3.3. Markov-Prozesse, Chapman-Kolmogorov-, Master- und Fokker-Planck-Gleichung

Definition der bedingten Wahrscheinlichkeit :

$$P_n(m_n,t_n;m_{n-1},t_{n-1};...;m_1,t_1) = \underbrace{p(m_n,t_n\,|\,m_{n-1},t_{n-1};...;m_1,t_1)}\,P_{n-1}(m_{n-1},t_{n-1};...;m_1,t_1) \qquad (1)$$

Definition der bedingten Wahrscheinlichkeit dafür, das Teilchen T zu t_n bei m_n zu finden, vorausgesetzt es befand sich zu t_1 bei m_1, …, und t_{n-1} bei m_{n-1}.

<u>Markov-Prozesse</u>: Gilt für die bedingte W. eines stochastischen Prozesses (kleine p)

$$p(m_n,t_n\,|\,m_{n-1},t_{n-1};...;m_1,t_1) = p(m_n,t_n\,|\,m_{n-1},t_{n-1}) =: \overbrace{p_{t_n,t_{n-1}}(m_n,m_{n-1})}^{\text{Übergangsrate}}, \qquad (2)$$

dann handelt es sich um einen Markov-Prozess: Die bedingte W. des Markov-Prozesses auf der linken Seite hängt nur von t_{n-1} ab, nicht von noch weiter zurückliegenden früheren Zeitpunkten t_{n-2}, usw. Deshalb werden Markov-Prozesse auch als gedächtnislose stochastische Prozessen bezeichnet.

Durch rekursive Anwendung der Definition (1) folgt für Markov-Prozesse

$$P_n(m_n,t_n;m_{n-1},t_{n-1};...;m_1,t_1) = p_{t_n,t_{n-1}}(m_n,m_{n-1})\cdot p_{t_{n-1},t_{n-2}}(m_{n-1},m_{n-2})\cdot ...\cdot p_{t_2,t_1}(m_2,m_1)\cdot P_1(m_1,t_1)$$

Die Wahrscheinlichkeitsdichte P_n (große P), ein Teilchen/System in der Zeitfolge t_i an Positionen/in Zuständen m_i anzutreffen, ergibt sich daraus, dass man den Weg des Teilchens verfolgt und die entsprechenden Übergangswahrscheinlichkeiten von einem Punkt zum nächsten verwendet.

Chapman-Kolmogorov-Gleichung: Betrachte $t_1 < t_2 < t_3$. Es gilt

$$\underbrace{P_2(m_3,t_3;m_1,t_1)}_{\downarrow} = \sum_{m_2}\underbrace{P_3(m_3,t_3;m_2,t_2;m_1,t_1)}_{\downarrow}$$

$$p_{t_3,t_1}(m_3,m_1)\cdot P_1(m_1,t_1) = \sum_{m_2} p_{t_3,t_2}(m_3,m_2)\cdot p_{t_2,t_1}(m_2,m_1)\cdot P_1(m_1,t_1) \qquad \textbf{(*)}$$

und da $P_1(m_1,t_1)$ beliebig

$$p_{t_3,t_1}(m_3,m_1) = \sum_{m_2} p_{t_3,t_2}(m_3,m_2)\cdot p_{t_2,t_1}(m_2,m_1) \qquad (3a)$$

Eine alternative Form der CKG erhält man durch Summation von (*) über m_1

$$\sum_{m_1} \underbrace{p_{t_3,t_1}(m_3,m_1)\cdot P_1(m_1,t_1)}_{\substack{\downarrow \\ P_2(m_3,t_3;m_1,t_1)}} = \sum_{m_1,m_2} p_{t_3,t_2}(m_3,m_2)\cdot \underbrace{p_{t_2,t_1}(m_2,m_1)\cdot P_1(m_1,t_1)}_{\substack{\downarrow \\ P_2(m_2,t_2;m_1,t_1)}}$$

nach $\sum_{m_1}$ $\qquad P_1(m_3,t_3) \qquad\qquad P_1(m_2,t_1)$,

also insgesamt

$$P_1(m_3,t_3) = \sum_{m_2} p_{t_3,t_2}(m_3,m_2)\; P_1(m_2,t_2) \quad \text{bzw.} \quad \underline{P(m,t) = \sum_n p_{t,t'}(m,n)\; P(n,t')}\,. \qquad (3b)$$

Wir setzen nun t = t' + τ , dann ist (3b) $P(m,t+\tau) = \sum_n p_{t+\tau,t'}(m,n)\; P(m,t')$. Daraus folgt

$$\frac{1}{\tau}\left[P(m,t+\tau) - P(m,t)\right] = \sum_n \frac{1}{\tau}\left[p_{t+\tau,t'}(m,n) - p_{t,t'}(m,n)\right] P(n,t')$$

Im Limes $\tau \to 0$, also $t' \to t$ ergibt sich

$$\underline{\frac{\partial P(m,t)}{\partial t} = \sum_n \dot{p}_t(m,n)\; P(n,t)}$$

mit der Übergangswahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit/Übergangsrate

$$\dot{p}_t(m,n) := \lim_{t\to 0} \frac{1}{\tau}\left[p_{t+\tau,t'}(m,n) - p_{t,t'}(m,n)\right] \quad .$$

Alternative Schreibweise:

$m \neq n$: $\quad \dot{p}_t(m,n) =: w(m,n) = w(n \to m)$ $\qquad$ Zahl der Übergänge $n \to m$/Zeiteinheit

$$m = n: \quad \lim_{t\to 0} \frac{1}{\tau}\left[p_{t+\tau,t'}(m,m) - p_{t,t'}(m,m)\right] = \dot{p}_t(m,m) := -\sum_n w(n,m) = -\sum_n w(m \to n)$$

denn die Änderung der W., das Teilchen zu t + τ bei m zu finden, wenn es sich zu t bereits am selben Ort m befand, resultiert aus allen Übergängen bei denen es seinen ursprünglichen Ort m verlässt.

So erhalten wir die **Mastergleichung** für Markov-Prozesse

$$\frac{\partial P(m,t)}{\partial t} = \sum_n \left[\underbrace{w(n \to m)}_{\downarrow} P(n,t) - w(m \to n)\, P(m,t) \right] = \sum_n w(n \to m)\, P(n,t) - P(m,t) \sum_n w(m \to n)$$

Übergangsrate $n \to m$ hinein,
multipliziert mit W. des "Zustandes m"
und summiert über alle Übergänge n (4)

Die zentralen Größen sind die Übergangsraten – sie enthalten (abgesehen von der Markov-Näherung) die Physik.

Heuristische Herleitung/Interpretation der Mastergleichung:

Zeitliche Änderung der Wahrscheinlichkeit für den "Zustand m"	= +	Übergangsrate in "Zustand m" hinein; diese Übergänge erhöhen P(m,t)	-	Übergangsrate aus "Zustand m" heraus; diese Übergänge verringern P(m,t)

Stationäre Lösung der Mastergleichung

$$\lim_{t\to\infty} P(m,t) =: P^0(m) \qquad \sum_n [\, w(n \to m)\, P^0(n) - w(m \to n)\, P^0(m) \,] = 0$$

Detaillierte Balance: $w(n \to m)\, P^0(n) - w(m \to n)\, P^0(m) = 0 \quad \dfrac{P^0(m)}{P^0(n)} = \dfrac{w(n \to m)}{w(m \to n)}, \quad P^0(n) \neq 0$

Bei detaillierter Balance erfolgen pro Zeiteinheit genauso viele Übergänge von n nach m wie von m nach n.

Schreibe $m = n_{j+1}$, $n = n_j$

- Übergang von j = 0 nach j = 1 entsprechend $\dfrac{P^0(n_1)}{P^0(n_0)} = \dfrac{w(n_0 \to n_1)}{w(n_1 \to n_0)}$

- Übergang von j = 0 über j = 1 nach j = 2 entsprechend

$$\frac{P^0(n_2)}{P^0(n_0)} = \frac{P^0(n_1)}{P^0(n_0)}\, \frac{P^0(n_2)}{P^0(n_1)} = \frac{w(n_0 \to n_1)}{w(n_1 \to n_0)}\, \frac{w(n_1 \to n_2)}{w(n_2 \to n_1)} \,.$$

- Soll $P^0(n)$ eindeutig sein, muss mindestens eine Folge {j} existieren, so dass

$$\frac{P^0(n_N)}{P^0(n_0)} = \prod_{j=0}^{N-1} \frac{w(n_j \to n_{j+1})}{w(n_{j+1} \to n_j)} . \qquad (5)$$

Setzen wir $P^0(n) = N e^{\Phi(n)}$, dann ist $\Phi(n_N) - \Phi(n_0) = \sum_{j=0}^{N-1} \ln \frac{w(n_j \to n_{j+1})}{w(n_{j+1} \to n_j)}$.

FAZIT: Ist die stationäre Lösung eindeutig und die Bedingung der detaillierten Balance erfüllt, kann $P^0(n)$ durch einfache Summation (im kontinuierlichen Fall Integration) erhalten werden.

Beispiel: Lineare Kette mit nächster Nachbar WW, d.h. Sprünge um ± 1

$$\frac{\partial P(m,t)}{\partial t} = w(m,m-1)P(m-1,t) + w(m,m+1)P(m+1,t) - \left[w(m+1,m) - w(m-1,m) \right] P(m,t)$$

Kontinuierliche Zustände/Zustandsraum, Fokker-Planck-Gleichung

Sei $P(x,t)\,dx$ – W., dass $x \in (x+dx, x)$ zu t, dann folgt

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \left[w(x,x')P(x',t) - w(x',x)P(x,t) \right] \quad (x = \{x_1, x_2, ..., x_n\} \text{ möglich, dann } d^n x')$$

Führe die Sprungweite r := x - x' ein und drücke Übergangsraten als Funktion von r und des Zustandes vor dem Sprung aus

$$w(x,x') \text{ entspricht } x' \to x = x' + r \Rightarrow w(x,x') \to w(x';r) = w(x-r;r)$$

$$w(x',x) \text{ entspricht } x \to x' = x - r \Rightarrow w(x',x) \to w(x;-r) = w(x-r;r)$$

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = \int_{-\infty}^{+\infty} dr \left[\underbrace{w(x-r;r)}_{\downarrow} P(x-r,t) - w(x;-r)P(x,t) \right] \stackrel{\therefore}{=}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx' \stackrel{r=x-x'}{\to} \int_{+\infty}^{-\infty} (-dr) = \int_{-\infty}^{+\infty} dr$$

strebt mit wachsendem
r schnell gegen Null

♦ Annahme: Taylor-Entwicklung nach kleinen Sprungweiten sei möglich

$$\stackrel{\therefore}{=} P(x,t)\int_{-\infty}^{+\infty} dr\; w(x;r) - \int_{-\infty}^{+\infty} dr\; r\,\frac{\partial}{\partial x}\left[w(x;r)\,P(x,t)\right] + \frac{1}{2}\int_{-\infty}^{+\infty} dr\; r^2\,\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left[w(x;r)\,P(x,t)\right] + \ldots -$$

$$- P(x,t)\int_{-\infty}^{+\infty} dr\; \underbrace{w(x;-r)}_{r\to -r}$$

Nach Definition der Momente der Übergangswahrscheinlichkeitsdichte

$$a_\nu(x) := \int_{-\infty}^{+\infty} dr\; r^\nu\; w(x;r) \qquad \text{Sprungmomente}$$

folgt

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = \begin{cases} -\dfrac{\partial}{\partial x}\left[a_1(x)\,P(x,t)\right] + \dfrac{\partial^2}{\partial x^2}\left[a_2(x)\,P(x,t)\right] \\ \qquad\qquad \text{oder} \\ \displaystyle\sum_{\nu=1}^{\infty} \frac{(-1)^\nu}{\nu!}\left(\frac{\partial}{\partial x}\right)^\nu \left[a_\nu(x)\,P(x,t)\right] \end{cases} \quad , \qquad \underline{\text{Kramers-Moyal-Entwicklung}}$$

d.h., die Reihe bricht entweder nach dem zweiten Term ab (Diffusionsprozesse) oder alle Terme der Reihe müssen berücksichtigt werden (Satz von Pawula).

Beispielsweise ist bei Abbruch nach dem dritten Term die Lösung P(x,t) nicht positiv definit, also keine Wahrscheinlichkeitsdichte.