Wh: Betrachte 3 Zeiten $t_3 > t_2 > t_1$

$$p(x_3,t_3 | x_1,t_1) = \int dx_2 \, p(x_3,t_3 | x_2,t_2) \cdot p(x_2,t_2 | x_1,t_1)$$

Chapman-Kolmogorov-Gleichung

Stationäre Prozesse:
$$p(x,t) = p(x)$$
$$M_\nu(t) = M_\nu$$

$$p(x_1,t_1; x_2,t_2) = p(x_1,0; x_2,\tau)$$
$$\tau = t_2 - t_1$$

$$G(t_1,t_2) = \langle (\overbrace{x(t_1)}^{x_1} - M_1(t_1))(x(t_2) - M_1(t_2)) \rangle$$
$$= G(\tau)$$

Spektrale Leistungsdichte

$$S(\omega) = \lim_{T\to\infty} \frac{1}{T} \langle |\hat{x}_T(\omega)|^2 \rangle$$
$$= \dots = \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \, e^{-i\omega\tau} G(\tau)$$

Wiener-Khinchin-Theorem

$\Rightarrow$ Zusammenhang zwischen der Autokorrelationsfunktion und der Spektraldichte für <u>stationäre</u> Prozesse

Umkehrung: $G(\tau) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \, S(\omega) \, e^{i\omega\tau}$

Beispiel:

$$G(\tau) = A \, e^{-\tau/\tau_R}$$

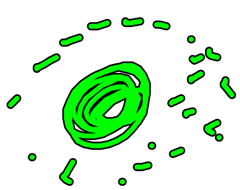
exponentiell in der Zeit abfallend

charakteristische Zeit: $\tau_R = \text{const}$

„Relaxationszeit"

z.B. Geschwindigkeits-Autokorrelationsfunktion eines Brownschen Teilchens

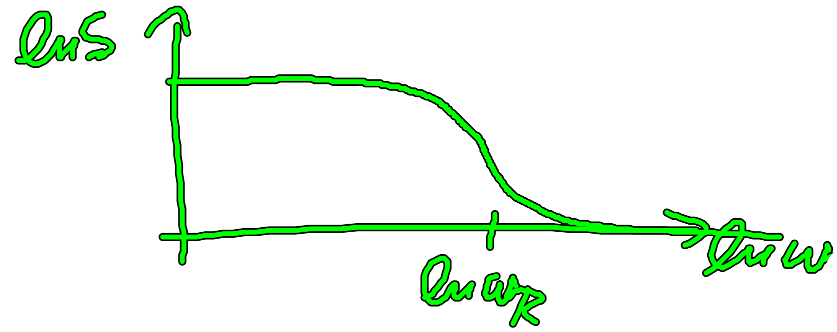
$$G(\tau) \longrightarrow \langle \underline{v}(\tau) \cdot \underline{v}(0) \rangle$$



(Annahme: $\langle \underline{v}(\tau) \rangle = 0$)

~~Aus~~ aus dem Wiener-Khintchin-Theorem folgt:

$$S(\omega) = A \frac{2\tau_R}{1+(\omega\tau_R)^2} \quad \text{„Lorentzverteilung"}$$



$\omega_R = \frac{1}{\tau_R}$

$\Rightarrow$ S ist nahezu unabhängig von der Frequenz im Bereich $\omega \ll \frac{1}{\tau_R}$

Bemerkung zur eigentlichen Berechnung von $G(\tau)$

Wir hatten: (im stationären Fall)

$$G(\tau) = \langle x(\tau)\, x(0) \rangle$$

$$= \int dx_1 \int dx_2 \; x_1 x_2 \; p(x_1, 0; x_2, \overbrace{t_2 - t_1}^{\tau})$$

Das ist eine Art „Ensemblemittelwert":

wiederholte Messung unter Einbeziehung aller Konfigurationen der Variable x zu zwei verschiedenen Zeiten

Ergodizität:

Ensemble-Mittelwert = Zeitmittelwert

Mit dieser Annahme ergibt sich als alternative Rechenvorschrift für die Autokorrelationsfunktion im stationären Fall.

$$G(\tau) = \lim_{T\to\infty} \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{T/2} dt \; x(t)\, x(t+\tau)$$

$$\langle x(0)\, x(\tau) \rangle = \langle x(t)\, x(t+\tau) \rangle$$

1.4. Mastergleichung

Ausgangspunkt: Chapman-Kolmogorov-Gleichung

$$(*) \quad p(x_3,t_3 \,|\, x_1,t_1) = \int dx_2 \; p(x_3,t_3 \,|\, x_2,t_2) \cdot p(x_2,t_2 \,|\, x_1,t_1)$$

$$t_3 > t_2 > t_1$$

x_1: Ausgangszustand
x_2: Zwischenzustand
x_3: Endzustand

Idee: (*) Umformung in eine differentielle Form
$\Longrightarrow$ Zeitentwicklung (Bewegungsgleichung) für Übergangswahrsch.

Führe dazu eine Taylorentwicklung in $\Delta t = t_{i+1} - t_i$

$i = 1, 2$

Beachte:

$$P(x_2, t_1 \mid x_1, t_1) = \delta(x_1 - x_2)$$

Zum Zeitpunkt t_1 kann das System nicht gleichzeitig in zwei verschiedenen Zuständen $x_1 \neq x_2$ sein

Ansatz für die Taylorentwicklung:

$$P(x_2, t_2 \mid x_1, t_1) \qquad \Delta t = t_2 - t_1$$

$$= \left(1 - \bar{w}(x_1, t_1)\Delta t\right)\delta(x_1 - x_2)$$

$$+ \; w(x_2; x_1, t_1)\Delta t \; + \; O(\Delta t)^2$$

die Übergangswahrsch. pro Zeiteinheit, d.h. die Übergangsrate vom Ausgangszustand (x_1, t_1) in einen anderen Zustand $x_2 \neq x_1$

Festlegung der Größe $\bar{w}(x_1, t_1)$: über Normierungsbedingung

Es muß gelten:

$$\int dx_2\, p(x_2,t_2|x_1,t_1) \overset{!}{=} 1$$

System muß irgendwo hingehen!

$$\Rightarrow \int dx_2 \Big[(1-\bar{w}(x_1,t_1)\Delta t)\,\delta(x_1-x_2) + W(x_2;x_1,t_1)\Delta t + O(\Delta t)^2 \Big] \overset{!}{=} 1$$

$$\Rightarrow \cancel{1} - \bar{w}(x_1,t_1)\Delta t + \int dx_2\, W(x_2;x_1,t_1)\Delta t + O(\Delta t)^2 \overset{!}{=} \cancel{1}$$

$$\Delta t \to 0 \quad \Rightarrow \quad \boxed{\bar{w}(x_1,t_1) = \int dx_2\, W(x_2;x_1,t_1)}$$

Gehe nun zurück zur Chapman-Kolmogorov-Gleichung (*) für $p(x_3,t_3|x_1,t_1)$

Wir subtrahieren die Größe

$$p(x_3,t_2|x_1,t_1) = p(x_3,t_3-\Delta t|x_1,t_1) \qquad t_2 = t_3 - \Delta t$$

und dividieren durch Δt

$\Rightarrow$ Linke Seite der Chapman-Kolmogorov-Gl. wird:

$$\frac{1}{\Delta t}\left(p(x_3,t_3|x_1,t_1) - p(x_3,t_3-\Delta t|x_1,t_1)\right) \underset{\Delta t\to 0}{=} \frac{\partial}{\partial t_3}(x_3,t_3|x_1,t_1) = ①$$

<u>Rechte Seite:</u>

$$\frac{1}{\Delta t}\left(\int dx_2\, p(x_3,t_3|x_2,t_2)\, p(x_2,t_2|x_1,t_1) - p(x_3,t_2|x_1,t_1)\right) = ②$$

Wir machen die Taylorentwicklung für $p(x_3,t_3|x_2,t_2)$

$$② = \frac{1}{\Delta t}\Big(\int dx_2\, p(x_2,t_2|x_1,t_1) \cdot \left[(1-\overline{w}(x_2,t_2)\Delta t)\,\delta(x_2-x_3) + W(x_3;x_2,t_2)\Delta t + \mathcal{O}((\Delta t)^2)\right] - p(x_3,t_2|x_1,t_1)\Big)$$

$$= \frac{1}{\Delta t}\Big(\cancel{p(x_3,t_2|x_1,t_1)} - p(x_3,t_2|x_1,t_1)\cdot\overline{w}(x_3,t_2)\Delta t$$

$$+\int dx_2 \Big(p(x_2,t_2|x_1,t_1)\, W(x_3;x_2,t_2)\,\Delta t + O(\Delta t)^2 \Big)$$

$$- \cancel{p(x_3,t_2|x_1,t_1)} \Big) \Big)$$

$$\boxed{\begin{array}{l}\text{beachte:}\\ t_2 = t_3 - \Delta t\end{array}}$$

$$= -\bar{w}(x_3,t_2)\, p(x_3,t_2|x_1,t_1) + \int dx_2\, p(x_2,t_2|x_1,t_1)\, W(x_3;x_2,t_2) + O(\Delta t)$$

im Limes $\Delta t \to 0$

$$② = -\bar{w}(x_3,t_3)\, p(x_3,t_3|x_1,t_1) + \int dx_2\, p(x_2,t_3|x_1,t_1)\cdot W(x_3;x_2,t_3)$$

benutze noch

$$\bar{w}(x_3,t_3) = \int dx_2\, W(x_2;x_3,t_3)$$

$$\Rightarrow (2) = \int dx_2\, W(x_3; x_2, t_3)\, p(x_2, t_3 | x_1, t_1)$$
$$- \int dx_2\, W(x_2; x_3 t_3)\, p(x_3, t_3 / x_1, t_1)$$

Kombiniere linke und rechte Seite:

$$\frac{\partial}{\partial t_3} p(x_3, t_3 / x_1, t_1)$$
$$= \int dx_2 \Big[W(x_3; x_2, t_3) \cdot p(x_2, t_3 | x_1, t_1) - W(x_2; x_3 t_3) \cdot p(x_3, t_3 | x_1, t_1) \Big]$$

„Pauli-Mastergleichung"

Wir schreiben diese Gleichung noch um in eine Gleichung für $\frac{\partial}{\partial t_3} p(x_3, t_3)$

Verwende dazu:

$$\int dx_1\, p(x_3 t_3 | x_1, t_1) \cdot p(x_1, t_1)$$

$$= \int dx_1 \; \underbrace{p(x_1,t_1\,;x_3,t_3)}_{\text{Verbundwahrscheinlichkeit}}$$

$$= p(x_3,t_3)$$

$\Rightarrow$ Multipliziere die Pauli-Master-Gleichung mit $p(x_1,t_1)$ und integriere über $\int dx_1$

Dann ergibt sich aus der Pauli-Mastergleichung:

$$\frac{\partial}{\partial t} p(x_3,t_3) = \int dx_2 \left[W(x_3; x_2 t_3) \cdot p(x_2,t_3) - W(x_2; x_3 t_3)\, p(x_3,t_3) \right]$$

neue Notation:

$$x_3 \to x \quad , \quad x_2 \to x' \quad , \quad t_3 \to t$$

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t} p(x,t) = \int dx' \left(W(x;x't)\, p(x't) - W(x';x,t)\, p(x,t) \right)}$$

Mastergleichung (für kontinuierliche Variable)

<u>Interpretation:</u>

Eine zeitliche Änderung der Wahrsch., bei t den Zustand (Wert) x zu finden, kann auf zwei Arten erfolgen

(1. Term auf der rechten Seite)

$\Rightarrow$ Zunahme von $p(x,t)$ infolge von Übergängen aus anderen Zuständen x'

(2. Term auf der rechten Seite)

$\Rightarrow$ Abnahme durch Übergänge von x nach x'

Diskrete Form der Mastergleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} p(x,t) = \sum_{x' \neq x} \Big(W(x;x',t)\,p(x',t) - W(x';x,t)\,p(x,t) \Big)$$

~~Bsp~~ Spezialfall: Stationäre Verteilung

$$\frac{\partial}{\partial t} p(x,t) = 0$$

$\Rightarrow$ Rechte Seite der Mastergleichung ist Null