11.4. Die Fokker-Planck-Gleichung

- **Motivation:** DGl. für $P(x,t)$
  mit $P(x,t)\,dx$ ... Wahrscheinlichkeit System zur Zeit t in $[x, x+dx]$ anzutreffen.

  $\longrightarrow$ Berechnung von Momenten und Zeitkorrelationsfunktionen
  $\hat{=}$ Meßgrößen des stochast. Prozesses

a) Kramers-Moyal-Entwicklung:

- Führe ein: Propagator = bedingte Wahrscheinlichkeit

$$\boxed{P(x, t+\tau \,|\, x', t) \text{ ... für } x \text{ bei } t+\tau, \text{ wenn } x' \text{ bei } t \text{ mit Sicherheit vorliegt}} \qquad (11.23)$$

damit:
$$P(x, t+\tau) = \int P(x, t+\tau \,|\, x', t)\, P(x', t)\, dx' \qquad (11.24)$$

NB: Markov-Prozeß! $P(x,t)$ hängt nur von unmittelbarer Vergangenheit ab!

- **Ziel:** Gl. für $\frac{\partial P}{\partial t}$!

  (i) Berechne:

neue Variable: $x' \to \Delta$
$\Delta = x - x'$

$$P(x, t+\tau \,|\, x', t)\, P(x', t) = P(x+\Delta-\Delta, t+\tau \,|\, x-\Delta, t)\, P(x-\Delta, t)$$

$$\overset{\text{Taylor}}{=} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \Delta^n \left(\frac{\partial}{\partial x}\right)^n \big[\underbrace{P(x+\Delta, t+\tau \,|\, x, t)}_{\substack{\text{neue Fkt. in } x \\ \text{mit } \Delta \text{ als Index}}}\, P(x,t)\big] \qquad (11.25)$$

(ii) also:

$$P(x,t+\tau) \overset{(11.24)}{=} \int (11.25)\, dx'$$

$$\text{mit} \int_{-\infty}^{\infty} \dots dx' \underset{\substack{\Delta = x-x' \\ d\Delta = -dx' \\ x \text{ fest}}}{=} -\int_{\infty}^{-\infty} \dots d\Delta = \int_{-\infty}^{\infty} \dots d\Delta$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \left(\frac{\partial}{\partial x}\right)^n \Big[\underbrace{\int \Delta^n P(x+\Delta, t+\tau | x,t)\, d\Delta}_{n.\text{tes Moment: } \langle [x(t+\tau)-x(t)]^n \rangle} \; P(x,t) \Big]$$

insbes.: $\langle [\dots]^0 \rangle = \langle 1 \rangle = 1$! Normierung

$$\longrightarrow P(x,t+\tau) = \underbrace{P(x,t)}_{\text{von } n=0} + \sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{\partial}{\partial x}\right)^n \Big[\underbrace{\frac{\langle [x(t+\tau)-x(t)]^n \rangle}{n!}}_{= D^{(n)}(x,t)\tau + O(\tau^2)} P(x,t) \Big]$$

(10.26)

... Kramers-Moyal-Koeff.

$$\text{mit } \frac{P(x,t+\tau) - P(x,t)}{\tau} \xrightarrow[\tau \to 0]{} \frac{\partial P(x,t)}{\partial t}$$

$$\longrightarrow \boxed{\begin{aligned} &\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = L_{KM}(x,t)\, P(x,t) \\ &\text{mit } L_{KM} = \sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{\partial}{\partial x}\right)^n \left[D^{(n)}(x,t) \dots \right] \end{aligned}} \quad (11.26)$$

... Kramers-Moyal-(Vorwärts)-Entwicklung

≙ „propagiert vorwärts in der Zeit!"

NB: Propagator: $P(x,t|x',t')$ ... Lsg. von (11.26) mit

Anfangsbed. $P(x,t') = \delta(x-x')$

[bei t' liegt x' mit Sicherheit vor!]

• Berechnung von:

(i) Momenten: $\langle x^n(t)\rangle = \int x^n P(x,t)\,dx$ (11.27)

(ii) Zeitkorrelationsfunktion:

$$\langle x(t)\,x(t')\rangle = \iint x x' \underbrace{P(x,t;x't')}_{\text{Wahrscheinl. } x \text{ bei } t \text{ und } x' \text{ bei } t' \text{ anzutreffen}} dx\,dx'$$

$$= \iint x x' \; P(x,t\,|\,x',t')\,P(x',t')\,dx\,dx'$$

[vgl. Kap. 9.3]

<u>NB</u>: im therm. GG: $P(x',t') = P(x') \sim e^{-E(x')/k_BT}$

• Kramers-Moyal-(Rückwärts-)Entwicklung: o.B.

$$\boxed{\begin{aligned}\frac{\partial P(x,t|x',t')}{\partial t'} &= -L^{+}_{KM}(x',t')\,P(x,t|x',t') \\ \text{mit adj. Operator: } L^{+}_{KM}(x',t) &= \sum_{n=1}^{\infty} D^{(n)}(x',t')\left(\frac{\partial}{\partial x'}\right)^n\end{aligned}} \quad (11.29)$$

… „propagiert rückwärts in der Zeit!"

<u>NB</u>: L^{+}_{KM} adjungiert zu L_{KM} aus (11.26)

<u>Beweis</u>: Berechne

$$\langle g(x)|L_{KM}|f(x)\rangle$$

ein Summand:

$$\longrightarrow \langle g(x)|\left(-\frac{\partial}{\partial x}\right)^n D^{(n)}(x)\,|\,f(x)\rangle$$

$$= \int g(x)\left(-\frac{\partial}{\partial x}\right)^n D^{(n)}(x)\,f(x)\,dx$$

$$= \underbrace{\int -\frac{\partial}{\partial x}\left[g(x)\left(-\frac{\partial}{\partial x}\right)^{n-1} D^{(n)}(x)\,f(x)\right]dx}_{=0 \text{ mit } „g(\pm\infty)=0“}$$

$$+ \int\left[\frac{\partial}{\partial x}g(x)\right]\left(-\frac{\partial}{\partial x}\right)^{n-1} D^{(n)}(x)\,f(x)\,dx$$

$$= \int\left[\left(\frac{\partial}{\partial x}\right)^n g(x)\right] D^{(n)}(x)\,f(x)\,dx \qquad \text{qed}$$

• <u>Pawula – Theorem:</u> (o. B.)

$$\boxed{P(x,t) \geq 0 \;\ldots\; \text{positiv definit} \longleftrightarrow \begin{cases} \text{(i) } D^{(n)} = 0, \; n \geq 3 \\ \text{(ii) unendliche Anzahl} \\ \quad \text{von } D^{(n)} \neq 0 \end{cases}}$$

Fall (i): $D^{(n)}(x,t) = 0, \; n \geq 3$

(11.26) $\longrightarrow$ Fokker–Planck/ Vorwärts-Kolmogorov Gl.

b) <u>Fokker – Planck – Gleichung:</u>

• Verallgemeinerung auf mehrere Variable: $\underline{x} = (x_1, \ldots, x_N)$

<u>o. B.</u>:

$$\boxed{\begin{aligned} \frac{\partial P(\underline{x},t)}{\partial t} &= L_{FP}(\underline{x},t)\, P(\underline{x},t) \\ \text{mit } L_{FP} &= -\frac{\partial}{\partial x_i} D_i^{(1)}(\underline{x},t) + \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} D_{ij}(\underline{x},t) \end{aligned}} \tag{11.31}$$

<u>Bem</u>: $\underline{D}^{(1)}$, $\underline{\underline{D}} = \underline{\underline{D}}^{(2)}$ .. Kramers-Moyal-Koeffizienten [s. (10.35), (10.36)/(11.17), (11.18)]

bestimmen stochast. Prozeß vollständig!

• Formulierung als Kontinuitätsgl.: $\int P \, d^N x = 1$

$$\boxed{\begin{aligned} \frac{\partial P(\underline{x},t)}{\partial t} &= -\operatorname{div} \underline{j} = -\frac{\partial}{\partial x_i} j^i \\ \text{mit } j_i &\overset{(11.31)}{=} \left(D_i^{(1)} - \frac{\partial}{\partial x_j} D_{ij} \right) P(\underline{x},t) \end{aligned}} \tag{11.32}$$

c) <u>Beispiele:</u>

(i) Brownsches Teilchen:

• mit Trägheit und äußerer Kraft $F(x) = -\frac{\partial}{\partial x} U$, 1D:

$$\boxed{\begin{aligned} \dot{x} &= v \\ \dot{v} &= \frac{1}{m}\left[-\gamma v + F(x) + \sqrt{2 k_B T \gamma}\, \Gamma(t) \right] \\ &\text{mit } \langle \Gamma(t) \Gamma(t') \rangle = \delta(t-t') \end{aligned}} \tag{11.33}$$

NB: (1) $\sqrt{2k_BT\gamma}$ wegen FD-Theorem

(2) 2 stochast. Variable x, v

• Vgl. mit (11.19): $\dot{x}_i = h_i + g_{ij}\Gamma_j(t)$

$$\longrightarrow \quad \Gamma_x = 0 \,, \quad \Gamma_v = \Gamma \qquad (11.34)$$

$$h_x = v \,, \quad h_v = -\frac{1}{m}\left[\gamma v - F(x)\right]$$

$$g_{xx} = g_{xv} = g_{vx} = 0 \,, \quad g_{vv} = \frac{\sqrt{2k_BT\gamma}}{m}$$

aus (11.20) bzw (11.21):

$$\longrightarrow \quad D_x^{(1)} = h_x = v \,, \quad D_v^{(1)} = h_v = -\frac{1}{m}\left[\gamma v - F(x)\right] \qquad (11.35)$$

$$D_{vv} = \frac{1}{2} g_{vv}^2 = \frac{k_BT\gamma}{m^2}$$

• also: FP-Gl. für $P(x,v,t)$:

$$\boxed{\frac{\partial P}{\partial t} = \left[-\frac{\partial}{\partial x} v + \frac{1}{m}\frac{\partial}{\partial v}\left[\gamma v - F(x)\right] + \frac{k_BT\gamma}{m^2}\frac{\partial^2}{\partial v^2}\right] P(x,v,t)} \qquad (11.36)$$

... (Klein)-Kramers-Gleichung

• Lsg. im stationären Fall:

$$\frac{\partial P_{stat}}{\partial t} = 0 \longrightarrow \boxed{P_{stat} \sim e^{-E/k_BT} \quad \text{mit } E = \frac{m}{2}v^2 + U(x)} \qquad (11.37)$$

... Boltzmannverteilung

Beweis: Zeige selbst, klar

• ohne äußere Kraft: FP-Gl. für $P(v,t) = \int_{-\infty}^{\infty} P(x,v,t)\,dx$

mit $\int (11.36)\,dx$ und $\int \frac{\partial}{\partial x} P(x,v,t) = P(x,v,t)\Big|_{-\infty}^{\infty} = 0$

$$\xrightarrow[F(x)=0]{} \quad \boxed{\frac{\partial P}{\partial t} = \Big[\underbrace{\frac{\gamma}{m}\frac{\partial}{\partial v} v + \frac{k_BT\gamma}{m^2}\frac{\partial^2}{\partial v^2}}_{\text{„Diffusion im Geschw.raum"}}\Big] P(v,t)} \qquad (11.38)$$

(ii) Kolloiddynamik ohne Trägheit: $t > \tau_B$ ... Brownsche Zeitskala
$\gg$ Impulsrelaxation

• Langevin-Gl.:

$$\underline{U} = \dot{\underline{X}} = \underline{\underline{M}}\left[\underline{F} + \underline{\Gamma}(t)\right]$$

mit $\langle \underline{\Gamma}(t) \circ \underline{\Gamma}(t') \rangle = 2k_BT\,\underline{\underline{M}}^{-1}\,\delta(t-t')$

NB: $\underline{\underline{M}} = \underline{\underline{M}}(\underline{X})$

• Kramers-Moyal-Entw. Koeff.:

(10.36) & (10.37) $\longrightarrow$ $\underline{D}^{(1)}(\underline{X}) = \frac{1}{k_BT}\underline{\underline{D}}\,\underline{F} + \operatorname{div}\underline{\underline{D}}$

$$\underline{\underline{D}}(\underline{X}) = k_BT\,\underline{\underline{M}}$$

• also FP-Gl. = Smoluchowski-Gl. für $P(\underline{X},t)$

$$\boxed{\frac{\partial P}{\partial t} = -\underline{\nabla}\cdot\left[\underline{D}^{(1)}(\underline{X})\,P(\underline{X},t)\right] + \nabla_i\nabla_j\left[D_{ij}(\underline{X})\,P(\underline{X},t)\right]} \quad (11.39)$$

• mit $\nabla_i\nabla_j\left[D_{ij}(\underline{X})P(\underline{X},t)\right] = \nabla_i\left[D_{ij}\nabla_j P + \underbrace{\underbrace{(\nabla_j D_{ij})}_{(\operatorname{div}\underline{\underline{D}})_i}}_{\text{hebt sich gegen rausch-ind. Drift in } \underline{D}^{(1)}(\underline{X}) \text{ weg}} P\right]$

$$\longrightarrow \boxed{\frac{\partial P}{\partial t} = \underline{\nabla}\cdot\left[\underline{\underline{D}}\left(-\frac{1}{k_BT}\underline{F} + \underline{\nabla}\right)P\right]}$$

vgl. (10.49)

$$\boxed{\begin{aligned}\frac{\partial P}{\partial t} &= -\underline{\nabla}\cdot\underline{j}\\ \underline{j} &= \underline{\underline{D}}\Big(\underbrace{\tfrac{1}{k_BT}\underline{F}}_{\text{Drift}}\underbrace{-\underline{\nabla}}_{\text{Diffusionsstrom}}\Big)P\end{aligned}} \quad (10.49)$$

also: systematischer & heuristischer Weg $\longrightarrow$ gleiche Smoluchowski-Gl. (10.49)