Herleitungen zum Seminarvortrag “Mikroskopische Herleitung”

Felix Lucka

01.09. 2008

1 Diffusionsgleichung, informelle Herleitung

Man geht bei der Herleitung zunächst von der Gültigkeit einer Kontinuitätsgleichung aus:

$$\frac{\partial\varphi}{\partial t}(x,t) + \nabla j(x,t) = 0 \tag{1}$$

$$j(x,t) = \varphi(x,t) \cdot v(x,t) \tag{2}$$

Ferner nimmt an (aus empirischen Beobachtungen motiviert), dass der Fluss immer engegengesetzt zum Gradienten der Konzentration steht:

$$j(x,t) = -D(\varphi(x,t), x)\nabla\varphi(x,t) \tag{3}$$

Kombiniert man beide Ausdrücke so folgt:

$$\frac{\partial\varphi}{\partial t} = \nabla\left(D(\varphi)\nabla\varphi\right) \tag{4}$$

2 Itô’s Formel, informelle Herleitung

Sei $X(t)$ ein stochastischer Prozess für den gilt:

$$dX(t) = a(t)\,dt + b(t)\,dB_t \tag{5}$$

Sein nun $f(x,t)$ eine zweimal stetig part. differenzierbare Funktion. Wir entwickeln $f(x,t)$ in eine Taylorreihe in x und t:

$$df = f_x dx + f_t dt + \frac{1}{2} f_{xx} dx^2 + \cdots \tag{6}$$

und substituieren (5) für dx

$$= f_x\,(a\,dt + b\,dB_t) + f_t dt + \frac{1}{2} f_{xx}\left(a^2\,dt^2 + 2\,a\,b\,dt\,dB_t + b^2\,dB_t^2\right) + \cdots \tag{7}$$

$$\approx \left[f_t + a\,f_x + \frac{b^2}{2} f_{xx}\right]\,dt + b\,f_x\,dB_t \tag{8}$$

da man zeigen kann, dass $dB_t^2 \xrightarrow{dt \to 0} \mathbb{E}\left[dB_t^2\right] = dt$

3 Mikroskopische Herleitung

Wir betrachten eine beliebige Funktion $f\,(x,t) \in C_b^2(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}_+)$, ausgewertet entlang einer individuellen Partikeltrajektorie $\left(X_N^k(t)\right)$. Unter Ausnutzung der SDE für das Differenzial gilt für die zeitliche Evolution:

$$f\left(\left(X_N^k(t)\right), t\right) = f\left(\left(X_N^k(0)\right), 0\right) + \int_0^t \left\{df\left(\left(X_N^k(s)\right), s\right)\right\} ds \tag{9}$$

Dabei gilt für das Differenzial df nach Itô's Formel:

$$\begin{aligned} df = &\left[\frac{\partial}{\partial s} f + F\left[X_N(s)\right] \nabla f + \frac{\sigma_N^2}{2} \Delta f\right] \cdot ds \\ &+ \sigma_N \cdot \nabla f \cdot dB_s \end{aligned} \tag{10}$$

mit:

$$F^N\left[X_N(s)\right] = \left\{\alpha\left[\nabla V_1^{agg} * \epsilon_N(s)\right] - \gamma\left[\nabla V_N^{rep} * \epsilon_N(s)\right]\right\} \tag{11}$$

Eingesetzt in (9) ergibt sich:

$$\begin{aligned} f\left(X_N(t), t\right) = &f\left(X_N(0), 0\right) \\ &+ \int_0^t F\left[X_N(s)\right]\left(X_N^k(s)\right) \nabla f\left(X_N^k(s), s\right) ds \\ &+ \int_0^t \left[\frac{\partial}{\partial s} f\left(X_N^k(s), s\right) + \frac{\sigma_N^2}{2} \Delta f\left(X_N^k(s), s\right)\right] ds \\ &+ \sigma_N \int_0^t \nabla f\left(X_N^k(s), s\right) dW_s^k \end{aligned} \tag{12}$$

Unter Ausnutzung der $\langle \cdot, \cdot \rangle$ - Notation ergibt sich so für die zeitliche Evolution des empirischen Maßes $\epsilon_N(t)$, in schwacher Formulierung:

$$\begin{aligned}
\langle \epsilon_N(t), f(\cdot, t) \rangle = & \frac{1}{N} \sum_{k=1}^{N} f\left(X_N^k(t), t\right) \\
= & \langle \epsilon_N(0), f(\cdot, 0) \rangle && \text{(13a)} \\
& + \int_0^t \langle \epsilon_N(s), [F[X_N(s)](\cdot)\nabla f(\cdot, s)] \rangle \, ds && \text{(13b)} \\
& + \int_0^t \left\langle \epsilon_N(s), \left[\frac{\partial}{\partial s} f(\cdot, s) + \frac{\sigma_N^2}{2} \Delta f(\cdot, s)\right] \right\rangle ds && \text{(13c)} \\
& + \int_0^t \langle \epsilon_N(s), \sigma_N \nabla f(\cdot, s) \rangle \, dW_s^k && \text{(13d)}
\end{aligned}$$

Term (13b) beschreibt die modellierte Interaktion und ist i.a. nichtlinear, (13c) beschreibt die gewöhnliche Diffusion deterministisch über den infinitesimalen Generator des Wiener-Prozesses, den Laplaceoperator. Term (13d), ein Martingalterm (siehe [3]), stellt die einzige explitzite Quelle von Stochastizität in der Gleichung dar. Wir werden zunächst zeigen, dass der letzte Term im Limes großer Systeme ($N \to \infty$) (nach Wahrscheinlichkeit) verschwindet:

$$\begin{aligned}
M_N^k(f, t) := & \int_0^t \langle \epsilon_N(s), \sigma_N \nabla f(\cdot, s) \rangle \, dW_s^k && \text{(14)} \\
= & \frac{\sigma_N}{N} \int_0^t \sum_{k=1}^{N} \nabla f\left(X_N^k(s), s\right) dW_s^k && \text{(15)}
\end{aligned}$$

Wir betrachten nun die *quadratische Variation* .Die Abschätzung verwendet an der mit $(*)$ gekennzeichneten Stelle eine Form der Doob'schen Ungleichung.

$$\begin{aligned}
\mathbb{E}\left[\sup_{t \le T} |M_N(f, t)|\right]^2 \le & \, \mathbb{E}\left[\sup_{t \le T} |M_N(f, t)|^2\right] \\
\overset{(*)}{\le} & \, 4\mathbb{E}\left[|M_N(f, T)|^2\right] \\
\le & \, \frac{4\sigma_N^2}{N^2} \sum_{k=1}^{N} \mathbb{E}\left[\int_0^T |\nabla f\left(X_N^k(s), s\right)|^2 ds\right] \\
\le & \, \frac{4\sigma_N^2 \|\nabla f\|_\infty^2 T}{N} && \text{(16)}
\end{aligned}$$

Die quadratische Variation des Terms verschwindet nach (16) für $N \to \infty$, d.h. die Verteilung konvergiert gegen eine δ-Distributuion an der Stelle des Erwartungswertes, also null.

Für das Repulsionspotenzial gilt:

$$\lim_{N\to\infty} V_N^{rep}\left(X_N^k(s), s\right) = \delta\left(X_N^k(s), s\right) \tag{17}$$

Die Stärke der Brownschen Bewegung soll ebenfalls einen Grenzwert annehmen:

$$\lim_{N\to\infty} \sigma_N = \sigma_\infty \geq 0 \tag{18}$$

Als formelle Konsequenz aus der schwachen Konvergenz $\lim_{N\to\infty} \langle \epsilon_N(t), f\rangle = \langle \rho(t) \cdot d\lambda(x), f\rangle$ und (17) erhalten wir (für die Herleitungen und weitergehende mathematische Betrachtungen siehe [1]):

$$\lim_{N\to\infty} \left[\epsilon_N(t) * V_N\right](x) = \rho(x,t) \tag{19}$$

$$\lim_{N\to\infty} \left[\epsilon_N(t) * \nabla V_N^{rep}\right](x) = \nabla\rho(x,t) \tag{20}$$

$$\lim_{N\to\infty} \left[\epsilon_N(t) * \nabla V_1^{agg}\right](x) = \left[\rho(t)\cdot d\lambda * \nabla V_1^{agg}\right](x) \tag{21}$$

Die Durchführung der Grenzübergänge in (13a) bis (13d) führt auf:

$$\begin{aligned}
&\int_{\mathbb{R}^d} f(x,t)\rho(x,t)\,dx \\
&\qquad = \int_{\mathbb{R}^d} f(x,0)\rho(x,0)dx \\
&\qquad\quad + \int_0^t \int_{\mathbb{R}^d} \left[\alpha(\nabla V_1^{agg} * \rho(\cdot,s))(x) - \gamma\nabla\rho(x,s)\right]\nabla f(x,s)\rho(x,s)\,dx\,ds \\
&\qquad\quad + \int_0^t \int_{\mathbb{R}^d} \left[\frac{\partial}{\partial s} f(x,s) + \frac{\sigma_\infty^2}{2}\Delta f(x,s)\right]\rho(x,s)\,dx\,ds
\end{aligned} \tag{22}$$

Dies ist eine schwache Formulierung der folgenden PDE für die Dichteverteilung $\rho(x,t)$:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t}\rho(x,t) &= \frac{\sigma_\infty^2}{2}\Delta\rho(x,t) + \gamma\,\nabla\cdot(\rho(x,t)\nabla\rho(x,t)) \\
&\quad - \alpha\,\nabla\cdot\left[\rho(x,t)(\nabla V_1^{agg} * \rho(x,t))(x)\right], \quad x\in\mathbb{R}^d,\ t\geq 0,
\end{aligned} \tag{23}$$

$$\rho(x,0) = \rho_0(x), \quad x\in\mathbb{R}^d \tag{24}$$

Formt man $\nabla\cdot(\rho(x,t)\nabla\rho(x,t))$ um so ergibt sich:

$$\nabla\cdot(\rho(x,t)\nabla\rho(x,t)) = \frac{1}{2}\nabla\cdot\left[(2\rho(x,t))\nabla\rho(x,t)\right] = \frac{1}{2}\nabla\cdot\left[\nabla\rho(x,t)^2\right] = \frac{1}{2}\Delta\rho(x,t)^2$$

Gleichung (24) erhält dann die Form einer verall. PME mit m = 2.

Literatur

[1] Daniela Morale, Vincenzo Capasso, Karl Oelschläger: An interacting particle system modelling aggregation behavior: from individuals to populations, *J. Mathematical Biology, Volume 50, Number 1*, 2005.

[2] Robert Philipowski: Stochastic Interacting Particle Systems and Nonlinear Partial Differential Equations from Fluid Mechanics, *Dissertation, Bonn*, 2007.

[3] Friedman, A.: Stochastic Differential Equations and Application. Vols. I and II *Academic Press*, London, 1975