

Midtherm Report
Jan Grzegorzewski

Reaction-diffusion dynamics with fractional Brownian motion

Summer term: 2016

Contents

1	Introduction	1
2	Theory	3
2.1	Brownian Motion	3
2.2	Fractional Brownian Motion	6
2.3	Fractional Brownian Motion	9
2.3.1	Algorythm	9
3	Reactions-Diffusion-Dynamics	21
4	Status Quo & Outlook	22
5	Appendix	23
5.0.1	Code:Gebrochen-rationale Brownische Bewegung	23
	Bibliography	26

List of Figures

2.1	Mean Square Displacement of different α	13
2.2	Mean Square Displacement (Ensemble average of 4000 Trajectories)	13
2.3	Mean Square Displacement (Ensemble average fpr different Δt) . . .	14
2.4	Mean Square Displacement (time and ensemble avarge for different Δt and with standard deviation of the Mean)	15
2.5	Non-gaussian parameter of $\alpha = 0.5$, $D = 2$ and 5000 trajectories ensemble.	16
2.6	Non-gaussian parameter of $\alpha = 0.5$, $D = 2$ and 5000 trajectories ensemble.	17
2.7	rescaled function for different times	18
2.8	variere dt bei gleichem Faktor 1	18
2.9	variere dt bei gleichem Faktor 1, logarithmisch	19
2.10	variere Faktor bei gleichem dt	19
2.11	variere Faktor bei gleichem dt, logarithmisch	20

List of Tables

1 Introduction

Anomalous diffusion can be observed in many different areas of nature, in particular related to heterogeneous media (Crowded biological media, porous materials, ...). The most popular phenomenon of anomalous diffusion is a power-law behaviour of the Mean-Square-Displacement ($MSD \propto t^\alpha$), which is violating the Einstein formula $MSD = 2dDt$ and thereby the central limit theorem. Various theoretical models try to encounter the power-law behaviour of the MSD showing different origins for anomalous diffusion. These models have the main phenomenon, thus the power-law behaviour of the mean square displacement, in common. But differ in some other observables, due to different origins of the anomalous power-law behaviour. By measuring theses different quantities one might reveal the origin of the anomalous behaviour in an experiment.

A basic model which accounts this phenomenon so far is Fractional Brownian Motion. This thesis is going to focus on Fractional Brownian Motion especially in respect to Reaction and Diffusion Dynamics. (Normal Diffusion Limited Smoluchowski equation, chemical master equation, mass action law michaelis menden reaction ????? check it) is failing miserably in describing Reaction and Diffusion Dynamics while anomalous motion is present.(explain ...because of fluctuations). The overall work aims not only to bring Reaction Diffusion and Fractional Brownian Motion together but also providing a Fractional Brownian Motion Integrator implemented into a **Reaction Diffusion Dynamics** software (ReaDDy). ReaDDy being a particle-based **Reaction Diffusion Dynamics** software is acting on a macromolecular level. It is coarse-graining molecules into spherical particles. Usually using Brownian or Langevin motion as the integrator. A Fractional Brownian Motion Integrator may be an elegant way of adding an approximation due to a crowded environment. The phenomenon of anomalous motion can also be studied with conventional integrators by actually building a crowded environment (for example: by adding obstacles). Nevertheless, the Fractional Brownian Motion approach could save computational time since it is not necessary to simulated each particle explicitly which builds up the crowded environment. Furthermore different studies show that heterogeneous environments have influences on particle segregation in the presents of reactions.

Having an Introduction set, chapter 2 deals with the theoretical foundation for Frac-

tional Brownian Motion. Subsequently, due to computational reasons these theoretical elaborations need to be transferred into discrete space and finally casted into an algorithm. In the following some properties of the algorithm are studied. In Chapter 3 theoretical foundation for reactions are going to be set. The final chapter 4 will deal with the present state of the thesis and give an outlook on further challenges.

2 Theory

2.1 Brownian Motion

Fractional Brownian motion is a generalized case of standard Brownian Motion. The following section will explore in more detail Brownian motion and normal diffusion. Than the more generalized case will be considerer.

Standard Brownian Motion is a very important and good studied stochastic process. It describes the erratic motion for mesoscopic particles, which first have been documented by Jan Ingenhousz in 1785, in particular for coal dust on the surface of alcohol. Later on in 1827 Robert Brown observed the erratic motion of pollen grains. Brownian Motion has an Gaussian propagator which has its origin in the Central Limit Theorem (CLT) for a sum of independent random variables. Lets assume a set of N independent variables $\{X_i\}$ with a finite variance $\sigma_i^2 = \langle X_i^2 \rangle$ and the mean $\langle X_i \rangle = 0$. The definition of a another random variable Y is given by:

$$Y = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^N X_j \quad (2.1)$$

This scenario in which a random variable is defined of the sum of another can be observed generically in nature. In the following the distribution of Y , $\rho(y)dy = P(y < Y < y + dy)$ in the limit of large N , is going to be calculated. The Generating function for a random variable Y is:

$$G_Y(k) = \langle e^{ikY} \rangle = \int e^{ikY} \rho(y)dy \quad (2.2)$$

2.1 can be inserted into the generating function, which results in:

$$\begin{aligned} G_Y(k) &= \langle e^{\frac{ik}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^N X_j} \rangle \\ G_Y(k) &= \langle \prod_{j=i}^N e^{\frac{ik}{\sqrt{N}} X_j} \rangle \end{aligned}$$

If all X_j are independent, then:

$$G_Y(k) = \prod_{j=i}^N \langle e^{\frac{ik}{\sqrt{N}} X_j} \rangle = e^{\sum_{j=1}^N A_j(\frac{k}{\sqrt{N}})}$$

with $A_j(\frac{k}{\sqrt{N}}) = \ln \langle e^{\frac{ik}{\sqrt{N}} X_j} \rangle$

(2.3)

For large N behaviour, we assume $\frac{k}{\sqrt{N}} \ll 1$ and expand

$$A_j(\frac{k}{\sqrt{N}}) = \ln(1 + \langle X_j \rangle \frac{ik}{\sqrt{N}} - \langle X_j^2 \rangle \frac{k^2}{2N} + \mathcal{O}(N^{-\frac{3}{2}}))$$
(2.4)

with a finite variance $\sigma_i^2 = \langle X_i^2 \rangle$ and the mean $\langle X_i \rangle = 0$

$$A_j(\frac{k}{\sqrt{N}}) = -\sigma_j^2 \frac{k^2}{2N} + \mathcal{O}(N^{-\frac{3}{2}}))$$
(2.5)

Thus, the generating function for large N is:

$$G_Y(k) = e^{-\frac{\sigma^2 k^2}{2}}$$
(2.6)

with $\sigma = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \sigma_j^2$

The distribution of Y can be calculated via the inverse Fourier Transform:

$$\rho(y) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\sigma^2 k^2}{2}} e^{iky} dk$$
(2.7)

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{y^2}{2\sigma^2}}$$
(2.8)

The seemingly innocent assumption of independence for the random variables $\{X_i\}$ in the summation result in an Gaussian distribution. Microscopic processes, which result in independent random position changes of an particle and add up over time, thus have a Gaussian distribution function for the overall position change. The propagator for Brownian motion has a Gaussian distribution.

Definition 1 Standard Brownian motion is an stochastic process $\{W_t\}_{t \geq 0} : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^n$ with $W_t(\omega)$ being the position of a particle with $\omega \in \Omega$ at time $t \in T$ in the

observation time $T = [0, \infty)$. It has a fixed $x \in \mathbb{R}^n$ as its origin. For $0 \leq t_1 \leq \dots \leq t_k, k \in \mathbb{N}, t_i \in T$ we define measures $\nu_{t_1 \dots t_k} : \mathcal{B}(\mathbb{R}^n)^K \rightarrow [0, 1]$. \mathcal{B} is a borel set. The transition probabilities are:

$$\begin{aligned} T_t(y|x) &:= (2\pi t)^{-\frac{n}{2}} e^{-\frac{\|x-y\|^2}{2t}} \text{ for } y \in \mathbb{R}^n, t > 0 \\ T_0(y|x) &= \delta(x - y) \end{aligned} \quad (2.9)$$

In the following some properties of Brownian motion are discussed:

- Due to the Kolomogorov's continuity theorem a continuous path $t \mapsto W_t(\omega)$ almost surely exists. Therefore it is possible to go to a continuous function $[0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}^n$ and define a probability density.

$$p_{t_1, \dots, t_k}(x_1, \dots, x_k) = T_{t_k-t_{k-1}}(x_k|x_{k-1}) \dots T_{t_2-t_1}(x_2|x_1)T_{t_1}(x_1|x) \quad \text{with } 0 \leq t_1 < t_2 < \dots < t_k, k \in \mathbb{N}$$

- Brownian motion is a Gaussian process with mean $E^x[W_t] = x$, $W_o = x$ Since $E^x[(W_{t_i} - W_{t_{i-1}})(W_{t_j} - W_{t_{j-1}})] = 0$ all its increments $\{W_{t_1}, W_{t_2} - W_{t_1}, \dots, W_{t_k} - W_{t_{k-1}}\}$ are independent.
- Brownian motion has stationary increments since $W_{t-h} - W_h$ has the same distribution for all $h > 0$.
- Brownian scaling $\{\hat{W}_t := \frac{1}{c}W_{c^2t}\}_{t \geq 0}$ if $\{W_t\}_{t \geq 0}$ is also a Brownian motion. Therefore Brownian motion has self-similar and fractal paths.

For Brownian motion a linear relation between the MSD and the diffusion constant can be shown. The starting point is the diffusion equation for overdamped motion with a constant diffusion coefficient D .

$$\frac{\partial}{\partial t} C(x, t) = -\frac{\partial}{\partial x} J(x, t) = D \frac{\partial^2}{\partial x^2} C(x, t) \quad (2.10)$$

Flux of particles $J(x, t) = \frac{\partial}{\partial x} C(x, t)$ as a result of a linear response relation. Under this approximation diffusion only depends on the position and not on the velocity. Therefore it is again a long-time approximation for normal diffusion. The propagator of Brownian motion solves this equation. The Concentration $C(x, t)$ can be in

interpreted as a probability distribution if properly normalised as $\int dx C(x, t) = 1$. The Mean Square Displacement (MSD) can be calculated as:

$$\frac{d}{dt} \langle x^2(t) \rangle = \frac{d}{dt} \int dxx^2 C(x, t) = \int dxx^2 \frac{\partial}{\partial t} C(x, t) \quad (2.11)$$

$$= D \int_{-\infty}^{\infty} dxx^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} C(x, t) = -2D \int_{-\infty}^{\infty} dxx \frac{\partial}{\partial x} C(x, t) \quad (2.12)$$

$$= 2D \int_{-\infty}^{\infty} dx C(x, t) = 2D \quad (2.13)$$

In previous equations partial integration has been used and $C(\pm\infty, t) = 0$ has been assumed. By integration for the initial condition $x(0) = 0$ one gets the Einstein Formula: $\langle (x(t) - x(0))^2 \rangle = 2Dt$, which can easily be extended for 2 and 3 dimensions. It will not be calculated here explicitly, but one can show that also for Smoluchowski eq. which follows from langevin dynamics for a long time limit the initial velocities decorrelates and thus the MSD is also linear with time.

2.2 Fractional Brownian Motion

In this section the theoretical foundation for Fractional Brownian Motion will be set and related to standard Brownian Motion.

In the previous section the the Means Square Displacement (MSD) has been shown to be linear with time as a result of the central limit theorem. In normal liquids this behaviour can be seen already at time scales higher than picoseconds [2]. Nevertheless many experiments show that the MSDs has a power law behaviour ($\delta r^2(t) \propto t^\alpha$ for $0 < \alpha < 1$). Thus the central limit theorem does not hold, not even for long time scales. It can be shown that persistent correlations of the increments can be observed. In soft matter, like polymers, subdiffusive behaviour is typically present in a time window but finally the linear MSD takes over. In particular Fractional Brownian Motion examines the case that the central limit theorem is violated for all time scales.

In the following some statistical tools are defined. They are important as the increments of Fractional Brownian motion are no longer assumed to be independent. The single particle density $\rho(\mathbf{r}, t) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}(t))$ describes the density of a particle which is localized at position $\mathbf{R}(t)$. Its correlation function $P(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t - t') = V \langle \rho(\mathbf{r}, t) \rho(\mathbf{r}', t') \rangle$ is also called Van Hove self-correlation function. V refers to the volume. From now on we will consider an isotropic system $r = |\mathbf{r}|$. As for Brownian motion with independent increments the correlated increments $\Delta \mathbf{R}(t)$ of fractional Brownian motion

are assumed to follow a Gaussian distribution with zero mean. Thus the correlation function of the single particle density results in:

$$P(r, t) = [2\pi\delta r^2(t)/d]^{-\frac{d}{2}} e^{\frac{-r^2 d}{2\delta r^2(t)}} \quad (2.14)$$

The van Hove correlation function can be transformed via the spatial Fourier transform into the wave-number representation, which is called the self-intermediate scattering function. Again for isotropic systems one can write $|\mathbf{k}| = k$.

$$F_s(k, t) = \langle \rho(\mathbf{k}, t)\rho(\mathbf{k}', t') \rangle = \int d^d r e^{-ikr} P(r, t) \quad (2.15)$$

$$= \langle e^{-ik\Delta R(t)} \rangle \quad (2.16)$$

The intermediate scattering function for the single particle density turns out to be the characteristic or moment generating function of $\Delta R(t)$ by expanding it for small wave-numbers $k \rightarrow 0$ one can get the moments. An other important quantity is the dynamical structure factor, which is the time-frequency Fourier transform of the intermediate scattering function:

$$F_s(\mathbf{k}, z) = \langle \rho(\mathbf{k}, z)\rho(\mathbf{k}', z') \rangle = \int_0^\infty dt e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} P(r, t) \text{ for } k \rightarrow 0, \text{Im}(z) > 0 \quad (2.17)$$

$$= \frac{1}{-iz} - \frac{k^2}{2d} \int_0^\infty dt e^{izt} \delta r^2(t) + \mathcal{O}(k^2) \quad (2.18)$$

Another important correlation function is the Velocity Autocorrelation Function (VACF):

$$Z(t) = \frac{1}{d} \langle \mathbf{v}(t)\mathbf{v}(0) \rangle \quad (2.19)$$

frequency representation of VACF

non gaussian parameter From the observation of The Mean Square Displacement $\delta r^2(t) = \langle \Delta R(t) \rangle = 2dK_\alpha t^\alpha$ one can calculate the velocity auto correlation function in the frequency domain as follows:

$$\begin{aligned} \tilde{Z}(z) &= \int_0^\infty dt e^{izt} Z(t) \\ &= 2d \int_0^\infty dt e^{izt} \left[\frac{d^2}{dt^2} \delta r^2(t) \right] \end{aligned}$$

$$\text{par.integ. } 2d \left(\underbrace{\left[e^{izt} \overbrace{\frac{d^2}{dt^2} 2dK_\alpha t^\alpha}^{=A(t)} \right]_0^\infty}_{\alpha \leq 2} - \int_0^\infty dt e^{izt} \left[\frac{d}{dt} \delta r^2(t) \right] \right)$$

$$A(t) = \frac{d}{dt} \overbrace{\left[\frac{2dK_\alpha t^{\alpha-1}}{\alpha} \right]}^{B(t)} = \frac{2dK_\alpha t^{\alpha-2}}{\alpha + (\alpha - 1)}$$

$$\begin{aligned} \tilde{Z}(z) &\stackrel{\text{par.integ.}}{=} -2d \left(\underbrace{\left[e^{izt} \overbrace{\frac{d}{dt} 2dK_\alpha t^\alpha}^{=B(t)} \right]_0^\infty}_{\alpha \leq 1} - \int_0^\infty dt e^{izt} \delta r^2(t) \right) \\ &= \int_0^\infty dt e^{izt} \delta r^2(t) \stackrel{\text{Im}(z) > 0}{=} K_\alpha \Gamma(1 + \alpha) (iz)^{1-\alpha} \end{aligned}$$

Gebrochene Brownische Bewegung ist eine Verallgemeinerung der Brownischen Bewegung. Sie kann benutzt werden bei der Simulation von Anomaler Diffusion.

Theorie von Felix, bisschen von Christoph und die Motivation könnte sein, dass man zwar anomale Diffusion simuliert werden kann wenn man alle Teilchen berücksichtigt. Mit diesem Ansatz könnte man konkret den Einfluss von Gebrochen-rationale Brownische Bewegung auf Reaktionen test.zb.als Vergleich zu normaler Brownian motion und Brownian Motion an sich ist auch schon eine Vereinfachung, welche eine zufällige Gaußzahl annimmt. Das heißt sämtliche Stöße des Teilchens mit anderen Teilchen innerhalb eines Zeitintervalls werden schon zu diesem Wert verallgemeinert. Als Unterschied zu tatsächlichen Simulation von allen Stößen (MD-Simulation). Die Motivation ist einen performanten Integrator für gebrochen-rationale Brownische Bewegung zu entwickeln. Die Anomale Diffusion, welche besonders in biologischen Systemen zu beobachten ist, wird durch Interaktion der Teilchen mit

ihrer Umgebung verursacht. Für den im Verlauf verwendeten Integrator muss davon ausgegangen werden, dass keine weiteren Interaktion (Potentiale) auftreten. Da zur Erstellung der Trajektorie ihre sämtlichen Inkremente im voraus durch gewöhnliche Brownische Bewegung erstellt werden müssen. Der Vorteil von der Methode ist ihre Performance. Der hier verwendete Algorithmus leitet sich vom Davies-Haste Algorithmus [1] ab. Dabei werden anfänglich alle Inkremente (Geschwindigkeiten) für gewöhnliches Braunische Bewegung erzeugt $\eta_{Br}(t) = v(t)$. Für die Entfernung eines Teilchens zu seinem Ursprung gilt $\Delta R(t)_{Br} = R(t) - R(0) = \int_0^t dt' v(t')$. Es ergibt sich für die Mittlere Quadratische Verschiebung:

$\delta r_{norm}^2(t) = <\Delta R(t)_{Br}> = 2dDt$ mit d = Anzahl der Dimension, D = Diffusionskonstante und t = Zeit. Da gewöhnliche Brownische Bewegung einer Gaußverteilung folgt und ein Markowischer Prozess ist, lässt sich für den Propagator folgende Gleichung aufstellen:

$$P(r, t) = [2\pi\delta r_{norm}^2(t)/d]^{-\frac{d}{2}} e^{\frac{-r^2 d}{2\delta r_{norm}^2(t)}} \quad (2.20)$$

2.3 Fractional Brownian Motion

Als Ausgangspunkt wird weiterhin die Differentialgleichung $\partial R(t) = \eta(t)$ betrachtet. $\eta_i(t)$ ist in dem Fall aber nicht mehr delta korreliert in der Zeit, wie für eine einfache Brownische Bewegung. Für Gebrochen-rationale Brownische Bewegung wird eine dauerhaftes Korrelation angenommen, sodass die Mittlere Quadratische Verschiebung nicht mit der für Brownische Bewegung übereinstimmt, aber stattdessen eine exponentielle Abhängigkeit zur Zeit aufweist $\delta r_{fBr}^2(t) = <\Delta R(t)_{fBr}> = 2dK_\alpha t^\alpha$. Die Geschwindigkeitsautokorrelationsfunktion für Gebrochen-rationale Brownische Bewegung kann wie folgt definiert werden:

$$Z(\omega) = K_\alpha \Gamma(1 + \alpha)(iz)^{1-\alpha} \text{ für} \quad (2.21)$$

- K_α = generalisierter Diffusions-Koeffizient
- ω = Frequenz

[2]

2.3.1 Algorythm

Für den im Verlauf verwendeten Integrator muss davon ausgegangen werden, dass keine weiteren Interaktion (Potentiale) auftreten. Da zur Erstellung der Trajektorie ihre sämtlichen Inkremente im voraus durch gewöhnliche Brownische Bewegung

erstellt werden müssen. Der Vorteil von der Methode ist ihre Performance. Der hier verwendete Algorithmus leitet sich vom Davies-Haste Algorithmus [1] ab. Die theoretischen Überlegung aus dem Theorieteil müssen für den Algorithmus in eine diskrete Form gebracht werden.

Das Inkrement ist:

$$\boldsymbol{\eta}(t) \longrightarrow \boldsymbol{\eta}_j \text{ mit } j = (0, 1, 2, \dots, n) \text{ und } n = \text{Schrittanzahl} \quad (2.22)$$

Die dickgeschriebenen Inkremente $\boldsymbol{\eta}_j$ sind als Vektoren zu verstehen. Die Schreibweise wird im Verlauf so belassen. Es ergibt sich für die Länge der Trajektorie:

$$\Delta \mathbf{R}_n = \sum_{j=0}^n \boldsymbol{\eta}_j \Delta t \quad (2.23)$$

Der Algorithmus hat die Motivation die Inkremente $\boldsymbol{\eta}_j$ so zu generieren, dass sie die Eigenschaften der Gebrochen-rationale Brownische Bewegung wiederspiegeln und sie insbesondere dem potentiellen Abklingen der Mittleren Quadratischen Verschiebung folgen.

$$\langle \Delta \mathbf{R}_{fbr} \rangle = 2dK_\alpha t^\alpha \quad (2.24)$$

Der verwendete Algorithmus geht wie folgt:

1. Es werden $2n$ unabhängige Normalverteilte, mit dem Mittelwert $\langle \boldsymbol{\eta}_j \rangle = 0$ und der Standardabweichung $\delta \boldsymbol{\eta}_j = \sqrt{\Delta t}$, Zufallszahlen erstellt:

$$\boldsymbol{\eta}_j = (\boldsymbol{\eta}_0, \boldsymbol{\eta}_1, \boldsymbol{\eta}_2, \dots, \boldsymbol{\eta}_{2n}) = \mathcal{N}(0, \sqrt{\Delta t}) \text{ mit } j = (0, 1, 2, \dots, 2n) \quad (2.25)$$

Im Verlauf des Algorithmus wird die Motivation für die doppelte Anzahl an Zufallszahlen gegenüber der resultierenden Trajektoriellänge für gebrochen-rationale Brownische Bewegung erläutert.

2. Die Inkremente werden dann mit Hilfe einer diskreten Fouriertransformation (numpy.fft) in den Frequenzraum transformiert.

$$\boldsymbol{\eta}_g = \sum_{j=0}^{2n-1} \boldsymbol{\eta}_j e^{-\frac{i 2 \pi j g}{2n}} \text{ mit } g = (0, 1, 2, \dots, 2n) \quad (2.26)$$

$$(2.27)$$

Die entsprechende analytische Fouriertransformation ist:

$$\boldsymbol{\eta}(\omega) = \int_0^\infty e^{-i2\pi\omega t} \boldsymbol{\eta}(t) dt \quad (2.28)$$

$$\text{mit } \omega = g\Delta\omega, \Delta\omega = \frac{1}{2n\Delta t} \text{ und } t = j\Delta t \quad (2.29)$$

3. Daraufhin wird die Auto-Korrelation Funktion [2] angewendet, wodurch die Inkremente jetzt einen gebrochen-rationalen Brownischen Charakter bekommen:

$$\boldsymbol{\eta}_{fbr_g} = \boldsymbol{\eta}_g \sqrt{2\operatorname{Re}(Z_g)} \quad (2.30)$$

$$Z(\omega) = K_\alpha \Gamma(1 + \alpha)(-\iota\omega)^{1-\alpha} \quad (2.31)$$

$Z(\omega)$ wurde durch die analytische Fouriertransformation $Z(\omega) = \int_0^\infty e^{i\omega t} Z(t) dt$ bestimmt. Da Numpy FFT eine andere Definition der Fouriertransformation benutzt (siehe Formel 2.28), wird $Z'(\omega) = \int_0^\infty e^{-i2\pi\omega t} Z(t) dt = K_\alpha \Gamma(1 + \alpha)(i\omega 2\pi)^{1-\alpha}$ so umgeschrieben. Im Anschluss wird $Z(\omega) \rightarrow Z_g$ (nach Formel 2.29) in eine diskrete Form gebracht.

$$\rightarrow Z_g = K_\alpha \Gamma(1 + \alpha)(i2\pi g\Delta\omega)^{1-\alpha} = K_\alpha \Gamma(1 + \alpha)(ig \frac{\pi}{n\Delta t})^{1-\alpha} \quad (2.32)$$

4. Für gebrochen-rationale Brownischen Bewegung ist die Auto-Korrelations Funktion an der Stelle 0: $Z_{g=0} = 0$. Daraus folgt nach Formel 2.30, dass auch das Nullte Inkrement im Frequenzraum $\boldsymbol{\eta}_{fbr_{g=0}} = 0$ ist. Das Nullte Inkrement im Frequenzraum ist mit Formel 2.23 aber auch:

$$\boldsymbol{\eta}_{fbr_{g=0}} = \sum_{j=0}^{2n-1} \boldsymbol{\eta}_j e^0 = \frac{\Delta \mathbf{R}}{\Delta t} \quad (2.33)$$

$\Delta \mathbf{R}$ ist in dem Fall die zurückgelegte Entfernung nach $2n$ Zeitschritten. Dadurch würde das Teilchen nach $2n$ Schritten wieder zurück an seinen Ursprung kehren. Stattdessen wird Das Nullte Inkrement im Frequenzraum folgendermaßen berechnet:

$$\boldsymbol{\eta}_{fbr_{g=0}} = \mathcal{N}(0, \sqrt{2K_\alpha(2n\Delta t)^\alpha}) \quad (2.34)$$

gerechnet. Dies wäre korrekt, wenn Gebrochen-rationale Brownische Bewegung ein Markowischer Prozess wäre. Da dies nicht der Fall ist, entsteht an dieser Stelle eine Approximation. Um sie genauer zu verstehen muss ich mich damit noch weiter beschäftigen. Um den Einfluss der Approximation zu verringern wurde in Schritt 1 die doppelte Menge an Inkrementen erstellt. Die Hoffnung ist, dass der Einfluss der Approximation mit zunehmender Entfernung von $2\Delta R_{fbr}$ immer geringer wird und bei ΔR_{fbr} bereits vernachlässigbar ist.

5. In der Zeitdomäne ergeben sich die Inkremente durch die Rücktransformation als:

$$\eta_{fbr_j} = \frac{1}{2n} \sum_{g=0}^{2n-1} \eta_g e^{\frac{2\pi i j g}{2n}} \quad (2.35)$$

Es wird nur die erste Hälfte der Inkremente, η_{fbr_j} für $j = (0, 1, \dots, n)$, weiter verwendet.

Für die drei dimensionale Gebrochen-rationale Brownische Bewegung kann für jede kartesische Komponente der soeben beschriebene Algorithmus verwendet werden, da davon ausgegangen wird, dass die Kartesischen Komponenten der Inkremente untereinander nicht korreliert sind.

Analyse of Algorythm

Hier kommen die Plots aus dem Analyse Skript rein.

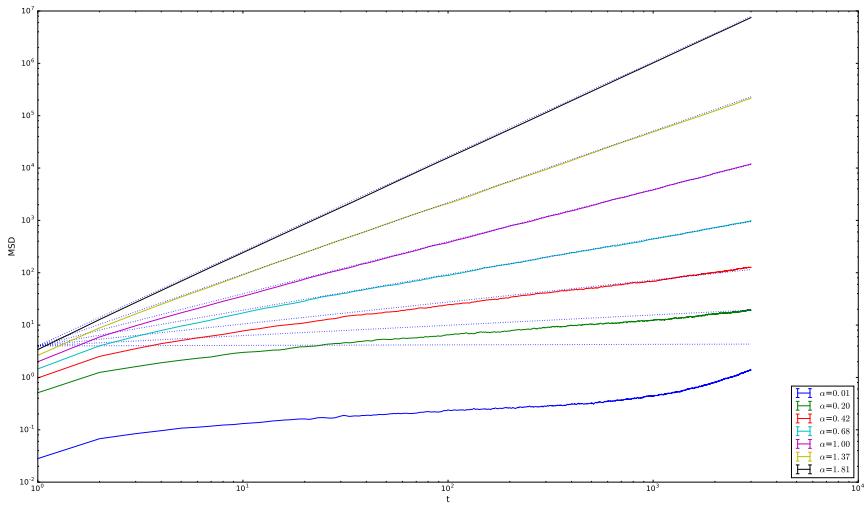
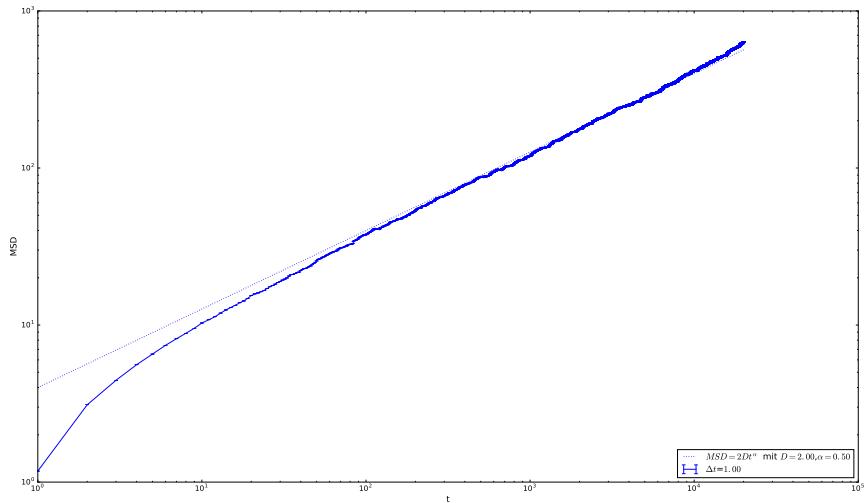
Figure 2.1: Mean Square Displacement of different α 

Figure 2.2: Mean Square Displacement (Ensemble average of 4000 Trajectories)

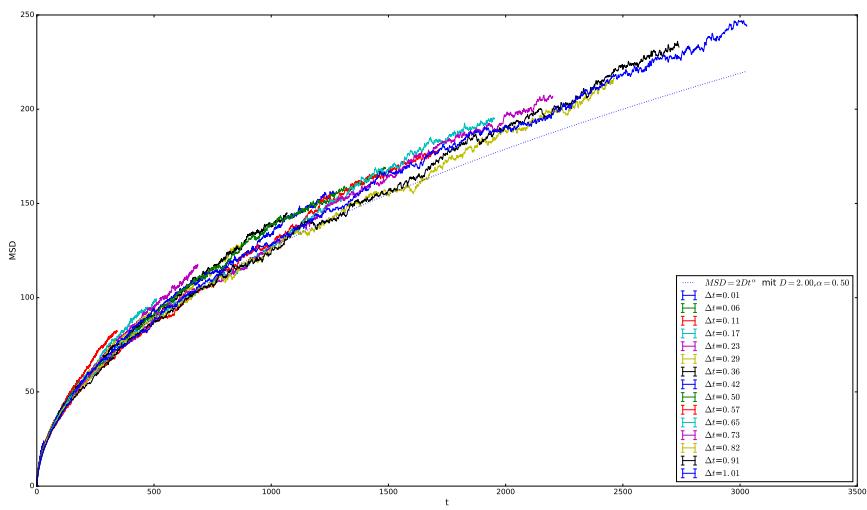


Figure 2.3: Mean Square Displacement (Ensemble average fpr different Δt)

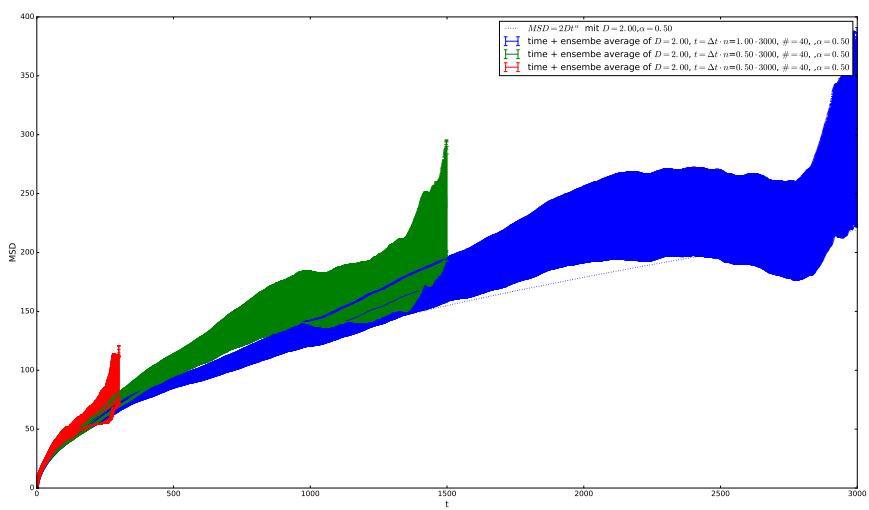


Figure 2.4: Mean Square Displacement (time and ensemble average for different Δt and with standard deviation of the Mean)

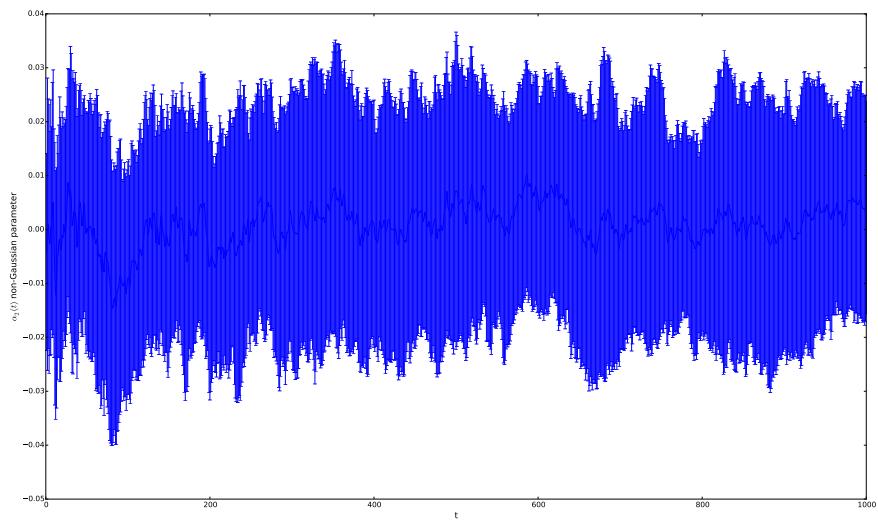


Figure 2.5: Non-gaussian parameter of $\alpha = 0.5$, $D = 2$ and 5000 trajectories ensemble.

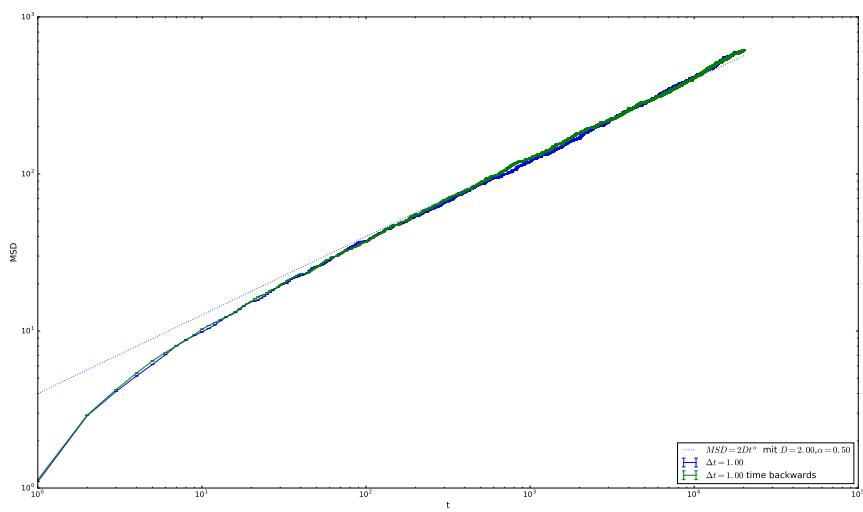


Figure 2.6: Non-gaussian parameter of $\alpha = 0.5$, $D = 2$ and 5000 trajectories ensemble.

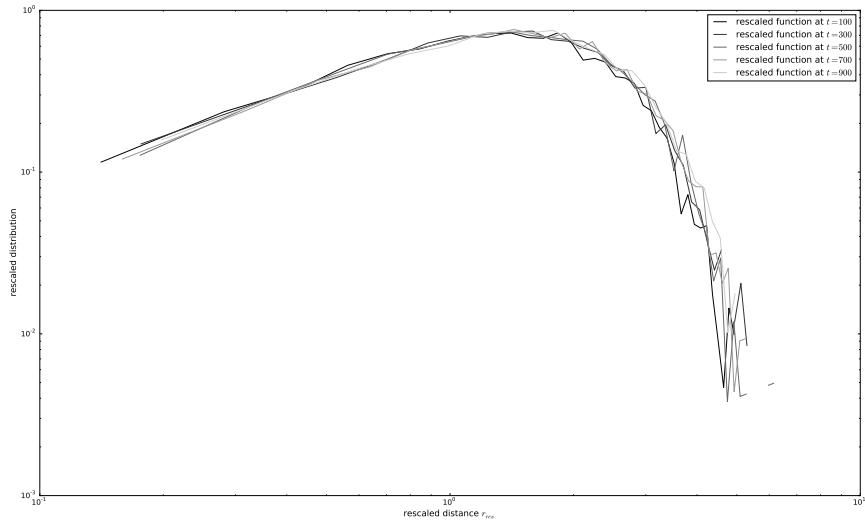
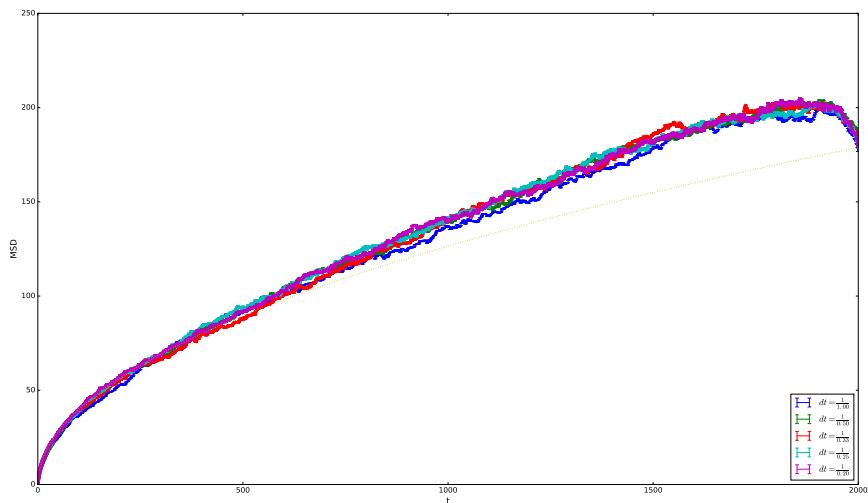
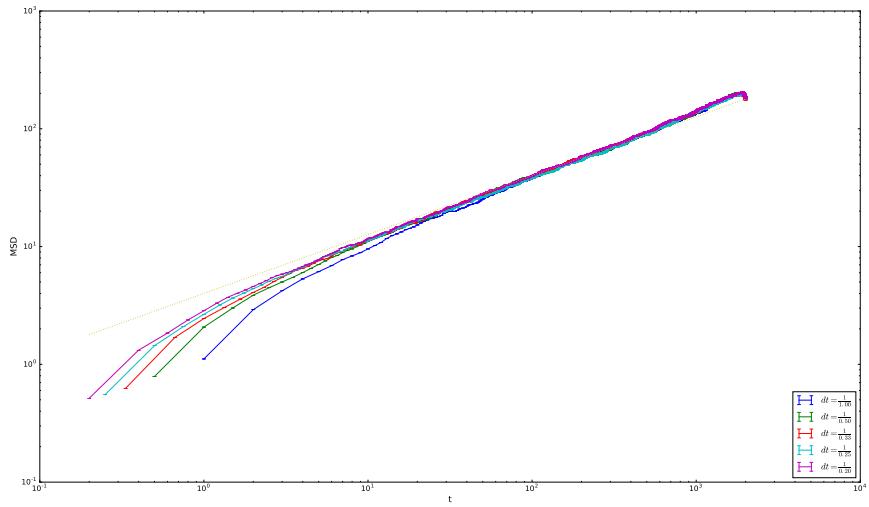
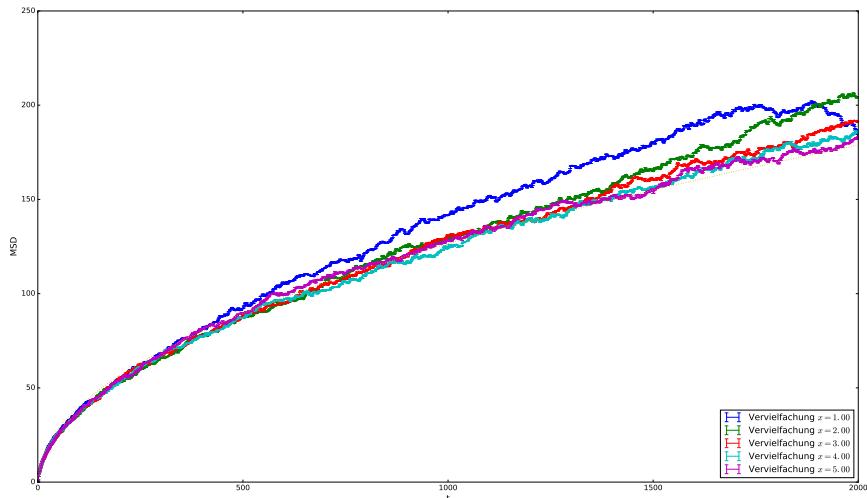


Figure 2.7: rescaled function for different times

Figure 2.8: variere dt bei gleichem Faktor 1

Figure 2.9: variere dt bei gleichem Faktor 1, logarithmischFigure 2.10: variere Faktor bei gleichem dt

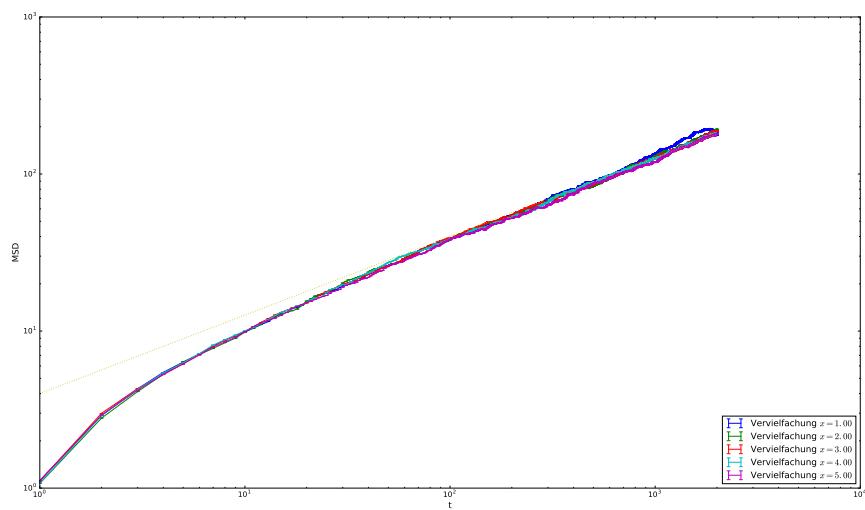


Figure 2.11: variere Faktor bei gleichem dt, logarithmisch

3 Reactions-Diffusion-Dynamics

4 Status Quo & Outlook

5 Appendix

5.0.1 Code: Gebrochen-rationale Brownische Bewegung

```
1 # -*- coding: utf-8 -*-
2 --author__ = 'janek'
3 import numpy as np # module for scientific computing
4 from scipy import integrate
5 import matplotlib.pyplot as plt # module for plotting "a la" matlab
6 import test_cython.genereatefracincrements as ginc
7
8
9 class Felix_Method():
10
11     def __init__(self, D, particles, length, alpha, dt, x=2, version="python"):
12         self.D=D
13         self.K_alpha=D
14         self.particles=particles
15         self.n=length
16         self.alpha=alpha
17         self.ki=self.n*x
18         self.frq=np.fft.freq(self.ki)*(np.pi*2. / (dt))
19         self.t=np.array(range(length))
20         self.dt=dt
21         self.version=version
22
23     def z(self):
24         """
25             :param D: Diffusionskoeffizient
26             :param alpha: Anomalieparameter
27
28
29             :return: z: Correlationsfunktion im Frequenzraum welche auf die
30             gew hnliche diffusion angewendet wird.
31
32
33
```

```

35     """
36     z=((((+1j* self . frq ))** (1- self . alpha ))* self . K_alpha *np . math .
37     gamma(1+ self . alpha ))
38     return z
39
40     def compute_trajectory ( self ):
41         """
42             :param D: Diffusionskoeffizient
43             :param particles: Anzahl an Teilechen welche simuliert werden
44             sollen .
45
46             :param length: L nge der Trajektorien , welche simuliert werden
47             sollen .
48
49             :param alpha: Anomalieparameter
50
51             :return: ( Particles x Length ) Array of Trajectories of all
52             particles . Close to :cite:`Graigmile2003` "
53
54         """
55
56         #plt . plot ( self . frq , " r ")
57         #plt . plot ( np . arange (-np . pi / self . dt , np . pi / self . dt ,( np . pi /( self . n* self . dt ))))
58         #plt . show ()
59         r_t_allparticles = []
60         if self . version == "cpp":
61             inc = ginc . pyIncrements ( self . n, self . particles )
62             inc . generateIncrements ( self . D, self . dt , self . alpha )
63             a = inc . returnIncrements ()
64             r_t = np . cumsum ( a [:, 0 ,:], axis = 1 )
65             r_t [:, 0 ] = 0
66             return r_t
67         if self . version == "python":
68             for particle in range ( self . particles ):
69                 #r = np . random . RandomState (1234)
70                 v_t =(np . random . normal (0,np . sqrt ( self . dt ), size = self . ki ))
71 #todo mit matrix . shape k nnen man eine zuf llige Verteilung von
72 allen daten generieren
73                 v_t = np . array ( v_t )
74                 v_fraq = np . fft . fft ( v_t )
75                 v_ano_fraq = np . sqrt ( self . z () . real * 2 . ) * v_fraq
76                 v_ano_fraq [0] = np . random . normal (0,np . sqrt ( 2 . * self . K_alpha
77 * ( self . ki * self . dt )** self . alpha ))

```

```

73         #v_ano_frq [ self .n]=np .sqrt ( self .z () [ self .n]. real* self .n
    *2)* v_t [ self .ki-1]
    #v_ano_frq [ self .n-1]=np .sqrt ( self .z () [ self .n]. real* self .
    .n*2)* v_t [ self .ki-1]
    v_ano_t=np .fft .ifft ( v_ano_frq)
    #r_t1=np .cumsum( v_ano_t [: self .n]. real) #Ort bei
    anomaler Diffusion in Abh ngigkeit von der zeit
    r_t=np .zeros( self .n)
    r_t [1:]=np .cumsum( v_ano_t [: self .n]. real) [1:] #Ort bei
    anomaler Diffusion in Abh ngigkeit von der zeit
    r_t_allparticles.append(r_t) # Trajektorie bei anomaler
    Diffusion f r alle teilchen
    return np .array( r_t_allparticles)

```

..//simulation.py

Bibliography

- [1] Peter F. Craigmile.
Simulating a class of stationary Gaussian processes using the Davies-Harte algorithm, with application to long memory processes.
Journal of Time Series Analysis, 24(5):505–511, 2003.
- [2] Felix Höfling and Thomas Franosch.
Anomalous transport in the crowded world of biological cells.
Reports on Progress in Physics, 76(4):046602, apr 2013.

inspired by http://www.weizmann.ac.il/weizsites/mukamel/files/2013/01/Brownian_Motion.pdf