Интегрирование случайных дифференциальных уравнений на компьютере

Статья
в

Международный журнал современной физики C · Ноябрь 2002
DOI: 10.1142/S0129183102004042

ИНТЕГРИРОВАНИЕ СЛУЧАЙНЫХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ НА КОМПЬЮТЕРЕ

РИККАРДО МАННЕЛЛА
Dipartimento di Fisica, Universit`
a di Pisa, and Istituto Nazionale Fisica della Materia, UdR Pisa
Via Buonarroti 2, 56100 Пиза, ИТАЛИЯ
Электронная почта: riccardo.mannella@df.unipi.it
…чено (дата получения)
…смотрено (дата пересмотра)

Представлено краткое введение в моделирование стохастических дифференциальных уравнений.Изучаются …итмы для моделирования редких флуктуаций - тема, представляющая интерес в свете недавних теоретических работ по оптимальным траекториям. …е будут обсуждены проблемы, связанные с обработкой границ и коррелированного шума.

Ключевые слова
: Численное интегрирование; Стохастические дифференциальные уравнения; Большие флуктуации;
Коррелированный шум.

1. Введение

Случайные процессы, вводимые для моделирования множества различных физических ситуаций, широко распространены в современной науке. К сожалению, наиболее распространенной ситуацией является то, что “решение” некоторых величин, связанных со стохастической моделью, не может быть найдено теоретически: тогда обычно обращаются к моделированию, аналоговому или цифровому, интересующей системы. Недавно появился очень полный обзор аналоговых методов, и заинтересованный читатель может обратиться к нему за дополнительной информацией [1]. Здесь мы концентрируемся на моделировании случайных процессов на компьютере (цифровое моделирование), уделяя особое внимание моделированию редких колебаний. Редкие флуктуации - это флуктуации, которые уводят стохастическую систему очень далеко от фазового пространства, которое система исследует большую часть времени. Возникновение редкой флуктуации можно связать с некоторым накоплением энергии активации (можно представить энергию, необходимую для преодоления потенциального барьера, как при химической реакции). Природа редких флуктуаций такова, что у нас должны быть алгоритмы, которые корректно исследуют хвосты функций распределения: это так, потому что “редкая флуктуация” распространяется на область низкой вероятности. Мы должны быть в состоянии правильно остановить нашу симуляцию, когда редкая флуктуация, которую мы имитируем, достигает заданной границы в фазовом пространстве. Мы должны оптимизировать, по возможности, наши алгоритмы для ситуаций, когда системе не хватает детального баланса, например, когда случайный процесс, управляющий системой, не является белым. Наконец, у нас должны быть быстрые и очень надежные генераторы псевдослучайных чисел, способные выдавать нам очень длинные случайные последовательности. Мы попытаемся рассмотреть все эти проблемы в данной статье. За дальнейшими комментариями и ссылками заинтересованный читатель может обратиться, среди прочего, к [2,3,4,5,7].

2. Базовый алгоритм

Стохастическое дифференциальное уравнение имеет общий вид

$$\dot{x}_{\text{я}} = f_{\text{я}}(x) + g_{\text{я}}(x)\xi(t), \quad \langle\xi(t)\rangle = 0, \quad \langle\xi(t)\xi(s)\rangle = \delta(t - s), \qquad (1)$$

где мы предполагаем, что случайный процесс ξ является гауссовым и что присутствует только одно случайное воздействие. В дальнейшем мы называем h шагом интегрирования по времени и используем исчисление Стратоновича [4]. Простой подход к решению уравнения 1 состоит в том, чтобы формально интегрировать его, затем использовать разложение Тейлора вокруг точки t = 0, чтобы повторно найти различные вклады [6]. Ограничение обсуждения одномерным модели, уравнение имеет вид

$$\dot{x} = f(x) + g(x)\xi(t) \qquad (2)$$

Формальная интеграция дает

$$x(h) - x(0) = \int_0^h \left(f(x(t)) + g(x(t))\xi(t)\right) dt \qquad (3)$$

Определить $f_0 \equiv f(x(0))$ $g_0' \equiv \left.\frac{\partial g(x(t))}{\partial x(t)}\right|_{x=x(0)}$ и так далее. Под разложением Тейлора подразумевается, что функции расширяются как $f_{\text{т}} = f_0 + (x(t) - x(0))f_0' + \dots$. Самый простодушный низший порядок в h, по-видимому,

$$x(h) - x(0) = \int_0^h (f_0 + g_0\xi(t))\, dt = hf_0 + g_0\int_0^h \xi(t)dt.$$

(4)

Мы увидим, что это неправильный самый низкий порядок в h. На данный момент обратите внимание , что на r.h.s. существует так называемый “стохастический интеграл”.

$$Z_1(h) \equiv \int_0^h \xi(t)dt \qquad (5)$$

который является интегралом по временному диапазону (0, h) случайного процесса $\xi(t)$. Этот интеграл является случайной переменной, и интегрирование происходит при сложении некоторых гауссовых переменных: таким образом, $Z_1(h)$ сама по себе является гауссовой переменной, или, другими словами, ее распределение вероятностей является гауссовым распределением. Это означает , что вероятностное распределение $Z_1(h)$ определяется после того, как известны среднее значение и стандартное отклонение распределения. Тогда простодушный числовой интегратор был бы, на каждом временном шаге:

- сгенерировать случайную гауссову переменную с соответствующим средним и стандартным значением отклонение (для “имитации” стохастического интеграла);
- подставьте стохастический интеграл в r.h.s. уравнения. 4 с помощью этого случайного переменная;
- интегрируйте уравнение, используя любой стандартный интегратор, допустимый для детерминированных дифференциальные уравнения.

Как мы можем определить статистические свойства $Z_1(h)$? Нам нужно только его среднее значение и его стандартное отклонение. Использование ... чтобы указать статистические средние значения,

$$Z_1 = \int_0^h \xi(s)\, ds = 0 \qquad (6)$$

$$Z_1^2(h) = \int_0^h \int_0^h \xi(s)\xi(t)\, dsdt = \int_0^h \int_0^h \delta(t - s)\, dsdt = \int_0^h ds = h. \qquad (7)$$

Если мы введем стохастическую гауссову переменную со средним нулем и стандартным отклонением на единицу, Y_1, из этого следует, что мы можем записать следующее представление для $Z_1(h)$

$$Z_1(h) = \sqrt{h}Y_1$$

это означает, что, используя это определение, $Z_1(h)$ обладает правильными статистическими свойствами. Мы также можно переписать уравнение 4 как

$$x(h) - x(0) = hf_0 + Z_1(h)g_0 = hf_0 + \sqrt{h}g_0 Y_1. \qquad (8)$$

Проблема очевидна: в r.h.s. первое слагаемое имеет порядок h, но второе имеет порядок $\sqrt{h}$: в принципе, мы должны вставить приращение x из уравнения 4 в уравнение 3, взять еще одно слагаемое в разложении Тейлора и проверить порядок вклада, который мы получаем. Оказывается, что если бы мы это сделали, правильный алгоритм для первого порядка в h был бы

$$x(h) - x(0) = g_0 Z_1(h) + f_0 h + \frac{1}{2} g_0 g_0 Z_1(h)^2 \qquad (9)$$

Члены более высокого порядка получаются путем рекурсии, вставки членов более низкого порядка в уравнение 3 и сбора различных вкладов. Прежде чем мы напишем алгоритм порядка h^2 (это самый высокий порядок, который мы можем получить рекурсивно), давайте представим другие случайные интегралы, которые имеют значение при выводе. В последующем, Y_1 является ли та же самая стохастическая переменная, используемая для Z

$_1(h)$, и Y_2 и Y_3 это еще две гауссовские случайные переменные со средним нулем и стандартным отклонением один, независимые друг от друга. Нам нужно

$$Z_2(h) = \int_0^h Z_1(s)ds = h^{3/2}\left(\frac{Y_1}{2} + \frac{Y_2}{2\sqrt{3}}\right)$$

$$Z_3(h) = \int_0^h Z_1^2(\text{ы})ds \approx \frac{h^2}{3}\left(Y_1^2 + Y_3 + \frac{1}{2}\right)$$

Для аддитивного шума ($g(x) = \sqrt{2D}$) значение h_2 алгоритм считывает

$$x(h) = x(0) + \sqrt{2D}Z_1(h) + f_0 h + \sqrt{2D}Z_2(h)f_0 + ДЗ_3(h)f_0 + \frac{h^2}{2} f_0 f_0 \quad (10)$$

Мы будем называть это “Полным алгоритмом”. В n-мерном случае, для одного внешнего случайного воздействия, которое является аддитивным, т.е. для системы, описываемой $x_я = f_я(x) + g_я ξ(t)$ мы находим (определяя здесь $f_{i,j} \equiv \partial f_я / \partial x_j$ вычисляется в $x_я(t = 0)$ и т.д., и предполагая, что сумма по повторяющимся показателям)

$$x_я(h) = x_я(0) + g_я Z_1(h) + f_я h + Z_2(h) f_{я,к} g_к + \frac{1}{2} f_{я,\ джей\ кей}\, g_j g_к Z_3(h) +$$

1

2

h

2

f

i,j

f

j

.

(11)

Выражения , действительные для более общего случая , можно найти в

2

. Другими схемами интеграции

, которые можно найти в литературе, являются (см. Приведенные ссылки):

Схема Эйлера

: Уравнение 10, сохраняя только первые три члена в r.h.s.

“Точный распространитель”

: решите точно x = f (x), а затем добавьте Z

1

(h) принимать

во внимание шум.

Схема Heun

: Используйте следующий интегратор:

x

1

= x(0) + √2DZ

1

(h) + f
0
h
x(h)
= x(0) + √2DZ
1
(h) +
h
2
(f
0
+ f (x
1
))

Некоторые авторы разработали схемы Рунге-Кутты (см.
4
). Однако мы увидим, что специфическая природа SDE такова, что схемы более высокого порядка могут не привести к существенным улучшениям интеграции.

3. Какой алгоритм является “лучшим”?

Проблема “наилучшего алгоритма” для SDE имеет два аспекта: детерминированную точность и случайное поведение. Здесь мы сильно отходим от стандартных учебников по стохастической интеграции. В математической литературе по теории случайных процессов ((см., В частности,

) доходы О внесении мера того, насколько точно заданной численно-скую интеграцию схема аппроксимирует стохастической модели одно исследование: с этой целью определения слабая или сильная конвергенция вводятся. Хотя мы отсылаем заинтересованного читателя к любому учебнику по стохастическим процессам для формального определения этих различных критериев сходимости, здесь мы просто скажем, что эти критерии основаны на оценке, в статистическом смысле, разницы между "истинной" эволюцией и "моделируемой" эволюцией как функции времени; эта разница (которая является статистической величиной и, по сути, нормой разницы между некоторым точным моментом и соответствующим эволюционировавшим моментом) обычно увеличивается со временем, и ее рост является функцией как временного шага интегрирования, так и интенсивности шума ; разница между сильной и слабой конвергенцией заключается в том, как оценивается конвергенция к "истинной" эволюции. Следует понимать, что этот подход к изучению сходимости справедлив только для динамики "коротких времен": хотя обычно это нормально, очевидно, что хорошее поведение в короткие периоды на больших временах это ничего не означает, и в частности, это не означает, что случайное движение, генерируемое нашим алгоритмом, точно определяет правильное равновесное распределение. Здесь, как уже упоминалось, будет применен другой подход: различные схемы будут сначала изучены при отсутствии шума ("детерминированная точность"); и впоследствии, при наличии шума, как в течение короткого, так и большого времени.

3.1. Детерминированная точность

В этом случае стохастической составляющей пренебрегают и изучают только детерминированную схему интеграции, используя стандартные методы.

Это дает некоторые указания на "детерминированную точность" рассматриваемой схемы. В этом случае применяется обычное оборудование (используемое для обеспечения точности, стабильности и т.д.). Ошибка, связанная с данной схемой интегрирования, легко вычисляется; мы находим следующее:

Схема Эйлера: с точностью до O (h).

Точный распространитель: нет числовой ошибки, связанной с этим алгоритмом (по определению).

Схема Heun: с точностью до O (h^2).

Полный алгоритм: с точностью до O (h^2). "Точный пропагандатор" на практике получается с использованием схемы интегрирования очень высокого порядка, например Рунге-Кутты.

3.2. Стохастическое поведение

В этом случае можно проверить разложение Тейлора, чтобы судить о динамике за короткое время. Тогда ясно, что лучшим алгоритмом в этом временном диапазоне является "Полный алгоритм", учитывая, что он был получен как разложение Тейлора случайных уравнений. Альтерна-венно, стандартные техники уже упоминалось выше, имеются: в основном, даже после введения сходятся в слабом или сильном смысле, то мы обнаружим, что алгоритм, который имеет лучшую сходятся "полный алгоритм". Очевидно, что практически весь повторный поиск в схемах стохастического интегрирования касался поведения различных алгоритмов в этом пределе. Некоторые интересные схемы можно, например, найти в [9].

Эта последняя ссылка не означает, что она является исчерпывающей, а просто указывает на пару статей, в которых представлено и обсуждается очень много схем интеграции.

С другой стороны, поведение при больших временах можно изучить, извлекая свойства равновесия из пропагатора, используемого в числовой схеме (есть и другие возможности: например, можно рассмотреть, какая схема наиболее близка к истинной траектории при некоторой мере). Мы имеем в виду проблему редких больших флуктуаций, поэтому, как эмпирическое правило, мы должны использовать интеграторы, которые максимально точно воспроизводят динамику за большой промежуток времени, т.е. одни и те же равновесные величины. Сосредоточив внимание на динамике больших времен, идея состоит в том, чтобы начать с общей формы интегратора, x (t) = x (0) + F (x, t), и, например, найти равновесное распределение, которое он генерирует; затем сравнить его с реальным. Из этого следует, что, записывая пропагандист, который

10

$$P(x, t+h) - P(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{x_я} \frac{\partial}{\partial x_1} \cdots \frac{\partial}{\partial x_n} K_{1\ldots n} P(x, t) \qquad (12)$$

где P (x, t) - распределение вероятностей, сгенерированное при моделировании, начиная с начального значения P (x, 0) и

$$K_{1\ldots n} \equiv (-1)^n \frac{1}{н!} F_1 \ldots F_{n\ шум}.$$

При равновесии разница в l.h.s. в уравнении 12 равна нулю, а r.h.s. в уравнении 12 становится неявным уравнением для P (x, ∞)). В общем, для систем с подробным баланс,

$$P(x, \infty)_{sim} = P(x, \infty)_{верно} \times опыт \sum_{n=1}^{\infty} h^n C_n / D$$

где все C_n было бы равно нулю, если бы алгоритм был точным. Сосредоточение внимания на системе

$$x = -V(x) + \sqrt{2d}\xi(t)$$

который имеет точное равновесное распределение

$$P(x, \infty)$$

верно

$= N \exp\{-V(x)/D\}$

и фактическое равновесное распределение (с использованием различных схем численного интегрирования)

$$P_{sim}(x, \infty) = N \exp\{(-V(x) + hS(h,x))/D\}.$$

Выполняя необходимую алгебру, несложно найти функцию S(x) по

схеме Эйлера: $S(h, x) = (V')^2/4 - DV''/2$

Точный распространитель: $S(h, x) = (V')^2/2 - DV''/2$

Схема Heun: $S(h, x) = O(h)$

Полный алгоритм: $S(h, x) = O(h)$

Результаты моделирования с использованием $-V(x) = x - x^3$ приведены в кратком виде на рис. 1.

Ясно, что "Полный алгоритм" и схема Heun являются алгоритмами, которые наиболее точно воспроизводят равновесное распределение: обратите внимание, как они хорошо воспроизводят теоретически ожидаемое равновесное распределение. Также интересно отметить, что "Точный пропагандатор" работает не лучше, чем схема Эйлера: это подразумевает, что для получения алгоритмов более высокого порядка необходимо иметь дело с членами более высокого порядка, исходящими как из детерминированной, так и из стохастической части SDE. Но, как мы видели при выводе "Полного алгоритма", при заказе h

2
мы начинаем иметь
негауссовские случайные переменные (Z
3
(h)), поэтому схемы более высокого порядка могут быть не очень хороши
основан. Среди прочего, алгоритмы более высокого порядка ref.
9
не делают лучше
(а иногда они делают хуже!), чем “Полный алгоритм” или “Схема Heun”,
хотя они намного дороже с точки зрения вычислительной мощности
11
.
-1
0
1
X
0
0.005
0.01
Вероятность
Полная
Теория

Точного пропагатора
Эйлера
Хойна
Рис. 1. Сравнение равновесных распределений, полученных с использованием различных схем интегрирования.
D = h = 0,1
4. √
h проблема и границы
Независимо от схемы интеграции, используемой для выполнения интеграции, существует
внутренняя проблема с SDE из-за дискретности интеграции и
выборки; эта проблема присутствует даже при использовании идеального интегратора
13,12
. Рис. 2 показывает
, что стохастическая траектория выглядит очень по-разному в разных временных масштабах (т.е. в
часах). Проблема становится наиболее острой, когда нам нужно остановить интегрирование из-за достижения
границы (см. пунктирную линию на рис. 2), как, например, при оценке среднего
времени первого прохождения (MFPT): “уменьшенная” траектория (траектория,
полученная при интегрировании с большим h) просто пропускает переход. Лекарство
простое: нам нужно оценить вероятность того, что траектория достигла границы
и вернулась обратно в пределах шага интегрирования по времени, и, таким образом, остановить моделирование.
Следующее
12
, для системы, описанной SDE
x = F (x) + √2dξ(t),
ξ(t) = 0,
ξ(t)ξ(s) = δ(t − s)
(13)
вероятность того, что стохастическая траектория, находящаяся в точке x
0
в момент времени t = 0 и в
x
h
при t = h достигните границы x
б
в промежуточное время задается с помощью
P (попадание) = опыт −
F
б
2D e
2hF
б
− 1
x
h
− x
б
+ (x

0
− x
б
)e
ВЧ
б
−
F
б
F
б
2
+
1
4Dh
x
1
− x
0
+ h
F
0
+ F
h
2
2
(14)
где F
б
= F (x
б
) и т.д.. На каждом шаге интегрирования вычисляется уравнение 14, и генерируется равномерно распределенная случайная величина в диапазоне (0,1). Если случайная величина меньше, чем уравнение 14, предполагается, что траектория пересекает границу

Рис. 2. Сравнение траекторий, выполненных с разными временными шагами

и вернулся, и должны быть
предприняты соответствующие действия для достижения границы.

4.1. Свободная диффузия с поглощающими границами

В качестве тестовой системы возьмем группу частиц, введенных при $x = 0$, которые могут свободно перемещаться в одном измерении, пока не достигнут границ, расположенных на $\pm L$, где они поглощаются[13]. Правящий SDE является

$$x = \sqrt{2d}\xi(t), \quad \xi(t) = 0, \quad \xi(s)\xi(t) = \delta(t - s). \tag{15}$$

При $h = 0$ MFPT до границы равен $\tau(0) = \frac{L^2}{2D}$, тогда как для конечного h это становится[13]

$$\tau(h)/\tau(0) = 1 + \frac{32}{9\pi} h/\tau(0). \quad (16)$$

Рисунок 3 показывает, что действительно, MFPT, смоделированные без коррекции, соответствуют уравнению. 16. Как только вводится поправка на конечность шага интегрирования по времени, соответствие между моделированием и теоретическим MFPT $h = 0$ становится превосходным (нижние кружки). Подчеркнем, что интегрирование этой динамической системы является точным, благодаря структуре уравнения 15, поэтому расхождение, наблюдаемое при конечных временных шагах интегрирования , связано с выборкой.

4.2.

MFPT в бистабильной системе

Учитывая, что вклад в MFPT, который имеет вид $\sqrt{h}$, обусловлен конечностью выборки стохастической траектории, мы ожидаем, что аналогичный вклад будет обнаружен при любом вычислении MFPT. Мы построим график на рис. 4 МФПТ

Рис. 3. MFPT для частицы, свободно диффундирующей к границе

чтобы перейти от $x = -1$ к $x = 0$ в системе

$x = x - x$

3

$+ \sqrt{2D}\xi(t),$

$\xi(t) = 0,$

$\xi(t)\xi(s) = \delta(t - s).$

(17)

Теоретически, MFPT в пределе $h \to 0$ должен быть

MFPT($h = 0$) =

π

$\sqrt{2}$ опыта

1

4D

(18)

Из рисунка видно, что MFPT, вычисленный без какой-либо коррекции, показывает зависимость квадратного корня от шага интегрирования по времени (наилучшее соответствие). Однако, когда вводится дополнительный случайный процесс для моделирования предела $h \to 0$, числовые точки не показывают зависимости от шага интегрирования по времени. Важно понимать, что из структуры уравнения 18 можно предположить, что по мере того, как D становится меньше, поправка к MFPT из-за конечности h должна стать незначительной по сравнению с самим MFPT. Рис. 4 показывает, что на самом деле верно обратное: MFPT вычисляются для разных масштабов h и D на одной и той же кривой, когда они нанесены на график относительно $h / \sqrt{D}$: это означает, что если h поддерживается постоянным, моделируемые MFPT без поправок все пропорциональнее и больше отличаются от теоретических, поскольку D уменьшается. Дополнительные примеры см.

12

. SDE в уравнении 17 был интегрирован с использованием алгоритма Heun. Статистическая погрешность, связанная с конечным числом траекторий, равна порядку размеров символа.

5. Небелый шум

До сих пор мы рассматривали стохастические дифференциальные уравнения, управляемые белым шумом. Однако шум в реальных системах очень часто далек от белого. Интересный класс

1.6
1.5
1.4
1.3
1.2
1.1
1.0

MFPT (h)/MFPT (h =0)

0.001
2
3
4 5 6
0.01
2
3
4
5 6
0.1
2
3
4 5

ч/Д

1/2

D=0,10, необработанный
D=0,07, необработанный
D=0,05, необработанный
D=0,04, необработанный
подходит для необработанных данных
D=0,10, скорректированный
D=0,05, скорректированный
D=0,04 с поправкой

Рис. 4. MFPT в системе уравнения 17

корреляции шума - это шум, который может быть записан в терминах линейно отфильтрованного белого шума. Самым простым из этих шумов является экспоненциально коррелированный гауссов шум

$\eta(t) = 0,$

$$\langle \eta(t)\eta(s)\rangle = \frac{D}{\tau}\,\text{опыт}\left(-\frac{|т-с|}{\tau}\right) \quad (19)$$

или, с точки зрения его спектральной плотности,

$$|\hat{\eta}(\omega)|^2 = \frac{D}{\pi(1+\omega^2\tau^2)}. \quad (20)$$

Переменная $\eta(t)$ может быть записана в терминах отфильтрованного белого шума следующим образом [14]

$$\dot{\eta} = -\frac{1}{\tau}\eta + \frac{\sqrt{2D}}{\tau}\xi(t), \quad \langle\xi(t)\rangle = 0, \quad \langle\xi(t)\xi(s)\rangle = \delta(t-s) \quad (21)$$

Предположим, у нас есть динамическая система, управляемая аддитивным экспоненциально коррелированным гауссовым шумом ($\xi(t)$ будет обычным белым гауссовым шумом со стандартным отклонением один)

$$\dot{x} = f(x) + y$$

$$\dot{y} = -\frac{1}{\tau}y + \frac{\sqrt{2D}}{\tau}\xi(t). \quad (22)$$

Мы могли бы использовать Eq. 11 (или любой другой алгоритм) для интеграции Eq. 22. Однако, если t_p является наименьшим временным масштабом динамической системы в уравнении 22, время интегрирования шага h должно быть выбрано таким образом, чтобы оно было намного меньше обоих t_p и τ. Теперь, в случаи, когда τ намного меньше t_p, ясно, что, делая h τ, мы бы использовали всю вычислительную мощность для интегрирования уравнения, описывающего экспоненциально коррелированный шум, а не саму динамическую систему.

Мы помним, что Z_1 (Уравнение 5) было получено суммированием некоторых гауссовских случайных процессов: теперь структура уравнения 22 такова, что y сам по себе является линейной комбинацией случайных гауссовских процессов (ξ(t)) через фильтр с временным масштабом τ . Итак, должна быть возможность использовать “Полный алгоритм” или алгоритм Heun, но с каким-то образом измененным $Z_1(h)$. Эта идея была использована в [15]. Уравнение 22 может быть немедленно интегрируется, чтобы получить (точно)

$$y(t) = e^{-\frac{t}{\tau}} y(0) + \frac{\sqrt{2D}}{\tau} \int_0^{т} e^{\frac{с-т}{\tau}} \xi(ы)\, ds. \qquad (23)$$

Давайте теперь определим некоторые величины, которые понадобятся в дальнейшем, а именно

$$w_0 \equiv \int_0^h e^{\frac{с-ч}{\tau}} \xi(ы)\, ds$$

$$w_1 \equiv \int_0^h \int_0^{т} e^{\frac{с-т}{\tau}} \xi(ы)\, ds\, dt$$

$$\alpha \equiv \frac{h}{\tau}.$$

Очевидно, что w_0, и w_1 являются гауссовыми переменными (они представляют собой линейные комбинации гауссовских переменные), с нулевым средним значением и неизвестными корреляциями. Разработка алгебры [15], который соответствует алгебре, проведенной для получения Z_1, полученный результат равен сумме-маринованный в таблице 1. Из таблицы, если корреляция w_0 с w_0 необходим,

Таблица 1. Корреляции для случайных переменных в алгоритме с экспоненциальной корреляцией

$w_0/\tau^{1/2}$

w_1

/τ

3
/
2
w
0
/τ
1
/
2
1
2
1
−
e
$-_2$
α
1
2
1
−
2e
−
α
+ e
$-_2$
α
w
1
/τ
3
/
2
1
2
2α
−
3
−
e
$-_2$
α
+ 4e
−
α

берем количество, в котором строка и столбец помечены как w
0
крестом можно написать

w
0
τ
1/2
w
0
1/2
=
1
2
1 – e
$-_{2\alpha}$

что дает

w
2
0
=
τ
2

$1 - e^{-2\alpha}$

и так далее. Теперь мы можем написать

$$y(h) = y(0) + \sqrt{2D} \, \tau \, w_0$$

$$Z_1(h) \equiv \int_0^h y(s)\, ds = \tau \left(1 - e^{-\alpha}\right) y(0) + \sqrt{2D}\, w_1 \qquad (24)$$

и, если Y_0 и Y_1 являются двумя независимыми гауссовыми переменными с нулевым средним и стандартное отклонение первое, мы можем, наконец, написать

$$w_0 = w_{20} Y_0$$

$$w_1 = \frac{w_{01}}{w_{20}} Y_0 + w_{21} - \frac{w_{10}^2}{w_{20}} Y_1 .$$

В принципе, нам нужны выражения для $Z_2(h)$ и $Z_3(h)$. Z_2

(h) был получен в [15]

:

однако оказывается, что для случая экспоненциально коррелированного шума алгоритм Heun быстрее, чем “Полный алгоритм”, и имеет сопоставимую точность.

Итак, предлагается использовать алгоритм Heun, интегрирующий уравнения. 24, чтобы получить $Z_1(h)$

требуется на каждом этапе интеграции.

Другим интересным коррелированным шумом является так называемый “зеленый шум” (см.[16] для более подробная информация и некоторая литература). Спектральная плотность этого шума имеет вид

$$S(\omega) = \frac{D}{2\pi}\frac{\omega^2}{\omega^2 + \gamma^2}. \qquad (25)$$

Алгоритмы численного интегрирования в присутствии гауссова шума
произвольной спектральной плотности легко строятся с помощью преобразования Фурье (см., среди других,[22,23,4]): идея состоит в том, чтобы создать необходимый зашумленный процесс (назовем его $\xi(t)$), используя

$\xi(t) = \sum_n a_n e^{в\Delta мас}$

.
(26)
С подходящим выбором коэффициентов a
n
s, любое спектральное распределение может быть обобщенным
атед. Очевидно, что последовательность ξ(t) повторяется через некоторое время

$$t = 2\pi /(\Delta\omega);$$

и что генерация последовательности обычно обрабатывается с помощью БПФ, что означает, что вся последовательность генерируется априори, предварительно определив, какой длины она должна быть. При численном моделировании это подразумевает, что использование (26) может быть далеко от оптимального. Например, в случае времени прохождения до барьера, пришлось бы сгенерировать очень длинную случайную последовательность, чтобы убедиться, что существует достаточно случайных членов для наблюдения побега, и все же, как только переход произошел, то, что осталось от последовательности, должно быть отброшено. Очевидно, что это очень неэффективно. Гораздо лучшим подходом было бы разработать алгоритм для генерации зашумленной последовательности, которая является локальной по времени, как показано ранее для случая экспоненциально коррелированного шума. Характеристикой алгоритма, который является локальным по времени, является то, что алгоритму требуется только значение шума на предыдущем временном шаге (или на небольшом и конечном числе предыдущих временных шагов) для генерации значения шума на следующем временном шаге. Стохастическое дифференциальное уравнение, которое должно быть интегрировано, имеет обычный вид

$x = a(x) + f(t)$
(27)

где a(x) - детерминированный дрейф, а f (t) - стохастический случайный процесс с гауссовой статистикой, нулевым средним значением и спектральной плотностью флуктуаций вида (25). Уравнение (25) подразумевает, что моменты f (t), усредненные по зашумленным реализациям самого f (t), должны быть

$f(t) = 0$

$f(t)f(0) = D\,\delta(t) - \frac{\gamma}{2} e^{-\gamma|t|}$.
(28)

В [17] было найдено представление для зеленого шума f (t) в виде

$f(t) = \xi(t) - \gamma e^{-\gamma t} \int_{-\infty}^{t} e^{\gamma s} \xi(s)ds$
(29)

где $\xi(t)$ - белый гауссовский процесс с моментами

$\xi(t) = 0$

$\xi(t)\xi(0) = D\delta(t).$

Мы могли бы напрямую интегрировать эти уравнения: введя шаг интегрирования по времени h и определив

$g(t) = \int_{0}^{t} f(s)\, ds,$
(30)

используя, например, схему Heun для изменения переменной x (t) от t = 0 до t = h, можно было бы вычислить

$\tilde{x} = x(0) + ha(x(0)) + g(h)$

$x(h) = \frac{1}{2}\left[\tilde{x} + x(0) + ha(\tilde{x}) + g(h)\right].$
(31)

Хотя такой подход возможен в принципе, ясно, что он очень неэффективен с вычислительной точки зрения. Во-первых, мы были бы вынуждены хранить всю историю процесса ξ; во-вторых, нам пришлось бы вычислять длительный интеграл по времени (см. Уравнение (30)) на каждом шаге интегрирования по времени; и в-третьих, это интегрирование не было бы локальным по времени. Отметим, чтобы вывести алгоритм, который является локальным по времени и распараллеливает вывод для экспоненциально коррелированного шума, что (стохастическая) переменная g (t) является линейной комбинацией случайных переменных, так что мы могли бы подойти к проблеме по-другому: вместо использования случайного процесса g (t), определенного в (30), мы могли бы заменить его соответствующим суррогатным случайным процессом, характеризуемым теми же статистическими данными и корреляционными функциями.

Давайте введем величины

$I(t) = e^{-\gamma t}$

τ

$-\infty$

e
ys
ξ(ы)ds
(32)
и случайные интегралы
Z
0
(t) =
т
0
ξ(ы) ds
W
0
(t) =
т
0
e
γ(s−t)
ξ(ы) ds
(33)
W
1
(t) =
т
0
W
0
(ы) ds
Из этого следует, что
I(t) = e
−yt
т
−∞
e
ys
ξ(s) ds = e
−yt
0
−∞
e
γs
ξ(s) ds +
t
0
e
γs
ξ(s) ds
= e
−yt
I(0) + W
0
(t).
(34)
Вспомнив, что на шаге Heun нам нужно оценить g(h), мы начинаем переписывать
g(t) =
т
0
f (t) dt =
т
0
ξ(t) dt − γ
т
0
e
−yt
т
−∞
e

ys
ξ(ы) ds
дт
= Z
0
(t) − γ
т
0
e
−yt
I(0) + W
0
(t)
дт
(35)
Путем интеграции мы легко получаем
g(t) = Z
0
(t) + e
−yt
− 1 I(0) − yW
1
(t)
(36)

Должно быть ясно, как выполнять интегрирование: на каждом временном шаге используются (34) и (36) для генерации соответствующих случайных величин, которые, в свою очередь, используются в (31) для продвижения уравнения вперед. На каждом временном шаге ранее вычисленные x (h) и I(h) становятся новыми x(0) и I(0) соответственно, и так далее.

Следует понимать, что память о случайном процессе в основном ограничивается термином I(0): величины $W_0(t)$ и $W_1(t)$ не зависят от предыдущей истории случайного процесса. Вся проблема состоит в том, чтобы найти подходящее представление случайных интегралов в (34), поскольку очевидно, что различные величины не являются независимыми друг от друга.

Чтобы найти представление случайных интегралов (34), сначала отметим, что они являются линейными комбинациями гауссовых переменных, следовательно, они могут быть представлены с помощью подходящего набора случайных чисел, извлеченных из гауссовых распределений соответствующих средних значений и стандартных отклонений. Это значительно упрощает решение проблемы . Нам нужно только указать первый и второй моменты этих переменных, и мы должны быть в состоянии легко сгенерировать их. Давайте кратко покажем, как выполнить вычисления, которые параллельны аналогичным вычислениям, показанным выше для случая экспоненциально коррелированного шума, рассматривая второй момент переменной Z

${}_0(t)$. Мы имеем, используя
для указания средних значений, полученных по реализациям шума, и
вспоминая определение $Z_0(t)$ и статистические свойства процесса $\xi(t)$,

$$Z_0(t)^2 = \int_0^t \int_0^t \xi(s)\xi(s')\, ds\, ds' = \int_0^t \int_0^t D\delta(s - s')\, ds\, ds' = Dt$$

. При проверке становится ясно, что все стохастические интегралы, фигурирующие в (34), имеют нулевое среднее значение. Их вторыми моментами являются (мы не будем записывать временную зависимость, чтобы упростить обозначение, и предположим, что t = h)

$$
\begin{aligned}
Z_0^2 &= Dh \\
W_0^2 &= \frac{D}{2\gamma}\left(1 - e^{-2\gamma h}\right) \\
W_1^2 &= \frac{D}{2\gamma^3}\left(2\gamma h - 3 + 4e^{-\gamma h} - e^{-2\gamma h}\right) \\
Z_0 W_0 &= \frac{D}{\gamma}\left(1 - e^{-\gamma h}\right) \\
Z_0 W_1 &= \frac{D}{\gamma^2}\left(\gamma h - 1 + e^{-\gamma h}\right) \\
W_0 W_1 &= \frac{D}{2\gamma^2}\left(1 - 2e^{-\gamma h} + e^{-2\gamma h}\right)
\end{aligned}
\tag{37}
$$

Предположим , что Y_0, Y_1 и Y_2 являются случайными гауссовыми переменными с нулевым средним значением и стандартным отклонением единица, независимыми друг от друга, мы можем представить стохастические интегралы из (34) в виде

$$Z_0(h) = Z_0^2 Y_0$$

$$W_0(h) = b_0 Y_0 + b_1 Y_1$$

$$W_1(h) = c_0 Y_0 + c_1 Y_1 + c_2 Y_2. \qquad (38)$$

Коэффициенты, фигурирующие в (38), легко получаются путем комбинирования различных величин, фигурирующих в (38), с помощью (37): например, если бы мы хотели вычислить значение для b_0, мы бы рассмотрели $W_0(h)Z_0$

$$(h) = \frac{D}{\gamma}\left(1 - e^{-\gamma h}\right) = (b_0 Y_0 + b_1 Y_1) Z_0^2$$

$$Y_0 = b_0 Z_0^2$$

и так далее.

Аналитические выражения для констант, фигурирующих в (38), громоздки, и мы не будем их здесь записывать: очевидно, что их очень легко вычислить численно, учитывая (38) и (37).

0
10
20
30
ω
0
0.2
0.4
0.6
0.8
1
S(ω)
0
10
20
30
ω
0
0.2
0.4
0.6
0.8
1
1.2
1.4
S(ω)

Рис. 5. Спектральная плотность флуктуаций для величины g(t) = f (t), полученная с использованием уравнения (36), для D = 2π и γ = 10,0 (слева) и 0,1 (справа). Гладкая линия: теория (уравнение (25)), неровная линия: смоделированные спектральные плотности. Обратите внимание, что соответствие между моделированием и теорией на малых частотах очень хорошее, и что моделируемая спектральная плотность действительно становится постоянной для больших частот.

На рис. 5 показано, что шум, генерируемый с использованием предлагаемого алгоритма, имеет спектральную плотность (25). Уравнение (25) относится к f(t), тогда как любая схема интегрирования (например, схема Heun) требует g(t). Следовательно, мы действительно сгенерировали g (t), дифференцировали его (вычисляя (g (t + h) − g(t)) / h) и, наконец, вычисляем спектральную плотность колебаний оценки полученных временных рядов. На рисунке 5 нет настраиваемых параметров. Соответствие между генерируемой спектральной плотностью флуктуаций и теорией чрезвычайно хорошее.

Другие спектральные плотности шума были рассмотрены в [20,21]. Для общих алгоритмов и дополнительные комментарии см. также [4,22,23].

6. Генераторы случайных чисел

При интеграции SDE следует иметь в виду, что хороший генератор псевдослучайных чисел важнее эффективного алгоритма интеграции. Поэтому при реализации кода необходимо соблюдать особую осторожность, а в литературе следует искать хорошие генераторы. Существуют классические алгоритмы, такие как алгоритм Бокса-Мюллера [24], для получения гауссовых случайных величин из равномерно распределенных генераторов; интересным алгоритмом отклонения (который быстрее, чем алгоритм Бокса-Мюллера) является алгоритм Зиккурата [25]. Следует избегать алгоритмов, основанных на сложении ряда равномерно распределенных случайных чисел для получения случайного числа гаусса с помощью центральной предельной теоремы: они медленнее, чем Бокса-Мюллера, и сгенерированное распределение случайных чисел показывает четкое ограничение в хвостах. Существует несколько алгоритмов для генерации равномерно распределенных псевдослучайных чисел. Самым современным, по-видимому, являются алгоритмы, основанные на так называемых вычитании и переносе [26,27] или добавить и перенести [28] алгоритмы: учитывая их характеристики, эти алгоритмы особенно хорошо подходят для моделирования редких колебаний.

7. Выводы

Мы обсуждали возможность иметь интеграторы для SDE, которые способны воспроизводить равновесные свойства динамической системы с высокой точностью на шаге интегрирования по времени: такие интеграторы идеально подходят для изучения длительной динамики явлений, таких как большая редкая флуктуация. Мы показали, что возможно моделировать свойства процесса с нулевым временным шагом интегрирования, что подразумевает , что мы способны с высокой точностью определять, когда стохастическая траектория достигает заданного порога. Специализированные алгоритмы могут быть получены в случае шума, который фильтруется через фильтр с n полюсами, или, в более общем случае, заданы в терминах линейной комбинации гауссовых шумов, что ускоряет моделирование для этих особых случаев.

Наконец, были даны некоторые указания относительно генераторов псевдослучайных чисел, подходящих для рассматриваемого случая.

Ссылки

1. Д. Г. Лучинский, П. В. Э. Макклинток и М. И. Дикман, респ. прог. Физ. 61, 889–997 (1998).

2. Р. Маннелла, в

Шум в нелинейных динамических системах, III: Эксперименты и моделирование отклонения
, F. Moss and P. V. E. McClintock eds (CUP, Кембридж) 189-221 (1989).
3. П. Э. Клоден и Э. Платен
Численное решение случайных дифференциальных уравнений
(Springer-Verlag, Berlin, 1992).
4. Р. Маннелла, в
Суперкомпьютеры в нелинейных и неупорядоченных системах
, Л. Васкес,
Ф. Тирадо и И. Мартин ред. (World Scientific) 100-129 (1997).
5. Дж. Гарсия-Охальво и Дж. М. Санчо
Шум в пространственно протяженных системах
, (Спрингер,
Берлин, 1999).
6. Н. Дж. Рао, Дж. Д. Борванкар и Д. Рамкришна
СИАМ Дж . Контроль 12
124–139 (1974)
7. Р. Маннелла, в
Случайные процессы в физике, химии и биологии

, Дж. А.
Фрейн и Т. П.
oschel eds (Springer-Verlag, Берлин-Гейдельберг) 353-364 (2000).
8. Т. Т. Сун,
Случайные дифференциальные уравнения в науке и технике
(Aca-
demic Press, 1973); С. Н. Этье и Т. Г. Куртц,
Характеристика марковских процессов-
объединение и конвергенция
, (Серия Уайли в области вероятности и математической статистики, 1986);
Л. Арнольд,
Стохастические дифференциальные уравнения: теория и приложения
, (Уайли Интер-
научное издание, 1973); И. И. Гихман и А. В. Скороход,
Стохастический дифференциал
Уравнения
, (Спрингер, 1972).
9. Г. Н. Мильштейн и М. В. Третьяков

СИАМ Дж. Числ. Анальный секс. 34
2142-2176 (1997); Г.
Н. Мильштейн,
Применяемая теория вероятности 30
750–766 (1985).
10. Г. Г. Батруни, Г. Р. Кац, А. С. Кронфельд, Г. П. Лепаж, Б. Светицкий и К. Г.
Уилсон
Физика. Откр. D 32
2736–2747 (1985).
11. Джи Тоннарелли,
Propriet`
a asintotiche di classi di algoritmi per l'integrazione di
equazioni differenziali stocastiche
, (Dissertation for Laurea in Fisica, Pisa, 2001).
12. Р. Маннелла
Физика. Lett. A 254
257–262 (1999).
13. У. Стритматтер
Препринт Фрайбургского университета
, протокол 87/12 (1987).
14. Дж. М. Санчо, М. Сан-Мигель, Л. С. Кац и Дж. Гантон
Физика. Откр. A 26

1589–1609
(1982).
15. Р. Маннелла и В. Паллески
Физика. Откр. А 40
, 3381-3386 (1989).
16. Р. Маннелла
Флуктуации и Шумовые буквы 1
, L45–L50 (2001).
17. С. А. Гузь, И. Г. Рузавин и М. В. Свиридов,
Медленная динамика в системах, управляемых
“Зеленый” шум’
, в качестве ссылки
18
, страницы 515-520.
18. Д. Эбботт и Л. Киш ред.,
Нерешенные проблемы шума
, Материалы конференции AIP
Том 511, Вудбери, Нью-Йорк (2000).
19. С. А. Гузь и М. В. Свиридов
П
привет. Латыш. А
240
43–49 (1998).
20. Л. Шимански-Гейер и Ч. З
улике
З. Физ. В 79
, 451-460 (1990).
21. М. И. Дикман, Р. Маннелла, П. В. Э. Макклинток, Н. Д. Стейн и Н. Г. Стокс,

Физ.
Откр . Е 47
, 3996-4009 (1993)
22. К. Я. Р. Биллах и М. Синозука
Физика. Откр. А 42
, 7492-7495 (1990).
23. Р. Маннелла и В. Паллески
Физика. Преподобный А 46
, 8028-8030 (1992); К. Я. Р. Биллах и
М. Синозука
Физика. Преподобный А 46
, 8031-8033 (1992).
24. У. Х. Пресс, Б. П. Фланнери, С. А. Теукольский и У. Т. Веттерлинг
Числовые рецепты:
искусство научных вычислений
(КУБОК, Кембридж, 1986).
25. Г. Марсалья и У. У. Цанг
СИАМ Дж. Си. & Статистика. Сост. 5
, 349-359 (1984).
26. К. М. Люшер
Компьютерная физика. Комм. 79
, 100-110 (1994).
27. Ф. Джеймс
Компьютерная физика. Комм. 79

, 111-114 (1994).
28. Д. Э. Кнут
Искусство компьютерного программирования
(Эддисон-Уэсли, Нью-Йорк), том-
ум 2 (1981).