Wh: <u>Pauli-Master-Gleichung</u>

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

entwickle $W(x;x'',t)$ für kleine $\Delta = x - x''$
Taylorentw. . Term mit $n=0$ hebt gerade den Verlustterm weg

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

mit

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

Zeige nun: Zusammenhang mit den früher definierten Koeffizienten

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

definiere in $\circledast$: $\Delta = x(t+\tau) - x(t)$

Wir wollen die $K^{(n)}$ jetzt über eine Wahrscheinlichkeitsdichte ausrechnen. Da der ~~M~~ Mittelwert bei scharfem $x(t)$

genommen wird, ist die relevante Wahrsch.dichte eine bedingte Verteilung!

Damit (aus $\circledast$)

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

Übergangswahrsch. von x, t nach $x+\Delta = x(t+\tau)$

Um den Limes $\tau \Rightarrow 0$ durchzuführen, entwickeln wir (in Kap. I. 4.) die Übergangswahrsch. wie folgt.

$$P(x+\Delta, t+\tau | x, t)$$

$$= \underbrace{\overbrace{\left(1 - \bar{w}(x,t)\cdot\tau\right)}^{\text{Wahrsch., dass kein Übergang stattfindet}}}\ \underbrace{\delta(x+\Delta-x)}_{\delta(\Delta)}$$

$$+ \underbrace{W(x+\Delta; x,t)}_{\text{Übergangsrate}}\cdot\tau + O(\tau^2) \quad (**)$$

Festlegung der Normierungsbedingung:

Forderung: $\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} d\Delta\, P(x+\Delta, t+\tau \,|\, x,t) \overset{!}{=} 1$

System geht irgendwo hin

setze $(**)$ ein:

Vernachlässige Term $O(\tau^2)$

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\Delta \Big[\Big(1\cdot\delta(\Delta) - \bar{w}(x,t)\cdot\tau\cdot\delta(\Delta)\Big) + W(x+\Delta; x,t)\,\tau \Big] \overset{!}{=} 1$$

$$\cancel{1} - \tau\, \bar{w}(x,t)\cdot 1 + \int d\Delta\; W(x+\Delta; x,t)\cdot \tau \overset{!}{=} \cancel{1}$$

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

Einsetzen in Ausdruck für $K^{(n)}$:

$$K^{(n)} = \frac{1}{n!} \lim_{\tau \to 0} \frac{1}{\tau} \int_{-\infty}^{\infty} d\Delta\; \Delta^n \left[\underbrace{\left(1 - \bar{w}(x,t)\cdot\tau\right)\delta(\Delta)} + W(x+\Delta; x,t)\cdot\tau \right]$$

liefert keinen Beitrag,
da $\int_{-\infty}^{\infty} d\Delta\; \Delta^n\, \delta(\Delta) = 0$!

$$\Rightarrow K^{(n)} = \frac{1}{n!} \lim_{\tau \to 0} \overbrace{\frac{1}{\tau}\cdot\tau}^{1} \int_{-\infty}^{\infty} d\Delta\; \Delta^n\, W(x+\Delta; x,t)$$

(beachte: höhere Terme $O(\tau^2)$ von
P würden durch den
Limes $\tau \to 0$ verschwinden!)

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

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

$$= \tilde{K}^{(n)}(x,t) \quad !!$$

Damit entsprechen die „neuen" Koeffizienten $\tilde{K}^{(n)}$ unseren alten Kramers-Moyal-Koeffizienten!

Zurück zur Taylor-entwickelten Pauli-Master-Gl.

$$\frac{\partial}{\partial t} p(x,t \mid x',t')$$

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

Differentialoperatoren wirken hier auf beide Funktionen, $K^{(n)}$ und P !!

Bemerkung:

multipliziert man noch mit $p(x',t')$ und integriert über x' so folgt:

$$\left(p(x,t) = \int dx' \underbrace{p(x',t';x,t)}_{\text{Verbundwahrsch.}} \right.$$
wegen

$$\left. = \int dx' \, p(x,t|x',t')\, p(x',t') \right)$$

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

totale Wahrscheinlichkeitsdichte (einzeitig)

Wir fokussieren nun auf den Fall

$$K^{(n\geq 3)} = 0$$

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

- Allgemeiner kann man die Aussage $K^{(n \geq 3)} = 0$ als Näherung für den Fall auffassen, dass die Übergangsraten nur für kleine Sprünge $\Delta = x - x''$ ungleich Null ist

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-Gleichung

Die Fokker-Planck-Gl. entspricht also einer genäherten Master-Gleichung!

Verallgemeinerung auf viele Variable

$i = 1, \dots, M$

$$\frac{\partial}{\partial t} P(\{\underline{x}(t)\}, t)$$

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

Fokker-Planck-Operator

$$L_{FP} = - \frac{\partial}{\partial x_i} K_i^{(1)}(\{x(t)\}, t) + \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} K_{ij}^{(2)}(\{\underline{x}(t)\}, t)$$

Einstein'sche Summenkonvention

$$\rightarrow \boxed{\frac{\partial}{\partial t} P(\{\underline{x}(t)\}, t) = \hat{L}_{FP} P(\{\underline{x}(t)\}, t)}$$

Völlig analog für die bed. Wahrsch.

$$\frac{\partial}{\partial t} P(\{\underline{x}(t)\}, t \,|\, \{\underline{x}'(t)\}, t')$$

$$= \hat{L}_{FP} P(\{\underline{x}(t)\}, t \,|\, \{\underline{x}'(t)\}, t')$$

Bem:

Aus dieser Schreibweise erkennt man formale Analogie zur Schrödingergleich. in der QM

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle$$

Schließlich:

Die Fokker-Planck (FP)-Gleichung kann man als Kontinuitätsgleichung schreiben

Definiere dazu den Strom

Vektor $\underline{J}$ mit Komponente J_i , $i=1,..,M$

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

$$\Rightarrow \boxed{\frac{\partial}{\partial t} P(\{\underline{x}(t)\},t) + \frac{\partial J_i}{\partial x_i} = 0}$$

$i=1,\dots,M$

$$\Leftrightarrow \frac{\partial}{\partial t} P(..) + \nabla \cdot \underline{J} = 0 \quad \text{mit } \nabla = \begin{pmatrix} \nabla_1 \\ \vdots \\ \nabla_M \end{pmatrix}$$

Kontinuitätsgleichung! Drückt die Erhaltung der Gesamtwahrsch. aus, also $\int dx\, P(\{\underline{x}(t)\},t) \overset{!}{=} 1$

mit $\int d\underline{x} = \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \ldots \int_{-\infty}^{\infty} dx_M$

Daraus folgt:

Normal-Komponente des Vektors $\underline{J}$ muß auf den Rand des Integrationsvolumens verschwinden

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

→ Anwendung

Ausgangspunkt: Langevin-Gl. für 1 Teilchen

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

1. Betrachte überdämpften Fall

($\cancel{\text{betra}}$ also $t \gg \tau = \frac{1}{\gamma}$) $\Rightarrow \underline{\dot{v}} = 0$

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

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

additives Rauschen

Wiener Prozess

relevante dyn. Variablen : $x_i(t) \rightarrow r_x(t)$, $r_y(t)$, $r_z(t)$

$n = 3$

Kramers-Moyal-Koeffizient:

$$K_i^{(1)} = h_i + \text{rauschinduzierter Drift} \underset{\text{hier}}{=} h_i$$

(Stratonovich)

$$= 0$$

$$K_{ij}^{(2)} = \frac{\Gamma}{2} D_{ik} D_{kj} = \frac{\Gamma}{2} \frac{1}{\gamma} \delta_{ik} \frac{1}{\gamma} \delta_{kj} = \frac{\Gamma}{2} \gamma^{-2} \delta_{ij}$$

Therm. Gleichgewicht

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

und $\frac{k_B T}{\gamma m} = D$ — Diffusions-Konstante

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

Das erklärt nachträglich, warum man den 2. Kramers-Moyal-Koeff. häufig "Diffusions-Koeff." nennt!

FP-Gl.

$$\frac{\partial}{\partial t} P(\underline{r},t)$$

$$= \left\{ -\frac{\partial}{\partial x_i} K_i^{(1)} + \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} K_{ij}^{(2)} \right\} P(\underline{r},t)$$

r_i: i-Komp. von $\underline{r}$

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

$K_i^{(1)} = 0$

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

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

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

Das ist die ganz gewöhnl.
Diffusionsgleichung !!

(Erinnerung:
Lösung: $P(\underline{r},t) = \frac{1}{(4\pi D t)^{3/2}} \exp\left(-\frac{(\underline{r}(t)-\underline{r}(0))^2}{4Dt}\right)$)

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

wie beim Wiener Prozess!

2. Nicht überdämpfte Bewegung

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

Die dyn. Variablen die Komponenten der Geschw.

$$x_i(t) \longrightarrow v_i(t) \quad , \quad i=1,2,3$$

(das wäre anders, falls in der Gl. noch eine ortsabhängige Kraft auftreten würde → später)

Kramers-Moyal-Koeff.:

$$K_i^{(1)} = -\gamma v_i \quad (= h_i) \quad ; \quad K_{ij}^{(2)} = \frac{\Pi}{2} \overset{\delta_{ik}}{D_{ik}} D_{kj} = \frac{\Pi}{2} \delta_{ij}$$

<u>FP-Gleichung</u>:

$$\frac{\partial}{\partial t} P(\underline{v},t)$$

$$= -\sum_i \frac{\partial}{\partial v_i} \Big(\overbrace{-\gamma v_i}^{K_i^{(1)}} P(\underline{v},t) \Big)$$

$$+ \frac{\Pi}{2} \sum_{i,j} \frac{\partial}{\partial v_i} \frac{\partial}{\partial v_j} \delta_{ij} P(\underline{v},t)$$

$$= \gamma \nabla_{\underline{v}} \left(\underline{v}\, P(\underline{v},t) \right) + \frac{\Pi}{2} \nabla_{\underline{v}}^2 P(\underline{v},t)$$

Spezialfall:

therm. <u>Gleichgewicht</u>

Strom $\underline{J} = 0$

$$\frac{\partial}{\partial t} P(\underline{v},t) + \sum_i \frac{\partial J_i}{\partial v_i} = 0$$

mit $J_i = -\gamma v_i P(\underline{v},t) - \frac{\Gamma}{2} \frac{\partial}{\partial v_i} P(\underline{v},t)$

folgt aus der allg. Formel für den Wahrsch.-Strom

setze $J_i = 0$

$$\Leftrightarrow \frac{\partial}{\partial v_i} P(\underline{v},t) = -\frac{2\gamma}{\Gamma} v_i P(\underline{v},t)$$

benutze $\Gamma = \frac{2\gamma k_B T}{m}$ (FDT)

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial v_i} P(\underline{v},t) = -\frac{m}{k_B T} v_i P(\underline{v},t)$$

Ansatz: $P(\underline{v},t) = A e^{-\frac{m}{2k_B T} \underline{v}^2}$

Konstante A wird festgelegt durch

Normieren $\int d\underline{v}\, P(\underline{v},t) \stackrel{!}{=} 1$

$$\Rightarrow \boxed{P(\underline{v},t) = \sqrt{\frac{m}{2\pi k_B T}}^{\,3} e^{-\frac{m}{2k_BT}\underline{v}^2}}$$

Maxwell'sche Geschwindigkeitsverteilung!