

(ii) Deutung: Arbeitsleistung von $\underline{\Gamma}(t)$ wird in Wärme dissipiert
 \leftrightarrow Gleichverteilungssatz für kinetische Energie gilt! [S.u.]

(iii) "räumliche" Korrelationen der $\underline{\Gamma}_i$ in $\underline{\Gamma}$ über HW!

(iv) Annahme: (10.21) auch gültig für (10.15)

Driftbewegung ändert lokaler therm. GlW der Flüssigkeit nicht!

(v) $\underline{M} = \underline{M}_0 = \text{konstant} \dots$ additives Rauschen: $\langle \underline{\Gamma} \rangle = 0$ $\underline{M} = \text{konst.}$

$$\langle (10.15) \rangle \rightarrow \langle \underline{u} \rangle = \langle \underline{M} (\underline{E} + \underline{\Gamma}) \rangle = \langle \underline{M} \underline{E} \rangle = \underline{M} \underline{E}$$

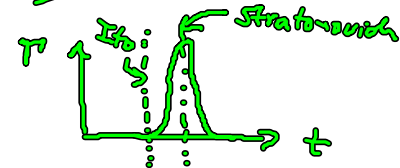
... Driftbewegung

$\underline{M} = \underline{M}(\underline{x}) \dots$ multiplikatives Rauschen:

$$\langle (10.15) \rangle \rightarrow \langle \underline{u} \rangle = \underline{M} \underline{E} + \underbrace{\langle \underline{M}(\underline{x}) \underline{\Gamma} \rangle}_{\neq 0} \quad (10.22)$$

räumlich-zeitlicher Drift

Problem: Welches $\underline{M}(\underline{x})$ während $\underline{\Gamma}(t)$ wirkt?



(i) Stratonovich-Interpretation: in der Mitte von $\underline{\Gamma}$

\rightarrow räumlich. Drift, physik. richtig, wenn FD-Theorem gelten soll!

(ii) Ito-Interpretation: zu Beginn von $\underline{\Gamma} \rightarrow$ kein Räumlich. Drift.

\rightarrow s. Kap. 11

-Veranschaulichung: ein Teilchen, 1D mit Masse m :

$$m\ddot{u} + \gamma\dot{u} = \Gamma(t) \quad (10.23)$$

(i) direkte Herleitung von FD-Theorem (10.21)

Lsg. von (10.23): $u(t) = \underbrace{u(0) e^{-t/\tau}}_{\text{Lsg. der hom. Gl.}} + \underbrace{\frac{1}{m} \int_0^t e^{-(t-t')/\tau} \Gamma(t') dt'}_{\text{part. Lösung aus Variation d. Konst.}}$ mit $\tau = \frac{m}{\gamma}$

(s. Übung)

Ziel: Gleichverteilungssatz anwenden!

$$\langle |u(t)|^2 \rangle = \underbrace{u^2(0) e^{-2t/\tau}}_{\langle \Gamma \rangle = 0} + \frac{1}{m^2} \int_0^t \int_0^t dt' dt'' e^{-(2t-t'-t'')/\tau} \underbrace{\langle \Gamma(t') \Gamma(t'') \rangle}_{2q \delta(t'-t'')}$$

$$\begin{aligned}
 \xrightarrow{t \gg \tau} \langle |u(t)|^2 \rangle &= \frac{2q}{m^2} \int_0^t e^{-2(t-t')/\tau} dt' \\
 &= \frac{q}{m^2} \tau e^{-2(t-t')/\tau} \Big|_0^t = \frac{q}{m^2} \tau (1 - e^{-2t/\tau}) \\
 &\xrightarrow{t \gg \tau} \frac{q}{m^2} \tau = \frac{q}{m\gamma} \stackrel{!}{=} \frac{k_B T}{m} \text{ Gleichverteilungssatz!} \\
 \Rightarrow \boxed{q = k_B T \gamma} & \quad (10.24) \quad \text{Gleiches Vorfaktor wie in (10.21)!}
 \end{aligned}$$

(ii) diffusive Bewegung $\boxed{m \rightarrow 0} \leftrightarrow$ Inertialterm vernachlässigen

$$\langle u(t_1) u(t_2) \rangle \stackrel{(10.23)}{=} \frac{q}{\gamma^2} \langle \Gamma(t_1) \Gamma(t_2) \rangle \stackrel{(10.24)}{=} \frac{2k_B T}{\gamma} \delta(t_1 - t_2)$$

mittels Verschiebungsfunktion (für $x(0) = 0$):

$$\begin{aligned}
 \langle x^2(t) \rangle &= \left\langle \int_0^t u(t_1) dt_1 \cdot \int_0^t u(t_2) dt_2 \right\rangle = \int_0^t \int_0^t \underbrace{\langle u(t_1) u(t_2) \rangle}_{\frac{2k_B T}{\gamma} \delta(t_1 - t_2)} dt_1 dt_2 \\
 &= \frac{2k_B T}{\gamma} t \rightarrow \boxed{\langle x^2(t) \rangle = 2 D_0 t \text{ mit } D_0 = \frac{k_B T}{\gamma}} \quad (10.25) \\
 &\quad \dots \text{diffusive Bewegung} \quad \underbrace{\hspace{10em}}_{\text{Einstein-Relation!}}
 \end{aligned}$$

10.3 Kramers-Moyal-Entwicklungskoeffizienten

- Motivation:
- (1) Signaturen der stochastischen Bewegung
 - (2) Zugang zu Brownscher Dynamik-Simulation \rightarrow s. Kap 10.4!
 - (3) —" — Fokker-Planck-Gleichung für Wahrscheinlichkeitsverteilung $P(x, t) \rightarrow$ s. Kap 11!

Definition: mit $\underline{x} = x(t)$

und $[]^n = [\dots] \otimes \dots \otimes [\dots]$ (n -faches Tensorprodukt)

$$\boxed{D^{(n)}(\underline{x}) = \frac{1}{n!} \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{1}{\tau} \langle [\underline{x}(t+\tau) - \underline{x}(t)]^n \rangle} \quad (10.26)$$

$\underbrace{\hspace{10em}}_{\text{Kurzzeitverhalten}}$
 $\underbrace{\hspace{10em}}_{\text{Momente } n\text{-ter Ordnung}}$

Bem.: (1) $\underline{D}^{(1)}(\underline{x})$... Vektor \rightarrow Driftbewegung

(2) $\underline{D}^{(2)}(\underline{x})$... Tensor 2. Stufe \rightarrow diffusive Bewegung

(3) hier: $\underline{D}^{(n)}(\underline{x}) = 0$ für $n \geq 3$ [s.u.]

(Erinnere: Driftbewegung / ballistische Bewegung $\langle \Delta x \rangle \sim t$ $\langle \Delta x^2 \rangle \sim t^2$
Diffusive Bewegung $\langle \Delta x \rangle \sim \sqrt{t}$ $\langle \Delta x^2 \rangle \sim t$)

(4) falls $\underline{D}^{(n)}(\underline{x}) \neq 0$ für $n \geq 3 \rightarrow$ nichtlineare Dynamik!

Bsp.: $\langle [X(t+\tau) - X(t)]^2 \rangle \sim t^\alpha$

$\alpha > 1$... Superdiffusion $\rightarrow D^{(2)}(\underline{x}) = 0$

$\alpha < 1$... Subdiffusion $\rightarrow D^{(2)}(\underline{x}) = \infty$!

• Berechnung von $\underline{D}^{(1)}$ und $\underline{D}^{(2)}$ für $\underline{u} = \underline{M} [E + \underline{\Gamma}(t)]$ (10.15)

(i) Betrachte System-Trajektorie, start bei $\underline{x} = \underline{x}(t)$:

$$\underline{x}(t+\tau) - \underline{x}(t) = \int_t^{t+\tau} \underline{u}(\underline{x}(t')) dt' = \int_t^{t+\tau} \underline{M}(\underline{x}(t')) [E + \underline{\Gamma}(t')] dt' \quad (10.27)$$

(10.15)

generelles Problem: $\int_t^{t+\tau} \underline{M}(\underline{x}(t')) \underline{\Gamma}(t') dt' \xrightarrow{?} \underline{M}(\underline{x}(t)) \underline{\Gamma}(t) ?$
hochgradig singular!
nicht praktikabel für num. Integration!

Ausweg: Arbeite mit Wiener-Inkrement $w(t) = \int_t^{t+\tau} \underline{\Gamma}(t') dt'$ glattere Fkt. als $\underline{\Gamma}$!

\rightarrow Stratonovich-Integral

mit Ito, Stratonovich-Interpretation [s. Kap. 11]