

Dynamik Stochastischer Systeme: Master, Langevin und Fokker–Planck Gleichungen

M. Janßen 2001

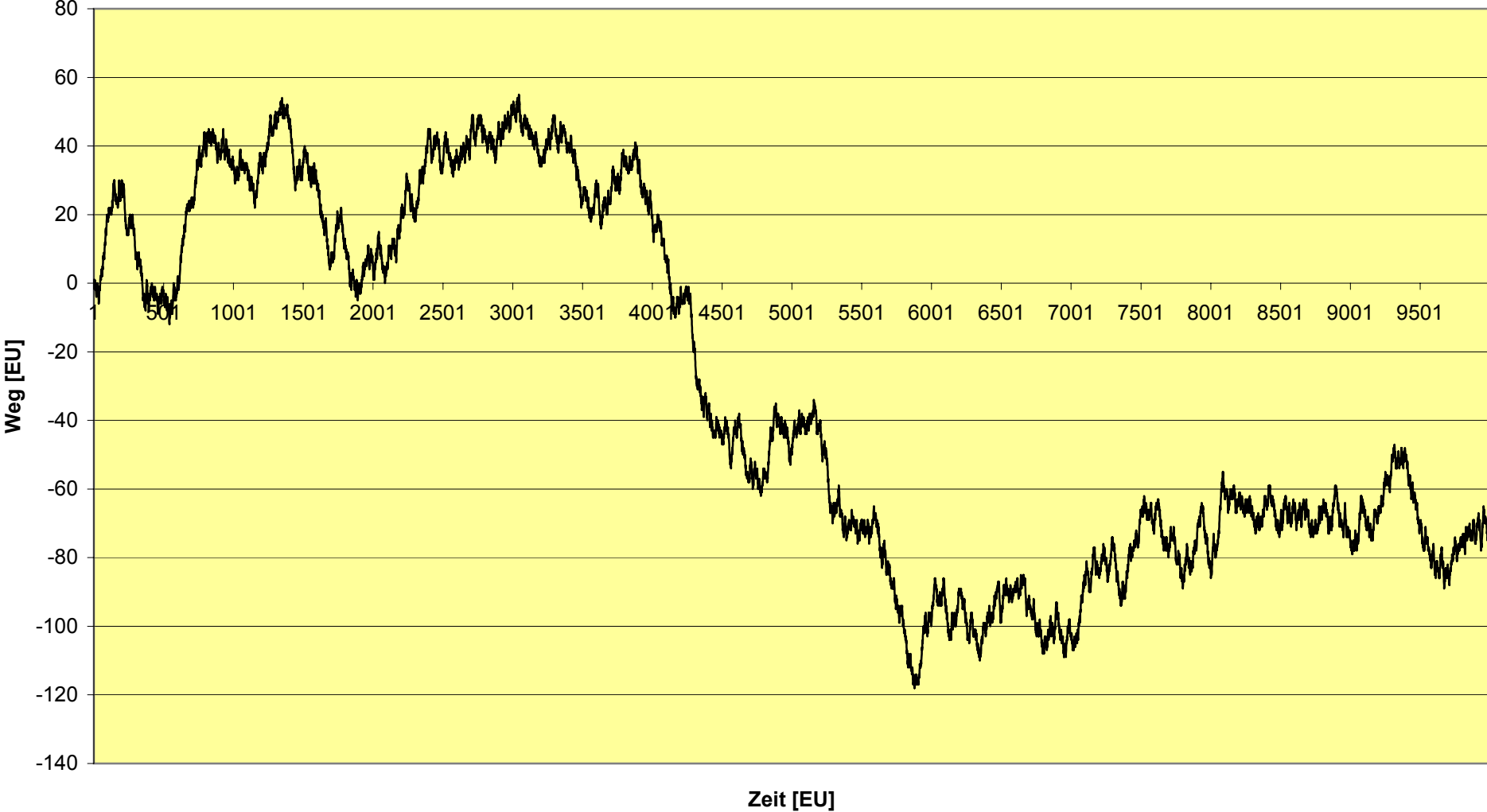
$$\partial_t P_t(x) = \mathcal{L}_x P_t(x)$$

Für Mitteilungen über Tippfehler und sonstige Unzulänglichkeiten
bin ich dankbar.

e-mail: martin-janssen@gmx.de

Stand: 24.11.2001

Random-Walk in 1D: Weg-Zeitverlauf



Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	5
1.1	Zum Kontext der Vorlesung	5
1.1.1	Adressat	5
1.1.2	Ziele	5
1.1.3	Voraussetzungen	6
1.1.4	Abgrenzungen	6
1.1.5	Literatur	8
1.2	Einführung	9
1.2.1	Typische stochastische Prozesse	9
1.2.2	Anmerkungen zur Geschichte	18
1.2.3	Glossar wichtiger Begriffe	19
1.2.4	Schnellvorlauf	22
2	Zufallsprozesse und ihre Bewegungsgleichungen	23
2.1	Zufallsvariablen	23
2.2	Zufallsprozesse	23
2.3	Markov Prozesse	23
2.4	Master Gleichung	23
2.5	Fokker–Planck Gleichung	23
2.6	Langevin Gleichung	23
3	Die Bewegungsgleichungen	25
3.1	Auftreten der Gleichungen	25
3.2	Lösungsmethoden	25

3.3	Laser Physik	25
3.4	Random Matrix Theorie	25
3.5	Mesoskopischer Transport	25
3.6	Life Science	25

Kapitel 1

Einleitung

1.1 Zum Kontext der Vorlesung

1.1.1 Adressat

Die Vorlesung richtet sich an Studierende im Hauptstudium Physik mit Schwerpunkt Theorie. Darüber hinaus kann die Vorlesung auch für Studierende und Anwender in allen Wissenschaftsbereichen von Interesse sein, die theoretische Methoden zur Beschreibung dynamischer Zufallsprozesse erlernen wollen. Diese haben breite Anwendungen in Natur- und Sozialwissenschaften wie Physikalische Chemie, Populationsdynamik, Epidemiologie, Umweltphysik, Finanzmathematik, Verkehrsforschung und allgemein in der Dynamik komplexer (auch sozialer) Systeme.

1.1.2 Ziele

Die Vorlesung will systematisch und elementar in das Thema einführen. Es soll die Bedeutung der Wahl **relevanter Freiheitsgrade** zur Beschreibung der Dynamik komplexer Systeme hervorgehoben werden und die Flexibilität der Bewegungsgleichungen herausgestellt werden, die uns heute zur Verfügung stehen: Die sehr allgemeine Master Gleichung und spezieller die vereinfachenden Bewegungsgleichungen, die als Langevin bzw. Fokker–Planck Gleichungen bezeichnet werden.

Das Thema der Vorlesung ist ein wichtiges Teilgebiet der Nichtgleichgewichtsphysik, die im Gegensatz zur Gleichgewichtsstatistik und Thermodynamik eine echte zeitliche Entwicklung außerhalb von stationären Gleichgewichten behandelt. Dynamik stochastischer Prozesse ist ein interdisziplinäres Thema, das mehr als andere Bereiche der Theoretischen Physik in viele Bereiche anderer Wissenschaftsdisziplinen heranreicht.

Die Hörer/innen sollen in die Lage versetzt werden, zu erkennen, wann sich in ihrer Arbeit ein Zugang mittels der hier vorgestellten Bewegungsgleichungen lohnt.

1.1.3 Voraussetzungen

Physikstudierende sollten zuvor die Theoriekurse I-IV (Theoretische Mechanik, Elektrodynamik, Quantenmechanik und Gleichgewichtsstatistik) gehört haben. Sie sind damit bestens vorbereitet. Generell gilt, dass wir an Mathematik elementare mehrdimensionale Analysis und lineare Algebra voraussetzen, etwa auf dem Niveau eines Kurses »Mathematik für Naturwissenschaftler bzw. Physiker« z.B. [Grossmann]. Besonderheiten werden in Anhängen behandelt. Es wird versucht, im Text Hinweise zu geben, wo man die Mathematik nachlesen kann, die jeweils benötigt wird. Sie hat für unseren Zweck reinen »Werkzeugcharakter« .

1.1.4 Abgrenzungen

Inhaltlich grenzt sich die Vorlesung dadurch ab, dass stochastische Prozesse, die auch als Zufallsprozesse bezeichnet werden, im Gegensatz zu deterministischen Prozessen stehen. Die wichtigsten Gleichungen der Theoretischen Physik, die deterministische Prozesse beschreiben, sind die Newton Gleichung für die zeitliche Veränderung klassischer mechanischer Freiheitsgrade, die Maxwell Gleichung für die zeitliche Veränderung klassischer elektromagnetischer Feldfreiheitsgrade, die Einstein Gleichung für die Veränderung klassischer Feldfreiheitsgrade der Gravitation und ganz allgemein die Schrödinger Gleichung bzw. Heisenberg Gleichung für die Veränderung beliebiger Freiheitsgrade aus quantentheoretischer Sicht.

In solche deterministischen Bewegungsgleichungen gehen sehr genaue Detailkenntnisse über das betrachtete System ein, so dass man aus einer Anfangsbedingung für den Zustand aller Freiheitsgrade auf die Werte der Freiheitsgrade zu jedem beliebigen späteren (auch früheren) Zeitpunkt schließen kann (vorausgesetzt, die Rechengenauigkeit reicht aus). Ja es ist gerade ein Charakteristikum für alle uns bekannten fundamentalen Bewegungsgleichungen, dass sie sowohl im Hinblick auf die Zukunft als auch auf die Vergangenheit vollkommen deterministisch sind und eine exakte Symmetrie bezüglich der Zeitumkehr besitzen.

Oft ist aber die Kenntnis über den Zustand eines Systems nicht genau. Noch häufiger ist man wegen der Informationsfülle, die eine genaue Kenntnis mit sich brächte, gar nicht am exakten Zustand eines Systems interessiert. Auch kann der Zustand externen Einflüssen unterliegen, die man nicht im Detail kontrollieren kann.

Unter solchen Umständen bietet es sich an, sich auf wenige informative **relevante Freiheitsgrade** zu beschränken. Das gebietet nicht nur der ökonomische Umgang mit der Zeit, die man zur Beschreibung eines Systems braucht, sondern eröffnet zudem den Blick auf **das Wesentliche** in einem komplexen dynamischen System.

In der Regel wird man sich auf wenige relevante Freiheitsgrade beschränken, die die Veränderungen im Makroskopischen beschreiben. Damit meint man, dass an den makroskopischen Freiheitsgraden viele mikroskopische Freiheitsgrade des Systems (diejenigen, die alle Details enthalten) in einem bestimmten Sinne summarisch beteiligt sind (nicht notwendigerweise rein additiv). Die Wahl der relevanten Freiheitsgrade ist eine Kunst, für die es Praxen und Erfahrungen aber derzeit keine allgemeingültigen Regeln gibt. Einher mit der Konstruktion der relevanten Freiheitsgrade geht die Beschränkung der Beschreibung des Zeitverhaltens auf Skalen, die groß gegenüber allen Zeitskalen sind, auf denen sich wohl mikroskopische Freiheitsgrade ändern können, nicht aber die relevanten makroskopischen Freiheitsgrade. Es ist nun gerade eine faszinierende Einsicht der Physik stochastischer Prozesse, dass diese Beschränkung auf mittlere Zeitskalen und relevante Freiheitsgrade einige wenige einfach handhabbare Bewegungsgleichungen generiert, die einen makrosko-

pisch deterministischen Anteil und einen rasch und unregelmässig fluktuierenden stochastischen Anteil haben. Besonders transparent sieht man das in den zugeordneten Langevin und Fokker–Planck Gleichungen. Weil man auf viele Details verzichtet hat, bekommt man Bewegungsgleichungen von sehr großer Allgemeinheit, die oft identisch auf eine Fülle unterschiedlichster mikroskopischer Systeme passen. Das ist eine Manifestierung des »Jaynes’schen Prinzips«, das wir in der von uns gewählten Formulierung als Motto der Vorlesung gelten lassen wollen:

Wenn es sich herausstellt, dass ein für den Beschreibenden relevantes Phänomen in einem Experiment mit genügender Treue reproduzierbar ist, dann sind offenbar alle Details, die nicht unter der Kontrolle des Experimentierenden standen, tatsächlich irrelevant für das Verständnis und die Vorhersage des Phänomens.

Eine zweite bemerkenswerte Eigenschaft der Bewegungsgleichungen ist das Brechen der Symmetrie gegen Zeitumkehr – so wie wir im Alltag auch gewohnt sind, zwischen Vergangenheit und Zukunft als Zeitmodi des Faktischen und Möglichen zu unterscheiden

Die Themenauswahl richtet sich einerseits danach, die Allgemeinheit der Bewegungsgleichungen herauszustellen, andererseits sind die Fallbeispiele nach persönlichen Vorlieben ausgesucht.

1.1.5 Literatur

[Röpke 1987]: G. Röpke, *Statistische Mechanik für das Nichtgleichgewicht*, VEB, 1987.

[Risken 1996]: H. Risken, *The Fokker–Planck Equation*, Springer, 1996 3rd edition.

[Honerkamp 1990]: J. Honerkamp, *Stochastische Dynamische Systeme*, VCH, 1990.

Weitere Hinweise gibt es im Laufe der Vorlesung.

1.2 Einführung

1.2.1 Typische stochastische Prozesse

Der Begriff **Stochastik** ist griechischen Ursprungs und bedeutet zunächst soviel wie »erraten, vermuten, ahnen, das Ziel treffen« und wird hier im Sinne von **Zufallsprozessen** verwendet.

Zufallsprozesse sind zeitliche Abläufe von Ereignisketten, für die eine detaillierte deterministische Beschreibung entweder nicht vorliegt, nicht informativ ist, oder prinzipiell unmöglich erscheint.

Typischerweise sind **Transportprobleme** mit der Frage nach dem zeitlichen Verlauf **relevanter** meist **makroskopischer** Beobachtungsgrößen das Anwendungsgebiet der stochastischen Prozesse.

Beispiele sind:

- Ein zufällig heraus gegriffenes typisches Auto im Stadtverkehr
- Ein zufällig heraus gegriffenes typisches Elektron im Festkörper unter angelegter externer elektrischer Spannung
- Makroskopische Beobachtungsgrößen in komplexen Systemen (=dynamische Systeme mit vielen mikroskopischen Freiheitsgraden, weit entfernt von einem globalen thermodynamischen Gleichgewicht), z.B. die räumlich schwankende Temperatur im Atmosphäre-Ozean System, oder
- Stoffkonzentrationen in bio-chemischen Systemen, oder
- Populationen in Gesellschaften, oder
- Börsenindizes des Weltmarktsystemes

Die beschreibenden Bewegungsgleichungen für stochastische Prozesse können in **zwei Kategorien** eingeteilt werden.

Zum einen gibt es Gleichungen direkt für die Beobachtungsgrößen $x(t)$ als Funktion der Zeit t als so genannte **stochastische Differentialgleichungen** vom Typ

$$\boxed{\dot{x} = D(x, t) + \eta(t)}, \quad (1.1)$$

wobei D einen deterministischen Anteil und η einen stochastischen Anteil beschreibt ($\dot{x} := dx/dt$ wie üblich). Das heißt, dass D eine eindeutige Funktion der Zeit t und des Wertes x und möglicherweise von weiteren Parametern ist, aber $\eta(t)$ verschiedene Verläufe annehmen kann, die nur in ihrer statistischen Gesamtheit charakterisiert werden können. Für jeden speziellen Verlauf $\eta(t)$ ergibt sich somit selbst bei gleichen Anfangsbedingungen für x verschiedene Lösungen der Zeitfunktion $x(t)$. Gesucht ist die statistische Charakterisierung aller möglichen Lösungen.

Zum anderen gibt es Gleichungen für die **Verteilungsfunktion** $P_t(x)$, die wesentliche statistische Aussagen über mögliche Zeitverläufe von $x(t)$ beschreibt. Diese Gleichungen sind partielle Integro-Differentialgleichungen vom Typ

$$\boxed{\partial_t P_t(x) = \mathcal{L} P_t(x)} \quad (1.2)$$

wobei \mathcal{L} ein Integro-Differentialoperator mit den Variablen x, t ist ($\partial_t := \partial/\partial t$).

Für beide Kategorien gibt es auch diskrete Versionen, wobei die Diskretheit sich sowohl auf die Zeit $t \rightarrow j$ als auch auf die Variable $x \rightarrow n$ beziehen kann. Aus der stochastischen Differentialgleichung Gl. (1.1) wird eine stochastische Differenzgleichung vom Typ

$$\boxed{x_{j+1} - x_j = D_j(x) + \eta_j}. \quad (1.3)$$

Aus einer Integralgleichung Gl. (1.2) wird eine Summengleichung vom Typ

$$\boxed{\partial_t P_t(n) = \sum_{n'} L_{nn'}(t) P_t(n')}, \quad (1.4)$$

während z.B. aus einer partiellen Differentialgleichung zweiter Ordnung eine partielle Differenzgleichung vom Typ

$$\partial_t P_t(n) = A(n, t) P_t(n+1) + B(n, t) P_t(n-1) + C(n, t) P_t(n), \quad (1.5)$$

wird.

Wichtige Vertreter von Gl. (1.1) sind Langevin Gleichung und von Gl. (1.2) die Master Gleichung (Integralgleichung) und die Fokker–Planck Gleichung (partielle Differentialgleichung zweiter Ordnung).

⊙**Beispiel:** Diffusion

Eine räumliche Dichte (z.B. einer Teilchenart) $n(\mathbf{r}, t)$ mit physikalischer Dimension $[1/\text{m}^d]$ in d Raumdimensionen sei inhomogen.

Solche Situationen liegen beispielsweise vor, wenn eine Parfümflasche geöffnet wird, denn die Moleküle des flüssigen Parfüms sind im umgebenden Raum nicht gleichverteilt. Ein anderes Beispiel ist das Hineinbringen von Zucker in ein Getränk, nachdem sich dieser gelöst hat; oder von Tinte in eine flache mit Wasser gefüllte Schale. Auch wenn man bei zwei Gasen, die durch eine Trennwand getrennt sind, die Trennwand entfernt, liegt eine solche Situation vor.

Dann gibt es einen i.A. nichtverschwindenden Dichtegradienten $\text{grad } n(\mathbf{r}, t)$. Ein als **Ficksches Gesetz** bekannter Erfahrungssatz besagt, dass ein Teilchenstrom $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$ mit physikalischer Dimension $[1/\text{sm}^{d-1}]$ erzeugt wird, der in führender (und oft hinreichender) Näherung direkt proportional zum Dichtegradienten ist,

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = -D \text{grad } n(\mathbf{r}, t). \quad (1.6)$$

Dabei ist D eine z.B. empirisch zu bestimmende **Materialkonstante** der physikalischen Dimension $[\text{m}^2/\text{s}]$.

Nun genügt jede Dichte einer global erhaltenen Größe (wie es z.B. die Teilchenzahl in einem chemisch homogenen System ist) dem lokalen Erhaltungssatz in Form einer Kontinuitätsgleichung,

$$\partial_t n(\mathbf{r}, t) = -\text{div } \mathbf{j}(\mathbf{r}, t). \quad (1.7)$$

Kombiniert man die Kontinuitätsgleichung mit dem Fickschen Gesetz, erhält man für die Dichte eine partielle Differentialgleichung zweiter Ordnung, die man als **Diffusionsgleichung** mit Diffusionskonstante D bezeichnet,

$$\partial_t n(\mathbf{r}, t) = D \Delta n(\mathbf{r}, t) \quad (1.8)$$

wobei $\Delta = \partial_{\mathbf{r}} \cdot \partial_{\mathbf{r}} = \text{div grad}$ der aus der Elektrostatik bekannte Laplaceoperator ist. Sie wurde von Einstein 1905 zur Beschreibung der Brownschen Bewegung (unter dem Mikroskop beobachtbare Zitterbewegung von in Wasser schwebenden Pflanzensporen) abgeleitet.

Teilt man die Dichte durch ihr Integral $N = \int d^d r n(\mathbf{r}, t)$, also die erhaltene Teilchenzahl N , so kann $P_t(\mathbf{r}) := n(\mathbf{r}, t)/N$ als eine auf 1 normierte **Wahrscheinlichkeitsverteilung** für das Antreffen eines Teilchens bei \mathbf{r} zur Zeit t interpretiert werden. Natürlich genügt dann $P(\mathbf{r}, t)$ auch der Diffusionsgleichung und diese ist daher ein erstes Beispiel einer Fokker-Planck Gleichung im Sinne dieser Vorlesung. Mit der Lösung beschäftigen wir uns in Kürze.

Eine alternative Betrachtungsweise auf den Diffusionsvorgang ist die Frage nach der Geschwindigkeit $\mathbf{v}(t)$ eines zufällig heraus gegriffenen Teilchens. Dafür machte Langevin 1908 den folgenden plausiblen Ansatz einer stochastischen Differentialgleichung,

$$m\dot{\mathbf{v}} = -\frac{1}{B}\mathbf{v} + \mathbf{F}^s. \quad (1.9)$$

Hier ist m die träge Masse des Teilchens, B heißt Beweglichkeit des Teilchens (physikalische Dimension [s/kg]) in der Umgebung. Die zugehörige Reibungskraft ist proportional zur Geschwindigkeit angesetzt, was für nicht zu große Geschwindigkeiten eine gute Näherung ist. Der neue Term ist die Zufallskraft (stochastische Kraft) \mathbf{F}^s , von der Langevin annimmt, dass sie die regellosen Stöße des umgebenden molekularen bzw. atomaren Mediums auf das Teilchen beschreiben soll. Eine naheliegende Annahme ist, dass sie im Mittel verschwindet,

$$\langle \mathbf{F}^s \rangle = 0. \quad (1.10)$$

Was hierbei »im Mittel« genau heißen soll, lassen wir vorerst offen – in jedem Fall muss über eine statistische Gesamtheit ähnlicher Situationen gemittelt werden können. Neben der Annahme Gl. (1.10) muss aber nun noch etwas über die Fluktuationen der Zufallskraft gesagt werden. Hier macht Langevin zwei entscheidende Annahmen. 1. Es reicht, die Korrelationsfunktion $\langle F_j^s(t)F_k^s(t') \rangle$ zu kennen – weitere statistische Charakterisierungen der Zufallskraft sind unnötig. 2. Die Zeitdauer, über der eine Korrelation der Zufallskräfte besteht, ist gegenüber allen Zeitskalen, auf der sich die Geschwindigkeit unseres Teilchens ändert, als sehr gering anzusehen. Das führt auf den (isotropen) Ansatz

$$\langle F_j^s(t)F_k^s(t') \rangle = \delta_{jk}C\delta(t-t'). \quad (1.11)$$

Dabei hat die Konstante C der Zufallskraft Korrelation die Dimension $[\text{kg}^2\text{m}^2/\text{s}^3]$. Mit der Lösung der stochastischen Differentialgleichung beschäftigen wir uns in Kürze. Hier sei nur mitgeteilt, dass die Konstanten B, C mit der Diffusionskonstanten D und der Temperatur T des umgebenden Mediums über den Gleichverteilungssatz verknüpft sind.

Einige Jahre später (1914/17) haben Fokker und Planck sich die Frage gestellt, welche Bestimmungsgleichung für die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Geschwindigkeit $P_t(\mathbf{v})$ bei der Diffusion folgt. Wie wir noch sehen werden, folgt bei der obigen Wahl der Konstanten D und B die Fokker–Planck Gleichung

$$\partial_t P_t(\mathbf{v}) = \frac{1}{mB} \partial_{\mathbf{v}} \cdot (\mathbf{v} P_t(\mathbf{v})) + D \partial_{\mathbf{v}} \cdot \partial_{\mathbf{v}} P_t(\mathbf{v}). \quad (1.12)$$

Hierbei heißt der zweite Term auf der rechten Seite **Diffusion**, weil er formal wie bei der Diffusionsgleichung für eine Variable \mathbf{v} aussieht, und der erste Term heißt **Drift**. Ein solcher Term fehlte in der Diffusionsgleichung Gl. (1.8). Seine Bedeutung wird uns noch beschäftigen, ebenso wie die Lösungstheorie der Fokker–Planck Gleichung. \odot

Anmerken möchte ich noch dreierlei zu obigem Beispiel der Diffusion. Die Diffusionsgleichung Gl. (1.8) ist formal identisch zur Wärmeleitungsgleichung,

$$\partial_t T(\mathbf{r}, t) = \frac{\kappa}{\rho c} \Delta T(\mathbf{r}, t), \quad (1.13)$$

die von Fourier schon zu Beginn des 19. Jahrhunderts betrachtet und mit der eigens hierfür entwickelten Methode der Fourierreihen gelöst wurde. Hierbei sind $T(\mathbf{r}, t)$ die Temperatur eines lokalen Gleichgewichtszustandes bei \mathbf{r}, t , κ die thermische Leitfähigkeit, ρ die spezifische Dichte des Materials und c die spezifische Wärme des Materials. Diese formale Identität ist nicht zufällig, denn einem Temperaturgradienten ist eine Wärmestromdichte via κ negativ proportional und die Kontinuitätsgleichung gilt für Energiedichte und Wärmestromdichte. Die Umrechnung von Energiedichte auf Temperatur besorgt die spezifische Wärme mit der Dichte. Daher ist die phänomenologische Herleitung der Wärmeleitungsgleichung vom gleichen Kaliber wie die der Diffusionsgleichung.

Die zweite Anmerkung betrifft die Zeitumkehr. Die Diffusionsgleichung ist nicht gegen Zeitumkehr invariant (wie wir noch genauer sehen werden). Das

gilt auch für die Langevin Gleichung und die Fokker–Planck Gleichung. Bei den Fokker–Planck Typen äußert sich das in der ersten Ordnung der partiellen Zeitableitung, bei der Langevin Gleichung im der Geschwindigkeit proportionalem Reibungsterm. Da die Kontinuitätsgleichung keine Brechung der Zeitumkehr beinhaltet, muss sie aus dem Materialgesetz des Transportes wie dem Fickschen Gesetz stammen. Tatsächlich wird hier bereits der Erfahrung Rechnung getragen, dass ein Strom immer negativ proportional dem Dichtegradienten ist. Anschaulich heißt das, dass sich ein großer Teilchenhaufen in der Zukunft stets breiter verteilt, sich aber niemals spontan anhäuft. Man beachte, dass hierbei nicht der Einfluss von Gravitation gemeint ist, sondern lediglich innerhalb der inhomogenen Teilchendichte wirkende Ursachen (Stöße, statistische Schwankungen) verantwortlich sind.

Die dritte Anmerkung betrifft die formale Analogie von Fokker–Planck und Schrödinger Gleichung, die insbesondere bei der Diffusionsgleichung und der freien Schrödinger Gleichung auftritt. Der entscheidende Unterschied ist die imaginäre Einheit in der Schrödinger Gleichung und die komplexe Natur der Wellenfunktion (deren Betragsquadrat erst eine Wahrscheinlichkeitsverteilung beschreibt), was die Zeitumkehrinvarianz der Schrödinger Gleichung ermöglicht. Andererseits bietet die Analogie eine große Fülle von Hilfen bei der Lösungstheorie in beiden Disziplinen, Statistik und Quantentheorie. Im Rahmen der sogenannten stochastischen Quantentheorie dient die Analogie sogar als Konstruktionsbasis der Quantentheorie.

Wir wollen nun einige Rechnungen zu den Gleichungen zum Diffusionsproblem als Übungsaufgaben behandeln

▷ **Übungsaufgabe:** 1.) Diffusionsgleichung

Lösen Sie das Anfangswertproblem der Diffusionsgleichung Gl. (1.8) und bestimmen Sie die Zeitentwicklung der quadratischen Schwankungen $\langle(\delta\mathbf{r})^2\rangle$.

Lösungsskizze: Idee: Fourier Transformation in \mathbf{r} zur Reduktion des Laplace Operators auf Algebra,

$$\mathbf{P}_t(\mathbf{k}) := \int \frac{d^d r}{(2\pi)^{d/2}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} P_t(\mathbf{r}).$$

Das liefert

$$\partial_t P_t(\mathbf{k}) = -D\mathbf{k}^2 P_t(\mathbf{k}).$$

Damit $P_t(\mathbf{k}) = P_0(\mathbf{k})e^{-D\mathbf{k}^2 t}$. Zu lokalisierter Dichte am Anfang im Ursprung, $P_t(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r})$, ist $P_0(\mathbf{k})$ konstant. Rücktransformation

$$\mathbf{P}_t(\mathbf{r}) = \int \frac{d^d r}{(2\pi)^{d/2}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} P_t(\mathbf{k})$$

liefert Gauß Verteilung mit Varianz $2Dt$ in jeder kartesischen Komponente

$$\boxed{P_t(\mathbf{r}) = \sqrt{2Dt}^{-d} e^{-\mathbf{r}^2/4Dt}} \quad (1.14)$$

Damit ist

$$\boxed{\langle (\delta\mathbf{r})^2 \rangle = 2dDt} \quad (1.15)$$

das die Diffusion signalisierende wurzelförmige Zeitverhalten des Radius einer Anfangsverteilung.

◁

▷ **Übungsaufgabe:** 2.) Langevin Gleichung zur Diffusion

Lösen Sie die Langevin Gleichung Gl. (1.9) für $\mathbf{v}(t)$ und $\mathbf{r}(t)$. Bestimmen Sie die Korrelatoren $\langle v_k(t)v_l(t') \rangle$ und die Ortsschwankungen $\langle (\delta r_k)^2(t) \rangle$. Nehmen Sie an, dass die mittlere kinetische Energie dem thermodynamischen Gleichverteilungssatz genügt. Welche Konsequenzen hat das für die Parameter der Langevin und Diffusionsgleichung?

Lösungsskizze: Mit $\gamma = 1/mB$ und $\vec{\eta} = \mathbf{F}^s/m$ lautet die Langevin Gleichung

$$\dot{\mathbf{v}} = -\gamma\mathbf{v} + \vec{\eta}.$$

Direkte Integration liefert

$$\mathbf{v}(t) = e^{-\gamma t} \left(\mathbf{v}_0 + \int_0^t d\tau \vec{\eta}(\tau) e^{\gamma\tau} \right).$$

Im Mittel ist daher $\langle \mathbf{v}(t) \rangle = \mathbf{v}_0 e^{-\gamma t}$. Bei der Korrelation der Geschwindigkeitskomponenten muss man auf die Reihenfolge der Zeitargumente achten. Man findet dann durch Integration der δ -Funktion des η -Korrelators

$$\langle v_j(t)v_k(t') \rangle = e^{-\gamma(t+t')} \left[v_{0j}v_{0k} - \frac{BC}{m2} \delta_{jk} \right] + \delta_{jk} \frac{BC}{m2} e^{-|t'-t|/mB}.$$

Insbesondere ist

$$\langle v^2(t) \rangle = d \left[\left(\frac{v_0^2}{d} - \frac{BC}{2m} \right) e^{-2\gamma t} + \frac{BC}{2m} \right] \quad (1.16)$$

Zu Beginn ist natürlich $\langle v^2(0) \rangle = v_0^2$, interessanter ist was für $t \gg 1/\gamma$ passiert, wenn die mittlere Geschwindigkeit durch Reibung abgebaut ist. Dann wird

$$\langle v^2(t \gg 1/\gamma) \rangle \equiv \frac{BCd}{2m}$$

eine Konstante. Da im thermodynamischen Gleichgewicht die kinetische Energie $mv^2/2$ ebenfalls eine Konstante ist, die nach dem **Gleichverteilungssatz** gleich $dk_B T/2$ ist, kann man schließen: Wenn die Teilchen im Diffusionsprozess asymptotisch in den Zustand des Thermodynamischen Gleichgewichts übergehen, so gilt die folgende Beziehung zwischen den Parametern B, C der Langevin Gleichung und der Temperatur T des Systems

$$BC = 2k_B T.$$

Durch Integration der Geschwindigkeitskorrelation findet man nach etwas mühsamer Rechnung (Fallunterscheidungen) ein Ergebnis für die Ortsschwankungen aus exponentiell abklingenden Termen plus einem linearen Term, der asymptotisch dominiert und ganz charakteristisch für die Diffusion war. Er lautet

$$\langle (\delta r_k)^2(t) \rangle = B^2 C t. \quad (1.17)$$

Identifiziert man ihn mit dem Verhalten bei der Diffusionsgleichung, erhält man die berühmte **Einstein Relation** zwischen Diffusionskonstante D und der Beweglichkeit B sowie der Temperatur T

$$D = B k_B T. \quad (1.18)$$

Mit Hilfe des stochastischen Langevin Prozesses gelingt also auch eine Beschreibung des Übergangs ins Gleichgewicht. Das wird vielfach in der **Molekulardynamik** ausgenutzt. \triangleleft

▷ **Übungsaufgabe:** 3.) Herleitung der Fokker–Planck Gleichung aus der Langevin Gleichung

Leiten Sie die Fokker–Planck Gleichung Gl. (1.12) aus der Langevin Gleichung Gl. (1.9) her.

Lösungsskizze: Um Schreibarbeit zu sparen beschränken wir uns auf 1D und vereinfachen die Einheiten in der Langevin Gleichung: $\dot{v} = -v + \eta$. Gesucht ist das Zeitverhalten der Verteilungsfunktion $P_t(v)$. Dazu benutzen wir Methoden, die etwas vorgreifen auf Dinge, die erst im Laufe der Vorlesung klarer werden. Grundidee: Statt der Verteilung betrachte Erwartungswerte einer beliebigen Funktion $f(v)$,

$$\langle f(v(t)) \rangle = \int dv f(v) P_t(v)$$

und studiere ihre zeitliche Ableitung

$$\frac{d}{dt} \langle f(v(t)) \rangle = \int dv f(v) \partial_t P_t(v).$$

Auf der linken Seite benutzen wir Kettenregel, was \dot{v} ins Spiel bringt und damit die Langevin Gleichung,

$$\left\langle \frac{\partial f}{\partial v} (-v + \eta) \right\rangle.$$

Um das Mittel über η auszunutzen, macht man sich klar, dass man die η -Korrelation aus einer Gauß Verteilung gewinnen kann, $\int D\eta e^{-\frac{1}{4} \int \eta^2(\tau) d\tau}$. Wenn man dann noch sieht, dass ein zu mittelnder Faktor η stets durch eine (Funktional-)Ableitung der Gauss Funktion generiert werden kann, und partiell integriert, wälzt man die Ableitung hier auf $\partial_v f$ über. Damit erhält man

$$\left\langle \frac{\partial f}{\partial v} \eta \right\rangle = 2 \left\langle \frac{\partial^2 f}{\partial v^2} \frac{\delta v(t)}{\delta \eta(t)} \right\rangle.$$

Aus der Lösung der Langevin Gleichung Gl. (1.16) kann man $\delta v(t)/\delta \eta(t)$ berechnen, was sich als $\theta(t-t')$ an der Stelle $t=t'$ herausstellt und damit genau auf der Unstetigkeitsstelle liegt. Hier muss man eine sinnvolle Wahl treffen. Diese erschreckende Uneindeutigkeit ist, wie wir noch sehen werden, ein zwingender Zug der Beschreibung durch stochastische Differentialgleichungen und hat seinen Grund in der nichtanalytischen Abfolge der Prozesse

selbst. Sinnvollerweise wählt man hier $1/2$ als Zwischenwert und findet mit dieser Wahl

$$\int dv f(v) \partial_t P_t(v) = \int dv \left[-\frac{\partial f}{\partial v} v + \frac{\partial^2 f}{\partial v^2} \right] P_t(v).$$

Durch partielle Integration rechts befreit man $f(v)$ von den Ableitungen und kann dann, da $f(v)$ beliebig war, auf eine partielle Differentialgleichung für $P_t(v)$ schließen, die identisch mit der Fokker-Planck Gleichung ist. \triangleleft

1.2.2 Anmerkungen zur Geschichte

Das Gebiet der Stochastik ist im Wesentlichen erst im 20. Jhdt. entwickelt worden.

Wichtige Vorarbeiten bilden die Kontinuumsmechanik, die mit der Baseler Schule um die Bernoullis (ca. 1700 -1750) zur Theoretischen Physik zählt und um 1750 von Leonard Euler in eine vollendete Form im Rahmen der Newton Dynamik gebracht wurde.

Als Geburtsstunde kann man die Arbeiten von Jean Baptiste Fourier (1807 und 1822) zur Wärmeleitung ansehen.

Die Wärmelehre hielt das Interesse lange gefangen,

-J. Black (1750 /1804 veröffentlicht) Wärme und Temperaturbegriffe

- Rumford (1800) Wärmesubstanz

- Carnot, Watt (ca. 1820) Wärmekraftmaschinen

-Waterston (ca. 1840) Gleichverteilungssatz

-Mayer, Joule, Helmholtz (ca. 1845) Energiesatz,

bis sich die kinetische Gastheorie um ca. 1860 (Clausius, Maxwell, Boltzmann) durchzusetzen begann und statistischen Methoden Raum gab. Die Mathematik für partielle Differentialgleichungen war schon seit ca. 1800 mit Stokes Hydrodynamik und Fouriers Werk und der Elektro- und Magnetostatik (Ampere, Laplace, Gauss) gut vorbereitet.

1865 liegt der 2. Hauptsatz in der Version von Clausius vor.

Der Höhepunkt der Gleichgewichtstatistik liegt ca. 1900 mit dem Werk von Gibbs vor; ebenso die erste Transporttheorie der statistischen Physik von Boltzmann.

Die eigentlichen Highlights der stochastischen Prozesse sind dann

- 1905 Einsteins Beschreibung der Diffusion bei der Brownschen Bewegung
- 1908 Langevin Gleichung
- 1914/17 Fokker-Planck Gleichung
- 1915 Smoluchowski Gleichung = Chapman-Kolmogorov Gleichung von 1920
- 1925 Wiener Prozess, Pfadintegrale
- ca. 1930 Ornstein-Uhlenbeck Prozess
- 1928 Paulis' Master-Gleichung
- 1940-49 Kramers-Moyal Entwicklung
- 1960 Nakajima-Zwanzig Theorie
- 1966 Standardwerk von Stratonowich
- 1976 Standardwerk von van Kampen

1.2.3 Glossar wichtiger Begriffe

Zum besseren Verständnis des Sprachgebrauchs seien hier einige erklärende Erläuterungen für Begriffe angegeben, die meistens als 'bekannt' vorausgesetzt werden. Die Erläuterungen mögen auch den Blick schärfen für das, was Theoretische Physik kann, und was nicht. Der zentrale Begriff in der Theoretischen Physik ist der des physikalischen Systems.

Physikalisches System: Hinreichend identifizierbare Objekte, ihre Eigenschaften und Geschehnisse an ihnen werden als Physikalisches System bezeichnet, wenn dieses mit physikalischen Begriffen beschrieben werden kann, und die Passgenauigkeit dieser Beschreibung im Prinzip empirisch überprüfbar ist.

Bei der Fülle an physikalischen Begriffen haben sich einige Oberbegriffe (Begriffstypen) herausgebildet, die wohl nahezu in jeder Disziplin der Theoretischen Physik und bei jedem physikalischen System zur Anwendung kommen können. Ohne Anspruch auf Vollständigkeit sind diese im Folgenden aufgelistet.

Freiheitsgrade Die als veränderlich eingestuften Eigenschaften eines physikalischen Systems

Parameter als unveränderlich eingestufte Eigenschaften eines physikalischen Systems (bei Erweiterung des Systems durchaus als veränderlich einstuftbar)

Konfigurationsraum Raum der möglichen Werte der als **elementar** eingestuften Freiheitsgrade eines physikalischen Systems (alle anderen sollten daraus ableitbar sein oder nur im Zusammenhang mit ihnen auftreten)

Kinematik Beschreibung aller möglichen Bahnen (d.h. zeitlichen Veränderungen) im Konfigurationsraum

Dynamik Theorie für die Beschreibung der **tatsächlichen** Bahnen im Konfigurationsraum, bei Vorgabe von Bedingungen; meist in der Form von Bewegungsgleichungen mit Anfangsbedingungen

Zustände und Zustandsraum Zustände sind als mögliche Anfangsbedingungen einer Dynamik definiert; stationäre Zustände solche, die sich unter der Dynamik nicht zeitlich verändern. Der ein System vollständig charakterisierende Satz von Zuständen bildet den Zustandsraum, der auch Phasenraum genannt wird.

Observable Abstrakte Beobachtungsgrößen, die formal als Satz von Eigenschaften auftreten, die als Funktionen über dem Zustandsraum definiert sein können, aber generell als Funktionen über **elementaren** Observablen definiert werden. Sie bilden damit eine Algebra (Observablen Algebra)

Messgrößen Von Observablen abgeleitete konkrete Beobachtungsgrößen, die in reellen Zahlen und einer Maßeinheit angegeben werden; es muss für sie eine Messvorschrift bekannt sein, die mit dem physikalischen System konsistent sein muss.

relevante Freiheitsgrade Eine Auswahl von als relevant eingestuften Freiheitsgraden, die meist sehr viel kleiner als die Zahl der elementaren

Freiheitsgrade ist. Der Begriff der 'Relevanz' vererbt sich auf Konfigurationsraum, Zustände, Observable und Messgrößen.

Stochastische Dynamik Theorie der Dynamik auf dem Konfigurationsraum relevanter Freiheitsgrade x bei Vorgabe von Bedingungen und einem **statistischen Ensemble** von Zufallseinflüssen, d.h. es werden viele in zu präzisierender Weise ähnliche Physikalische Systeme zusammen beschrieben, die sich statistisch durch eine einzige stochastische Dynamik beschreiben lassen. Oft wird eine deterministische Gleichung für eine zeitabhängige Verteilungsfunktion $P_t(x)$ die stochastische Dynamik beschreiben. Damit wird $P_t(x)$ auf die begriffliche Ebene eines 'Zustandes' der stochastischen Dynamik gehoben.

Es ist zu beachten, dass die Begriffe nicht als einander ausschließend zu verstehen sind. Zum Beispiel sind Zustände immer auch Freiheitsgrade. Aber sie bilden z.B. in der klassischen Mechanik nicht den Konfigurationsraum eines physikalischen Systems. Observable können in der klassischen Mechanik stets als Funktionen der Zustände (Orte, Impulse) definiert werden, nicht aber in der Quantenmechanik, wo sie als Funktionen elementarer Observabler (Orte, Impulse) definiert werden. In der Quantenmechanik aber bilden nicht alle Orte und Impulse zusammen den Zustandsraum; der Zustandsraum wird vielmehr aus allen Wellenfunktionen (Hilbertraum des Systems) gebildet.

Oft ist auch die Zuordnung der Begriffe nicht frei von Interpretationen, aber die oben angegebenen Definitionen sind in der Regel zutreffend. Zum Beispiel spricht man in der Quantenmechanik oft gar nicht vom Konfigurationsraum. Man kann z.B. den Hilbertraum, der der Zustandsraum der Dynamik ist, auch als Konfigurationsraum auffassen, indem man die Wahrscheinlichkeitsamplituden (Wellenfunktion) als die elementaren Freiheitsgrade ansieht. Man kann aber auch die Gesamtheit der Orte der Teilchen wieder als Konfigurationsraum auffassen und der Begriff der Wahrscheinlichkeitsamplitude taucht erst bei der Bildung der Dynamik auf. Dann sieht man, dass man genauso gut die Impulse den Konfigurationsraum hätte bilden lassen können.

Kapitel 2

Zufallsprozesse und ihre Bewegungsgleichungen

2.1 Zufallsvariablen

2.2 Zufallsprozesse

2.3 Markov Prozesse

2.4 Master Gleichung

2.5 Fokker–Planck Gleichung

2.6 Langevin Gleichung

Kapitel 3

Die Bewegungsgleichungen

3.1 Auftreten der Gleichungen

3.2 Lösungsmethoden

3.3 Laser Physik

3.4 Random Matrix Theorie

3.5 Mesoskopischer Transport

3.6 Life Science

Literaturverzeichnis

[Grossmann] S. Grossmann

[Röpke 1987] G. Röpke, *Statistische Mechanik für das Nichtgleichgewicht*, VEB, 1987.

[Risken 1996] H. Risken, *The Fokker–Planck Equation*, Springer, 1996 3rd edition.

[Honerkamp 1990] J. Honerkamp, *Stochastische Dynamische Systeme*, VCH, 1990.