Anknüpfung an die letzte VL:

Argumentationsstruktur:

Master-gl: Evolutionsgleichung einer Wahrscheinlichkeitsdichte $P(x,t)$ auf Basis von Übergangswahrscheinlichkeiten W von x nach x' und umgekehrt

<u>Annahme</u>: W sei nur signifikant von 0 verschieden, wenn x nahe x'

o Kramers-Moyal Entwicklung für kleine Schrittweiten

$\Delta = x - x'$

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

mit $K^{(n)}(x,t)$: Kramers-Moyal Koeffizient n-ter Ordnung

Nehme an, dass die Übergangswahrscheinlichkeiten w so schnell mit Δ abfallen, dass

$$K^{(n)} \approx 0 \quad , n \geq 3$$

Sodass wir die Reihe nach dem <u>nach</u> dem zweiten Koeff. abbrechen können.
(diese sind exakt gleich 0 für Gauss-verteiltes Rauschen)

Man erhält die Fokker-Planck-Gl.

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t} P(x,t) = \left[-\frac{\partial}{\partial x} K^{(1)}(x,t) + \frac{\partial^2}{\partial x^2} K^{(2)}(x,t) \right] P(x,t)}$$

(für eine dynamische Variable)

analog für mehrere dyn. Variablen
$x_i,\ i = 1, \dots n$

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x,t) = \underbrace{\Big[- \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial}{\partial x_i} K^{(1)}(\{\underline{x}\}, t) + \sum_{i,j} \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} K^{(2)}(\{\underline{x}\}, t) \Big]}_{=: \hat{L}_{FP}} P(\{x\}, t)$$

Man kann obiges in Form einer Kontinuitätsgleichung schreiben, in dem man einen Strom J

$$J = K^{(1)} P(x,t) - \sum_j \frac{\partial}{\partial x_j} K^{(2)}_{ij} P$$

einführt und obiges darstellt als

$$\frac{\partial}{\partial t} P + \underbrace{\sum_i \frac{\partial}{\partial x_i} J_i}_{= \nabla \cdot \underline{J}} = 0$$

Dies drückt die Erhaltung der Gesamtwahrscheinlichkeit

$$\int dx\, P(\{\underline{x}\}, t) = 1 \quad \forall t$$

Von der Langevin-Gl zur Fokker Planck-Gl.

Langevin:

nicht-überdämpft:

$$\dot{\underline{r}} = \underline{v}$$

$$\dot{\underline{v}} = -\gamma \underline{v} + \frac{1}{m} \underline{f}^{(t)}$$

überdämpften Fall:

$$0 = -\gamma v + \frac{1}{m} \underline{f}^{(t)}$$

$$\Leftrightarrow \gamma \dot{r} = \frac{1}{m} f(t)$$

Kommentar zu möglichen verschiedenen aber äquivalenten Notationen

Manchmal

$$\dot{v} = -\underbrace{\frac{\gamma}{m}} v + \frac{1}{m} \underline{f} \qquad (\text{Newton})$$

Manchmal wird auch dies mit γ bezeichnet.

(nennen wir es hier mal $\tilde{\gamma}$)

$$\Rightarrow \quad \dot{v} = -\tilde{\gamma}\, v + \frac{1}{m} f$$

Rauschen der Kraft

Manchmal schreibt man das $\frac{1}{m}$ in das f rein

$$\Rightarrow \quad \dot{v} = -\tilde{\gamma}\, v + \tilde{f}$$

Je nach Verwendung von f oder $\hat{f}$ ändert sich die Bedeutung von Γ bzw $\tilde{\Gamma}$ um einen Faktor $\frac{1}{m^2}$

__verallgemeinerte Langevin-Gl:__

$$\dot{x}_i(t) = h_i(\{\underline{x}(t)\}, t) + \sum^{n} O_{i,j}(\{\underline{x}\}, t)\, f_j(t)$$

deterministisch (Drift-Term) ; prop. Rauschen (Diffusionsterm)

und $\underline{x}(t)$: Vektor, der alle dynamischen Variablen enthält.

<u>gls</u>

Bewegungsgleichung für die zugehörige Wahrscheinlichkeitsdichte $P(\{\underline{x}\}, t)$

Man kann zeigen, dass sich die Kramers-Moyal-Koeffizienten auch darstellen kann als:

$$K^{(n)}_{i_1, i_2, \ldots i_n}(\{\underline{x}\}, t) = \frac{1}{n!} \lim_{\tau \to 0} \left\langle (x_{i_1}(t+\tau) - x_{i_1}(t)) \cdot (x_{i_2}(t+\tau) - x_{i_2}(t)) \cdot \; \vdots \; (x_{i_n}(t+\tau) - x_{i_n}(t)) \right\rangle$$

berechenbar aus
Langevin-Gl.

formale Integration liefert:

$$x_i(t+\tau) - x_i(t) = \int_t^{t+\tau} dt' \; h_i(\{\underline{x}\},t) + \sum_j D_{ij}(\{\underline{x}\},t) f_j(t)$$

Stochastische
Integration

Ergebnis (nach Stratonovitch-Regel)

$$K_i^{(1)} = h_i(\{\underline{x}\},t) + \underbrace{\frac{\Gamma}{2} \sum_{jk} \frac{\partial D_{ij}}{\partial x_k} D_{kj}}_{\text{rausch-induzierter Drift}}$$

nur ungleich 0 für multiplikatives
Rauschen (d.h. $\frac{\partial}{\partial x_k} D_{ij} \neq 0$)

Beispiel

nicht überdämpfte Langevin-Gl.
für 1 Brownsches Teilchen

$$\dot{x} = v$$

$$\dot{v} = -\gamma v + \frac{1}{m} f$$

Identifikation

$$\left.\begin{array}{l} h_x = v \\ h_v = -\gamma v \end{array}\right\} \longrightarrow \begin{array}{l} K_x^{(1)} = v \\ K_v^{(1)} = -\gamma v \end{array}$$

Ergebnis: zweiter Kramers-Moyal-Koeff.

$$\boxed{K_{ij}^{(2)}(\{\underline{x}\}, t) = \frac{\Gamma}{2} \sum_k D_{ik} D_{kl}}$$

im Beispiel:

$$D_{xx} = 0 \;, \quad D_{xv} = 0, \quad D_{vx} = 0$$

$$D_{vv} = \frac{1}{m}$$

Zurück zur Fokker-Planck-Gleichung

Fokus: 1 Teilchen in 1D
überdämpfte Bewegung, kein externes Potential

$$0 = -\gamma v + \frac{1}{m} f$$

$$\Rightarrow \gamma \dot{x} = \frac{1}{m} f$$

$$\Rightarrow \dot{x} = \frac{1}{\gamma m} f$$ (also wieder nur additives Rauschen)

Identifikation:

$$h_x = 0 \longrightarrow K_x^{(1)} = 0$$

$$D_{xx} = \frac{1}{m\gamma} \Rightarrow K_{xx}^{(2)} = \frac{\Gamma}{2} \frac{1}{m^2\gamma^2}$$

Einsetzen in den Ausdruck für die Fokker-Planck-Gl

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial t} p(x,t) = \hat{L}_{FP}\, p$$

mit $\hat{L}_{FP} = -\frac{\partial}{\partial x} K_x^{(1)} + \frac{\partial^2}{\partial x^2} K^{(2)}$

$=0$

Also

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t} P(x,t) = D \frac{\partial^2}{\partial x^2} P(x,t)}$$

bekannte und erwartete Diffusions-Gl.
(für überdämpftes Teilchen ohne externe Kräfte)

Anderes Beispiel

nicht-überdämpftes Teilchen in einem externen Potential.

$$\dot{x} = v$$
$$\dot{v} = -\gamma v + \frac{1}{m} f + \frac{1}{m}\left(-\frac{\partial}{\partial x} u(x)\right)$$

dynamische Variablen: x, v

∘ Kramers-Moyal:

$$h_x = v$$
$$h_v = -\gamma v + \frac{1}{m}\left(-\frac{\partial}{\partial x} u(x)\right)$$
$$D_{xx} = 0$$
$$D_{vv} = \frac{1}{m}$$

$$\Rightarrow K_x^{(1)} = v,\quad K_v^{(1)} = -\gamma v + \frac{1}{m}\left(-\frac{\partial}{\partial x} u(x)\right)$$

$$K_{xx}^{(2)} = 0,\quad K_{vv}^{(2)} = \frac{\Gamma}{2}\frac{1}{m^2},\quad K_{xv}^{(2)} = K_{vx}^{(2)} = 0$$

$\Rightarrow$ zugehörige Fokker-Planck-Gl.
(KM-Koeff. einsetzen)

$$\frac{\partial}{\partial t} p(x,v,t) = \left[-\frac{\partial}{\partial x} v - \frac{\partial}{\partial v}\left(\frac{1}{m}\left(-\frac{\partial}{\partial x} u(x)\right) - \gamma v\right) + \frac{\Gamma}{2}\frac{1}{m^2}\frac{\partial^2}{\partial v^2}\right] p(x,v,t)$$

Stationäre Lösung der Fokker-Planck-Gleichung

betrachte System mit einer dyn. Variable x

$$\frac{\partial}{\partial t} p(x,t) + \frac{\partial j}{\partial x}(x,t) = 0$$

mit

$$j(x,t) = \left(K^{(1)}(x) - \frac{\partial}{\partial x} K^{(2)}(x)\right) p(x,t) \qquad (*)$$

betrachte nun das System im therm. Gleichgewicht.

$$\leftrightarrow J = 0$$

(schwächer $\frac{\partial J}{\partial x} = 0$: stationärer Fall)

aus ⊛

$$K^{(1)}(x)\, p^{eq}(x) = \frac{\partial}{\partial x}\left(K^{(2)}\, p^{eq}(x)\right)$$

erweitern liefert

$$\frac{K^{(1)}(x)}{K^{(2)}}\, K^{(2)}\, p^{eq} = \frac{\partial}{\partial x}\left(K^{(2)}\, p^{eq}\right)$$

$$\Longrightarrow \quad K^{(2)} p^{eq} = \alpha\, e^{\int_c^x dx' \frac{K^{(1)}(x')}{K^{(2)}(x')}}$$

bzw.

$$p^{eq}(x) = \frac{\alpha}{K^{(2)}}\, e^{\int_c^x dx' \frac{K^{(1)}(x')}{K^{(2)}(x')}}$$

$$\underset{\substack{\text{bringe}\\\text{auf}\\\text{Form}}}{=} \alpha\, e^{-\phi(x)}$$

mit $\phi(x) = \ln K^{(2)}(x) - \int_c^x dx' \frac{K^{(1)}(x')}{K^{(2)}(x')}$

Beispiel

1 nicht-überdämpftes Teilchen, kein äußeres Feld

- dynamische Variable : v

Langevin-Gl.: $\dot{v} = -\gamma v + f$

$$\Rightarrow \quad h_v = -\gamma v \longrightarrow K^{(1)} = -\gamma v$$

$$D_{vv} = 1 \longrightarrow K^{(2)} = \frac{\Gamma}{2}$$

$$\Rightarrow \phi(v) = \underbrace{\ln \frac{\Gamma}{2}}_{= \text{const}} - \underbrace{\int_c^v dv' \, \frac{-\gamma v'}{\frac{\Gamma}{2}}}_{= 2 \cdot \frac{\gamma}{\Gamma} v^2 \, = \frac{1}{2} \cdot m v^2 \cdot \beta}$$

setze Fluktuations-Dissipations-relationen

$$\Rightarrow \boxed{p^{eq}(v) \sim e^{-\beta \frac{1}{2} m v^2}}$$

Maxwell-Boltzmann-Verteilung