

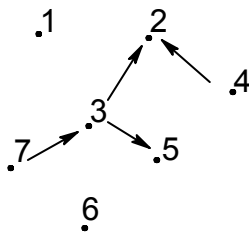
9. Grundlagen der Theorie stochastischer Prozesse

Chapman-Kolmogorov'sche Gleichung und Master-Gleichung

Mit Ausnahme der Brown'schen Bewegung haben wir uns bisher bei der statistischen Beschreibung auf Gleichgewichtszustände beschränkt. Die Gleichgewichtsverteilungen waren unabhängig von der Zeit t .

Ausgehend von einem bestimmten Zustand bleiben die Wahrscheinlichkeiten P_i , ein System in einem bestimmten Zustand Z_i anzutreffen, i.a. nicht konstant. Z. B. Aufenthalt von n Teilchen in zwei voneinander nicht durch eine Barriere getrennten Teilvolumina V_1 und V_2 . Befinden sich für $t = t_0$ alle Teilchen in V_1 wird sich dieser Zustand durch zufällige Bewegung der Teilchen ändern. Die für diese Anordnung typische Binomialverteilung stellt sich erst für $t \rightarrow \infty$ ein.

Wir betrachten endlich viele oder abzählbar unendlich viele Zustände Z_i über deren Realisierung nur Wahrscheinlichkeitsaussagen gemacht werden können.



Es können Übergänge stattfinden
(nicht alle müssen realisierbar sein).

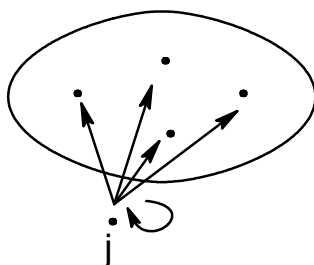
Wir betrachten zwei unterschiedliche Wahrscheinlichkeiten:

$P_i(t)$: Wahrscheinlichkeit dafür, dass sich das System zum Zeitpunkt t im Zustand Z_i befindet (Aufenthaltswahrscheinlichkeit).

$W_{ij}(t, t_0)$: Wahrscheinlichkeit, das System zum Zeitpunkt t im Zustand Z_i zu finden unter der Voraussetzung, dass es sich zu Zeitpunkt $t_0 \leq t$ im Zustand Z_j befand, Übergangswahrscheinlichkeit, (eine bedingte Wahrscheinlichkeit).

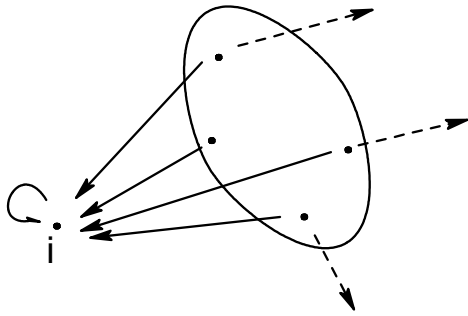
Es gelten offenbar die Regeln:

$$1) \sum_i W_{ij}(t, t_0) = 1 \quad , \quad W_{jj}(t, t_0) + \sum_{i \neq j} W_{ij}(t, t_0) = 1 \quad , \quad \text{Summation über den 1. Index von } W_{ij}$$



Ein System, das sich zum Zeitpunkt $t = t_0$ in Z_j befand, verbleibt entweder in diesem Zustand (W_{jj}) oder geht in einen anderen Zustand über ($W_{ij}, i \neq j$).

$$2) P_i(t) = \sum_j W_{ij}(t, t_0) P_j(t_0); \quad P_i(t) = W_{ii}(t, t_0) P_i(t_0) + \sum_{j \neq i} W_{ij}(t, t_0) P_j(t_0), \text{ Summation über den 2. Index}$$



$P_i(t)$: Aufenthaltswahrscheinlichkeit.

(System verbleibt in Z_i , oder es erfolgen Übergänge nach Z_i : $Z_j \rightarrow Z_i$.)

3) $W_{ij}(t, t_0) \geq 0$: (es gibt keine negativen Übergangswahrscheinlichkeiten)

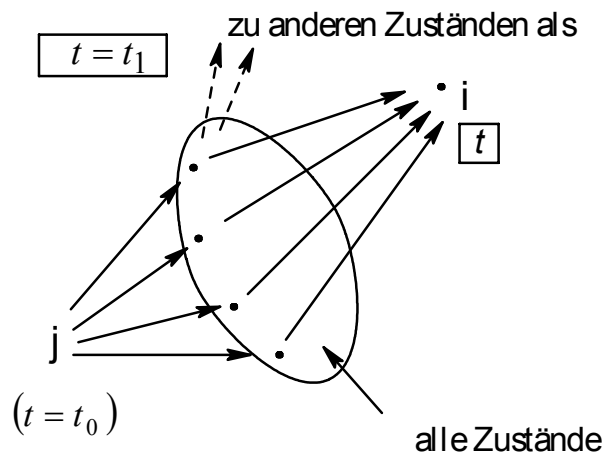
Die Größen W_{ij} können als Elemente einer Matrix (quadratische Matrix) aufgefasst werden.

In der Regel beschränkt man sich auf die Situation, wo die Übergangswahrscheinlichkeiten nur von der Zeitdifferenz $t - t_0$ abhängen.

$$W_{ij}(t, t_0) = W_{ij}(t - t_0)$$

(Annahme ähnlich wie bei autonomen Systemen in der Theorie deterministischer Prozesse.)

Die Übergänge von Z_j nach Z_i im Zeitintervall $t - t_0$ können über verschiedene Zwischenzustände erfolgen.



Daraus folgt: $W_{ij}(t - t_0) = \sum_k W_{ik}(t - t_1)W_{kj}(t_1 - t_0)$

mit $t \geq t_1 \geq t_0$. Das ist die sogenannte **Chapman-Kolmogorov'sche Gleichung**.

Um daraus eine Dgl. für $P_i(t)$ abzuleiten, betrachten wir kleine Zeitintervalle $\Delta t = t - t_1$ und setzen $t_0 = 0$.

$$W_{ij}(t) = \sum_k W_{ik}(\underbrace{\Delta t}_{t-t_1})W_{kj}(t - \Delta t)$$

Wir multiplizieren mit $P_j(0)$:

$$W_{ij}(t)P_j(0) = \sum_k W_{ik}(\underbrace{\Delta t}_{t-t_1})W_{kj}(t - \Delta t)P_j(0)$$

und summieren über alle j auf:

$$\sum_j W_{ij}(t)P_j(0) = \sum_{k,j} W_{ik}(\underbrace{\Delta t}_{t-t_1})W_{kj}(t - \Delta t)P_j(0)$$

Wir verwenden die Eigenschaft 2), nämlich: $P_i(t) = \sum_j W_{ij}(t - t_0)P_j(t_0) = \sum_j W_{ij}(t)P_j(0)$

$$\underbrace{\sum_j W_{ij}(t)P_j(0)}_{P_i(t)} = \sum_k W_{ik}(\Delta t) \underbrace{\left(\sum_j W_{kj}(t - \Delta t)P_j(0) \right)}_{P_k(t - \Delta t)}$$

$$P_i(t) = \sum_k W_{ik}(\Delta t)P_k(t - \Delta t)$$

$$P_i(t) = W_{ii}(\Delta t)P_i(t - \Delta t) + \sum_{k \neq i} W_{ik}(\Delta t)P_k(t - \Delta t)$$

außerdem die Eigenschaft 1) in der Form: $W_{ii} = 1 - \sum_{k \neq i} W_{ki}$

$$P_i(t) = 1 \cdot P_i(t - \Delta t) - \sum_{k \neq i} W_{ki}(\Delta t)P_i(t - \Delta t) + \sum_{k \neq i} W_{ik}(\Delta t)P_k(t - \Delta t)$$

$$\frac{P_i(t) - P_i(t - \Delta t)}{\Delta t} = \sum_{k \neq i} \frac{W_{ik}(\Delta t)}{\Delta t} P_k(t - \Delta t) - \sum_{k \neq i} \frac{W_{ki}(\Delta t)}{\Delta t} P_i(t - \Delta t)$$

$\Delta t \rightarrow 0$:

$$\frac{dP_i(t)}{dt} = \sum_{k \neq i} w_{ik} P_k(t) - \sum_{k \neq i} w_{ki} P_i(t)$$

Das ist die **Master-Gleichung**: Darin ist $w_{ik} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left(\frac{W_{ik}(\Delta t)}{\Delta t} \right)$ die

Übergangswahrscheinlichkeit/Zeiteinheit=Übergangsrate

Master-Gleichung: lineares Dgl.-System für die Aufenthaltswahrscheinlichkeiten

Die Änderung von P_i ergibt sich durch Betrachtung aller Übergänge, die aus Zuständen Z_k nach Z_i führen, minus allen Übergängen, die von Z_i zu Zuständen Z_k führen mit $k \neq i$.