# 10.2 Langevin-Gleichung

$$\boxed{\underline{U} = \underline{\underline{M}}\left[\underline{F} + \underline{\Gamma}(t)\right]} \qquad (10.15)$$

mit $$\boxed{\langle \underline{\Gamma}(t) \otimes \underline{\Gamma}(t') \rangle = 2 k_B T \underline{\underline{M}}^{-1} \delta(t-t')} \qquad (10.21)$$

... FD-Theorem

Bem.: (i) $\underline{\underline{M}}^{-1}(\underline{X}(t)) = \underline{\underline{Z}}(\underline{X}(t))$ ... Reibungsmatrix

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

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

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

Driftbewegung ändert lokales therm. GG der Flüssigkeit nicht!

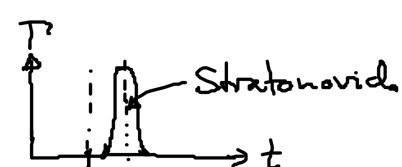
(v) $\underline{\underline{M}} = \underline{\underline{M}}_0 =$ konstant ... additives Rauschen

$$\langle (10.15) \rangle \longrightarrow \langle \underline{U} \rangle \underset{\langle \Gamma \rangle = 0}{=} \underline{\underline{M}}\,\underline{F} \quad \text{... Driftbewegung}$$

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

$$\langle (10.15) \rangle \longrightarrow \langle \underline{U} \rangle = \underline{\underline{M}}\,\underline{F} + \underbrace{\langle \underline{\underline{M}}(\underline{X})\, \underline{\Gamma} \rangle}_{\neq 0} \qquad (10.22)$$

... rauschinduzierte Drift!!




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

Stratonovich-Interpretation: in der Mitte von $\Gamma$ $\longrightarrow$ rauschind. Drift

physikalisch richtig, wenn FD-Theorem gelten soll

Ito-Interpretation: zu Beginn von $\underline{\Gamma}$ $\longrightarrow$ kein rauschind. Drift

s. Kap. 11

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

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

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

Lsg. von (10.23):

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

Ziel: Gleichverteilungssatz anwenden!

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

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

$$= \frac{q}{m^2}\,\tau\, e^{-2(t-t')/\tau}\Big|_0^t \underset{e^{-2t/\tau} \ll 1}{\overset{t \gg \tau}{=}} \frac{q}{m\gamma} \overset{!}{\underset{\text{Gleichverteilungssatz}}{=}} \frac{k_B T}{m}$$

$$\tau = \frac{m}{\gamma}$$

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

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

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

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

mittleres Verschiebungsquadrat: $x(0) = 0$

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

$$= \int_0^t\int_0^t \langle u(t_1)\, u(t_2)\rangle\, dt_1\, dt_2$$

$$\longrightarrow \boxed{\underbrace{\langle x^2(t)\rangle = 2D_0\, t}_{\text{... diffusive Bewegung}}, \quad \underbrace{D_0 = \frac{k_B T}{\gamma}}_{\text{Einstein-Relation}}} \quad (10.25)$$

## 10.3 Kramers-Moyal-Entwicklungskoeffizienten

- Motivation:
  (1) Signaturen der stochastischen Bewegung
  (2) Zugang zu Brownscher-Dynamik Simulation [s. Kap. 10.4]
  (3) " " Fokker-Planck-Gl. für Wahrscheinlichkeitsverteilung $P(\underline{X},t)$ [s. Kap. 11]

- Definition: mit $\underline{X} = \underline{X}(t)$
  und $[\ \ ]^n = [\ ] \otimes \ldots \otimes [\ ]$ (n-faches Tensorprodukt)

$$\boxed{D^{(n)}(\underline{X}) = \frac{1}{n!} \underbrace{\lim_{\tau \to 0} \frac{1}{\tau}}_{\text{Kurzzeit-verhalten}} \underbrace{< [\underline{X}(t+\tau) - \underline{X}]^n >}_{\text{„Momente n-ter Ordnung"}}} \quad (10.26)$$

<u>Bem.</u> (1) $\underline{D}^{(1)}(\underline{X})$ ... Vektor $\longrightarrow$ Driftbewegung $[<[\ldots]> \sim \tau]$

(2) $\underline{\underline{D}}^{(2)}(\underline{X})$ ... Tensor 2. Stufe $\longrightarrow$ diffusive Bewegung $[<[\ ]\otimes[\ ]> \sim \tau\,!]$

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

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

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

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

$\alpha < 1$ ... Subdiffusion $\longrightarrow D^{(2)}(\underline{X}) = \text{„}\infty\text{"}\,!$

- Berechnung von $\underline{D}^{(1)}$ und $\underline{\underline{D}}^{(2)}$ für $\underline{U} = \underline{\underline{M}}\,[\underline{F} + \underline{\Gamma}(t)]$ (10.15)

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

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

$$\overset{(10.15)}{=} \int_t^{t+\tau} \underline{\underline{M}}(\underline{X}(t'))\,[\underline{F}(\underline{X}(t')) + \underline{\Gamma}(t')]\,dt' \quad (10.27)$$

generelles Problem

$$\int_t^{t+\tau} \underline{\underline{M}}(\underline{X}(t'))\,\underline{\Gamma}(t')\,dt' \;\not\longrightarrow\; \underline{\underline{M}}(\underline{X}(?))\,\underbrace{\underline{\Gamma}(?)}_{\text{hochgradig singulär}}\,\tau$$

... nicht praktikabel für numerische Integration

Ausweg: Arbeite mit Wiener-Inkrement $W(\tau) = \int_t^{t+\tau} \Gamma(t')\,dt'$

$\longrightarrow$ Stieltjes-Integral
mit Ito, Stratonovich-Interpretation [s. Kap. 11]

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

$\longrightarrow$ Taylor-Entwicklung:

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

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

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

$$\left.\begin{aligned} \underline{X}(t+\tau) - \underline{X} &= \int_t^{t+\tau} [\underbrace{\underline{\underline{M}}\,\underline{F}} + \Delta\underline{X}' \cdot \underline{\nabla}\,\underline{\underline{M}}\,\underline{F} + \underline{\underline{M}}(\Delta\underline{X}' \cdot \underline{\nabla})\underline{F} + \ldots ]\,dt' \qquad (10.30) \\ &+ \int_t^{t+\tau} [\underbrace{\underline{\underline{M}}\,\underline{\Gamma}(t')} + \underbrace{\Delta\underline{X}' \cdot \underline{\nabla}\,\underline{\underline{M}}\,\underline{\Gamma}(t')} + \ldots ]\,dt' \\ \text{mit } \Delta\underline{X}' &= \underline{X}(t') - \underline{X} = (10.30) \text{ mit } t+\tau \to t' \\ D^{(1)}(\underline{X}) \qquad &= \int_t^{t'} [\underline{\underline{M}}\,\underline{F} + \Delta\underline{X}'' \cdot \underline{\nabla}\,\underline{\underline{M}}\,\underline{F} + \ldots ]\,dt'' \\ D^{(2)}(\underline{X}) \qquad &+ \int_t^{t'} [\underbrace{\underline{\underline{M}}\,\underline{\Gamma}(t'')} + \Delta\underline{X}'' \cdot \underline{\nabla}\,\underline{\underline{M}}\,\underline{\Gamma}(t'') + \ldots ]\,dt'' \\ \text{mit } \Delta\underline{X}'' &= \ldots\ldots \end{aligned}\right\} \quad (10.31)$$

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

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

(1) $\int_t^{t+\tau} \underline{\underline{M}}\,\underline{F}\,dt' \sim \tau$ ... Einfachintegral

(2) $\iint_t^{t+\tau} \underbrace{\langle \underline{\Gamma}(t') \otimes \underline{\Gamma}(t'') \rangle}_{\delta(t'-t'')} \ldots dt'dt'' \sim \tau$ ... "Zweifachintegral"

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

(iv) Berechnung:

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

$$\longrightarrow \langle \underline{X}(t+\tau) - \underline{X} \rangle = \tau\,\underline{\underline{M}}\,\underline{F} + \int_t^{t+\tau}\int_t^{t'} \underbrace{\langle \underline{\underline{M}}\,\underline{\Gamma}(t'') \cdot \underline{\nabla}\,\underline{\underline{M}}\,\underline{\Gamma}(t') \rangle}_{= \langle M_{kl} \Gamma_l(t'') \nabla_k M_{ij} \Gamma_j(t') \rangle} dt''dt'$$

$$(10.21) = \underset{\sim}{M_{kl}} \nabla_k M_{ij} \, 2 k_B T \underbrace{\underset{\sim}{M^{-1}_{ij}}}_{\to \delta_{kj}} \delta(t'-t'')$$

$$\langle \underline{X}(t+\tau) - \underline{X} \rangle = \tau \underline{\underline{M}} \, \underline{F} + \overset{2k_B T}{} \underbrace{\nabla_j M_{ij}}_{(\mathrm{div}\, \underline{\underline{M}})_i} \underbrace{\int_t^{t+\tau} \int_t^{t'} \delta(t'-t'') \, dt'' \, dt'}_{\text{Physiker: } = \frac{1}{2}\tau}$$