

Josef Honerkamp

# **Stochastische Dynamische Systeme**

Konzepte, numerische Methoden,  
Datenanalysen



# Inhalt

1	Stochastische Prozesse und komplexe Systeme .....	1
2	Zufallsvariablen .....	5
2.1	Wahrscheinlichkeitstheoretische Grundbegriffe.....	5
2.2	Charakteristische Größen einer Verteilung: Momente, Quantile und Kumulanten .....	12
2.3	Addition von stochastischen Variablen, der zentrale Grenzwertsatz.....	16
2.4	Die Erzeugung von Zufallszahlen .....	19
2.4.1	Die Erzeugung von gleichverteilten Zufallszahlen .....	19
2.4.2	Die Erzeugung von Zufallszahlen einer bestimmten Verteilung durch Koordinatentransformationen.....	21
2.4.3	Erzeugung von Zufallszahlen durch Dimensionsreduktion.....	23
2.4.4	Die Verwerfungsmethode .....	26
3	Analyse stationärer Daten.....	29
3.1	Messung von Momenten .....	29
3.1.1	Stichproben, Schätzfunktionen und Standardfehler.....	29
3.1.2	Anwendung: Die Monte-Carlo-Integration .....	34
3.1.3	Fehlerfortpflanzung .....	39
3.2	Vergleich von Meßreihen .....	41
3.2.1	Allgemeines zur Prüfung statistischer Hypothesen .....	41
3.2.2	Der Test auf Gleichheit der Mittelwerte zweier Meßreihen, der Studentsche $t$ -Test .....	43
3.2.3	Der Test auf Gleichheit der Varianzen zweier Meßreihen, der $F$ -Test...	44
3.2.4	Der $\chi^2$ -Test .....	46
3.2.5	Der Kolmogorov-Smirnov-Test.....	48
3.3	Das Prinzip der maximalen Wahrscheinlichkeit (die Maximum-Likelihood-Methode).....	49
3.4	Lineare Regressionsverfahren .....	51
3.4.1	Das Maximum-Likelihood-Prinzip und die Methode der kleinsten Quadrate .....	51
3.4.2	Bestimmung der Parameter mit der Methode der kleinsten Quadrate ...	52
3.4.3	Bewertung der Anpassung und Vorgehen bei Unbekanntheit der Fehler.....	57

3.4.4	Konfidenzgebiete für die Parameter .....	58
3.5	Statistische Abhängigkeiten .....	61
3.5.1	Die bedingte Wahrscheinlichkeit .....	61
3.5.2	Test auf statistische Unabhängigkeit .....	62
3.5.3	Kovarianz und Korrelation .....	63
4	Grundlegende Gleichungen für stochastische Prozesse .....	65
4.1	Markov-Prozesse .....	65
4.1.1	Zufallsprozesse, zeitabhängige Zufallsvariablen .....	65
4.1.2	Das Gaußsche weiße Rauschen .....	66
4.1.3	Die Markov-Bedingung .....	68
4.1.4	Die Chapman-Kolmogorov-Gleichung .....	69
4.1.5	Zwei-Zeit-Momente und Kovarianzfunktionen .....	70
4.1.6	Beispiele .....	71
4.2	Die Master-Gleichung .....	73
4.3	Die Fokker-Planck-Gleichung .....	74
4.3.1	Die Herleitung der Gleichung .....	74
4.3.2	Die adjungierte Fokker-Planck-Gleichung .....	79
4.4	Stochastische Differentialgleichungen .....	80
4.4.1	Die Langevin-Gleichung für die Brownsche Diffusion als ein Beispiel für eine stochastische Differentialgleichung .....	80
4.4.2	Die Ito-Formel .....	81
4.4.3	Additives und multiplikatives Rauschen .....	82
4.4.4	Äquivalenz von Fokker-Planck-Gleichung und Langevin-Gleichung ....	86
5	Master-Gleichungen .....	89
5.1	Verschiedene Anwendungen der Master-Gleichung .....	89
5.2	Ränder und Randbedingungen .....	92
5.3	Analytische Verfahren zur Lösung der Master-Gleichung .....	94
5.3.1	Gleichungen für die Momente .....	94
5.3.2	Eine Gleichung für die erzeugende Funktion .....	96
5.3.3	Die Spiegelbildmethode .....	100
5.4	Berechnung einer stationären Verteilung .....	101
5.5	Die mittlere Zeit bis zum Erreichen einer Schwelle, das "first passage" Problem .....	104
5.5.1	Dichteverteilung und Momente für die Zufallszeit $T$ .....	104
5.5.2	Gleichungen für die Momente .....	106
6	Numerische Verfahren zur Lösung von Master-Gleichungen .....	111
6.1	Berechnung der Dichte: Die Master-Gleichung als Differentialgleichung .....	111
6.2	Simulation von Trajektorien .....	114
6.2.1	Die Standardmethoden mit festem bzw. stochastischem Zeitschritt ....	114

6.2.2	Varianten, Einteilung der Übergänge in verschiedene Klassen.....	117
6.2.3	Beispiele .....	120
6.3	Simulation stationärer Verteilungen und Erwartungswerte .....	125
6.4	Monte-Carlo-Methoden in der Statistischen Mechanik der Gleichgewichtszustände .....	128
6.4.1	Die Idee der Monte-Carlo-Methode .....	128
6.4.2	Konstruktion einer Master-Gleichung .....	129
6.4.3	Besonderheiten .....	130
6.4.4	Beispiel: Das zweidimensionale Ising-Modell .....	131
7	Stochastische Differentialgleichungen: Analytische Verfahren .....	135
7.1	Beispiele stochastischer Differentialgleichungen aus der Dynamik polymerer Fluide .....	135
7.2	Ränder des Zustandsraumes und Randbedingungen .....	143
7.3	Exakte Lösungen für einen diffusiven Prozeß mit linearem Driftterm und additivem Rauschen .....	146
7.3.1	Momente und Dichteverteilung .....	146
7.3.2	Beispiele und Anwendungen .....	151
7.3.3	Die Zwei-Zeit-Kovarianzfunktion .....	155
7.4	Stationäre Lösungen der Fokker-Planck-Gleichung .....	157
7.4.1	Die stationäre Dichtefunktion und ihre Extrema .....	157
7.4.2	Beispiele für den Fall des additiven Rauschens .....	160
7.4.3	Stationäre Dichtefunktionen bei multiplikativem Rauschen, Rauschen-induzierte Übergänge .....	162
7.5	Zufallszeiten bis zum Erreichen einer Schwelle .....	166
7.5.1	Die Dichtefunktion für die Zufallszeit, Gleichungen für die Momente ..	166
7.5.2	Beispiele: Zeitverteilungen und mittlere Zeiten für Wiener- und Ornstein-Uhlenbeck-Prozeß .....	169
7.5.3	Anwendung: Das Entweichen aus einem Einzugsbereich eines bistabilen Systems .....	171
8	Numerische Methoden für stochastische Differentialgleichungen .....	175
8.1	Die Entwicklung nach der Schrittweite $h$ .....	175
8.2	Verfahren für die Schätzung einer Meßgröße $\langle M(X(t)) \rangle$ .....	178
8.2.1	Ein Verfahren niedrigster Ordnung, das Euler-Verfahren .....	178
8.2.2	Ein Verfahren höherer Ordnung für additives Rauschen, das Heun-Verfahren .....	179
8.2.3	Andere Verfahren zur Schätzung von $\langle M(X(t)) \rangle$ .....	180
8.2.4	Allgemeine Bemerkungen zu den Schätzungen der Meßwerte .....	180
8.2.5	Beispiele .....	181
8.3	Stochastische Prozesse mit Zwangsbedingungen .....	183
8.4	Numerische Berechnung stationärer Momente .....	186
8.5	Die mittlere quadratische Konvergenz .....	187

8.6	Numerische Berechnung der mittleren Zeit für das Erreichen einer Schwelle .....	191
8.6.1	Modifiziertes Euler-Verfahren mit linearer Konvergenz .....	191
8.6.2	Die Berechnung der Größe $f(x', x, h)$ .....	192
8.6.3	Beispiele .....	193
9	Funktionalintegrale in der Stochastik .....	197
9.1	Funktionalintegrale .....	197
9.2	Höhere Momente und deren erzeugendes Funktional .....	201
9.3	Die Response-Funktion: die lineare Antwort eines Systems auf äußere Kräfte .....	203
9.3.1	Alternative Darstellungen des erzeugenden Funktionals .....	203
9.3.2	Einführung der Response-Funktion .....	205
9.4	Gaußsche Prozesse und Gaußsche Funktionalintegrale .....	208
9.4.1	Das erzeugende Funktional der höheren Momente für Gaußsche Prozesse .....	208
9.4.2	Zwei-Zeit-Kovarianzfunktion und Response-Funktion .....	211
10	Störungstheorie und einige Näherungen, die darüber hinausgehen .....	213
10.1	Störungstheorie .....	213
10.1.1	Die Idee der störungstheoretischen Entwicklung .....	213
10.1.2	Beispiel und Einführung der Feynman-Graphen .....	214
10.1.3	Störungstheorie ohne Funktionalintegrale .....	221
10.2	Verschiedene Kategorien von Graphen .....	224
10.2.1	Kumulanten als Summe der zusammenhängenden Graphen .....	224
10.2.2	Das erzeugende Funktional der Vertexfunktionen .....	227
10.3	Nichtstörungstheoretische Methoden .....	231
10.3.1	Die Idee der Näherungsmethoden, dargestellt am Beispiel eines polynomialen Driftterms .....	232
10.3.2	Die Gaußsche Näherung .....	233
10.3.3	Die Schwinger-Dyson-Näherung .....	235
10.3.4	Anwendungen der Gaußschen und der Schwinger-Dyson-Näherung .....	239
11	Analyse von Zeitreihen: Vorhersage, Filtration und Modellidentifikation .....	243
11.1	Bedingte Schätzwerte .....	244
11.1.1	Die Minimierung des quadratischen Fehlers .....	244
11.1.2	Der lineare Ansatz für die Schätzfunktion .....	245
11.1.3	Beispiele .....	248
11.2	Filter .....	251
11.3	Vorhersagen, ARMA-Prozesse .....	254
11.3.1	Der lineare Ansatz für ein Vorhersage-Modell .....	254
11.3.2	Kausale und invertierbare ARMA-Prozesse .....	255

11.3.3	Autokovarianzfunktionen und Spektraldichten von ARMA-Prozessen...	258
11.3.4	Der Innovationsalgorithmus .....	261
11.3.5	ARIMA- und SARIMA-Prozesse .....	265
11.3.6	Modelle mit Transfer- oder Gedächtnisfunktionen .....	266
11.4	Das Kalman-Filter .....	267
11.4.1	Die Idee des Kalman-Filters .....	267
11.4.2	Beispiel .....	270
11.4.3	Beweis des Algorithmus .....	271
11.4.4	Das erweiterte Kalman-Filter .....	273
11.5	Schätzungen der Kovarianzfunktion und der Spektraldichte bei gegebener Zeitreihe .....	274
11.5.1	Schätzfunktionen für die Autokovarianzfunktion $C(k)$ und die Autokorrelationsfunktion .....	274
11.5.2	Die Schnelle Fourier-Transformation (FFT) .....	275
11.5.3	Schätzung der Spektraldichte einer Zeitreihe durch Fourier-Transformation der Zeitreihe .....	277
11.6	Schätzungen der Parameter für ARMA-Prozesse und Transfermodelle..	281
11.6.1	Schätzungen der Yule-Walker-Parameter für einen reinen $AR(p)$ -Prozeß	282
11.6.2	Schätzung der Parameter eines MA-Prozesses mit Hilfe des Innovationsalgorithmus .....	286
11.6.3	Die Methode der kleinsten Quadrate für die Schätzung der Parameter eines allgemeinen ARMA- oder Transfermodells .....	288
11.6.4	Probleme in der Praxis und Beispiele .....	293
12	Punktprozesse .....	299
12.1	Verteilungs- und Kumulantenfunktionen .....	299
12.2	Das erzeugende Funktional für Momente .....	302
12.2.1	Beispiele für Momente .....	302
12.2.2	Das erzeugende Funktional .....	305
12.3	Wartezeiten .....	308
12.4	Gauß-Poisson-Prozesse .....	310
12.5	Erneuerungsprozesse .....	312
Tafeln	.....	317
Referenzen und weiterführende Literatur	.....	327
Register	.....	333