

Wk: 1 Variable

$$\frac{\partial}{\partial t} p(x, t | x', t') = \int dx'' \left[ W(x; x'' | t) P(x'' | x', t') - W(x''; x | t) P(x | x', t') \right]$$

Ausgangszustand

$$\frac{\partial}{\partial t} p(x, t | x', t') = \sum_{n \geq 1} \left( -\frac{\partial}{\partial x} \right)^n U^{(n)}(x, t) P(x, t | x', t')$$

Kramers-Moyal-Entwicklung

$$U^{(n)}(x, t) = \frac{1}{n!} \int d\Delta \Delta^n W(x + \Delta; x, t)$$

$\Delta = x - x''$

Zusammenhang zu den in Kap. I-9. definierte Koeffizienten  $U^{(n)}(x, t)$  ??

$$\left( \frac{1}{n!} \lim_{\tilde{t} \rightarrow 0} \frac{1}{\tilde{t}} \langle (x(t + \tilde{t}) - x(t))^n \rangle \right)_{x(t) \text{ fest}}$$

benutze:  $x(t + \tilde{t}) - x(t) = \Delta$

$$U^{(n)}(x, t) = \frac{1}{n!} \lim_{\tilde{t} \rightarrow 0} \frac{1}{\tilde{t}} \int d\Delta \Delta^n \underbrace{P(x + \Delta, t + \tilde{t} | x, t)}_{x(t + \tilde{t})}$$

Um den Limes  $\tilde{t} \rightarrow 0$  durchzuführen, entwickeln wir — wie in Kap. I-4. — die Übergangswahrsch.

$$P(x + \Delta, t + \tilde{t} | x, t) = (1 - \bar{w}(x, t) \cdot \tilde{t}) \cdot d(x + \Delta - x)$$

$$+ W(x+\Delta; x, t) \cdot \bar{z} + o(\bar{z}^2)$$

benutze (wie in I.4.) die Normierung bed.:

$$\int d\Delta P(x+\Delta, t | x, t) = 1$$

„System geht irgendwo hin“

$$\Rightarrow \bar{w}(x, t) = \int d\Delta W(x+\Delta; x, t)$$

Entwicklung einsetzen in den Ausdruck für  $U^{(n)}$

$$\hookrightarrow U^{(n)}(x, t) = \frac{1}{n!} \lim_{\bar{z} \rightarrow 0} \frac{1}{\bar{z}} \int d\Delta \Delta^n$$

$$\left[ (1 - \bar{w}(x, t) \cdot \bar{z}) d(\Delta) + W(x+\Delta; x, t) \cdot \bar{z} + o(\bar{z}^2) \right]$$

Liefert keinen Beitrag wg.  $\int dx x^n d(x) = 0$

$$= \frac{1}{n!} \lim_{\bar{z} \rightarrow 0} \frac{1}{\bar{z}} \left( \int d\Delta \Delta^n W(x+\Delta; x, t) \cdot \bar{z} + o(\bar{z}^2) \right)$$

$$\Rightarrow U^{(n)}(x, t) = \frac{1}{n!} \int d\Delta \Delta^n W(x+\Delta; x, t)$$

$$= \hat{K}^{(n)}(x, t)$$

Damit entsprechen also die "neuen" Koeffizienten  $\hat{K}^{(n)}$  genau unseren "alten" Kramers-Moyal-Koeffizienten aus Kap. I. 9.

Damit  $\textcircled{*}$  
$$\frac{\partial}{\partial t} p(x, t | x', t') = \sum_{n \geq 1} \left( -\frac{\partial}{\partial x} \right)^n \left( K^{(n)}(x, t) \cdot p(x, t | x', t') \right)$$

Direkte Verbindung zur verallgemeinerten Fokker-Plank-Gl. über die  $K^{(n)}$ .

Beachtk =

Diese Gleichung  $\textcircled{*}$  kann man umschreiben in eine Gleichung für  $p(x, t)$

Multipliziere dazu mit  $p(x', t')$  und integriere über  $x'$

[Erinnerung: 
$$p(x, t) = \int dx' p(x, t | x', t')$$
 Verbundwahrsch.]

$$= \int dx' p(x|t | x'|t') \cdot p(x'|t')$$

$$\Rightarrow \left[ \frac{\partial}{\partial t} p(x|t) = \sum_{n \geq 1} \left( -\frac{\partial}{\partial x} \right)^n K^{(n)}(x|t) p(x|t) \right]$$

Bisher:  $\otimes$  ist nichts anderes als  
eine ungeschriebene  
Pauli-Master-Gl. !

Betrachte nun speziell den Fall, dass nur  
 $K^{(1)}$  und  $K^{(2)}$  ungleich Null sind (d.h.  $K^{(n \geq 3)} = 0$ )

— Das ist garantiert dann der Fall, wenn man  
von Langevin-Gl. mit gaussverteilten Stochast. Kräften  
ausgeht!

— Allgemein kann man die Situation  $K^{(n \geq 3)} = 0$  als  
Näherung für den Fall auffassen,

dass die Übergangsraten  $W$  nur für  
kleine Sprünge  $\Delta$  ungleich Null sind!

$$K^{(n)} = \frac{1}{n!} \int d\Delta \Delta^n W(x+\Delta; x, t)$$

"Näherung für kleine Sprungwahrscheinlichkeiten"

Dann folgt:

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x, t) = \left[ -\frac{\partial}{\partial x} K^{(1)}(x, t) + \frac{\partial^2}{\partial x^2} K^{(2)}(x, t) \right] P(x, t)$$

Fokker-Planck-Gl. !

analog:

$$\frac{\partial}{\partial t} p(x, t | x', t') = \left[ -\frac{\partial}{\partial x} K^{(1)}(x, t) + \frac{\partial^2}{\partial x^2} K^{(2)}(x, t) \right] p(x, t | x', t')$$

Die Fokker-Planck-Gl. entspricht also einer vereinfachten (Pauli-) Mastergleichung

Weitere Bemerkungen

- Verallgemeinerung auf den Fall vieler Variablen  $i=1, \dots, M$

$$\frac{\partial}{\partial \mathcal{H}} P(dx_{ub,t}) = \left[ - \sum_{i=1}^M \frac{\partial}{\partial x_i} \mu_i^{(1)}(dx_{ub,t}) + \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^M \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \mu_{ij}^{(2)}(dx_{ub,t}) \right] P(dx_{ub,t})$$

- Häufig führt man ein:

$$\hat{\mathcal{L}}_{FP} = - \frac{\partial}{\partial x_i} \mu_i^{(1)}(dx_{ub,t}) + \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \mu_{ij}^{(2)}(dx_{ub,t})$$

„Fokker-Planck-Operator“

(mit Einsteinscher  
Summenkonvention)

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial t} P(x_{ub,t}) = \hat{\mathcal{L}}_{FP} P(x_{ub,t})$$

- Die Fokker-Planck-Gl. kann umgeschrieben werden  
in Form einer Kontinuitätsgleichung!

Definiere dazu den „Wahrscheinlichkeitsstrom“:

$$J_i = k_i^{(1)}(dx_{u^3,t}) P(dx_{u^3,t})$$

$$i=1, \dots, M$$

$$- \frac{\partial}{\partial x_j} k_{ij}^{(2)}(dx_{u^3,t}) P(dx_{u^3,t})$$

$$\Rightarrow \left[ \frac{\partial}{\partial t} P(dx_{u^3,t}) + \underbrace{\sum_{i=1}^M \frac{\partial J_i}{\partial x_i}}_{\text{"Divergenz J" in M Dimensionen!}} = 0 \right] \quad (**)$$

"Divergenz J" in M Dimensionen!

Das Wort "Kontinuitätsgleichung" drückt bereits einen Erhaltungssatz aus: hier: Erhaltung der totalen Wahrscheinlichkeit!

also:

$$\int dx_1 \dots \int dx_M P(dx_{u^3,t}) = 1$$

$$\Leftrightarrow J_i = 0 \text{ auf den}$$

Rändern des M-dimensionalen Volumens

("Kein Fluss durch die Oberfläche")

Normierung beding  
für  $P(dx_{u^3,t})$ !

Speziell: Stationärer Fall

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x_{i+1}, t) = 0 \iff J_i = \text{const}$$

Da außerdem  $J_i$  an den Rändern verschwindet, gilt:

$$J_i = 0 \quad \text{für stationäre Prozesse}$$

## I.10 Fokker-Planck-Gleichung und Brownsche Bewegung

→ Einige Anwendungen der FP-Gl.

Ausgangspunkt:

$$\dot{v}(t) = -\gamma v(t) + f(t)$$

1) betrachte zunächst den ganzfall große Reibung

↔ lange Zeiten (Erinnerung:  $\langle v(t) \cdot v(0) \rangle = 3 \frac{k_B T}{m} e^{-\gamma t}$ )

⇒ für  $t \gg \tau = \frac{1}{\gamma}$  ist die  
Geschwindigkeit "relaxiert"

→ Die Langevin-Gl. reduziert sich auf



$$\gamma \underline{v}(t) = \underline{f}(t)$$

s. Kap. I.6

$$\underline{\dot{v}}(t) = \gamma^{-1} \underline{f}(t)$$

Wiener-Prozess!  
stochast. Kraft, gaußverteilt

Zugehörige Krümmungs-Moyal-Koeffizienten

mit der Notation aus Kap. 9 gilt.  ~~$D_{ij} = \gamma^{-1} d_{ij}$~~

$$\dot{x}_i(t) = h_i(dx_{\text{ub},t}) + \sum_j D_{ij}(dx_{\text{ub},t}) f_j(t)$$

hier:  $h_i = 0$

$$D_{ij} = \gamma^{-1} d_{ij}$$

$$\langle f_i(t) f_j(t') \rangle = \Gamma d_{ij} \delta(t-t')$$

$$x_i \rightarrow v_i \quad i=1,2,3$$

aus I.9.:  $k_i^{(1)} = h_i = 0$

$$k_{ij}^{(2)} = \frac{\Gamma}{2} D_{ik} D_{kj} = \frac{\Gamma}{2} \gamma^{-2} d_{ij}$$

Thermisches Gleichgewicht:

$$\text{FDT: } \Gamma = \frac{2\gamma k_B T}{m}$$

$$\text{und } \frac{k_B T}{\gamma m} = D$$

- Diffusionskoeff.

$$\Rightarrow \boxed{K_{ij}^{(2)} = D \delta_{ij}}$$

das erklärt auch, warum man den  
zweiten Krammers-Moyal-Koeffizienten  
häufig „Diffusionskoeffizient“ nennt!  
↑ ebenfalls

Einsetzen in die FP-Gleichung

Beachte: Die (einzigen) dynam. Variablen  
sind die Ortskoordinaten des Teilchens!

$$\begin{aligned} \Rightarrow \frac{\partial}{\partial t} P(\underline{r}, t) &= D \sum_{i,j=1}^3 \frac{\partial}{\partial r_i} \frac{\partial}{\partial r_j} \delta_{ij} P(\underline{r}, t) \\ &\quad \uparrow \\ &\quad \text{Ortsvelten} \\ &= D \sum_{i=1}^3 \frac{\partial^2}{\partial r_i^2} P(\underline{r}, t) \end{aligned}$$

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t} P(\underline{r}, t) = D \nabla^2 P(\underline{r}, t)}$$

Das ist die ganz gewöhnl. Diffusionsgl.!

Lösung (mit Anfangsbed.  $N(t=0) = N_0$ )

$$P(N, t) = \frac{1}{(\sqrt{4\pi Dt})^{3/2}} e^{-\frac{(N(t) - N_0)^2}{4Dt}}$$

S. auch  
Kap.  
I.5!

Daraus folgt sofort:

$$\langle (N(t) - N(0))^2 \rangle = 6Dt$$