)