Wh: Mastergleichung $\rightarrow$ Entwicklung für kleine Sprungweite $(x'-x)$ der Übergangswahrscheinl. $\rightarrow$ Fokker-Planck-Gleichung (FP)

Für eine dynamische Variable:

Kramers-Moyal-Koeffizienten

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

(Keine höheren Ableitungen, da wir $K^{(n)}(x,t)=0$, $n \geq 3$)
exakt für Systeme mit Gauss'schen Zufallsvariablen

Beachte: Die Ableitungen auf der rechten Seite beziehen sich auf alle Terme!

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

Verallgemeinerung auf viele Variablen

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

$\underline{x}(t)$: Vektor dyn. Variablen
(M Komponenten)

Kramers-Moyal-Koeffizienten

Berechnung (alternativ zur Definition als Momente der Übergangswahrsch., siehe letzte VL)
als Zeitmittelwert

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

Berechnung bei festem $\underline{x}(t)$

$i_n = 1, \ldots, M$

Strategy: Berechnung auf Basis der zugrundeliegenden allgemeinen Langevin-Gl.

$$\dot{x}_i(t) = h_i(\underline{x},t) + \sum_{j=1}^{M} D_{ij}(\underline{x},t)\, f_j(t)$$

Es gibt also direkte Verbindung zw. Langevin-Gl. und FP-Gl.!

explizit

$$x_i(t+\tau) - x_i(t) = \int_t^{t+\tau} dt' \left(h_i(\underline{x}(t'),t') + \sum_{j=1}^{M} D_{ij}(\underline{x}(t'),t')\, f_j(t') \right)$$

integriere allg. Langevin-Gleichung

entwickle die Funktion h_i und D_{ij} um den Vektor $\underline{x}(t)$ herum

$\longrightarrow$ Bildung der Zeitmittelwerte (Problem bei multiplikativem Rauschen!) Ito-Stratonovich

Ergebnisse für $n=1$, $n=2$ (in Stratonovich-Auswertung)

$$\boxed{K_i^{(1)} = \lim_{\tau \to 0} \langle x_i(t+\tau) - x_i(t) \rangle = h_i(\underline{x},t) + \frac{\Gamma}{2} \sum_{j,k} \frac{\partial D_{ij}}{\partial x_k}(\underline{x},t)\, D_{kj}(\underline{x},t)}$$

Γ: Stärke der stochast. Kraft

sogenannter "Drift-Koeffizient"

Bemerkung:

- Der zweite Term auf der rechten Seite ist nur dann von Null verschieden, wenn D_{ij} tatsächlich von $\underline{x}$ abhängt! (vom Zustand)

  „Rausch-induzierter Drift"

- Dieser 2. Term tritt nur dann auf, wenn man die Stratonovich-Auswertung des stochast. Integrals benutzt!

Zweiter Kramers-Moyal-Koeffizient

$$\boxed{\begin{aligned} K_{ij}^{(2)}(\underline{x},t) &= \frac{1}{2}\lim_{\tau\to 0}\frac{1}{\tau}\left\langle \left(x_i(t+\tau)-x_i(t)\right)\left(x_j(t+\tau)-x_j(t)\right)\right\rangle \\ &= \frac{\Gamma}{2}\sum_k D_{ik}(\underline{x},t)\, D_{kl}(\underline{x},t) \end{aligned}}$$

verallgemeinerter Diffusionskoeffizient

unabhängig davon, ob man die Itô- oder die Stratonovitch-Definition benutzt!

Beispiel:

nicht-überdämpftes Brown'sches Teilchen (in 1D), mit externem Potential

$$\dot{x} = v$$

$$\dot{v} = -\gamma v + \frac{1}{m} f(t) - \frac{1}{m}\frac{\partial}{\partial x} U(x)$$

additives Rauschen!

$\boxed{D_{xx}=0,\ D_{xv}=0,\ D_{vv}=\frac{1}{m}}$

also 2 dyn. Variablen! x, v

$$K_x^{(1)} = v$$

$$K_v^{(1)} = -\gamma v - \frac{1}{m}\frac{\partial}{\partial x} U(x)$$

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

$$K_{xx}^{(2)} = 0\ , \quad K_{xv}^{(2)} = 0\ , \quad K_{vv}^{(2)} = \frac{\Gamma}{2m^2} = \gamma\frac{k_B T}{m} = \gamma^2 D$$

Gleichgewicht (FDT)

Einstein

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x,v,t) = -\frac{\partial}{\partial x}\left(K_x^{(1)} P(x,v,t)\right) - \frac{\partial}{\partial v}\left(K_v^{(1)} P(x,v,t)\right) + \cancel{\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left(K_{xx}^{(2)} P(x,v,t)\right)} + \frac{\partial^2}{\partial v^2}\left(K_{vv}^{(2)} P(x,v,t)\right) + \cancel{\frac{\partial^2}{\partial x \partial v}\left(K_{xv}^{(2)} P(x,v,t)\right)}$$

Beispiel 2: überdämpftes Teilchen, kein externes Potential (in 1D)

$$-\gamma v = \frac{1}{m} f(t)$$

$$\Leftrightarrow v = -\frac{1}{\gamma m} f(t) \Leftrightarrow \dot{x} = -\frac{1}{\gamma m} f(t)$$

nur eine dyn. Variable, nämlich x!

Kein Driftterm $\Rightarrow$ $K_x^{(1)} = 0$

und. $K_{xx}^{(2)} = \frac{\Gamma}{2}\left(\left(-\frac{1}{\gamma m}\right)^2\right) \overset{FDT}{=} \gamma k_B T m \frac{1}{\gamma^2 m^2} = \frac{k_B T}{\gamma m} \overset{\text{Einstein}}{=} D$

$\Rightarrow$ FP-Gleichg:

$$\frac{\partial}{\partial t}P(x,t) = -\cancel{\frac{\partial}{\partial x}\left(K_x^{(1)} P(x,t)\right)} + \frac{\partial^2}{\partial x^2}\left(K_{xx}^{(2)} P(x,t)\right)$$

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

gewöhnl. Diffusionsgleichg.

Man sieht also: Die FP-Gleichg zur überdämpften Langevin-Gl. ohne Potential ("Wiener-Prozess") ist genau die Diffusionsgl.

„Stationäre" Lösung der FP-Gleichung (eigentlich: Lösung im Gleichgewicht)

Schreibe zunächst die FP-Gleichg noch etwas um

Definiere dazu eine Stromdichte $\underline{J}(\underline{x},t)$

mit $J_i(\underline{x},t) = K_i^{(1)}(\underline{x},t)P(\underline{x},t) - \sum_{j=1}^{M}\frac{\partial}{\partial x_j}\left(K_{ij}^{(2)}(\underline{x},t)P(\underline{x},t)\right)$

Dann läßt sich die FP-Gleichung schreiben als

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t}P(\underline{x},t) + \sum_i \frac{\partial}{\partial x_i}J_i = 0} \quad \hat{=} \quad \boxed{\frac{\partial}{\partial t}P(\underline{x},t) + \underbrace{\nabla\cdot\underline{J}}_{\text{Divergenz im M-dimensionalen Raum}} = 0}$$

Die FP-Gleichg läßt sich also als Kontinuitätsgleichg schreiben!

Impliziert Erhaltung der Gesamtwahrscheinlichkeit

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

Man sagt:

- stationärer Zustand des Systems: $\nabla \cdot \underline{J} = 0 \Leftrightarrow \sum_{i=1}^{N} \frac{\partial}{\partial x_i} J_i = 0$

denn dann gilt offensichtlich

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x,t) = 0 \Leftrightarrow P = P^{stat}(x)$$

- Gleichgewichtszustand des Systems

$$\underline{J} = 0 \Leftrightarrow J_i = 0$$

(dann folgt natürlich auch $\frac{\partial}{\partial t} P(x,t) = 0 \Leftrightarrow P = P^{eq}(x)$

Der Begriff "Gleichgewicht" ist strenger als der Begriff "Stationarität"

Folgerung: Ein System kann in einem stationären Zustand sein ($\nabla \cdot \underline{J} = 0$), ohne dass Gleichgewicht herrscht ($\underline{J} \neq 0$)

"stationärer Nichtgleichgewichtszustand"

(non-equilibrium steady state (NESS))

Betrachte 1D-Problem, suche die Lösung im Gleichgewicht (!)

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x,t) = -\frac{\partial}{\partial x} J(x,t) \quad \text{mit} \quad J(x,t) \underset{(*)}{=} \left(K^{(1)}(x) - \frac{\partial}{\partial x} K^{(2)}(x) \right) P(x,t)$$

Gleichgewicht

$J = 0$, $P(x,t) = P^{eq}(x)$

aus (*): $$K^{(1)}(x) P^{eq}(x) = \frac{\partial}{\partial x} \left(K^{(2)}(x) P^{eq}(x) \right)$$

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

formale Lösung: $$\Rightarrow K^{(2)}(x) P^{eq}(x) = \alpha \, e^{\int_c^x dx' \frac{K^{(1)}(x')}{K^{(2)}(x')}}$$

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

oder $P^{eq}(x) = \alpha\, e^{-\Phi(x)}$

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

z.B. nicht überdämpftes Brown'sche Teilchen, ohne externes Potential, nur die v-Dynamik ($\dot{v} = -\gamma v + \frac{1}{m} f(t)$)

$$K^{(1)} = -\gamma v \quad , \quad K^{(2)} = \frac{1}{m^2}\frac{\Gamma}{2}$$

man findet die Maxwell-Boltzmann-Verteilung ($\rightarrow$ nächstes Mal!)