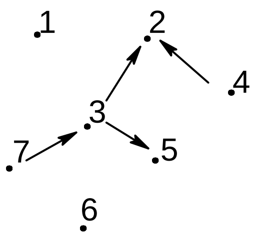
9. Grundlagen der Theorie stochastischer Prozesse
Chapman-Kolmogorov'sche Gleichung und Master-Gleichung

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 $t \to \infty$ 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).

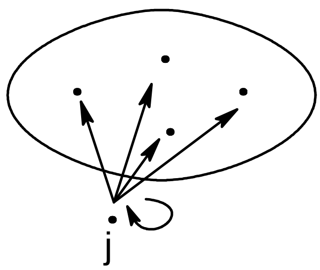
Wir betrachten zwei unterschiedliche Wahrscheinlichkeiten:

$P_i(t)$: 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 $t_0 \le t$ im Zustand Z_j befand, Übergangswahrscheinlichkeit, (eine bedingte Wahrscheinlichkeit).

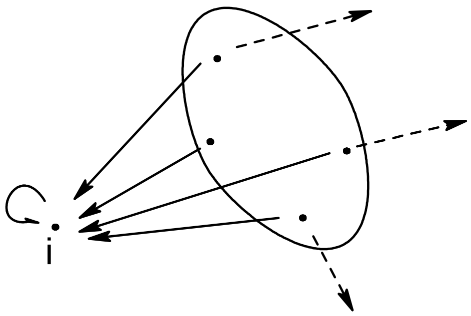
Es gelten offenbar die Regeln:

1) $\sum\limits_i W_{ij}(t, t_0) = 1$, $W_{jj}(t, t_0) + \sum\limits_{i \neq j} W_{ij}(t, t_0) = 1$, 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) $P_i(t) = \sum_j W_{ij}(t,t_0) P_j(t_0)$; $P_i(t) = W_{ii}(t,t_0) P_i(t_0) + \sum_{j \neq i} W_{ij}(t,t_0) P_j(t_0)$, 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)

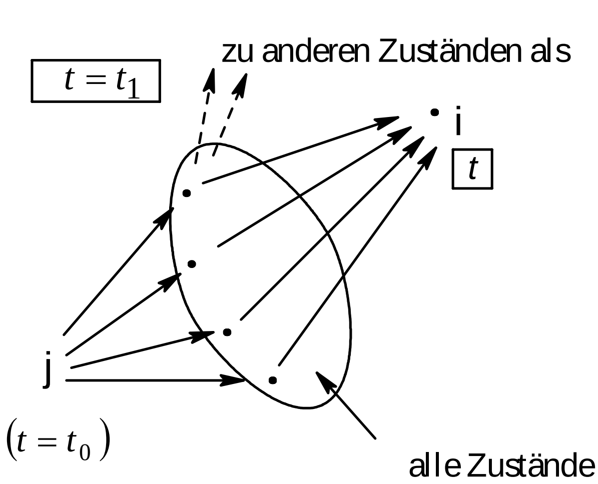
Die Größen W_{ij} können als Elemente einer Matrix (quadratische Matrix) aufgefasst werden.

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: $W_{ii} = 1 - \sum_{k \neq i} W_{ki}$

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

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

$\Delta t \to 0$:

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

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