

1.3 Chapman-Kolmogorov-Gleichung

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

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

läßt sich eine Diff.gl. für $p(x, t | x_0, t_0)$ ableiten: $t_1 \geq t_2 \geq t_3$

Annahmen: für $\varepsilon > 0$

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

Übergangswahrscheinl. pro Zeiteinheit $z \rightarrow x$

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

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

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:

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

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

Chapman-K.

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

Für $|x-z| < \epsilon$:

Entwicklung $f(x) = f(z) + \sum_i \frac{\partial f(z)}{\partial z_i} (x_i - z_i)$

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

+ Rest ($\rightarrow 0$ für $|x-z| \rightarrow 0$)

Subst. $x \rightarrow z$

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

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

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

A_i (ii)

B_{ij} (iii)

Zeit Betrag $\rightarrow z \rightarrow 0$

(1)

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

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

Substit. $x \leftrightarrow z$

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

$\int dx p(x, t + \Delta t | \dots) = 1$ analog $\int dz$

(i) einsetzen
[W]

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

(1) partielle Integration

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

+ Randterme ($\rightarrow 0$)

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

$$\Rightarrow \int dz f(z) [\dots] = 0 \quad \text{für bel. } f(z)$$

$$\Rightarrow [\dots] = 0$$

Bsp.:

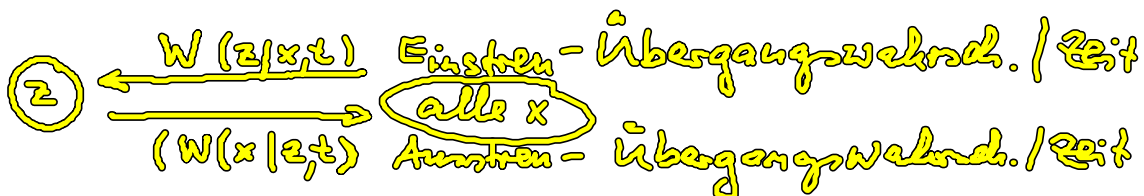
$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} p(z,t | y,t') &= - \sum_i \frac{\partial}{\partial z_i} [A_i(z,t) p(z,t | y,t')] \\ &\quad + \sum_{ij} \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial z_i \partial z_j} [B_{ij}(z,t) p(z,t | y,t')] \\ &\quad + \int dx [W(z|x,t) p(x,t | y,t') - W(x|z,t) p(z,t | y,t')]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

(differenzielle Chapman-Kolmogorov-Gl.)

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

(a) Sprung-Prozesse (diskontinuierlich) 

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



Mastergleichung (Bilanz rein - raus)

(b) Diffusions-Prozesse (kontinuierlich)

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

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

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

$$\frac{\partial}{\partial t} p = D \frac{\partial^2}{\partial z^2} p$$

(Diff. gl.)

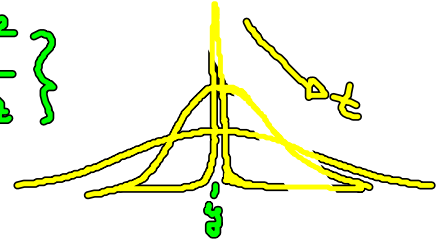
$$\frac{\partial p}{\partial x_j} + a_{ij} = 0$$

$$= -D \nabla_n$$

Lösung für Anfangswert $p(z, t | y, t_0) = \delta(z - y)$
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)

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

Liouville-Gl. der klass. Mechanik

mit Drift-Vektor $A_i(z, t)$ (Kraft oder Feld)

\triangleq determinist. Bewegung eines Teilchens

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

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

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

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

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

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

Kombination von (b) und (c):

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

Fokker-Planck-Gl.

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

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

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

