

Wk:

• eindimensionale Zufalls "proben", kontinuierlich

→ Wahrsch. dichte  $f(x)$

$$\langle x \rangle = \int dx f(x) x$$

$$M_2 := \int dx f(x) x^2$$

Erzeugende  $Z(k) = \langle e^{kx} \rangle$  —  $\frac{\partial^2 Z(k)}{\partial k^2} \Big|_{k=0} = M_2$   
der kumulierten  $T(k) = \ln Z(k)$

• mehrdimensional:  $Z(\underline{\alpha}) = \langle e^{\underline{\alpha} \cdot \underline{x}} \rangle$

Speziell für zwei <sup>un</sup> korrelierte Zufallsvariablen  $x_1, x_2$   
gilt

$$Z(\underline{\alpha}) = \langle e^{\alpha_1 x_1 + \alpha_2 x_2} \rangle$$

Faktorisierung!

$$= \int dx_1 \int dx_2 f_1(x_1) f_2(x_2) e^{\alpha_1 x_1} e^{\alpha_2 x_2}$$

$$= \langle e^{\alpha_1 x_1} \rangle \langle e^{\alpha_2 x_2} \rangle$$

$$\ln Z(\underline{\alpha}) = T(\underline{\alpha}) = \ln \langle e^{\alpha_1 x_1} \rangle + \ln \langle e^{\alpha_2 x_2} \rangle$$

# Kovarianzmatrix

$x_1, x_2$ : Elemente  
von  $\underline{x}$

$$(\underline{G})_{kl} = \langle (x_k - \langle x_k \rangle)(x_l - \langle x_l \rangle) \rangle$$

umschreiben

$$x_k - \langle x_k \rangle$$

$$(\underline{G})_{kl} = \langle \widetilde{\Delta x_k} \Delta x_l \rangle$$

$$= \langle x_k x_l \rangle - \langle x_k \langle x_l \rangle \rangle$$

$$- \langle \langle x_k \rangle x_l \rangle + \langle x_k \rangle \langle x_l \rangle$$

$$= \langle x_k x_l \rangle - \langle x_k \rangle \langle x_l \rangle - \langle x_k \rangle \langle x_l \rangle + \langle x_k \rangle \langle x_l \rangle$$

$$= \langle x_k x_l \rangle - \langle x_k \rangle \langle x_l \rangle$$

z.B. mehrdimensionale Gaußverteilung

$$g(\underline{x}) = (2\pi)^{-d/2} (\underline{\text{Det}} \underline{A})^{-\frac{1}{2}}$$

$$e^{-\frac{1}{2} (\underline{x} - \underline{a})^T \underline{A}^{-1} (\underline{x} - \underline{a})}$$

Hier folgt:

$$(G)_{\mathbb{R}} = (\underline{A})_{\mathbb{R}}$$

allgemein:  $(G)_{\mathbb{R}} = 0$  für  $\mathbb{R} \neq \mathbb{C}$

Die Zufallsvariablen sind unkorreliert!

## Zentraler Grenzwertsatz

Gegeben sei eine Summe unabhängiger  
Zufallsgrößen

$$X = X_1 + X_2 + \dots + X_d$$

unkorreliert (d.h. z.B.  $\langle X_1, X_2 \rangle = \langle X_1 \rangle \langle X_2 \rangle$   
etc.)

Für sehr große  $d$  fast unabhängig von der  
speziellen Form der Einzelverteilung.

$$P(X) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \Delta x} e^{-\frac{1}{2\langle \Delta x^2 \rangle} (x - \langle x \rangle)^2}$$

Gaußverteilung!

## 1.2. Markov-Prozess

Generell: Ein stochastischer Prozess  
beschreibt die Zeitentwicklung  
einer Zufallsvariable  $X$

Betrachte im Folgenden  $d=1$  und  
diskretisierte Zeiten

ES sei:  $x_1$ : Wert von  $X$  zur Zeit  $t_1$   
 $x_2$ : " " " " " "  
 $\vdots$   
 $x_n$ : " " " " " "

und  $t_1 < t_2 < t_3 < \dots < t_n$

Zeitabhängige Verbundwahrscheinlichkeit

$$p(x_1, t_1; x_2, t_2; x_3, t_3; \dots, x_n, t_n)$$

Wahrsch., dass zur Zeit  $t_1$  der Wert  $x_1$ ,  
zur Zeit  $t_2$  der Wert  $x_2$ ,  $\dots$ ,  $\dots$  vorliegt

Betrachte nun bedingte Wahrscheinlichkeit

$$P(\underbrace{X_{n+1}, \epsilon_{n+1}, \dots; X_{n+m}, \epsilon_{n+m}}_{\text{"Zukunft"}} \mid \underbrace{X_1, \epsilon_1, \dots; X_n, \epsilon_n}_{\text{"Vergangenheit"}}, \underbrace{\epsilon_n}_{\text{"Gegenwart"}})$$

Wahrsch. für das Auftreten von

$X_{n+1}$  bei  $\epsilon_{n+1}, \dots, X_{n+m}$  bei  $\epsilon_{n+m}$

unter der Bedingung, dass

bei  $\epsilon_1$   $X_1, \dots$ , bei  $\epsilon_n$   $X_n$  vorlag

Erinnerung:

$P(A|B)$ : Wahrsch. für das Auftreten von  $A$  unter der Bedingung, dass  $B$  vorliegt

$$\Rightarrow P(A|B) = \frac{P(A \cap B)}{P(B)} \quad \text{---} \text{ bedingte Wahrsch.}$$

Dann folgt:

$$P(X_{n+1}, \epsilon_{n+1}, \dots; X_{n+m}, \epsilon_{n+m} \mid X_1, \epsilon_1, \dots, X_n, \epsilon_n)$$

$$= \frac{p(x_{1,t_1}, \dots, x_{n,t_n})}{p(x_{1,t_1}, \dots, x_{n,t_n})}$$

Speziell:  $n=1$

$$p(x_{n+1}, t_{n+1} | x_{1,t_1}, \dots, x_{n,t_n})$$

Wahrsch. für das Auftreten von  $x_{n+1}$  in der Zeitstufe  $t_{n+1}$ , falls bei  $t_1, t_2, \dots, t_n$  vorher

Diese <sup>bedeutet</sup> Wahrsch. nennt man häufig auch

Übergangswahrscheinlichkeit

Klassifizierung stochastischer Prozesse

a) Reiner Zufallsprozess

$$p(x_{1,t_1}, \dots, x_{n,t_n}) = p(x_{1,t_1}) \dots p(x_{n,t_n})$$

Faktorisierung!

Folgerung:  $p(x_{n+1}, t_{n+1} | x_{1,t_1}, \dots, x_{n,t_n}) = p(x_{n+1}, t_{n+1})$

Es gibt also keine Konditionale  
zwischen Ereignissen zu  
verschiedenen Zeitpunkten

## b) Markov-Prozess

Übergangswahrsch.

$$P(X_{n+1}, t_{n+1} \mid X_1, t_1, \dots, X_n, t_n) \\ \stackrel{!}{=} \underbrace{P(X_{n+1}, t_{n+1} \mid X_n, t_n)}_{\text{"Zukunft"}} \underbrace{P(X_n, t_n)}_{\text{"Gegenwart"}}$$

Beim Markov-Prozess wird die  
Zukunft ( $t_{n+1}$ ) nicht durch  
die gesamte Vergangenheit, sondern  
nur durch die Gegenwart ( $t_n$ ) bestimmt!

man sagt:

Der Markov-Prozess ist ein stochastischer  
Prozess ohne Gedächtnis!

(umkehrig von da her zurück)

Heutig ist das eine gute  
Approximation, trotzdem sind  
Gedächtniseffekte wichtig!

Folgerung für die Verkettung

$$\frac{P(A|B)}{P(B)} = P(A|B)$$

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

allg.  $= p(x_n, t_n | x_1, t_1; \dots, x_{n-1}, t_{n-1}) \cdot p(x_1, t_1; \dots, x_{n-1}, t_{n-1})$

Markov  $= p(x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1}) p(x_1, t_1; \dots, x_{n-1}, t_{n-1})$

$$= p(x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1}) p(x_{n-1}, t_{n-1} | x_{n-2}, t_{n-2}) p(x_1, t_1; \dots, x_{n-2}, t_{n-2})$$

Prozedur wiederholen

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

Markov!



$$= p(x_n, t_n / x_{n-1}, t_{n-1})$$

$$\cdot p(x_{n-1}, t_{n-1} / x_{n-2}, t_{n-2})$$

$$\cdot \dots \cdot p(x_3, t_3)$$

„Markov-Kette“

Betrachte nun Markov mit 3 Zeiten

$$p(x_3, t_3; x_2, t_2; x_1, t_1)$$

$$\stackrel{\uparrow}{=} p(x_3, t_3 / x_2, t_2) p(x_2, t_2 / x_1, t_1)$$

Markov-Prop.

$$\cdot p(x_2, t_2)$$

Integriere (bzw. summiere für diskrete Zustände)  
über alle Zustände  $x_2$

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

~~...~~

$$\Rightarrow p(x_1, t_1; x_2, t_2)$$

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

( $\sum_{x_2}$ )

Auf der rechten Seite kann  
wie  $p(x_1, t_1)$  aus dem  
Integral herausziehen!

Direkt durch  $p(x_1, t_1)$

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

# „Chapman - Volmer - Jodsz!“

## Interpretation:

Die Übergangswahrsch. von Ausgangszustand  $x_1$  bei  $\epsilon_1$  zum Endzustand  $x_3$  bei  $\epsilon_3$  entspricht dem Produkt der Übergangswahrsch. vom Ausgangszustand

zu einem Zwischenzustand  $x_2$  bei  $\epsilon_2$

und der Übergangswahrsch. von

Zwischen - zum Endzustand

—  ~~$\epsilon_2$~~  integriert über Summe

über alle möglichen Zwischenzustände!

---

## Chapman - Volmer - Gl.

Ausgangspunkt für die Herleitung der Mastergleichung!

## 1.3. Stationäre stationäre

Prozesse, Autokorrekturfunktion

# Stationäri Prozess

⇒ Die Eigenschaften ändern sich nicht bei Verschiebung der Zeitachse (Zeittranslationsinvarianz)

$$p(x_1, t_1, \dots, x_n, t_n) = p(x_1, t_1 + \epsilon, \dots, x_n, t_n + \epsilon)$$

## Folgerung

• Die einzeitige Wahsch.  $p(x_1, t)$

ist zeitunabhängig, und ebenso alle Mom.

$$p(x_1, t) = p(x_1)$$

$$M_1(t) = M_1$$

• Die zweizeitige Verbundwahsch. hängt nur von der Differenz der Zeiten ab

$$p(x_1, t_1; x_2, t_2)$$

$$= p(x_1, 0; x_2, \underbrace{t_2 - t_1}_T)$$

↑  
stet. Prozess

↑  
Zeitnullpunkt, beliebig

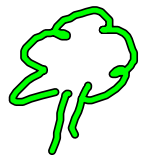
Folgerung für Übergangswahrscheinlichkeit

$$p(x_2, t_2 | x_1, t_1) = \frac{p(x_1, t_1; x_2, t_2)}{p(x_1, t_1)}$$

$$= \frac{p(x_1, 0; x_2, t_2 - t_1)}{p(x_1)}$$

Stationarität

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



Beim Markter-Prozess können alle Verbundprodukte  
als Produkte von Übergangsgüter und  
einzelige Güter gestrichen werden (Markter-Güter)  
⇒ Es treten also überall nur Zeitdifferenz auf!