3.4 Ableitung der Fokker-Planck-Kolmogorov- aus einer Langevin-Gleichung /stochastischen Differentialgleichung (vgl. J.L. Klimontovich, Statistical Physics)

Wir betrachten noch einmal die eindimensionale Brown´sche Bewegung (BB) entsprechend

$$\frac{dv(t)}{dt} + \gamma \cdot v(t) = \zeta(t) . \tag{1}$$

Der Erwartungswert der stochastischen Kraft $\zeta(t)$ ist gleich Null, die Korrelationen seien stationär, d.h., nur von der Zeitdifferenz τ abhängig

$$\langle \zeta(t) \rangle = 0 , \qquad \langle \zeta(t+\tau)\zeta(t) \rangle = h(\tau) . \tag{2}$$

Die Funktion $h(\tau)$ sollte mit wachsendem τ schnell abklingen, da die Korrelationen zwischen aufeinander folgenden Stößen verloren gehen: $0 < \tau < \tau_c << \gamma^{-1}$.
$\langle ... \rangle$ ist die Notation für die Mittelung über das Ensemble der stochastischen Kräfte ζ.

Wir betrachten die fluktuierende Verteilungsfunktion

$$\underline{F(v,t) := \delta(v - v(t))} . \tag{3}$$

Beachte: v – Phasenraumvariable, t – Zeit, v(t) - dynamische, gemäß (1) fluktuierende Größe (hier Geschwindigkeit des BB zu t).

Der Normierungsbedingung $\int dv\, F(v,t) = 1$ ist in lokaler Schreibweise die Kontinuitäts-gleichung

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial v}\left(F \cdot \frac{dv}{dt} \right) = 0 . \tag{4}$$

im v-Raum äquivalent.

(1), also $\frac{dv}{dt} = -\gamma \cdot v + \zeta$, ergibt eingesetzt in (4), $\frac{\partial F}{\partial t} - \gamma \frac{\partial}{\partial v}(F \cdot v) = -\frac{\partial}{\partial v}(\zeta \cdot F)$.

Der Erwartungswert von F ist die gesuchte Wahrscheinlichkeitsdichte P(v,t), $\underline{\langle F\rangle = P(v,t)}$. P ist Lösung der Gleichung

$$\frac{\partial P}{\partial t} - \gamma \frac{\partial}{\partial v}(P\cdot v) = -\frac{\partial}{\partial v}\langle \zeta\cdot F\rangle . \tag{5}$$

(5) ist keine geschlossene Gleichung, da sie neben $\langle F\rangle = P$ auch die unbekannte Größe $\langle \zeta\cdot F\rangle$ enthält.

Um diese zu bestimmen, definieren wir die Abweichungen, δF, des Erwartungswerts P von F, also, $\underline{F = P + \delta F}$. Wegen $\langle \zeta(t)\rangle = 0$, vereinfacht sich die rechte Seite von Gleichung (5) zu

$$\frac{\partial P}{\partial t} - \gamma \frac{\partial}{\partial v}(P\cdot v) = -\frac{\partial}{\partial v}\langle \zeta\cdot(\delta F)\rangle . \tag{6a}$$

Mit $\underline{F = P + \delta F}$ wird aus (5) $\frac{\partial (P+\delta F)}{\partial t} - \gamma \frac{\partial}{\partial v}\big((P+\delta F)\cdot v\big) = -\frac{\partial}{\partial v}(\zeta\cdot(P+\delta F))$, also

$$\frac{\partial P}{\partial t} + \frac{\partial (\delta F)}{\partial t} - \gamma \frac{\partial}{\partial v}(P\cdot v) - \gamma \frac{\partial}{\partial v}((\delta F)\cdot v) = -\frac{\partial}{\partial v}(\zeta\cdot P) - \frac{\partial}{\partial v}(\zeta\cdot(\delta F)) . \tag{6b}$$

Die Differenz (6b) - (6a) $\frac{\partial (\delta F)}{\partial t} - \gamma \frac{\partial}{\partial v}((\delta F)\cdot v) = -\frac{\partial}{\partial v}\langle \zeta\cdot \delta F\rangle + \frac{\partial}{\partial v}(\zeta\cdot \delta F)) + \frac{\partial}{\partial v}(\zeta\cdot P)$

ergibt für die Abweichungen $\delta F = \langle F\rangle - F = P - F$

$$\frac{\partial (\delta F)}{\partial t} - \gamma \frac{\partial}{\partial v}((\delta F)\cdot v) = -\frac{\partial}{\partial v}\left[\langle \zeta\cdot(\delta F)\rangle - \zeta\cdot(\delta F)\right] + \frac{\partial}{\partial v}(\zeta\cdot P) \tag{6c}$$

Wegen des Terms $\zeta\cdot(\delta F) - \langle \zeta\cdot(\delta F)\rangle$, ist auch (6c) keine geschlossene Gleichung. → Die Fortsetzung des Verfahrens ergäbe eine Hierarchie gekoppelter Gleichungen, die geeignet abgebrochen werden muss.

Um die unbekannte Größe $\langle \zeta\cdot(\delta F)\rangle$ in (6a) zu bestimmen, benötigen wir die Lösung von (6c) jedoch nur für Zeiten von der Größenordnung der Korrelationszeit τ_c. Auf der deterministischen Zeitskala $1/\gamma >> \tau_c$ sind die Fluktuationen unkorreliert (die Stöße statistisch unabhängig). Die Korrelationen höherer Ordnung $\left[\langle \zeta\cdot(\delta F)\rangle - \zeta\cdot(\delta F)\right]$ werden wir vernachlässigen. Dann ist für $\delta F << P$ der dominierende Term in (6c) der letzte auf der rechten Seite. Das ergibt

$$\frac{\partial(\delta F)}{\partial t} \approx -\frac{\partial}{\partial v}(P\cdot\zeta) \quad \text{also} \quad \delta F \approx -\int_{-\infty}^{t\approx\tau_c} dt' \frac{\partial}{\partial v}(P(v,t')\cdot\zeta(t')) \ .$$

Daraus folgt für $-\frac{\partial}{\partial v}\langle \zeta\cdot(\delta F)\rangle$ in (6a)

$$-\frac{\partial}{\partial v}\langle \zeta\cdot(\delta F)\rangle \approx -\frac{\partial}{\partial v}\left\langle -\frac{\partial}{\partial v}\int_{-\infty}^{t\approx\tau_c} dt'\, P(v,t')\langle \zeta(t)\cdot\zeta(t')\rangle)\right\rangle = \frac{\partial^2}{\partial v^2}\int_0^{\infty} dt'\, P(v,t-\tau)\langle \zeta(t)\cdot\zeta(t-\tau)\rangle$$

(wenn wir im letzten Schritt $t' = t-\tau,\ dt' = -d\tau,\ \int_{-\infty}^{t} dt' \ldots = \int_{\infty}^{0}(-d\tau)\ldots = \int_0^{\infty} d\tau \ldots$ substituieren).

Die gesuchte Gleichung für P lautet somit

$$\frac{\partial P}{\partial t} - \gamma\frac{\partial}{\partial v}(P\cdot v) = -\frac{\partial}{\partial v}\langle \zeta\cdot(\delta F)\rangle = \frac{\partial^2}{\partial v^2}\int_0^{\infty} dt'\, P(v,t-\tau)\langle \zeta(t)\cdot\zeta(t-\tau)\rangle \ . \tag{7}$$

Für den wichtigen Fall δ-korrelierten weißen Rauschens folgt aus der Intregro-Differentialgleichung (7) eine Fokker-Planck-Kolmogorov-Gleichung (FPKE)

$$\langle \zeta(t+\tau)\zeta(t)\rangle = h(\tau) = D\,\delta(\tau) \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial P}{\partial t} - \gamma\frac{\partial}{\partial v}(v\cdot P) = \frac{D}{2}\frac{\partial^2 P}{\partial v^2}, \tag{8}$$

d.h., in diesem Fall ist v ein Markov-Prozess. D bezeichnet die Intensität der stochastischen Stöße von Seiten der Moleküle der Flüssigkeit.

Lösung der FPKE (8) zur Anfangsbedingung $P(v,t_0) = \delta(v-v_0)$ ist die Gauß-Verteilung

$$P(v,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi d[v]}}\exp\left\{-\frac{(v-\langle v\rangle)^2}{2\,d[v]}\right\} \text{ mit } \langle v\rangle := v_0 e^{-\gamma t} \text{ und } d[v] := \langle (v-\langle v\rangle)^2\rangle = \frac{D}{2\gamma} \tag{9}$$

Daraus folgt für sehr große Zeiten

$$\lim_{t\to\infty}\langle v\rangle = 0,\ \lim_{t\to\infty} d[v] = \frac{D}{2\gamma} \text{ und } \lim_{t\to\infty} P(v,t) := P^0(v) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\frac{D}{2\gamma}}}\exp\left(-\frac{v^2}{2\frac{D}{2\gamma}}\right). \tag{10}$$

Wenn die Flüssigkeit sich im thermodynamische Gleichgewicht befindet (diese Forderung wurde bis jetzt nicht erhoben oder verwendet), dann gilt die Fluktuations-Dissipationsrelation $D = \frac{2k_B T}{m}\gamma$ zwischen D, γ / m (wir hatten in (1) m = 1 gesetzt) und der Temperatur T und aus (10) folgt

$$P^0(v) = P^{TDG}(v) = \sqrt{\frac{m}{2\pi k_B T}}\exp\left(-\frac{mv^2}{2k_B T}\right), \tag{11}$$

also die Maxwell´sche Geschwindigkeitsverteilung.

<u>Verallgemeinerung</u> der Entsprechung zwischen (1,2) $\leftrightarrow$ (8) (SDE $\leftrightarrow$ FPKE) auf nichtlineare dynamische Systeme $\frac{dx(t)}{dt} = f(x)$ mit beliebiger nichtlinearer Funktion f(x): Vollkommen analog zur Herleitung im Fall der Brown´schen Bewegung erhalten wir für die Wahrscheinlichkeitsdichte P(x,t) im x-Raum im Fall weißen Rauschens eine FPKE. Die Entsprechung lautet nun

$$\frac{dx(t)}{dt} = f(x) + g(x)\zeta(t),\ \langle\zeta(t)\rangle = 0,\ \langle\zeta(t+\tau)\zeta(t)\rangle = D\delta(\tau) \leftrightarrow$$

$$\leftrightarrow \frac{\partial P}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}\left[\left(f + \frac{D}{2}g\frac{dg}{dx}\right)P\right] = \frac{D}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}(g^2 P). \tag{12}$$

Im Fall $f(v) = -\gamma v$ und g unabhängig von v (g = D) geht (12) über in (8).

Ist g nicht konstant sondern von x abhängig, tritt auf der linken Seite der FPKE der zusätzliche Term $\frac{D}{2}g(x)\frac{dg(x)}{dx}$ auf, die sogenannte *fluktuationsinduzierte Drift*. In diesem

Falle hängt die Intensität der Fluktuationen vom Zustand x selbst ab. Die i.a. nichtlineare deterministische Dynamik f(x) koppelt über g(x) multiplikativ an die Fluktuationen an. Dieser Fall wird als *multiplikatives* Rauschen im Gegensatz zu *additivem* Rauschen (g unabhänig von x) bezeichnet.

Einschub:

1) Ito vs. Stratonovich-Interpretation des stochastischen Integrals

Wir schreiben die stochastische Differentialgleichung (SDE) $\frac{dx(t)}{dt} = f(x) + g(x)\zeta(t)$ (13)

als Differenzengleichung (vgl. **2)**) $x(t+\Delta t) - x(t) = f(x)\,\Delta t + g(?)\int_t^{t+\Delta t} dt'\,\zeta(t')$.

Die stochastischen Stöße $\zeta(t')$ erfolgen zu zufälligen Zeiten aus dem Intervall $(t, t+\Delta t)$. Es erhebt sich die Frage welcher x-Wert aus diesem Intervall ist anstelle des Fragezeichens in g(x) einzusetzen?

Zwei Möglichkeiten haben sich durchgesetzt:

• Ito wählte den Wert am linken Rand. Mit $g(x(t))$ folgt (ohne Beweis)

$$\frac{\partial P}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(f \cdot P) = \frac{D}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}(g^2 \cdot P)$$

Wir sprechen von der Ito-Interpretation der stochastischen Differentialgleichung SDE (13).

• Stratonovich wählte den Wert in der Mitte beider Randwerte, also $g\left(\frac{x(t) + x(t+\Delta t)}{2}\right)$.

Das führt auf (ohne Beweis) $\frac{\partial P}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}\left[\left(f + \frac{D}{2} g \frac{dg}{dx}\right) P\right] = \frac{D}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}(g^2 P)$.

Schlußfolgerung: Die Stratonovich-Interpretation der SDE (13) entspricht der von uns hergeleiteten FPKE (12).

Dazu passt der folgende Satz von Wong und Zakai aus dem Jahre 1965, dessen Beweis man im Buch von Lefever/Horsthemke (Kap. 5.4.2) nachlesen kann:

<u>Satz</u>: Gegeben sei die SDE $\frac{dx}{dt} = f(x) + g(x)\zeta(t)$. Im Grenzfall sehr kleiner Korrelationszeiten, $\tau_c \to 0$, ist x(t) ein Markov-Prozess, dessen Wahrscheinlichkeitsdichte der FPKE (12) entspricht. Mit anderen Worten, für $\tau_c \to 0$ ist die SDE im Sinne von Stratonovich zu interpretieren. Physikalisch bedeutet $\tau_c \to 0$, die Korrelationszeit der Fluktuationen ist kleiner als alle charakteristischen deterministischen Zeitskalen, also, z.B., $\tau_c << 1/\gamma$ im Fall der BB. Die Trennung der Zeitskalen von deterministischer und stochastischer Dynamik ist in vielen Fällen tatsächlich vorhanden.

2) Die mathematisch korrekte Schreibweise für

$$\frac{dx(t)}{dt} = f(x) + g(x)\zeta(t) \text{ in (12) } \underline{\text{im Fall}} \quad \langle\zeta(t)\rangle = 0, \ \langle\zeta(t+\tau)\zeta(t)\rangle = D\,\delta(\tau) \text{ lautet}$$

$$dx_t = f(x_t)\,dt + g(x_t)\,dW_t \ , \quad (dW_t)^2 = dt\,.$$

dW_t ist das Differential des <u>Wiener-Prozess</u>es. Dieser stochastische Prozess ist stetig, aber nicht differenzierbar, und seine Varianz $\langle\zeta^2\rangle$ divergiert offensichtlich.

Deshalb dürfen wir streng genommen für weißes Rauschen nicht $\frac{dx}{dt} = ...$ schreiben …

3) Transformation der Variablen in stochastischen Differentialgleichungen (van Kampen, Kap. IX.4, S. 230).

Der Übergang

$$\frac{dx}{dt} = f(x) + g(x)\cdot\zeta(t) \quad \to \quad \frac{1}{g}\frac{dx}{dt} = \frac{f}{g} + \zeta(t)\,. \qquad\qquad g(x) \neq 0$$

führt von multiplikativem zu additivem Rauschen. Unter Verwendung der neuen Variable

$\underline{\tilde{x} := \int \frac{dx}{g(x)}}$ mit $d\tilde{x} = \frac{dx}{g}$ hat die SDE nun die Form

$$\frac{d\tilde{x}}{dt} = \tilde{f}(\tilde{x}) + \zeta(t)\,.$$

Letztere, mit additivem Rauschen, ist unabhängig von der Interpretation als Ito- oder Stratonovich-SDE, äquivalent zu

$$\frac{\partial \tilde{P}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \tilde{x}}(\tilde{f}\cdot\tilde{P}) = \frac{D}{2}\frac{\partial^2 \tilde{P}}{\partial \tilde{x}^2}\,.$$

Mit $P(x)\,dx = \tilde{P}(\tilde{x})\,d\tilde{x}$, also $\tilde{P}(\tilde{x}) = P(x)\frac{dx}{d\tilde{x}} = g(x)\,P(x)$, und $d\tilde{x} = \frac{dx}{g(x)}$ lautet diese Gleichung nach Rücktransformation

$$g\frac{\partial P}{\partial t} + g\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{f}{g}\cdot P\cdot g\right) = \frac{D}{2}g\frac{\partial}{\partial x}\left[g\frac{\partial}{\partial x}(P\cdot g)\right].$$

Nach Umformung der eckigen Klammer

$$\left[g\frac{\partial}{\partial x}(P\cdot g)\right] = \left[\frac{\partial}{\partial x}(P\cdot g\cdot g) - (P\cdot g)\frac{\partial g}{\partial x}\right] = \left[\frac{\partial}{\partial x}(g^2\cdot P) - g\cdot\frac{\partial g}{\partial x}\cdot P\right]$$

erhalten wir für $g(x) \neq 0$ wieder die Gleichung

$$\frac{\partial P}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}\left[\left(f + \frac{D}{2}g\frac{dg}{dx}\right)P\right] = \frac{D}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}(g^2 P)\,.$$

Schlußfolgerung: Bei Stratonovich-Interpretation der SDE können bei Variation der stochastischen Variablen die "gewohnten" Transformationsregeln angewandt werden.

Weitere Details zu den Themen des Einschubs sind zu finden in:

- J.L. Klimontovich, Statistical Physics, Harwood Academic Publishers, New York, 1986.
- R.L. Stratonovich, Topics in the Theory of Random Noise, I and II, Gordon and Breach, New York, 1963.
- W. Horsthemke, R. Lefever, Noise-Induced Transitions. Theory and Applications in Physics, Chemistry, and Biology, Springer, Berlin, 1984.
- H. Risken, The Fokker-Planck-Equation, Springer, Berlin, 1989.
- N.G. van Kampen, Stochastic Processes in Physics and Chemistry, North-Holland, Amsterdam, 1981.

- L. Arnold, Stochastische Differentialgleichungen: Theorie und Anwendungen, Oldenbourg, München, Wien, 1973.

3.5 K-Theorem

Definition: Informationsgewinn beim Übergang von der Wahrscheinlichkeitsdichten $P_1(x,t)$ zur Wahrscheinlichkeitsdichten $P_2(x,t)$ (relative Entropie)

$$K[P_1,P_2] := \int dx\; P_1(x,t)\, \ln\frac{P_1(x,t)}{P_2(x,t)} \; . \tag{14}$$

Angenommen, $P_1(x,t)$ und $P_2(x,t)$ sind Lösungen der Fokker-Planck-Kolmogorov-Glg.

$$\frac{\partial P_i(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left\{ F(x)\,P_i(x,t) + \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial x}\big[D(x)\,P_i(x,t)\big]\right\}^{\mathbf{1)}}$$

(zu unterschiedlichen Anfangsbedingungen) **1)** Notation in der letzten Vorlesung: Driftmoment $F(x) = a_1(x)$, Diffusionsmoment $D(x) = a_2(x) \ge 0$; Vorzeichen beachten.

Als Übungsaufgabe beweisen Sie, dass K ein Lyapunov-Funktional ist, dass also gilt

(i) $K[P_1,P_2] \ge 0$, $K = 0$ für $P_1(x,t) \equiv P_2(x,t)$.

(15)

(ii) $\displaystyle \frac{d}{dt}K[P_1,P_2] = -\frac{1}{2}\int dx\; D(x)\frac{P_2^2(x,t)}{P_1(x,t)}\left\{\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{P_1(x,t)}{P_2(x,t)}\right)\right\}^2 \le 0$.

Interpretation: Wählen wir $P_2(x,t) \equiv P^0(x)$, bleibt der Beweis gültig. Das bedeutet: Jedem stochastischen dynamischen System, dessen zeitabhängige Wahrscheinlichkeitsdichte der FPE genügt, können wir genau eine von der Anfangsverteilung unabhängige stationäre Wahrscheinlichkeitsdichte $P_2(x,t) \equiv P^0(x) = \lim_{t\to\infty} P(x,t)$ zuordnen.

Diese eindeutige Zuordnung wird uns als Ausgangspunkt für die Klassifikation von Bifurkationen in stochastischen dynamischen Systemen dienen.

Bemerkungen:

1) Beweise für $n = 1$ und $n > 1$ analog

2) Der Satz gilt auch dann, wenn P der Mastergleichung genügt. In diesem Fall ist zusätzlich vorauszusetzen, dass der Zustandsraum X^n unzerlegbar ist, d.h., jeder Zustand $x \in X^n$ muss erreichbar sein (keine isolierten Regionen in X^n).

Literatur:

- M.S. Green, Markov random processes and the statistical mechanics of time-dependent phenomena, J. Chem. Phys. **20**, 1281-1295 (1952).
- J. L. Lebowitz, P.G. Bergmann, Irreversible Gibbsian Ensembles, Ann. Phys. **1**, 1-23 (1957).
- R. Graham, Statistical theory of instabilities in stationary non-equilibrium systems with applications to lasers and nonlinear optics, Springer Tracts in Modern Physics **66**, 1-98 (1973).