

## 10.2 Langevin Gl.

• Brown'sche Dynamik:

$$\underline{U} = \underline{M} [\underline{F} + \underline{T}(t)] \quad (10.15)$$

$$\langle \underline{T}(t) \otimes \underline{T}(t') \rangle = 2q \delta(t-t') \quad (10.17)$$

$$\langle \underline{T}(t) \rangle = 0$$

• Stärke, Varianz  $q$ ?

$$(10.15) \xrightarrow{\underline{F}=0} \frac{d}{dt} \underline{X} = \underline{U}(t) = \underline{M} \underline{T}(t) \quad (10.18)$$

$$\underline{X} = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_N \end{pmatrix}$$

$$\xrightarrow{\text{FT}} \text{bzw. } \underline{X}(t) = \underline{X}(\omega) e^{-i\omega t} \quad -i\omega \underline{X} = \underline{U}(\omega) = \underline{M} \underline{T}(\omega)$$

$$\uparrow$$

$$|\underline{X}(\omega)| \ll a \text{ (Teilchenradius)}$$

$$\rightarrow \underline{M}(\underline{X}) \approx \text{konstant!}$$

$$\rightarrow \underline{T}(\omega) = \underbrace{-i\omega \underline{M}^{-1}}_{\underline{X}^{-1}(\omega)} \underline{X}(\omega) \quad (10.20)$$

$$\underline{X}^{-1}(\omega) \quad [\text{vgl. (10.10)}]$$

Kraft-Korrelationen:  $\underline{X}^{-1}(\omega)$  in (10.14) &  $\underline{M}$  reell

$$\rightarrow \langle \underline{T}(\omega) \otimes \underline{T}^*(\omega) \rangle = -2k_B T \frac{\text{Im} \underline{X}^{-1}(\omega)}{\omega} = 2k_B T \underline{M}^{-1}$$

$$\xrightarrow{\text{FT}} \text{Wiener-Khintchine-Theorem} \quad \langle \underline{T}(t) \otimes \underline{T}(t') \rangle = 2k_B T \underline{M}^{-1} \int e^{-i\omega(t-t')} \frac{d\omega}{2\pi}$$

Natürl.  
keine  
 $\omega$  Abhängigkeit

$$\langle \underline{I}(t) \otimes \underline{I}(t') \rangle = 2k_B T \underline{M}^{-1} \delta(t-t') \quad (10.21)$$

... FD - Theorem

- Bem:
- (i)  $\underline{M}^{-1}(\underline{X}(t)) = \underline{Z}(\underline{X}(t)) \dots$  Reibungsmatrix
  - (ii) Deutung: Arbeitsleistung von  $\underline{I}(t)$  wird in Wärme dissipiert  
 $\leftrightarrow$  Gleichverteilungssatz für kinet. Energie gilt! [s.u.]
  - (iii) „räumliche“ Korrelationen der  $\underline{I}_i$  in  $\underline{I}$  aber HW!
  - (iv) Annahme: (10.21) auch gültig für (10.15)  
 Driftbewegung ändert lokales therm. GG der Flüssigkeit nicht!
  - (v)  $\underline{M} = \underline{M}_0 = \text{konstant} \dots$  additives Rauschen  
 $\langle (10.15) \rangle \rightarrow \langle \underline{U} \rangle = \underline{M} \underline{F} \quad \langle \underline{I} \rangle = 0$  ... Driftbewegung

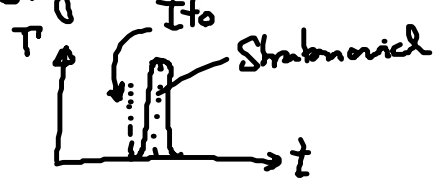
$\underline{M} = \underline{M}(\underline{X}) \dots$  multiplikatives Rauschen

$$\langle (10.15) \rangle \rightarrow \langle \underline{U} \rangle = \underline{M} \underline{F} + \underbrace{\langle \underline{M}(\underline{X}) \underline{I} \rangle}_{\neq 0} \quad (10.22)$$

... rauschinduzierte Drift

Problem:

Welches  $\underline{M}(\underline{X})$  während  $T(t)$  wirkt?



Stratonovich - Repräsentation: in der Mitte von  $T \rightarrow$  rauschind. Drift

physikal. wichtig, wenn FD - Theorem gelten soll

Ito Repräsentation: zu Beginn von  $\underline{I} \rightarrow$  kein rauschind. Drift

S. Kap. 11

• Veranschaulichung: ein Teilchen, 1D, mit Masse:

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

(i) direkte Herleitung von FD - Theorem (10.21):  $\tau = \frac{m}{\gamma}$

Lsg. von (10.23):

$$u(t) = \underbrace{u(0) e^{-t/\tau}}_{\substack{\text{Lsg. homog.} \\ \text{Dgl.}}} + \underbrace{\frac{1}{m} \int_0^t e^{-(t-t')/\tau} T(t') dt'}_{\substack{\text{partikuläre Lsg. aus} \\ \text{Variation der Konstante}}}$$

Ziel: Gleichverteilungssatz anwenden!

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

$$\xrightarrow[\text{Impulsrel. ins Gb.}]{t \gg \tau} \langle |u(t)|^2 \rangle = \frac{2q}{m^2} \int_0^t e^{-2(t-t')/\tau} dt'$$

$$= \frac{q}{m^2} \tau e^{-2(t-t')/\tau} \Big|_0^t \xrightarrow[t = \frac{m}{\gamma}]{t \gg \tau} \frac{q}{m^2} \frac{1}{\gamma} \frac{k_B T}{m}$$

Gleichverteilungssatz

$$\rightarrow \boxed{q = k_B T \gamma} \quad (10.24)$$

...  $2q =$  Vorfaktor wie in (10.21)

(ii) diffusive Bewegung:  $m \rightarrow 0$

$$\langle u(t_1) u(t_2) \rangle \stackrel{(10.23)}{=} \frac{1}{\gamma^2} \langle T(t_1) T(t_2) \rangle \stackrel{(10.24)}{=} \frac{2k_B T}{\gamma} \delta(t_1 - t_2)$$

mittleres Verschiebungsquadrat:  $x(0) = 0$

$$\langle x^2(t) \rangle = \left\langle \left( \int_0^t u(t_1) dt_1 \right) \left( \int_0^t u(t_2) dt_2 \right) \right\rangle$$

$$= \iint_0^t \langle u(t_1) u(t_2) \rangle dt_1 dt_2$$

$$\rightarrow \boxed{\langle x^2(t) \rangle = 2 D_0 t, \quad D_0 = \frac{k_B T}{\gamma}} \quad (10.25)$$

... diffusive Bewegung Einstein-Relation

### 10.3 Kramers-Moyal-Entwicklungs Koeffizienten

• Motivation:

(1) Signaturen der stochastischen Bewegung

(2) Zugang zu Brownscher Dynamik Simulation [s. Kap. 10.4]

(3) " " Fokker-Planck-Gl. für Wahrscheinlichkeitsverteilung  $P(\underline{X}, t)$

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

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

$$D^{(n)}(\underline{X}) = \underbrace{\frac{1}{n!} \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{1}{\tau}}_{\text{Kurzzeitverhalten}} \underbrace{\langle [\underline{X}(t+\tau) - \underline{X}]^n \rangle}_{\text{Moment } n\text{-ter Ordnung}} \quad (10.26)$$

Bem.: (1)  $D^{(1)}(\underline{X})$  ... Vektor  $\rightarrow$  Driftbewegung [ $\langle [\dots] \rangle \sim \tau$ ]

(2)  $D^{(2)}(\underline{X})$  ... Tensor 2. Stufe  $\rightarrow$  diffusive Bewegung  
 $[\langle [\ ] \circ [\ ] \rangle \sim \tau!]$

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

(4) falls  $D^{(n)}(\underline{X}) \neq 0, n \geq 3 \rightarrow$  nichttriviale Dynamik!

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

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

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

• Beding von  $D^{(1)}$  und  $D^{(2)}$  für  $\underline{Y} = \underline{Y} [\underline{F} + \underline{I}(t)]$  (10.15)

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

$$\underline{X}(t+\tau) - \underline{X} = \int_t^{t+\tau} \underline{Y}(\underline{X}(t')) dt'$$

$$\stackrel{(10.15)}{=} \int_t^{t+\tau} \underline{Y}(\underline{X}(t')) [\underline{F}(\underline{X}(t')) + \underline{I}(t')] dt' \quad (10.27)$$

generelles Problem

$$\int_t^{t+\tau} \underline{M}(X(t')) \underline{T}(t') dt' \not\rightarrow \underline{M}(X(?)) \underline{T}(?) \tau \quad \dots \text{nicht praktikabel für numerische Integration}$$

hochgradig  
singular

Ansatz: Arbeitet mit Wiener - Inkrement  $W(\tau) = \int_t^{t+\tau} \underline{T}(t') dt'$   
 $\rightarrow$  Stieltjes - Integral  
 mit Ito, Stratonovich - Interpretation [s. Kap. 11]

(ii) Ziel: in (10.27)  $\underline{M}, \underline{F}, \dots$  bei  $\underline{X} = \underline{X}(t)$

$\rightarrow$  Taylor - Entwicklung:

$$\left. \begin{aligned} \text{mit } \underline{M}(X) &= \underline{M}, \quad \underline{\nabla} \otimes \underline{M}(X) = \underline{\nabla} \underline{M} \\ \underline{F}(X) &= \underline{F}, \quad \underline{\nabla} \otimes \underline{F}(X) = \underline{\nabla} \underline{F} \\ \underline{X}(t') - X &= \Delta X' \end{aligned} \right\} (10.28)$$

$$\left. \begin{aligned} \underline{M}(X(t')) &= \underline{M} + \Delta X' \cdot \underline{\nabla} \underline{M} + \dots \\ \underline{F}(X(t')) &= \underline{F} + \Delta X' \cdot \underline{\nabla} \underline{F} + \dots \end{aligned} \right\} (10.29)$$

(10.29) in (10.27)  $\rightarrow$  iterative Berechnung von (10.27)

$$\begin{aligned} \underline{X}(t+\tau) - X &= \int_t^{t+\tau} [\underline{M} \underline{F} + \Delta X' \cdot \underline{\nabla} \underline{M} \underline{F} + \underline{M} (\Delta X' \cdot \underline{\nabla}) \underline{F} + \dots] dt' \\ &+ \int_t^{t+\tau} [\underline{M} \underline{T}(t') + \Delta X' \cdot \underline{\nabla} \underline{M} \underline{T}(t') + \dots] dt' \end{aligned} \quad (10.30)$$

mit  $\Delta X' = X(t') - X = (10.30)$  mit  $t+\tau \rightarrow t'$

$$\begin{aligned} \underline{D}^{(1)}(X) &= \int_t^{t'} [\underline{M} \underline{F} + \Delta X'' \cdot \underline{\nabla} \underline{M} \underline{F} + \dots] dt' \\ \underline{D}^{(2)}(X) &= \int_t^{t'} [\underline{M} \underline{T}(t'') + \Delta X'' \cdot \underline{\nabla} \underline{M} \underline{T}(t'') + \dots] dt' \end{aligned}$$

mit  $\Delta X'' = \dots$

$\rightarrow \underline{X}(t+\tau) - X =$  Summe von Vielfachintegralen  $\iiint \dots dt' dt'' \dots$

(iii) Beiträge zu  $D^{(1)}(X)$  und  $D^{(2)}(X)$ ? nur Terme  $\sim \tau$ !

(1)  $\int_t^{t+\tau} \underline{M} \underline{E} dt' \sim \tau \dots$  Einfachintegrale

(2)  $\iint_t^{t+\tau} \underbrace{\langle T(t') \otimes T(t'') \rangle}_{S(t-t'')} \dots dt' dt'' \sim \tau \dots$ , Zweifachintegrale

sonstige Mehrfachintegrale  $\rightarrow O(\tau^2)$ !

(iv) Berechnung:

(1)  $D^{(1)}(X)$ ?  $\rightarrow \langle X(t+\tau) - X \rangle$  (bis  $O(\tau)$ )

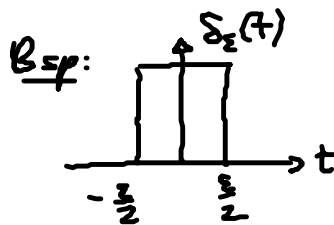
$\rightarrow \langle X(t+\tau) - X \rangle = \tau \underline{M} \underline{E} + \int_t^{t+\tau} \int_t^{t'} \underbrace{\langle \underline{M} T(t'') \cdot \nabla \underline{M} T(t') \rangle}_{S(t'-t'')} dt'' dt'$

$= \langle M_{kl} T_l(t'') \nabla_k M_{ij} T_j(t') \rangle$

(8.10.21)  $= \underbrace{M_{kl} \nabla_k M_{ij}}_{(\text{div } \underline{M})_i} \underbrace{2\epsilon_{kl} T M_{lj}^{-1}}_{S_{kj}} S(t'-t'')$

$\langle X(t+\tau) - X \rangle = \tau \underline{M} \underline{E} + 2\epsilon_{kl} T \underbrace{\nabla_j M_{ij}}_{(\text{div } \underline{M})_i} \underbrace{\int_t^{t+\tau} \int_t^{t'} S(t'-t'') dt'' dt'}_{\text{Physiker} := \frac{1}{2} \tau}$

denn:  $S(t) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \delta_\epsilon(t)$  mit  $\delta_\epsilon(t)$  symmetrisch um  $t=0$



also  $\int_t^{t+\tau} \int_t^{t'} S(t'-t'') dt'' dt' = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_t^{t+\tau} \int_t^{t'} \delta_\epsilon(t'-t'') dt'' dt' = \frac{1}{2} \tau$  ged

$$\rightarrow \langle X(t+\tau) - X \rangle = \tau (\underline{\mu} \underline{F} + k_B T \operatorname{div} \underline{\mu}) \quad (10.32)$$

(10.26)  
 $\rightarrow$

$$\boxed{D^{(1)}(X) = \underline{\mu} \underline{F} + k_B T \operatorname{div} \underline{\mu}} \quad (10.33)$$

randschulizierte  
 Driftbewegung  $\sim k_B T!$