

Prof. Dr. Andreas Mielke  
Institut für Theoretische Physik  
Universität Heidelberg  
Philosophenweg 19  
69120 Heidelberg  
Germany

<http://www.tphys.uni-heidelberg.de/~mielke/>  
e-mail: [mielke@tphys.uni-heidelberg.de](mailto:mielke@tphys.uni-heidelberg.de)

# Strukturbildung: Phänomene und Modelle

Andreas Mielke

Wintersemester 2007/08  
Zeit: Dienstag, 9-11  
Ort: Philosophenweg 19, Seminarraum

Dieses Script wird fortlaufend ergänzt.

*Copyright ©2002ff Andreas Mielke*

---

## Abstract

Strukturen gibt es überall. Während man einfache Kristallgitter dadurch verstehen kann, daß man die Energie minimiert, benötigt man zum Verständnis dynamischer Strukturen andere Konzepte. Fast überall in der Natur stößt man auf die Bildung komplexer dynamischer Strukturen: Galaxien, Wolken, Kontraktionen des Herzmuskels sind Beispiele, die jeder aus der eigenen Anschauung kennt. Ziel der Vorlesung ist es, zu einem einheitlichen Verständnis dieser verschiedenen Phänomene zu kommen. Wir werden dazu einige dieser Phänomene genauer studieren, einfache Modelle dafür entwickeln und schließlich versuchen, universelle Eigenschaften dieser Modelle zu extrahieren. Die Modelle haben Anwendungen in ganz verschiedenen Bereichen, z.B. Chemie (Brusselator), Biologie (Aktivator-Inhibitor-Modelle), Physik (Rayleigh-Benard Instabilität, Laser). Viele dieser Modelle werden wir außerdem am Computer simulieren, dazu werden auf Wunsch auch Übungen angeboten.

Literatur (nur als Ergänzung zur Vorlesung, nicht als Voraussetzung oder zum Selbststudium):

D. Walgraef, Spatio-Temporal Pattern Formation, Springer-Verlag Berlin, Heidelberg, New York 1996. Eine gute Einführung in das Thema mit vielen Beispielen aus Physik, Chemie und Materialwissenschaften.

H. Haken, Synergetics. Springer-Verlag Berlin, Heidelberg, New York 1978 oder eine neuere Auflage. Als Einführung geeignet.

M. C. Cross, P. C. Hohenberg: Pattern formation outside of equilibrium. Rev. Mod. Phys. 65, 851-1112 (1993). Für Fortgeschrittene eine anspruchsvolle Lektüre.

Für Simulationen z.B. SciLab <http://www.scilab.org/>.

## Hinweise zu diesem Text

Das Manuscript ist in unterschiedlichen Formaten verfügbar. Ich empfehle die Verwendung der pdf-Version und den Acrobat Reader, da an vielen Stellen von den zusätzlichen Möglichkeiten des pdf Gebrauch gemacht wird. Beispielsweise sind alle Verweise innerhalb des Textes aktive Verknüpfungen. Links für Zitate sind dunkelrot, Links auf Textstellen dunkelblau, Links auf http-Adressen dunkelgrün eingefärbt. Diese können sie nutzen, wenn Sie den Acrobat Reader so konfigurieren, daß bei Verweisen auf externe Quellen ein WWW-Browser die entsprechenden Seiten anzeigt.

Das Manuscript wird fortlaufend erweitert und ergänzt.

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>5</b>
<b>2</b>	<b>Nicht-lineare dynamische Systeme</b>	<b>6</b>
2.1	Nicht-lineare dynamische Systeme . . . . .	6
2.1.1	Charakteristika linearer Systeme . . . . .	6
2.1.2	Eindimensionale dynamische Systeme . . . . .	6
2.1.3	Begrenzte Skaleninvarianz . . . . .	7
2.1.4	Bifurkation . . . . .	8
2.1.5	Zweidimensionale Systeme, singuläre Punkte, Grenzzyklen . . . . .	10
2.1.6	Höherdimensionale Systeme . . . . .	12
<b>3</b>	<b>Stochastische Systeme</b>	<b>13</b>
3.1	Stochastische Prozesse auf diskreten Mengen . . . . .	13
3.1.1	Random Walk in einer Dimension . . . . .	14
3.1.2	Random Walk auf einem Graphen . . . . .	16
3.1.3	Spezielle Beispiele . . . . .	19
3.1.3.1	Der dichotome Prozess . . . . .	19
3.1.3.2	Summen dichotomer Prozesse . . . . .	20
3.2	Stochastische Prozesse auf $\mathbb{R}^n$ . . . . .	20
3.2.1	Markovprozesse . . . . .	20
3.2.2	Der dichotome Prozess . . . . .	22
3.2.3	Gaußsche Prozesse . . . . .	23
3.2.4	Der Wiener Prozess . . . . .	28
<b>4</b>	<b>Chemische Reaktionen, Aktivator-Inhibitor-Modelle</b>	<b>30</b>
4.1	Chemische Reaktionen . . . . .	30
4.2	Brüsselator . . . . .	31
4.2.1	Reaktionsgleichungen . . . . .	31
4.2.2	Ratengleichungen für die Reaktion, homogenes System . . . . .	31
4.2.3	Ratengleichungen für die Reaktion, ortsabhängig . . . . .	32
4.3	Die Belousov-Zhabotinsky- Reaktion (BZ-Reaktion) . . . . .	34
4.4	Aktivator-Inhibitor-Modelle . . . . .	36
<b>5</b>	<b>Laser</b>	<b>40</b>
5.1	Photonenmodell des Ein-Moden-Lasers . . . . .	40
5.2	Halbklassische Theorie . . . . .	41

---

5.2.1	Herleitung der Bilanzgleichungen . . . . .	43
5.2.2	Ein-Moden-Laser I . . . . .	44
5.2.3	Ein-Moden-Laser II, adiabatische Näherung . . . . .	45
5.2.4	Mehr-Moden-Laser, adiabatische Näherung . . . . .	46
5.2.5	Grenzen des halbklassischen Modells . . . . .	47
5.3	Quantenmechanisches Modell . . . . .	47
5.3.1	Adiabatische Näherung . . . . .	48
5.3.2	Ein-Moden-Laser . . . . .	49
<b>6</b>	<b>Andere physikalische Systeme</b>	<b>51</b>
6.1	Rayleigh-Benard-Instabilität . . . . .	51
6.2	Taylor-Couette-Strömung . . . . .	51
6.3	Swift-Hohenberg-Gleichung . . . . .	52
<b>7</b>	<b>Rauschinduzierter Transport</b>	<b>53</b>
7.1	Rauschinduzierter Transport . . . . .	53
7.1.1	Feynmans Ratsche . . . . .	53
7.1.2	Motivation der Modelle für rauschinduzierten Transport . . . . .	54
7.1.3	Modelle . . . . .	55
7.1.3.1	fluktuierende oder periodische Kraft . . . . .	55
7.1.3.2	fluktuierendes Potential . . . . .	58
7.1.4	Lösungen . . . . .	59
7.1.4.1	Grenzfälle . . . . .	59
7.1.4.2	Stückweise lineare Potentiale . . . . .	60
7.1.5	Ergebnisse und Diskussion . . . . .	62
7.1.5.1	Ergebnisse für ein fluktuierendes Potential . . . . .	62
7.1.5.2	Ergebnisse für eine additive, fluktuierende Kraft . . . . .	63
7.1.5.3	Ergebnisse für eine additive, periodische Kraft . . . . .	63
7.2	Fluktuierende Barrieren: Rauschinduzierte Stabilität und resonante Aktivierung	64

# 1 Einleitung

Strukturen bilden sich in vielen, unterschiedlichen Systemen. Wir unterscheiden:

1. Strukturen, die sich in Systemen bilden, die sich im thermodynamischen Gleichgewicht befinden,  
z.B. Kristallgitter.
2. Strukturen, die sich in dynamischen Systemen fernab vom thermodynamischen Gleichgewicht bilden.

In dieser Vorlesung betrachten wir die zweite Klasse von Systemen.

Beispiele:

- Physik
  - Laser
  - Rayleigh-Bénard-Instabilität
  - Taylor-Couette-Strömung
- Chemie
  - Belousov-Zhabotinsky-Reaktion
  - Brüsselator
- Biologie
  - Räuber-Beute-Systeme
  - Muster auf Muscheln, Fell des Leopard, des Zebras, der Kuh

Ziel der Vorlesung ist es, ein gemeinsames Verständnis dieser Systeme herauszuarbeiten. Grundlegende Gemeinsamkeiten dieser Systeme:

- Nicht-lineare Kopplungen
- Stochastizität

Siehe auch den Foliensatz zur Einleitung.

## 2 Nicht-lineare dynamische Systeme

### 2.1 Nicht-lineare dynamische Systeme

#### 2.1.1 Charakteristika linearer Systeme

Superpositionsprinzip: Sind  $x_1$  und  $x_2$  Lösungen eines linearen Systems, dann ist auch  $\alpha_1 x_1 + \alpha_2 x_2$  eine Lösung. Berühmte Beispiele: Elektrodynamik, Quantenmechanik.

#### 2.1.2 Eindimensionale dynamische Systeme

Ein dynamisches System oder ein dynamischer Prozeß ist ein System, das durch zeitabhängige Größen  $x(t)$  beschrieben wird.  $x(t)$  kann eine mehrkomponentige Größe sein, die Zeit kann eine kontinuierliche oder diskrete Variable sein. Im ersten Fall wird man die Dynamik typischerweise durch eine Differentialgleichung

$$\frac{dx}{dt} = f(x, t), \quad (2.1)$$

im zweiten Fall durch eine Rekursionsgleichung

$$x(t + \Delta t) = f(x(t), t) \quad (2.2)$$

beschreiben. Wenn  $f$  in diesen Ausdrücken nicht-linear ist, spricht man von einem nicht-linearen System. Wenn  $f$  nicht von  $t$  abhängt, nennt man das System ein autonom. Wir betrachten im folgenden autonome Systeme.

Wir betrachten zunächst einige einfache eindimensionale Beispiele.

**Beispiel:**

$$\frac{dx}{dt} = -ax^\alpha, \quad \alpha > 1, a > 0 \quad (2.3)$$

Superpositionsprinzip gilt nicht. Lösung:

$$\frac{x^{1-\alpha} - x_0^{1-\alpha}}{1-\alpha} = -a(t-t_0) \quad (2.4)$$

$$x = [(\alpha-1)a(t-t_0) + x_0^{1-\alpha}]^{\frac{1}{1-\alpha}} \quad (2.5)$$

$x$  fällt monoton. Für große  $t$  erhält man

$$x = ((\alpha-1)at)^{\frac{1}{1-\alpha}} \quad (2.6)$$

Man erhält also ein universelles Verhalten, daß unabhängig von der Anfangsbedingung ist. Die lineare Gleichung ( $\alpha = 1$ ) hat dagegen die Lösung  $x = x_0 \exp(-\alpha(t - t_0))$ , die für alle  $t$  von der Anfangsbedingung abhängt. Die Lösung der Gleichung mit  $\alpha > 1$  hat für große  $t$  die Eigenschaft:

$$x(\lambda t) = \lambda^{\frac{1}{1-\alpha}} x(t) \quad (2.7)$$

Diese Eigenschaft nennt man Skaleninvarianz oder Affininvarianz. Sie ist typisch für nichtlineare Systeme. Sie tritt in sehr vielen Bereichen in der Natur auf. Ein prototypisches Beispiel ist die Turbulenz.

### 2.1.3 Begrenzte Skaleninvarianz

In der Natur gilt Skaleninvarianz meist nur in bestimmten Parameterbereichen.

**Beispiel:**

$$\frac{dx}{dt} = -ax - bx^3 \quad (2.8)$$

Lösung

$$2a(t - t_0) = \ln \left[ \frac{a + bx^2}{x^2} \frac{x_0^2}{a + bx_0^2} \right] \quad (2.9)$$

Ich setze der Einfachheit halber  $t_0 = 0$ . Ist  $a \gg bx_0^2$ , dann gilt auch  $a \gg bx^2$  und man erhält einen exponentiellen Abfall  $x = x_0 \exp(-at)$ . Ist dagegen  $bx_0^2 \gg a$ , dann gilt das auch noch für nicht zu große  $t$  und man erhält

$$2at = \ln \left[ \frac{1 + \frac{a}{bx^2}}{1 + \frac{a}{bx_0^2}} \right] \approx \frac{a}{bx^2} - \frac{a}{bx_0^2} \quad (2.10)$$

und damit die obige Lösung. Für den Fall  $bx_0^2 \gg a$  erhält man also folgende Bereiche:

$$\begin{array}{ll} 0 \leq t < 1/(2bx_0^2) & \text{Die Lösung hängt von der Anfangsbedingung ab.} \\ 1/(2bx_0^2) < t < 1/(2a) & x \approx (2bt)^{-1/2} \\ 1/(2a) < t & x = \sqrt{a/b} \exp(-at) \end{array}$$

Man erhält in diesem Fall für große  $t$  ein universelles Verhalten, das für  $1/(2bx_0^2) < t < 1/(2a)$  skaleninvariant ist. Ein Bereich mit Skaleninvarianz tritt also nur dann auf, wenn

$$R = \frac{bx_0^2}{a} \gg 1 \quad (2.11)$$

ist. Führt man die dimensionslosen Größen  $\bar{x} = x/x_0$  und  $\bar{t} = tbx_0^2$ , dann erhält man

$$\frac{d\bar{x}}{d\bar{t}} = -\frac{\bar{x}}{R} - \bar{x}^3, \bar{x}(0) = 1 \quad (2.12)$$

Das bedeutet, daß Zeitverläufe zu unterschiedlichen  $a, b, x_0$  ähnlich sind, wenn sie das gleiche  $R$  haben. Solche Ähnlichkeit von Lösungen tritt bei gemischten Systemen mit

linearen und nichtlinearen Anteilen generisch auf. Ein klassisches Beispiel ist die Navier-Stokes Gleichung. Die Größe  $R$  entspricht dort der Reynoldszahl. Systeme mit gleicher Reynoldszahl sind ähnlich, deshalb kann man das Strömungsverhalten an Flugzeugen oder Autos im Windkanal an kleinen Modellen studieren. Ist die Reynoldszahl groß, tritt ein Bereich mit Skalenverhalten auf. Ist  $R < 1$ , dann spielt die Nichtlinearität keine Rolle.

### 2.1.4 Bifurkation

Beispiel:

$$\frac{dx}{dt} = ax - bx^3, a > 0, b > 0 \quad (2.13)$$

Lösung

$$2a(t - t_0) = -\ln \left[ \frac{a - bx^2}{x^2} \frac{x_0^2}{a - bx_0^2} \right] \quad (2.14)$$

Für  $t \rightarrow \infty$  geht  $bx^2 \rightarrow a$ , also  $x \rightarrow \pm\sqrt{a/b}$ . Das asymptotische Verhalten ist ein exponentieller Abfall auf diesen Wert. Während also für  $a < 0$   $x$  nach 0 geht, geht  $x$  gegen einen endlichen Wert für  $a > 0$ . Das ist ein einfaches Beispiel für Bifurkation: In Abhängigkeit von einem Parameter ändert sich das Verhalten des Systems grundlegend.

Das Beispiel macht schon das generelle Vorgehen deutlich. Hat man eine Abbildung der Form

$$\frac{dx}{dt} = f(x, a) \quad (2.15)$$

dann kann man eine Konvergenz gegen  $x_\infty$  erhalten, falls

$$f(x_\infty, a) = 0 \quad (2.16)$$

Diese Gleichung kann natürlich mehrere Lösungen haben. Eine Lösung ist dann stabil, wenn  $x(t)$  gegen  $x_\infty$  konvergiert, sofern der Startwert in einer hinreichend kleinen Umgebung von  $x_\infty$  liegt. Das ist der Fall, wenn  $f'(x_\infty, a) < 0$ . Stabilität hängt von den externen Parametern  $a$  ab. Es muß aber keine Konvergenz geben.

Generell bezeichnet man einen Punkt  $\bar{x}$  als Gleichgewichtspunkte, wenn  $f(\bar{x}) = 0$  gilt. Ist  $f'(\bar{x}) > 0$ , so hat man ein instabiles Gleichgewicht, ist  $f'(\bar{x}) < 0$ , so hat man ein stabiles Gleichgewicht.

Für diskrete Abbildungen

$$x_{n+1} = f(x_n) \quad (2.17)$$

hat man einen Gleichgewichtspunkt bei  $\bar{x}$ , falls

$$\bar{x} = f(\bar{x}) \quad (2.18)$$

Stabilität erhält man, wenn  $|f'(\bar{x})| < 1$ , Instabilität für  $|f'(\bar{x})| > 1$ . Setzt man  $x_n = \bar{x} + \delta_n$ , dann erhält man

$$\delta_{n+1} = f'(\bar{x})\delta_n + O(\delta_n^2) \quad (2.19)$$

und  $\delta_n \rightarrow 0$  für  $|f'(\bar{x})| < 1$ . Wenn das nicht der Fall ist, kann es periodische Lösungen geben. Eine periodische Lösung mit Periode  $p$  ist eine stabile Lösung der Abbildung

$$x_{n+1} = f^p(x_n) = f(f(\dots f(x_n)\dots)) \quad (2.20)$$

mit  $|\frac{d}{dx}f^p(\bar{x})| < 1$ .

**Beispiel: Logistische Abbildung.** Die logistische Abbildung (logistic map) wurde 1977 von Großmann und Thomae als Prototyp für nicht-lineare Dynamik eingeführt. Es handelt sich um die Abbildung

$$x_{n+1} = f(x_n) = rx_n(1 - x_n), \quad 0 < r \leq 4 \quad (2.21)$$

Für  $r < 1$  läuft die Folge  $x_n$  nach  $x_\infty = 0$ . Da  $x_n$  mit steigendem  $n$  immer kleiner wird, erhält man einen asymptotischen Abfall  $x_n \propto r^n$ . Das entspricht dem exponentiellen Zerfall in einer linearen Differentialgleichung. Der asymptotische Wert  $x_\infty = 0$  ist die eine der beiden Lösungen der Gleichung  $x_\infty = f(x_\infty)$ , also

$$x_\infty = rx_\infty(1 - x_\infty) \quad (2.22)$$

Für  $1 < r < 3$  läuft die Folge  $x_n$  auf den zweiten Fixpunkt zu, also  $x_\infty = 1 - \frac{1}{r}$ . Ist dieser Fixpunkt stabil? Stabilität erhält man, wenn  $|f'(x_\infty)| < 1$ . Setzt man  $x_n = x_\infty + \delta_n$ , dann erhält man

$$\delta_{n+1} = f'(x_\infty)\delta_n + O(\delta_n^2) \quad (2.23)$$

und  $\delta_n \rightarrow 0$  für  $|f'(x_\infty)| < 1$ . Es gilt  $f'(x_\infty) = r(1 - 2x_\infty) = r(-1 + 2/r) = 2 - r$ . Für  $r = r_1 = 3$  wird der Fixpunkt instabil und es treten zwei neue Fixpunkte auf. Man findet sie als Lösung der Gleichung

$$x_\infty = f(f(x_\infty)). \quad (2.24)$$

Dies ist eine Gleichung vierten Grades, zwei Lösungen sind die bereits bekannten, die weiteren beiden sind

$$x_{\infty\pm} = \frac{1}{2} + \frac{1}{2r} \pm \frac{1}{2r} \sqrt{r^2 - 2r - 3} \quad (2.25)$$

Es gilt  $f(x_{\infty+}) = x_{\infty-}$ , so daß die Abbildung zwischen diesen beiden Werten oszilliert. Diese beiden Fixpunkte sind bis zu  $r_2$  stabil.  $r_2$  berechnet man, indem man wieder  $x_n = x_{\infty+} + \delta_n$  setzt. Dann gilt

$$\delta_{n+2} = f'(f(x_\infty))f'(x_\infty)\delta_n \quad (2.26)$$

und die Folge der  $\delta_n$  konvergiert nach 0 falls  $|f'(f(x_\infty))f'(x_\infty)| < 1$ . Danach tritt wieder eine Verdopplung auf, die entsprechenden Werte erhält man aus  $x_\infty = f(f(f(f(x_\infty))))$  und so fort. Wenn  $r > r_\infty = 3,5699\dots$  ist, wird das System chaotisch. Genauer erhält man folgende Szenarien:

1.  $0 < r < 1$ : Exponentieller Zerfall nach  $x_\infty = 0$ . Für  $r = 1$  bricht der exponentielle Zerfall zusammen.
2.  $1 < r < 2$ : Exponentieller Zerfall nach  $x_\infty = 1 - \frac{1}{r}$ .

3.  $2 < r < 3$ : Exponentieller Zerfall mit alternierendem Vorzeichen nach  $x_\infty = 1 - \frac{1}{r}$ . Das läßt sich einfach zeigen, indem man  $x_n = x_\infty + \delta_n$  setzt und linearisiert. Die Linearisierung bricht bei  $r = 3$  zusammen.
4.  $3 < r < 3.57$ : Kaskade von Zyklen der Periode  $2^n$ . Mit wachsendem  $r$  wird  $n$  größer.
5.  $3.57 < r < 3.82$ : Bereich mit abwechselnd chaotischen und periodischem Verhalten mit sehr langen Perioden.
6.  $3.83 < r < 3.85$ : Ein Bereich mit Periode 3 und anschließenden Periodenverdopplungen für  $3.842 < r < 3.85$ , als Perioden  $3 \times 2^n$ .
7.  $3.85 < r < 4$ : Chaotisches Verhalten mit kleinen periodischen Bereichen mit hoher Periode  $k$  und Periodenverdopplungen  $k \times 2^n$ .
8.  $r = 4$ : Vollständig chaotisches Verhalten.  $x$  nimmt alle Werte zwischen 0 und 1 an.

Die exakte Lösung für  $r = 4$  ist

$$x_n = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \cos(2^n \arccos(1 - 2x_0)) \quad (2.27)$$

Anwendungen in vielen Bereichen, z.B. Populationsdynamik.

### 2.1.5 Zweidimensionale Systeme, singuläre Punkte, Grenzzyklen

In einem eindimensionalen System treten nur (stabile oder instabile) Fixpunkte auf. In einem zweidimensionalen System gibt es mehr Möglichkeiten.

Ein zweidimensionales System wird wie ein eindimensionales durch die Gleichung (2.1) beschrieben, mit dem Unterschied, daß  $x$  und  $f$  Werte aus  $\mathbb{R}^2$  annehmen. Wir betrachten im folgenden wie oben schon autonome Systeme.

In einem zweidimensionalen System kann man die Trajektorien, auf denen sich das System bewegt, aus der Gleichung

$$\frac{dx_2}{dx_1} = \frac{f_2(x_1, x_2)}{f_1(x_1, x_2)} \quad (2.28)$$

bestimmen. Einen Punkt im Phasenraum, an dem  $f(x) = 0$  gilt, nennt man singulären Punkt. Wenn alle Trajektorien auf so einen Punkt zeigen, ist es ein stabiler Punkt, wenn alle davon wegzeigen, ein instabiler Punkt. Daneben gibt es weitere Möglichkeiten.

Im folgenden nehmen wir der Einfachheit halber an, daß ein singulärer Punkt bei  $x = 0$  liegt. Wir entwickeln um diesen Punkt. In linearer Ordnung gilt

$$\frac{dx}{dt} = Ax \quad (2.29)$$

wobei  $A$  eine reelle  $2 \times 2$ -Matrix ist. Die Eigenschaften des Punktes können aus den Spektraleigenschaften der Matrix gewonnen werden. Seien  $\lambda_i$  die Eigenwerte und  $\bar{x}_i$  die zugehörigen rechten Eigenvektoren. Man kann dann  $x = \xi_1 \bar{x}_1 + \xi_2 \bar{x}_2$  setzen und erhält

$$\frac{d\xi_i}{dt} = \lambda_i \xi_i \quad (2.30)$$

Folgende Fälle können unterschieden werden:

1. Beide Eigenwerte sind reell.
  - a) Beide Eigenwerte sind negativ: Stabiler Punkt.
  - b) Beide Eigenwerte sind positiv: Instabiler Punkt.
  - c) Ein Eigenwert positiv, einer negativ: Sattelpunkt.
2. Die Eigenwerte sind komplex. Da die Matrix reell ist, sind die Eigenwerte konjugiert komplex,  $\lambda_1 = \lambda_2^*$ . In diesem Fall gilt

$$\xi_{1,2} = \xi_{1,2}(0) \exp(at \pm i\omega t). \quad (2.31)$$

- a)  $a < 0$ : Stabiler Fokus. Die Trajektorien laufen spiralförmig in den Punkt hinein.
- b)  $a > 0$ : Instabiler Fokus. Die Trajektorien laufen spiralförmig von dem Punkt weg.
- c)  $a = 0$ : Zentrum. Die Trajektorien laufen kreisförmig um den Punkt.

Neben singulären Punkten können Grenzzyklen auftreten. Ein Grenzzyklus ist eine geschlossene Trajektorie, auf die andere Trajektorien zulaufen.

### Beispiel: Van der Pol Oszillator

Die Bewegungsgleichung des Van der Pol Oszillators lautet

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \mu(1-x^2)\frac{dx}{dt} + x = 0. \quad (2.32)$$

$x = 0, \frac{dx}{dt} = 0$  ist ein singulärer Punkt. Wir betrachten zunächst die Umgebung dieses Punktes. Wir setzen  $v = \frac{dx}{dt}$ . Die linearisierte Gleichung lautet

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} x \\ v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & -\mu \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ v \end{pmatrix}. \quad (2.33)$$

Die Eigenwerte sind  $\lambda_{1,2} = -\frac{\mu}{2} \pm \sqrt{\frac{\mu^2}{4} - 1}$ . Wir können folgende Fallunterscheidung treffen:

1.  $\mu > 0$ : Das ist der gedämpfte Fall, der singuläre Punkt ist ein stabiler Fokus. Die Eigenwerte haben einen negativen Realteil.
2.  $\mu = 0$ : Das ist der normale, klassische Oszillator. Der singuläre Punkt ist ein Zentrum.
3.  $\mu < 0$ : Der singuläre Punkt ist ein instabil.

Wir betrachten jetzt die selbe Gleichung für große  $x$ . Dann gilt asymptotisch  $\frac{dx}{dt} = \frac{1}{\mu x}$  und damit  $x^2 = \frac{2t}{\mu} + x_0^2$ . Für  $\mu < 0$  nimmt der Betrag von  $x$  also ab. Wir haben also für  $\mu < 0$  eine Situation, in der für große  $x$  alle Trajektorien für kleine  $x$  nach außen, für große  $x$  nach innen laufen. Das ist die Situation, in der es einen Grenzzyklus gibt.

Allgemeiner ist das die Aussage des *Poincaré-Bendixson-Theorems*. Wenn es im Phasenraum zwei geschlossene Kurven gibt, durch die innere Kurve alle Trajektorien von innen nach außen laufen und durch die äußere von außen nach innen, dann gibt es einen Grenzzyklus zwischen beiden Kurven.

### **2.1.6 Höherdimensionale Systeme**

Höherdimensionale Systeme können in ähnlicher Weise behandelt werden. Neben Fixpunkten und Grenzyklen können natürlich noch weitere Effekte auftreten. Ich verzichte hier auf eine detaillierte Diskussion höherdimensionaler Systeme. Die Vorgehensweise ist analog zu dem bisher gezeigten.

# 3 Stochastische Systeme

## 3.1 Stochastische Prozesse auf diskreten Mengen

Diskrete stochastische dynamische Systeme sind Folgen von Zahlen, die sich aus einer Regel ergeben, wobei die Regel stochastisch ist. Die Dynamik läuft dann auf diskreten Zeitschritten  $t = m\Delta t$ ,  $m \in \mathbb{N}$ . Sie lassen sich z.B. durch Rekursionsgleichungen von dem Typ

$$x_{t+\Delta t} = f(x_t, z_t, t) \tag{3.1}$$

beschreiben, wobei der zusätzliche Parameter  $z_t$  eine Folge von Zufallszahlen ist. In diesem Abschnitt betrachten wir stochastische Prozesse auf diskreten Mengen,  $x_t$  nimmt also nur diskrete Werte an. Die Wertemenge bezeichnen wir mit  $V$ . Ein einfaches Beispiel wäre  $V = \mathbb{Z}$ .

Allgemein können stochastische Prozesse durch bedingte Wahrscheinlichkeiten von dem Typ

$$p(x_t = x | x_{t_1} = x'_1, x_{t_2} = x'_2, \dots) \tag{3.2}$$

mit  $t > t_1 > t_2 > \dots$  beschrieben werden.  $p(A|B)$  ist die bedingte Wahrscheinlichkeit für das Auftreten des Ereignisses  $A$  (hier  $x_t = x$ ) unter der Voraussetzung, daß vorher das Ereignis  $B$  aufgetreten ist.

Der einfachste Fall ist der, in dem die Zufallsvariable  $x_t$  nicht von vorangegangenen Zeitpunkten abhängt, die Zufallsvariablen  $x_t$  für verschiedene  $t$  also unabhängig verteilt sind. Man spricht dann von einem vollständig zufälligen Prozess.

Einen kontinuierlichen stochastischen Prozess erhält man im Limes  $\Delta t \rightarrow 0$ . Dann wird  $x$  eine Funktion  $x(t)$ . Auch in diesem Fall kann man den Prozess durch bedingte Wahrscheinlichkeiten

$$p(x(t_n) = x | x(t_{n-1}) = x_{n-1}, x(t_{n-2}) = x_{n-2}, \dots), t_n > t_{n-1} > t_{n-2} > \dots \tag{3.3}$$

beschreiben. Für einen Markovprozess gilt dann

$$p(x(t_n) = x | x(t_{n-1}) = x_{n-1}, x(t_{n-2}) = x_{n-2}, \dots) = p(x(t_n) = x | x(t_{n-1}) = x_{n-1}) \tag{3.4}$$

In dieser Vorlesung werden wir fast ausschließlich Markovprozesse behandeln.

Zur vollständigen Beschreibung eines Prozesses benötigen wir zusätzlich die unbedingte Wahrscheinlichkeit  $p(x(t) = x)$ . Allerdings sind diese Wahrscheinlichkeiten nicht unabhängig. Folgende zwei Eigenschaften müssen erfüllt sein (hier formuliert für kontinuierliche Prozesse und für die Wahrscheinlichkeitsdichten)

$$p(x(t) = x) = \sum_{x' \in V} p(x(t) = x | x(t') = x') p(x(t') = x'), t > t' \tag{3.5}$$

$$p(x(t) = x | x(t_0) = x_0) = \sum_{x' \in V} p(x(t) = x | x(t') = x') p(x(t') = x' | x(t_0) = x_0) \quad t > t' > t_0 \quad (3.6)$$

Diese Gleichung heißt Chapman-Kolmogorov-Gleichung.

Im folgenden verwende ich die Notation  $p(x, t) = p(x(t) = x)$ .

In einem späteren Abschnitt der Vorlesung und in diesem Abschnitt in einem Beispiel werden wir den Übergang zum Kontinuum vornehmen. Im Kontinuumsmites kann  $x(t)$  Werte aus einer kontinuierlichen Menge, z.B.  $\mathbb{R}$  annehmen.

### 3.1.1 Random Walk in einer Dimension

Lineare Kette,  $x \in \mathbb{Z}$ . Diskrete Zeit  $t = m\Delta t$ ,  $m \in \mathbb{N}$ .

$p(x, t)$  ist die Wahrscheinlichkeit, ein Teilchen zur Zeit  $t$  am Ort  $x$  zu finden.  $w(x \pm 1, x)$  sind Übergangswahrscheinlichkeiten für Übergänge von  $x$  nach  $x \pm 1$ ,  $w(x+1, x) + w(x-1, x) = 1$ .

Dynamik

$$p(x, t + \Delta t) = w(x, x-1)p(x-1, t) + w(x, x+1)p(x+1, t) \quad (3.7)$$

$$\frac{p(x, t + \Delta t) - p(x, t)}{\Delta t} = r(x, x-1)p(x-1, t) + r(x, x+1)p(x+1, t) - r(x-1, x)p(x, t) - r(x+1, x)p(x, t) \quad (3.8)$$

$r(x \pm 1, x) = \frac{w(x \pm 1, x)}{\Delta t}$  sind Übergangsraten.

Übergang zu kontinuierlicher Zeit  $\lim \Delta t \rightarrow 0$ .

$$\frac{dp(x, t)}{dt} = r(x, x-1)p(x-1, t) + r(x, x+1)p(x+1, t) - r(x-1, x)p(x, t) - r(x+1, x)p(x, t) \quad (3.9)$$

Das ist die Master-Gleichung für diesen Prozess.

**Beispiel:**  $w(x, x \pm 1) = \frac{1}{2}$ . Startwert  $p(x, 0) = \delta_{x,0}$ .

$$p(x, t | x(0) = 0) = 2^{-t/\Delta t} \binom{t/\Delta t}{t/(2\Delta t) + x/2} \quad (3.10)$$

Kontinuumsmites (Vorgriff auf späteren Abschnitt): Ersetze  $x$  durch  $x/\Delta x$  und betrachte kleine  $\Delta x$ . Verwende Stirlingsche Formel

$$(x/\Delta x)! = \left(\frac{x}{e\Delta x}\right)^{\frac{x}{\Delta x}} \sqrt{2\pi \frac{x}{\Delta x}} \quad (3.11)$$

und entwickle nach  $\Delta x$ ,  $\Delta t$  wobei  $D = \frac{\Delta x^2}{\Delta t}$  festgehalten wird. Dann gilt

$$p(x, t | x(0) = 0) = \frac{2}{\sqrt{2\pi}} \frac{\sqrt{t/\Delta t}}{\sqrt{t/\Delta t + x/\Delta x} \sqrt{t/\Delta t - x/\Delta x}}$$

$$\begin{aligned}
& \exp\left(\frac{t}{\Delta t} \ln \frac{t}{2\Delta t} - \frac{1}{2}\left(\frac{t}{\Delta t} + \frac{x}{\Delta x}\right) \ln\left(\frac{t}{2\Delta t} + \frac{x}{2\Delta x}\right)\right. \\
& \quad \left. - \frac{1}{2}\left(\frac{t}{\Delta t} - \frac{x}{\Delta x}\right) \ln\left(\frac{t}{2\Delta t} - \frac{x}{2\Delta x}\right)\right) \\
&= \frac{2}{2\sqrt{2\pi}} \sqrt{\frac{\Delta t}{t}} \exp\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{t}{\Delta t} + \frac{x}{\Delta x}\right) \ln\left(1 + \frac{x\Delta t}{t\Delta x}\right)\right. \\
& \quad \left. - \frac{1}{2}\left(\frac{t}{\Delta t} - \frac{x}{\Delta x}\right) \ln\left(1 - \frac{x\Delta t}{t\Delta x}\right)\right) \\
&= \frac{2\Delta x}{\sqrt{2\pi D t}} \exp\left(-\frac{x^2}{2Dt}\right) \tag{3.12}
\end{aligned}$$

Im Kontinuumsimes wird aus der Wahrscheinlichkeit eine Wahrscheinlichkeitsdichte. Ich setze  $p(x, t|x(0) = 0) = \rho(x, t)dx$  und  $dx = 2\Delta x$ , dann gilt

$$\rho(x, t)dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi D t}} \exp\left(-\frac{x^2}{2Dt}\right)dx \tag{3.13}$$

Die Ersetzung  $dx = 2\Delta x$  kommt daher, daß im diskreten Fall, wenn man bei 0 startet, für ungerade Zeiten immer nur ungerade, für gerade Zeiten immer nur gerade  $x$  erreicht werden. Das ist die Brownsche Bewegung. Der Übergang kann auch in der Mastergleichung durchgeführt werden. Dazu setzt man

$$r(x, x \pm \Delta x) = \frac{1}{2\Delta t} \tag{3.14}$$

$$p(x \pm \Delta x, t) = p(x, t) \pm \Delta x \frac{\partial p(x, t)}{\partial t} + \frac{1}{2}\Delta x^2 \frac{\partial^2 p(x, t)}{\partial x^2} \tag{3.15}$$

und erhält

$$\frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} = \frac{\Delta x^2}{2\Delta t} \frac{\partial^2 \rho(x, t)}{\partial x^2} = \frac{D}{2} \frac{\partial^2 \rho(x, t)}{\partial x^2} \tag{3.16}$$

Das ist die Diffusionsgleichung in einer Dimension. Man überzeugt sich leicht, daß (3.13) die Lösung der Diffusionsgleichung mit der Anfangsbedingung  $\rho(x, 0) = \delta(x)$  ist. Die allgemeine Lösung ist dann

$$\rho(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi D t}} \int dx' \rho(x', 0) \exp\left(-\frac{(x-x')^2}{2Dt}\right) \tag{3.17}$$

**Aufgabe** Schreiben Sie ein Programm in scilab, daß einen Randomwalk in einer Dimension mit  $w(x, x \pm 1) = \frac{1}{2}$ . Startwert  $p(x, 0) = \delta_{x,0}$  simuliert. Plotten Sie das Histogramm der Verteilung von  $N$  Teilchen als Funktion der Zeit.

Ein wichtiger Aspekt, der später immer wieder vorkommt, ist das detaillierte Gleichgewicht. Sie hängt mit der Frage zusammen, welche Bedingungen eine stationäre Lösung der Mastergleichung erfüllen muß.

In einer stationären Lösung muß der Wahrscheinlichkeitsstrom von  $x$  nach  $x + 1$  gleich dem Wahrscheinlichkeitsstrom von  $x + 1$  nach  $x$  sein. Es muß also

$$r(x + 1, x)p(x) = r(x, x + 1)p(x + 1) \quad (3.18)$$

für alle  $x$  gelten. Diese Bedingung heißt detailliertes Gleichgewicht. Sie ist eine hinreichende Bedingung für die Existenz einer stationären Lösung  $p(x)$  der Mastergleichung. Sie ist aber keine notwendige Bedingung.

**Beispiel:** Random Walk auf einem Kreis der Länge  $L$ ,  $V = \mathbb{N} \bmod L$ . Setzt man  $r(x + 1, x) = r, r(x - 1, x) = 0$  und führt man periodische Randbedingungen ein  $p(x + L, t) = p(x, t)$  ein. Dann ist  $p(x) = \frac{1}{L}$  eine stationäre Lösung der Master-Gleichung. Detailliertes Gleichgewicht gilt für diesen Fall nicht.

### 3.1.2 Random Walk auf einem Graphen

Mastergleichungen kommen in viel allgemeinerer Form vor. Wir betrachten in diesem Abschnitt ein System, das verschiedene Zustände annehmen kann. Die Menge der Zustände sei  $V$ . Die Dynamik des Systems ist durch Übergangsraten  $r(x, y)$   $x, y \in V$  beschrieben, die Übergänge von  $y$  nach  $x$  charakterisieren. Die Mastergleichung lautet dann

$$\frac{dp(x, t)}{dt} = \sum_{y \in V} r(x, y)p(y, t) - \sum_y r(y, x)p(x, t) \quad (3.19)$$

Führt man den linearen Operator  $L$  ein, der die Matricelemente  $L_{xy} = r(x, y)$  für  $x \neq y$ ,  $L_{xx} = -\sum_{y \neq x} r(y, x)$  enthält, dann kann diese Gleichung in der Form

$$\frac{dp}{dt} = Lp \quad (3.20)$$

geschrieben werden. Wegen  $\sum_x L_{xy} = 0$  hat  $L$  mindestens einen Eigenwert 0. Es gibt also mindestens eine stationäre Lösung.

Wir betrachten  $V$  als Vertexmenge eines Graphen  $G(L) = (V(L), E(L))$  mit

$$E(L) = \{(x, y) : x, y \in V, L_{y,x} > 0\} \quad (3.21)$$

Die Kanten von  $G$  sind gerichtet.

In diesem Abschnitt sollen folgende Fragen geklärt werden:

1. Welche Eigenschaften hat das Spektrum von  $L$ ?
2. Wann gibt es genau eine stationäre Lösung?
3. Wann gilt detailliertes Gleichgewicht?
4. Wie kann die stationäre Lösung konstruiert werden?

$L$  ist keine symmetrische Matrix, wir unterscheiden deshalb zwischen linken und rechten Eigenvektoren.

$$L\phi^{(i)} = \lambda_i \phi^{(i)} \quad (3.22)$$

$$\xi^{(i)}L = \lambda_i \xi^{(i)} \quad (3.23)$$

Die Eigenwerte sind so sortiert, daß  $\Re\lambda_0 \geq \Re\lambda_1 \geq \dots$ . Für die Eigenvektoren gilt

$$(\xi^{(i)}, \phi^{(j)}) = \sum_{x \in V} \xi^{(i)}(x) \phi^{(j)}(x) = \delta_{i,j} \quad (3.24)$$

Wichtige Eigenschaften zum Spektrum von  $L$  ergeben sich daraus, daß die außerdiagonalen Matrixelemente nicht-negativ sind. Sei

$$m = \sup \{-L_{xx}, x \in V\} \quad (3.25)$$

und  $M = L + mI$ , wobei  $I$  die Einheitsmatrix ist.  $M$  hat nur nicht-negative Matrixelemente, wir können also das Perron-Frobenius-Theorem anwenden. Damit gilt

1.  $\lambda_0 + m \in \mathbb{R}$ ,  $\lambda_0 + m > 0$
2. Ist  $G(L)$  verbunden, dann ist  $\lambda_0 + m$  ein einfacher Eigenwert.
3. Die Elemente  $\phi^{(0)}(x)$  haben alle das gleiche Vorzeichen.
4. Die Elemente  $\xi^{(0)}(x)$  haben alle das gleiche Vorzeichen.

Wir wissen weiter, daß ein  $\xi^{(0)}$  mit  $\xi^{(0)}(x) = 1$  ein linker Eigenvektor zum Eigenwert  $m$  von  $M$  ist. Wegen 4. und (3.24) ist das ein Eigenvektor zu  $\lambda_0 + m$ .

Wir nehmen im folgenden oBdA an, daß  $G(L)$  verbunden ist. Dann hat  $L$  genau einen Eigenvektor  $\phi^{(0)}$  zum Eigenwert  $\lambda^{(0)} = 0$ , es gilt  $\phi^{(0)}(x) \geq 0$  und wegen (3.24)  $\sum_x \phi^{(0)}(x) = 1$ . Das ist die stationäre Lösung von (3.20).

Die formale Lösung (3.20) für eine Anfangsbedingung  $p(x, 0)$  ist

$$p(x, t) = \exp(tL)p(x, 0) \quad (3.26)$$

Wir zerlegen  $L = D + R$ ,  $D$  ist der Diagonalteil von  $L$ ,  $R$  der Außerdiagonalteil. Dann gilt

$$p(x, t) = \lim_{n \rightarrow \infty} (\exp(\frac{t}{n}R) \exp(\frac{t}{n}D))^n p(x, 0) \quad (3.27)$$

Für den Anfangswert gilt  $p(x, 0) \geq 0$ .  $\exp(\frac{t}{n}D)$  ist eine diagonale Matrix mit nicht-negativen Einträgen,  $\exp(\frac{t}{n}R)$  ist wie  $R$  eine Matrix mit nicht-negativen Einträgen, also gilt auch  $p(x, t) \geq 0$ . Weiter kann man  $p(x, 0) = \phi^{(0)}(x) + q(x, 0)$  schreiben, dann gilt  $p(x, t) = \phi^{(0)}(x) + q(x, t)$ , wobei  $(\xi^{(0)}, q(t)) = 0$  für alle  $t \geq 0$ . Damit folgt

$$(\xi^{(0)}, p(t)) = \sum_{x \in V} p(x, t) = 1 \quad (3.28)$$

für alle  $t \geq 0$ . Wir haben also gezeigt, daß die Lösung der Mastergleichung nicht-negativ und normiert ist, wenn die Anfangsbedingung diese Eigenschaft hat.

Als nächstes wollen wir annehmen, daß für die stationäre Lösung detailliertes Gleichgewicht gilt, d.h.

$$r(x,y)\phi^{(0)}(y) = r(y,x)\phi^{(0)}(x) \quad (3.29)$$

Klar ist, daß wenn ein Vektor diese Eigenschaft hat, es sich um  $\phi^{(0)}$  handelt. Unklar ist zunächst, unter welchen Bedingungen das gilt. Ein Gegenbeispiel hatten wir oben bereits gezeigt.

Wir betrachten jetzt die Matrix  $\tilde{L}$  mit den Elementen

$$\tilde{L}_{x,y} = (\phi^{(0)}(x))^{-1/2} L_{x,y} (\phi^{(0)}(y))^{1/2} \quad (3.30)$$

Wegen (3.29) ist  $\tilde{L}$  symmetrisch, hat also nur reelle Eigenwerte. Da  $\tilde{L}$  und  $L$  ähnliche Matrizen sind, hat damit auch  $L$  nur reelle Eigenwerte. Die Eigenwerte von  $L$  sind also bis auf den Eigenwert  $\lambda^{(0)} = 0$  alle negativ. Detailliertes Gleichgewicht gilt genau dann, wenn  $\tilde{L}$  symmetrisch ist.

Reelle Eigenwerte von  $L$  sind eine notwendige, aber keine hinreichende Bedingung für detailliertes Gleichgewicht, denn  $L$  und  $\tilde{L}$  können reelle Eigenwerte auch dann haben, wenn  $\tilde{L}$  nicht symmetrisch ist.

Führt man die Matrix  $D = \text{diag}\phi^{(0)}$  ein, dann kann man den stationären Wahrscheinlichkeitsstrom als Matrix  $J = RD - DR^t$  schreiben.

(3.29) erlaubt eine einfache Konstruktion der stationären Lösung. Wir wählen als Ausgangspunkte einen Vertex 0 des Graphen aus. Sei  $w = (y_0, y_1, y_2, \dots, y_n)$  ein beliebiger Weg (d.h. eine Folge benachbarter Vertices) von  $y_0 = 0$  nach  $y_n = x$ , dann gilt

$$\phi^{(0)}(x) = \prod_{i=0}^{n-1} \frac{r(y_{i+1}, y_i)}{r(y_i, y_{i+1})} \phi^{(0)}(0) \quad (3.31)$$

Gibt es kein detailliertes Gleichgewicht, läßt sich die Lösung ebenfalls konstruieren. Wir verwenden dazu das Kirchhoffsche Gesetz aus der Graphentheorie. Wir benötigen dazu den Begriff eines aufspannenden Baumes  $T(G)$ . Das ist ein Untergraph von  $G$ , der die gleiche Vertexmenge hat wie  $G$ , verbunden ist und keinen Kreis (d.h. keinen geschlossenen Weg) enthält. Da wir einen gerichteten Graphen betrachten, ist auch  $T(G)$  gerichtet. Seien jetzt  $T_x^{(i)}$  alle Bäume, deren Kanten Richtung  $x$  zeigen. Für jeden Baum sei  $R(T_x^{(j)}) = \prod_{(y,z) \in T_x^{(j)}} r(z,y)$ . Weiter sei  $S_x = \sum_j R(T_x^{(j)})$ . Dann gilt

$$\phi^{(0)}(x) = \frac{S_x}{\sum_{y \in V} S_y} \quad (3.32)$$

Für den Beweis verweisen wir auf Standardlehrbücher der Graphentheorie.

**Beispiel:** Ein Kreis der Länge  $L$  mit  $r(x+1,x) > 0$ ,  $r(x,x+1) = 0$ ,  $x \in \mathbb{N} \text{ mod } L$ . Sei ferner  $R = \prod_x r(x+1,x)$ . Es gibt für jeden Vertex genau einen Baum  $T_x$  und es gilt  $S_x = R/r(x,x-1)$ . Dann gilt

$$\phi^{(0)}(x) = \frac{r(x,x-1)^{-1}}{\sum_y r(y+1,y)^{-1}} \quad (3.33)$$

Sind alle  $r(x+1,x) = r$  so folgt  $\phi^{(0)}(x) = 1/L$ .

Die Lösung der Mastergleichung (3.20) kann nach den rechten Eigenfunktionen von  $L$  entwickelt werden. Es gilt

$$p(t) = \sum_i (\xi^{(i)}, p(0)) \exp(\lambda_i t) \phi^{(i)}$$

Damit ist sofort klar, daß  $p(t)$  im Limes  $t \rightarrow \infty$  gegen die stationäre Lösung  $\phi^{(0)}$  konvergiert.

### 3.1.3 Spezielle Beispiele

#### 3.1.3.1 Der dichotome Prozess

Der dichotome Prozess ist ein stochastischer Prozess  $z(t)$ , der nur zwei Werte annimmt,  $z_1$  und  $z_2$ . Die Übergangsraten seien  $r_{12}$  und  $r_{21}$ . Dann gilt

$$L = \begin{pmatrix} -r_{21} & r_{12} \\ r_{21} & -r_{12} \end{pmatrix} \quad (3.34)$$

Die Eigenzustände und Eigenwerte sind

$$\phi^{(0)} = \frac{1}{r_{12} + r_{21}} \begin{pmatrix} r_{12} \\ r_{21} \end{pmatrix}, \xi^{(0)} = (1, 1), \lambda_0 = 0 \quad (3.35)$$

$$\phi^{(1)} = \frac{1}{r_{12} + r_{21}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}, \xi^{(1)} = (r_{21}, -r_{12}), \lambda_1 = -\frac{1}{r_{12} + r_{21}} \quad (3.36)$$

Sehr häufig bezeichnet man als dichotomen Prozess des Spezialfall  $z_1 = -z_2 = z_0$  und  $r_{12} = r_{21} = (2\tau)^{-1}$ . Wir betrachten im folgenden diesen Spezialfall, die Verallgemeinerung ist einfach.

Für die Wahrscheinlichkeitsverteilung gilt  $p(t) = \exp(tL)p(0)$  mit

$$\exp(tL) = \phi^{(0)} \xi^{(0)} + \exp(-t/\tau) \phi^{(1)} \xi^{(1)} \quad (3.37)$$

$$= \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} + \exp(-\frac{t}{\tau}) \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \quad (3.38)$$

$$= \exp(-\frac{t}{2\tau}) \begin{pmatrix} \cosh \frac{t}{2\tau} & \sinh \frac{t}{2\tau} \\ \sinh \frac{t}{2\tau} & \cosh \frac{t}{2\tau} \end{pmatrix} \quad (3.39)$$

und damit

$$p(z(t) = \pm z_0 | z(0) = z_0) = \frac{1}{2} (1 \pm \exp(-\frac{t}{\tau})) \quad (3.40)$$

$$p(z(t) = \pm z_0, z(0) = z_0) = \frac{1}{4} (1 \pm \exp(-\frac{t}{\tau})) \quad (3.41)$$

oder allgemeiner

$$p(z(t) = \pm z(t')) = \frac{1}{2} (1 \pm \exp(-\frac{t-t'}{\tau})), \quad t \geq t'. \quad (3.42)$$

Damit ist

$$\langle z(t) z(0) \rangle = \exp(-\frac{t}{\tau}) \quad (3.43)$$



für dessen Beschreibung verwenden. Für einen Markovprozess gilt dann

$$p(x(t_n) \in A | x(t_{n-1}) = x_{n-1}, x(t_{n-2}) = x_{n-2}, \dots) = p(x(t_n) \in A | x(t_{n-1}) = x_{n-1}) \quad (3.47)$$

Neben dieser bedingten Wahrscheinlichkeit benötigt man zur vollständigen Beschreibung des Prozesses noch die Wahrscheinlichkeit

$$p(x(t) \in A) \quad (3.48)$$

Allerdings sind diese Wahrscheinlichkeiten nicht unabhängig. Folgende zwei Eigenschaften müssen erfüllt sein (hier formuliert für kontinuierliche Prozesse und für die Wahrscheinlichkeitsdichten)

$$\rho(x(t) = x) = \int dx' \rho(x(t) = x | x(t') = x') \rho(x(t') = x'), t > t' \quad (3.49)$$

$$\rho(x(t) = x | x(t_0) = x_0) = \int dx' \rho(x(t) = x | x(t') = x') \rho(x(t') = x' | x(t_0) = x_0) t > t' > t_0 \quad (3.50)$$

Diese Gleichung heißt Chapman-Kolmogorov-Gleichung.

In den meisten Fällen werden wir stationäre Prozesse betrachten. Für stationäre Prozesse hängt  $\rho(x(t) = x)$  nicht von  $t$  und  $\rho(x(t) = x | x(t') = x')$  nur von  $\Delta t = t - t'$  ab. Für kleine  $\Delta t$  gilt

$$\rho(x(t + \Delta t) = x | x(t) = x') = (1 - r(x')\Delta t)\delta(x - x') + \Delta t r(x|x') + o(\Delta t) \quad (3.51)$$

wobei  $r(x|x')$  die Übergangsrate und

$$r(x') = \int dx r(x|x') \quad (3.52)$$

die Zerfallsrate ist. Damit findet man

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \Delta t} \rho(x(t + \Delta t) = x | x(t) = x') &= \int dx'' r(x|x'') \rho(x(t + \Delta t) = x'' | x(t) = x') \\ &\quad - \int dx'' r(x''|x') \rho(x(t + \Delta t) = x | x(t) = x') \end{aligned}$$

Dies ist die differentielle Version der Chapman-Kolmogorov-Gleichung für stationäre Prozesse, die Mastergleichung. Die diskrete Form hatten wir im vorangehenden Abschnitt kennengelernt. Die Mastergleichung ist von der Form

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(x(t) = x | x(t') = x') = L \rho(x(t) = x | x(t') = x') \quad (3.53)$$

Der Operator  $L$  ist die Erzeugende des (stationären) Markovprozesses. Für einen stationären Prozess hängt  $L$  nicht explizit von  $t$  ab. Entwickelt man in dieser Gleichung nach  $\Delta x = x - x'$ , dann erhält man statt der Integro-Differential Gleichung eine partielle Differentialgleichung von unendlicher Ordnung. Diese Entwicklung heißt Kramers-Moyal Entwicklung. Sie ist von der Form

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(x(t) = x | x(t') = x') = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial x^n} [a_n(x) \rho(x(t) = x | x(t') = x')] \quad (3.54)$$

Die Koeffizienten heißen Kramers-Moyal Koeffizienten. Die rechte Seite ist nur eine andere Darstellung von  $L$ . Häufig bricht man diese Gleichung nach der zweiten Ordnung ab, und in vielen Fällen ist diese Näherung exakt. Die resultierende Gleichung ist die Fokker-Planck Gleichung. Ich verzichte hier auf eine Herleitung der Kramers-Moyal Entwicklung und verweise statt dessen auf das Buch von Risken [?].

Für Markovprozesse, bei denen  $x(t)$  nicht kontinuierlich ist, sondern z.B. nur diskrete Werte annimmt, ist  $L$  kein Differential- oder Integraloperator, sondern eine Matrix. Diesen Fall haben wir bereits diskutiert. Viele Eigenschaften für Prozesse auf diskreten Mengen können auf den kontinuierlichen Fall erweitert werden.

Für die Fälle, in denen die Entwicklung bis zweiter Ordnung exakt ist, nennt man den Prozess einen Diffusionsprozess. Das gilt auch entsprechend für Verallgemeinerungen in höheren Dimensionen.

**Beispiel** Der einfache Diffusionsprozeß genügt der Diffusionsgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(x(t) = x | x(t') = x') = D \frac{\partial^2}{\partial x^2} \rho(x(t) = x | x(t') = x') \quad (3.55)$$

wobei  $a_2(x) = D$  ist.  $D$  ist die Diffusionskonstante.

**Aufgabe** Simuliere einen Diffusionsprozeß in zwei Dimensionen mit periodischen Randbedingungen.

### 3.2.2 Der dichotome Prozess

Den dichotomen Prozess haben wir bereits kennengelernt. Wir leiten hier einige bereits bekannte Eigenschaften aus einer anderen Perspektive ein zweites Mal ab.

Der dichotome Prozess ist ein einfaches Beispiel für einen kontinuierlichen stochastischen Prozess auf einer diskreten Menge. Er kann direkt aus einem diskreten Prozess auf einer kontinuierlichen Menge konstruiert werden. Ausgangspunkt ist eine Folge von Zeitintervallen mit zufällig verteilter Länge

$$\Delta t_i, \quad \rho_i(\Delta t_i) = \rho(\Delta t_i), \quad i \geq 1 \quad (3.56)$$

mit

$$\rho(\Delta t) = \frac{1}{2\tau} \exp\left(-\frac{\Delta t}{2\tau}\right) \theta(\Delta t). \quad (3.57)$$

Diese Folge ist ein diskreter Zufallsprozeß auf  $\mathbb{R}_+$ . Aus dieser Folge von Zeitintervallen erhält man eine Folge von Zeitpunkten

$$t_n = \sum_{i=1}^n \Delta t_i + t_0. \quad (3.58)$$

Damit setzen wir

$$z(t) = \begin{cases} z(t_0) & \text{falls } t_{2n} \leq t \leq t_{2n+1}, n \geq 0 \\ -z(t_0) & \text{falls } t_{2n+1} \leq t \leq t_{2n+2}, n \geq 0. \end{cases} \quad (3.59)$$

Der Einfachheit halber wählen wir  $z(t_0) = \pm 1$  mit gleicher Wahrscheinlichkeit und  $t_0 = 0$ . Damit gilt  $\langle z(t) \rangle = 0$ .  $z(t)$  ist ein kontinuierlicher stochastischer Prozess, seine Eigenschaften ergeben sich vollständig aus dem diskreten stochastischen Prozess  $\Delta t_i$ . Wir berechnen zunächst die Wahrscheinlichkeit  $p(t_{n-1} < t < t_n)$ . Es gilt

$$p(t_{n-1} < t < t_n) = \langle \theta(t_n - t) \theta(t - t_{n-1}) \rangle \quad (3.60)$$

$$= \int_0^\infty \prod_{i=1}^n dx_i \exp(-\sum_{i=1}^n x_i) \theta(\sum_{i=1}^n x_i - \frac{t}{2\tau}) \theta(\frac{t}{2\tau} - \sum_{i=1}^{n-1} x_i) \quad (3.61)$$

$$= \exp(-\frac{t}{2\tau}) \int_0^\infty \prod_{i=1}^{n-1} dx_i \theta(\frac{t}{2\tau} - \sum_{i=1}^{n-1} x_i) \quad (3.62)$$

$$= \frac{1}{(n-1)!} (\frac{t}{2\tau})^{n-1} \exp(-\frac{t}{2\tau}). \quad (3.63)$$

Die Normierung ist

$$\sum_{n=1}^{\infty} p(t_{n-1} < t < t_n) = 1. \quad (3.64)$$

Damit erhält man

$$\langle z(t)z(0) \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} p(t_{2n} < t < t_{2n+1}) - \sum_{n=0}^{\infty} p(t_{2n+1} < t < t_{2n+2}) \quad (3.65)$$

$$= \exp(-\frac{t}{2\tau}) \left[ \cosh(\frac{t}{2\tau}) - \sinh(\frac{t}{2\tau}) \right] \quad (3.66)$$

$$= \exp(-\frac{t}{\tau}). \quad (3.67)$$

In gleicher Weise berechnet man

$$p(z(t) = \pm z(t')) = \frac{1}{2} (1 \pm \exp(-\frac{t-t'}{\tau})), \quad t \geq t'. \quad (3.68)$$

Das sind genau die bedingten Wahrscheinlichkeiten, die wir auch im letzten Abschnitt auf ganz andere Weise hergeleitet haben.

### 3.2.3 Gaußsche Prozesse

Wir haben bereits eine Summe dichotomer Prozesse

$$z^{(N)}(t) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=1}^N z_i(t) \quad (3.69)$$

eingeführt.  $z^{(N)}(t)$  nimmt die diskreten Werte  $z_i = \frac{N-2i}{\sqrt{N}}$ ,  $i = 0, \dots, N$  an, wobei

$$p(z^{(N)}(t) = z_i) = \frac{1}{2^N} \binom{N}{i} \quad (3.70)$$

gilt. Jedes  $z^{(N)}(t)$  ist also binomialverteilt. Für den Prozess  $z(t) = \lim_{N \rightarrow \infty} z^{(N)}(t)$  erhält man damit

$$p(z(t) < z) = \int_{-\infty}^z \frac{dz'}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{z'^2}{2}\right). \quad (3.71)$$

$z(t)$  ist also ein kontinuierlicher stochastischer Prozess, der normalverteilte Werte annimmt. Da  $p(z(t) < z)$  nicht von  $t$  abhängt, nennt man den Prozess stationär, wie den dichotomen Prozess auch. Wegen

$$\langle z_i(t) z_j(0) \rangle = \delta_{i,j} \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) \quad (3.72)$$

für die dichotomen Prozesse  $z_i(t)$  gilt

$$\langle z(t) z(0) \rangle = \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) \quad (3.73)$$

Die Eigenschaften dieses Prozesses wollen wir jetzt näher untersuchen. Sie lassen sich aus der bedingten Wahrscheinlichkeit

$$p(z(t) < z | z(0) = z') \quad (3.74)$$

berechnen. Um diese Größe zu berechnen, betrachten wir zunächst den Prozess  $z^{(N)}(t)$  für endliche  $N$ . Er setzt sich aus einzelnen dichotomen Prozessen zusammen. Für einen dichotomen Prozess hatten wir gezeigt, daß

$$p(t_n < \Delta t < t_{n+1}) = \frac{1}{n!} \left(\frac{\Delta t}{\tau}\right)^n \exp\left(-\frac{\Delta t}{\tau}\right) \quad (3.75)$$

gilt, das ist die Wahrscheinlichkeit, daß ein dichotomer Prozess im Zeitintervall  $\Delta t$   $n$  Sprünge gemacht hat. Die Wahrscheinlichkeit, daß ein dichotomer Prozess nach dem Zeitintervall  $\Delta t$  einen anderen Zustand hat als zu Beginn ist demnach

$$\bar{p} = \sum_{n=0}^{\infty} p(t_{2n+1} < \Delta t < t_{2n+2}) = \exp\left(-\frac{\Delta t}{2\tau}\right) \sinh\left(\frac{\Delta t}{2\tau}\right) \quad (3.76)$$

Für den Prozess  $z^{(N)}(t)$  nehmen wir für den Anfangszustand an, daß  $\bar{N}_{\pm}$  ( $\bar{N}_{+} + \bar{N}_{-} = N$ ) dichotome Prozesse  $z_i(t)$  im Zustand  $\pm 1$  sind und berechnen die Wahrscheinlichkeit dafür, daß ein Endzustand mit  $N_{\pm}$  dichotome Prozesse den Zustand  $\pm 1$  haben. Sei  $\Delta N = N_{+} - \bar{N}_{+} = \bar{N}_{-} - N_{-}$ . Um den Endzustand zu erreichen müssen folgende Änderungen auftreten:

- $n_{+} = \Delta N + n$  dichotome Prozesse ändern ihren Zustand von  $-1$  nach  $+1$ .
- $n_{-} = n$  dichotome Prozesse ändern ihren Zustand von  $+1$  nach  $-1$ .
- $N - 2n - |\Delta N|$  dichotome Prozesse ändern ihren Zustand nicht.

Dabei gilt  $\max(0, -\Delta N) \leq n \leq \min(N_{-} - \Delta N, N_{+})$ . Die Wahrscheinlichkeit für den Übergang ist damit

$$\sum_{n_{+}=0}^{\bar{N}_{+}} \sum_{n_{-}=0}^{\bar{N}_{-}} \binom{\bar{N}_{+}}{n_{+}} \bar{p}^{n_{+}} (1 - \bar{p})^{\bar{N}_{+} - n_{+}} \binom{\bar{N}_{-}}{n_{-}} \bar{p}^{n_{-}} (1 - \bar{p})^{\bar{N}_{-} - n_{-}} \delta_{n_{+} - n_{-}, \Delta N} \quad (3.77)$$

Im Limes  $\Delta t \rightarrow \infty$  wird  $\bar{p} = \frac{1}{2}$  und der Ausdruck geht gegen die Binominalverteilung, wird also unabhängig vom Anfangszustand. Für endliche  $\Delta t$  werten wir die Summen im Limes großer  $N$  aus. Dazu setzen wir

$$\bar{N}_{\pm} = \frac{N}{2} \pm \frac{\sqrt{N}}{2} z' \quad (3.78)$$

$$N_{\pm} = \frac{N}{2} \pm \frac{\sqrt{N}}{2} z \quad (3.79)$$

$$\Delta N = \frac{\sqrt{N}}{2} (z - z') = \frac{\sqrt{N}}{2} \Delta z \quad (3.80)$$

und erhalten

$$p(z^{(N)}(t) = z | z^{(N)}(t') = z') = \sum_n \binom{\frac{N}{2} + \frac{\sqrt{N}}{2} z'}{\frac{n}{2} + \frac{\sqrt{N}}{4} \Delta z} \binom{\frac{N}{2} - \frac{\sqrt{N}}{2} z'}{\frac{n}{2} - \frac{\sqrt{N}}{4} \Delta z} \bar{p}^n (1 - \bar{p})^{N-n} \quad (3.81)$$

$$\approx \int dn \exp(f(n)) \quad (3.82)$$

Der Übergang von der Summe zum Integral kann für große  $N$  durchgeführt werden. Außerdem kann man die Fakultäten durch

$$N! \approx \sqrt{2\pi N} N^N \exp(-N) \quad (3.83)$$

nähern. Damit erhält man

$$f(n) = n \ln \bar{p} + (N - n) \ln(1 - \bar{p}) - \ln 2\pi \quad (3.84)$$

$$- \left( \frac{N}{2} + \frac{\sqrt{N}}{2} z' - \frac{n}{2} - \frac{\sqrt{N}}{4} \Delta z \right) \ln \left( 1 - \frac{\frac{n}{2} + \frac{\sqrt{N}}{4} \Delta z}{\frac{N}{2} + \frac{\sqrt{N}}{2} z'} \right) \quad (3.85)$$

$$- \left( \frac{n}{2} + \frac{\sqrt{N}}{4} \Delta z \right) \ln \left( \frac{\frac{n}{2} + \frac{\sqrt{N}}{4} \Delta z}{\frac{N}{2} + \frac{\sqrt{N}}{2} z'} \right) \quad (3.86)$$

$$- \left( \frac{N}{2} - \frac{\sqrt{N}}{2} z' - \frac{n}{2} + \frac{\sqrt{N}}{4} \Delta z \right) \ln \left( 1 - \frac{\frac{n}{2} - \frac{\sqrt{N}}{4} \Delta z}{\frac{N}{2} - \frac{\sqrt{N}}{2} z'} \right) \quad (3.87)$$

$$- \left( \frac{n}{2} - \frac{\sqrt{N}}{4} \Delta z \right) \ln \left( \frac{\frac{n}{2} - \frac{\sqrt{N}}{4} \Delta z}{\frac{N}{2} - \frac{\sqrt{N}}{2} z'} \right) \quad (3.88)$$

$$+ \frac{1}{2} \ln \left( \frac{\left( \frac{N}{2} + \frac{\sqrt{N}}{2} z' \right) \left( \frac{N}{2} - \frac{\sqrt{N}}{2} z' \right)}{\left( \frac{N}{2} + \frac{\sqrt{N}}{2} z' - \frac{n}{2} - \frac{\sqrt{N}}{4} \Delta z \right) \left( -\frac{\sqrt{N}}{2} z' - \frac{n}{2} + \frac{\sqrt{N}}{4} \Delta z \right) \left( \frac{n}{2} + \frac{\sqrt{N}}{4} \Delta z \right) \left( \frac{n}{2} - \frac{\sqrt{N}}{4} \Delta z \right)} \right) \quad (3.89)$$

$$\approx N \ln \frac{N}{2} + \frac{1}{2} z'^2 - n \ln \frac{n}{2} - \frac{N \Delta z^2}{8n} - (N - n) \ln \frac{N - n}{2} - \frac{N(z' + \frac{\Delta z}{2})^2}{2(N - n)} \quad (3.90)$$

$$+ \ln \frac{N}{(N - n)n} + n \ln \bar{p} + (N - n) \ln(1 - \bar{p}) - \ln 2\pi \quad (3.91)$$

Der zweite Ausdruck entsteht, wenn man im ersten Ausdruck  $n = O(N)$  annimmt und bis  $O(N^0)$  entwickelt. Wir verwenden diesen Ausdruck, um das Integral über  $n$  mit Hilfe einer Sattelpunkt-näherung zu berechnen. Es gilt

$$f'(n) = -\ln \frac{n}{2} + \frac{N\Delta z^2}{8n^2} + \ln \frac{N-n}{2} - \frac{N(z' + \frac{\Delta z}{2})^2}{2(N-n)^2} + \frac{1}{N-n} - \frac{1}{n} + \ln \bar{p} - \ln(1-\bar{p}) \quad (3.92)$$

$$f''(n) = -\frac{1}{n} - \frac{N\Delta z^2}{4n^3} - \frac{1}{N-n} - \frac{N(z' + \frac{\Delta z}{2})}{(n-n)^3} + \frac{1}{(N-n)^2} + \frac{1}{n^2} \quad (3.93)$$

Die Bedingung  $f'(n) = 0$  liefert in führender Ordnung  $n = N\bar{p}$ . Die weiteren Ordnungen liefern nur Beiträge  $O(\frac{1}{N})$  zu  $f_{\max}$ . Man erhält (bis auf Terme  $O(\frac{1}{N})$ ) oder niedriger

$$f(N\bar{p}) = -\ln(N\bar{p}(1-\bar{p})) - \ln(2\pi) - \frac{(2\bar{p}z' + \Delta z)^2}{8\bar{p}(1-\bar{p})} \quad (3.94)$$

$$f''(N\bar{p}) = -\frac{1}{N\bar{p}(1-\bar{p})} \quad (3.95)$$

und damit

$$\int dn \exp(f(n)) \approx \sqrt{\frac{2\pi}{|f''(N\bar{p})|}} \exp(f(N\bar{p})) \quad (3.96)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi N\bar{p}(1-\bar{p})}} \exp\left(-\frac{(z - (1-2\bar{p})z')^2}{8\bar{p}(1-\bar{p})}\right) \quad (3.97)$$

Beachtet man  $dz = N^{-1/2}$ , dann findet man im Limes  $N \rightarrow \infty$

$$\rho(z(t) = z | z(t') = z') dz = \frac{1}{\sqrt{2\pi(1-\exp(-2\Delta t/\tau))}} \exp\left(-\frac{(z - \exp(-\Delta t/\tau)z')^2}{2(1-\exp(-2\Delta t/\tau))}\right) dz \quad (3.98)$$

Auch dies ist eine Gaußverteilung. Wir haben es also wieder mit einem zentralen Grenzwertsatz zu tun, der hier als Summe von dichotomen Prozessen einen Gaußschen Prozess liefert.

Der Vollständigkeit halber erwähnen wir, daß  $\rho(z(t) = z | z(t') = z')$  die Lösung der Gleichung

$$\tau \frac{\partial \rho(z(t) = z | z(t') = z')}{\partial t} = \left( \frac{\partial}{\partial z} z + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \rho(z(t) = z | z(t') = z') \quad (3.99)$$

mit der Anfangsbedingung  $\rho(z(t') = z | z(t') = z') = \delta(z - z')$  ist. Diese Gleichung beschreibt also die Dynamik der Verteilungsfunktion. Die Erzeugende für diesen Prozess ist also

$$L = \frac{1}{\tau} \left( \frac{\partial}{\partial z} z + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \quad (3.100)$$

Wir können jetzt die spektralen Eigenschaften von  $L$  diskutieren. Dazu führen wir

$$\tilde{L} = \exp\left(\frac{1}{4}z^2\right) L \exp\left(-\frac{1}{4}z^2\right) \quad (3.101)$$

$$= \frac{1}{\tau} \left( \frac{1}{2} - \frac{z^2}{4} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \quad (3.102)$$

$\tilde{L}$  ist bis auf ein Vorzeichen der Hamiltonoperator des quantenmechanischen harmonischen Oszillators, mit den Eigenfunktionen

$$f_n(z) \propto H_n\left(\frac{z}{\sqrt{2}}\right) \exp\left(-\frac{1}{4}z^2\right) \quad (3.103)$$

Damit erhält man sofort das Spektrum und die linken und rechten Eigenfunktionen von  $L$ :

$$\lambda_n = -\frac{n}{\tau}, n = 0, 1, \dots \quad (3.104)$$

$$\xi^{(n)}(z) = H_n\left(\frac{z}{\sqrt{2}}\right) \quad (3.105)$$

$$\phi^{(n)}(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}2^n n!} H_n\left(\frac{z}{\sqrt{2}}\right) \exp\left(-\frac{1}{2}z^2\right) \quad (3.106)$$

Der Prozess  $z(t)$  heißt auch Ornstein-Uhlenbeck Prozess und hat eine wichtige physikalische Bedeutung, z.B. für die Theorie der Brownschen Bewegung. Es handelt sich um einen Diffusionsprozess. Wir kommen später darauf genauer zurück; hier sei aber schon erwähnt, daß  $z(t)$  die Rolle von  $\frac{v(t)}{\sqrt{\langle v^2 \rangle}}$  spielt, wobei  $v(t)$  die Geschwindigkeit des Brownschen Teilchens ist. Das motiviert uns dazu, neben  $z(t)$  auch den Prozess  $x(t) = \int_0^t dt' z(t')$  zu diskutieren. Dieser Prozess ist als Integral eines Gaußschen Prozesses wieder ein Gaußscher Prozess. Wir müssen also die ersten beiden Momente berechnen, um die Verteilungsfunktion zu bestimmen. Es gilt

$$\langle x(t) \rangle = \left\langle \int_0^t dt' z(t') \right\rangle \quad (3.107)$$

$$= \int_0^t dt' \int dz z \rho(z(t') = z | z(0) = z_0) \quad (3.108)$$

$$= \tau z_0 (1 - \exp(-t/\tau)) \quad (3.109)$$

und

$$\langle x(t)^2 \rangle = \int_0^t dt' \int_0^t dt'' \langle z(t') z(t'') \rangle \quad (3.110)$$

$$= 2 \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \int dz z z' \rho(z(t') = z | z(t'') = z') \rho(z(t'') = z' | z(0) = z_0) \quad (3.111)$$

$$= 2t\tau + \tau^2(1 - \exp(-t/\tau))^2 - \tau^2(3 - 4\exp(-t/\tau) + \exp(-2t/\tau)) \quad (3.112)$$

Sei  $\sigma_x^2(t) = \langle x(t)^2 \rangle - \langle x(t) \rangle^2$ . Dann gilt

$$\rho(x(t) = x | x(0) = 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_x^2(t)}} \exp\left(-\frac{(x - \langle x(t) \rangle)^2}{2\sigma_x^2(t)}\right) \quad (3.113)$$

### 3.2.4 Der Wiener Prozess

In vielen Anwendungen, in denen ein dynamisches System durch einen Rauschprozess gestört wird, ist die charakteristische Zeitskala  $\tau$ , die Korrelationen des Rauschens beschreibt, klein verglichen mit Zeitskalen, die das dynamische System selbst charakterisieren. In solchen Fällen kann man den Limes  $\tau \rightarrow 0$  durchführen. Dabei sind aber einige Besonderheiten zu beachten. Für die bisher diskutierten stochastischen Prozesse ist dieser Limes nicht ohne weiteres durchführbar. Ein einfacher, aber sehr wichtiger Fall, in dem der Limes ohne Schwierigkeiten durchführbar ist, ist der Prozess

$$W(t) = \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{x(t)}{\sqrt{2\tau}} \quad (3.114)$$

wobei  $x(t) = \int_0^t dt' z(t')$  das im vorangegangenen Abschnitt diskutierte Integral eine Ornstein-Uhlenbeck-Prozesses ist. Aus den Eigenschaften von  $x(t)$  erhält man

$$\langle W(t) \rangle = 0 \quad (3.115)$$

$$\langle W(t)^2 \rangle = t \quad (3.116)$$

und damit

$$\rho(W(t) = w, W(0) = 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi t}} \exp\left(-\frac{w^2}{2t}\right) \quad (3.117)$$

Die zugehörige Differentialgleichung, deren Lösung diese Wahrscheinlichkeitsdichte ist, ist

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(W(t) = w, W(0) = 0) = \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial w^2} \rho(W(t) = w, W(0) = 0) \quad (3.118)$$

Der Wiener Prozess ist also auch ein Diffusionsprozess mit der Erzeugenden

$$L = \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial w^2} \quad (3.119)$$

Für den Wiener Prozess gilt

$$p(|W(t + \Delta t) - W(t)| > \Delta w) = \int_{\Delta w}^{\infty} dw \frac{2}{\sqrt{2\pi\Delta t}} \exp\left(-\frac{w^2}{2\Delta t}\right) \quad (3.120)$$

und damit

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} p(|W(t + \Delta t) - W(t)| > \Delta w) = 0 \quad \forall \Delta w > 0 \quad (3.121)$$

Der Wiener Prozess ist also (mit Wahrscheinlichkeit 1) stetig. Andererseits gilt

$$p\left(\frac{|W(t + \Delta t) - W(t)|}{\Delta t} > \Delta w\right) = \int_{\Delta w\Delta t}^{\infty} dw \frac{2}{\sqrt{2\pi\Delta t}} \exp\left(-\frac{w^2}{2\Delta t}\right) \quad (3.122)$$

und damit

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} p\left(\frac{|W(t + \Delta t) - W(t)|}{\Delta t} > \Delta w\right) = 1 \quad \forall \Delta w > 0 \quad (3.123)$$

so daß der Wiener Prozess  $W(t)$  nirgendwo differenzierbar ist. Andererseits gilt  $\dot{x}(t) = z(t)$ . Führt man formal

$$\eta(t) = \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{z(t)}{\sqrt{2\tau}} \quad (3.124)$$

ein (das suggeriert  $\dot{W}(t) = \eta(t)$ ), dann findet man

$$\langle \eta(t) \rangle = 0 \quad (3.125)$$

$$\langle \eta(t)\eta(t') \rangle = \delta(t-t') \quad (3.126)$$

und die zweite Gleichung zeigt, daß  $\langle \eta(t)^2 \rangle$  nicht existiert. Trotzdem kann man mit dem Wiener Prozess und in einem formalen Sinn mit seiner Ableitung rechnen. Dazu benötigt man allerdings ein spezielles Verfahren.

# 4 Chemische Reaktionen, Aktivator-Inhibitor-Modelle

## 4.1 Chemische Reaktionen

Kurze Diskussion zur Beschreibung der Dynamik chemischer Reaktionen.

Wir betrachten eine einfache Reaktion von dem Typ



wobei  $A, B, C, D$  die reagierenden Moleküle und  $a, b, c, d$  die zugehörigen stöchiometrischen Koeffizienten sind. Beispiel



Die Reaktionsgeschwindigkeit einer chemischen Reaktion ist

$$r = \frac{1}{c} \frac{dC}{dt} = \frac{1}{d} \frac{dD}{dt} = -\frac{1}{a} \frac{dA}{dt} = -\frac{1}{b} \frac{dB}{dt} \quad (4.3)$$

wobei ich die Konzentrationen der Moleküle wie die Moleküle bezeichne,  $A$  ist in der chemischen Reaktion das Molekül, in der mathematischen Gleichung die Konzentration des Moleküls. Die Reaktionsgeschwindigkeit für die Hinreaktion ist

$$r = k_1 A^a B^b \quad (4.4)$$

wobei  $k_1$  eine Konstante ist, die nicht von den Konzentrationen, aber von anderen Parametern (Temperatur, etc.) abhängt. Für die Rückreaktion gilt entsprechend

$$r = k_2 C^c D^d \quad (4.5)$$

Sind beide gleich, hat man ein Gleichgewicht, die Konzentrationen ändern sich dann nicht mehr, und es gilt

$$\frac{C^c D^d}{A^a B^b} = K \quad (4.6)$$

Das ist das Massenwirkungsgesetz. Wenn man ein homogenes System hat (z.B. durch Rühren), dann genügt das für die Beschreibung. In einem inhomogenen System kommt noch die Diffusion der Moleküle dazu.

## 4.2 Brüsselator

Der Brüsselator ist ein einfaches Modell zur Beschreibung chemischer Oszillatoren. Der Brüsselator wurde von Ilya Prigogine und René Lefever an der Université Libre de Bruxelles in Belgien entwickelt, daher auch der Name.

Es handelt sich um ein einfaches System von vier Reaktionsgleichungen, die zwar chemisch sinnlos sind, aber ein einfaches Modell bilden, das alle Phänomene von chemischen Oszillatoren (wie der Belousov-Zhabotinsky-Reaktion) wiedergeben.

### 4.2.1 Reaktionsgleichungen



mit festen Konzentrationen für  $A, B, D, E$  und variablen Konzentrationen für  $X$  und  $Y$ . Die Konzentrationen bezeichnen wir wie die Moleküle.

### 4.2.2 Ratengleichungen für die Reaktion, homogenes System

Die Reaktionskonstanten der vier Reaktionsgleichungen bezeichne ich mit  $k_i$  für die Hinreaktion,  $k'_i$  für die Rückreaktion. Die Raten der vier Gleichungen sind dann

$$r_1 = k_1 A - k'_1 X \quad (4.11)$$

$$r_2 = k_2 B X - k'_2 Y D \quad (4.12)$$

$$r_3 = k_3 Y X^2 - k'_3 X^3 \quad (4.13)$$

$$r_4 = k_4 X - k'_4 E \quad (4.14)$$

Damit gilt (zunächst ohne Diffusion)

$$\frac{dX}{dt} = r_1 - r_2 + r_3 - r_4 \quad (4.15)$$

$$\frac{dY}{dt} = r_2 - r_3 \quad (4.16)$$

Ich setze  $k_1 A + k'_4 E = \tilde{A}$ ,  $k'_1 + k_4 = 1$ ,  $k_2 B = \tilde{B}$ ,  $k'_2 D = 0$ ,  $k_3 = 1$ ,  $k'_3 = 0$  und lasse anschließend die Tilden weg. Konkreter: Alle Reaktionen laufen nur nach rechts, also  $k'_i = 0$ , und die Gleichungen werden so skaliert, daß  $k_i = 1$ . Dann gilt

$$\begin{aligned} \frac{dX}{dt} &= A - (B + 1)X + X^2 Y \\ \frac{dY}{dt} &= BX - X^2 Y \end{aligned}$$

Das ist ein einfaches nicht-lineares System. Wir können uns mit den Methoden für nicht-lineare Systeme sehr schnell einen Überblick verschaffen. Die einzelnen Schritte dazu sind:

1. Wo liegen Fixpunkte?
2. Sind die Fixpunkte stabil?
  - a) Lineare Entwicklung um den Fixpunkt.
  - b) Eigenwerte der zugehörigen linearen Abbildung bestimmen.

Ein Fixpunkt dieser Gleichungen ist  $X = A, Y = B/A$ .

Entwicklung um diesen Punkt:

$$x = X - A \quad (4.17)$$

$$y = Y - B/A \quad (4.18)$$

Damit gilt

$$\frac{dx}{dt} = (B - 1)x + A^2y + O(x^2, xy, x^2y) \quad (4.19)$$

$$\frac{dy}{dt} = -Bx - A^2y + O(x^2, xy, x^2y) \quad (4.20)$$

Die Matrix

$$\begin{pmatrix} B-1 & A^2 \\ -B & -A^2 \end{pmatrix} \quad (4.21)$$

hat für  $B < B_c = A^2 + 1$  zwei komplexe Eigenwerte mit negativem Realteil, der Fixpunkt ist also stabil. Für  $(A + 1)^2 > B > A^2 + 1$  sind die Eigenwerte komplex mit positivem Realteil, für  $B > (A + 1)^2$  positiv reell. In diesen Fällen ist der Fixpunkt instabil. Die Simulation liefert in diesen Fällen einen Grenzzyklus.

### Simulation in SciLab

Eine Instabilität, bei der ein System aus einem stabilen Fixpunkt durch Variation eines Parameters in einen Grenzzyklus übergeht, heißt *Hopf-Bifurkation*, benannt nach Heinz Hopf (\* 19. November 1894 in Gräbschen bei Breslau, † 3. Juni 1971 in Zollikon, Schweiz. Pionier der algebraischen Topologie.).

### 4.2.3 Ratengleichungen für die Reaktion, ortsabhängig

Bisher haben wir den homogenen Fall betrachtet. Es gab keine Ortsabhängigkeit. Das kann man in der Chemie einfach durch Rühren erreichen. Wir betrachten jetzt zusätzlich Diffusion der Moleküle X und Y. Die Kinetik ist dann durch das Gleichungssystem

$$\frac{\partial X}{\partial t} = A - (B + 1)X + X^2Y + D_X \nabla^2 X, \quad (4.22)$$

$$\frac{\partial Y}{\partial t} = BX - X^2Y + D_Y \nabla^2 Y \quad (4.23)$$

gegeben. Wir linearisieren wieder um den (homogenen) Fixpunkt. Für die Stabilität im ortsabhängigen Fall müssen wir den Operator

$$L = \begin{pmatrix} B - 1 + D_X \nabla^2 & A^2 \\ -B & -A^2 + D_Y \nabla^2 \end{pmatrix} \quad (4.24)$$

untersuchen. Fouriertransformiert:

$$L = \begin{pmatrix} B - 1 - D_X q^2 & A^2 \\ -B & -A^2 - D_Y q^2 \end{pmatrix} \quad (4.25)$$

Die Eigenwertgleichung ist

$$\lambda^2 + \alpha \lambda + \beta = 0 \quad (4.26)$$

$$\alpha = (D_X q^2 + D_Y q^2 + A^2 - B + 1) \quad (4.27)$$

$$\beta = (1 - B + D_X q^2)(A^2 + D_Y q^2) + A^2 B \quad (4.28)$$

Fallunterscheidung:

- Zwei reelle Lösung  $\alpha^2 - 4\beta > 0$ 
  - Beide negativ  $\sqrt{(\alpha^2 - 4\beta)} - \alpha < 0$ . Das ist der Fall, wenn  $\alpha > 0$  und  $\beta > 0$ .
  - Einer positiv  $\sqrt{(\alpha^2 - 4\beta)} - \alpha > 0$ . Das ist der Fall, wenn  $\alpha < 0$  oder  $\beta < 0$
- Zwei komplexe Lösungen  $\alpha^2 - 4\beta < 0$ 
  - Realteil negativ  $\alpha > 0$
  - Realteil positiv  $\alpha < 0$ .

Stabilität des Fixpunkts falls  $\alpha > 0$  und  $\beta > 0$ , also

$$B < (D_X + D_Y)q^2 + A^2 + 1 \quad (4.29)$$

$$B < \frac{(A^2 + D_Y q^2)(1 + D_X q^2)}{D_Y q^2} \quad (4.30)$$

Die rechte Seite der ersten Ungleichung wird minimal für  $q = 0$ . Das liefert Stabilität für  $B < B_c = A^2 + 1$  wie im homogenen Fall. Wir müssen aber die zweite Ungleichung auch erfüllen.

Die rechte Seite der zweiten Ungleichung wird minimal für  $q^2 = q_c^2 = \frac{A}{\sqrt{D_X D_Y}}$ . Für diesen Wert von  $q$  muß  $B < B_{c2} = (1 + A\sqrt{\frac{D_X}{D_Y}})^2$  sein. Wenn  $B_{c2} < B_c$  ist, tritt also eine neue Instabilität für endliche Werte von  $q$  auf. Diese Instabilität tritt nur dann auf, wenn  $\frac{D_X}{D_Y}$  hinreichend klein ist.

Instabilitäten dieser Art, die bei endlichem  $q$  auftreten, heißen *Turing-Instabilitäten*. Da  $q$  endlich ist, entsteht ein räumliches Muster.

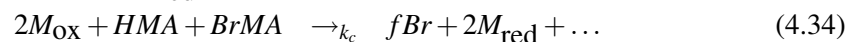
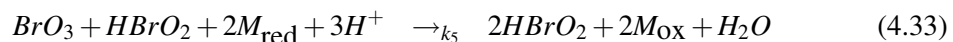
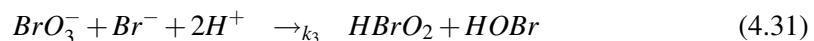
**Simulation** in SciLab

**Bemerkungen** zu der Simulation: Da ein endliches System simuliert wird, gibt es eine Konkurrenz zwischen den  $q$ -Werten, die sich aus der Turing-Instabilität ergeben, und den  $q$ -Werten, die durch die Randbedingungen (es wurden periodische Randbedingungen verwendet) zugelassen sind.

#### Alan Turing

- 23. Juni 1912 bis 7. Juni 1954, lebte in England
- Einflussreicher Theoretiker der frühen Computerentwicklung und Informatik (Turingmaschine)
- Entschlüsselung von Funksprüchen (Enigma) während des 2. Weltkriegs
- Turing-Preis als bedeutendste Auszeichnung der Informatik
- Turing-Test zum Nachweis künstlicher Intelligenz
- Tod durch vergifteten Apfel. Dieser Apfel diente angeblich als Vorbild für das Apple-Logo.

### 4.3 Die Belousov-Zhabotinsky- Reaktion (BZ-Reaktion)

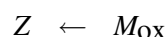
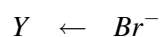
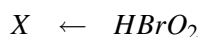
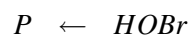
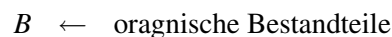
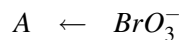


*HMA* ist Mallonsäure,  $\text{M}_{\text{OX/red}}$  ist ein Metallkomplex im oxidierten oder reduzierten Zustand in der Regel Ferriin/Ferriin.

Die Reaktionsgleichungen sind hier nur in Auszügen angegeben, für eine präzise Beschreibung werden bis zu 20 Gleichungen verwendet. In anderen Formulierungen werden z.B. die ersten beiden und die letzten beiden zusammengefasst.

Der Parameter  $f$  ist nicht genau zu bestimmen.

Wir setzen



Die Reaktionsgleichungen haben dann schematisch die Struktur



und die Dynamik wird durch

$$\begin{aligned} \frac{dX}{dt} &= k_3AY - k_2XY + k_5AX - 2k_4X^2 \\ \frac{dY}{dt} &= -k_3AY - k_2XY + \frac{f}{2}k_cBZ \\ \frac{dZ}{dt} &= 2k_5AX - k_cBZ \end{aligned}$$

beschrieben. Wir führen die dimensionslosen Größen

$$\begin{aligned} x &= \frac{2k_4X}{k_5A} \\ y &= \frac{k_2Y}{k_5A} \\ z &= \frac{k_c k_4 B Z}{k_5^2 A^2} \\ \varepsilon &= \frac{k_c B}{k_5 A} \\ \varepsilon' &= \frac{2k_c k_4 B}{k_2 k_5 A} \\ q &= \frac{2k_3 k_4 B}{k_2 k_5 A} \\ \tau &= k_c B t \end{aligned}$$

Damit erhält man die Differentialgleichungen

$$\begin{aligned} \frac{dx}{d\tau} &= \frac{qy - xy + x(1-x)}{\varepsilon} \\ \frac{dy}{d\tau} &= \frac{fz - qy - xy}{\varepsilon'} \\ \frac{dz}{d\tau} &= x - z \end{aligned}$$

**Fixpunkte:** Der Fixpunkt  $x = y = z = 0$  ist instabil, weil in linearer Näherung  $\frac{dx}{d\tau} > 0$  für  $x > 0$  oder  $y > 0$  gilt. Für den zweiten Fixpunkt findet man

$$\begin{aligned} z &= x \\ y &= \frac{x(1-x)}{x-q} \\ fz &= qy + xy \end{aligned}$$

und daraus  $fx(x-q) - (q+x)(1-x) = 0$  mit der Lösung

$$\begin{aligned} x_0 &= -\frac{q-1+f}{2} + \sqrt{\frac{(q-1+f)^2}{4} + q(1+f)} \\ y_0 &= \frac{fx_0}{x_0+q} \\ z_0 &= x_0 \end{aligned}$$

Die Nichtlinearitäten in der Gleichung sind so beschaffen, daß die Werte für  $x$ ,  $y$ ,  $z$  beschränkt bleiben (weil es sich um eine chemische Reaktion handelt und die Konzentrationen nicht unendlich werden können). Es muß deshalb entweder einen stabilen Fixpunkte oder einen Grenzzyklus geben. Mit  $x = x_0 + \delta x$ ,  $y = y_0 + \delta y$ ,  $z = x_0 + \delta z$  findet man

$$\frac{d}{d\tau} \begin{pmatrix} \delta x \\ \delta y \\ \delta z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varepsilon^{-1}(1-y_0-2x_0) & \varepsilon^{-1}(q-x_0) & 0 \\ -\varepsilon'^{-1}y_0 & -\varepsilon'^{-1}(q+x_0) & \varepsilon'^{-1}f \\ 1 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta x \\ \delta y \\ \delta z \end{pmatrix}$$

Es gibt einen reellen, negativen und zwei konjugiert komplexe Eigenwerte. Bei geeigneter Wahl der Parameter ist der Realteil negativ. Dann ist der Fixpunkt stabil. Wenn man die Parameter variiert, kann der Realteil positiv werden, dann hat man eine Hopfbifurkation und das System hat einen Grenzzyklus.

## 4.4 Aktivator-Inhibitor-Modelle

Aktivator-Inhibitor-Modelle spielen eine wichtige Rolle in der theoretischen Biologie, sie wurden zuerst von Turing intensiv mathematisch untersucht. Zwei Substanzen, ein Aktivator und ein Inhibitor, diffundieren und reagieren miteinander. Eine biologischen Eigenschaft wird durch den Aktivator verstärkt, durch den Inhibitor behindert. Das System ist nichtlinear. Eine hohe Konzentration von Aktivator führt dazu, daß auch viel Inhibitor gebildet wird. Der Inhibitor sorgt dafür, daß Aktivator abgebaut oder weniger stark gebildet wird. Der Inhibitor diffundiert allerdings schneller als der Aktivator, so daß es trotzdem dazu kommen kann, daß es Regionen mit hoher Aktivatorkonzentration gibt.

Generelle Struktur der Modelle ist

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} &= D_u \Delta u + \gamma f(u, v) \\ \frac{\partial v}{\partial t} &= D_v \Delta v + \gamma g(u, v) \end{aligned}$$

mit  $D_v > D_u$ . Wir können  $D_u = 1$  und  $D_v = d > 1$  setzen. Typische Beispiele für  $f$  und  $g$  sind

1.  $f(u, v) = a - bu + \frac{u^2}{v}$ ,  $g(u, v) = u^2 - v$
2.  $f(u, v) = a - u - h(u, v)$ ,  $g(u, v) = \alpha(b - v) - h(u, v)$  mit  $h(u, v) = \frac{\rho uv}{1 + u + Ku^2}$
3.  $f(u, v) = a - (b + 1)u + u^2v$ ,  $g(u, v) = bu - u^2v$

Den Fall 3 kennen wir schon, es ist der Brusselator.

Ein wesentlicher Punkt besteht darin, daß man diese Modelle in einem endlichen Volumen betrachtet. Entweder hat man (typischerweise) Dirichletsche Randbedingungen, also

$$n \cdot \nabla u = n \cdot \nabla v = 0$$

(keine Diffusion über den Rand) oder periodische Randbedingungen. Andernfalls würde der Inhibitor durch seine schnellere Diffusion im Unendlichen verschwinden.

Wir nehmen jetzt an, daß es einen stationären Punkt bei  $u_0, v_0$  gibt, d.h.

$$f(u_0, v_0) = g(u_0, v_0) = 0$$

Der stationäre Punkt ist im nicht-diffusivem Fall stabil, wenn die Eigenwerte der Koeffizientenmatrix

$$A = \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial u}(u_0, v_0) & \frac{\partial f}{\partial v}(u_0, v_0) \\ \frac{\partial g}{\partial u}(u_0, v_0) & \frac{\partial g}{\partial v}(u_0, v_0) \end{pmatrix}$$

des linearen Problems beide negative Realteile haben, d.h.

$$\frac{\partial f}{\partial u}(u_0, v_0) + \frac{\partial g}{\partial v}(u_0, v_0) < 0$$

und

$$\det A = \frac{\partial f}{\partial u}(u_0, v_0) \frac{\partial g}{\partial v}(u_0, v_0) - \frac{\partial f}{\partial v}(u_0, v_0) \frac{\partial g}{\partial u}(u_0, v_0) > 0$$

Wir untersuchen jetzt die Stabilität dieser Lösung gegenüber räumlichen Störungen. Setzt man  $u = u_0 + \delta u$ ,  $v = v_0 + \delta v$  und entwickelt man bis in erste Ordnung, dann erhält man

$$\begin{aligned} \frac{\partial \delta u}{\partial t} &= \Delta \delta u + \gamma \frac{\partial f}{\partial u}(u_0, v_0) \delta u + \gamma \frac{\partial f}{\partial v}(u_0, v_0) \delta v \\ \frac{\partial \delta v}{\partial t} &= d \Delta v + \gamma \frac{\partial g}{\partial u}(u_0, v_0) \delta u + \gamma \frac{\partial g}{\partial v}(u_0, v_0) \delta v \end{aligned}$$

Als Ansatz für  $\delta u$  und  $\delta v$  führen wir eine Entwicklung nach Fourierkomponenten ein, also

$$\begin{aligned} \delta u(x, t) &= \sum_k \delta u_k \exp(\lambda_k t) \cos(kx) \\ \delta v(x, t) &= \sum_k \delta v_k \exp(\lambda_k t) \cos(kx) \end{aligned}$$

wobei  $\lambda_k$  die Eigenwerte der Matrix

$$A_k = \begin{pmatrix} \gamma \frac{\partial f}{\partial u}(u_0, v_0) - k^2 & \gamma \frac{\partial f}{\partial v}(u_0, v_0) \\ \gamma \frac{\partial g}{\partial u}(u_0, v_0) & \gamma \frac{\partial g}{\partial v}(u_0, v_0) - dk^2 \end{pmatrix}$$

sind. Die Eigenwertgleichung lautet

$$\lambda_k^2 + p_k \lambda_k + q_k = 0$$

mit

$$p_k = (1+d)k^2 - \gamma \frac{\partial f}{\partial u}(u_0, v_0) - \gamma \frac{\partial g}{\partial v}(u_0, v_0)$$

$$q_k = (\gamma \frac{\partial f}{\partial u}(u_0, v_0) - k^2)(\gamma \frac{\partial g}{\partial v}(u_0, v_0) - dk^2) - \gamma \frac{\partial f}{\partial v}(u_0, v_0) \gamma \frac{\partial g}{\partial u}(u_0, v_0)$$

Stabilitätskriterium für den homogenen Fall war

$$\frac{\partial f}{\partial u}(u_0, v_0) + \frac{\partial g}{\partial v}(u_0, v_0) < 0$$

Damit ist  $p_k > 0$ .  $\lambda_k$  wird also nur dann größer als 0 sein, wenn  $q_k$  negativ ist. Das passiert, wenn

$$d \frac{\partial f}{\partial u}(u_0, v_0) + \frac{\partial g}{\partial v}(u_0, v_0) > 0$$

gilt. Die Nullstellen von  $q_k$  liegen bei

$$(k^2)_{1,2} = \frac{\gamma}{2(1+d)} \left( d \frac{\partial f}{\partial u}(u_0, v_0) + \frac{\partial g}{\partial v}(u_0, v_0) \right) \pm \sqrt{\frac{\gamma^2}{4(1+d)^2} \left( d \frac{\partial f}{\partial u}(u_0, v_0) + \frac{\partial g}{\partial v}(u_0, v_0) \right)^2 - \frac{\gamma^2}{1+d} \det A}$$

Wenn

$$\left( d \frac{\partial f}{\partial u}(u_0, v_0) + \frac{\partial g}{\partial v}(u_0, v_0) \right)^2 > 4(1+d) \det A$$

gilt  $(k^2)_{1,2} > 0$ . Wenn also  $(k^2)_2 < k^2 < (k^2)_1$  gilt, gibt es positive  $\lambda_k$ . Für diese  $k$  tritt also eine Instabilität auf.

Wegen

$$\frac{\partial f}{\partial u}(u_0, v_0) + \frac{\partial g}{\partial v}(u_0, v_0) < 0$$

$$d \frac{\partial f}{\partial u}(u_0, v_0) + \frac{\partial g}{\partial v}(u_0, v_0) > 0$$

passiert das nur für

$$\frac{\partial f}{\partial u}(u_0, v_0) > 0$$

$$\frac{\partial g}{\partial v}(u_0, v_0) < 0$$

$$d > -\frac{\frac{\partial g}{\partial v}(u_0, v_0)}{\frac{\partial f}{\partial u}(u_0, v_0)} > 1$$

also für hinreichend große  $d$ .

Wir beachten jetzt, daß wir ein endliches System betrachten, also z.B. ein zweidimensionales System mit den linearen Ausdehnungen  $L_1$  und  $L_2$ .  $k$  ist dann (je nach Randbedingungen) von der Form

$$k = \left( \frac{2\pi}{L_1} n, \frac{2\pi}{L_2} m \right)$$

Für Werte von  $d$ , für die der Bereich mit instabilen  $k$ -Werte noch sehr klein ist, werden zunächst nur ein oder wenige zulässige  $k$  auftreten, und zwar nur solche, die zu der größeren der beiden Längen  $L_{1,2}$  gehören.

## 5 Laser

Ziel dieses Kapitels ist es, anhand des Beispiels des Lasers tiefer in die Behandlung von nicht-linearen Systemen einzusteigen. Die Methoden, die in diesem Abschnitt vermittelt werden, können auf die bisher behandelten Systeme auch angewandt werden.

### 5.1 Photonenmodell des Ein-Moden-Lasers

Atom als Zweiniveausystem.

Größen:

- $n$  Zahl der Photonen (eine Mode)
- $N_{1,2}$  Zahl der Atome im unteren (1) oder oberen (2) Zustand
- $W$  Koeffizient für Emission
- $\kappa$  Koeffizient für Verlust von Photonen
- $w_{ij}$  Koeffizient für Übergänge von Niveau  $i$  auf Niveau  $j$ .

Gleichungen:

$$\begin{aligned}\frac{dn}{dt} &= (N_2 - N_1)Wn - 2\kappa n \\ \frac{dN_1}{dt} &= w_{12}N_2 - w_{21}N_1 + (N_2 - N_1)Wn \\ \frac{dN_2}{dt} &= w_{21}N_1 - w_{12}N_2 - (N_2 - N_1)Wn\end{aligned}$$

Da  $N = N_1 + N_2$  konstant ist, kann man zur Vereinfachung die Größen  $D = N_2 - N_1$ ,  $T = (w_{21} + w_{12})^{-1}$  und  $D_0 = NT(w_{21} - w_{12})$  einführen. Dann erhält man

$$\begin{aligned}\frac{dn}{dt} &= DWn - 2\kappa n \\ \frac{dD}{dt} &= (D_0 - D)/T - 2DWn\end{aligned}$$

Stationäre Lösung:

- $D = D_0, n = 0$
- $D = \bar{D} = \frac{2\kappa}{W}, n = \bar{n} = \frac{D_0 - D}{2TDW} = \frac{D_0W - 2\kappa}{4\kappa TW}$

Man erhält also eine Lösung mit  $n > 0$  falls  $D_0 W > -2\kappa$ . Das ist die Laserbedingung.

Stabilität:

$$n = \bar{n} + x, \quad D = \bar{D} + y$$

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= yW\bar{n} + O(xy) \\ \frac{dy}{dt} &= -4\kappa x - (2W\bar{n} - \frac{1}{T})y + O(xy) \end{aligned}$$

Die Eigenwerte der Koeffizientenmatrix sind

$$-\frac{1}{2T} - W\bar{n} \pm \sqrt{\left(\frac{1}{2T} + W\bar{n}\right)^2 - 4\kappa W\bar{n}}$$

Der Realteil beider Eigenwerte ist negativ, der Fixpunkt ist also stabil. Für  $4\kappa W\bar{n} > \left(\frac{1}{2T} + W\bar{n}\right)$  treten Relaxationsoszillationen auf. Das sieht man sehr schön in der Simulation.

## 5.2 Halbklassische Theorie

Ich zeige in diesem Abschnitt nur die Grundzüge der Herleitung. Für Details verweise ich auf [6].

Ausgangspunkt der Herleitung sind die Maxwellgleichungen

$$\begin{aligned} \nabla \times E &= -\frac{1}{c}\dot{B} \\ \nabla \times H &= \frac{4\pi}{c}j + \frac{1}{c}\dot{D} \end{aligned}$$

Außerdem gilt  $D = E + 4\pi P$ . Verwendet man zusätzlich die Materiegleichung  $j = \sigma E$  und die weiteren Maxwellgleichungen, leitet man schließlich die Wellengleichung

$$\Delta E - \frac{1}{c^2}\ddot{E} - \frac{4\pi\sigma}{c^2}\dot{E} = \frac{4\pi}{c^2}\ddot{P}$$

her.

Um die Polarisation zu berechnen, betrachten wir Atome, die wir mit einem Index  $\mu$  nummerieren. Die klassische Auslenkung  $\xi_\mu$  eines Elektrons vom Kern können wir in harmonischer Näherung durch

$$m\ddot{\xi}_\mu + f\xi_\mu = -eE(x_\mu, t)$$

Dabei ist  $x_\mu$  der Ort des Atoms. Das Dipolmoment des Atoms ist durch  $p_\mu = -e\xi_\mu$  gegeben.

Das Atom beschreiben wir jetzt durch ein Zwei-Niveau-System, also durch einen Hamiltonoperator, der sich als  $2 \times 2$ -Matrix schreiben läßt. Konkret nehmen wir nur zwei Wellenfunktionen

in der Rechnung mit,  $\phi_j(\xi)$ ,  $j = 1, 2$  mit Energien  $\omega_j$  ( $\hbar = 1$ ). Die Ankopplung des elektrischen Feldes an den Hamiltonoperator ist linear, also

$$H = H_0 e \xi E$$

und das Dipolmoment ist

$$p = \langle \psi, -e \xi \psi \rangle$$

Für die Wellenfunktion setzt man an

$$\psi = \sum_j c_j(t) \exp(-i\omega_j t) \phi_j$$

Mit  $\Theta_{jk} = \langle \phi_j, e \xi \phi_k \rangle$  erhält man

$$-p = \alpha(t) \Theta_{12} + \text{h.c.}$$

mit  $\alpha(t) = c_1^* c_2 \exp(-i(\omega_2 - \omega_1)t)$ . Man erhält dann als Gleichung für  $\alpha$

$$\dot{\alpha} = -i(\omega_2 - \omega_1)\alpha - \gamma\alpha + iE\Theta_{12}d$$

wobei  $d$  die Inversion ist. Für  $d$  ergibt sich

$$\dot{d} = 2iE(\Theta_{12}\alpha - \text{h.c.})$$

In dieser Gleichung müssen wir einen weiteren Term einbauen, der die Pumpprozesse beschreibt. Berücksichtigt man dies, so erhält man

$$\dot{d} = 2iE(\Theta_{12}\alpha - \text{h.c.}) + \frac{d_0 - d}{T}$$

In einem Resonator erhält man für  $E$  eine Entwicklung nach den Eigenmoden des Resonators

$$E = \sum_{\lambda} E_{\lambda}(t) u_{\lambda}(x)$$

Führt man dann noch die dimensionslosen Größen  $b_{\lambda}$  durch

$$E_{\lambda} = -i\sqrt{2\pi\omega_{\lambda}} b_{\lambda}, \quad \omega_{\lambda} > 0$$

$$E_{\lambda} = -i\sqrt{2\pi|\omega_{\lambda}|} b_{\lambda}^*, \quad \omega_{\lambda} < 0$$

ein, so erhält man die Feldgleichungen

$$\frac{db_{\lambda}}{dt} = (-i\omega_{\lambda} - \kappa_{\lambda})b_{\lambda} - i \sum_{\mu} g_{\mu\lambda}^* \alpha_{\mu}$$

Die Kopplungskonstanten sind

$$g_{\mu\lambda} = i\Theta_{12}u_{\lambda}(x_{\mu})\sqrt{2\pi\omega_{\lambda}}$$

Die Materiegleichungen lauten dann

$$\begin{aligned}\frac{d\alpha_\mu}{dt} &= (-i\bar{\omega}_\mu - \gamma)\alpha_\mu + i\sum_\lambda g_{\mu\lambda} b_\lambda d_\mu \\ \frac{dd_\mu}{dt} &= \frac{d_0 - d_\mu}{T} + 2i\sum_\lambda (g_{\mu\lambda}^* \alpha_\mu b_\lambda^* - g_{\mu\lambda} \alpha_\mu^* b_\lambda)\end{aligned}$$

$\lambda$  indiziert die Moden,  $\mu$  die Atome.  $\alpha_\mu$  ist das Dipolmoment,  $d_\mu$  die Inversion des Atoms  $\mu$ .  $b_\lambda$  ist die Amplitude der Mode  $\lambda$ .

### 5.2.1 Herleitung der Bilanzgleichungen

Annahme:  $b_\lambda = B_\lambda \exp(-i\Omega_\lambda t)$ .  $B_\lambda$  und  $d_\mu$  sollen nur langsam veränderlich sein. Eingesetzt in die Gleichung für  $\alpha_\mu$  erhält man

$$\frac{d\alpha_\mu}{dt} = (-i\bar{\omega}_\mu - \gamma)\alpha_\mu + i\sum_\lambda g_{\mu\lambda} B_\lambda d_\mu \exp(-i\Omega_\lambda t)$$

Unter der Annahme (adiabatische Näherung), daß  $B_\lambda$  und  $d_\mu$  konstant sind, kann man die Gleichung lösen

$$\alpha_\mu = \alpha_{\mu 0} \exp(-i\bar{\omega}_\mu t - \gamma t) + \sum_\lambda \frac{ig_{\mu\lambda} b_\lambda d_\mu}{i(\Omega_\lambda - \bar{\omega}_\mu) + \gamma}$$

Der erste Term klingt exponentiell ab und ist für das Langzeitverhalten irrelevant. Er wird weggelassen. Setzt man  $n_\lambda = b_\lambda^* b_\lambda$  und den Ausdruck für  $\alpha_\mu$  in die Zeitableitung von  $n_\lambda$  ein, dann erhält man

$$\frac{dn_\lambda}{dt} = -2\kappa_\lambda n_\lambda + \sum_\mu \sum_{\lambda'} \left[ \frac{g_{\mu\lambda} g_{\mu\lambda'}^* d_\mu b_\lambda^* b_{\lambda'}}{-i(\Omega_{\lambda'} - \bar{\omega}_\mu) + \gamma} + \text{c.c.} \right]$$

Nimmt man an, daß die Schwingungen  $b_\lambda$  nicht phasengekoppelt sind, dann liefert die Summe nur einen Beitrag, wenn  $\lambda = \lambda'$ . Man erhält dann

$$\frac{dn_\lambda}{dt} = -2\kappa_\lambda n_\lambda + \sum_\mu W_{\lambda\mu} d_\mu n_\lambda$$

mit

$$W_{\lambda\mu} = \frac{2\gamma |g_{\mu\lambda}|^2}{(\Omega_\lambda - \bar{\omega}_\mu)^2 + \gamma^2}$$

In gleicher Weise setzt man den Ausdruck für  $\alpha_\mu$  in die Gleichung für  $d_\mu$  ein, nimmt an, daß es keine Phasenkopplung gibt, und erhält

$$\frac{dd_\mu}{dt} = \frac{d_0 - d_\mu}{T} - 2\sum_\lambda W_{\lambda\mu} d_\mu n_\lambda$$

Beschränkt man sich auf eine Mode und nimmt man an, und führt man  $W = \langle W_{\lambda\mu} \rangle$ ,  $D = \frac{1}{\bar{W}} \sum_\mu W_{\lambda\mu} d_\mu$  ein, dann erhält man die Gleichungen des Photonmodells.

### 5.2.2 Ein-Moden-Laser I

Feldgleichungen

$$\frac{db}{dt} = (-i\omega - \kappa)b - i \sum_{\mu} g_{\mu}^* \alpha_{\mu}$$

Materiegleichungen

$$\begin{aligned} \frac{d\alpha_{\mu}}{dt} &= (-i\bar{\omega}_{\mu} - \gamma)\alpha_{\mu} + ig_{\mu}bd_{\mu} \\ \frac{dd_{\mu}}{dt} &= \frac{d_0 - d_{\mu}}{T} + 2i(g_{\mu}^*\alpha_{\mu}b^* - g_{\mu}\alpha_{\mu}^*b) \end{aligned}$$

Stationärer Fall:  $d_{\mu} = d_0$  und  $b = 0$ ,  $\alpha_{\mu} = 0$ . Für

Annahme:  $\bar{\omega}_{\mu} = \bar{\omega}$ ,  $g_{\mu}^*g_{\mu} = g^2$ . Das ist der Fall, wenn die Atome sich nicht bewegen, so daß es zu keiner inhomogenen Linienverbreiterung durch Dopplereffekt kommt. Die  $g_{\mu}$  haben eine ortsabhängige Phase, die auch zu einer Phase in  $\alpha_{\mu}$  führt.  $b$  ist zeitabhängig, typischerweise mit einer Phase  $\exp(-i\Omega t)$ .

Sei  $A = g^{-1} \sum_{\mu} g_{\mu}^* \alpha_{\mu}$ .  $D = \sum_{\mu} d_{\mu}$ ,  $D_0 = \sum_{\mu} d_0$ . Dann gilt

$$\begin{aligned} \frac{dA}{dt} &= (-i\bar{\omega} - \gamma)A + igbD \\ \frac{dD}{dt} &= \frac{D_0 - D}{T} + 2ig(Ab^* - A^*b) \\ \frac{db}{dt} &= (-i\omega - \kappa)b - igA \end{aligned}$$

Aus der zweiten Gleichung erhält man

$$\frac{dn}{dt} = -2\kappa n - ig(Ab^* - A^*b)$$

und weiter

$$\begin{aligned} \frac{dAA^*}{dt} &= -2\gamma AA^* - igD(Ab^* - A^*b) \\ \frac{d}{dt}(iAb^* - iA^*b) &= -i(\gamma + \kappa)(Ab^* - A^*b) - (\omega - \bar{\omega})(Ab^* + A^*b) - 2gAA^* - 2gDn \\ \frac{d}{dt}(Ab^* + A^*b) &= -(\gamma + \kappa)(Ab^* + A^*b) + i(\omega - \bar{\omega})(Ab^* - A^*b) \end{aligned}$$

Stationär: Eine stationäre Lösung ist  $D = D_0$  und  $n = 0$ ,  $A = 0$ . Für jede weitere stationäre Lösung ist  $L = -i(Ab^* - A^*b) > 0$ . Dann gilt

$$D = D_0 - 2gTL$$

$$n = \frac{Lg}{2\kappa} = \frac{D_0 - D}{4\kappa T}$$

$$AA^* = \frac{gDL}{2\gamma}$$

$$(Ab^* + A^*b) = -\frac{(\omega - \bar{\omega})L}{\gamma + \kappa}$$

$$D = \frac{\gamma\kappa}{g^2(\gamma + \kappa)^2} ((\gamma + \kappa)^2 + (\omega - \bar{\omega})^2)$$

Führt man

$$W = \frac{2g^2}{\gamma} \frac{(\gamma + \kappa)^2}{(\gamma + \kappa)^2 + (\omega - \bar{\omega})^2}$$

ein, dann ergibt sich sofort

$$D = \frac{2\kappa}{W}$$

$$n = \frac{D_0 W - 2\kappa}{4\kappa W T}$$

wie im Photonenmodell.

Die Dynamik der Gleichungen zeigt qualitativ ein ähnliches Verhalten (Relaxationsoszillationen, etc.), quantitativ hängt das Verhalten der neuen Gleichungen aber von den Anfangsbedingungen der anderen drei Größen ab.

### 5.2.3 Ein-Moden-Laser II, adiabatische Näherung

Ein zweiter Lösungsansatz: Adiabatische Näherung.

$$\alpha_\mu = \frac{ig_\mu b d_\mu}{i(\Omega - \bar{\omega}_\mu) + \gamma}$$

$$\frac{db}{dt} = (-i\omega - \kappa)b + \sum_\mu \frac{g_\mu^* g_\mu b d_\mu}{i(\Omega - \bar{\omega}_\mu) + \gamma}$$

$$\frac{dd_\mu}{dt} = \frac{d_0 - d_\mu}{T} - 2g_\mu^* g_\mu b^* b d_\mu \frac{2\gamma}{\gamma^2 + (\Omega - \bar{\omega}_\mu)^2}$$

$$= \frac{d_0 - d_\mu}{T} - 2nd_\mu W_\mu$$

$$\frac{dn}{dt} = -2\kappa n + \sum_\mu W_\mu d_\mu n$$

In diesen Gleichungen ist die Resonanzfrequenz  $\Omega$  noch zu bestimmen. Dazu setzt man für große  $t$   $b(t) = \bar{b} \exp(-i\Omega t)$  in die Gleichung für  $b$  ein und trennt Real- und Imaginärteil.

$$\begin{aligned} -i\Omega &= -i\omega - \kappa + \sum_{\mu} \frac{g_{\mu}^* g_{\mu} d_{\mu}}{i(\Omega - \bar{\omega}_{\mu}) + \gamma} \\ 0 &= -\kappa + \sum_{\mu} \frac{g_{\mu}^* g_{\mu} d_{\mu} \gamma}{\gamma^2 + (\Omega - \bar{\omega}_{\mu})^2} \\ \Omega &= \omega + \sum_{\mu} \frac{g_{\mu}^* g_{\mu} d_{\mu} (\Omega - \bar{\omega}_{\mu})}{\gamma^2 + (\Omega - \bar{\omega}_{\mu})^2} \\ d_{\mu} &= d_0 - 4T\bar{n} \frac{g_{\mu}^* g_{\mu} d_{\mu} \gamma}{\gamma^2 + (\Omega - \bar{\omega}_{\mu})^2} \end{aligned}$$

Im allgemeinen wird also  $\Omega$  von  $\bar{n}$  abhängen. Wenn wir wieder annehmen, daß es keine inhomogene Linienverbreiterung gibt, dann ist  $\bar{\omega}_{\mu} = \bar{\omega}$  und damit

$$\Omega = \omega + \kappa \frac{\Omega - \bar{\omega}}{\gamma}$$

Die Gleichungen reduzieren sich dann auf die ursprünglichen Gleichungen des Photonmodells. Das ist nicht verwunderlich, da durch die adiabatische Näherung die Anfangsbedingungen der  $\alpha_{\mu}$  keine Rolle mehr spielen.

#### 5.2.4 Mehr-Moden-Laser, adiabatische Näherung

Ausgangspunkt der folgenden Rechnungen ist die adiabatische Näherung im Mehrmodenfall, die wir bereits weiter oben bei der Herleitung der Bilanzgleichungen verwendet haben:

$$\frac{dn_{\lambda}}{dt} = -2\kappa_{\lambda} n_{\lambda} + \sum_{\mu} W_{\lambda\mu} d_{\mu} n_{\lambda}$$

mit

$$W_{\lambda\mu} = \frac{2\gamma |g_{\mu\lambda}|^2}{(\Omega_{\lambda} - \bar{\omega}_{\mu})^2 + \gamma^2}$$

und

$$\frac{dd_{\mu}}{dt} = \frac{d_0 - d_{\mu}}{T} - 2 \sum_{\lambda} W_{\lambda\mu} d_{\mu} n_{\lambda}$$

Wir nehmen wie oben an, daß  $|g_{\mu\lambda}|^2 = g^2$  unabhängig von  $\mu$  und  $\lambda$  ist und es keine Dopplerverschiebung gibt, d.h.  $\bar{\omega}_{\mu} = \bar{\omega}$ . Dann gilt  $W_{\lambda\mu} = W_{\lambda}$  und es kommt in der Gleichung für  $n_{\lambda}$  nur noch die Inversion  $D = \sum_{\mu} d_{\mu}$  vor. Für  $D$  erhält man

$$\frac{dD}{dt} = \frac{D_0 - D}{T} - 2D \sum_{\lambda} W_{\lambda} n_{\lambda}$$

$$\frac{dn_\lambda}{dt} = -2\kappa_\lambda n_\lambda + DW_\lambda n_\lambda$$

Eine stationäre Lösung dieser Gleichungen erhält man für

$$D = \frac{2\kappa_\lambda}{W_\lambda} \text{ oder } n_\lambda = 0$$

und

$$D = \frac{D_0}{1 + 2T \sum_\lambda W_\lambda n_\lambda}$$

Da die Brüche  $\frac{\kappa_\lambda}{W_\lambda}$  für verschiedene  $\lambda$  verschieden sind, erhält man nur dann eine Lösung, wenn alle  $n_\lambda = 0$  sind bis auf eines. Man sieht also, daß tatsächlich (unter den obigen Annahmen) nur eine Mode 'überlebt', alle anderen 'sterben aus'.

Mehrmodenbetrieb kann in Lasern dann vorkommen, wenn es eine inhomogene Linienverbreiterung gibt, wenn also unterschiedliche  $\bar{\omega}_\mu$  vorkommen. In diesem Fall werden quasi unterschiedliche Moden von unterschiedlichen Atomen mit unterschiedlichen Übergangsfrequenzen gespeist.

### 5.2.5 Grenzen des halbklassischen Modells

Das halbklassische Modell kann viele Aspekte des Lasers quantitativ sehr gut beschreiben.

Das halbklassische Modell hat wie die Bilanzgleichungen aber ein wesentliches Problem. Der Fixpunkt  $d_\mu = d_0$  oder  $D = D_0$  hat  $n = 0$ . Es gibt keine Photonen. Das Modell kann also eine normale Lampe nicht beschreiben. Physikalisch betrachtet fehlt die spontane Emission. Um das zu berücksichtigen, braucht man eine vollständige quantenmechanische Beschreibung.

## 5.3 Quantenmechanisches Modell

Feldgleichungen

$$\frac{db_\lambda}{dt} = (-i\omega_\lambda - \kappa_\lambda)b_\lambda - i \sum_\mu g_{\mu\lambda}^* \alpha_\mu + F_\lambda(t)$$

Materiegleichungen

$$\begin{aligned} \frac{d\alpha_\mu}{dt} &= (-i\bar{\omega}_\mu - \gamma)\alpha_\mu + i \sum_\lambda g_{\mu\lambda} b_\lambda d_\mu + \Gamma_\mu(t) \\ \frac{dd_\mu}{dt} &= \frac{d_0 - d_\mu}{T} + 2i \sum_\lambda (g_{\mu\lambda}^* \alpha_\mu b_\lambda^* - g_{\mu\lambda} \alpha_\mu^* b_\lambda) + \tilde{\Gamma}_\mu(t) \end{aligned}$$

Das Modell sieht aus wie das halb-klassische Modell, hat aber zusätzliche Rauschterme. Es handelt sich um weißes Rauschen, d.h.

$$\langle F_\lambda(t) \rangle = \langle \Gamma_\mu(t) \rangle = \langle \tilde{\Gamma}_\mu(t) \rangle$$

$$\langle \Gamma_\mu^*(t) \Gamma_{\mu'}(t') \rangle \propto \delta_{\mu\mu'} \delta(t-t'), \dots$$

Die Proportionalitätskonstanten in den Korrelationen sind kompliziertere Ausdrücke, die von den Parametern in den Gleichungen abhängen. Die Rauschterme beheben das Problem des halb-klassischen Modells: Eine stationäre Lösung ohne Phononen tritt nicht mehr auf.

Die Gleichungen können analysiert werden, indem man die Fokker-Planck-Gleichung zu diesen Gleichungen aufstellt und dafür die stationäre Lösung sucht. Man erhält dann eine Verteilungsfunktion für die  $b_\lambda$ , deren Maximum dort liegt, wo in der klassischen Theorie  $n_\lambda > 0$  ist.

### 5.3.1 Adiabatische Näherung

Gleichung für  $\alpha_\mu$  wird formal integriert

$$\alpha_\mu = \alpha_{\mu 0} \exp(-i\bar{\omega}_\mu t - \gamma t) + \int_0^t dt' (i \sum_\lambda g_{\mu\lambda} d_\mu b_\lambda + \Gamma_\mu) \exp(-(i\bar{\omega}_\mu + \gamma)(t-t'))$$

Wir betrachten große  $t$  und nehmen an, daß  $\gamma^{-1}$  eine kleine Zeitskala ist. Das entspricht der adiabatischen Näherung und liefert

$$\alpha_\mu = \sum_\lambda \frac{i g_{\mu\lambda} d_\mu b_\lambda}{\gamma + i(\bar{\omega}_\mu - \Omega_\lambda)} + \tilde{\Gamma}_\mu$$

$$\tilde{\Gamma}_\mu = \int_{-\infty}^t dt' \Gamma_\mu(t') \exp(-(i\bar{\omega}_\mu + \gamma)(t-t'))$$

Eingesetzt in die Gleichung  $d_\mu$  erhält man

$$\frac{dd_\mu}{dt} = \frac{d_0 - d_\mu}{T} - 4 \sum_{\lambda\lambda'} \frac{b_\lambda^* b_{\lambda'} g_{\mu\lambda}^* g_{\mu\lambda'} d_\mu \gamma}{(\gamma + i(\bar{\omega}_\mu - \Omega_\lambda))(\gamma - i(\bar{\omega}_\mu - \Omega_{\lambda'}))} + \tilde{\Gamma}_\mu + 2i \sum_\lambda (g_{\mu\lambda}^* b_\lambda^* \tilde{\Gamma}_\mu - g_{\mu\lambda} b_\lambda \tilde{\Gamma}_\mu^*)$$

Hier nehmen wir zunächst wie schon früher an, daß man im zweiten Term nur wesentliche Beiträge bekommt für  $\lambda = \lambda'$ . Außerdem setzen wir wieder  $|g_{\mu\lambda}|^2 = g^2$  und  $\bar{\omega}_\mu = \bar{\omega}$ . Dann gilt mit  $W_\lambda = g^2 / ((\bar{\omega} - \Omega_\lambda)^2 + \gamma^2)$

$$\frac{dd_\mu}{dt} = \frac{d_0 - d_\mu}{T} - 4 \sum_\lambda W_\lambda n_\lambda d_\mu + \tilde{\Gamma}_\mu + 2i \sum_\lambda (g_{\mu\lambda}^* b_\lambda^* \tilde{\Gamma}_\mu - g_{\mu\lambda} b_\lambda \tilde{\Gamma}_\mu^*)$$

Diese Gleichung integrieren wir formal:

$$d_\mu = \frac{d_0}{T} \int_0^t dt' \exp(-\frac{t-t'}{T} - \int_{t'}^t dt'' 4 \sum_\lambda W_\lambda n_\lambda(t'')) + \hat{\Gamma}_\mu$$

$\hat{\Gamma}_\mu$  enthält alle Terme, die ein Rauschen enthalten. Die Näherung besteht jetzt darin anzunehmen, daß man hauptsächlich Beiträge zu dem Integral in der Nähe von  $t$  bekommt und deshalb  $n(t'') = n(t)$  setzen kann. Dann erhält man unter Vernachlässigung eines exponentiell abfallenden Terms

$$d_\mu = d_0 \frac{1}{1 + 4T \sum_\lambda W_\lambda n_\lambda(t)} + \hat{\Gamma}_\mu$$

In dieser Gleichung wird der Nenner entwickelt

$$d_\mu = d_0 - 4T \sum_\lambda W_\lambda n_\lambda d_0 + \hat{\Gamma}_\mu$$

und über  $\mu$  summiert

$$D = D_0 - 4TD_0 \sum_\lambda W_\lambda^2 n_\lambda + \hat{\Gamma}$$

Wir betrachten jetzt die Gleichung für  $b_\lambda$

$$\begin{aligned} \frac{db_\lambda}{dt} &= (-i\omega_\lambda - \kappa_\lambda)b_\lambda - i \sum_\mu g_{\mu\lambda}^* \alpha_\mu + F_\lambda(t) \\ &= (-i\omega_\lambda - \kappa_\lambda)b_\lambda + D \sum_{\lambda'} \frac{g_\lambda^* g_{\lambda'} b_{\lambda'}}{\gamma + i(\bar{\omega} - \Omega_{\lambda'})} + \hat{F}_\lambda \end{aligned}$$

Wie sonst auch schon setzen wir  $b_\lambda = B_\lambda \exp(-i\Omega_\lambda t)$ . Wir setzen das in die obige Gleichung ein, nehmen an, daß  $\omega_\lambda - \Omega_\lambda$  klein ist und daß in der Summe im zweiten Term hauptsächlich die Beiträge mit  $\lambda' = \lambda$  beitragen. Außerdem nehmen wir an, daß wir  $\hat{\Gamma}$  vernachlässigen können. Dann erhält man

$$\frac{dB_\lambda}{dt} = -\frac{\partial\Phi}{\partial B_\lambda^*} + \hat{F}_\lambda$$

mit

$$\Phi = \sum_\lambda |B_\lambda|^2 (\kappa_\lambda - \frac{1}{2}W_\lambda D_0) + \frac{1}{2}TD_0 \sum_{\lambda\lambda'} W_\lambda W_{\lambda'} |B_\lambda|^2 |B_{\lambda'}|^2$$

Wenn man annimmt, daß

$$\begin{aligned} \langle \hat{F}_\lambda(t) \rangle &= 0 \\ \langle \hat{F}_\lambda(t) \hat{F}_{\lambda'}(t') \rangle &= Q \delta_{\lambda\lambda'} \delta(t-t') \end{aligned}$$

ist die Gleichung für  $B_\lambda$  die Bewegungsgleichung der Brownschen Bewegung im Potential  $\Phi$  und man erhält die Wahrscheinlichkeitsverteilung

$$p(B_\lambda) = N \exp\left(-\frac{2\Phi}{Q}\right)$$

Ich diskutiere diesen Ansatz in verkürzter Form für den Ein-Moden-Fall.

### 5.3.2 Ein-Moden-Laser

Im Fall einer Mode gilt

$$\frac{dB}{dt} = -\frac{\partial\Phi}{\partial B^*} + \hat{F}$$

mit

$$\Phi = |B|^2 \left( \kappa - \frac{1}{2} W D_0 \right) + \frac{1}{2} T D W^2 |B|^4$$

Die Laserbedingung lautet wie vorher  $D_0 W > 2\kappa$  und die mittlere Photonenzahl ist  $\bar{n} = |B|^2 = \frac{D_0 W - 2\kappa}{2 T D_0 W^2}$ . Das stimmt in der Ordnung, in der wir entwickelt haben, mit dem überein, was z.B. das Photonenmodell liefert. Im Unterschied zum Photonenmodell erhalten wir jetzt aber eine Theorie, die Fluktuationen durch spontane Emission enthält und deshalb auch das inkohärente Leuchten unterhalb der Laserschwelle beschreibt.

## 6 Andere physikalische Systeme

Neben den bisher diskutierten Systemen gibt es eine Reihe weiterer, wichtiger physikalischer Systeme, in denen Strukturbildung auftritt. Ich gehe auf diese Systeme hier nur summarisch ein.

### 6.1 Rayleigh-Benard-Instabilität

Eine Flüssigkeit dehnt sich an der warmen Unterseite aus und kann aufgrund der geringeren Dichte nach oben steigen, während die kältere, dichtere Flüssigkeit im oberen Bereich nach unten sinken kann. Die Viskosität der Flüssigkeit wirkt diesem entgegen.

Ist die Temperaturdifferenz  $\Delta T$  zwischen Boden und Oberfläche gering, überwiegt die Viskosität und die Wärme wird ohne gleichzeitigen Stofftransport durch homogene Wärmeleitung von unten nach oben befördert. Oberhalb eines kritischen Temperaturunterschiedes  $\Delta T_{\text{krit}}$  wird dieser Zustand instabil, der Wärmetransport findet durch Wärmekonvektion statt. Die Flüssigkeit kommt aufgrund der Dichteunterschiede zwischen Ober- und Unterseite in Bewegung. Es treten regelmäßig geformte Konvektionszellen meist in Sechseck- oder Rollenmuster auf, die Bénard-Zellen. Steigt die Temperaturdifferenz zwischen Ober- und Unterseite der Flüssigkeit weiter an, setzen ab einem zweiten kritischen Wert  $\Delta T_{\text{krit},2}$  Periodenverdopplungen ein. Das System gelangt auf der Feigenbaum-Route ins Chaos, es entwickelt sich Turbulenz.

Zur Durchführung des Experiments eignen sich besonders Flüssigkeiten mit einer geringen Viskosität, z. B. dünnes Öl oder Gele. Es wurde aber auch schon mit flüssigem, tiefgekühltem Helium durchgeführt. Der Wärmeausdehnungskoeffizient der Flüssigkeit muss positiv sein. Das Temperatur- und Strömungsgeschwindigkeitsfeld dieses Experiments muss der Navier-Stokes-Gleichung, der Wärmeleitungsgleichung und der Kontinuitätsgleichung (Erhaltungssatz der Masse) genügen.

### 6.2 Taylor-Couette-Strömung

Couette-Strömung oder Taylor-Couette-Strömung bezeichnet die laminare Strömung einer inkompressiblen viskosen Flüssigkeit, die sich im Zwischenraum zwischen zwei coaxialen, relativ zueinander rotierenden Zylindern, bzw. zwischen zwei relativ zueinander bewegten, unendlich langen und breiten Platten (ebene Couette-Strömung), befindet. Die entstehende Strömung zwischen den Zylindern ist dabei nicht nur von der Rotationsgeschwindigkeit abhängig, sondern

auch davon, ob der innere oder der äußere Zylinder rotiert. Ist die Relativgeschwindigkeit der Zylinder gering (s.u.) und der Spalt zwischen den beiden Zylinder klein gegenüber dem Durchmesser der Zylinder kann die Strömung als ebene Couette-Strömung behandelt werden. Dabei kann die eine Platte eine als feststehend und die andere als bewegt betrachtet werden. Die Strömung wurde nach Maurice Frédéric Alfred Couette benannt, der Ende des 19. Jahrhunderts das erste funktionierende Rotationsviskosimeter konstruiert hat.

### 6.3 Swift-Hohenberg-Gleichung

Die Swift-Hohenberg-Gleichung

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \varepsilon \psi - (\Delta + k_{\text{krit}}^2) \psi + R(\psi)$$

mit einem nicht-linearen (z.B. kubischen) Term  $R(\psi)$  mit  $R(0) = 0$  ist eine mathematische Modellgleichung zur Untersuchung von Musterbildungsprozessen. Sie beschreibt kein reales physikalisches Experiment. Der Vorteil der Gleichung liegt darin, dass die Analyse im Vergleich zum verschiedenen real existierenden Beispielen übersichtlich ist. Dennoch treten hier viele Phänomene auf, die auch bei physikalischen Musterbildungsprozessen vorkommen. Dazu zählen Phasenübergänge (analog zum Übergang von Wärmeleitung zur Konvektion beim Bénard-Experiment), spontane Symmetriebrechung und eben die Musterbildung.

# 7 Rauschinduzierter Transport

Rauschinduzierter Transport ist an sich kein klassisches Beispiel für Strukturbildung. Es handelt sich um eindimensionale Systeme im Nicht-Gleichgewicht, in denen durch Nicht-Gleichgewichts-Fluktuationen Transport induziert wird.

Ich behandle dieses Problem in dieser Vorlesung, weil es seit kurzem analoge mehrdimensionale Modelle gibt, in denen der Transportmechanismus zu Strukturbildung führt.

## 7.1 Rauschinduzierter Transport

### 7.1.1 Feynmans Ratsche

In den Feynman Lectures ([?], Kap. 46) findet sich ein interessantes Beispiel für eine Wärme-Kraft Maschine, das auf Marian von Smoluchowski [?] zurückgeht: In einem Behälter befindet sich eine Ratsche, die über eine Achse mit einem Flügelrad in einem zweiten Behälter verbunden ist. Beide Behälter sind mit Gas gefüllt, der Ratschenbehälter bei einer Temperatur  $T_1$ , der Behälter mit dem Flügelrad bei einer Temperatur  $T_2$ . Außerhalb der beiden Behälter ist auf der Achse ein Rolle angebracht, über die ein Seil läuft, an dem ein Gewicht hängt. Feynman argumentiert nun, daß durch die Stöße mit dem Gas das Flügelrad mal in die eine, Mal in die andere Richtung gestoßen wird. Die Ratsche erlaubt aber nur Bewegungen in die eine Richtung, so daß bei geeigneter Anordnung das Gewicht an dem Seil gehoben werden kann, da sich die Achse mit der Rolle nur in eine Richtung dreht. Diese Argumentation sollte sogar für  $T_1 \geq T_2$  funktionieren. Damit hätte man ein perpetuum mobile zweiter Art, eine Maschine, die Wärme in Arbeit verwandelt. Das ist offensichtlich im Widerspruch zum zweiten Hauptsatz. Feynman löst diesen Widerspruch natürlich auf: Die Maschine funktioniert nur für  $T_1 < T_2$ . In ganz ähnlicher Weise kann man sich klar machen, daß Brownsche Bewegung in einem periodischen Potential keine Vorzugsrichtung haben kann. Wäre dies der Fall, so könnte man damit allein aus Wärmeenergie ein Konzentrationsgefälle erzeugen und somit Wärme in chemische Energie überführen, wieder im Widerspruch zum zweiten Hauptsatz.

Anders ist die Situation, wenn sich das System nicht im Gleichgewicht befindet. Dann verbietet der zweite Hauptsatz den Transport nicht und die in den obigen Beispielen diskutierten Mechanismen können zu Transport führen. Das ist zum Beispiel dann der Fall, wenn man die Ratsche an ein nicht-thermisches, farbiges Rauschen koppelt. Diesen Transport nennt man rauschinduzierten Transport.

Als Übersichtsartikel für den rauschinduzierten Transport ist:

Peter Reimann: Brownian motors: noisy transport far from equilibrium. *Physics Reports*, **361**, Issues 2-4, Pages 57-265 (April 2002) Archiv: cond-mat/0010237 <http://arXiv.org/abs/cond-mat/0010237> [?]

zu empfehlen. Dieser Artikel enthält auch eine ausführliche Literaturliste.

### 7.1.2 Motivation der Modelle für rauschinduzierten Transport

Die Modelle für rauschinduzierten Transport, die wir im Folgenden diskutieren werden, sind ganz ähnlich zur Brownschen Bewegung in einem periodischen Potential. Die wesentliche Idee ist, in dem Modell zusätzlich oder an Stelle des thermischen Rauschens ein zeitlich korreliertes Rauschen einzufügen. Zeitlich korreliertes Rauschen entspricht nicht einem thermischen Gleichgewicht, man erhält also keinen Widerspruch zum zweiten Hauptsatz, wenn diese Modelle Transport zeigen. Wie läßt sich zeitlich korreliertes Rauschen motivieren? Zunächst ist zu erwarten, daß man ähnlich wie bei der Brownschen Bewegung mesoskopische Systeme betrachten muß. Beispiele für das Brownsche Teilchen wären also große Moleküle. Große Moleküle können bei geeigneter Anordnung tief inelastische Stöße mit der Umgebung zeigen. Zum Beispiel ist denkbar, daß sich ein kleineres Molekül für einige Zeit an das große Molekül anlagert oder sogar chemisch mit ihm reagiert. Die dabei auftretenden Reaktionszeiten können lang genug sein, um zu einem zeitlich korreliertem Rauschen zu führen. Daher können solche Effekte zum Beispiel in biologischen Zellen realisiert sein. Ein entsprechendes, biologisch motiviertes Modell wurde 1993 von Magnasco [?] vorgeschlagen. Es handelt sich um ein stark vereinfachtes Modell zur Erklärung der Bewegung von Motorproteinen.

#### Motorproteine.

Motorproteine sind Enzyme, die chemische Energie in Bewegung umsetzen können, um zum Beispiel intrazellulären Transport zu realisieren. Man kennt inzwischen etwa 100 verschiedene Motorproteine. Drei wichtige Beispiele sind Myosin, Kinesin und Dynein. Myosin ist für die Muskelkontraktion verantwortlich, Kinesin und Dynein sorgen für den intrazellulären Transport entlang von Mikrotubuli. Mikrotubuli sind der Hauptbestandteil des Cytoskeletts, das daneben noch aus intermediären Filamenten und Actinfilamenten besteht. Die Mikrotubuli erstrecken sich von der Zellmitte, der Zentriole, bis in die äußeren Bereiche der Zelle. Sie sind aus Tubulin gebildet, einem polaren Molekül. Die Mikrotubuli bestehen aus Tubulinfilamenten, die sich zu einer Röhre von etwa 25nm Durchmesser zusammenlagern. Durch die Polarität des Tubulin hat der Mikrotubus eine Richtung. Das – Ende befindet sich an der Zentriole, das + Ende außen.

Die Motorproteine Kinesin und Dynein sind Enzyme, die an die Mikrotubuli binden und an ihnen entlang laufen. Dabei wird chemische Energie aus der ATP-Hydrolyse in mechanische Energie umgewandelt. Die Motorproteine transportieren beispielsweise Zellorganelle in der Zelle. Es ist heute recht gut möglich, die Bewegung der Motorproteine *in vitro* zu studieren. Eine erste, detaillierte Studie in dieser Richtung stammt von Svoboda et al. [?]. Ähnliche Experimente werden von einer Reihe von Gruppen vorgenommen, etwa auch hier in Heidelberg am EMBL.

Als gute Einführung in das Zellskelett und die Motorproteine von biologischer Seite kann z.B. Alberts et al [?] dienen.

Lange war unklar, warum es in diesen Systemen überhaupt zu Transport kommen kann. Die ATP-Hydrolyse zeichnet keine Bewegungsrichtung aus, ebensowenig die thermischen Stöße mit der Umgebung. Die Brownsche Bewegung in einem periodischen Potential, als die man etwa die Bewegung entlang eines Mikrotubus modellieren könnte, zeichnet keine Richtung aus. Dies gilt auch noch dann, wenn man keine Inversionssymmetrie hat. In der Tat muß man aufgrund der Asymmetrie von Tubulin davon ausgehen, daß keine Inversionssymmetrie vorliegt. Wir werden im folgenden einfache Modelle entwickeln und lösen, die alle drei Bedingungen erfüllen (periodisches Potential ohne Inversionssymmetrie, thermisches Rauschen und korrelierte Fluktuationen) und zeigen, daß in diesen Modellen ganz typisch Transport auftritt.

### 7.1.3 Modelle

#### 7.1.3.1 fluktuierende oder periodische Kraft

##### Grundsätzliches

Ein erstes, einfaches Modell beschreibt ein Teilchen in einem eindimensionalen, periodischen Potential  $V(x)$  unter dem Einfluß einer stochastischen Kraft  $\xi(t)$ , die als weißes Rauschen modelliert wird, und einer zusätzlichen zeitkorrelierten stochastischen Kraft  $z(t)$ . Die Periode des Potentials sei  $L$ , es gilt also  $V(x+L) = V(x)$ . Im überdämpften Grenzfall lautet die Bewegungsgleichung für die Koordinate  $x(t)$  des Teilchens

$$\frac{dx}{dt} = f(x) + \sqrt{2T}\xi(t) + z(t)$$

$f(x) = -\frac{dV}{dx}$  ist die Kraft, die sich aus dem Potential  $V(x)$  ergibt. Der zweite Term beschreibt das thermische Rauschen.  $\xi(t)$  ist ein Gaußsches, weißes Rauschen mit  $\langle \xi(t)\xi(t') \rangle = \delta(t-t')$ . Die zusätzliche stochastische Kraft  $z(t)$  hat Mittelwert  $\langle z(t) \rangle = 0$ . Betrachten wir ein einfaches Beispiel, an dem klar wird, daß in diesen Modellen ein Transport auftreten kann: Sei  $z(t)$  ein dichotomer Prozeß, der die Werte  $\pm z_0$  annimmt.  $z_0$  soll so gewählt sein, daß falls  $f(x) - z_0 < 0$  gilt,  $f(x) + z_0 > 0$  gilt. Außerdem soll es ein  $x$  geben, so daß  $f(x) \pm z_0 > 0$ . Bei  $T = 0$  ist dann nur ein Transport nach rechts möglich, es gilt  $\langle dx/dt \rangle > 0$ .

Allgemein kann  $z(t)$  durch einen Markov Prozeß mit einem erzeugenden Operator  $M_z$  beschrieben werden. Die Wahrscheinlichkeitsdichte dieses Markovprozesses  $p(z, t)$  erfüllt die Fokker-Planck Gleichung

$$\frac{\partial p(z, t)}{\partial t} = M_z p(z, t)$$

Wir diskutieren im Folgenden eine sehr allgemeine Klasse von Markovprozessen. Wir fordern, daß der Operator  $M_z$  die Eigenwertgleichung

$$M_z \phi_n(z) = -\lambda_n \phi_n(z)$$

erfüllt mit  $\lambda_0 = 0$ ,  $\lambda_1 > 0$ ,  $\lambda_{n+1} \geq \lambda_n$ . Weiter nehmen wir an, daß die Eigenfunktionen die Bedingung

$$z\phi_n(z) = \gamma_{n,n+1}\phi_{n+1}(z) + \gamma_{n,n-1}\phi_{n-1}(z)$$

erfüllt. Als Konsequenz gilt

$$\phi_n(z) = q_n(z)\phi_0(z)$$

wobei  $q_n(z)$  orthogonale Polynome mit der Gewichtsfunktion  $\phi_0(z)$  sind,

$$\int dz q_n(z) q_m(z) \phi_0(z) = \delta_{n,m}$$

Die stationäre Verteilung  $\phi_0(z)$  sollte eine gerade Funktion sein, damit nicht schon durch die fluktuierende Kraft eine Richtung ausgezeichnet wird. Diese Klasse von Markovprozessen ist recht allgemein, sie enthält alle stochastischen Prozesse, die bisher in der Vorlesung diskutiert wurden. Der kleinste, nicht verschwindende Eigenwert  $\lambda_1$  liefert via  $\tau = \lambda_1^{-1}$  die Korrelationszeit des Rauschprozesses  $z(t)$ . Es gilt

$$\langle z(t)z(t') \rangle \propto e^{-|t-t'|/\tau}$$

für hinreichend große Zeitdifferenzen.

Uns interessieren die Eigenschaften von  $x(t)$ . Dazu stellen wir eine Fokker-Planckgleichung für die Wahrscheinlichkeitsdichte  $\rho(x, z, t)$  der beiden stochastischen Prozesse  $x(t)$  und  $z(t)$  auf. Sie lautet

$$\frac{\partial \rho(x, z, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} \left( f(x) + z - T \frac{\partial}{\partial x} \right) \rho(x, z, t) + M_z \rho(x, z, t)$$

Wir sind an der Frage interessiert, ob es einen stationären Transport gibt. Dazu genügt es, die stationäre Wahrscheinlichkeitsdichte  $\rho(x, z)$  zu untersuchen. Der Strom in  $x$  ergibt sich dann aus dem Mittelwert

$$J = \frac{1}{L} \int_0^L dx \int dz \left( f(x) + z - T \frac{\partial}{\partial x} \right) \rho(x, z)$$

### Ein lösbares Modell

Betrachten wir einen dichotomen Prozeß, bei dem  $z(t)$  mit gleicher Wahrscheinlichkeit die beiden Werte  $\pm z_0$  annimmt. Ferner sei  $T = 0$ . Es gilt

$$\phi_0(z) = \frac{1}{2}(\delta(z - z_0) + \delta(z + z_0))$$

$$\phi_1(z) = \frac{1}{2}(\delta(z - z_0) - \delta(z + z_0))$$

also  $z\phi_0(z) = z_0\phi_1(z)$ ,  $\gamma_{0,1} = z_0$ . Ich setze  $\rho(x, z) = p_0(x)\phi_0(z) - p_1(x)\phi_1(z)$ . Damit gilt

$$-\frac{d}{dx} f(x)p_0(x) + z_0 \frac{d^2}{dx^2} p_1(x) = 0$$

$$-\frac{d}{dx}f(x)p_1(x)' + z_0 \frac{d^2}{dx^2}p_0(x) - \lambda_1 \frac{d}{dx}p_1(x) = 0$$

Es gilt die Normierungsbedingungen

$$\int_0^L p_0(x) dx = 1$$

sowie periodische Randbedingungen für  $p_0(x)$  und  $p_1(x)'$ . Beide Gleichungen können einmal integriert werden, man erhält

$$-f(x)p_0(x) + z_0 \frac{d}{dx}p_1(x) = J$$

$$-f(x)p_1(x)' + z_0 \frac{d}{dx}p_0(x) - \lambda_1 p_1(x) = 0$$

wobei in der ersten Gleichung der Strom  $J$  als Integrationskonstante auftritt und in der zweiten Gleichung die Integrationskonstante verschwindet. Man erhält mit  $D = z_0^2/\tau$

$$\sqrt{\frac{D}{\tau}}J = \tau^{-1}f(x)p_1(x) + f^2(x)p_1'(x) - D\tau^{-1}p_1'(x).$$

Mit dem Ansatz  $p_1(x) = g(x)\exp(-\Phi(x))$ ,  $\Phi(x) = -\int_0^x dy \frac{f(y)}{D-\tau f^2(y)}$ , erhält man

$$g'(x) = -J\sqrt{D\tau} \frac{\exp(\Phi(x))}{D - \tau f^2(x)}$$

und damit

$$p_1(x) = \left( C - J\sqrt{D\tau} \int_0^x dy \frac{\exp(\Phi(y))}{D - \tau f^2(y)} \right) \exp(-\Phi(x)).$$

Die beiden Konstanten  $C$  und  $J$  erhält man aus der Periodizität  $p_1(x) = p_1(x+L)$  und aus der Normierungsbedingung  $\int_0^L dx p_0(x) = \frac{1}{\lambda_{0,1}} \int_0^L dx (\tau^{-1} - f'(x))p_1(x) = 1$ . Damit gilt

$$C = \exp(-\Phi(L)) \left( C - J\sqrt{D\tau} \int_0^L dx \frac{\exp(\Phi(x))}{D - \tau f^2(x)} \right)$$

und

$$1 = \frac{1}{\sqrt{D\tau}} \int_0^L dx \left( C - J\sqrt{D\tau} \int_0^x dy \frac{\exp(\Phi(y))}{D - \tau f^2(y)} \right) \exp(-\Phi(x))(1 - \tau f'(x)).$$

Für den Strom erhält man  $J = (1 - \exp(\Phi(L)))/Q$  mit

$$Q = \int_0^L dx \frac{\exp(\Phi(x))}{D - \tau f^2(x)} \int_0^L dx (1 - \tau f'(x)) \exp(-\Phi(x)) - (1 - \exp(\Phi(L))) \int_0^L dx (1 - \tau f'(x)) \exp(-\Phi(x)) \int_0^x dy \frac{\exp(\Phi(y))}{D - \tau f^2(y)}.$$

Allerdings gilt diese Lösung nur, wenn  $D/\tau > |f(x)|^2$  für alle  $x$  gilt, also nur für hinreichend große  $z_0$ . Für  $|z_0| < |f(x)|$  für einige  $x$  erhält man  $\delta$ -Beiträge zu  $p_0(x)$ .

### periodische Kraft

Eine verwandte Klasse von Modellen beschreibt den Transport unter dem Einfluß einer periodischen Kraft  $z(t) = A \sin(\omega t)$ . Diese Modelle sind eher analog zu der stochastischen Resonanz, wie wir sie bisher studiert haben. Die entsprechende Fokker-Planck Gleichung lautet

$$\frac{\partial \rho(x,t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} \left( f(x) + A \sin(\omega t) - T \frac{\partial}{\partial x} \right) \rho(x,t)$$

Für diese Modelle kann man den mittleren Strom berechnen.

#### 7.1.3.2 fluktuierendes Potential

Die Modelle, die wir bisher eingeführt haben, sind zwar von sich heraus interessant, es wurde aber vielfach kritisiert, daß sie die Motorproteine nicht gut modellieren. Motorproteine ändern während der ATP-Hydrolyse mehrfach ihre Konformation und ihre Ladung. Bei einer Änderung der Konformation ändert sich auch die Bindung zwischen dem Motorprotein und dem Mikrotubus. Die Änderung der Bindung läßt sich besser durch ein fluktuierendes Potential als durch eine additive, fluktuierende Kraft modellieren. Ein einfaches, fluktuierendes Potential wäre  $z(t)V(x)$ , wobei  $z(t)$  ein Rauschprozeß ist, der zwei oder mehr verschiedene Werte annimmt. Die Anzahl der Werte, die  $z(t)$  annimmt, entspricht der Anzahl der Konfigurationen des Motorproteins. Im übrigen lassen sich diese Modelle aber genauso behandeln wie die oben beschriebenen mit einer fluktuierenden Kraft. Die Langevingleichung lautet

$$\frac{dx}{dt} = -z(t) \frac{\partial V(x)}{\partial x} + \sqrt{2T} \xi(t)$$

und die zugehörige Fokker-Planck Gleichung

$$\frac{\partial \rho(x,z,t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} \left( z f(x) - T \frac{\partial}{\partial x} \right) \rho(x,z,t) + M_z \rho(x,z,t)$$

Der wesentliche Unterschied zu der additiven fluktuierenden Kraft besteht darin, daß  $z(t)$  keine gerade Verteilung haben muß. Man kann deshalb etwas allgemeiner als oben annehmen, daß

$$z \phi_n(z) = \gamma_{n,n+1} \phi_{n+1}(z) + \gamma_{n,n} \phi_n(z) + \gamma_{n,n-1} \phi_{n-1}(z), \quad n \geq 1$$

Damit gilt  $\langle z \rangle = \gamma_{0,0}$ . Wir können ohne Beschränkung der Allgemeinheit  $\gamma_{0,0} \geq 0$  annehmen. Für die Zweipunktfunktion gilt

$$\langle z(t)z(t') \rangle - \langle z \rangle^2 \propto e^{-|t-t'|/\tau}$$

Versuchen wir uns zunächst anschaulich klar zu machen, daß es in einem solchen Modell zu Transport kommen kann. Ich nehme dazu an, daß  $V(x)$  ein Sägezahnpotential (oder ein ähnlich geformtes Potential) ist und daß  $z(t)$  ein dichotomer Prozeß ist, der die beiden Werte 0 und 1 annimmt. Das Potential hat ein Minimum bei  $x = L_1 < L/2$  und ein Maximum bei  $x = 0$  (also auch bei  $x = L$ ). Wir nehmen ferner an, daß die Temperatur hinreichend tief ist. Zum Zeitpunkt

$t_0$  soll  $z = 1$  sein. Das Teilchen wird sich dann mit großer Wahrscheinlichkeit im Minimum des Potentials befinden. Wenn  $z$  auf 0 springt, spürt das Teilchen kein Potential und wird eine Brownsche Bewegung durchführen, die keine Richtung bevorzugt. Nach einer gewissen Zeit springt  $z$  wieder auf 1. Dann befindet sich das Teilchen mit einer größeren Wahrscheinlichkeit im Bereich  $x < 0$  als im Bereich  $x > L$ , und wird deshalb eher in ein Minimum links von dem laufen, aus dem es gestartet war, als in ein Minimum weiter rechts. Daher ergibt sich ein Transport nach links, der stationäre Strom sollte negativ sein.

Die stationäre Lösung kann hier (und natürlich auch für den Fall einer fluktuierenden Kraft) nach den Eigenfunktionen von  $M_z$  entwickelt werden. Wir machen den Ansatz

$$\rho(x, z) = p_0(x)\phi_0(z) + \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \phi_n(z)p'_n(x)$$

Eingesetzt in die Fokker-Planck Gleichung erhält man durch Koeffizientenvergleich Rekursionsgleichungen für die Funktionen  $p_n(x)$ .

$$J = \gamma_{0,0}f(x)p_0(x) - Tp'_0(x) - \gamma_{0,1}f(x)p'_1(x)$$

$$\gamma_{0,1}f(x)p_0(x) = \lambda_1p_1(x) + \gamma_{1,1}f(x)p'_1(x) - Tp''_1(x) - \gamma_{1,2}f(x)p'_2(x)$$

$$\gamma_{n-1,n}f(x)p'_{n-1}(x) = \lambda_np_n(x) + \gamma_{n,n}f(x)p'_n(x) - Tp''_n(x) - \gamma_{n,n+1}f(x)p'_{n+1}(x), \quad n > 1.$$

Für einen Prozeß  $z(t)$ , der nur endlich viele verschiedene Werte annimmt, bricht diese Folge von Gleichungen bei einem endlichen  $n$  ab und man erhält einen geschlossenen Satz von Gleichungen. Ist das nicht der Fall, kann man hoffen, daß man näherungsweise bei einem endlichen  $n$  abbrechen kann und der Fehler dadurch nicht zu groß wird. Das ist im Einzelfall natürlich zu überprüfen.

## 7.1.4 Lösungen

### 7.1.4.1 Grenzfälle

Sowohl für den Fall einer fluktuierenden Kraft als auch für ein fluktuierendes Potential kann man den Grenzfall  $\tau \rightarrow 0$  untersuchen. Für eine fluktuierende Kraft betrachtet man eine  $\tau$ -Entwicklung für feste Rauschstärke  $D = \gamma_{0,1}^2/\tau$ . Für ein fluktuierendes Potential würde das zu beliebig großen Potentialfluktuationen führen, weshalb man dafür  $\gamma_{n,m}$  fest hält. Wir betrachten hier nur ein fluktuierendes Potential. Mit

$$p_0(x) = p_{00}(x) + p_{01}(x)\tau + p_{02}(x)\tau^2 + O(\tau^3)$$

für  $p_0(x)$  und ebenso

$$J = J_0 + J_1\tau + J_2\tau^2 + O(\tau^3)$$

gilt  $p_n(x) = O(\tau^n)$ . In führender Ordnung erhält man

$$p_{00}(x) = Ce^{-\frac{\gamma_{0,0}V(x)}{\tau}}$$

und  $J_0 = 0$ .  $C$  wird durch die Normierung von  $p_{00}(x)$  festgelegt. In der nächsten Ordnung spielt  $p_1(x)$  zusätzlich eine Rolle und die zweite Rekursionsgleichung muß mitgenommen werden. Mit dem Ansatz

$$p_{01}(x) = C^{(1)}(x)e^{-\frac{\gamma_{0,0}V(x)}{T}}$$

findet man

$$C^{(1)}(x) = -\frac{1}{T} \int_0^x \left( J_1 + \gamma_{0,1}^2 f(y) \left\{ \frac{d}{dy} f(y) p_{00}(y) \right\} \right) e^{\frac{\gamma_{0,0}V(y)}{T}} dy + C_0^{(1)}$$

Die Konstante  $C_0^{(1)}$  erhält man aus der Normierung  $\int_0^L p_{01}(x) dx = 0$ .  $J_1$  bestimmt man aus der periodischen Randbedingung  $C^{(1)}(0) = C^{(1)}(L)$ . Man erhält

$$J_1 = -\frac{\gamma_{0,1}^2}{T} \gamma_{0,0} \frac{\int_0^L f(x)^3 dx}{\int_0^L e^{-\frac{\gamma_{0,0}V(x)}{T}} dx \int_0^L e^{\frac{\gamma_{0,0}V(x)}{T}} dx}$$

Das Vorzeichen von  $J_1$  hängt nur von  $\gamma_{0,0} \int_0^L f(x)^3 dx$  ab und ist für alle Rauschprozesse gleich. Für eine Situation, wie wir sie oben zur anschaulichen Erklärung des Transports benutzt haben, ist  $J < 0$ , so wie erwartet. Die zweite Ordnung läßt sich auch noch geschlossen berechnen. Ihr Vorzeichen hängt von  $\gamma_{0,0}$  und  $\gamma_{1,1}$  ab und kann daher für unterschiedliche Rauschprozesse unterschiedlich sein.

#### 7.1.4.2 Stückweise lineare Potentiale

Für stückweise lineare Potentiale werden die Rekursionsgleichungen für die  $p_n(x)$  Differentialgleichungen mit konstanten Koeffizienten. Wir nehmen an, daß wir das Intervall  $[0, L]$  in  $N_I$  Teilintervalle  $I_k = [L_{k-1}, L_k]$  aufteilen, wobei  $L_0 = 0$ ,  $L_{N_I} = L$  gilt. Für  $x \in I_k$  soll  $f(x) = f_k$  sein. Für  $x \in I_k$  erhält man dann

$$\begin{aligned} J &= \gamma_{0,0} f_k p_0(x) - T p_0'(x) - \gamma_{0,1} f_k p_1'(x) \\ \gamma_{0,1} f_k p_0(x) &= \lambda_1 p_1(x) + \gamma_{1,1} f_k p_1'(x) - T p_1''(x) - \gamma_{1,2} f_k p_2'(x) \\ \gamma_{n-1,n} f_k p_{n-1}'(x) &= \lambda_n p_n(x) + \gamma_{n,n} f_k p_n'(x) - T p_n''(x) - \gamma_{n,n+1} f_k p_{n+1}'(x), \quad n > 1. \end{aligned}$$

Dies sind Differentialgleichungen mit konstanten Koeffizienten. Mit einem Exponentialansatz  $p_n(x) = \exp(\alpha x)$  kann das System gelöst werden, und man erhält für  $\alpha$  eine Eigenwertgleichung. Die Lösungen dieser Eigenwertgleichung bezeichne ich mit  $\alpha_k^{(r)}$ . Der Index  $k$  indiziert das Intervall, der obere Index  $r$  nummeriert die Eigenwerte durch. Als vollständigen Ansatz kann man die einzelnen Lösungen linear kombinieren,

$$\begin{aligned} p_0(x) &= \sum_r c_{r,k} a_{0,k}^{(r)} \alpha_k^{(r)} e^{\alpha_k^{(r)} x} + b_{0,k} \quad \text{falls } x \in I_k \\ p_n(x) &= \sum_r c_{r,k} a_{n,k}^{(r)} e^{\alpha_k^{(r)} x} + b_{n,k} \quad \text{falls } n \geq 1, x \in I_k \end{aligned}$$

wobei  $a_{n,k}^{(r)}$  zu einem Vektor  $\vec{a}_k^{(r)}$  zusammengefaßt die Eigenvektoren zu den Eigenwerten  $\alpha_k$  sind. Das zu lösende Eigenwertproblem lautet

$$\mathbf{A}_k \vec{a}_k = \alpha_k \mathbf{B}_k \vec{a}_k + T \alpha_k^2 \vec{a}_k$$

wobei  $\mathbf{A}$  die Diagonalmatrix

$$\mathbf{A}_k = \text{diag}(0, \lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \dots)$$

ist und  $\mathbf{B}$  die Tridiagonalmatrix

$$\mathbf{B}_k = f_k \begin{pmatrix} \gamma_{0,0} & \gamma_{0,1} & & & & \\ \gamma_{1,0} & \gamma_{1,1} & \gamma_{1,2} & & & \\ & \gamma_{2,1} & \gamma_{2,2} & & & \\ & & & \ddots & & \\ & & & & \ddots & \\ & & & & & \ddots \end{pmatrix}$$

Da die Matrix  $\mathbf{A}$  nichtnegativ ist, ist  $\sqrt{\mathbf{A}}$  definiert und man kann das Eigenwertproblem umschreiben zu

$$\begin{pmatrix} -\frac{\mathbf{B}_k}{T} & \sqrt{\frac{\mathbf{A}_k}{T}} \\ \sqrt{\frac{\mathbf{A}_k}{T}} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{a} \\ \frac{1}{\alpha} \sqrt{\frac{\mathbf{A}_k}{T}} \vec{a} \end{pmatrix} = \alpha \begin{pmatrix} \vec{a} \\ \frac{1}{\alpha} \sqrt{\frac{\mathbf{A}_k}{T}} \vec{a} \end{pmatrix}$$

Das ist das Eigenwertproblem einer hermiteschen Matrix, die Eigenwerte  $\alpha_k^{(r)}$  sind also reell. Ein Eigenwert ist immer 0 und darf nicht betrachtet werden. Abhängig vom Rauschprozeß kann dieses Eigenwertproblem entweder analytisch oder numerisch gelöst werden. Hat man es gelöst, müssen noch die Koeffizienten  $c_{r,k}$  bestimmt werden. Beschränkt man die Matrizen  $\mathbf{A}$  und  $\mathbf{B}$  auf  $N \times N$ -Matrizen, dann sind  $N_I(2N - 1)$  Koeffizienten zu bestimmen. Als weitere Unbekannte hat man den Strom  $J$ . Die  $N_I(2N - 1) + 1$  Unbekannten können aus den Stetigkeitsbedingungen und der Normierungsbedingung bestimmt werden. An den Sprungstellen der Kraft muß gelten:

1.  $p_0(x)$  ist stetig.
2.  $p_n(x)$  ist stetig für  $n > 0$ .
3.  $p'_n(x)$  ist stetig für  $n > 0$ .

Außerdem gilt die Normierungsbedingung

$$\int_0^L dx p_0(x) = 1$$

Das sind zusammen gerade  $N_I(2N - 1) + 1$  Bedingungen. Das zugehörige inhomogene lineare Gleichungssystem ist lösbar, muß aber in der Regel auf dem Rechner gelöst werden.

Löst man das Eigenwertproblem und die Bestimmung der Koeffizienten auf dem Rechner, so muß man für einen Parametersatz  $N_I$  Eigenwertprobleme von  $N \times N$  Matrizen lösen und anschließend das lineare Gleichungssystem. Ist  $N_I = 2$  (oder 3 oder 4), so läßt sich die Rechnung selbst für  $N = 50$  so schnell durchführen, daß man in wenigen Minuten beispielsweise den Strom als Funktion eines Parameters plotten kann. Zudem zeigt sich, daß das Verfahren als Funktion von  $N$  sehr gut konvergiert. Für Rauschprozesse, bei denen die Matrizen unendlich groß sind, genügt es meist,  $N \leq 50$  zu betrachten.

## 7.1.5 Ergebnisse und Diskussion

### 7.1.5.1 Ergebnisse für ein fluktuierendes Potential

Wir haben schon gesehen, daß die Modelle mit einem fluktuierenden Potential für die biologischen Fragestellungen realistischer erscheinen. Die Potentialfluktuationen entsprechen den Konformationsänderungen und Ladungsänderungen während der ATP-Hydrolyse. Man wird also annehmen, daß das Potential nur zwischen einigen Werten fluktuiert und das nicht beliebige Übergänge zwischen diesen Werten möglich sind. Diese Situation wird am besten durch eine Summe von dichotomen Prozessen wiedergegeben. Ein einzelner dichotomer Prozeß ist ein Prozeß  $z(t)$ , bei dem  $z$  zwei verschiedene Werte annimmt. In der Regel nimmt man an, daß beide Werte mit gleicher Wahrscheinlichkeit auftreten, es gibt aber auch andere Möglichkeiten. Die stationäre Verteilung ist dann

$$\phi_0(z) = \frac{1}{2}(\delta(z - z_1) + \delta(z - z_2))$$

Es gilt  $\langle z \rangle = \gamma_{0,0} = \frac{1}{2}(z_1 + z_2)$ . Damit erhält man

$$z\phi_0(z) = \gamma_{0,0}\phi_0(z) + \gamma_{0,1}\phi_1(z)$$

mit

$$\gamma_{0,1}\phi_1 = (z - \gamma_{0,0})\phi_0 = p_1(z)\phi_0(z)$$

Die Normierungsbedingung  $\int dz p_1(z)^2 \phi_0(z) = 1$  liefert

$$\frac{1}{\gamma_{0,1}^2} \int dz (z - \gamma_{0,0})^2 \phi_0(z) = \frac{1}{4\gamma_{0,1}^2} (z_1 - z_2)^2 = 1$$

und damit  $\gamma_{0,1} = \frac{1}{2}(z_1 - z_2)$ . Als nächstes findet man  $\gamma_{1,1} = \gamma_{0,0}$  und  $\gamma_{1,2} = 0$ . Es gilt also  $N = 2$  für den dichotomen Prozeß. Das muß auch so sein, da  $z(t)$  nur zwei Werte annimmt und daher alle  $\phi_n(z)$  Linearkombinationen von  $\delta(z - z_1)$  und  $\delta(z - z_2)$  sind und es nur zwei linear unabhängige Kombinationen geben kann.

Addiert man zwei dichotome Prozesse, so nimmt ihre Summe die Werte  $2z_1, z_1 + z_2, 2z_2$  an, wobei  $z_1 + z_2$  mit doppelter Wahrscheinlichkeit auftritt. In diesem Fall gilt analog  $N = 3$ , und so fort. Die entsprechenden  $\gamma_{n,m}$  kann man leicht berechnen. Zudem ist es so, daß bei Summen von dichotomen Prozessen nur bestimmte Übergänge auftreten. Bei der Summe von zwei dichotomen Prozessen gibt es keinen Übergang von  $2z_1$  auf  $2z_2$ . Generell ändert sich  $z(t)$  immer nur um  $\pm|z_1 - z_2|$ . Daher erscheinen diese Prozesse für die Modellierung biologischer Systeme besonders geeignet.

Die in der Vorlesung gezeigten Ergebnisse finden sich in [?] und [?]. Interessant ist, daß man in diesen Systemen Ströme mit unterschiedlichen Vorzeichen beobachtet. Die Vorzeichenumkehr des Stroms bei der Variation von Parametern könnte erklären, warum unterschiedliche Motorproteine entlang des Mikrotubus in unterschiedliche Richtungen laufen.

### 7.1.5.2 Ergebnisse für eine additive, fluktuierende Kraft

Im Fall einer additiven, stochastischen Kraft stellt sich die Frage, wie man diese wählt. Die biologische Situation wird durch diese Modelle nicht so gut wiedergegeben. Es kann aber durchaus andere Systeme geben, die auch eine rauschinduzierten Transport zeigen, und die durch solche Modelle beschrieben werden können. Als generischer Prozeß mit endlicher Korrelationszeit gilt der Ornstein-Uhlenbeck Prozeß. Man kann ihn als unendliche Summe dichotomer Prozesse modellieren:

$$z(t) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=1}^N z_i(t)$$

Wie schon in den oben beschriebenen Rechnungen kann man sich auf endliche  $N$  beschränken. Die  $\gamma_{n,n+1}$  sind wie oben beschrieben zu berechnen,  $\gamma_{n,n} = 0$ . Ebenso wie für einen einzelnen, dichotomen Prozeß zeigen die Systeme mit einem Ornstein-Uhlenbeck Prozeß keine Stromumkehr. Sie wurde für eine additive, stochastische Kraft zuerst von Doering et al (siehe oben) gefunden, und zwar für einen Gaußschen Känguruhprozeß. Känguruhprozesse sind Prozesse, bei denen  $z(t)$  unstetig ist und Sprünge macht. Es bleibt über bestimmte Zeitintervalle, deren Längen exponentiell verteilt sind, konstant, und springt dann auf einen neuen Wert. Die Werte, die  $z(t)$  annimmt, werden gemäß der Verteilung  $\phi_0(z)$  gezogen. Generell zeigen Känguruhprozesse eine Stromumkehr (vom dichotomen Prozeß abgesehen). Die  $\gamma_{n,n+1}$  ergeben sich unmittelbar aus  $\phi_0(z)$ , ein Känguruhprozeß zeichnet sich zudem dadurch aus, daß  $\lambda_n = 1/\tau$  für alle  $n > 0$  gilt. Alle nicht verschwindenden Eigenwerte von  $M_z$  sind also entartet.

Ferner wird eine Stromumkehr auch für Summen von einer geraden Anzahl von dichotomen Prozessen beobachtet. Beide Fälle unterscheiden sich aber offenbar durch den Mechanismus, sie treten in ganz unterschiedlichen Parameterbereichen auf.

### 7.1.5.3 Ergebnisse für eine additive, periodische Kraft

Wir betrachten jetzt noch ein Modell mit einer additiven, periodischen Kraft,

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= f(x) + \sqrt{2T} \xi(t) + z(t) \\ z(t) &= A \sin(\omega t) \end{aligned}$$

Der Strom ist in diesem Fall

$$J(x,t) = [f(x) + A \sin(\omega t) - T \frac{d}{dx}] \rho(x,t)$$

und man definiert den mittleren Strom

$$\bar{J} = \lim_{t \rightarrow \infty} \int_t^{t+T} dt' \int_0^L dx J(x,t')$$

mit  $T = 2\pi/\omega$ . Dieses Modell wurde zuerst von Bartussek et al [?] untersucht. Der Grenzfall  $\omega \rightarrow 0$  kann analytisch bestimmt werden, im übrigen ist man auf numerische Lösungen angewiesen. Bartussek et al berechnen  $\bar{J}$  mit Hilfe einer Matrixkettenbruchentwicklung.

## 7.2 Fluktuierende Barrieren: Rauschinduzierte Stabilität und resonante Aktivierung

Ähnlich wie beim rauschinduzierten Transport treten in der Biologie und in der Chemie viele andere Prozesse auf, die durch eine gedämpfte Bewegung über eine fluktuierende Barriere beschrieben werden können. Den Fall einer festen Barriere haben wir schon ausführlich kennengelernt. Eine charakteristische Größe ist die mean first passage time  $\tau_{\text{mfpt}}$ , die wir schon kennengelernt haben. Im Übrigen kann die Beschreibung und Lösung eines Teilchens mit den Methoden erfolgen, die wir schon für den rauschinduzierten Transport kennengelernt haben.

Die Bewegungsgleichung ist die Langevingleichung

$$\dot{x} = f(x, t) + \xi(t)$$

mit  $f = -\frac{\partial V}{\partial x}$ .  $f$  (und  $V$ ) hängen wegen der Potentialfluktuationen von  $t$  ab.  $\xi(t)$  ist das bekannte weiße Rauschen  $\langle \xi \rangle = 0$ ,  $\langle \xi(t)\xi(t') \rangle = T\delta(t-t')$ . Ich nehme an, daß sich das Potential durch einen Zufallsprozeß  $z(t)$  in der Form

$$V(x, t) = V(x) + z(t)\Delta V(x)$$

parametrisieren läßt. Für den dichotomen Fall kann man eine statische Verteilung

$$p_0(z) = p_+\delta(z-1) + p_-\delta(z+1)$$

$V$  nimmt dann die beiden Werte  $V_+(x)$  and  $V_-(x)$ ,  $V(x) = \frac{1}{2}(V_+(x) + V_-(x))$ ,  $\Delta V(x) = \frac{1}{2}(V_+(x) - V_-(x))$ .

Was erwarten wir für dieses Modell? Für sehr schnelle Potentialfluktuationen wird sich das Teilchen wie in einem gemittelten Potential  $\langle V \rangle(x) = V(x) + \langle z \rangle \Delta V(x)$  bewegen. Für sehr langsame Potentialfluktuationen wird keine Fluktuation auftreten, bevor das Teilchen über die Barriere gelaufen ist. Die mean first passage time ist dann das Mittel der mean first passage times  $\tau_+$  und  $\tau_-$  der beiden Potential  $V_+(x)$  und  $V_-(x)$ . Was passiert dazwischen?

Die Fokker-Planck Gleichung für das Problem lautet

$$\frac{\partial \rho(x, z, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} \left( f(x) + z\Delta f(x) - T \frac{\partial}{\partial x} \right) \rho(x, z, t) + M_z \rho(x, z, t).$$

Die mean first passage time berechnen wir ähnlich wie im Fall des festen Potentials. Als Anfangsbedingung wählen wir  $\rho(x, z, 0) = \delta(x-x_i)\delta(z-z_i)$ . Bei  $x_a$  sei ein absorbierender Rand. Die Lösung der Fokker-Planck Gleichung für dieses Problem sei  $\rho(x, z, t|x_i, z_i, 0)$ . Die mean first passage time ist dann

$$\tau_{\text{mfpt}} = \int dz \int_{-\infty}^{x_a} dx \rho_1(x, z|x_i) \quad (7.1)$$

mit

$$\rho_1(x, z|x_i) = - \left\langle \int_0^\infty t \frac{\partial}{\partial t} \rho(x, z, t|x_i, z_i, 0) \right\rangle_{z_i} \quad (7.2)$$

Der Mittelwert wird über die stationäre Verteilung von  $z_i$  gebildet. Für  $\rho_1(x, z)$  erhält man eine inhomogene, stationäre Fokker-Planck Gleichung, die mit den bekannten Methoden gelöst werden kann.

Dieses Problem wurde zuerst von Doering und Gadoua (Phys. Rev. Lett. **69**, 2318 (1992)) diskutiert, etwas allgemeiner dann von Bier und Astumian (Phys. Rev. Lett. **71**, 1649 (1993)). Man beobachtet ein Phänomen, daß von diesen Autoren als *resonant activation* bezeichnet wurde.  $\tau_{\text{mfpt}}$  hat ein Minimum bei einem charakteristischen Wert der Korrelationszeit  $\tau$  des Rauschprozesses  $z(t)$ . Verstehen läßt sich dieses Phänomen, wenn man die Raten betrachtet. Für mittlere  $\tau$ , genauer in einem Bereich, in dem  $\tau$  klein verglichen mit  $\tau_{\pm}$  ist, aber groß im Vergleich zur der Zeit, die das Teilchen benötigt, um innerhalb des Potentialminimums zu relaxieren, sieht das Teilchen die Potentialfluktuationen sehr wohl, sie sind aber nicht schnell genug, um das Modell effektiv durch das mittlere Potential zu beschreiben. In diesem Fall ist die Rate, mit der das Teilchen die Barriere überwindet, durch die mittlere Rate gegeben, also  $\tau_{\text{mfpt}}^{-1} = p_+ \tau_+^{-1} + p_- \tau_-^{-1}$ . Ein entsprechendes Minimum läßt sich in den numerischen Ergebnissen sehr gut erkennen.

Ein anderer Effekt, der in diesen Systemen auftritt, ist die rauschinduzierte Stabilität. Man beobachtet sie in Systemen mit mehreren Minima und Barrieren, wenn die Tiefe der Minima fluktuiert. Als einfachstes Beispiel kann man ein System betrachten, das zwei Minima und eine Barriere dazwischen hat. Das Potential fluktuiert dichotom zwischen zwei verschiedenen Werten. In ersten Fall ist das linke Minimum tiefer als das rechte, im zweiten Fall umgekehrt. Dabei wird der erste Zustand mit deutlich höherer Wahrscheinlichkeit angenommen als der zweite. Das mittlere Potential sieht also dem ersten Fall sehr ähnlich. Wenn die Potentialfluktuationen sehr schnell sind, "sieht" das Teilchen das mittlere Potential und hält sich mit hoher Wahrscheinlichkeit links auf. Sind die Fluktuationen sehr langsam, wird das Teilchen sich jeweils adiabatisch an das Potential anpassen. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit ist dann durch den Mittelwert der Aufenthaltswahrscheinlichkeiten in dem einen oder anderen Potential gegeben und damit hält sich das Teilchen im Mittel auch links auf. Für mittlere Potentialfluktuationen hängt die Aufenthaltswahrscheinlichkeit von der Potentialform ab und man kann durch eine geeignete Wahl des Potentials die Aufenthaltswahrscheinlichkeit im rechten Minimum deutlich erhöhen. Durch die Potentialfluktuationen wird also der eigentlich instabile Zustand stabilisiert.

Es gibt für den Effekt der rauschinduzierten Stabilität eine anschauliche Erklärung. Bei hinreichend tiefen Temperaturen kann das System durch Ratengleichungen beschrieben werden. Voraussetzung ist, daß die Potentialfluktuationen langsam im Vergleich zu den Relaxationszeiten innerhalb der beiden Minima sind. Betrachtet man Ratengleichungen, so gilt ähnlich wie oben, daß für langsame Fluktuationen der Raten die Wahrscheinlichkeit dafür, daß Teilchen links zu finden, durch den Mittelwert der Wahrscheinlichkeit dafür in den beiden unterschiedlichen Potentialen gegeben ist. Sind die Fluktuationen dagegen schnell, dann ist das Verhalten durch die mittleren Raten bestimmt. Bei geeigneter Potentialform kann aber die Rate für den Übergang von links nach rechts größer als die für den Übergang von rechts nach links sein, dann würde sich das Teilchen eher rechts aufhalten. Das gilt natürlich nur solange, wie die Ratengleichungen anwendbar sind. Werden die Potentialfluktuationen zu schnell, dann kann das Teilchen nicht mehr in der Nähe des linken oder rechten Minimums in ein lokales Gleichgewicht kommen und man kann nicht mehr von einem linken oder rechten Zustand sprechen.

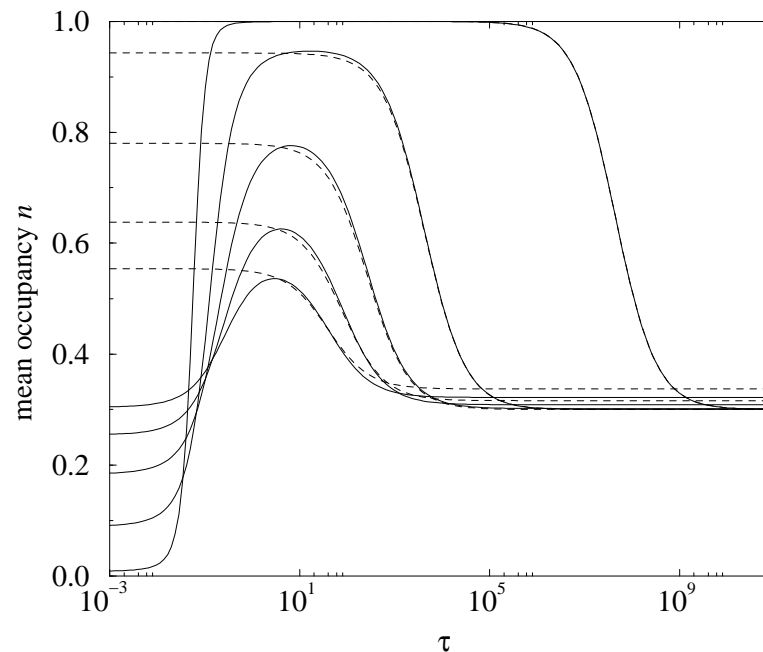


Abbildung 7.1: Besetzungswahrscheinlichkeit im rechten Minimum eines dichotom fluktuierenden Potentials mit zwei Minima, wie im Text beschrieben, für unterschiedliche Temperaturen.

Das qualitative Bild läßt sich in quantitativen Rechnungen sehr gut bestätigen. Das folgende Bild zeigt Ergebnisse für ein dichotom fluktuierendes Potential für unterschiedliche Temperaturen.

Die durchgezogenen Linien sind exakte Resultate, die hier wieder für ein stückweise lineares Potential aus der Fokker-Planck Gleichung berechnet wurden. Die gestrichelten Linien sind die Lösungen der Ratengleichungen. Die Ratengleichungen sind gültig, solange die Potentialfluktuationen langsam verglichen mit der Relaxationszeit innerhalb der Minima ist. Der Effekt der rauschinduzierten Stabilität ist sehr gut zu erkennen: Für mittlere  $\tau$  (Korrelationszeit für die Potentialfluktuationen) wird die Besetzungswahrscheinlichkeit im rechten Minimum bei tiefen Temperaturen sehr groß.

Modelle mit zwei oder mehreren Zuständen und fluktuierenden Raten für Übergänge zwischen diesen Zuständen sind typische Modelle, die in der Theoretischen Biologie zur Modellierung von Zellrezeptoren verwendet werden. Ein Zellrezeptor ist ein großes Molekül, daß typischerweise in oder an der Zellmembran sitzt und auf chemische, elektrische oder mechanische Reize reagiert. Im einfachsten Fall reagiert der Rezeptor auf ein spezielles Molekül. Bindet dieses Molekül an den Rezeptor, ändert sich dessen Konformation. Aufgrund der thermischen Fluktuationen kann eine Konformationsänderung auch auftreten, wenn das Molekül nicht an den Rezeptor bindet, aber mit sehr viel geringerer Wahrscheinlichkeit.

Übergänge zwischen den einzelnen Zuständen werden durch Raten beschrieben. Die chemische, mechanische oder elektrische Anregung des Rezeptors beschreibt man durch ein zeitliche Än-

derung der Raten. Da diese Änderung nicht zeitlich vorhersagbar ist, beschreibt man sie durch eine stochastische Fluktuation der Raten. Die Korrelationszeit der Fluktuationen entspricht der mittleren Zeit für Anregungen des Rezeptors. Modelle dieser Art wurden für sehr unterschiedliche Systeme untersucht und mit Messungen an Rezeptoren verglichen. In einigen Fällen werden dabei Abweichungen gefunden. Diese Abweichungen treten insbesondere dann auf, wenn die für die Messung charakteristische Zeitskala klein ist. In diesem Fall ist aber die Gültigkeit der Ratengleichungen nicht mehr garantiert. Man sollte solche Systeme durch ein Brownsches Teilchen in einem fluktuierenden Potential modellieren. Dabei tritt das Problem auf, daß die Form der Potentiale nicht ausreichend bekannt ist. Trotzdem kann man in einigen Fällen zumindest qualitative Erklärungen für das Verhalten der Systeme und speziell für die Abweichungen von den Resultaten der Ratengleichungen geben.

# Literaturverzeichnis

- [1] D. Walgraef, Spatio-Temporal Pattern Formation, Springer-Verlag Berlin, Heidelberg, New York 1996.
- [2] H. Haken, Synergetics. Springer-Verlag Berlin, Heidelberg, New York 1978.
- [3] M. C. Cross, P. C. Hohenberg: Pattern formation outside of equilibrium. Rev. Mod. Phys. 65, 851-1112 (1993).
- [4] SciLab <http://www.scilab.org/>
- [5] J.D. Murray: Mathematical Biology I: An Introduction. Springer-Verlag Berlin, Heidelberg, New York 2002.
- [6] H. Haken, Licht und Materie II. Laser. Bibliographisches Institut, Zürich 1981.