1.3 Chapman-Kolmogorov-Gleichung

Aus der Chapman-Kolmogorov-Gl. (diskret in t)

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

$$t_1 \geq t_2 \geq t_3$$

läßt sich eine Diff.gl. für $p(x,t|x_0,t_0)$ ableiten:

Annahmen: für $\varepsilon > 0$

(i) $$\lim_{\Delta \to 0} \frac{p(x,t+\Delta t|z,t)}{\Delta t} = W(x|z,t)$$ gleichförmig in x,z,t für $|x-z| \geq \varepsilon$

<u>Übergangswahrscheinl. pro Zeiteinheit</u> $z \to x$

(ii) $$\lim_{\Delta t \to 0} \frac{1}{\Delta t} \int_{|x-z|<\varepsilon} dx\, (x_i - z_i)\, p(x,t+\Delta t|z,t) = A_i(z,t) + O(\varepsilon)$$ gleichförmig

(iii) $$\lim_{\Delta t \to 0} \frac{1}{\Delta t} \int_{|x-z|<\varepsilon} dx\, (x_i - z_i)(x_j - z_j)\, p(x,t+\Delta t|z,t) = B_{ij}(z,t) + O(\varepsilon)$$ gleichförmig

alle höheren Momente verschwinden $O(\varepsilon)$!

- Betrachte $\frac{\partial}{\partial t} \int dx\, f(x)\, p(x,t|y,t')$ für bel. Fkt. $f(x)$
  und leite daraus Dgl. für $\frac{\partial}{\partial t} p(x,t|y,t')$ ab:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int dx\, f(x)\, p(x,t|y,t')$$

$$= \lim_{\Delta t \to 0} \left\{ \int dx\, f(x) \frac{[p(x,t+\Delta t|y,t') - p(x,t|y,t')]}{\Delta t} \right\}$$

Chapman-K.

$$= \lim_{\Delta t \to 0} \left\{ \int dx\, f(x) \frac{\int dz\, p(x,t+\Delta t|z,t)\, p(z,t|y,t') - p(x,t|y,t')}{\Delta t} \right\}$$

Subst. $x \to z$

Für $|x-z|<\varepsilon$:
Entwicklung $f(x) = f(z) + \sum_i \frac{\partial f(z)}{\partial z_i}(x_i - z_i)$

$$+ \sum_{ij} \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f(z)}{\partial z_i \partial z_j}(x_i - z_i)(x_j - z_j)$$

$$+ \text{Rest} \quad (\to 0 \text{ für } |x-z| \to 0)$$

Aufspaltung in Integrale $\int_{|x-z|<\varepsilon}$ und $\int_{|x-z|>\varepsilon}$:

$$D \equiv \frac{\partial}{\partial t} \int dx\, f(x)\, p(x,t|y,t')$$

$$= \lim_{\Delta t \to 0} \frac{1}{\Delta t} \Big\{ \iint_{|x-z|<\varepsilon} dx\, dz \Big[\sum_i (x_i - z_i) \frac{\partial f}{\partial z_i} + \sum_{ij} \frac{1}{2}(x_i - z_i)(x_j - z_j) \frac{\partial^2 f}{\partial z_i \partial z_j} \, p(x,t+\Delta t|z,t)\, p(z,t|y,t') \Big]$$

$\boxed{A_i}$ (ii) (iii) $\boxed{B_{ij}}$ gibt Beitrag für $\varepsilon \to 0$ (1)

$$+ \iint_{|x-z|<\varepsilon} dx\, dz \ \text{Rest} \ (\to 0) + \iint_{|x-z|<\varepsilon} dx\, dz\, f(z)\, p(x,t+\Delta t|z,t)\, p(z,t|y,t') \ (\to 0)$$

$$+ \iint_{|x-z|\geq\varepsilon} dx\, dz\, f(x)\, p(x,t+\Delta t|z,t)\, p(z,t|y,t') \quad (2)$$

Substit. $x \leftrightarrow z$

$$- \iint dx\, dz\, f(z)\, p(x,t+\Delta t|z,t)\, p(z,t|y,t') \quad (3)$$

(i) einsetzen $\boxed{W}$

$\int dx\, p(x,t+\Delta t|\ldots) = 1$ eingefügt

(2) $\varepsilon \to 0$: $\lim_{\varepsilon \to 0} \int_{|x-z|>\varepsilon} dx$ = Hauptwertintegral (Annahme: existiert)

(1) partielle Integration

$$\int dz \left(\frac{\partial}{\partial z} f(z) \right) A_i(z)\, p(z,t|\ldots) = - \int dz\, f(z) \frac{\partial}{\partial z} [A_i(z)\, p(z,t|\ldots)]$$

+ Randterme $(\to 0)$

$$\int dz \left(\frac{\partial^2}{\partial z_i \partial z_j} f(z)\right) B_{ij}(z)\, p(z,t|\cdot\cdot) = +\int dz\, f(z) \frac{\partial^2}{\partial z_i \partial z_j}\left[B_{ij}(z)\, p(z,t|\cdots)\right]$$

$\Rightarrow \int dz\, f(z)\, [\,\cdots\,] = 0$ für bel. $f(z)$

$\Rightarrow \qquad [\,\cdots\,] = 0$

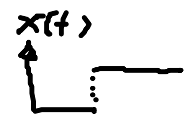
<u>Erg.</u>:

$$\boxed{\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t} p(z,t|y,t') = &-\sum_i \frac{\partial}{\partial z_i}\left[A_i(z,t)\, p(z,t|y,t')\right] \\ &+ \sum_{ij} \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial z_i \partial z_j}\left[B_{ij}(z,t)\, p(z,t|y,t')\right] \\ &+ \int dx \left[W(z|x,t)\, p(x,t|y,t') - W(x|z,t)\, p(z,t|y,t')\right]\end{aligned}}$$

(differentielle Chapman-Kolmogorow-Gl.)

Anfangsbed. $p(z,t'|y,t') = \delta(y-z)$

(a) <u>Sprung-Prozesse</u> (diskontinierlich)



$$\frac{\partial}{\partial t} p(z,t|\cdots) = \int dx \left[W(z|x,t)\, p(x,t|\cdots) - W(x|z,t)\, p(z,t|\cdots)\right]$$

$$z \;\underset{(W(x|z,t))}{\overset{W(z|x,t)}{\leftrightarrows}}\; \text{alle } x$$

$W(z|x,t)$ Einstreu-Übergangswahrsch./Zeit

$(W(x|z,t))$ Ausstreu-Übergangswahrsch./Zeit

<u>Mastergleichung</u> (Bilanz rein − raus)

(b) <u>Diffusions-Prozesse</u> (kontinuierlich)

$$\frac{\partial}{\partial t} p(z,t|\cdots) = \frac{1}{2}\sum_{ij} \frac{\partial^2}{\partial z_i \partial z_j}\left[B_{ij}(z,t)\, p(z,t|\cdots)\right]$$

Diffusionsmatrix B_{ij} ($B_{ij} = B_{ji}$ pos. semidefinit)

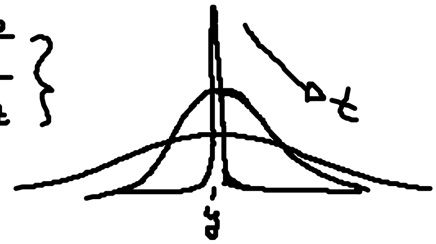
z.B. 1-dim, $\frac{1}{2}B_{ij} = D$ (Diff. konst.)

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t} p = D \frac{\partial^2}{\partial z^2} p}$$ (Diff. gl.)

$\frac{\partial}{\partial t} n + \operatorname{div} j = 0$, $j = -D\nabla n$

Lösung für Anfangsverteil. $p(z,t|y,t) = \delta(z-y)$ und kleine Δt:

$$p(z,t+\Delta t|y,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\sqrt{2D\Delta t}} \exp\left\{-\frac{(z-y)^2}{4D\Delta t}\right\}$$



Gaußverteilung mit Varianz $\sigma^2 = 2D\Delta t$ und Mittelwert y

(c) Drift (kontinuierlich)

$$\frac{\partial}{\partial t} p(z,t|\ldots) = -\sum_i \frac{\partial}{\partial z_i}\left[A_i(z,t)\, p(z,t|\ldots)\right]$$

Liouville-gl. der klass. Mechanik mit Drift-Vektor $A_i(z,t)$ (Kraft oder Feld)

$\hat{=}$ determinist. Bewegung eines Teilchens

$$\dot{x}(t) = A(x(t)) \qquad \text{mit } x(t_0) = y$$

$$\Rightarrow \quad p(z,t|y,t_0) = \delta(z - x(t))$$

Beweis (1-dim): $-\frac{\partial}{\partial z}\left[A(z)\,\delta(z-x(t))\right]$

$$= -\frac{\partial}{\partial z}\left[A(x(t))\,\delta(z-x(t))\right]$$

$$= -A(x(t))\frac{\partial}{\partial z}(z-x(t))$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\delta(z-x(t)) = -\frac{\partial}{\partial z}\delta(z-x(t))\underbrace{\frac{dx}{dt}}_{A} \qquad \text{L.S.} = \text{R.S.} \qquad \square$$

Kombination von (b) und (c):

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t} p(z,t|\ldots) = -\sum_i \frac{\partial}{\partial z_i}\left[A_i(z,t)\, p(z,t|\ldots)\right] + \frac{1}{2}\sum_{ij}\frac{\partial^2}{\partial z_i \partial z_j}\left[B_{ij}(z,t)\, p(z,t|\ldots)\right]}$$

Fokker-Planck-gl.

Lösung für kleine Δt und N-dim. Zufallsvar.: $B_{ij}(z) \approx B_{ij}(y)$
$A_i(z) \approx A_i(y)$

$$p(z, t+\Delta t \mid y, t) = (2\pi)^{-\frac{N}{2}} (\det B)^{\frac{1}{2}} \Delta t^{-\frac{1}{2}} \exp\left\{ -\frac{1}{2} \frac{[z-y-A\Delta t]^T B^{-1} [z-y-A\Delta t]}{\Delta t} \right\}$$

Gaußverteilung mit Kovarianzmatrix $\underline{\underline{B}}\,\Delta t$
und Mittelwert $\underline{y} + \underbrace{\underline{A}\,\Delta t}_{\text{Drift}}$