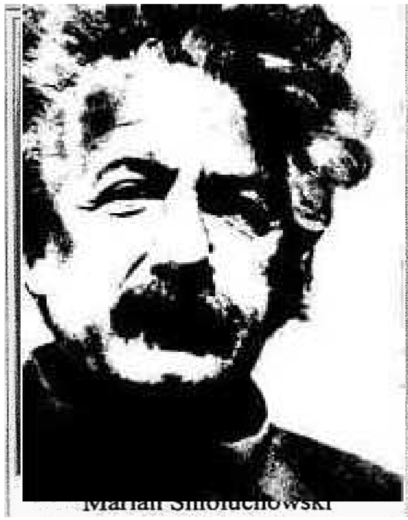
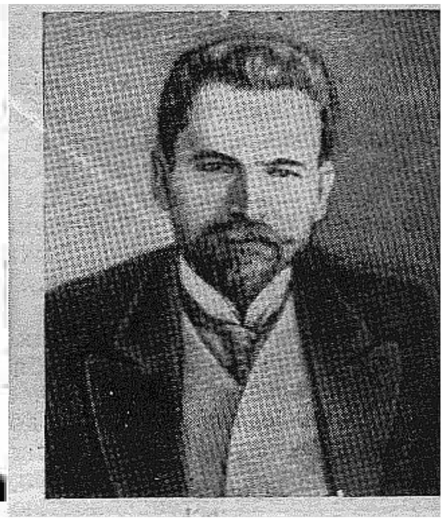
Theory of Brownian Motion with applications to physics, biology and evolution

Werner Ebeling

Humboldt-University Berlin

Instituto Pluridisciplinar, UCM Madrid





FOREWORD on the dynamics of fishes in the adriatic sea and Volterra’s model

Vito Volterra (1860-1940)

- In 1926 Volterra published a fundamantal work (parallel to a paper of Alfred Lotka): “Variazioni e fluttuazioni del numero d’ individui in specie animali conviventi” based on observations of fishery in the adriatic sea.
- This is one of the first models describing the dynamics of populations. We will present here a a different stochastic model inspired by Volterra’s work.

Verhulst-Pearl and Lotka-Volterra for populations

$$\frac{d}{dt}x = ax(1 - x / x_0)$$

Analytical sol known shows growths and saturation

$$\frac{d}{dt}x_i = a_i x_i (1 - \sum_j b_{ij} x_j)$$

i,j= 1,2,,...n
For n=2 Lotka-Volterra, for n=3 Lorenz as a special case.
In general many possibilities including growth, decay, competition, selection, CHAOS, evolution

Here we follow a different route, we assume that CHAOS-randomness is intrinsic, is added to the diff eqs

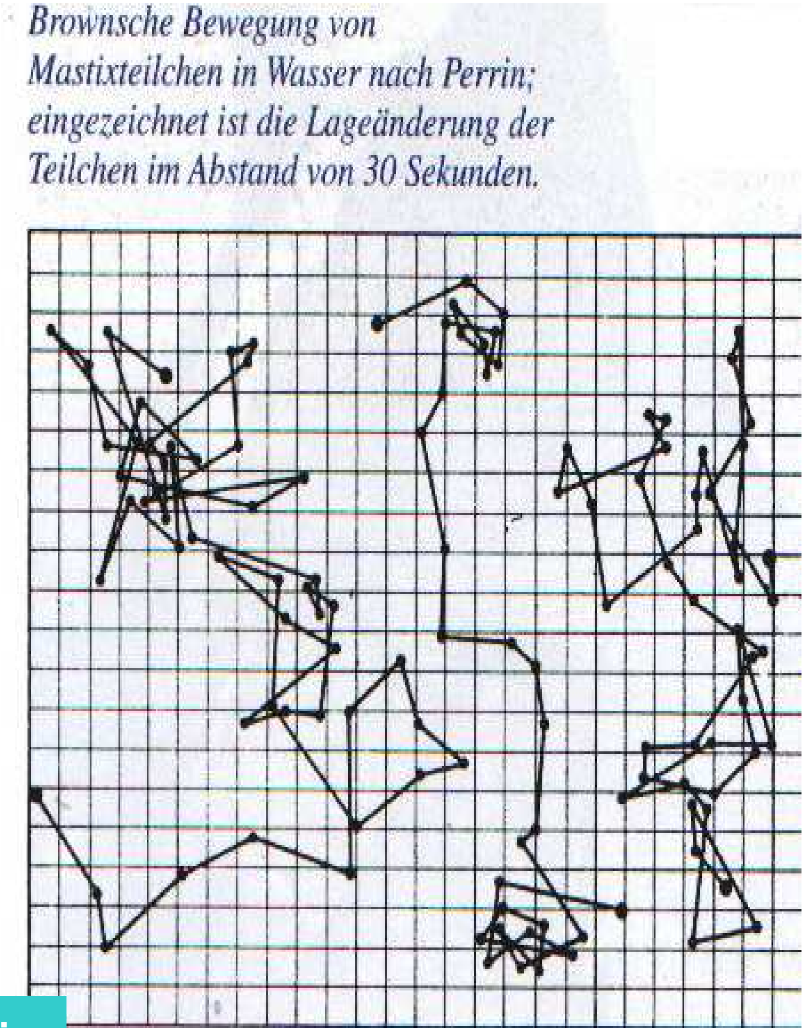
Contents

- History: Brown, Einstein and Smoluchowski,
- Briefly on the work of Langevin,Fokker,Planck, Klein,Kramers,Ornstein,Debye,Hückel,Onsager, Falkenhagen, Markov, Kolmogorov, Enskog, Grad, Zwanzig, Stratonovich,Klimontovich
- Model of selfpropelled Brownian motion
- Stochastic theory of selfpropelled particles
- Collective motions of interacting particles
- Conclusions and outlook on models of evolution

1. From Brown to Einstein-Smoluchowski

Robert Brown 1773-1858

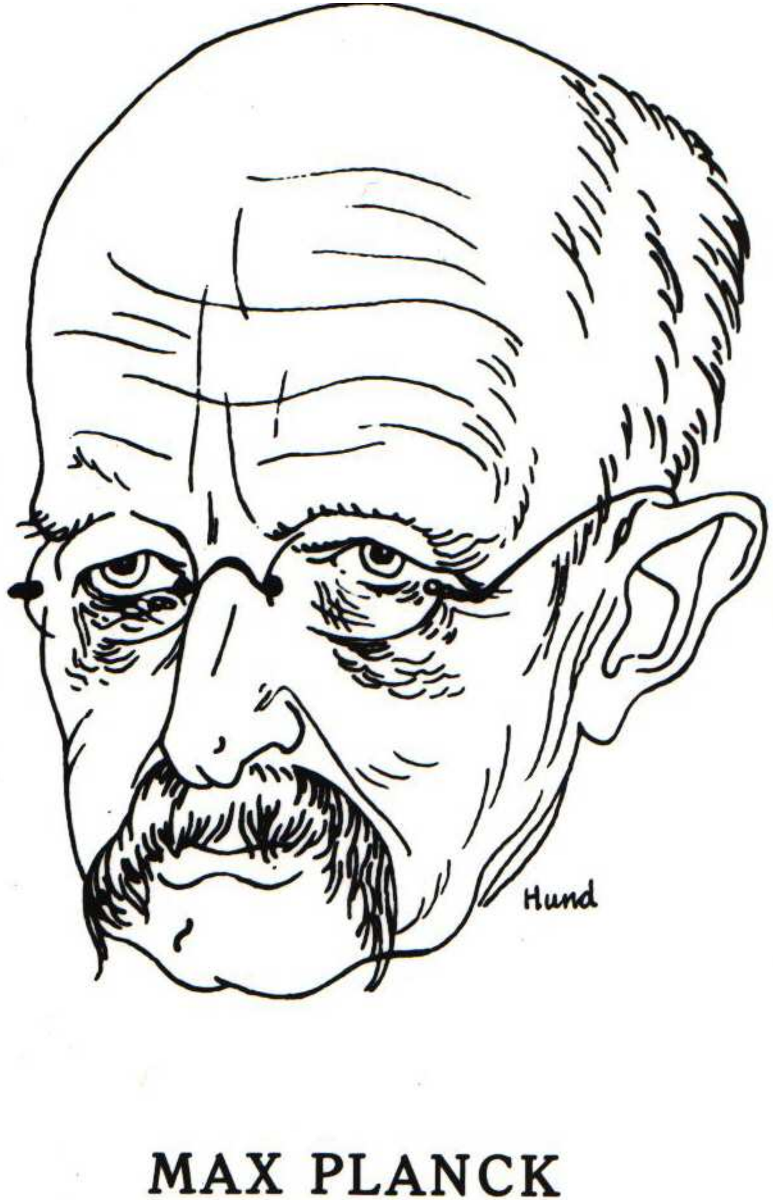
Perrin:mastix-particles in water obs every 30s



Perrin

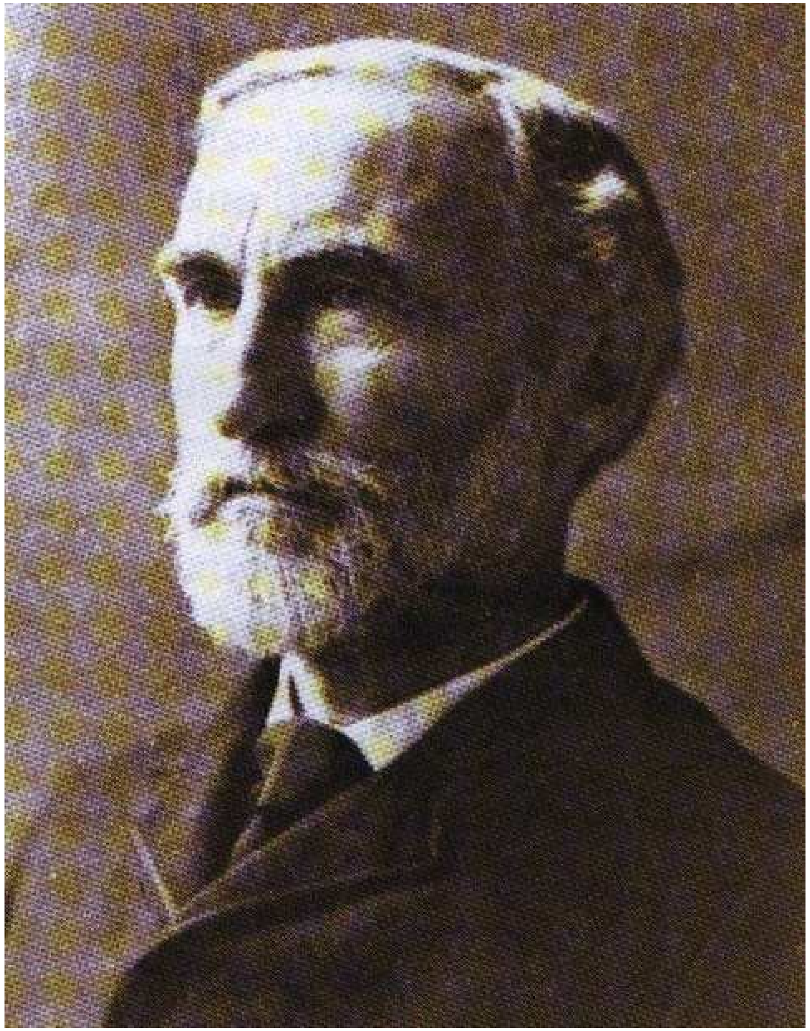
Brown

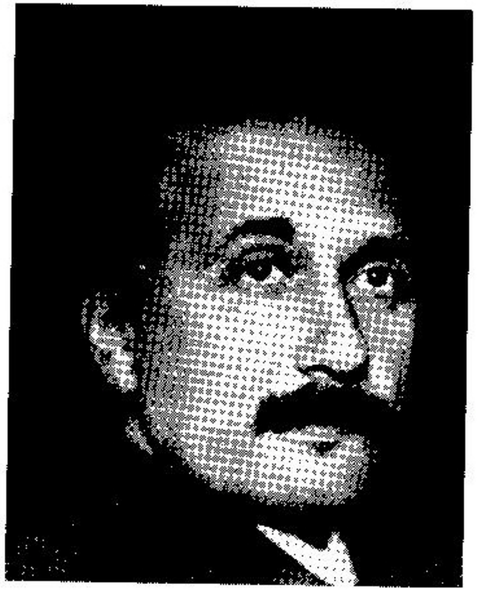
An open problem: How Brownian dynamics is related to the 2nd law



and how BM is related to STATPHYS

L. Boltzmann J.W. Gibbs





Albert Einstein
14.3.1879 - 18.4.1955

OSTWALDS KLASSIKER DER EXAKTEN WISSENSCHAFTEN

Band 199

Untersuchungen über die Theorie der Brownschen Bewegung

(1905)

von
Albert Einstein

mit Anmerkungen von
R. Fürth
und einem Vorwort von
W. Trageser

EINSTEIN: Annalen 17, 549 (1905)

X-Koordinaten der einzelnen Teilchen um Δ vergrößern, wobei Δ für jedes Teilchen einen anderen (positiven oder negativen) Wert hat. Es wird für Δ ein gewisses Häufigkeitsgesetz gelten; die Anzahl dn der Teilchen, welche in dem Zeitintervall τ eine Verschiebung erfahren, welche zwischen Δ und $\Delta + d\Delta$ liegt, wird durch eine Gleichung von der Form

$$dn = n\varphi(\Delta)\, d\Delta$$

ausdrückbar sein, wobei

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(\Delta)\, d\Delta = 1$$

und φ nur für sehr kleine Werte von Δ von Null verschieden ist und die Bedingung

$$\varphi(\Delta) = \varphi(-\Delta)$$

erfüllt.

[557] Wir untersuchen nun, wie der Diffusionskoeffizient von φ abhängt, wobei wir uns wieder auf den Fall beschränken, daß die Anzahl ν der Teilchen pro Volumeneinheit nur von x und t abhängt.

Es sei $\nu = f(x, t)$ die Anzahl der Teilchen pro Volumeneinheit, wir berechnen die Verteilung der Teilchen zur Zeit $t + \tau$ aus deren Verteilung zur Zeit t. Aus der Definition der Funktion $\varphi(\Delta)$ ergibt sich leicht die Anzahl der Teilchen welche sich zur Zeit $t + \tau$ zwischen zwei zur X-Achse senkrechten Ebenen mit den Abszissen x und $x + dx$ befinden. Man erhält:

$$f(x, t+\tau)\, dx = dx \cdot \int_{\Delta=-\infty}^{\Delta=+\infty} f(x+\Delta)\, \varphi(\Delta)\, d\Delta.$$

Nun können wir aber, da τ sehr klein ist, setzen:

$$f(x, t+\tau) = f(x, t) + \tau \frac{\partial f}{\partial t}.$$

Ferner entwickeln wir $f(x + \Delta, t)$ nach Potenzen von Δ:

$$f(x+\Delta, t) = f(x, t) + \Delta \frac{\partial f(x,t)}{\partial x} + \frac{\Delta^2}{2!} \frac{\partial^2 f(x,t)}{\partial x^2} \ldots \text{in inf.}$$

Diese Entwicklung können wir unter dem Integral vornehmen, da zu letzterem nur sehr kleine Werte von Δ etwas beitragen. Wir erhalten:

$$f + \frac{\partial f}{\partial t} \cdot \tau = f \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(\Delta)\, d\Delta + \frac{\partial f}{\partial x} \int_{-\infty}^{+\infty} \Delta \varphi(\Delta)\, d\Delta + \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\Delta^2}{2} \varphi(\Delta)\, d\Delta \ldots$$

Auf der rechten Seite verschwindet wegen $\varphi(x) = \varphi(-x)$ das zweite, vierte etc. Glied, während von dem ersten, dritten, fünften

etc. Glieder jedes folgende gegen das vorhergehende sehr klein ist. Wir erhalten aus dieser Gleichung, indem wir berücksichtigen, daß

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(\Delta)\, d\Delta = 1.$$

[558] und indem wir

$$\frac{1}{\tau} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\Delta^2}{2} \varphi(\Delta)\, d\Delta = D$$

setzen und nur das erste und dritte Glied der rechten Seite berücksichtigen:

$$(1) \qquad \frac{\partial f}{\partial t} = D \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}.$$

Dies ist die bekannte Differentialgleichung der Diffusion, und man erkennt, daß D der Diffusionskoeffizient ist.

An diese Entwicklung läßt sich noch eine wichtige Überlegung anknüpfen. Wir haben angenommen, daß die einzelnen Teilchen alle auf dasselbe Koordinatensystem bezogen seien. Dies ist jedoch nicht nötig, da die Bewegungen der einzelnen Teilchen voneinander unabhängig sind. Wir wollen nun die Bewegung jedes Teilchens auf ein Koordinatensystem beziehen, dessen Ursprung mit der Lage des Schwerpunktes des betreffenden Teilchens zur Zeit $t = 0$ zusammenfällt, mit dem Unterschiede, daß jetzt $f(x, t)\, dx$ die Anzahl der Teilchen bedeutet, deren X-Koordinaten von der Zeit $t = 0$ bis zur Zeit $t = t$ um eine Größe gewachsen ist, welche zwischen x und $x + dx$ liegt. Auch in diesem Falle ändert sich also die Funktion f gemäß Gleichung (1). Ferner muß offenbar für $x \gtrless 0$ und $t = 0$

$$f(x, t) = 0 \text{ und } \int_{-\infty}^{+\infty} f(x, t)\, dx = n$$

sein. Das Problem, welches mit dem Problem der Diffusion von einem Punkte aus (unter Vernachlässigung der Wechselwirkung der diffundierenden Teilchen) übereinstimmt, ist nun mathematisch vollkommen bestimmt[9]): seine Lösung ist:

$$f(x, t) = \frac{n}{\sqrt{4\pi D}} \frac{e^{-\frac{x^2}{4Dt}}}{\sqrt{t}}.^{10)}$$

Die Häufigkeitsverteilung der in einer beliebigen Zeit t erfolgten Lagenänderungen ist also dieselbe wie die der zufälligen [559] Fehler, was zu vermuten war. Von Bedeutung aber ist,

Smoluchowski's contribution

Lviv/Lemberg 1900-13, Krakow 1913-17

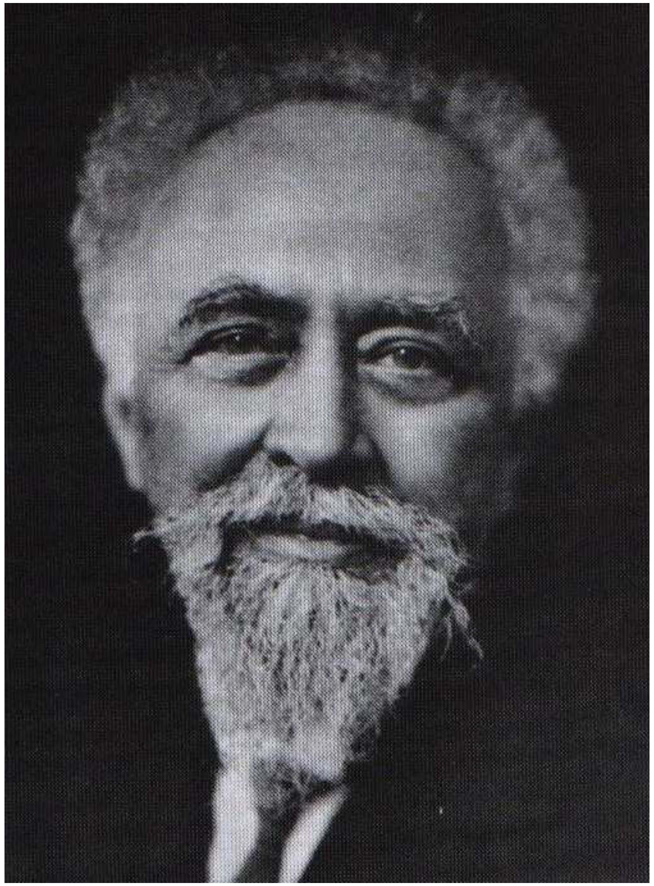
- **1904 theory of thermodyn fluctuations**
- **1906 Smoluchowski equation**: pde for distribution functions (Kac: "more direct, simpler and thus more convincing than E."), influence of **external forces** acting on molecules,
- understood the relation between microscopic motion and second law of thermodynamics

Einstein/Smoluchowski about the relation BM-2nd law

- Einstein Ann..Physik, Band **17** (1905) 549-560: “In dieser Arbeit soll gezeigt werden, daß .... suspendierte Teilchen von mikroskopischer Größe ... Bewegungen ausführen müssen, ... die leicht .. nachgewiesen werden können..... , so ist die **klass.TD für mikr. Räume nicht mehr ..gültig,** ...”
- Smoluchowki: constructs **examples for micros-copic violation of 2nd law**, (“limits of validity of 2nd law”) the **ratchet concept,** developes the **theory of fluctuations and recurrence time**

Experimental work checking the Einstein-Smoluchowski predictions

- **Svedberg, Siedentopf, Gouy**: the theory describes Brownian motion correctly!
- **Perrin**: systematic,quantitative, exp. investigations, msd, Avogadro-number, Planck's constant, Nobel price



Perrin

Smoluchowski eq for free motion = diffusion equation (diffusion constant D_r)

$$\frac{\partial}{\partial t} n(\mathrm{r}, t) = D_r \, \Delta n(\mathrm{r}, t); \quad D_r = \frac{k_B T}{m \gamma_0}$$

2. Further development of the BM-theory in 20th century

- **Langevin**: stochastic diffeq. with noise source (‘100x more simple than E.’),
- **Fokker**: Diss (U Zürich) + letter to Annalen, p.d.e. for distrib-function in phase space,
- **Planck**: derivation + generalization,
- **Klein/Kramers**: general form of FPE,
- **Uhlenbeck/Ornstein/Debye/ Onsager/ Falkenhagen**: studied special stochastic processes (ions, ionpairs, dipole molecules)

Langevin equation for Brownian motion

$$\frac{d}{dt}\mathrm{v} = -\gamma(v^2)\mathrm{v} + \sqrt{2D_v}\cdot\xi(t)$$

friction function = const for normal motion
source of noise = white noise (delta correlated)
D - strength of noise

Fokker,1914; Planck,1917

Über einen Satz der statistischen Dynamik und seine Erweiterung in der Quantentheorie.

Von Max Planck.

Einleitung und Inhaltsübersicht.

In seiner Theorie der Brownschen Bewegung hat Hr. A. Einstein[1] für den stationären Zustand einer großen Zahl gleichbeschaffener Systeme, die kleinen schnellen zufälligen äußeren Störungen unterworfen sind, einen sehr fruchtbaren Satz entwickelt, der später von Hrn. A. Fokker[2] auf den Fall verallgemeinert worden ist, daß die Wirkung einer äußeren Störung wesentlich mit abhängt von dem jeweiligen Zustand des von ihr betroffenen Systems. Allerdings hat Fokker in der angeführten Publikation nur die Fassung des verallgemeinerten Satzes mitgeteilt, nicht aber einen Beweis dafür gegeben, welch letzteren er für eine spätere Gelegenheit baldigst in Aussicht stellte. Seit jener Mitteilung sind einige Jahre verstrichen, ohne daß meines Wissens die angekündigte Beweisführung veröffentlicht wurde. Da nun der erwähnte Satz, namentlich in seiner allgemeinen Fassung, für die statistische Dynamik eine wichtige Bedeutung besitzt — ich selber habe ihn schon zu wiederholten Malen benutzt —, und da anderseits seine Richtigkeit, wie mir briefliche Mitteilungen aus Fachkreisen gezeigt haben, in Zweifel gezogen wird, so scheint es mir von Wert, einen Beweis desselben zu veröffentlichen. Dies ist der erste Zweck der folgenden Arbeit.

Sodann habe ich versucht, den Satz so zu erweitern, daß er auch vom Standpunkt der Quantentheorie aus die nötigen Anhaltspunkte zur Bestimmung des stationären Zustandes liefert. Hier ist allerdings ein Vorbehalt zu machen. Wenn man sich auf den Standpunkt stellt, daß die Quantentheorie nur ganz bestimmte, die sogenannten »statischen« Zustände der Systeme, z. B. bestimmte Rotationsgeschwindigkeiten, bestimmte Amplituden, zuläßt, so ist ein Satz, wie der hier in Rede stehende, überhaupt sinnlos, da dieser ja von kleinen Zustandsänderungen handelt und solche gar nicht eintreten können, wenn der Zu-

[1] A. Einstein, Ann. d. Phys. 19, S. 37, 1906.
[2] A. Fokker, Ann. d. Phys. 43, S. 812, 1914.

Systempunkte. Von diesen N' Punkten werden nach Ablauf der Zeit τ alle diejenigen sich im Abschnitt (q, dq) befinden, deren Verschiebung r zwischen $q-q'$ und $q+dq-q'$ liegt, also nach (2)

$$N'\cdot\phi_{q'}(q-q')\cdot dq = N\cdot W(q')\cdot dq'\cdot\phi_{q'}(q-q')\cdot dq. \qquad (4b)$$

und demzufolge erhält man die Gesamtzahl der aus allen benachbarten Abschnitten in den Abschnitt (q, dq) übergetretenen Punkte, indem man den letzten Ausdruck über q' von $q-R$ bis $q+R$ integriert, also:

$$N dq\cdot\int_{q-R}^{q+R} W(q')\cdot\phi_{q'}(q-q')\cdot dq'. \qquad (4c)$$

oder, wenn man statt q' als Integrationsvariable $r = q-q'$ einführt:

$$N dq\cdot\int_{-R}^{+R} W(q-r)\cdot\phi_{q-r}(r)\cdot dr. \qquad (5)$$

Dieser Ausdruck gibt die Zahl der Systempunkte, welche sich zur Zeit $t+\tau$ in dem Abschnitt (q, dq) befinden.

Also ist nach (1) die gesuchte Änderung, welche die Verteilungsdichte $W(q)$ in der Zeit τ erlitten hat:

$$\frac{\partial W}{\partial t}\cdot\tau = \int_{-R}^{+R} W(q-r)\cdot\phi_{q-r}(r)\cdot dr - W(q). \qquad (6)$$

Hier können wir schreiben:

$$W(q-r)\phi_{q-r}(r) = W(q)\phi_q(r) - r\frac{\partial}{\partial q}\{W(q)\cdot\phi_q(r)\} + \frac{r^2}{2}\frac{\partial^2}{\partial q^2}\{W(q)\cdot\phi_q(r)\}$$

und erhalten durch Einsetzen in (6) mit Berücksichtigung von (3):

$$\frac{\partial W}{\partial t}\cdot\tau = -\frac{\partial}{\partial q}(W(q)\cdot\overline{r}) + \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial q^2}(W(q)\cdot\overline{r^2}). \qquad (7)$$

wobei zur Abkürzung gesetzt ist: die mittlere Verschiebung

$$\int_{-R}^{+R} r\phi_q(r)dr = \overline{r} \qquad (8)$$

und das mittlere Verschiebungsquadrat

$$\int_{-R}^{+R} r^2\phi_q(r)dr = \overline{r^2}. \qquad (9)$$

Für die Bedeutung der Gleichung (7) ist der Umstand charakteristisch, daß die beiden Glieder auf ihrer rechten Seite von gleicher Größen-

The Fokker-Planck equation for free particles with friction for gamma=const, q=0: Maxwell distribution

Stochastic force (assume that only the passive friction generates noise !!! $D = \gamma_0 kT$):

$$\langle \xi_i(t) \rangle = 0\,; \;\; \langle \xi_i(t) \xi_j(t') \rangle = \delta(t - t')\delta_{ij}$$

Free particles: v^2 = conserved quantity

Canonical-dissipative: $\rightarrow$ FPE has exact solutions .

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{v}} \left(\gamma \boldsymbol{v} f + D \frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{v}} \right)$$

$$f_0 = C \exp \left[- \frac{v^2}{2kT} + \frac{q}{2D} \log \left(1 + \frac{d}{c} v^2 \right) \right]$$

Relative diffusional motion: Pair correlation functions

- M. von Smoluchowski: “Versuch einer mathe-matischen Theory der Koagulationskinetik kolloidaler Losungen”,
  Z. physikal. Chemie **92,** 129-135 (1917)
- here Smoluchowski considered the relative motion of particles and presented new solutions
- this work led to the stochastic theory of absorber problems, of ion pairs, and finally to the modern theory of diffusion-controlled reactions

Debye/Hückel/Onsager/Falkenhagen: ionic pair correlation functions

- Debye/Hückel formulated Smolu-eqs for pair correlation functions, presented solutions including Coulomb interactions, measurable effects on electrolytic conductance,
- Onsager corrected an error (symmetry), generalization, TD of irreversible processes
- Falkenhagen found time-dependent solutions, frequency-dep conductance and shear viscosity
- 60s: Kadomtsev/Klimontovich/Eb: appl to plasmas

3. Mathematical and statistical foundation

- A.A. Markov 1905-22: developed the theory of M-chains, M-processes,
- the theory was generalized and further developed by Chapman and Kolmogorov to the modern theory of stochastic processes,
- Kolmogorov/Petrovskii/Piscounov (1937): Etude de l eq. diff. avec croissance de la matiere et son application a un problem biologique

Statistical-mechanical derivation

- Kinetic theory of gases: Enskog/Chapman
- molecular distribution functions BBGKY
- method of projection operators Zwanzig

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho = \mathrm{L}\,\rho;\ \ \rho = \rho' + \rho'';\ \ \rho' = \mathrm{P}\rho$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho' = P\mathrm{L}(\rho' + \rho'');\ \ \mathrm{L} = \mathrm{L}_0 - v_1\nabla_1$$

First applications of Zwanzig meth to derive Smoluch eq: Falkenhagen/Eb.:Phys.Lett.15(1965);Ann.Phys.16(1965)

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(R,R'VV'\ \ t) = \mathrm{L}\ \rho(R,R'VV't\ \ )$$

$$\rho' = G\rho = \Omega\rho_{\mathrm{eq}} n(\mathrm{r}_1, t) = \Omega\rho_{\mathrm{eq}} \int dr_2 \ldots dr_N \int dv_1 \ldots dv_N\, \rho$$

$$\text{propagator} \ : \mathrm{A}(t) = \exp((1 - \mathrm{G})\mathrm{L}t)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} n(\mathrm{r}_1\ \ t) = \nabla_1 \left[\Omega \int dr_2 \ldots dr_N \int dv_1 \ldots dv_N\, \mathrm{v}_1 \int_0^t dt' \mathrm{A}(t - t')\rho_{\mathrm{eq}} \mathrm{v}_1 \right]$$

$$\nabla_1 n(\mathrm{r}_1\ \ t') + f(\rho''(0))$$

$$= \nabla_1 \left[\int_0^t d\tau\, \Phi(\mathrm{t} - \tau)\nabla_1 n(\mathrm{r}_1\ \ t - \tau) \right] + f(\rho''(0))$$

4. Generalization to selfpropelled (active) Brownian motion

- Dynamic theory of active osc/circuits: **Helmholtz**: "Tonempfindungen", **Rayleigh**: "Theory of Sound",**v.d.Pol**, **Andronov.**
- **Stratonovich**: Stochastic theory of driven/active oscill/circuits,
- **Klimontovich**: Statistical physics of open systems/active motion, concept of nonlin.BM,
- Transition from driven oscill/circuits to systems of many interacting driven particles
  --> theory of selfpropelled motion

Памяти Руслана Леонтьевича Стратоновича

Ruslan L. Stratonovich, 31.05.1930 - 13.01.1997

13 января 1997 г. на 67-м году жизни скончался Руслан Леонтьевич Стратонович — профессор Московского государственного университета. Он самозабвенно работал в науке со студенческой скамьи до последних дней жизни. Руслан Леонтьевич не занимал каких-либо административных постов, впервые выехал за границу в 1989 г. и около 50 лет состоял членом одной и той же кафедры физического факультета МГУ.

Р.Л. Стратонович родился 31 мая 1930 г. в Москве. Сдав экстерном экзамены, в 1947 г. он окончил школу с золотой медалью и поступил на физический факультет МГУ, который закончил в 1953 г.

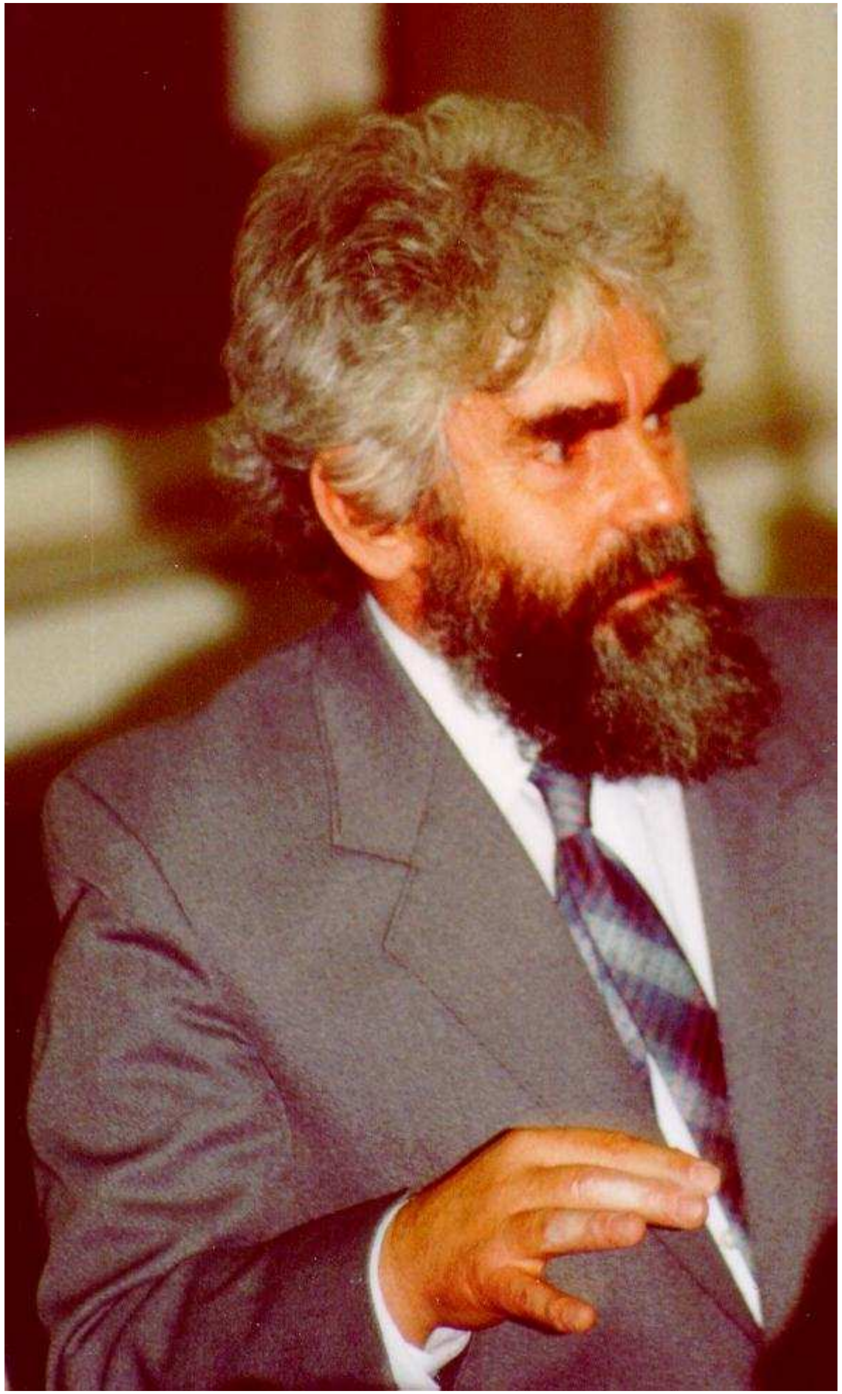
Можно перечислять его безупречный послужной список, библиографию его трудов и научные награды. Но самое важное, о чем хотелось бы сказать, — это то, что Руслан Леонтьевич обладал уникальным интеллектом. С одинаковой легкостью он разбирал тонкие вопросы как теории, так и эксперимента. Широта его интересов удивительна — от теории колебаний и теории информации до теории квантовых измерений, от термодинамики до самых тонких вопросов теории стохастических процессов и статистической физики. Математики знают, сколь легко и глубоко он владел математическим аппаратом.

Данный ему природой талант позволял Руслану Леонтьевичу не только хорошо разбираться во всех перечисленных выше областях науки, но и внести свой весьма существенный вклад в развитие каждой из них. Его кандидатская диссертация — это не просто ступень по служебно-научной лестнице, а основа для опубликованной в 1961 г. у нас в стране и в 1963, 1967 гг. в США его теперь уже знаменитой первой монографии "Избранные вопросы флуктуаций в радиотехнике" (Topics in the Theory of Random Noise, Vol. I, II). В этой монографии им была предложена (как он ее тогда называл) симмет-

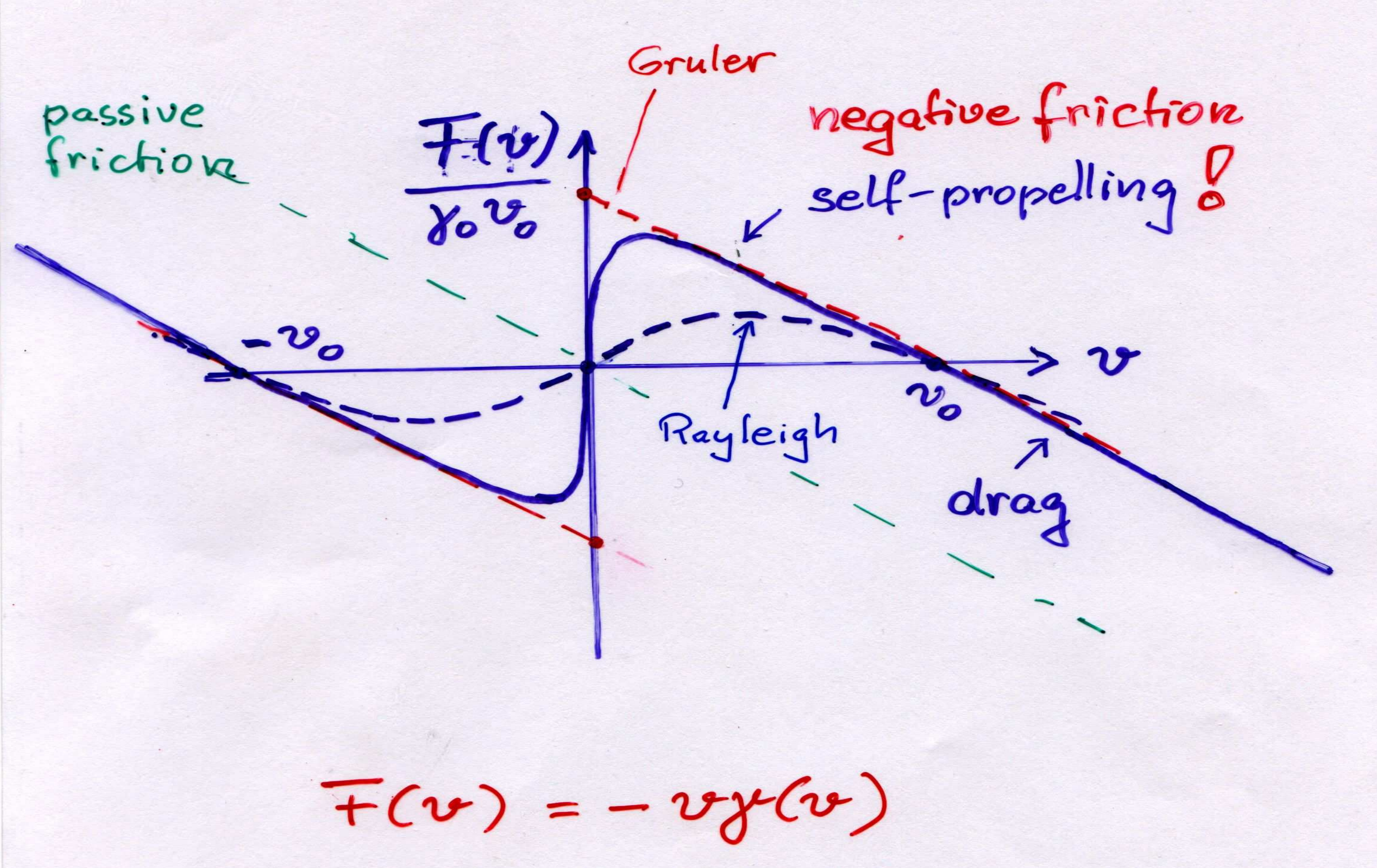
Руслан Леонтьевич Стратонович

Yuri Lvovich Klimontovich

*28.09.1924
+27.11.2002
solved FPE
treated many
special
problems

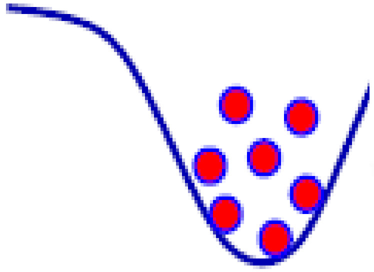


The dissipative nonlinear force

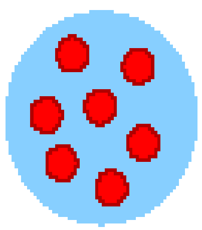


Particles in traps. with lasercooling

Pohl et al.

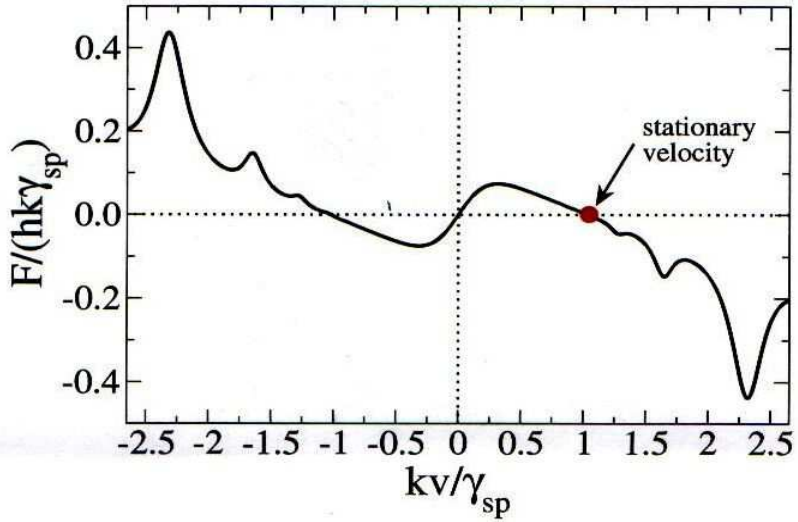


ionization



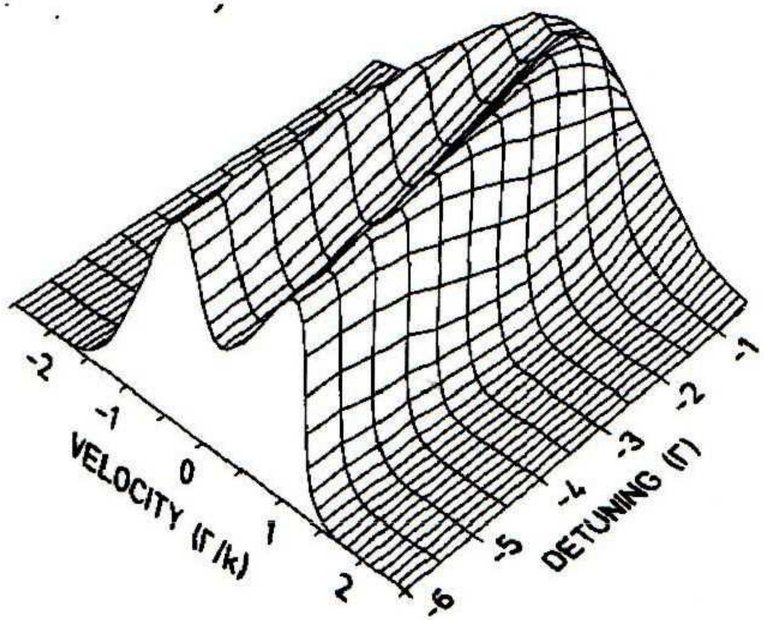
strong interactions in ultracold plasmas

high intensity standing wave exhibits strongly nonlinear damping forces



stationary nonzero ion velocities in traps

[K. Berg-Sorensen et al. (1992)]



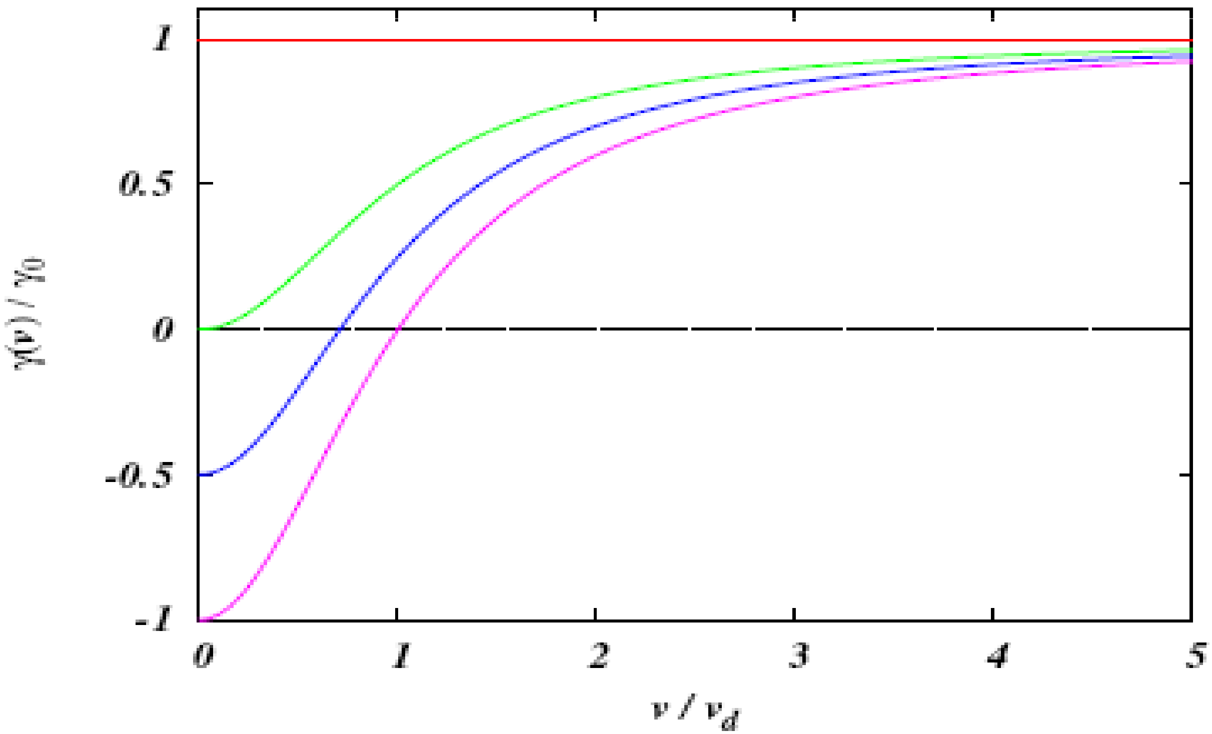
Ants rotating around a center of motion and two leading researches rotating around the ants

rotation modes of fishes

5. Fokker-Planck equations for self-propelled Brownian motion

$$\frac{d}{dt}\mathrm{v} = -\gamma(v^2)\mathrm{v} + \sqrt{2\mathrm{D}_v}\cdot\xi(t)$$

friction function with negative part for small velocity

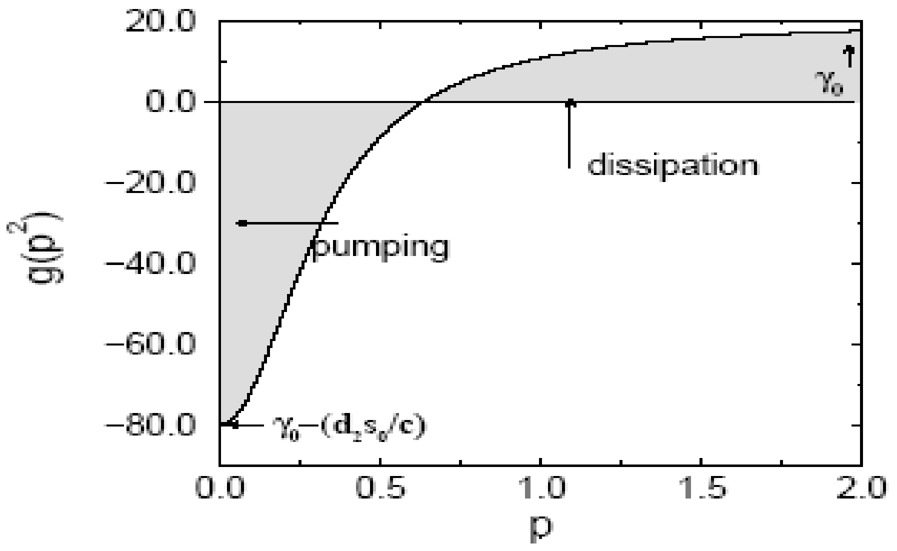


Our model: particles with energy depot and 'engine' (SET)

Friction: γ = velocity-dependent, possibly with a negative part !!! (pumping). Thermal equilibrium: $\gamma(\boldsymbol{v}) = \gamma_0 = \text{const.}$. General nonequilibrium case (SET-model):

$$\gamma(\boldsymbol{v}^2) = \left(\gamma_0 - \frac{dq}{c + dv^2}\right) \tag{4}$$

where c, d, q = positive constants characterizing the energy flows from a depot to the particle.



The Fokker-Planck equation for free particles with velocity-dep friction

Stochastic force (assume that only the passive friction generates noise !!! $D = \gamma_0 kT$):

$$\langle \xi_i(t) \rangle = 0\,; \; \langle \xi_i(t) \xi_j(t') \rangle = \delta(t - t')\delta_{ij}$$

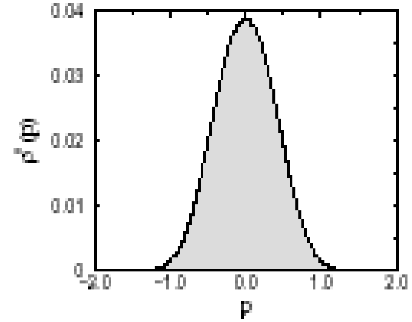
Free particles: v^2 = conserved quantity

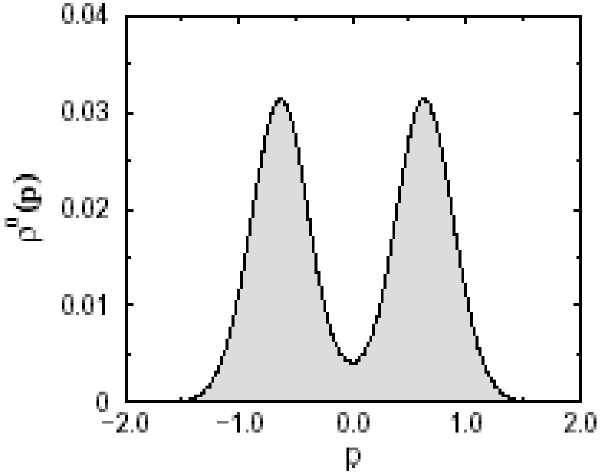
Canonical-dissipative: $\rightarrow$ FPE has exact solutions .

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{v}} \left(\gamma \boldsymbol{v} f + D \frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{v}} \right)$$

$$f_0 = C \exp \left[-\frac{v^2}{2kT} + \frac{q}{2D} \log \left(1 + \frac{d}{c} v^2 \right) \right]$$

Velocity distribution



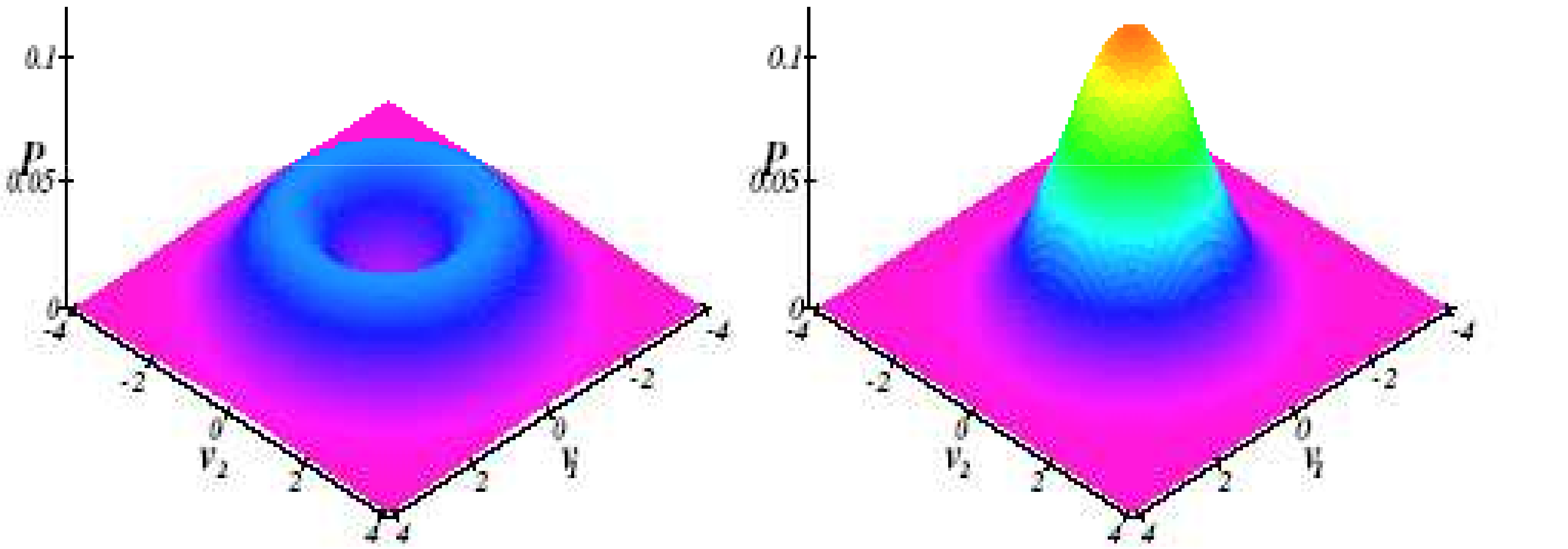


Above undercritical, below overcritical

For the depot-model the stationary solution reads

$$P_0(\vec{v}) = \mathcal{N}\left(1 + \frac{d}{c}\,\vec{v}^{\,2}\right)^{\frac{\gamma_0}{2D_v}} \exp\left[-\frac{\gamma_0}{2D_v}\,\vec{v}^{\,2}\right] . \tag{28}$$

The figure 2 shows a cross section of the probability distribution for Rayleigh-Helmholtz and Schienbein-Gruler-Helbing friction function. In case of strong noise and low



(a) (b)

Figure 2. (a) Velocity distribution function of active Brownian particles for the

$$\left\langle\left(\vec{r}(t)-\vec{r}(0)\right)^2\right\rangle = \int_0^t \mathrm{d}t_1 \int_0^t \mathrm{d}t_2 \langle \vec{v}(t_1)\vec{v}(t_2)\rangle ;$$

$$\left\langle\left(\vec{r}(t)-\vec{r}(0)\right)^2\right\rangle = 2\left\langle v^2\right\rangle \left[t t_0 - t_0^2 + t_0^2 \exp\left(-t/t_0\right)\right]$$

$$\left\langle\left(\vec{r}(t)-\vec{r}(0)\right)^2\right\rangle = \frac{2\bar{v}^4}{D_v} t + \frac{\bar{v}^6}{D_v^2}\left[\exp\left(-\frac{2D_v t}{\bar{v}^2}\right)-1\right]$$

Smoluchowski eq for free motion (spatial diffusion D_r strongly increases with driving strength)

$$\frac{\partial}{\partial t} n(\mathrm{r}, t) = D_r \, \Delta n(\mathrm{r}, t); \quad D_r = \frac{v_0^{\ 4}}{D_v}$$

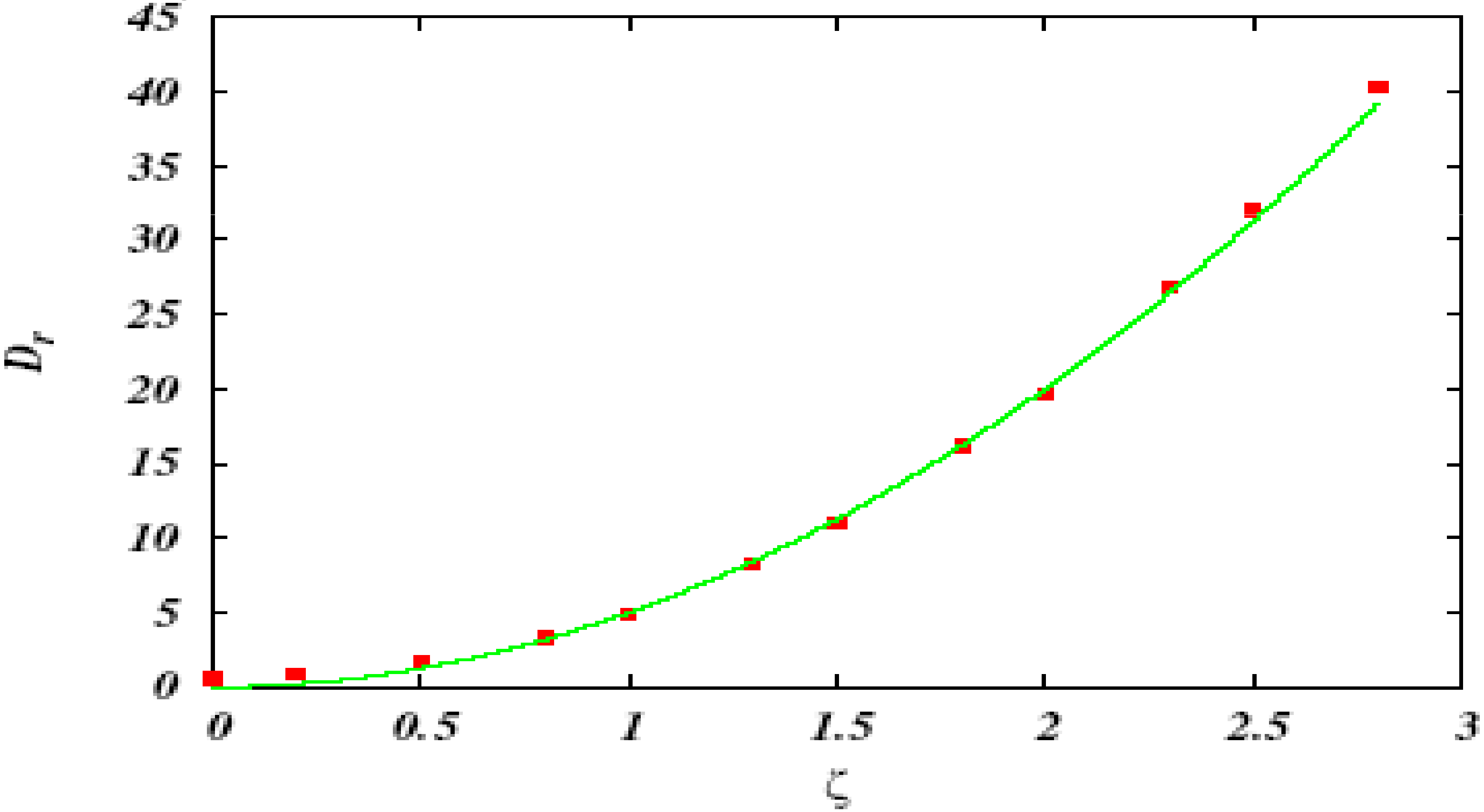


Figure 3. Spatial diffusion coefficient (D_r) in dependence on the driving parameter

6. Active diffusion in external fields (forcing, chemotactic gradients,..)

$$\frac{d}{dt}\mathrm{v} + \frac{1}{\mathrm{m}}\frac{dU}{dr} = -\gamma(v^2)\mathrm{v} + \sqrt{2\mathrm{D}_v}\cdot\xi(t),$$

$$\gamma(v^2) = -\gamma_1 + \gamma_2 v^2$$

Fokker-Planck equation:

$$\frac{\partial P(\boldsymbol{r},\boldsymbol{v},t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{v}}\left\{\gamma(\boldsymbol{r},\boldsymbol{v})\,\boldsymbol{v}\,P(\boldsymbol{r},\boldsymbol{v},t) + D\frac{\partial P(\boldsymbol{r},\boldsymbol{v},t)}{\partial \boldsymbol{v}}\right\}$$

$$-\boldsymbol{v}\frac{\partial P(\boldsymbol{r},\boldsymbol{v},t)}{\partial \boldsymbol{r}} - \nabla U(\boldsymbol{r})\frac{\partial P(\boldsymbol{r},\boldsymbol{v},t)}{\partial \boldsymbol{v}}$$

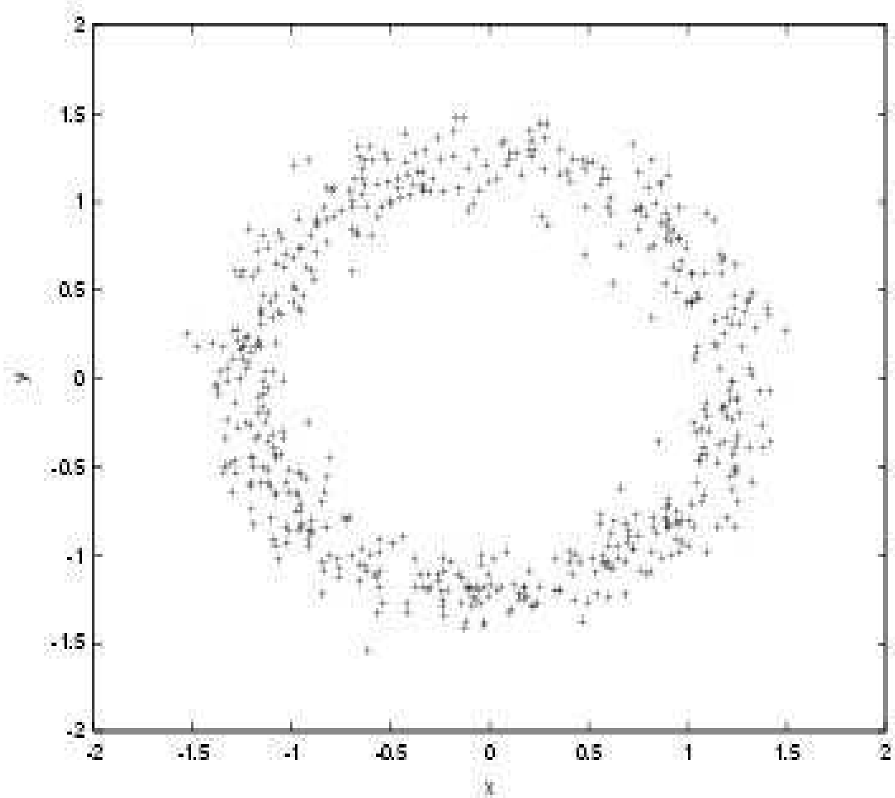
Parabolic confinement by parabolic wells or chemotactic hills

- **Normal BM:**
- Boltzmann disfunc = centered around minimum of potential
- **Active BM:** force equ.

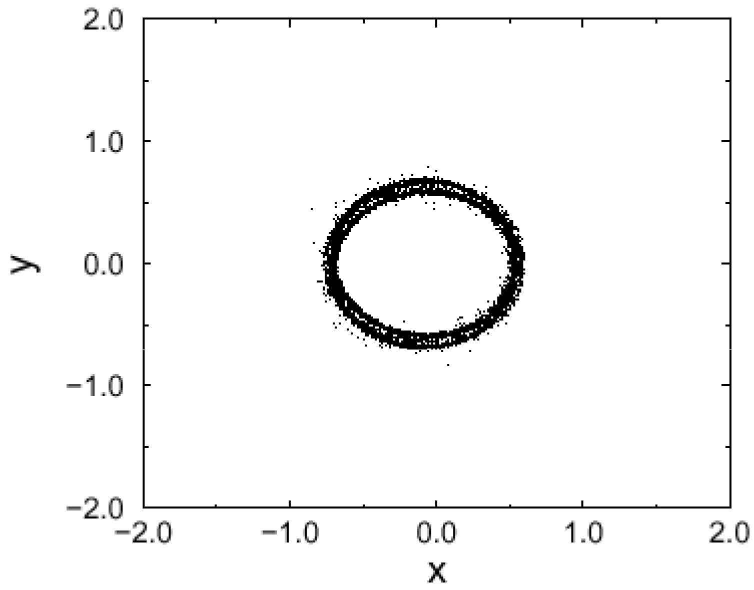
$$\frac{mv_0^2}{r_0} = m\,\omega_0^2 r_0$$

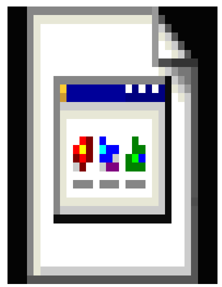
$$r_0 = \frac{v_0}{\omega_0}$$

- Active BM: right + left limit cycle rotation



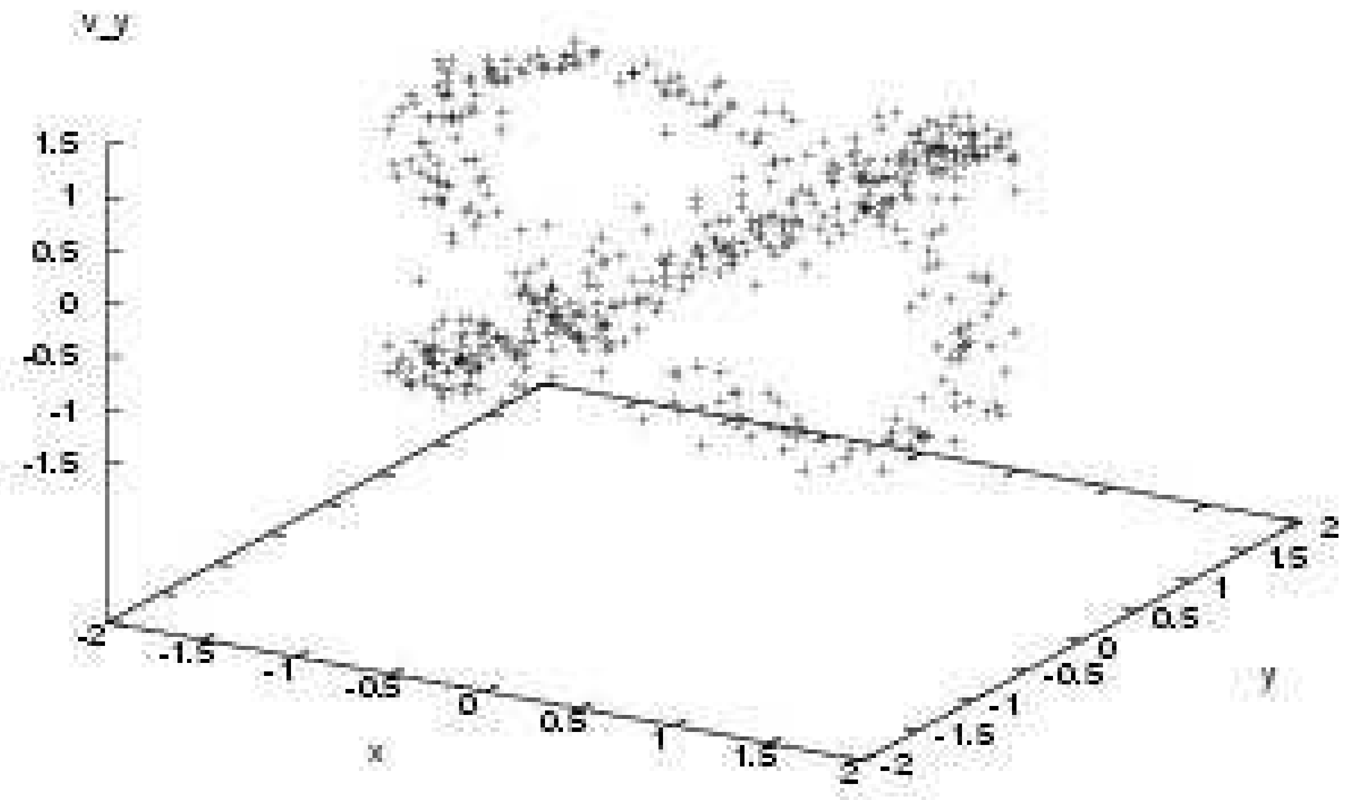
10000 active particles in parabolic well (Tilch)





Swaest1.gif

clock-wise and counter-clockwise limit cycles in x-y-v_y space

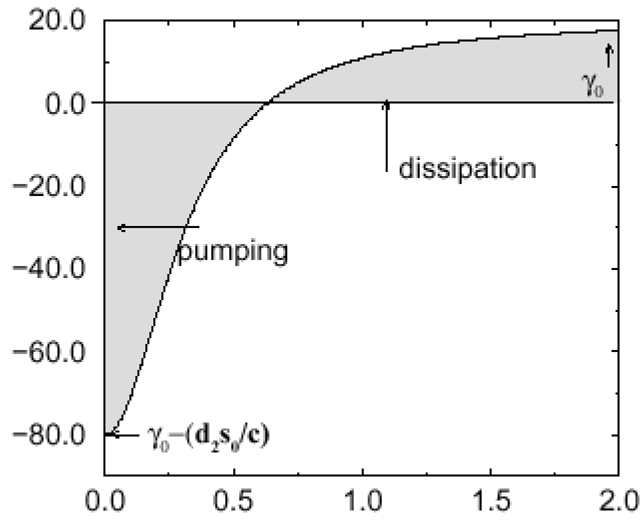


7. Collective motions including interactions

$$\frac{d}{dt}r_i = v_i\,;\ \frac{d}{dt}v_i = -\gamma(v^2)v_i - a r_i - \sum_j \frac{r_{ij}}{r_{ij}}\Phi'(r_{ij}) + \sqrt{2D_0}\zeta_i(t)$$

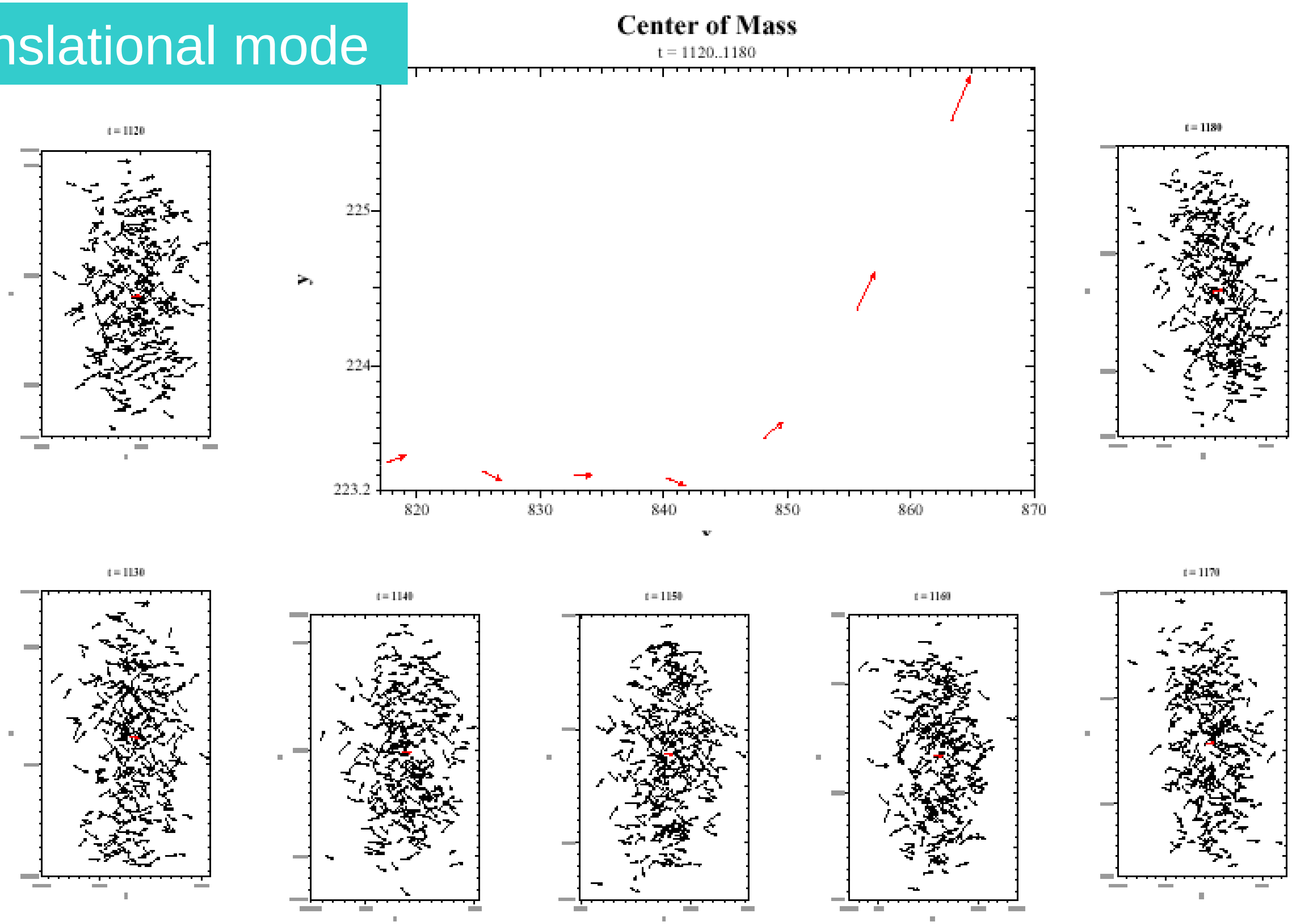
$$\Phi'(r_{ij}) = \alpha(r_i - r_j)$$

negative friction at small velocities



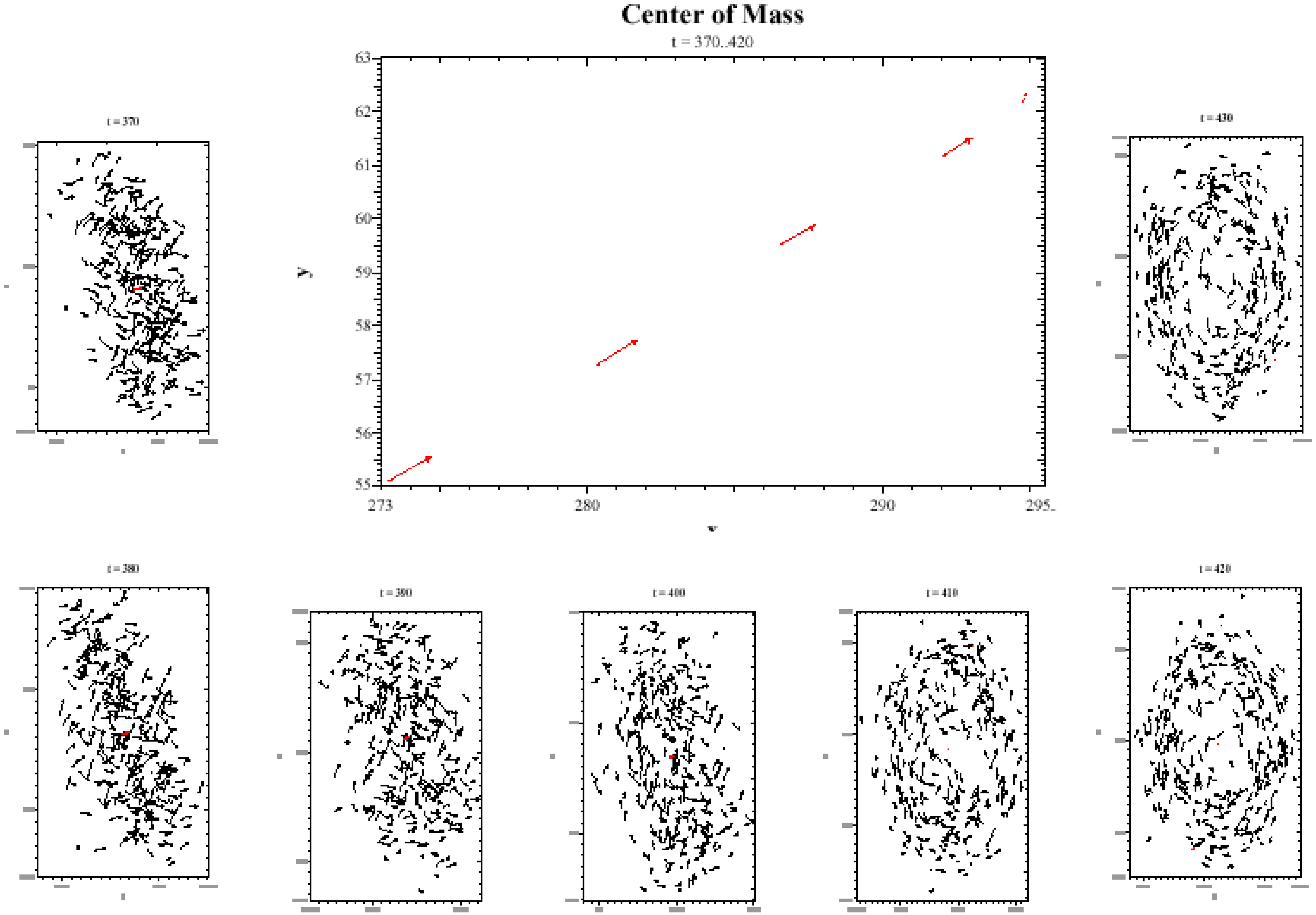
Stochastic bifurcations: translational --> rotational modes

translational mode



Erdmann/E/Mikhailov (PRE, 71, 051904 (2005))

Mikhailov/Zanette (1D)+Erdmann/E./Mikhailov (2D): increasing noise induces a phase transition to rot:



translation comes to stop -->
1D:osc mode, 2D: rotational mode

ABM with Morse- Coulomb and Oseen interactions

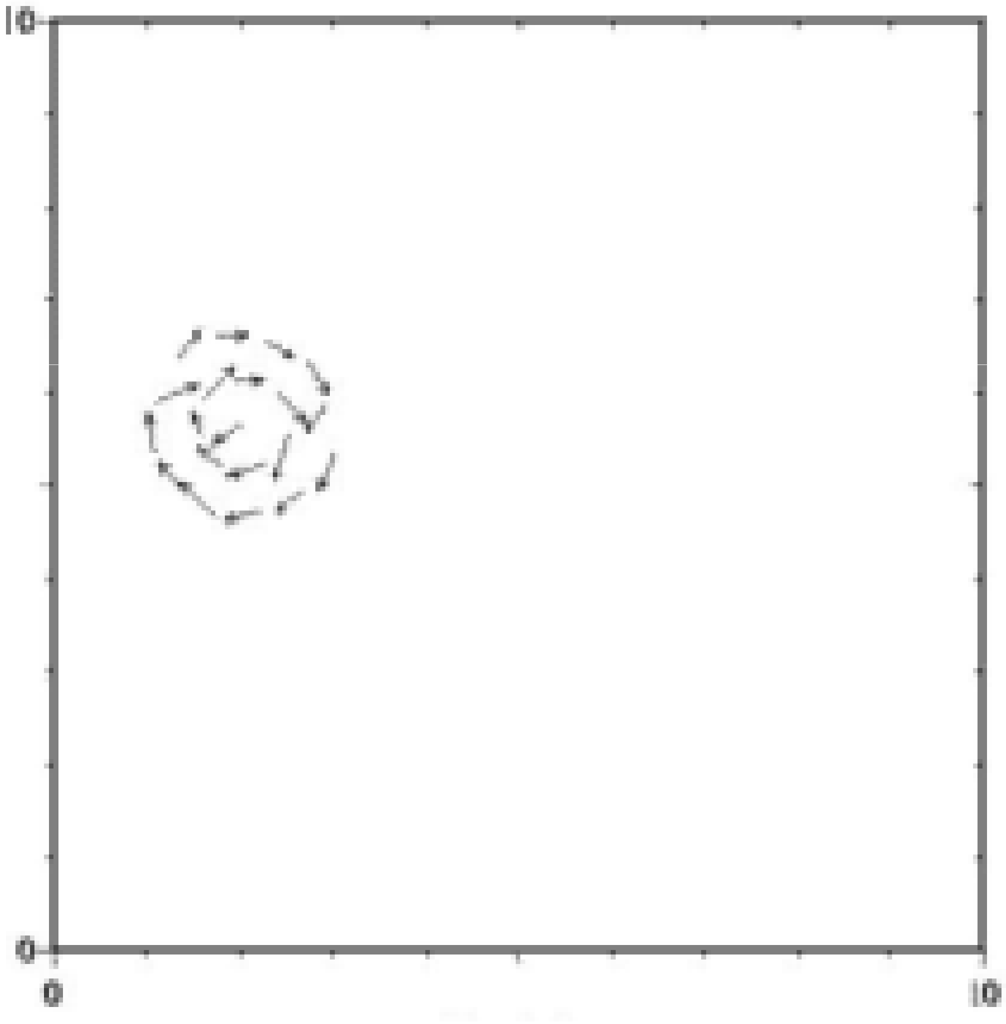
Morse potential (shape similar to Lennard-Jones)

(Morse 1928; minimum (-D) at r = sigma;)

$$\Phi(r_{ij}) = D[\exp(-2b(r_{ij} - \sigma))$$

$$- 2\exp(-b(r_{ij} - \sigma))]$$

rotating cluster of Morse particles: bistability of L



Hydrodynamic interactions (Stokes Oseen)

Velocity creatd by a moving sphere:

$$\Delta \mathbf{v}(r) = \frac{3R}{4r}\left[\boldsymbol{\delta} + \frac{\mathbf{rr}}{r^2}\right](u - u_0)$$

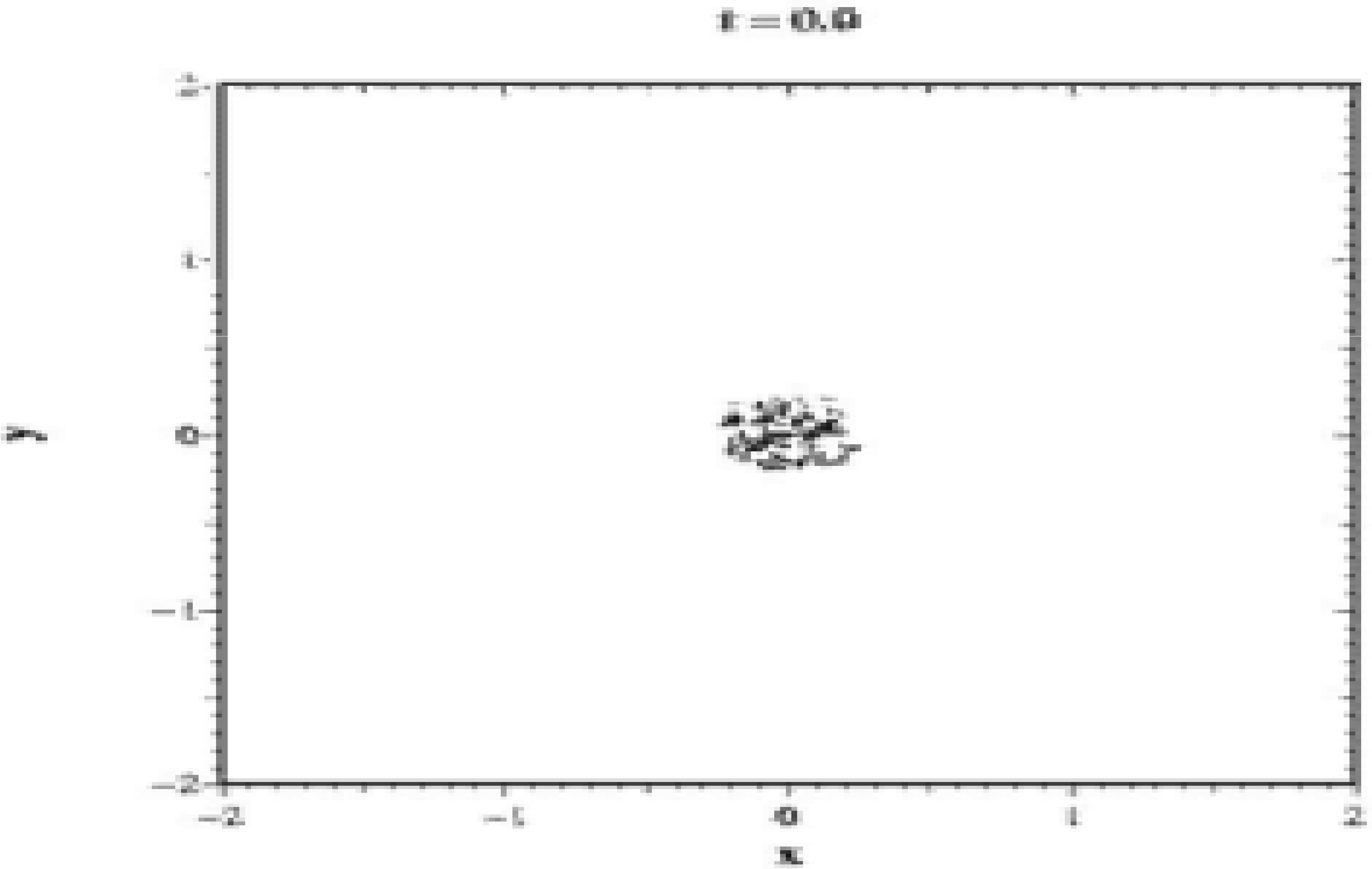
$$\mathbf{v}(r_{ij}) = \frac{\zeta}{r_{ij}}[\boldsymbol{\delta} + \frac{\mathbf{r}_{ij}\mathbf{r}_{ij}}{r_{ij}^{\;2}}] \otimes \mathbf{v}_j$$

Oseen: parallel and radial components of induced

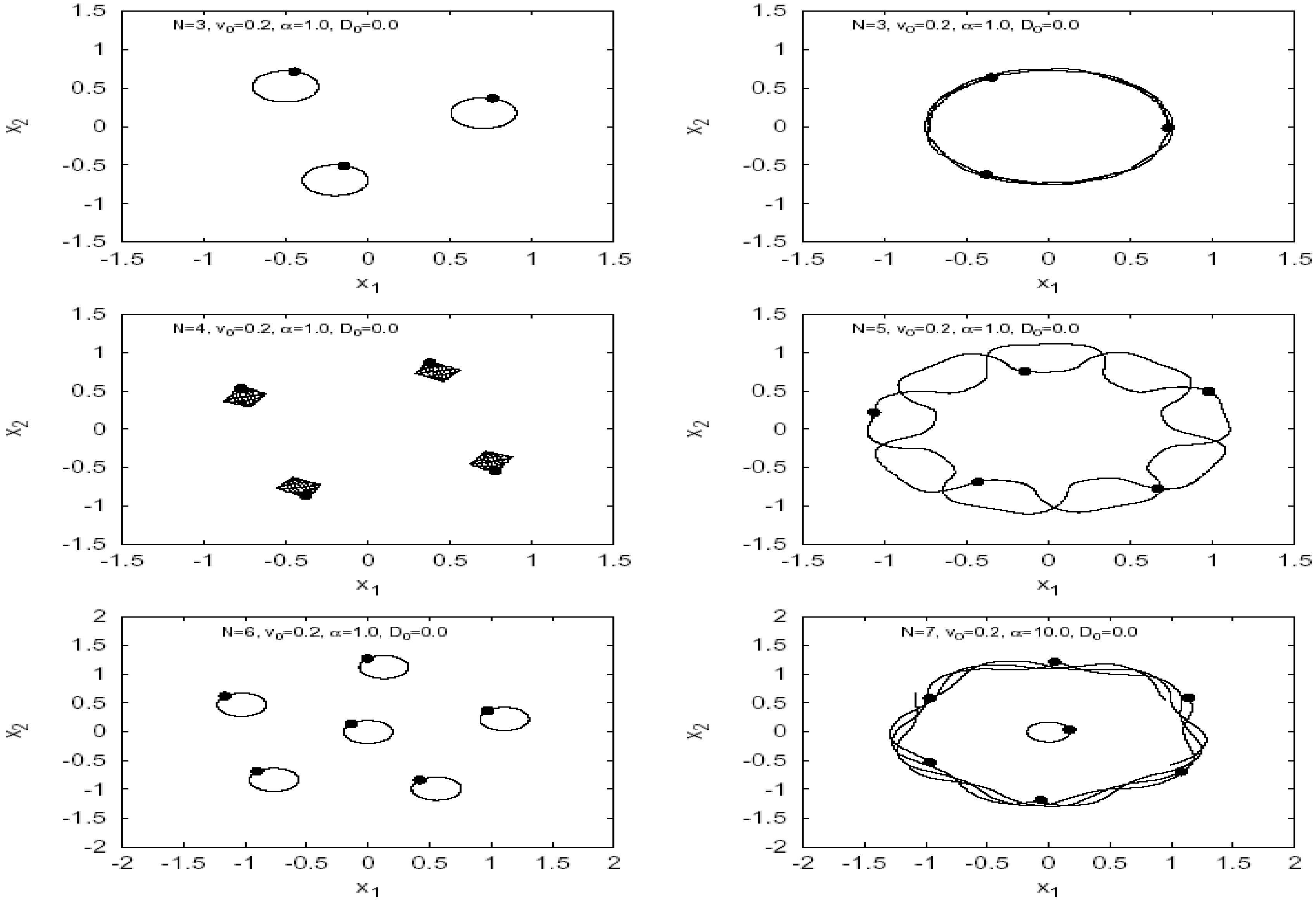
flow of particles located at distance r

Effect of parallelization of motion

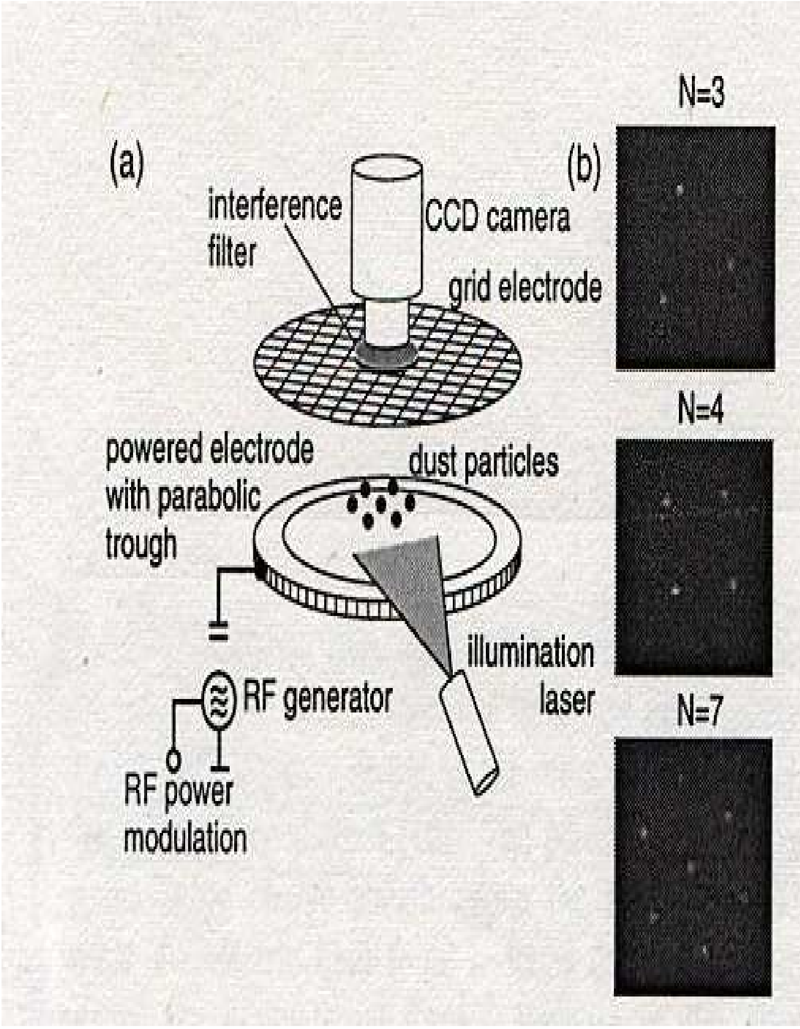
Simulation of ABM in a parabolic well with Oseen int.

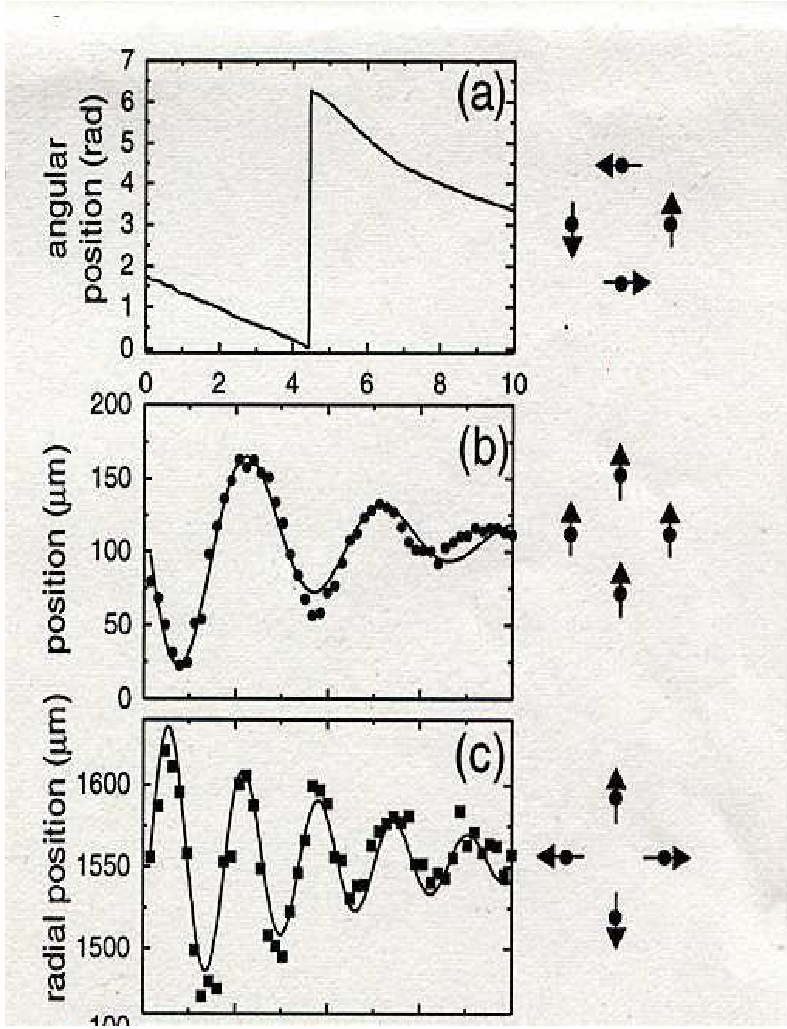


Charged grains in dusty plasmas with Coulomb repulsion (with Dunkel/Trigger)



Examples: Dusty plasmas (Melzer et al. PRL 2001)





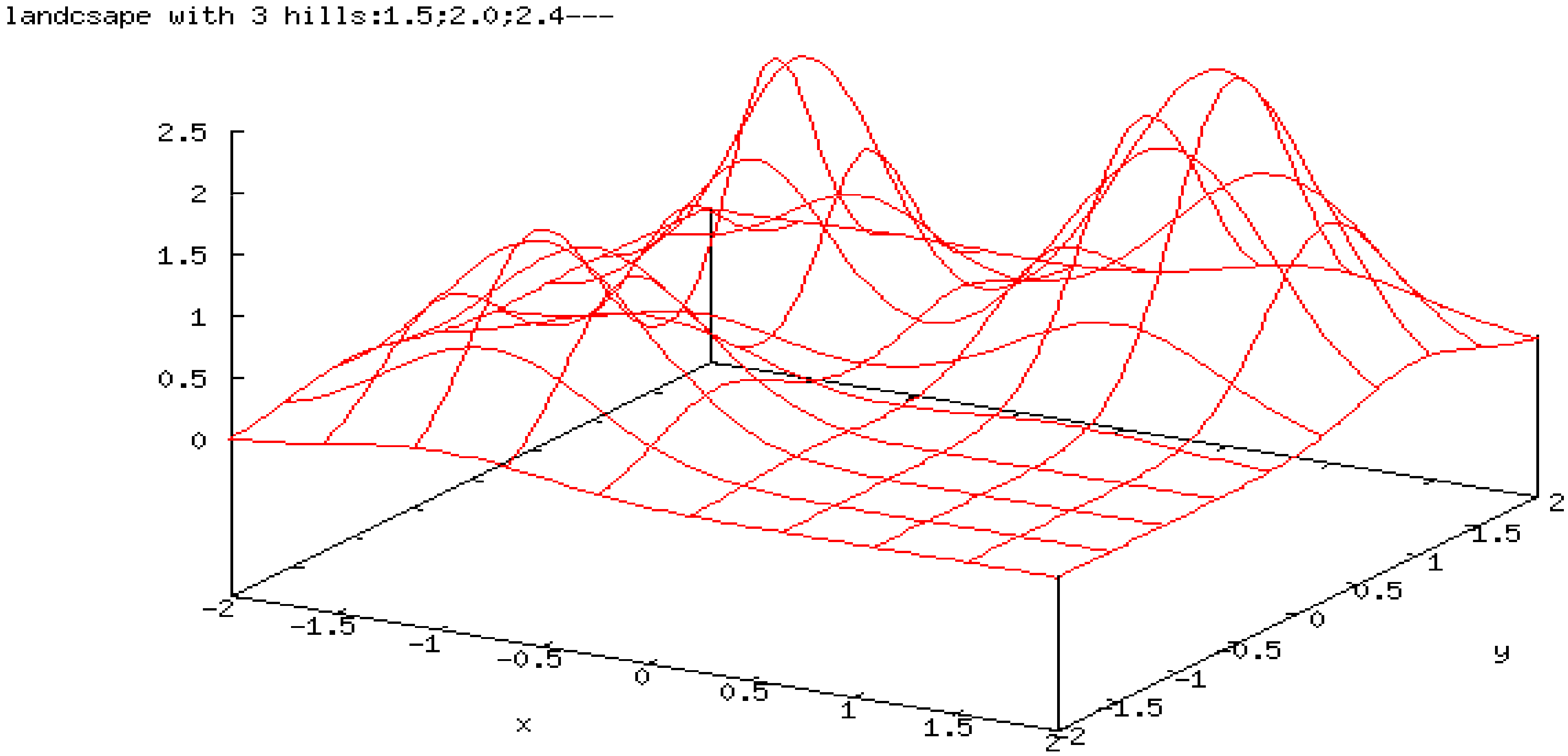
A few references

- Phys. Rev. Lett. **80**, 5044-5047 (1998)
- BioSystems **49**, 5044-5047 (1999)
- Eur.Phys.J. B **15**, 105(2000);**44**, 509(2005)
- Phys.Rev.E **64**, 021110 (2001); **65**, 061106 (2002); **71,** 051904 (2005); Complexity **8, No** 4 (2003);
- PhysicaD **187**,268 (2004); FNL **3**,L137,L145(2003).
- Acta Phys. Polonica 36, 1757 (2005)
- Ebeling/Sokolov: Statistical thermodynamics and stochastic theory of nonequilibrium systems, World Scientific 2005

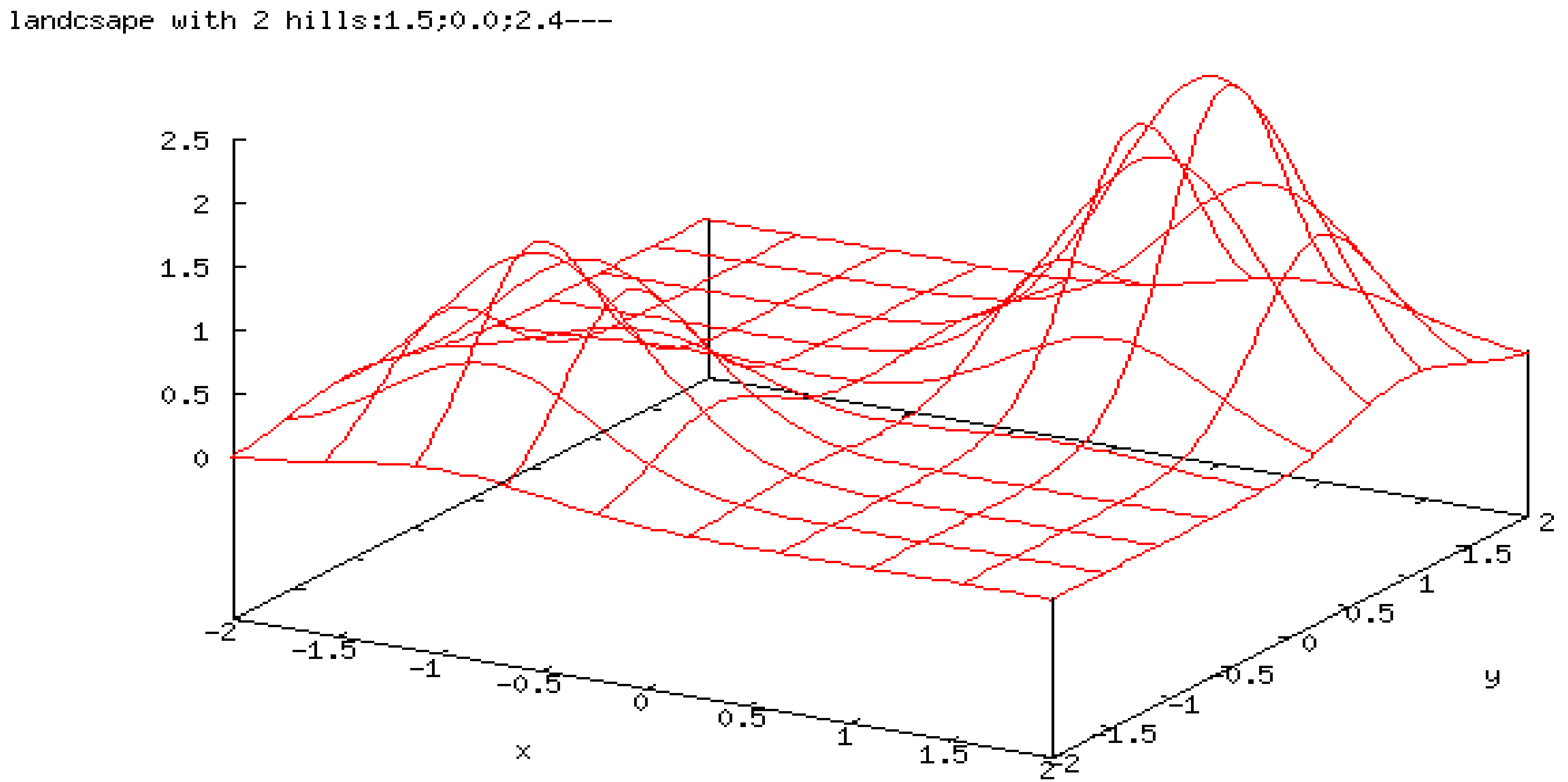
Conclusions

- The model of BM due to Einstein & Smoluchowski is still source of important applications,
- exist many generalizations and applications,
- a new direction the theory of BM is based on the idea of **‘self-propelled motion (negative friction / active forces)’**.
- new phenomena are **rotations** (centrifugal forces) in external fields, bifurcations, several modes of **collective motion** (coll transl. rotat.),
- hydrodynamic effects lead to **parallelization**
- new **appl to physics /biology /social agents** ?

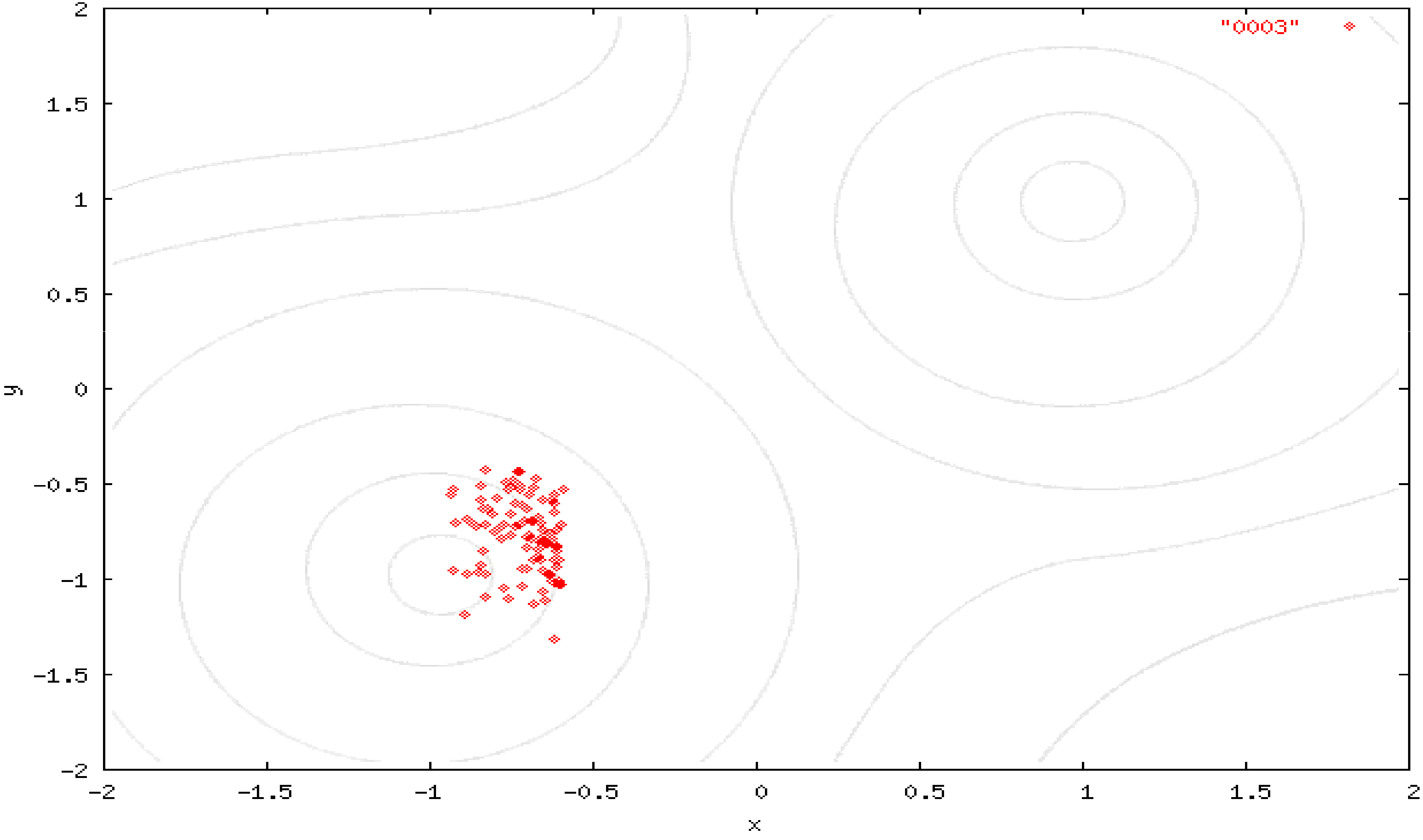
8. Outlook on evolution as hill climbing (Wright/Fisher) Brownian motion



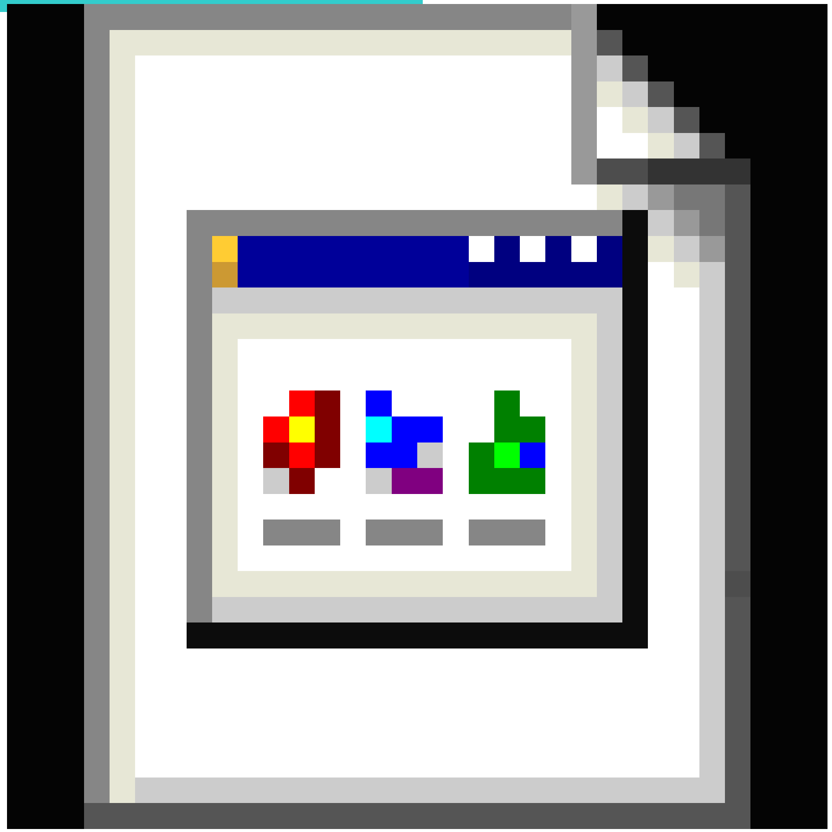
Landscape with 2 hills



Simulation of transitions of agents to a new state with higher value



transitions of agents betwee 3 maxima



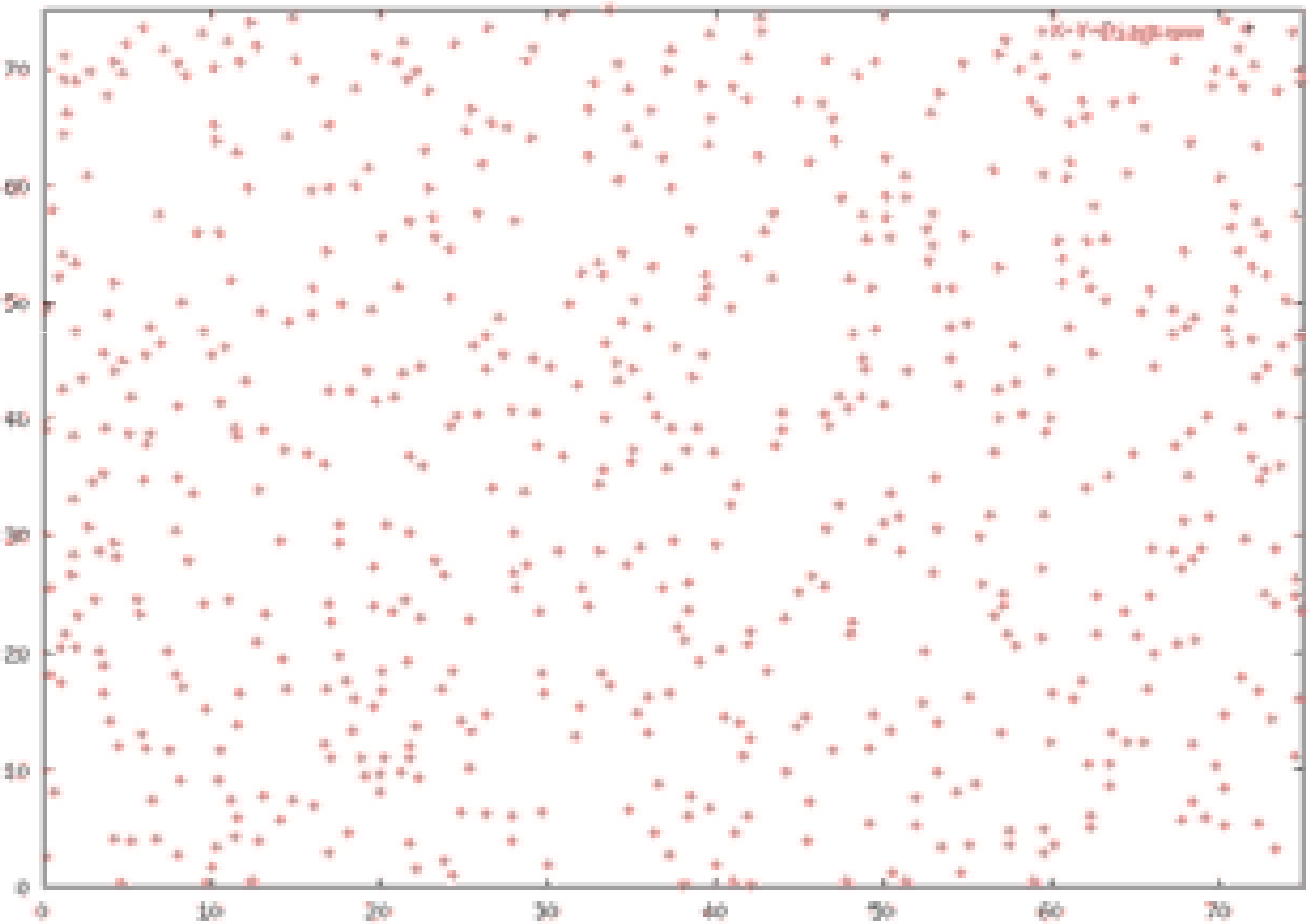
3max46.exe

Real Evo-landscapes may have many extrema, structure unknown. Models:

1. Ratchets (saw tooth - potentials)

2. Landscapes with randomly distr extrema

Evolution of networks of agents (illustration by Erdmann)



References on Brownian agents

- Schweitzer: Brownian agents..Berlin 2002
- Phys. Rev. Lett. **80**, 5044-5047 (1998)
- BioSystems **49**, 5044-5047 (1999)
- Eur. Phys. Journal B **15**,105-113 (2000)
- Phys. Rev. E **64**, 021110 (2001)
- Phys. Rev E **65**, 061106 (2002)
- Phys. Rev E **67**, 046403 (2003)
- Complexity **8,** No. 4 (2003)

Refs on models of evolution

- Ebeling/Feistel: Physik d Evolutionsprozesse (engl edition in preparation, Wiley 2010)
- Schweitzer: Brownian agents. Berlin 2002
- BioSystems **49**, 5044-5047 (1999)
- Phys. Rev. E **64**, 021110 (2001); **65**, 061106 (2002); **67**, 046403 (2003)
- Complexity **8,** No. 4 (2003)
- see also next lecture

Thanks you for attention

Please look for references, reprints etc. at

www.werner-ebeling.de,

summa.physik.hu-berlin.de/tsd

th-www.if.uj.edu.pl/stattherm

contact by email: werner_ebeling@web.de