Fokker-Planck Gleichung

Max Haardt

WWU Münster

21. November 2008

Inhalt

Einleitung

Langevin Gleichung

Langevin Gleichung

$$\dot{x} = h(x,t) + g(x,t)\Gamma(t)$$

- $\Gamma(t)$: Normalverteilte δ korrelierte Zufallskraft
- Bewegungsgleichung direkt für die Beobachtungsgröße
- Allerdings Lösung aller mikroskopischen Gleichungen notwendig
- Alternative Betrachtung: Trajektorie $x(t) \rightarrow$ Wahrscheinlichkeitsdichte $p(x,t)$

Fokker-Planck Gleichung

Fokker-Planck Gleichung

$$\frac{\partial p(x,t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}[D^{(1)}(x,t)p(x,t)] + \frac{\partial^2}{\partial x^2}[D^{(2)}(x,t)p(x,t)]$$

- $D^{(1)} = h(x,t)$ Driftkoeffizient $D^{(2)} = (g(x,t))^2$ Diffusionskoeffizient
- Beschreibt die Zeitentwicklung einer Wahrscheinlichkeitsdichte $p(x,t)$

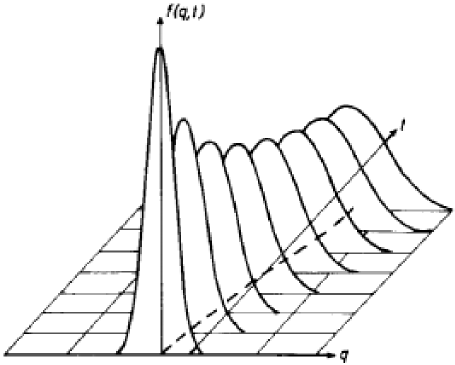


Abbildung: Aus H.Haken: Synergetics An introduction, 2.Auflage,Springer Verlag

- Lösung der Fokker-Planck Gleichung führt in der Regel zu einer Gaußverteilung

Herleitung

Mastergleichung

Mastergleichung

$$\frac{\partial p(x,t)}{\partial t} = \underbrace{\int W(x' \to x)p(x',t)dx'}_{Quellen} - \underbrace{\int W(x \to x')p(x,t)dx'}_{Senken}$$

- Bilanzgleichung
- Beschreibt die Zeitentwicklung der Wahrscheinlichkeitsdichte $p(x,t)$ eines Systems
- Übergangsrate $W(x' \to x) = \lim_{\Delta t \to 0} \frac{p(x,t+\Delta t|x',t)}{\Delta t}$
- Bedingte Wahrscheinlichkeit $p(x,t + \Delta t|x', t)$
- Gültig nur für Markow Prozesse:

$$p(x_1|x_2,x_3,\ldots) = p(x_1|x_2)$$

Kramers-Moyal Entwicklung

- Einsetzen der Länge des Sprungs $\Delta x = x - x'$:

$$\Rightarrow W(x' \rightarrow x) = W(x'; \Delta x) = W(x - \Delta x; \Delta x)$$

- Taylorentwicklung des ersten Terms der Mastergleichung nach $\Delta x \Rightarrow$

Kramers-Moyal Entwicklung

$$\frac{\partial p(x,t)}{\partial t} = \sum_{n=1}^{\infty} (-\frac{\partial}{\partial x})^n (p(x,t) \underbrace{\frac{1}{n!} \int (\Delta x)^n W(x; \Delta x) d(\Delta x))}_{D^{(n)}(x,t)}$$

- $D^{(n)}(x,t)$ Kramers-Moyal Entwicklungskoeffizienten

- Problem: Gleichung hat unendlich viele Terme
- Frage: Wann bricht die Reihe ab?
- Satz von Pawula: Verschwindet der 4. Term ($D^{(4)}(x,t)$), so verschwinden auch der 3. und alle höheren Terme
- Dies ist der Fall für eine Gaußverteilte δ korrelierte Langevin Kraft

Fokker-Planck Gleichung

Fokker-Planck Gleichung in 1D

$$\frac{\partial p(x,t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}[D^{(1)}(x,t)p(x,t)] + \frac{\partial^2}{\partial x^2}[D^{(2)}(x,t)p(x,t)]$$

$D^{(1)}$ Driftkoeffizient

$D^{(2)}$ Diffusionskoeffizient

Fokker-Planck Gleichung in 3D

$$\frac{\partial p(\overrightarrow{x},t)}{\partial t} = -\sum_i \frac{\partial}{\partial x_i}[D_i^{(1)}(\overrightarrow{x},t)p(\overrightarrow{x},t)] + \sum_{ij} \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j}[D_{ij}^{(2)}(\overrightarrow{x},t)p(\overrightarrow{x},t)]$$

$\overrightarrow{D}^{(1)}$ Driftvektor

$D^{(2)}$ Diffusionsmatrix

Vorteile Gegenüber der Mastergleichung:

- Die Fokker-Planck Gleichung ist eine reine DGL
- Nur die Bestimmung von Driftkoeffizient $D^{(1)}$ und Diffusionkoeffizient $D^{(2)}$ erforderlich

Kramers-Moyal Entwicklungskoeffizienten

- Zu zeigen:

$$D^{(n)}(x,t) = \frac{1}{n!} \lim_{\Delta t \to 0} \frac{1}{\Delta t} < [\xi(t+\Delta t) - \xi(t)]^n > |_{\xi(t)=x}$$

- Bedingte Momente:

$$M_n(x,t,\Delta t) =< [\xi(t+\Delta t) - \xi(t)]^n > |_{\xi(t)=x}$$

Beispiele und Lösungen

Die Fokker-Planck Gleichung als Kontinuitätsgleichung

- Im folgenden:

$$\textit{Driftkoeffizient} : D^{(1)} = K \quad \textit{Diffusionskoeffizient} : D^{(2)} = D$$

- Definieren des Wahrscheinlichkeitsflusses:

$$J = [K - D\frac{d}{dx}]p(x,t)$$

$\Rightarrow$ FPG nimmt die Form einer Kontinuitätsgleichung an:

$$\frac{\partial p}{\partial t} + \frac{d}{dx}J = 0$$

Stationäre Lösung der Fokker-Planck Gleichung

- Für den stationären Fall gilt:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = 0 \qquad \Rightarrow \qquad J = const$$

- Natürliche Randbedingungen:

$$p \rightarrow 0 \quad für \quad x \rightarrow \pm\infty \quad \Rightarrow \quad J \rightarrow 0 \quad für \quad x \rightarrow \pm\infty$$

- Zu lösende Gleichung:

$$D \frac{dp(x)}{dx} = Kp(x)$$

Stationäre Lösung der Fokker-Planck Gleichung

- Lösung durch Exponentialansatz:

$$p(x) = N \cdot exp(-V(x)/D)$$

- Potential:

$$V(x) = \int_{x_0}^{x} K(x)dx$$

- Normierungskonstante N bestimmt durch

$$\int_{-\infty}^{+\infty} p(x)dx = 1$$

Beispiel

$$D = const \qquad K(x) = -\alpha x - \beta x^3 \quad \Rightarrow \quad V(x) = \frac{\alpha}{2}x^2 + \frac{\beta}{4}x^4$$

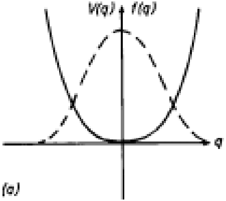
- Wahrscheinlichkeitsverteilung

$$p(x) = N \cdot exp[-(\frac{\alpha}{2}x^2 + \frac{\beta}{4}x^4)/D]$$

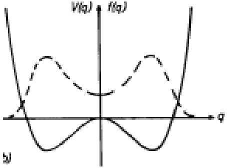
- Langevin Gleichung

$$\dot{x} = -\alpha x - \beta x^3 + \sqrt{D}\Gamma(t)$$

- Zufallskraft schiebt ein Teilchen einen Potentialtopf hoch
- Nach jedem Schub fällt das Teilchen wieder herunter



(a) Fall $\alpha > 0$



(b) Fall $\alpha < 0$ Doppelmulden Potential

Ornstein-Uhlenbeck Prozess

- Linearer Driftkoeffizient $K = -\gamma x$
- Daraus folgt: Harmonisches Potential um die Gleichgewichtslage $V(x) = \frac{1}{2}\gamma x^2$
- Konstanter Diffusionskoeffizient $D = const$

Fokker-Planck Gleichung für den Ornstein-Uhlenbeck Prozess

$$\frac{\partial p(x,t)}{\partial t} = \gamma \frac{\partial}{\partial x}[xp(x,t)] + D \frac{\partial^2}{\partial x^2} p(x,t)$$

- Anfangsbedingung $p(x,t=0) = \delta(x - x_0)$

Lösung der Gleichung im Fourierraum

- Fouriertransformierte der Gleichung:

$$\frac{\partial \tilde{p}(k,t)}{\partial t} = -\gamma k \frac{\partial}{\partial k}\tilde{p}(k,t) - Dk^2 \tilde{p}(k,t)$$

- Anfangsbedingung wird zu:

$$p(k,t=0) = e^{-ikx_0}$$

- Rücktransformation der Lösung:

$$p(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} exp[-\frac{(x- < x >)^2}{2\sigma^2}]$$

$$\text{mit} < x >= e^{-\gamma t} x_0 \qquad \sigma^2 = \frac{1}{\gamma} D(1 - e^{-2\gamma t})$$

- Lösung entspricht einer Gaußverteilung
- Zum Zeitpunkt 0 ist die Varianz 0 $\Rightarrow$ Lösung ist eine δ-Funktion
- Für steigendes t konvergiert die Lösung gegen eine Gaußverteilung mit Varianz $\frac{D}{\gamma}$

Stationäre Lösung

Für $t \to \infty$ folgt ergibt sich der Gleichgewichtszustand:

$$p(x,t \to \infty) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} exp[-\frac{(x- < x >)^2}{2\sigma^2}]$$

mit $< x >= 0$ $\qquad$ $\sigma^2 = \frac{D}{\gamma}$

- Es ergibt sich:

$$p(x,t \to \infty) = \frac{1}{\sqrt{2\pi D/\gamma}} exp[-\frac{x^2}{2D/\gamma}]$$

Anwendung der Fokker-Planck Gleichung auf die Brownsche Bewegung

- Die Fokker-Planck Gleichung läßt sich aus den Lösungen der Langevin Gleichung gewinnen:

$$v(t) = v_0 exp(-\gamma t) + \int_0^t dt' exp(-\gamma(t-t'))\Gamma(t')$$

- Ziel: Berechnung von Drift- und Diffusionskoeffizient

Berechnung von Drift und Diffusionskoeffizient

- Driftkoeffizient:

$$D^{(1)}(v,t) = \lim_{\Delta t \to 0} \frac{1}{\Delta t} < [V(t+\Delta t) - V(t)] > |_{V(t)=v}$$

$$D^{(1)}(v,t) = -\gamma v$$

- Diffusionskoeffizient:

$$D^{(2)}(v,t) = \frac{1}{2} \lim_{\Delta t \to 0} \frac{1}{\Delta t} < [V(t+\Delta t) - V(t)]^2 > |_{V(t)=v}$$

$$D^{(2)}(v,t) = \frac{\gamma k_B T}{m}$$

Fokker-Planck Gleichung für die Brownsche Bewegung

Fokker-Planck Gleichung für die Brownsche Bewegung

$$\frac{\partial p(v,t)}{\partial t} = \gamma \frac{\partial}{\partial v}[vp(v,t)] + \gamma \frac{k_B T}{m} \frac{\partial^2}{\partial v^2} p(v,t)$$

- Erster Term auf der rechten Seite: Driftterm
  Beschreibt die dynamische Reibung
- Zweiter Term auf der rechten Seite: Diffusionsterm
  Beschreibt den Diffusionsprozess im Geschwindigkeitsraum

Stationäre Lösung

- Annahme Für große t:

$$\lim_{t\to\infty} p(v,t) = p(v) \quad ; \quad \frac{\partial p(v,t)}{\partial t} = 0$$

- Die Fokker-Planck Gleichung wird zu:

$$\gamma \frac{\partial}{\partial v}[vp(v)] + \gamma \frac{k_B T}{m} \frac{\partial^2}{\partial v^2} p(v) = 0$$

- Lösung ist die Maxwell-Boltzmannsche Geschwindigkeitsverteilung:

$$p(v) = c \cdot exp(\frac{-mv^2}{2k_B T}) \quad ; \quad c = (\frac{m}{2\gamma\pi k_B T})^{1/2}$$

- Lösung entspricht der des Ornstein-Uhlenbeck Prozesses

Zusammenfassung

- Langevin und Fokker-Planck Gleichung sind äquivalente Beschreibungen eines stochastischen Prozesses
- Die Fokker-Planck Gleichung läßt aus der Mastergleichung unter Anwendung der Kramers-Moyal Entwicklung und des Pawula Theorems herleiten
- Der Ornstein-Uhlenbeck Prozess ist ein einfaches Beispiel für Systeme, die man durch Fokker-Planck beschreiben kann
- Lösung ist in der Regel eine Gaußfunktion

Vielen Dank für Ihre Aufmerksamkeit

Literatur

- H.Risken: The Fokker-Planck Equation, 1. Auflage, Springer-Verlag
- H.Haken: Synergetics, 2.Auflage, Springer Verlag