

• Pecletzahl: Wichtigkeit von Drift- zu stochastischer Bewegung

$$Pe = \frac{a^2/D}{a/v} = \frac{\text{Diffusionszeit für Distanz } a}{\text{Driftzeit mit Geschw. } v} \quad (10.43)$$

$$Pe = \begin{cases} \ll 1 & \dots \text{ Diffusion ist wichtig} \\ \approx 1 & \dots \text{ beide Bewegungen sind wichtig} \\ \gg 1 & \dots \text{ deterministische Bewegung} \end{cases}$$

### 10.5 Smoluchowski-Gleichung

• Bisher: einzelne stochastische Pfade  $\underline{X}(t)$   
 jetzt: Gl. für Wahrscheinlichkeitsdichte  $P(\underline{X}, t)$

$$P(\underline{X}, t) d\{\underline{X}\} \dots \text{Wahrscheinlichkeit } \underline{X} = \text{in } [X_1, X_1 + dX_1, \dots] \text{ anzutreffen} \quad (10.44)$$

• Motivation: (i) vollständige Info. über stochast. Prozeß  
 (ii) Berechnung von Mittelwerten (Bsp.: Münzfall)

• heuristische Herleitung: allg. Herleitung s. Kap. 11

(i) Erhaltungsgröße:  $\int P(\underline{X}, t) d\{\underline{X}\} = 1$

$$\rightarrow \boxed{\frac{\partial P}{\partial t} = -\text{div } \underline{j}} \quad (10.45)$$

... Kontinuitätsgleichung  
 mit  $\underline{j}(\underline{X}, t)$  ... Wahrscheinlichkeitsstromdichte

(ii) diffusive Anteil:

$$\underline{j}^{(\text{diff})} = -D \underline{\nabla} P \quad (10.46)$$

... 1. Ficksches Gesetz

mit  $\underline{D}(\underline{x}) = k_B T \underline{M}(\underline{x})$  (10.35)

(iii) Drift-Anteil: korrekterer Anteil von  $j$  [s. Kap. 3.3]

$$j^{(\text{drift})} = P \underline{u} - \underline{M} \underline{E} \underset{(10.35)}{=} \frac{\underline{D}(\underline{x})}{k_B T} \underline{E} P \quad (10.47)$$

$$\Rightarrow \boxed{j(\underline{x}, t) = j^{(\text{drift})} + j^{(\text{diff})} = - \underline{D} \left( -\frac{1}{k_B T} \underline{E} + \underline{\nabla} \right) P(\underline{x}, t)} \quad (10.48)$$

Bem: (i) thermisches GG:

$$\left. \begin{aligned} P(\underline{x}, t) &\sim e^{-E(\underline{x})/k_B T} \\ \underline{E} &= -\underline{\nabla} E(\underline{x}) \end{aligned} \right\} \xrightarrow{(10.48)} j = 0 \quad \checkmark$$

(ii) Einstein: Herleitung von  $\underline{D} = k_B T \underline{M}$  aus therm. GG

$$j = 0 \rightarrow (-\underline{M} \underline{E} + \underline{D} \underline{\nabla}) P = 0$$

$$P \sim e^{-E/k_B T} \left( -\underline{M} \underline{E} - \frac{\underline{D}}{k_B T} \frac{\underline{\nabla} E}{-E} \right) P = 0$$

$$\rightarrow \underline{D} = k_B T \underline{M} \quad \checkmark$$

... Einstein-Sutherland Relation

(iv) (10.48) in (10.45)

$$\rightarrow \boxed{\frac{\partial P}{\partial t} = -\text{div} j(\underline{x}, t) = \underline{\nabla} \cdot \left[ \underline{D} \left( -\frac{1}{k_B T} \underline{E} + \underline{\nabla} \right) P \right]} \quad (10.49)$$

... Smoludowski-Gl.

• Beispiel 1:

$$\underline{D}(\underline{x}) = D_0 \underline{1}, \quad \underline{E} = 0 \xrightarrow{(10.49)} \frac{\partial P}{\partial t} = D_0 \underline{\nabla}^2 P \quad (10.50)$$

... Diffusionsgl.  
2. Ficksches Gesetz

• Beispiel 2: Teilchen „nahe Wand“



$$F = -f \mathbf{e}_x \dots \text{Gewichtskraft}$$

$$D = k_B T \mu_0 x$$

stationäres GG:  $j = 0 \longrightarrow \left( \frac{\partial}{\partial x} + \frac{f}{k_B T} \right) P(x) = 0$

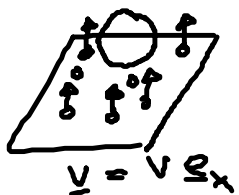
$$\longrightarrow p = c e^{-\frac{x}{\lambda_0}} \text{ mit } \lambda_0 = \frac{k_B T}{f}$$

Normierung:  $\int_0^\infty P(x) dx = 1 \longrightarrow c = \frac{1}{\lambda_0}$

$$\longrightarrow \boxed{p = \frac{1}{\lambda_0} e^{-x/\lambda_0} \text{ mit } \lambda_0 = \frac{k_B T}{f}} \quad (10.51)$$

NB: exponentielles Profil unabhängig von  $D$ ! macht Sinn!

• Beispiel 3: Teilchen über Wand +  $j_{\text{starr}} = P v \mathbf{e}_x$



stationäres GG:

$$j + P v \mathbf{e}_x = 0 \quad (10.52)$$

(i)  $D = k_B T \mu = \text{konstant}$

$$(10.52) \longrightarrow \left( \frac{\partial}{\partial x} + \frac{f}{k_B T} - \frac{v}{D} \right) P(x) = 0$$

$$\longrightarrow \boxed{p = \frac{1}{\lambda_1} e^{-\frac{x}{\lambda_1}} \text{ mit } \lambda_1 = \left( \frac{f}{k_B T} - \frac{v}{D} \right)^{-1} > 0} \quad (10.53)$$

NB: nur für  $v < \mu f$  stabiles Profil!

(ii) „nahe Wand“:  $D = k_B T \mu_0 x$

$$(10.52) \longrightarrow \left( \frac{\partial}{\partial x} + \frac{f}{k_B T} - \frac{v}{D(x)} \right) P(x) = 0$$

Separation der Variable

$$\rightarrow \boxed{p \sim e^{-\frac{x}{\lambda_0}} x^\alpha}$$

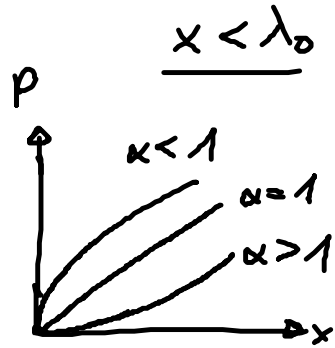
$$\text{mit } \alpha = \frac{v}{k_B T \mu_0}$$

Diskussion:

(1)  $\alpha < 1 \rightarrow v < k_B T \mu_0$

(2)  $\alpha = 1 \rightarrow v = k_B T \mu_0$

(3)  $\alpha > 1 \rightarrow v > k_B T \mu_0$



Beispiel 4: kreisförmige Kollide im gekippte Sägezahnpotential  $\rightarrow$  Folie

## 11. Allgemeine Beschreibung stochastischer Prozesse

Motivation:

(i) allgemeine Theorie der stochast. Differentialgleichung (SDG)

$T(t)$  ... stochast. Kraft [nicht unbedingt therm. Ursprung]

(ii) Ito- / Stratonovich-Interpretation

(iii) Herleitung der Faktor-Planck Gl.

### 11.1 Stochastische Differentialgleichung I

allgemeine 1D-Langevin-Gl. = SDG:

$$\dot{x} = h(x,t) + g(x,t)T(t) \quad (11.1)$$

$$\text{mit } \langle T(t) \rangle = 0, \quad \langle T(t)T(t') \rangle = \delta(t-t')$$

Bem: (i)  $T(t)$  ... Gauß des weißen Rauschen

durch  $\langle TT' \rangle$   
bestimmt

$$\langle TT' \rangle \sim \delta(t-t')$$

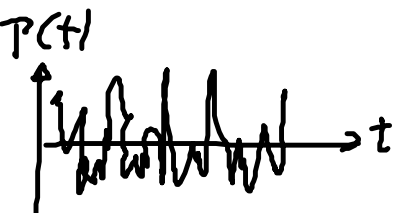
(ii)  $\sqrt{g}$  ... Stärke von  $T(t)$

(iii) nicht unbedingt them. Ursprung

(iv)  $g = g(t)$  ... additives Rauschen

$g = g(x, t)$  ... multiplikatives "

• formale Integration: 
$$x(t+\tau) = x(t) + \int_t^{t+\tau} h(x, t') dt' + \int_t^{t+\tau} g(x, t') T(t') dt' \quad (11.16)$$

Probl.:   $\dots$  hochgradig irregulär, Korrelationszeit = 0!  
 $\rightarrow \int_t^{t+\tau} \dots T(t') dt'$  nicht definierbar

• Ansatz:

(i) Behalte:  $h=0, g=1$

(11.1)  $\rightarrow$  Brownsche Bewegung:

$$\begin{aligned} \dot{x} &= T(t) \\ \text{mit } \langle x(t) \rangle &= 0, \quad x(0) = 0 \\ \langle [x(t+\tau) - x(t)]^2 \rangle &= \tau \\ \text{bzw. } \langle x(t+\tau)x(t) \rangle &= t \end{aligned}$$

 (11.2)

Beweis: (1)  $\langle [\dots]^2 \rangle$  ... s. (10.23), (10.25) mit  $g=1, T=\frac{1}{2} \rightarrow 0=\frac{1}{2}$

$$\begin{aligned} (2) \langle x(t+\tau)x(t) \rangle &= \frac{1}{2} [\langle x^2(t+\tau) \rangle + \langle x^2(t) \rangle \\ &\quad - \langle [x(t+\tau) - x(t)]^2 \rangle] \\ &\stackrel{(11.2)}{=} \frac{1}{2} [t+\tau + t - \tau] = t \quad \text{qed} \end{aligned}$$

$\rightarrow$  andere Sichtweise auf (11.16)

(ii) Führe ein: 
$$W(\tau) = x(t+\tau) - x(t) = \int_t^{t+\tau} T(t') dt'$$

Bem: (1) stochastische Variable

gleiche Momente wie  $x$  von Brownscher Bewegung

(2) glattere Funktionsals  $T(t)$ !

definition:

Wiener Prozess:

stochastische Variable  $W(t)$

mit  $W(0) = 0$

$$\langle W(t) \rangle = 0, \quad \langle W(t+\tau)W(t) \rangle = t, \quad \tau \geq 0$$

(11.4)

NB:

formel  $dW = \sqrt{T(t)} dt$  aber  $\dot{W} = T(t)$  existiert nicht!

$$\text{dann: } \dot{W} \sim \frac{W(t+\varepsilon) - W(t)}{\varepsilon} \approx \frac{\sqrt{\varepsilon}}{\varepsilon} = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} \rightarrow \infty, \quad \varepsilon \rightarrow 0$$

$\rightarrow$  Wiener-Prozess ist nicht differenzierbar

(iii) also: (11.16)  $\rightarrow$

$$x(t+\tau) = x(t) + \int_t^{t+\tau} h(x, t') dt' + \int_t^{t+\tau} g(x, t') dW(t') \quad (11.5)$$

↑  
stochastische Variable:  $x(t')$   
ist Funkt. von  $W(t')$

Integration?

## 11.2 Integrale nach Ito & Stratonovich

• Definitionen der Integration:

Berechne  $\int_0^t \dots dW(t')$  mit  $N+1$  Stützstelle  $t_i, i=0, \dots, N+1$

$$\begin{array}{c} \Delta t \\ \overline{\quad} \\ t_0=0 \quad t_1 \quad t_2 \quad \dots \quad t=t_{N+1} \end{array}$$

(i) nach Ito:

$$A_I = \int_0^t g[x(t'), t'] dW(t') \\ = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \sum_{i=0}^N g[x(t_i), t_i] \underbrace{[W(t_{i+1}) - W(t_i)]}_{\Delta W(t_i)} \quad (11.6)$$

NB:  $g$  am Anfang des  $\Delta t$ -Intervalls!

(ii) nach Stratonovich:

$$A_S = \int_0^T g[x(t'), t'] dW(t')$$
$$= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \sum_{i=0}^N g\left(\frac{x(t_i) + x(t_{i+1})}{2}, \frac{t_i + t_{i+1}}{2}\right) [W(t_{i+1}) - W(t_i)]$$

NB:  $g$  in der Mitte des  $\Delta t$ -Intervalls!

Bem: (1) gewöhnliche Riemannsche Integrale  $A_S = A_I$   
hier nicht! s.u.

(2)  $A_{I|S}$  ist stochast. Variable

Sichtweise

$$A_I, \bar{A}_I = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \sum_{i=0}^N f[x(t_i), x(t_{i+1}), W(t_i), W(t_{i+1}), t_i, t_{i+1}]$$

sind identisch, falls mittlere quadratischer

$$\text{Limes: } \langle (A_I - \bar{A}_I)^2 \rangle = 0!$$

Bsp. s.u.

ebenso für  $A_S$