

Mathematik kollektiven Verhaltens

Fokker-Planck-Gleichungen und Brown'sche Bewegung

Ralf Engbers

ralf.engbers@gmx.de

Sommersemester 2008



Inhalt des Vortrags

- 1 Fokker-Planck und Langevin Gleichungen
 - Mastergleichung
 - Fokker-Planck-Gleichungen
 - Brown'sche Bewegung
 - Langevin-Ansatz
- 2 Ω -Entwicklung der Master-Gleichung
 - Überblick
 - Herleitung
 - Die makroskopische Gleichung
 - Linear Noise Approximation
- 3 The Diffusion Type
 - Master-Gleichung – Diffusion Type
- 4 Unstabile Systeme
 - Das bistabile System
- 5 Quellen

Markov-Prozess

Stochastischer Prozess für n aufeinanderfolgende Zeiten mit

$$P_{1|n-1}(y_n, t_n | y_1, t_1; \dots; y_{n-1}, t_{n-1}) = P_{1|1}(y_n, t_n | y_{n-1}, t_{n-1})$$

Ein Markov-Prozess ist vollständig durch $P_1(y_1, t_1)$ und $P_{1|1}(y_2, t_2 | y_1, t_1)$ bestimmt. Für $t_1 < t_2 < t_3$ gilt dann

$$\begin{aligned} P_3(y_1, t_1; y_2, t_2; y_3, t_3) &= P_2(y_1, t_1; y_2, t_2) P_{1|2}(y_3, t_3 | y_1, t_1; y_2, t_2) \\ &= P_1(y_1, t_1) P_{1|1}(y_2, t_2 | y_1, t_1) P_{1|1}(y_3, t_3 | y_2, t_2) \end{aligned} \quad (1)$$

Chapman-Kolmogorov-Gleichung

Integration von (1) über y_2 (für $t_1 < t_2 < t_3$) ergibt

$$P_2(y_1, t_1; y_3, t_3) = P_1(y_1, t_1) \int P_{1|1}(y_2, t_2 | y_1, t_1) P_{1|1}(y_3, t_3 | y_2, t_2) dy_2$$

Beide Seiten durch $P_1(y_1, t_1)$ dividieren:

$$P_{1|1}(y_3, t_3 | y_1, t_1) = \int P_{1|1}(y_2, t_2 | y_1, t_1) P_{1|1}(y_3, t_3 | y_2, t_2) dy_2 \quad (2)$$

(2) nennt man die *Chapman-Kolmogorov-Gleichung*.

Übergangswahrscheinlichkeit

Definiere

$$P_{1|1}(y_2, t_2 | y_1, t_1) = T_\tau(y_2 | y_1) \quad \text{mit } \tau = t_2 - t_1$$

Dann wird die Chapman-Kolmogorov-Gleichung (2) zu

$$T_{\tau+\tau'}(y_3 | y_1) = \int T_{\tau'}(y_3 | y_2) T_\tau(y_2 | y_1) dy_2$$

Außerdem gilt

$$T_{\tau+\tau'} = T_{\tau'} T_\tau$$

$$T_0(y_2 | y_1) = \delta(y_2 - y_1)$$

$$\int T_\tau(y_2 | y_1) dy_2 = 1$$

Master-Gleichung

Betrachten zuerst das Verhalten von $T_{\tau'}$ für $\tau' \rightarrow 0$ (durch Taylorentwicklung (siehe [2]))

$$T_{\tau'}(y_2 | y_1) = (1 - a_0\tau')\delta(y_2 - y_1) + \tau'W(y_2|y_1) + o(\tau') \quad (3)$$

mit der Übergangsrate (Übergangswahrscheinlichkeit pro Zeitschritt)

$$W(y_2|y_1) = \left. \frac{\partial P(y_2, t_2 | y_1, t_1)}{\partial t} \right|_{t_2=t_1} \geq 0$$

und

$$a_0(y_1) = \int W(y_2|y_1)dy_2$$

Master-Gleichung

Einsetzen von (3) in Chapman-Kolmogorov-Gleichung ergibt

$$\begin{aligned}T_{\tau+\tau'}(y_3|y_1) &= \int T_{\tau'}(y_3|y_2) T_{\tau}(y_2|y_1) dy_2 \\&= \int ((1 - a_0(y_3)\tau') \delta(y_3 - y_2) + \tau' W(y_3|y_2)) T_{\tau}(y_2|y_1) dy_2 \\&= \int (1 - a_0(y_3)\tau') \delta(y_3 - y_2) T_{\tau}(y_2|y_1) dy_2 \\&\quad + \int \tau' W(y_3|y_2) T_{\tau}(y_2|y_1) dy_2 \\&= (1 - a_0(y_3)\tau') T_{\tau}(y_3|y_1) dy_2 + \int \tau' W(y_3|y_2) T_{\tau}(y_2|y_1) dy_2\end{aligned}$$

Master-Gleichung

Betrachte den Grenzübergang von $\tau' \rightarrow 0$, ergibt Differentialversion der Chapman-Kolmogorov-Gleichung

$$\frac{d}{d\tau} T_\tau(y_3|y_1) = \int W(y_3|y_2) T_\tau(y_2|y_1) - W(y_2|y_3) T_\tau(y_3|y_1) dy_2,$$

bzw. allgemeiner

$$\frac{\partial P(y, t)}{\partial \tau} = \int W(y|y') P(y', t) - W(y'|y) P(y, t) dy'$$

Für eine diskrete y -Variable

$$\frac{\partial P(y, t)}{\partial \tau} = \sum_{y'} W(y|y') P(y', t) - W(y'|y) P(y, t) \quad (4)$$

Master-Gleichung

(4) nennt man die Master-Gleichung

- Master-Gleichung sowas wie Gewinn-Verlust-Gleichung für Wahrscheinlichkeit jedes Zustands y_i
- Master-Gleichung meist für diskrete Markov-Prozesse benutzt
- Fokker-Planck-Gleichung meist für kontinuierliche Markov-Prozesse benutzt

Allgemeines über die Fokker-Planck-Gleichung

Die Fokker-Planck-Gleichung ist eine spezielle Art von Master-Gleichung und hat die Form

$$\frac{\partial P(y, t)}{\partial t} = \underbrace{-\frac{\partial}{\partial y} A(y)P}_{\text{Drift}} + \underbrace{\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial y^2} B(y)P}_{\text{Diffusion}} \quad (5)$$

für $A(y), B(y)$ differenzierbar und $B(y) > 0$. Besondere Eigenschaften

- ① Differentialgleichung, keine Integro-Differentialgleichung
- ② Bestimmung von $A(y)$ und $B(y)$, nicht vom ganzen Kern $W(y|y')$

(5) heißt linear, falls A lineare Funktion von y und B konstant

Herleitung der Fokker-Planck-Gleichung

Betrachte die Übergangsrates W als Funktion der Größe des Sprungs r und dem Startpunkt y' :

$$W(y|y') = W(y'; r) \quad \text{mit } r = y - y'$$

Dann folgt für die Master-Gleichung

$$\frac{\partial P(y, t)}{\partial t} = \int W(y - r; r) P(y - r, t) dr - P(y, t) \int W(y; -r) dr \quad (6)$$

Generelle Annahme:

$$W(y'; r) \approx 0$$

$$\text{für } |r| > \delta$$

$$W(y' + \Delta y; r) \approx W(y'; r)$$

$$\text{für } |\Delta y| < \delta$$

Herleitung der Fokker-Planck-Gleichung

Taylorentwicklung des ersten Integrals von (6) bezüglich des ersten Arguments ergibt

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(y, t)}{\partial t} &= \int W(y; r)P(y, t)dr - \int r \frac{\partial}{\partial y} (W(y; r)P(y, t)) dr \\ &\quad + \frac{1}{2} \int r^2 \frac{\partial^2}{\partial y^2} (W(y; r)P(y, t)) dr - P(y, t) \int W(y; -r)dr \end{aligned}$$

Dann folgt

$$\frac{\partial P(y, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial y} (a_1(y)P) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial y^2} (a_2(y)P) \quad (7)$$

und (7) heißt *Fokker-Planck-Gleichung* mit den Sprungmomenten

$$a_\nu(y) = \int r^\nu W(y; r) dr.$$

Multivariate lineare Fokker-Planck-Gleichung

Für r Variablen y_i lässt sich die Fokker-Planck-Gleichung verallgemeinern zu

$$\frac{\partial P(y, t)}{\partial t} = - \sum_{i,j} A_{ij} \frac{\partial}{\partial y_i} y_j P + \frac{1}{2} \sum_{i,j} B_{ij} \frac{\partial^2 P}{\partial y_i \partial y_j}$$

mit A_{ij}, B_{ij} Koeffizientenmatrizen.

B_{ij} ist symmetrisch, A_{ij} in der Regel nicht

Was ist Brown'sche Bewegung?

Anschaulich: zufällige Bewegung eines schweren Partikels in einem Fluid aus leichten Partikeln

Markov-Eigenschaft

- Geschwindigkeit hat bestimmten Wert $V \Rightarrow$ vorne mehr Kollisionen, als von hinten; Wahrscheinlichkeit für eine bestimmte Veränderung δV in nächsten Zeitschritt Δt nur abhängig von V , nicht von früheren Werten
- Betrachte Sequenz von Positionen X_1, X_2, \dots , jede Veränderung $X_{k+1} - X_k$ unterliegt Zufall, aber Wahrscheinlichkeitsverteilung hängt nicht von vorherigem Verlauf ab (Geschwindigkeit ändert sich sehr oft zwischen X_k und X_{k+1})

Brown'sche Bewegung als Fokker-Planck-Gleichung

Partikel springt zufällig auf der X -Achse, wobei die Wahrscheinlichkeit für große Sprünge stark abnimmt. Außerdem sei die Wahrscheinlichkeit symmetrisch und unabhängig vom Startpunkt

$$a_1 = \frac{\langle \Delta X \rangle_X}{\Delta t} = 0 \qquad a_2 = \frac{\langle (\Delta X)^2 \rangle_X}{\Delta t} = \text{const}$$

Damit lautet die Fokker-Planck-Gleichung

$$\frac{\partial P(X, t)}{\partial t} = \frac{a_2}{2} \frac{\partial^2 P(X, t)}{\partial X^2} \qquad (8)$$

und man sieht, dass (8) eine Diffusionsgleichung mit Diffusionskoeffizient

$$D = \frac{1}{2} a_2 = \frac{\langle (\Delta X)^2 \rangle_X}{2\Delta t}$$

Brown'sche Bewegung mit Driftterm

Betrachte Brown'sches Partikel unter zusätzlicher konstanter Kraft, z.B. Gravitation Mg in Richtung $-X$; schreibe $M\gamma$ für Reibung des Partikels in Fluid, dann ist die durchschnittliche Driftgeschwindigkeit $-\frac{g}{\gamma}$, also

$$a_1 = \frac{\langle \Delta X \rangle_X}{\Delta t} = -\frac{g}{\gamma} \quad a_2 = 2D$$

und damit die Fokker-Planck-Gleichung

$$\frac{\partial P(X, t)}{\partial t} = \frac{g}{\gamma} \frac{\partial P}{\partial X} + D \frac{\partial^2 P}{\partial X^2} \quad (9)$$

Zusammenfassung bis jetzt

Markov-Prozeß

$$p(x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1}; \dots; x_1, t_1) = p(x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1})$$



Chapman-Kolmogorov-Gleichung:

$$p(x, t | x_0, t_0) = \int dx' p(x, t | x', t') p(x', t' | x_0, t_0)$$



Master-Gleichung:

$$\frac{\partial p(x, t | x_0, t_0)}{\partial t} = \int \left(\underbrace{W_t(x|x') p(x', t | x_0, t_0)}_{\text{Gewinn}} - \underbrace{W_t(x'|x) p(x, t | x_0, t_0)}_{\text{Verlust}} \right) dx'$$



Fokker-Planck-Gleichung:

(für Prozesse mit stetigen Pfaden)

$$\frac{\partial p(x, t | x_0, t_0)}{\partial t} = \underbrace{-\frac{\partial}{\partial x} A[x, t] p(x, t | x_0, t_0)}_{\text{Drift}} + \underbrace{\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} (B^2[x, t] p(x, t | x_0, t_0))}_{\text{Fluktuationen}}$$

Abbildung: Quelle: [2]

Langevin-Gleichungen

Alternativ zur Behandlung der Brown'schen Bewegung, betrachte die Gleichung

$$\frac{dV}{dt} = -\gamma V + L(t) \quad (10)$$

mit $L(t)$ normalverteilte Zufallsvariable \implies (10) ist stochastische Differentialgleichung

Wenn gilt

- Dämpfungsterm ist durchschnittliche Kraft, also $\langle L(t) \rangle = 0$
- L variiert schnell in der Zeit, d.h. $\langle L(t)L(t') \rangle = \delta(t - t')$

heißt (10) Langevin-Gleichung

Äquivalenz von Langevin-Gleichung und Fokker-Planck-Gleichung

Für einen häufig vorkommenden linearen Fall ist die Lösung der Fokker-Planck-Gleichung gegeben durch eine Gauß-Funktion.

Berechnet man den Erwartungswert und die Varianz von V aus dem Langevin-Ansatz, entsprechen diese gerade dem Erwartungswert und der Varianz der Lösung der Fokker-Planck-Gleichung.

Da L als normalverteilt angenommen wurde, ist auch V normalverteilt und da eine Gauß-Verteilung eindeutig durch ihren Erwartungswert und ihre Varianz bestimmt ist, folgt die Äquivalenz der Langevin-Gleichung zur linearen Fokker-Planck-Gleichung (siehe [2])

Inhalt des Vortrags

- 1 Fokker-Planck und Langevin Gleichungen
 - Mastergleichung
 - Fokker-Planck-Gleichungen
 - Brown'sche Bewegung
 - Langevin-Ansatz
- 2 Ω -Entwicklung der Master-Gleichung
 - Überblick
 - Herleitung
 - Die makroskopische Gleichung
 - Linear Noise Approximation
- 3 The Diffusion Type
 - Master-Gleichung – Diffusion Type
- 4 Unstabile Systeme
 - Das bistabile System
- 5 Quellen

Ziel einer Ω -Entwicklung

Master-Gleichungen oft nicht explizit lösbar \implies benötigen systematische Approximationsmethode, in diesem Fall eine Potenzreihenentwicklung im Parameter Ω

Grundsätzliche Idee:

- deterministischen Teil, „makroskopische Gleichung“, aus einer gegebenen Master-Gleichung extrahieren
- stochastischen Teil nach Systemgröße entwickeln, d.h. die Größe der Fluktuationen bestimmen

Einführung des Parameters Ω

Ω -Entwicklung involviert immer zwei Größenordnungen: mesoskopisch und makroskopisch

Offensichtlich: Größe des Systems misst den relativen Einfluss von Fluktuationen

Parameter Ω ist Verhältnis zwischen Skala der Größe der Sprünge (X) und Skala auf der die makroskopischen Eigenschaften des Systems (x) gemessen werden

$$x = \frac{X}{\Omega}$$

Formelle Herleitung der Ω -Entwicklung

Allgemeine Form der Master-Gleichung für Variable X

$$\dot{P}(X, t) = \int W_{\Omega}(X|X')P(X', t) - W_{\Omega}(X'|X)P(X, t)dX' \quad (11)$$

Schreiben W wieder als Funktion des Startpunkts und der Sprunglänge
 $r = X - X'$

$$W_{\Omega}(X|X') = W_{\Omega}(X'; X - X') = W_{\Omega}(X'; r)$$

Schreiben nun

$$W_{\Omega}(X'; X - X') = \Phi\left(\frac{X'}{\Omega}; X - X'\right) = \Phi(x'; r) \quad (12)$$

woraus direkt $W_{\Omega}(X'|X) = \Phi(x; -r)$ folgt.

Formelle Herleitung der Ω -Entwicklung

Kanonische Form von (12)

$$W_{\Omega}(X|X') = f(\Omega) \left\{ \Phi_0 \left(\frac{X'}{\Omega}; r \right) + \Omega^{-1} \Phi_1 \left(\frac{X'}{\Omega}; r \right) + \Omega^{-2} \Phi_2 + \dots \right\}$$

passt zu fast allen in der Praxis auftretenden Fällen

Einsetzen in die Master-Gleichung (11)

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(X, t)}{\partial t} = & f(\Omega) \int \left\{ \Phi_0 \left(\frac{X-r}{\Omega}; r \right) + \Omega^{-1} \Phi_1 \left(\frac{X-r}{\Omega}; r \right) + \dots \right\} P(X-r, t) dr \\ & - f(\Omega) \int \left\{ \Phi_0 \left(\frac{X}{\Omega}; -r \right) + \Omega^{-1} \Phi_1 \left(\frac{X}{\Omega}; -r \right) + \dots \right\} dr \cdot P(X, t) \end{aligned} \quad (13)$$

Formelle Herleitung der Ω -Entwicklung

Müssen noch überlegen wie $P(X, t)$ von Ω abhängt. Als Startbedingung haben wir

$$P(X, 0) = \delta(X - X_0) \quad \text{mit } X_0 \text{ von der Größenordnung } \Omega$$

Erwarten Entwicklung

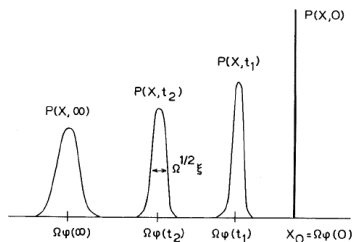


Fig. 24. The evolution of the probability density.

Abbildung: Quelle [1]

Formelle Herleitung der Ω -Entwicklung

Formal bedeutet das

$$X = \Omega\phi(t) + \Omega^{\frac{1}{2}}\xi$$

Schreibe $P(X, t)$ als Funktion von $\xi \implies P$ unabhängig von Ω

Betrachte Transformation

$$P(X, t) = P(\Omega\phi(t) + \Omega^{\frac{1}{2}}\xi, t) = \Pi(\xi, t)$$

mit

$$\frac{\partial^\nu \Pi}{\partial \xi^\nu} = \Omega^{\frac{1}{2}\nu} \frac{\partial^\nu P}{\partial X^\nu}$$

$$\frac{\partial \Pi}{\partial t} = \frac{\partial P}{\partial t} + \Omega \frac{d\phi}{dt} \frac{\partial P}{\partial X} = \frac{\partial P}{\partial t} + \Omega^{\frac{1}{2}} \frac{d\phi}{dt} \frac{\partial \Pi}{\partial \xi}$$

Formelle Herleitung der Ω -Entwicklung

Insgesamt folgt dann für (13)

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Pi(\xi, t)}{\partial t} - \Omega^{\frac{1}{2}} \frac{d\phi}{dt} \frac{\partial \Pi}{\partial \xi} = & \\ f(\Omega) \int \Phi_0 \left(\phi(t) + \Omega^{-\frac{1}{2}}(\xi - \Omega^{-\frac{1}{2}}r); r \right) \Pi(\xi - \Omega^{\frac{1}{2}}r, t) dr & \\ + \Omega^{-1} f(\Omega) \int \Phi_1 \left(\phi(t) + \Omega^{-\frac{1}{2}}(\xi - \Omega^{-\frac{1}{2}}r); r \right) \Pi(\xi - \Omega^{\frac{1}{2}}r, t) dr + \dots & \\ - f(\Omega) \int \Phi_0 \left(\phi(t) + \Omega^{-\frac{1}{2}}\xi; -r \right) dr \cdot \Pi(\xi, t) & \\ - \Omega^{-1} f(\Omega) \int \Phi_1 \left(\phi(t) + \Omega^{-\frac{1}{2}}\xi; -r \right) dr \cdot \Pi(\xi, t) - \dots & \end{aligned}$$

Formelle Herleitung der Ω -Entwicklung

Taylorentwicklung der ersten beiden Terme um ξ ergibt

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \Pi(\xi, t)}{\partial t} - \Omega^{\frac{1}{2}} \frac{d\phi}{dt} \frac{\partial \Pi}{\partial \xi} = \\ & - \Omega^{-\frac{1}{2}} f(\Omega) \frac{\partial}{\partial \xi} \int r \Phi_0 \left(\phi(t) + \Omega^{-\frac{1}{2}} \xi, r \right) dr \cdot \Pi(\xi, t) \\ & + \frac{1}{2} \Omega^{-1} f(\Omega) \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} \int r^2 \Phi_0 \left(\phi(t) + \Omega^{-\frac{1}{2}} \xi, r \right) dr \cdot \Pi(\xi, t) \\ & - \frac{1}{3!} \Omega^{-\frac{3}{2}} f(\Omega) \frac{\partial^3}{\partial \xi^3} \int r^3 \Phi_0 \left(\phi(t) + \Omega^{-\frac{1}{2}} \xi, r \right) dr \cdot \Pi(\xi, t) \\ & - \Omega^{-\frac{3}{2}} f(\Omega) \frac{\partial}{\partial \xi} \int r \Phi_1 \left(\phi(t) + \Omega^{-\frac{1}{2}} \xi, r \right) dr \cdot \Pi(\xi, t) + O(\Omega^{-2}) \end{aligned}$$

Formelle Herleitung der Ω -Entwicklung

Zur Vereinfachung definiere

$$\alpha_{\nu,\lambda}(x) = \int r^\nu \Phi_\lambda(x; r) dr$$

und skaliere die Zeit durch

$$\Omega^{-1} f(\Omega) t = \tau$$

Formelle Herleitung der Ω -Entwicklung

Aus der Gleichung wird dann

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Pi(\xi, t)}{\partial \tau} - \Omega^{\frac{1}{2}} \frac{d\phi}{d\tau} \frac{\partial \Pi}{\partial \xi} = & \\ - \Omega^{\frac{1}{2}} \frac{\partial}{\partial \xi} \alpha_{1,0} \left(\phi(\tau) + \Omega^{-\frac{1}{2}} \xi \right) \cdot \Pi & \\ + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} \alpha_{2,0} \left(\phi(\tau) + \Omega^{-\frac{1}{2}} \xi \right) \cdot \Pi & \\ - \frac{1}{3!} \Omega^{-\frac{1}{2}} \frac{\partial^3}{\partial \xi^3} \alpha_{3,0} \left(\phi(\tau) + \Omega^{-\frac{1}{2}} \xi \right) \cdot \Pi & \\ - \Omega^{-\frac{1}{2}} \frac{\partial}{\partial \xi} \alpha_{1,1} \left(\phi(\tau) + \Omega^{-\frac{1}{2}} \xi \right) \cdot \Pi + O(\Omega^{-1}) & \end{aligned}$$

Formelle Herleitung der Ω -Entwicklung

Durch Entwicklung der Sprungmomente erhält man die systematische Entwicklung der Master-Gleichung

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \Pi(\xi, t)}{\partial \tau} - \Omega^{\frac{1}{2}} \frac{d\phi}{d\tau} \frac{\partial \Pi}{\partial \xi} = & \\
 - \Omega^{\frac{1}{2}} \alpha_{1,0}(\phi) \frac{\partial \Pi}{\partial \xi} - \alpha'_{1,0} \frac{\partial}{\partial \xi} \xi \Pi - \frac{1}{2} \Omega^{-\frac{1}{2}} \alpha''_{1,0}(\phi) \frac{\partial}{\partial \xi} \xi^2 \Pi & \\
 + \frac{1}{2} \alpha_{2,0}(\phi) \frac{\partial^2 \Pi}{\partial \xi^2} + \frac{1}{2} \Omega^{-\frac{1}{2}} \alpha'_{2,0}(\phi) \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} \xi \Pi & \\
 - \frac{1}{3!} \Omega^{-\frac{1}{2}} \alpha_{3,0} \frac{\partial^3 \Pi}{\partial \xi^3} - \Omega^{-\frac{1}{2}}(\phi) \frac{\partial \Pi}{\partial \xi} + O(\Omega^{-1}) & \quad (14)
 \end{aligned}$$

wobei $\phi = \phi(\tau)$

Die makroskopische Gleichung

Für große Ω ist (14) keine geeignete Entwicklung wegen der Terme der Ordnung $\Omega^{\frac{1}{2}}$

Setzen

$$\frac{d\phi}{d\tau} = \alpha_{1,0}(\phi) \quad (15)$$

Ziel ist Master-Gleichung mit Startbedingung $P(X, 0) = \delta(X - X_0)$ zu lösen, wir setzen

$$\phi(0) = \frac{X_0}{\Omega} = x_0 \quad (16)$$

Durch (15) und (16) definierte Funktion ϕ benutzt man in Transformation $X = \Omega\phi(t) + \Omega^{\frac{1}{2}}\xi$; bestimmt den makroskopischen Teil von X derart, dass Fluktuationen von der Größenordnung $\Omega^{\frac{1}{2}}$ (15) nennt man *makroskopische Gleichung*

Stationäre Lösungen der makroskopischen Gleichung

Stationäre Lösungen von (15) sind Nullstellen von $\alpha_{1,0}(\phi) = 0$

Für verschiedene Arten von Nullstellen von $\alpha_{1,0}$ betrachte Hodogramm (Plot $\dot{\phi} \equiv \alpha_{1,0}(\phi)$ vs ϕ)

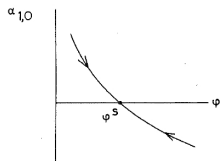


Fig. 25a. Stable stationary solution of the macroscopic equation.

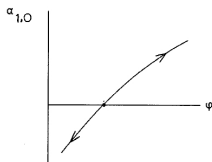


Fig. 25b. Unstable stationary solution.

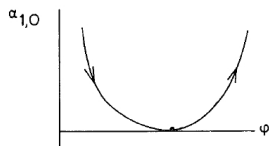


Fig. 25c. Another form of instability.

Abbildung: Quelle: [1]

Wir nehmen zunächst an ($h > 0$ const)

$$\alpha'_{1,0}(\phi) \leq -h < 0 \quad \forall \phi$$

(17)

Definition Linear Noise Approximation

Um die Terme mit $\Omega^{\frac{1}{2}}$ haben wir uns gekümmert, also haben wir eine Gleichung für $\Pi(\xi, \tau)$, die eine geeignete Entwicklung in $\Omega^{-\frac{1}{2}}$ ist. Betrachte Terme der Größenordnung Ω^0

$$\frac{\partial \Pi(\xi, \tau)}{\partial \tau} = -\alpha'_{1,0}(\phi) \frac{\partial}{\partial \xi} \xi \Pi + \frac{1}{2} \alpha_{2,0}(\phi) \frac{\partial^2 \Pi}{\partial \xi^2} \quad (18)$$

(18) ist eine Fokker-Planck-Gleichung mit zeitabhängigen (durch ϕ) Koeffizienten. Diese Approximation nennt man *linear noise approximation*.

Gleichungen zur bestimmung der Momente

Lösung zu (18) ist Gauß'sche Normalverteilung, d.h. genügt ersten beiden Momente von ξ zu bestimmen

Folgende Gleichungen bestimmen beide Momente, sofern Startwert bekannt

$$\begin{aligned}\partial_\tau \langle \xi \rangle &= \alpha'_{1,0}(\phi) \langle \xi \rangle \\ \partial_\tau \langle \xi^2 \rangle &= 2\alpha'_{1,0}(\phi) \langle \xi^2 \rangle + \alpha_{2,0}(\phi) \\ \partial_\tau \langle \langle \xi^2 \rangle \rangle &= 2\alpha'_{1,0}(\phi) \langle \langle \xi^2 \rangle \rangle + \alpha_{2,0}(\phi)\end{aligned}\tag{19}$$

Startfluktuationen verschwinden

$$\langle \xi \rangle_0 = \langle \xi^2 \rangle_0 = \langle \langle \xi^3 \rangle \rangle_0 = 0\tag{20}$$

Zusammenfassung

Ziel: Lösung der Master-Gleichung mit Startbedingung

Vorgehen:

- 1 Löse makroskopische Gleichung (15) mit Startbedingung (16); nenne Lösung $\phi(\tau|x_0)$
- 2 Setze $\phi(\tau|x_0)$ in (19) ein und löse mit Startbedingung (20)
- 3 Benutze die Ergebnisse um Mittel und Varianz der originalen Variable X zu finden

$$\langle X \rangle_\tau = \Omega \phi(\tau|x_0) + \Omega^{\frac{1}{2}} \langle \xi \rangle_\tau$$
$$\langle\langle X^2 \rangle\rangle_\tau = \Omega \langle\langle \xi^2 \rangle\rangle_\tau$$

und nehme $P(X, t)$ als Gaußverteilung mit diesem Mittel und dieser Varianz

Inhalt des Vortrags

- 1 Fokker-Planck und Langevin Gleichungen
 - Mastergleichung
 - Fokker-Planck-Gleichungen
 - Brown'sche Bewegung
 - Langevin-Ansatz
- 2 Ω -Entwicklung der Master-Gleichung
 - Überblick
 - Herleitung
 - Die makroskopische Gleichung
 - Linear Noise Approximation
- 3 The Diffusion Type
 - Master-Gleichung – Diffusion Type
- 4 Unstabile Systeme
 - Das bistabile System
- 5 Quellen

Verletzung der Stabilitätsbedingung

Betrachten nun Master-Gleichungen für die die Stabilitätsbedingung nicht gilt

$$\alpha_{1,0}(\phi) \equiv 0$$

Makroskopische Gleichung $\implies \phi(\tau) = (\text{const.}) = \phi(0)$, d.h. kleine Abweichungen vom Startwert $\delta\phi(0)$ führen zu $\delta\phi(\tau)$ konstant über die Zeit
Makroskopische Lösungen instabil, Varianz wächst linear

Ist Startverteilung delta-Funktion haben Fluktuationen gleiche Größenordnung wie makroskopischer Teil nach einer Zeit

$$\tau \sim \Omega\alpha_{2,0}(\phi)$$

Nach dieser Zeit funktioniert die Ω -Entwicklung nicht mehr, Teilung von Fluktuation und makroskopischen Teil nicht länger möglich

Ω -Entwicklung für intensive Variable

Leiten nun Ω -Entwicklung für $x = \frac{X}{\Omega}$ her

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = & f(\Omega) \int \left\{ \Phi_0 \left(x - \frac{r}{\Omega}; r \right) + \Omega^{-1} \Phi_1 \left(x - \frac{r}{\Omega}; r \right) + \dots \right\} P \left(x - \frac{r}{\Omega}, t \right) dr \\ & - f(\Omega) \int \left\{ \Phi_0 (x; -r) + \Omega^{-1} \Phi_1 (x; -r) + \dots \right\} dr \cdot P(x, t) \end{aligned}$$

Ω -Entwicklung für intensive Variable

Entwicklung in Ω^{-1} und bekannte Schreibweise mit $\alpha_{\nu,\lambda}$

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = & \Omega^{-2} f(\Omega) \left\{ -\frac{\partial}{\partial x} \alpha_{1,1}(x) P + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \alpha_{2,0}(x) P \right\} \\ & + \Omega^{-3} f(\Omega) \left\{ \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \alpha_{2,1}(x) P - \frac{1}{3!} \frac{\partial^3}{\partial x^3} \alpha_{3,0}(x) P - \frac{\partial}{\partial x} \alpha_{2,1}(x) P \right\} \\ & + f(\Omega) O(\Omega^{-4}) \quad (21) \end{aligned}$$

Vergleich der Entwicklungen

Es gibt entscheidende Unterschiede zwischen (14) und (21)

- Dominante Term von (14) fehlt, keine Extraktion des makroskopischen Teils von X möglich
System hat keine Neigung sich in die eine oder andere Richtung zu entwickeln \implies Fluktuationen bestimmen Entwicklung von P
- Zeitskala der Änderung um Faktor Ω^{-1} kleiner
- P hat keinen deutlichen Peak, d.h. α 's nicht um einen zentralen Wert entwickelbar, bleiben als nichtlineare Funktionen in der Gleichung

Diffusion Approximation

Erste Zeile von (21) enthält Hauptterme

$$\frac{\partial P(x, \tau)}{\partial \tau} = -\frac{\partial}{\partial x} \alpha_{1,1}(x)P + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \alpha_{2,0}(x)P \quad (22)$$

mit der neuen Zeitvariable $\tau = \Omega^{-2} f(\Omega)t$.

(22) heißt *diffusion approximation* und ist nichtlineare Fokker-Planck-Gleichung.

Inhalt des Vortrags

- 1 Fokker-Planck und Langevin Gleichungen
 - Mastergleichung
 - Fokker-Planck-Gleichungen
 - Brown'sche Bewegung
 - Langevin-Ansatz
- 2 Ω -Entwicklung der Master-Gleichung
 - Überblick
 - Herleitung
 - Die makroskopische Gleichung
 - Linear Noise Approximation
- 3 The Diffusion Type
 - Master-Gleichung – Diffusion Type
- 4 Unstabile Systeme
 - Das bistabile System
- 5 Quellen

Einleitung

Begrifflichkeiten:

macrostate jeder Wert der makroskopischen Variable ϕ ; zeitabhängig:
Lösung der makroskopischen Gleichung (15) / stationär:
Lösung von $\alpha_{1,0}(\phi) = 0$

mesostate jede Wahrscheinlichkeitsverteilung P ; zeitabhängig: Lösung
der Master-Gleichung / stationär: zeitunabhängige Lösung
der Master-Gleichung $P^s(X)$

Zunächst gelte noch (17), dann ϕ^s einziger stationärer macrostate und gehört zum stationären mesostate $P^s(X)$ im dem Sinne, dass $P^s(X)$ einen scharfen Peak bei $\Omega\phi^s$ hat und für $\Omega \rightarrow \infty$ gegen δ -Funktion strebt
Solche Zuordnung für jeden zeitabhängigen macrostate möglich, allerdings weder eindeutig noch genau definiert (einzige Einschränkung: Weite kleiner als Größenordnung $\Omega^{\frac{1}{2}}$)

Beliebige mesostates

mesostates die nicht aus einem scharfen Peak bestehen beschreiben Wahrscheinlichkeitsverteilung über eine Menge von macrostates, z.B.

$$P(X) = \pi_1 \delta(X - X_1) + \pi_2 \delta(X - X_2) \quad (23)$$

mit $X_1 \neq X_2$ und $\pi_1, \pi_2 > 0$, $\pi_1 + \pi_2 = 1$

(23) gehört zu zwei macrostates $\phi_1 = \frac{X_1}{\Omega}$ und $\phi_2 = \frac{X_2}{\Omega}$, d.h. System ist mit Wahrscheinlichkeit π_1 in macrostate ϕ_1 und mit Wahrscheinlichkeit π_2 in macrostate ϕ_2

Analog lässt sich jede flache Verteilung aufteilen in eine Summe scharfer Peaks, jedoch nicht eindeutig, die Form und Weite der individuellen Peaks kann variieren (in vernünftigen Grenzen)

Bistabilität

$\alpha_{1,0}(\phi)$ habe die Form

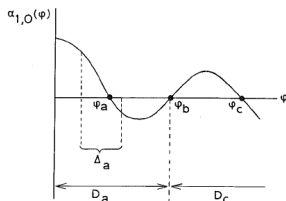


Fig. 32. The macroscopic rate equation for a bistable system and the domains of attraction.

Abbildung: Quelle: [1]

Drei stationäre macrostates ϕ_a, ϕ_b, ϕ_c , wobei ϕ_a, ϕ_c lokal stabil, ϕ_b instabil
Solche Systeme heißen *bistabil*

Verhalten von bistabilen Systemen

Betrachte lokal stabile Lösung ϕ_a ; da $\alpha'_{1,0}(\phi_a) < 0$ existiert eine Umgebung Δ_a in der (17) gilt

\implies jeder macrostate $\phi(t)$ der bei $\phi(0)$ innerhalb von Δ_a startet geht gegen ϕ_a ; außerdem bleibt der zugehörige mesostate $P(X, t)$ scharfer Peak (Ω groß genug); Entwicklung von $P(X, t)$ durch Ω -Entwicklung approximierbar

Kleiner Schönheitsfehler: Wahrscheinlichkeit für großen Sprung über ϕ_b hinweg nicht gleich 0!

mesostate mit scharfen Peak in Δ_a überlebt nicht für immer,

Wahrscheinlichkeit nimmt langsam ab zugunsten eines Peaks nahe ϕ_c

Zwar ϕ_a stabile Lösung der makroskopischen Gleichung, aber zugehörige mesostate „nur“ langlebig, nicht strikt stabil

Solch ein mesostate heißt *metastabil*

„escape time“ kann leicht das mehrfache Alter des Universums sein

Splitting Probability

Starten bei Punkt nahe bei makroskopisch unstabilen Punkt ϕ_b in D_a
Sprünge über ϕ_b hinweg nicht unwahrscheinlich, daher existiert nicht vernachlässigbare Wahrscheinlichkeit, dass das System nicht makroskopischen Pfad nach ϕ_a folgt, sondern in ϕ_c endet
D.h. in der Nähe von Instabilitäten führen Fluktuationen zu makroskopischen Effekten \implies nicht möglich makroskopischen Teil und Fluktuationsterm zu trennen wie in Ω -Entwicklung
Zur Berechnung dieser „splitting probability“ siehe [1].

Fazit: es existiert kein zum makrostate ϕ_b zugehöriger mesostate; jede ursprünglich in ϕ_b gepeakte Wahrscheinlichkeitsverteilung verschwindet mit der Zeit

Quellen



N.G. Van Kampen

Stochastic Processes in Physics and Chemistry Minimal Residual (GMRes) Method



J. Lemm

Econophysics WS1999/2000: Notizen zur Vorlesung über Optionen 2:
Der klassische Ansatz nach Black-Scholes

<http://pauli.uni-muenster.de/~lemm/econoWS99/options2/options2.html>