Wh.: 1 Variable

$$\frac{\partial}{\partial t} p(x,t|x't') = \int dx'' \Big[W(x;x''t) P(x''t|x't') \underset{\text{Ausgangszustand}}{} - W(x'';xt) P(xt|x't') \Big]$$

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

Kramers-Moyal-Entwicklung

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

$$\Delta = x - x''$$

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

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

benutze: $x(t+\tau) - x(t) = \Delta$

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

Um den Limes $\tau \to 0$ durchzuführen, entwickeln wir – wie in Kap. I-4. – die Übergangswahrsch.

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

$$+ W(x+\Delta; x,t)\cdot\tau + O(\tau^2)$$

benutze (wie in I.4.) die Normierungsbed.:

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

„System geht irgendwo hin"

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

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

$$\Rightarrow K^{(n)}(x,t) = \frac{1}{n!} \lim_{\tau\to 0} \frac{1}{\tau} \int d\Delta\, \Delta^n$$

$$\Big[\underbrace{(1-\bar{w}(x,t)\cdot\tau)\,\delta(\Delta)}_{\text{liefert keinen Beitrag wg. } \int dx\, x^n \delta(x) = 0} + W(x+\Delta; x,t)\cdot\tau + O(\tau^2)\Big]$$

$$= \frac{1}{n!} \lim_{\tau\to 0} \frac{1}{\tau}\left(\int d\Delta\, \Delta^n\, W(x+\Delta; x,t)\cdot\tau + O(\tau^2)\right)$$

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

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

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

Damit (*)

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t} p(x,t \mid x', t') = \sum_{n\geq 1}^{\infty} \left(-\frac{\partial}{\partial x}\right)^{n} \left(K^{(n)}(x,t) \cdot P(x,t \mid x', t')\right)}$$

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

Beachte:
Diese Gleichung (*) 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.

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

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

Bisher: (*) ist nichts anderes als eine umgeschriebene 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 <u>Näherung</u> für den Fall auffassen,

dass die Übergangsraten W nur für kleine Sprünge Δ ungleich Null sind!

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

„Näherung für kleine Sprungwahrscheinlichkeiten"

Dann folgt:

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

Fokker-Planck-Gl. !

analog:

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

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

Weitere Bemerkungen

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

$$\frac{\partial}{\partial t} P(\{x_k\},t) = \Big[-\sum_{i=1}^{M} \frac{\partial}{\partial x_i} K_i^{(1)}(\{x_k\},t) + \sum_{i=1}^{M}\sum_{j=1}^{M} \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} K_{ij}^{(2)}(\{x_k\},t)\Big] \cdot P(\{x_k\},t)$$

$k=1,\dots,M$

- Häufig führt man ein:

$$\mathcal{L}_{FP} = -\frac{\partial}{\partial x_i} K_i^{(1)}(\{x_k\},t) + \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} K_{ij}^{(2)}(\{x_k\},t)$$

„Fokker-Planck-Operator"

(mit Einsteinscher Summenkonvention)

$$\Rightarrow \boxed{\frac{\partial}{\partial t} P(\{x_k\},t) = \mathcal{L}_{FP} P(\{x_k\},t)}$$

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

Definiere dazu den „Wahrscheinlichkeitsstrom":

$$J_i = K_i^{(1)}(\{x_n\},t)\,P(\{x_n\},t) - \frac{\partial}{\partial x_j} K_{ij}^{(2)}(\{x_n\},t)\,P(\{x_n\},t)$$

$i = 1,\dots,M$

$$\Rightarrow \boxed{\frac{\partial}{\partial t}P(\{x_n\},t) + \underbrace{\sum_{i=1}^{M}\frac{\partial J_i}{\partial x_i}} = 0} \quad (**)$$

„Divergenz J" in M Dimension!

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

also:

$$\int dx_1 \dots \int dx_M\, P(\{x_n\},t) = 1$$

Normierungsbedingung für $P(\{x_n\},t)$!

$\Leftrightarrow J_i = 0$ auf den Rändern des M-dimensionalen Volumens

(„kein Fluss durch die Oberfläche")

Speziell: Stationärer Fall

$\frac{\partial}{\partial t} P(\{x_n\}, t) = 0 \iff J_i = \text{const}$

Da außerdem J_i an den Rändern verschwindet, gilt:

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

I.10 Fokker-Planck-Gleichung und Brown'sche Bewegung

→ Einige Anwendungen der FP-Gl.

<u>Ausgangspunkt:</u>

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

1) betrachte zunächst den Grenzfall großer Reibung
$\iff$ lange Zeiten (Erinnerung: $\langle \underline{v}(t) \cdot \underline{v}(0) \rangle = 3 \frac{k_B T}{m} e^{-\gamma t}$

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

→ Die Langevin-Gl. reduziert sich auf

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

$\boxed{\text{s. Kap. I.6}}$

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

Wiener-Prozess!

stochast. Kraft, gaussverteilt

Zugehörige Kramers-Moyal-Koeffizienten

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

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

hier: $h_i = 0$

$$D_{ij} = \gamma^{-1}\,\delta_{ij}$$

$$x_i \to v_i \qquad i = 1,2,3$$

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

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

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

Thermisches Gleichgewicht:

FDT: $\Gamma = \dfrac{2\gamma k_B T}{m}$ und $\dfrac{k_B T}{\gamma m} = D$ Diffusions-Koeff.

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

das erklärt auch, warum man den zweiten Kramers-Moyal-Koeffizienten häufig ebenfalls „Diffusionskoeffizient" nennt!

Einsetzen in die FP-Gleichung

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

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial t} P(\underline{r},t) = D \sum_{i,j=1}^{3} \frac{\partial}{\partial r_i}\frac{\partial}{\partial r_j}\,\delta_{ij}\,P(\underline{r},t)$$

Ortsvektor

$$= D \sum_{i=1}^{3} \frac{\partial^2}{\partial r_i^2} P(\underline{r},t)$$

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

Das ist die ganz gewöhnl. Diffusionsgl. !

Lösung (mit Anfangsbed. $\underline{r}(t=0)=\underline{r}_0$)

$$P(\underline{r},t) = \frac{1}{(4\pi D t)^{3/2}}\, e^{-\frac{(\underline{r}(t)-\underline{r}_0)^2}{4Dt}}$$

s. auch Kap. I.5 !

Daraus folgt sofort:

$$\langle (\underline{r}(t) - \underline{r}(0))^2 \rangle = 6Dt$$