Wh: Markov-Prozess

$$p(\underbrace{x_{n+1}, t_{n+1}}_{\text{Zukunft}} | \underbrace{x_1, t_1; x_2, t_2; \dots}_{\text{Vergangenheit}}; \underbrace{x_n, t_n}_{\text{Gegenwart}})$$

$$= p(x_{n+1}, t_{n+1} | x_n, t_n) \leftarrow \text{Übergangswahrsch.}$$

Verbundwahrsch.

$$p(x_1, t_1; x_2, t_2; \dots; x_n, t_n)$$

$$= p(x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1}) \cdot p(x_{n-1}, t_{n-1} | x_{n-2}, t_{n-2})$$

„Markov-Kette" $\dots\dots p(x_2, t_2 | x_1, t_1)\, p(x_1, t_1)$

speziell stationäre Prozesse

Zeittranslationsinvarianz! $t \to t + \tau$

$$p(x, t) = p(x)$$

$$M_\nu(t) = M_\nu$$

$$\langle x^\nu \rangle$$

Zweizeitige Wahrsch. $p(x_1, t_1; x_2, t_2)$

$$= p(x_1, 0; x_2, \underbrace{t_2 - t_1}_{\text{Zeitdifferenz!}})$$

Betrachte nun die Autokorrelationsfunktion

$$G(t_1,t_2) = \langle (\underbrace{X(t_1)}_{x_1} - \underbrace{M_1(t_1)}_{\langle x_1 \rangle})(\underbrace{X(t_2)}_{x_2} - \underbrace{M_1(t_2)}_{\langle x_2 \rangle}) \rangle$$

charakterisiert die Korrelation von Ereignissen zu zwei verschiedenen Zeitpunkten t_1, t_2

Berechnung:

$$G(t_1,t_2) = \int dx_1 \int dx_2 \, (x_1 - M_1(t_1)) \cdot (x_2 - M_1(t_2)) \, p(x_1, t_1; x_2, t_2)$$

Beim stationären Prozeß gilt:

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

und M_1 Zeitunabhängig

$\Rightarrow$ auch die Autokorrelationsfunktion hängt nur von der Zeitdifferenz ab!

$$G(t_1 - t_2) = G(t_2 - t_1)$$

• Zusammenhang mit spektralen Eigenschaften

Betrachte [illegible] reelle Variable $x(t)$ und definiere die Fouriertransformierte

$$\tilde{x}_T(\omega) = \int_{-T/2}^{T/2} e^{i\omega t}\, x(t)$$

Dabei wird angenommen, dass $x(t)$ nur im Intervall $-\frac{T}{2} \le t \le \frac{T}{2}$ von Null verschieden ist

da $x(t)$ reell folgt

$$\tilde{x}_T^{*}(\omega) = \tilde{x}_T(-\omega)$$

Umkehrung: $$x(t) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} d\omega\, \tilde{x}_T(\omega)\, e^{-i\omega t}$$

Spektrale Leistungsdichte

$$S(\omega) = \lim_{T\to\infty} \frac{1}{T} \langle |\tilde{x}_T(\omega)|^2 \rangle \qquad (*)$$

Interpretation:
$S(\omega) \,\hat{=}$ „Intensität" im Intervall $[\omega, \omega + d\omega]$

Umschreiben von ⊛

$$S(\omega) = \lim_{T\to\infty} \frac{1}{T} \Big\langle \int_{-T/2}^{T/2} dt\, e^{i\omega t} x(t)$$
$$\times \int_{-T/2}^{T/2} dt'\, e^{-i\omega t'} x(t') \Big\rangle$$
$$= \lim_{T\to\infty} \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{T/2} \int_{-T/2}^{T/2} dt\, dt'\, e^{i\omega t} e^{-i\omega t'} \langle x(t) x(t') \rangle$$

Stationäre Prozesse (Zeittranslations-
invarianz)

$$\langle x(t) x(t') \rangle = \langle x(0) x(t'-t) \rangle$$
$$= \langle x(0) x(\tau) \rangle$$

Umschreiben des Integrals

$$\Rightarrow \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} dt \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} dt' \ldots \longrightarrow T \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \ldots$$

Wie im Volumen-Fall

$$\int dk_1 \int dk_2 \ldots = V \int dk_{12} \ldots$$

Sobald T groß gegen den Bereich, in dem $\langle x(0)x(\tau)\rangle \neq 0$

$$\Rightarrow S(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \, \langle x(0)x(\tau)\rangle e^{-i\omega\tau}$$

Annahme $\langle x \rangle = 0$!

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

$$\Rightarrow \boxed{S(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \, e^{-i\omega\tau} \, G(\tau)}$$

Wiener-Khintchin-Theorem

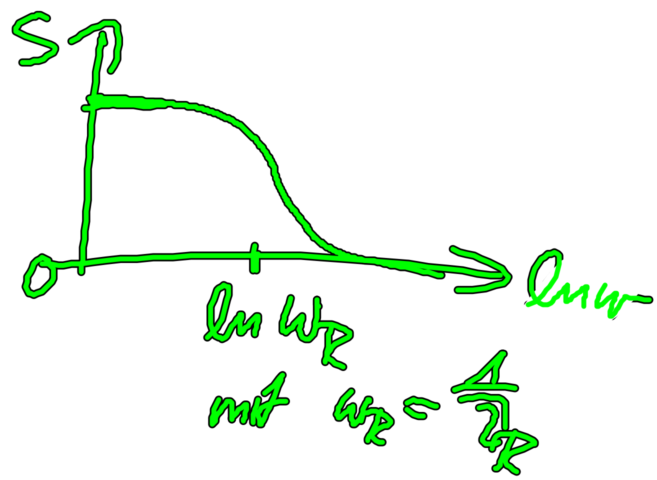
Zusammenhang zw. Spektraler Dichte und Autokorrelationsfkt. für stationäre Prozesse

Beispiel:

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

τ_R : Relaxationszeit

$$S(\omega) = A\,\frac{2\tau_R}{1+(\omega\tau_R)^2}$$



Nachbemerkung zur Berechnung von G

Wir hatten im stationären Fall:

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

$$= \int dx_1 \int dx_2 \; x_1 x_2 \; p(x_1, 0; x_2, \tau)$$

im thermodyn. Gleichgewicht gilt die Ergodizitätshypothese

Schar-Mittel (Ensemble-Mittel) $\stackrel{!}{=}$ Zeitmittel

dann

$$G(\tau) = \lim_{T \to \infty} \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{T/2} dt \; x(0)\, x(\tau)$$

$\parallel$
$\langle x(0)\, x(\tau) \rangle$

analog: $\langle x \rangle = \int dx_1 \; x_1 \; p(x_1, t_1)$

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

1.4. Pauli-Mastergleichung und Mastergleichung

Ausgangspunkt:

Chapman-Kolmogorov-Gl. (Markov-Prozess!)

(*) $p(x_3, t_3 | x_1, t_1)$ $\quad (t_3 > t_2 > t_1)$

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

Übergangswahrsch.
von x_1 bei t_1 (Anfangszustand)
nach x_3 bei t_3 (Endzustand)

x_2, t_2: Zwischenzustand

~~x ist kontinuierliche Variable, t ist diskret~~

Ziel:

Umformung von (*) in eine differentielle Form

$\Rightarrow$ Zeitentwicklung der Übergangswahrsch. !

Führe dazu eine Entwicklung der Übergangswahrsch. in $\Delta t = t_{i+1} - t_i$ durch.

Vorbemerkungen

- $p(x_3, t_1 \mid x_1, t_1) = \delta(x_1 - x_3)$

Begründung: Zum Zeitpunkt t_1 kann das System nicht gleichzeitig in verschiedenen Zuständen sein! $x_1 \neq x_3$

analog:

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

- <u>Ansatz</u> für die Entwicklung einer der beteiligten Übergangswahrsch. in Δt

$$P(x_2, t_2 \mid x_1, t_1) = \underbrace{\left(1 - \bar{w}(x_1, t_1)\Delta t\right)} \delta(x_1 - x_2) + W(x_2; x_1, t_1)\Delta t + O(\Delta t)^2$$

Maß für die Wahrsch., dass <u>kein</u> Übergang im Intervall $[t_1, t_1 + \Delta t]$ stattfindet

$W(x_2; x_1, t_1)$ ist die Übergangswahrsch. pro Zeiteinheit, d.h. die <u>Übergangsrate</u>, dass ein Übergang in einen anderen Zustand $x_2 \neq x_1$ erfolgt

- Festlegung der Größe $\bar{w}$:

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

System muß irgendwo hingehen!

Kombiniere mit dem Ansatz für $p(x_2 t_2 | x_1 t_1)$

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

$$\overset{!}{=} 1$$

$$\Leftrightarrow \cancel{1} - \bar{w}(x_1 t_1) \Delta t + \int dx_2 \big(W(x_2 ; x_1 t_1) \Delta t + \mathcal{O}(\Delta t^2) \big)$$

$$\overset{!}{=} \cancel{1}$$

Dividiere durch Δt und lasse danach Δt gegen Null gehen

$$\Rightarrow \boxed{\bar{w}(x_1,t_1) = \int dx_2\, w(x_2; x_1, t_1)}$$

„Verlustrate" bei x_1 zur Zeit t_1

Populationsrate anderer Zustände x_2

Gehe nun zurück zur Chapman-Kolmogorow-Gl.

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

Subtrahiere (auf beiden Seiten) die Größe

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

und dividiere durch Δt, mache anschließend $\Delta t \to 0$

Linke Seite:

$$\frac{1}{\Delta t}\Big(p(x_3,t_3|x_1,t_1) - p(x_3,t_3-\Delta t|x_1,t_1)\Big) \xrightarrow[\Delta t\to 0]{} \frac{\partial}{\partial t_3} p(x_3,t_3|x_1,t_1)$$

Rechte Seite

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

setze für $p(x_3,t_3|x_2,t_2)$ die Entwicklung in Δt ein!

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

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

$$-\bar{w}(x_3,t_2)\Delta t\, p(x_3,t_2|x_1,t_1)$$

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

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

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

Führe nun Limes $\Delta t \to 0$ durch und beachte, dass dann auch folgt

$$\lim_{\Delta t \to 0} t_2 = t_3$$

<u>Rechte Seite</u>

$$\underset{\Delta t \to 0}{=} -\bar{w}(x_3,t_3)\, p(x_3,t_3|x_1,t_1) + \int dx_2\, p(x_2,t_3;x_1,t_1)\, W(x_3;x_2,t_3)$$

benutze jetzt noch: $\bar{w}(x_3, t_3) \stackrel{!}{=} \int dx_2 \; w(x_2; x_3, t_3)$

→ Rechte Seite:

$$= \int dx_2 \; w(x_3; x_2, t_3)\, p(x_2, t_3 \,|\, x_1, t_1)$$

$$- \int dx_2 \; w(x_2; x_3, t_3)\, p(x_3, t_3 \,|\, x_1, t_1)$$

Bem. Die Zeit t_2 ist herausgeflogen!

Kombiniere linke und rechte Seite

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial t_3} p(x_3, t_3 | x_1, t_1)$$

$$= \int dx_2 \Big[W(x_3 ; x_2, t_3) P(x_2, t_3 | x_1, t_1) - W(x_2 ; x_3, t_3) P(x_3, t_3 | x_1, t_1) \Big]$$

„Pauli-Master-Gleichung"