

Fokker-Planck-Gleichung

Andreas Mielke

9. Juli 2019

Zusammenfassung

Dieses Skript erklärt kurz Herleitung und Eigenschaften der Fokker-Planck Gleichung. Außerdem wird dargestellt, wie aus der Fokker-Planck Gleichung Ratengleichungen hergeleitet werden können und es werden Lösungsmethoden kurz angerissen.

1 Fokker-Planck-Gleichung

Wenn man mit Wahrscheinlichkeitsdichten für Zufallsprozesse arbeitet, ist es sinnvoll, statt der Langevingleichung direkt eine Differentialgleichung für die Wahrscheinlichkeitsdichte zu haben. Es gilt (Chapman-Kolmogorov Gleichung)

$$p(x, t + \Delta t) = \int dx' p(x, t + \Delta t | x', t) p(x', t)$$

Um eine Differentialgleichung für $p(x, t)$ zu bekommen, nehmen wir an, daß Δt klein ist und wir danach entwickeln können. Für stetige Prozesse werden die wesentlichen Beiträge zu dem Integral von Werten x' kommen, die nahe x liegen. Setzen wir $x' = x - \Delta x$ und entwickeln den Integrand nach Δx .

$$\begin{aligned} p(x, t + \Delta t | x', t) p(x', t) &= p(x + \Delta x - \Delta x, t + \Delta t | x - \Delta x, t) p(x - \Delta x, t) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \Delta x^n \left(\frac{\partial}{\partial x} \right)^n p(x + \Delta x, t + \Delta t | x, t) p(x, t) \end{aligned}$$

Eingesetzt erhält man

$$p(x, t + \Delta t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \left(\frac{\partial}{\partial x} \right)^n M_n(x, t, \Delta t) p(x, t)$$

mit

$$M_n(x', t, \Delta t) = \langle (\xi(t + \Delta t) - \xi(t))^n \rangle_{\xi(t)=x'} = \int (x - x')^n p(x, t + \Delta t | x', t) dx$$

Nehmen wir an, daß diese Momente nach Δt entwickelt werden können. Sei (für $n \geq 1$)

$$M_n(x, t, \Delta t)/n! = D_n(x, t)\Delta t + O(\Delta t^2)$$

Dann gilt

$$\frac{\partial p(x, t)}{\partial t} = \sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{\partial}{\partial x} \right)^n D_n(x, t) p(x, t)$$

Diese Gleichung heißt Kramers-Moyal Entwicklung. Bricht man diese Entwicklung nach der zweiten Ordnung ab, dann erhält man die Fokker-Planck Gleichung

$$\frac{\partial p(x, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} \left(D_1(x, t) - \frac{\partial}{\partial x} D_2(x, t) \right) p(x, t)$$

Die Koeffizienten $D_n(x, t)$ müssen noch bestimmt werden. Mit gewissen heuristischen Annahmen ist das einfach möglich, wenn für $\xi(t)$ eine Langevingleichung gilt. Betrachten wir eine allgemeine Langevingleichung mit additivem Rauschterm

$$\dot{\xi} = f(\xi) + \chi$$

mit einem weißen Rauschen $\chi(t)$. Dann gilt

$$D_1(x) = \left\langle \dot{\xi} \right\rangle_{\xi(t)=x} = \langle f(\xi) + \chi \rangle_{\xi(t)=x} = f(x)$$

$$M_2 = \Delta t^2 \left\langle \dot{\xi}^2 \right\rangle_{\xi(t)=x} = \Delta t^2 \langle (f(x) + \chi)^2 \rangle$$

Das formale Problem ist jetzt, daß M_2 von Ordnung Δt^2 ist, gleichzeitig für weißes Rauschen $\langle \chi^2 \rangle$ nicht definiert ist. Nimmt man, wie oben angedeutet, als weißes Rauschen einen Ornstein-Uhlenbeck Prozeß mit einer Korrelationszeit $\tau \propto \Delta t$ und mit $\gamma^2 \propto 1/\tau$, dann ist D_2 im Limes $\Delta t \rightarrow 0$ definiert und konstant. Alle höheren D_n verschwinden, und man erhält als Fokker-Planck Gleichung zu dieser Langevingleichung

$$\frac{\partial p(x,t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} \left(D_1(x) - D_2 \frac{\partial}{\partial x} \right) p(x,t) = L_{\text{FP}} p(x,t)$$

Die Fokker-Planck Gleichung hat eine recht einfache Interpretation: Sie ist eine Kontinuitätsgleichung für die Wahrscheinlichkeitsdichte. Definiert man die Wahrscheinlichkeitsstromdichte als

$$j(x,t) = \left(D_1(x) - D_2 \frac{\partial}{\partial x} \right) p(x,t)$$

dann lautet die Fokker-Planck Gleichung einfach

$$\dot{p}(x,t) = -j'(x,t)$$

Ganz analog kann man auch Fokker-Planck Gleichungen für mehr als eine Zufallsvariable aufstellen, zum Beispiel für die Bewegung eines Teilchens in höheren Dimensionen.

Beispiel: Für $D_1(x) = -x/\tau$ sollte die Lösung der Fokker-Planck Gleichung einen Ornstein-Uhlenbeck Prozeß liefern. Die stationäre Verteilung

$$p_{\text{st}}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\gamma^2}} \exp(-x^2/(2\gamma^2))$$

ist tatsächlich eine Lösung der Gleichung mit $\gamma^2 = D_2\tau$. Ebenso kann man zeigen, daß die bedingte Wahrscheinlichkeitsdichte

$$p(x,t|x',t') = \frac{1}{\sqrt{(2\pi\gamma^2(1 - \exp(-2(t-t')/\tau))}} \exp \left[-\frac{(x - \exp(-(t-t')/\tau)x')^2}{2\gamma^2(1 - \exp(-2(t-t')/\tau))} \right]$$

eine Lösung mit der Anfangsbedingung $p(x,t|x',t) = \delta(x-x')$ ist.

2 Fokker-Planck Operator

Der Operator L_{FP} heißt Fokker-Planck Operator. Für den Ornstein-Uhlenbeck Prozeß gilt

$$L_{\text{FP}} = -\frac{1}{\tau} \frac{\partial}{\partial x} \left(x - \gamma^2 \frac{\partial}{\partial x} \right)$$

Definiere

$$\tilde{L}_{\text{FP}} = \exp(x^2/(4\gamma^2)) L_{\text{FP}} \exp(-x^2/(4\gamma^2)) = \frac{1}{\tau} \left[\frac{1}{2} - \frac{x^2}{4\gamma^2} + \gamma^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right]$$

Die rechte Seite ist ein hermitescher Operator, der aus der Quantenmechanik wohlbekannt ist: Bis auf ein Vorzeichen handelt es sich um den Hamiltonoperator des harmonischen Oszillators. \tilde{L}_{FP} hat also die Eigenwerte $-n/\tau$, $n \geq 0$. Das gleiche gilt für L_{FP} , da beide Operatoren durch eine Ähnlichkeitstransformation verknüpft sind. Die rechte Eigenfunktion von L_{FP} zum Eigenwert 0 ist die stationäre Verteilung. Die höheren rechten Eigenfunktionen sind in Analogie zum harmonischen Oszillator Hermitesche Polynome multipliziert mit der stationären Verteilung.

Ähnliche Eigenschaften kann man generell von Fokker-Planck Operatoren zeigen. Für den allgemeineren Fall

$$L_{\text{FP}} = -\frac{\partial}{\partial x}(D_1(x) - D_2 \frac{\partial}{\partial x}) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial V}{\partial x} + D_2 \frac{\partial}{\partial x} \right)$$

mit $D_1 = -V'$ ist die stationäre Lösung $\propto \exp(-V(x)/D_2)$ und man definiert

$$\tilde{L}_{\text{FP}} = \exp(V(x)/(2D_2)) L_{\text{FP}} \exp(-V(x)/(2D_2)) = \left[-\frac{V'^2}{4D_2} + \frac{V''}{2} + D_2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right]$$

Der Operator auf der rechten Seite ist wieder hermitesch. Er hat einen Eigenwert 0 und sonst nur negative Eigenwerte. Um das zu zeigen, setze ich $\phi(x) = g(x) \exp(-V(x)/2D_2)$ und berechne

$$\begin{aligned} \int dx \phi(x) \tilde{L}_{\text{FP}} \phi(x) &= -\int dx \left(\frac{V'^2}{4D_2} - \frac{V''}{2} \right) \phi(x)^2 + \int dx \phi(x) \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \\ &= -D_2 \int dx \left(\frac{\partial g}{\partial x} \right)^2 \exp(-V(x)/D_2) \leq 0 \end{aligned}$$

Das Gleichheitszeichen gilt nur, wenn g konstant ist. Entsprechendes kann man auch direkt aus der Fokker-Planck Gleichung folgern. Jede Lösung muß sich nach den Eigenfunktionen des Fokker-Planck Operators entwickeln lassen. Die Zeitabhängigkeit steckt in den Entwicklungskoeffizienten. Alle Koeffizienten müssen im Limes großer Zeiten verschwinden, bis auf den der stationären Verteilung, gegen den die Lösung für große Zeiten konvergiert.

Diese Überlegungen sind relativ allgemein und lassen sich auch in höheren Dimensionen durchführen. Sie sind aber abhängig von den Randbedingungen. Über Randbedingungen wurde bisher nichts gesagt. Wir haben implizit immer angenommen, daß die Funktion $\exp(-V(x)/D_2)$ im Unendlichen hinreichend schnell abfällt oder präziser, daß sie normierbar ist. Das muß natürlich nicht der Fall sein. Zum einen kann man Probleme mit anderen Randbedingungen (reflektierend, absorbierend) betrachten, zum anderen kann es sein, daß $\exp(-V(x)/D_2)$ nicht normierbar ist. In diesen Fällen ist nicht garantiert, daß es eine stationäre Lösung gibt.

3 Zeitskalen

Die Eigenwerte des Fokker-Planck Operators liefern Zeitskalen. Insbesondere beschreibt der kleinste, nicht verschwindende Eigenwert, auf welcher Zeitskala eine Lösung der Fokker-Planck Gleichung gegen die stationäre Lösung konvergiert. Voraussetzung ist natürlich, daß eine stationäre Lösung existiert. Es gibt Randbedingungen, unter denen keine stationäre Lösung existiert.

Oft betrachtet man Fälle, bei denen sich ein System in einem energetischen Minimum befindet, aus dem es durch stochastische Kräfte über einen Potentialberg in ein tieferes Minimum getrieben wird. Die charakteristische Zeit, die das System benötigt, um den Potentialberg zum ersten Mal zu überwinden, bezeichnet man als *mean first passage time* (MFPT). Wir betrachten als einfachstes Beispiel ein stark überdämpftes Brownsches Teilchen in einem eindimensionalen Potential $V(x)$ mit einem Minimum bei x_0 und einem Maximum bei $x_a > x_0$. Als Anfangsbedingung befindet sich das Teilchen zur Zeit $t = 0$ bei $x_i < x_a$. Die Bewegung des Teilchens wird durch eine Langevin-Gleichung

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

beschrieben, wobei $f(x) = -\partial V/\partial x$ ist und die Einheiten so gewählt wurden, daß die Reibungskonstante 1 ist. Für eine gegebene Realisierung der stochastischen Kraft $\xi(t)$, die das thermische Rauschen modelliert, kann diese Gleichung gelöst werden und zu einem bestimmten Zeitpunkt wird x zum ersten Mal den Wert x_a annehmen. Mittelt man diese Zeit über viele Realisierungen der stochastischen Kraft, dann erhält man die MFPT. Alternativ kann man das System durch die Fokker-Planck Gleichung

$$\frac{\partial p(x, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} \left(f(x) - T \frac{\partial}{\partial x} \right) p(x, t)$$

Sei $p(x, t|x_i, 0)$ die Lösung dieser Gleichung mit der Anfangsbedingung $p(x, 0|x_i, 0) = \delta(x - x_i)$. Wir führen eine absorbierende Randbedingung bei $x = x_a$ ein

$$p(x_a, t|x_i, 0) = 0$$

und definieren

$$W(x_i, t) = \int_{-\infty}^{x_a} dx p(x, t | x_i, 0)$$

Das ist die Wahrscheinlichkeit dafür, daß sich das Teilchen zur Zeit t noch in dem Intervall $(-\infty, x_a)$ befindet.

$$w(x_i, t) = -\frac{\partial W(x_i, t)}{\partial t}$$

ist die Wahrscheinlichkeitsverteilung für die Zeitpunkte, zu denen das Teilchen erstmals x_a erreicht und

$$\tau_{\text{mfpt}} = \int_0^{\infty} t w(x_i, t) dt$$

ist die MFPT. Es gilt

$$\tau_{\text{mfpt}} = \int_{-\infty}^{x_a} dx p_1(x | x_i)$$

mit

$$p_1(x | x_i) = -\int_0^{\infty} t \frac{\partial}{\partial t} p(x, t | x_i, 0)$$

$p_1(x | x_i)$ erhält man aus

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(f(x) - T \frac{\partial}{\partial x} \right) p_1(x | x_i) = \delta(x - x_i)$$

Auch hier gilt natürlich die absorbierende Randbedingung bei x_a . $p_1(x | x_i)$ ist also (bis auf ein Vorzeichen) die Greensche Funktion für den Fokker-Planck Operator mit dieser Randbedingung. Formal kann die Gleichung für p_1 gelöst werden. Zunächst gilt

$$\left(f(x) - T \frac{\partial}{\partial x} \right) p_1(x | x_i) = \theta(x - x_i)$$

Für $x > x_i$ ist die Lösung

$$p_1(x | x_i) = \frac{1}{T} \int_x^{x_a} dx' \exp(-(V(x) - V(x'))/T)$$

Für $x < x_i$ ist die Lösung

$$p_1(x | x_i) = C \exp(-V(x)/T)$$

und die Konstante C wird aus der Stetigkeit von p_1 bei $x = x_i$ bestimmt.

$$C = \frac{1}{T} \int_{x_i}^{x_a} dx' \exp(V(x')/T)$$

Für die MFPT ergibt sich damit

$$\begin{aligned} \tau_{\text{mfpt}} &= \frac{1}{T} \int_{x_i}^{x_a} dx' \exp(V(x')/T) \int_{-\infty}^{x_i} dx \exp(-V(x)/T) \\ &+ \frac{1}{T} \int_{x_i}^{x_a} dx \int_x^{x_a} dx' \exp(V(x')/T - V(x)/T) \end{aligned}$$

Ein einfaches Beispiel: $V(x) = x$ für $0 \leq x \leq 1$, $V(x) = \infty$ für $x < 0$, $x_a = 1$, $x_i = 0$. Der erste Term in dem Ausdruck für τ_{mfpt} verschwindet, der zweite liefert

$$\begin{aligned} \tau_{\text{mfpt}} &= \frac{1}{T} \int_0^1 dx \int_x^1 dx' \exp((x' - x)/T) \\ &= T \exp(1/T) - T - 1 \end{aligned}$$

Man erkennt, daß τ_{mfpt} für tiefe Temperaturen durch den ersten Term dominiert wird, also

$$\tau_{\text{mfpt}} = T \exp(1/T)$$

und sehr groß wird. Für hohe Temperaturen gilt dagegen $\tau_{\text{mfpt}} = \frac{1}{2T} + O(T^{-2})$.

Wir betrachten jetzt den allgemeinen Fall bei tiefen Temperaturen. Wir nehmen dazu an, daß $V(x)$ ein Minimum bei x_m hat und die Anfangsbedingung $x_i = x_m$ gilt. Außerdem sei x_a das Maximum von $V(x)$. Für tiefe Temperaturen ist eine Sattelpunktsnäherung gerechtfertigt:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{x_m} dx \exp(-V(x)/T) &\approx \int_{-\infty}^{x_m} dx \exp(-V(x_m)/T - V''(x_m)(x - x_m)^2/T) \\ &= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi T}{V''(x_m)}} \exp(-V(x_m)/T) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \int_{x_m}^{x_a} dx \exp(V(x)/T) &\approx \int_{x_m}^{x_a} dx \exp(V(x_a)/T - |V''(x_a)|(x - x_a)^2/T) \\ &\approx \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi T}{|V''(x_a)|}} \exp(V(x_a)/T) \end{aligned}$$

$$\int_{x_i}^{x_a} dx \int_x^{x_a} dx' \exp(V(x')/T) \approx \int_{x_i}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{x_a} dx' \exp(V(x')/T - V(x)/T)$$

und damit

$$\tau_{\text{mfpt}} = \frac{\pi}{2} \frac{1}{\sqrt{V''(x_m)|V''(x_a)|}} \exp((V(x_a) - V(x_m))/T)$$

Diese Formel wurde zuerst von Kramers 1940 hergeleitet.

4 Ratengleichungen

Eng mit dem Problem der unterschiedlichen Zeitskalen hängt eine andere Beschreibung von Systemen zusammen, die in vielen Anwendungen benutzt wird, nämlich die Beschreibung mit Hilfe von Ratengleichungen. Wir diskutieren dieses Problem in dem allgemeineren Fall eines Brownschen Teilchens in einem höherdimensionalen Potential. Der Fokker-Planck Operator für dieses Problem ist

$$L = \nabla \cdot ((\nabla V(\vec{x})) + T\nabla).$$

Wir nehmen im folgenden an, daß das Potential $V(\vec{x})$ N verschiedene Minima an den Punkten \vec{x}_i , $i = 0, \dots, N - 1$ hat und daß $V(\vec{x}) \rightarrow \infty$ für $|\vec{x}| \rightarrow \infty$. Alternativ kann man auch annehmen, daß das Problem überhaupt nur auf einem endlichen (zusammenhängenden) Raumbereich Ω definiert ist und auf dem Rand $\partial\Omega$ reflektierende Randbedingungen gelten. Die letzte Annahme soll gelten, um zu garantieren, daß L einen Eigenwert 0 hat und daß die zugehörige (rechte) Eigenfunktion $\propto \exp(-V(\vec{x})/T)$ existiert, also normierbar ist. Sie liefert auch die stationäre Lösung des Problems. $-L$ ist nicht-negativ, genauer sind alle anderen Eigenwerte von $-L$ positiv. Wir haben diese Eigenschaft in Abschnitt 2 diskutiert. Wir werden jetzt mit einem ähnlichen Variationargument zeigen, daß $-L$ mindestens $(N - 1)$ Eigenwerte hat, die sich für tiefe Temperaturen wie $\exp(-c/T)$ verhalten. Dazu teilen wir Ω in offene Untermengen Ω_i . Die Konstruktion soll so erfolgen, daß $\vec{x}_i \in \Omega_j$ dann und nur dann gilt wenn $i = j$. Außerdem sollen die Untermengen keinen Punkt gemeinsam haben, also $\Omega_i \cap \Omega_j = \emptyset$ falls $i \neq j$, und sie sollen (bis auf die Ränder) den gesamten Raum aufspannen, d.h. $\bigcup_i \Omega_i = \Omega \setminus (\bigcup_i \partial\Omega_i)$. Dabei ist $\partial\Omega_i$ der Rand von Ω_i . Die Ränder sollen so gewählt werden, daß $\vec{n}_i(\vec{x}) \cdot \nabla V(\vec{x}) = 0$ für $\vec{x} \in \partial\Omega_i$ gilt, wobei $\vec{n}_i(\vec{x})$ senkrecht auf dem Rand $\partial\Omega_i$ stehen soll. Es ist immer möglich, den gesamten Raum Ω in dieser Weise aufzuteilen, aber abhängig von dem Potential $V(\vec{x})$ gibt es evt. keine eindeutige Aufteilung. Weiter führen wir Untermengen $\tilde{\Omega}_i \subset \Omega_i$ ein, die bis auf eine kleine Umgebung des Randes mit Ω_i übereinstimmen sollen, die also insbesondere das jeweilige Minimum \vec{x}_i und eine genügend große Umgebung um dieses Minimum herum enthalten. Außerdem führen wir Funktionen $\tilde{\theta}_i(\vec{x})$ ein, die für $\vec{x} \in \tilde{\Omega}_i$ gleich eins sind, für $\vec{x} \notin \tilde{\Omega}_i$ verschwinden und auf $\Omega_i \setminus \tilde{\Omega}_i$ in hinreichend glatter Weise von 1 auf 0 abfallen. Wir wollen insbesondere annehmen, daß genügend viele Ableitungen von $\tilde{\theta}_i$ existieren. Dies ist der eigentliche Grund für die zunächst kompliziert erscheinende Konstruktion der Ω_i und $\tilde{\Omega}_i$. Wir benötigen Funktionen

$\tilde{\theta}_i$, die in einer ausreichend großen Umgebung eines Minimums \vec{x}_i 1 sind, dann hinreichend glatt auf 0 abfallen und für die $\tilde{\theta}_i(\vec{x})\tilde{\theta}_j(\vec{x}) = 0$ gilt, falls $i \neq j$.

Als nächstes führen wir den Operator $\hat{L} = \exp(V(\vec{x})/(2T))L \exp(-V(\vec{x})/(2T))$ ein. \hat{L} ist hermitesch und hat die Gestalt

$$\hat{L} = T\nabla^2 + \frac{1}{2}(\nabla^2 V) - \frac{1}{4T}(\nabla V)^2. \quad (1)$$

Natürlich hat \hat{L} die gleichen Eigenwerte wie der Fokker-Planck Operator L . $\exp(-V(\vec{x})/(2T))$ ist die nicht-normierte Eigenfunktion von \hat{L} mit Eigenwert 0. Wir führen nun die Funktionen $\hat{g}_i(\vec{x}) = C_i \exp(-V(\vec{x})/(2T))\tilde{\theta}_i(\vec{x})$, wobei die Konstanten C_i so gewählt werden, daß die Normierungsbedingungen $\int d^d x |\hat{g}_i(\vec{x})|^2 = 1$ erfüllt sind. Es gilt $\int d^d x \hat{g}_i(\vec{x})\hat{g}_j(\vec{x}) = \delta_{i,j}$, die Funktionen $\hat{g}_i(x)$ bilden also ein (unvollständiges) Orthonormalsystem. Sei $\hat{L}_{i,j} = \int d^d x \hat{g}_i(\vec{x})\hat{L}\hat{g}_j(\vec{x})$. Diese Größen verschwinden für $i \neq j$ und für $i = j$ erhält man

$$\hat{L}_{ii} = \frac{T}{2}|C_i|^2 \int d^d x \nabla \cdot (\exp(-V(\vec{x})/T)\nabla\tilde{\theta}_i(\vec{x})). \quad (2)$$

Da $\nabla\tilde{\theta}_i$ für $\vec{x} \in \tilde{\Omega}_i$ verschwindet, enthält \hat{L}_{ii} eine Faktor $\exp(-\Delta\hat{V}_i/T)$ mit

$$\Delta\hat{V}_i = \min_{x \in \Omega_i \setminus \tilde{\Omega}_i} V(\vec{x}) - V(\vec{x}_i). \quad (3)$$

Sei $\Delta\hat{V} = \min_i \Delta\hat{V}_i$. Dann hat man hiermit gezeigt, daß $-\hat{L}$ mindestens N Eigenwerte hat, die mindestens so schnell wie $\exp(-\Delta\hat{V}/T)$ mit der Temperatur nach 0 gehen.

Als nächstes betrachten wir den ursprünglichen Fokker-Planck Operator L , aber eingeschränkt auf Ω_i mit reflektierenden Randbedingungen auf dem Rand $\partial\Omega_i$. Mit diesen Randbedingungen hat $-L$ genau einen Eigenwert 0 und weitere Eigenwerte, die für tiefe Temperaturen typischerweise deutlich größer als $\exp(-\Delta\hat{V}/T)$ sind. Da das auf Ω_i eingeschränkte Problem nur ein Minimum hat, liefern diese Eigenwerte die Zeitskala dafür, daß das Teilchen sich in der Umgebung des Minimums bei \vec{x}_i in das Gleichgewicht bewegt hat. Man kann also erwarten, daß $-L$ In dem ursprünglichen Gebiet Ω genau einen Eigenwert 0 und $N - 1$ weitere Eigenwerte hat, die von der Ordnung $\exp(-c/T)$ sind. Alle anderen Eigenwerte von $-L$ sind für hinreichend niedrige Temperaturen T deutlich größer. Das Argument, das uns zu dieser Annahme geführt hat, kann leicht in einen Beweis verwandelt werden. Die nicht-verschwindenden $N - 1$ kleinsten Eigenwerte von $-L$ liefern die Zeitskalen, die das Teilchen typischerweise benötigt, um von einem Minimum in ein anderes zu gelangen, die anderen Eigenwerte beschreiben die Relaxation innerhalb der einzelnen Potentialtöpfe.

Wenn man sich speziell für das statische Verhalten des Systems oder für das dynamische Verhalten auf langen Zeitskalen interessiert, dann kann man den Hilbertraum, auf dem \hat{L} definiert ist, auf den Raum einschränken, der von den Eigenfunktionen zu den N kleinsten Eigenwerten von $-L$ aufgespannt wird. Wir bezeichnen die N kleinsten Eigenwerte von $-L$ mit λ_i , $i = 0, \dots, N - 1$, wobei $\lambda_0 = 0$ gilt. Die rechten Eigenfunktionen von $-L$ zu diesen Eigenwerten bezeichnen wir mit $g_i(\vec{x})$. Für $\rho(x, t)$ kann man dann den Ansatz

$$\rho(\vec{x}, t) = \sum_{i=0}^{N-1} \rho_i(t)g_i(\vec{x}) \quad (4)$$

machen. Zumindest für ausreichend lange Zeiten sollte dies ein guter Ansatz für die Lösung der Fokker-Planck Gleichung $\frac{\partial \rho}{\partial t} = L\rho$ sein. Als nächstes führen wir die Größen

$$n_i(t) = \int_{x \in \Omega_i} d^d x \rho(\vec{x}, t)$$

ein. $n_i(t)$ ist die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen in dem Gebiet Ω_i zu finden, also in der Nähe des Minimums \vec{x}_i . Sei

$$n_{ij} = \int_{x \in \Omega_i} d^d x g_j(\vec{x})$$

Dann gilt

$$n_i(t) = \sum_j \rho_j(t)n_{ij}$$

Bildet man die Ableitung nach der Zeit, dann erhält man

$$\begin{aligned} \frac{dn_i}{dt} &= \int_{x \in \Omega_i} d^d x L \rho = \sum_j \rho_j \int_{x \in \Omega_i} d^d x L g_j \\ &= - \sum_j \lambda_j \rho_j n_{ij} = \sum_k r_{ik} n_k, \end{aligned} \quad (5)$$

wobei die Matrix $R = (r_{ij})_{i,j=0,\dots,N-1}$ durch $R = -N^{-1} \Lambda N$ gegeben ist. N ist dabei die Matrix $(n_{ij})_{i,j=0,\dots,N-1}$ und Λ ist die Diagonalmatrix mit den Diagonalelementen λ_j , $j = 0, \dots, N-1$. Die Differentialgleichungen $\frac{dn_i}{dt} = \sum_k r_{ik} n_k$ heißen Ratengleichungen. Sie beschreiben das System in einer diskreten Form. Der Index i bezeichnet den Zustand des Systems, bei dem sich das Teilchen in der Nähe des Minimums x_i befindet. r_{ik} ist die Rate für den Übergang des Systems von Zustand k zu Zustand i . Per Konstruktion hat die Matrix R die Eigenwerte $-\lambda_i$, also die N niedrigsten Eigenwerte des Fokker-Planck Operators, der das Problem beschreibt.

In sehr vielen Fällen ist es viel einfacher, die Ratengleichungen für ein gegebenes Problem aufzustellen und zu lösen, als die Fokker-Planck Gleichung zu lösen. Zum einen ist für ein konkretes Problem das Potential eventuell nicht bekannt, während die Raten experimentell zugänglich sind. Zum anderen sind die Ratengleichungen selbst natürlich viel einfacher.

Ein Problem ist aber, daß die obige Definition von R in der Praxis nicht nützlich ist. Wenn man R auf diese Weise berechnen will, muß man ja das Eigenwertproblem von $-L$ schon gelöst haben. In der Regel ist es aber möglich, gute Näherungen für die Matrix R zu finden, indem man zum Beispiel in einer Dimension den Ausdruck von Kramers benutzt.

5 Lösungsmethoden

5.1 Simulationen

Langevin-Gleichungen können numerisch für eine gegebene Realisierung der stochastischen Kräfte integriert werden. Man simuliert so die Bewegung des Systems. Dabei ist das Problem, daß numerisch immer eine endliche Korrelationszeit vorliegt. Diese muß hinreichend klein gewählt werden, damit man nicht durch Korrelationen der stochastischen Kraft zusätzliche Effekte erhält, die die Resultate verfälschen. Es macht aber auch keinen Sinn, dieses Zeitintervall zu klein zu wählen, da die Simulation dann länger läuft und man bei gleicher Laufzeit eine schlechtere Statistik erhält. Um Aussagen über das System zu erhalten, muß über eine ausreichende Zahl von Realisierungen gemittelt werden. Je länger eine Simulation benötigt, desto weniger Simulationen lassen sich in gleicher Zeit durchführen, und desto schlechter wird die Statistik. Im übrigen sollten für solche Simulationen die gleichen Standards gelten wie für andere physikalische Simulationen auch (Monte-Carlo, Molekulardynamik, etc.). Auf folgende Punkte ist also besonders zu achten:

- Genaue Abschätzung der statischen Fehler (typischerweise $\propto \sqrt{\text{Budget}}$).
- Genaue Abschätzung der Autokorrelationszeit der Simulation
- Sorgfältige Auswahl des Zufallszahlengenerators

Beachtet man diese Punkte, dann ist eine Simulation der Langevin-Gleichung heutzutage auf einem PC ohne Probleme möglich. Meist interessiert man sich für Probleme, bei denen die äußere Kraft $f(x)$ zusätzlich zeitabhängig ist. Typischerweise hat man periodische oder stochastische Zeitabhängigkeiten mit einer charakteristischen Zeitskala. Wesentliche Konvergenzprobleme bestehen, wenn diese äußere Zeitskala sehr klein ist, oder wenn die Rauschintensität klein ist.

5.2 Operatormethoden

Aussagen über charakteristische Zeitskalen des Systems kann man aus dem Spektrum des Fokker-Planck Operators bekommen. Eventuell ist es auch möglich, die Lösung der Fokker-Planck Gleichung nach den (rechten) Eigenfunktionen des Fokker-Planck Operators zu entwickeln. Generell ist es möglich, nach einem vollständigen Satz von Funktionen zu entwickeln. Der Fokker-Planck Operator wird dann zu einer unendlichen Matrix, die geeignet trunziert numerisch untersucht werden kann. Für den numerischen Aufwand und die Genauigkeit ist die Trunkierung

und damit die Wahl der Basis entscheidend. Bei einer geeigneten Basis ist eventuell eine Trunkierung auf kleinere Matrizen möglich, die dann den numerischen Aufwand drastisch reduziert und somit die mögliche Genauigkeit bei gleichem Aufwand deutlich steigert.

Generell ist es möglich, viele Methoden der Quantenmechanik auch auf den Fokker-Planck Operator anzuwenden. Es ist sogar möglich (siehe oben), den Fokker-Planck Operator durch eine Ähnlichkeitstransformation auf einen Schrödingeroperator abzubilden.

Für die Lösung der Fokker-Planck Gleichung hat sich die Matrix-Kettenbruch Methode bewährt, die in dem Buch von Risken beschrieben wird. Sie wurde speziell von Jung und Hänggi in Augsburg programmiert und auf eine Reihe von Problemen angewandt.

5.3 Stückweise lineare Potentiale

Häufig ist es möglich, die Potentiale stückweise zu linearisieren. Für stückweise lineare Potentiale ist die Kraft $f(x)$ stückweise konstant. Der Fokker-Planck Operator ist dann stückweise ein Differentialoperator mit konstanten Koeffizienten. Die Eigenfunktionen können aus geeigneten Stetigkeitsbedingungen an die Eigenfunktionen und ihre Ableitungen bestimmt werden. Das ist häufig ein relativ leicht zu lösendes Problem der linearen Algebra. Der Aufwand steigt mit der Anzahl der Intervalle, die für die stückweise Linearisierung des Potentials gewählt wurde. In vielen Fällen kann der Aufwand durch eine geschickte Wahl der Intervalle deutlich gesenkt werden. Beispielsweise sollte man in der Nähe der Minima des Potentials, oder bei der Bestimmung der MFPT in der Nähe der absorbierenden Randbedingung kleinere Intervalle wählen, während in Bereichen, in denen das Potential groß ist, die Aufenthaltswahrscheinlichkeit klein ist und damit Fehler durch die Linearisierung weniger stark ins Gewicht fallen.