Stochastische Prozesse in der statistischen Physik

2 stg. Vorlesung - Ludger Santen und Heiko Rieger

Sommersemester 2003

Inhaltsverzeichnis

Literaturverzeichnis

[1] J. Honerkamp, "Stochastische dynamische Systeme", (VCH, 1990)

[2] G. Röpke, "Statistische Mechanik für das Nichtgleichgewicht", (Physik-Verlag, 1987)

[3] W. Feller, "An introduction to probability theory and its applications", Vol. 1,2, (Wiley, 1971)

[4] C.W. Gardiner, "Handbook of stochastic methods", (Springer, 1985)

[5] A. Papoulis, " Probability, random variables and stochastic processes", (Mc Graw-Hill, 1984)

[6] D.R. Cov and H.D. Miller, "The theory of stochastic processes", (Chapman and Hall, 1972)

[7] N. Wax ed., "Selected papers on noise and stochastic processes", (Dover Publ., 1954)

Intro

Im Rahmen der klassischen Physik haben wir es stets mit *deterministischen Bewegungsgleichungen* zu tun, da wir dort Aussagen über eine kleine Anzahl an Teilchen oder Untersystemen treffen. Ist deren Zahl hingegen sehr groß ($N \sim 10^{23}$), so bedient man sich *statistischer oder wahrscheinlichkeitstheoretischer Konzepte.*

Statistische Physik: Statistische Mechanik der $\boxed{\text{Gleichgewichtszustände}}$.

Mikrozustände vs. Makrozustand
Mikrozustände: beschrieben durch Ort und Impuls aller Teilchen
Makrozustände: beschrieben durch Wahrscheinlichkeitsverteilung, Temperatur, Volumen, Druck ....

[+ Quantenmechanik ⇒ Quantenstatistik, immer noch Gleichgewicht]

$\boxed{\text{Zeitabhängige Phänomene: }\textbf{Nicht}\text{-Gleichgewicht}}$

z.B. bei Energie-Zufuhr:

- Atmosphäre - Ozon
- Leben
- Strömung
- Verformung / Bruch

Wiederum: große Anzahl von Freiheitsgraden ⇒ statistische Konzepte

relevante Freiheitsgrade + Hintergrundrauschen ⇒ $\boxed{\text{stochastische Prozesse}}$

Kapitel 1

Zufallsvariablen

Wahrscheinlichkeitstheorie $\rightarrow$ Maßtheorie $\rightarrow$ Mathematik
Intuitive Vorstellung $\rightarrow$ klassisch (Laplace)

Axiomatische Methode: (Kolmogorov 1933)

Betrachte Menge S ("experimentelle Resultate")

$$\begin{aligned} A \subset S \quad &\Leftrightarrow \quad A \text{ "Ereignis"} \\ \omega \in S \quad &\Leftrightarrow \quad \{\omega\} \text{ "Elementar-Ereignis"} \end{aligned}$$

Ereignis $A(\subset S)$ ist eingetroffen $\Leftrightarrow$ wir beobachten bei einmaliger Ausführung des Experiments ein Element $\omega \in A$

Jedem Ereignis $A(\subset S)$ wird nun eine Wahrscheinlichkeit $P(A) \in \mathbb{R}$ zugeordnet. Drei Axiome

$$\begin{array}{rl} I) & P(A) \geq 0 \\ II) & P(S) = 1 \\ III) & A_i, i = 1, 2, \ldots \text{ disjunkte Teilmengen von } S (A_i \cap A_j = \emptyset \, \text{für } i \neq j) \\ & \Rightarrow P\left(\bigcup_i A_i\right) = \sum_i P(A_i) \end{array}$$

[σ-Körper (σ-Algebra, Borel-Körper) der Ereignisse: System F von Mengen mit

$$\begin{aligned} A, B \in F \quad \Rightarrow \quad & A \cap B \in F \\ & A \cup B \in F \\ & \overline{A} \in F \end{aligned}$$

Vereinigung von abzählbar vielen Mengen aus F.]

Wahrscheinlichkeitsraum:
i) Menge S aller interessierenden **experimentellen Resultate**
ii) σ-Körper der **Ereignisse**, ein System von Untermengen von S
iii) die den Ereignissen zugeordneten **Wahrscheinlichkeiten**

Beispiel: S sei eine endliche oder abzählbar unendliche Menge wie $\{1, 2, \ldots, \}$
Betrachte z.B. σ-Körper, der aus allen $\{\omega_i\}$ erzeugt wird;

$$P(\{\omega_i\}) = P_i$$

definiert dann die Wahrscheinlichkeit.

z.B. Würfel, $\omega_i = i$ Augenzahl $(i = 1, 2, \ldots, 6)$ $P(\{\omega_i\}) = \frac{1}{6}$
Die Wahrscheinlichkeit für das Ereignis $\{1, 5\}$ ist $P(\{1\}) + P(\{5\}) = \frac{1}{3}$.

Beispiel: S sei die Menge der Punkte der reellen Achse. Ereignisse: alle Intervalle $[x_1, x_2]$ und abzählbare Vereinigungen, Schnitte. $p(x)$ sei Funktion mit $\int\limits_{-\infty}^{+\infty} dx\, p(x) = 1$, $p(x) \geq 0$

$$P(\{x \leq \lambda\}) = \int\limits_{-\infty}^{+\lambda} dx\, p(x)$$

$\Rightarrow P([x_1, x_2]) = \int\limits_{x_1}^{x_2} dx\, p(x)$, $P(\{x\}) = 0$ wenn $p(x)$ beschränkt
Für dx hinreichend klein: $p(x)dx$ ist die Wahrscheinlichkeit für $[x, x + dx]$

Def. Zufallsvariablen:

$$X : S \to \mathbb{R},\ \omega \mapsto x_\omega \tag{1.1}$$

"Zufallsvariable"(Zuordnung von reellen Zahlen zu Ereignissen) mit $\forall\lambda$: $A_\lambda := \{\omega | X(\omega) \leq \lambda\}$ ist ein Ereignis.

$$P(\{\omega | X(\omega) = \infty\}) = 0 = P(\{\omega | X(\omega) = -\infty\}) \tag{1.2}$$

Im obigen Beispiel sind die Ereignisse schon reelle Zahlen, also $\omega = x$ und X die Identität: $X(x) = x$, $A_\lambda = \{x | x \leq \lambda\}$ ist ein Ereignis mit Wahrscheinlichkeit $P(\{x \leq \lambda\})$.

Verteilungsfunktion der Zufallsvariablen X: $P_X(\lambda) = P(A_\lambda)$ = Wahrscheinlichkeit, dass bei Realisierung eines Elementes $\omega \in S$ gilt $X(\omega) \leq \lambda$.

In obigem Beispiel: $P_X(\lambda) = P(\{x \leq \lambda\})$

Für die Praxis:
Zufallsvariable oder stochastische Variable charakerisiert durch
a) Menge aller möglichen Werte
b) Wahrscheinlichkeitsverteilung $P_X(\lambda)$

Ist die Menge in a) das reelle Intervall $[a, b]$, so ist

$$P_X(\lambda) = \int_a^\lambda dx\, p(x)$$

mit $p(x) \geq 0$, $\int_a^b dx\, p(x) = 1$

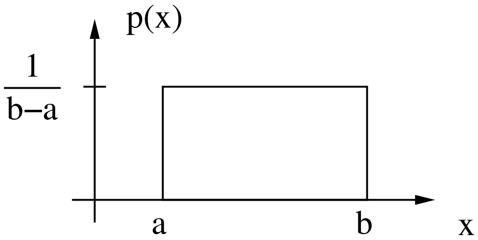
$p(x)$ ist die Wahrscheinlichkeits**dichte**.

Ist die Menge in b) diskret: $P_i = P(x_i)$ Wahrscheinlichkeit für Wert x_i.

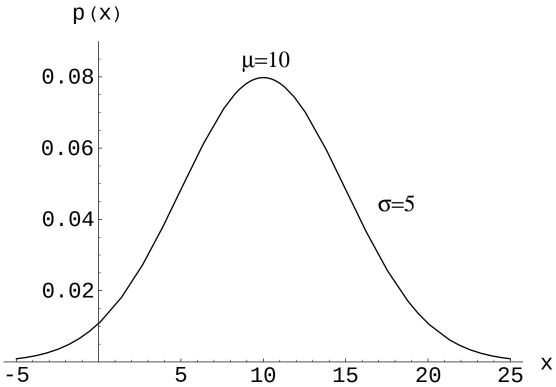
$$P(x) = \sum_i P_i\, \delta(x - x_i)\,, \; \sum_i P_i = 1$$

Wichtige Wahrscheinlichkeitsdichten und -verteilungen

a) Konstante Dichtefunktion (**Gleichverteilung**, uniforme Verteilung) im Intervall $I = [a, b]$



b) **Gauß- oder Normalverteilung**



$$p(\mu, \sigma^2; x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}\, e^{-(x-\mu)^2/2\sigma^2} \tag{1.3}$$

$I = [-\infty, +\infty]$

Fourier-Transformation:

$$G(k) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, e^{ikx}\, p(\mu, \sigma^2; x) = e^{-\frac{1}{2}\sigma^2 k^2 + i\mu k} \tag{1.4}$$

c) n-dimensionaler Zufallsvektor $X = (x_1, \ldots, x_n) \in [a_1, b_1] \times \ldots \times [a_n, b_n] \leadsto$ mehrdimensionale ("multivariate") Dichtefunktion,
$p_n(x_1, \ldots, x_n)\, dx_1 \cdot \ldots \cdot dx_n =$ Wahrscheinlichkeit für $x_i \in [x_i, s_i + dx_i]$

Marginale Verteilung für $x_1, \ldots, x_s\,, s < n$:

$$P_s(x_1, \ldots x_s) = \int P_n(x_1, \ldots, x_n)\, dx_{s+1}, \ldots dx_n \tag{1.5}$$

Bedingte Wahrscheinlichkeit von $x_1, \ldots, x_s$ für $x_{s+1}, \ldots, x_n$ fest (Bayes' Regel):

$$P_{s|n-s}(x_1, \ldots, x_s | x_{s+1}, \ldots, x_n) = \frac{P_n(x_1, \ldots, x_n)}{P_{n-s}(x_{s+1}, \ldots, x_n)} \tag{1.6}$$

$(x_1, \ldots, x_s)$ und $(x_{s+1}, \ldots, x_n)$ sind **statistisch unabhängig**.

$$\Longleftrightarrow P_n(x_1, \ldots, x_n) = P_s(x_1, \ldots, x_s) \cdot P_{n-s}(x_{s+1}, \ldots, x_n) \tag{1.7}$$

d) Multivariate Normalverteilung

$$P(\underline{\mu}, \underline{\underline{A}}; \underline{x}) = \frac{2\pi^{-n/2}}{[det\underline{\underline{A}}]^{1/2}} \exp\{-\frac{1}{2}(\underline{x} - \underline{\mu})^T \underline{\underline{A}}^{-1} (\underline{x} - \underline{\mu})\} \tag{1.8}$$

$$G(\underline{k}) = \exp(i\underline{\mu}^T \underline{k} - \frac{1}{2}\, \underline{k}^T \underline{\underline{A}}\, \underline{k}) \tag{1.9}$$

Beispiele für diskrete Verteilungen:

Binomialverteilung:

$$B(n, p; k) = \binom{n}{k} p^k (1-p)^{n-k} \;\; (k = 0, 1, \ldots, n) \tag{1.10}$$

(z.B. n-maliges Münzenwerfen, $p = \frac{1}{2}$, $B =$ Wahrscheinlichkeit für k mal Kopf)

Poisson-Verteilung:

$$p(\lambda; k) = \frac{\lambda^k}{k!}\, e^{-\lambda} \;\; (k = 0, 1, 2, \ldots) \tag{1.11}$$

Näherung für Binomialverteilung für p sehr klein, $\lambda = pn$ fest.

Mittelwerte

a) **n-tes Moment**

$$\mu_n = \langle X^n \rangle = \int_I dx\, x^n\, p(x) \tag{1.12}$$

oder Erwartungswert $E(X^n)$

1.-tes Moment = **Mittelwert**: $\langle X \rangle = E(x) = \int_I dx\, x\, p(x)$

(z.B. für Gleichverteilung $\langle X \rangle = \int_0^1 dx\, x\, p(x) = \frac{1}{2}$)

b) **Varianz** oder mittlere quadratische Abweichung (vom Mittelwert)

$$\sigma^2 = \mathrm{Var}\,(X) = \langle (X - \mu_1)^2 \rangle = \langle X^2 \rangle - \mu_1^2 = \mu_2 - \mu_1^2 \tag{1.13}$$

Oft:

$$\mathrm{Var}(X) = \langle\langle X^2 \rangle\rangle\,;\; \sigma = \sqrt{\mathrm{Var}(X)}, \tag{1.14}$$

wobei σ **Standardabweichung**

c) **Schiefe**

$$s = \langle \left(\frac{X - \mu_1}{\sigma} \right)^3 \rangle \tag{1.15}$$

$\rightsquigarrow$ Asymmetrie

d) **Mittlere Abweichung**

$$d = \langle |X - \mu| \rangle = \int_I dx\, |X - \mu|\, p(x) \tag{1.16}$$

e) **Wahrscheinlichster Wert**
$\mu_{\max}$ ist der Wert x, für den $p(x)$ maximal ist.

f) **Median**
$\mu_{\frac{1}{2}}$ ist der Wert x für den

$$\int_a^x dx\, p(x) = \int_x^b dx\;\, p(x) = \frac{1}{2} \tag{1.17}$$

α-Quantil x_α : $\int_a^{x_\alpha} dx\, p(x) = \alpha$

g) **Charakteristische Funktion** $G(k)$

$$G(k) = \langle e^{ikx} \rangle = \int_I dx\, e^{ikx}\, p(x) \tag{1.18}$$

= Fourier-Transformation von $p(x)$.
Falls alle Momente existieren:

$$G(k) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{i^n}{n!} k^n \langle X^n \rangle \tag{1.19}$$

Kennt man $G(k)$ ergeben sich die Momente durch Ableiten

$$\frac{d^n G(k)}{dk} = \frac{1}{i^n} \langle X^n \rangle \tag{1.20}$$

($\rightsquigarrow$ daher auch Momenten-generierende Funktion genannt)

Entwicklung von $\ln G(k)$ nach k

$$\ln[G(k)] = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(ik)^n}{n!} K_n \tag{1.21}$$

ergibt die **Kumulanten**:

$$\begin{aligned}
K_1 &= \mu_1 \\
K_2 &= \mu_2 - \mu_1^2 = \sigma^2 \\
K_3 &= \mu_3 - 3\mu_2\mu_1 + 2\mu_1^3 \\
K_4 &= \mu_4 - 4\mu_3\mu_1 - 3\mu_2^2 + 12\mu_2\mu_1^2 - 6\mu_1^4
\end{aligned}$$

(Gaußverteilung: $\ln G(k) = -\frac{1}{2}\sigma^2 k^2 + i\mu k$! Alle Kumulanten bis auf 1. und 2. verschwinden)

h) **Erzeugende Funktion**
Falls X nur ganzzahlige Werte annimmt, definiere statt der charakteristischen Funktion $G(k) = \langle e^{ikX} \rangle$

$$F(z) = \sum_{n=0}^{\infty} P_k z^k = \langle z^k \rangle \text{ für alle komplexen } z \text{ mit } |z| \leq 1 \tag{1.22}$$

z.B. für Binomialverteilung

$$F(z) = \sum_{k=0}^{n} \binom{n}{k} (zp)^k (1-p)^{n-k} = (1 - p + zp)^n \tag{1.23}$$

Die Momente ergeben sich wieder durch Ableiten

$$\mu_1 = \frac{d}{dz} F(z)|_{z=0} \tag{1.24}$$

Addition von stochastischen Variablen

Seien X_1, X_2 zwei unabhängige stochastische Variablen mit Wahrscheinlichkeitsdichten $p_{X_1}(x_1), p_{X_2}(x_2)$.

Verteilung der Summe $Y = X_1 + X_2$

$$p_Y(y)dy = \int_I dx_1 p_{X_1}(x_1)\, p_{X_2}(y - x_1)dy \tag{1.25}$$

$p_Y(y)$ ist Faltung.
$\Rightarrow$ charakteristische Funktion

$$G_Y(k) = G_{X_1}(k) \cdot G_{X_2}(k) \tag{1.26}$$

wobei $G_Y(k) = \exp(ikK_1^Y - \frac{1}{2}k^2 K_2^Y + \ldots)$ und
$G_{X_1}(k) \cdot G_{X_2}(k) = \exp(ik(K_1^{X_1} + K_2^{X_2}) - \frac{1}{2}k^2(K_2^{X_1} + K_2^{X_2}) + \ldots)$

$$\Rightarrow \langle Y \rangle = \langle X_1 \rangle + \langle X_2 \rangle \tag{1.27}$$

$$\mathrm{Var}\,(Y) = \mathrm{Var}\,(X_1) + \mathrm{Var}\,(X_2) \tag{1.28}$$

Analog für N Zufallsvariablen und alle Kumulanten für $Y = X_1 + \ldots + X_N$

$$K_n(Y) = \sum_{i=1}^{N} K_n(X_i) \; n = 1, 2, \ldots \tag{1.29}$$

Es folgt der außerordentlich wichtige **zentrale Grenzwertsatz**

Seien $X_i, i = 1, \ldots, N$ unabhängige, identisch verteilte Zufallsvariablen mit

$$\begin{aligned} K_1(X_i) &= \; < X_i > \; = \; 0 \\ K_2(X_i) &= \; \mathrm{Var}\,(X_i) \; = \; \sigma^2 \;\; \text{für}\, i = 1, \ldots, N \end{aligned}$$

Für

$$\boxed{Z = \frac{1}{\sqrt{N}}(X_1 + \ldots + X_N)} \tag{1.30}$$

ergibt sich

$$\begin{aligned} K_1(Z) &= 0 \\ K_2(Z) &= \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} K_2(X_i) = \sigma^2 \\ K_n(Z) &= \mathcal{O}(N^{1-\frac{n}{2}}) \\ \Rightarrow \lim_{N\to\infty} K_n(Z) &= 0 \quad \text{für}\, n \geq 3 \end{aligned}$$

Weiter gilt: $G_X(k) = \int dx\, e^{ikx} p_X(x) = 1 - \frac{1}{2}\sigma^2 k^2 + \mathcal{O}(k^3)$. Damit folgt aus $Z = \frac{1}{\sqrt{N}}(X_1 + ... + x_N)$ und (1.26), dass:

$$\begin{aligned} G_Z(k) &= \{G_X(\frac{k}{\sqrt{N}})\}^N \\ &= \{1 - \frac{1}{2}\frac{\sigma^2 k^2}{N} + \mathcal{O}(\frac{k^3}{N^{3/2}})\}^N \\ &\to \exp(-\frac{\sigma^2 k^2}{2}) \end{aligned}$$

Also gilt:

$$\boxed{P_Z(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp(-\frac{z^2}{2\sigma^2})}$$

Beispiel:
Zufallszahlengenerator im Computer, $X \in [0,1]$ gleichverteilt:

$$\rightsquigarrow \langle x \rangle = \frac{1}{2}\,,\ \mathrm{Var}\,(X) = \int_0^1 x^2\, dx - \langle x \rangle^2 = \frac{1}{12} \tag{1.31}$$

Dann ist $x' = (x - \frac{1}{2})\sqrt{12}\sigma$ eine Zufallsvariable mit Mittelwert 0 und Varianz σ^2, die gleichverteilt ist in $[-\frac{1}{2}\sqrt{12}\sigma, +\frac{1}{2}\sqrt{12}\,\sigma]$

Produziere N solcher Zahlen und bilde

$$Z = \frac{1}{\sqrt{N}}(X_1' + \ldots + X_N') \tag{1.32}$$

$\Rightarrow$ Z näherungsweise Gaußsche Zufallsvariable mit Varianz σ^2 und Mittelwert 0 (z.B. $N = 12$)

Betrachte N Kopien einer Zufallsvariablen X; bilde

$$Z = \frac{1}{N}(X_1 + \ldots + X_N) \tag{1.33}$$

(Mittelwerte von N Realisierungen von X)

$$\Rightarrow\ K_n(Z) = N^{-n} \sum_{i=1}^{N} K_n(X_i) = N^{-n+1} K_n(x) \tag{1.34}$$

d.h.

$$\begin{aligned} K_1(Z) &= \langle Z \rangle = \langle X \rangle \\ K_2(Z) &= \mathrm{Var}\,(Z) = \frac{1}{N}\mathrm{Var}\,(X) \qquad (1.35) \\ K_n(Z) &= \mathcal{O}(N^{-2}) \ \text{ für } n > 2 \qquad (1.36) \end{aligned}$$

Erzeugung von Zufallszahlen (auf dem Computer)

Pseudo-Zufallszahlen (Knuth, Presso et al.)

Lineare Kongruenzmethode: $r_{n+1} = (ar_n + b) \bmod m$ (geschickt gewählte Parameter), Startwert r_0 ("seed")
$\rightarrow$ Folge von ganzen Zahlen aus $[0, m] \rightsquigarrow$ Division durch m
Wiederholung nach m Zahlen

RAN2: $(m, a, b) = (714025, 1366, 150889)$ und Tabelle mit 97 Zahlen, daraus "zufällig" eine Zahl.

Andere Verteilungen:
Koordinatentransformation: $x \rightarrow y(x)$, $p(x)$ vorgegeben

$$\Rightarrow \tilde{p}(y) = p(x(y)) \left| \frac{dx}{dy} \right| \tag{1.37}$$

transformierte Dichte

Sei

$$p(x) = \begin{cases} 1 & x \in [0,1] \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \tag{1.38}$$

$$\Rightarrow \frac{dx}{dy} = \tilde{p}(y) \;\Rightarrow\; x(y) = \tilde{P}(y) = \int\limits_{y_0}^{y} dy' \, \tilde{p}(y') \tag{1.39}$$

KO-Transformation $y(x)$ erzeugt dann aus gleichverteiltem x Zufallszahlen y mit Verteilung $\tilde{p}(y)$

$$Y = Y(X) = \tilde{P}^{-1}(Y) \tag{1.40}$$

Beispiel:

a)

$$\tilde{p}(y) = we^{-wy} \,\text{mit}\, y \in [0, \infty] \tag{1.41}$$

$$\Rightarrow \frac{dx}{dy} = we^{-wy} \;\Rightarrow\; x(y) = \int\limits_{0}^{y} dy' \, we^{-wy'} = 1 - e^{-wy} \tag{1.42}$$

$$\Rightarrow y = -\frac{1}{w} \ln(1 - x) \tag{1.43}$$

d.h. produziert man in $[0,1]$ gleichverteilte Zufallszahlen x und bildet y gemäß (1.43) oder einfach

$$y = \frac{1}{w} \ln x \tag{1.44}$$

so ist y eine Realisierung einer exponentiell verteilten Zufallsvariablen Y.

b)

$$y = \tan(\pi x) \Rightarrow \tilde{p}(y) = \frac{1}{\pi} \frac{1}{1+y^2} \quad \text{Lorentz-Verteilung} \tag{1.45}$$

wobei x gleichverteilt in $[0,1]$

c) Analog in höheren Dimensionen

$$p(\vec{y}) = \left| \frac{\partial(x_1, \ldots, x_n)}{\partial(y_1, \ldots, y_n)} \right| p(\vec{x}) \tag{1.46}$$

z.B. $n = 2$

$$\begin{aligned} y_1 &= \sqrt{-2 \ln x_1} \cos(2\pi x_2) \\ y_2 &= \sqrt{-2 \ln x_1} \sin(2\pi x_2) \end{aligned} \quad \text{oder} \quad \begin{aligned} x_1 &= e^{-\frac{1}{2}(y_1^2 + y_2^2)} \\ x_2 &= \frac{1}{2\pi} \arctan \frac{y_2}{y_1} \end{aligned}$$

dann

$$\left| \frac{\partial(x_1, x_2)}{\partial(y_1, y_2)} \right| = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{y_1^2}{2}} \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{y_2^2}{2}} \tag{1.47}$$

d.h. y_1 und y_2 sind beide (unabhängig) Gauß-verteilt.

Übungsaufgaben

1.)a) Werfe n mal eine Münze. Zeige, dass die Wahrscheinlichkeiten dafür, dass exakt k-mal "Kopf" $P_k = 2^{-n}\binom{n}{k}$ ist, wenn "Kopf" 1 EUR gewinnt und "Zahl" 1 EUR verliert. Was ist die Wahrscheinlichkeitsverteilung für den totalen Gewinn?
b) Was ist die Wahrscheinlichkeit für 6 Richtige im Lotto (6 aus 49)?

2.)a) Berechne die Momente der Gleichverteilung

$$P(x) = \begin{cases} \frac{1}{2a} & \text{für } |x| < a \\ 0 & \text{für } |x| > a \end{cases}$$

b) Berechne die Momente der Gauß-Verteilung $P(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-x^2/2}$
c) Betrachte die Cauchy-Verteilung $P(x) = \frac{1}{\pi} \frac{\gamma}{(x-a)^2 + \gamma^2}$, $x \in [-\infty, +\infty]$?? Ist sie normiert? Was ist mit den Momenten?

3.)a) Berechne die charakteristische Funktion der Gleichverteilung und leite daraus die Momente ab.
b) Was ist die allgemeinste Verteilung mit der Eigenschaft, dass alle Kumulanten von höherer als 2. Ordnung verschwinden?
c) Finde die Kumulanten der Poisson-Verteilung $P_n = \frac{a^n}{n!}\, e^{-a}$

4.) a) Beweise und interpretiere die Normierung der bed. Wahrscheinlichkeit $P_{s|||n-s}(x_1, \ldots, x_s|x_{s+1}, \ldots, x_n)$. Welche Form hat letztere im Falle unabhängiger Variablen?
b) Berechne die Momente $< x^n y^m >$ und Kumulanten $<< x^n y^m >>$ (aus $G(k_1, k_2) = \sum\limits_{n,m} \frac{(ik_2)^n}{n!} \frac{(ik_y)^m}{m!} < x^n y^m >$ und $\ln G(k_1, k_2)$) der bivariaten Gaußverteilung $P(x, y) = \text{const. } e^{-\frac{1}{2}(ax^2+2bxy+cy^2)}$

Zufallsereignisse

Beispiele:

- Knacken im Geiger-Zähler
- Ankunft von Elektronen an der Anode einer Vakuum-Röhre
- Ankunft von Kunden am Schalter

Auch:

- Eigenwerte einer hermetischen Zufallsmatrix auf der reellen Achse
- Energien von kosmischen Strahlen

Def. Zufällige Menge von Punkten, Ereignissen oder Punkt-Prozessen

a) Zustandsraum:
i) $s \in \{0, 1, 2, \ldots\}$
ii) $\forall s : -\infty < \tau_1 < \tau_2 < \ldots < \tau_s < +\infty\,,\ \tau \in \mathbb{R}$
($\Leftrightarrow$ großkanonisches Ensemble)

b) Wahrscheinlichkeitsverteilung dieser Zustände: $Q_s(\tau_1, \tau_2, \ldots, \tau_s)$, mit

$$Q_0 + \int\limits_{-\infty}^{+\infty} d\tau\, Q_1(\tau) + \int\limits_{-\infty}^{+\infty} d\tau_1 \int\limits_{\tau}^{\infty} d\tau_2\, Q_2(\tau_1, \tau_2) + \ldots = 1 \qquad (1.48)$$

Bequemer: Beschränkung a) ii) aufheben, d.h. $\forall \tau_\sigma \in \mathbb{R}$, aber mit Q_s symmetrisiert in den Variablen

$$\rightsquigarrow Q_0 + \sum_{s=1}^{\infty} \frac{1}{s!} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} d\tau_1 \ldots d\tau_s\, Q(\tau_1 \ldots \tau_s) = 1 \qquad (1.49)$$

Mittelwerte: definiert für Funktionen $\{A_0, A_1(\tau_1), A_2(\tau_1,\tau_2),\ldots\}$ im Zustandsraum

$$\rightsquigarrow \langle A\rangle = A_0 Q_0 + \sum_{s=1}^{\infty}\frac{1}{s!}\int d\tau_1\ldots d\tau_s\, A(\tau_1\ldots\tau_s)\, Q_s(\tau_1\ldots\tau_s) \qquad (1.50)$$

Beispiel: Anzahl N von Punkten im Intervall $[t_a, t_b]$

$$\chi(t) = \begin{cases} 1 & t\in[t_a,t_b] \\ 0 & \text{sonst}\end{cases} \qquad (1.51)$$

$$\begin{aligned}
\rightsquigarrow \langle N\rangle &= \langle\sum_{\sigma=1}^{s}\chi(\tau_\sigma)\rangle \\
&= \sum_{s=1}^{\infty}\frac{1}{s!}\int_{-\infty}^{+\infty} d\tau_1\ldots d\tau_s\, Q_s(\tau_1\ldots\tau_s)\sum_{\sigma=1}^{s}\chi(\tau_\sigma) \\
&= \sum_{s=1}^{\infty}\frac{1}{(s-1)!}\int_{-\infty}^{+\infty} d\tau_1\chi(\tau_1)\int_{-\infty}^{+\infty} d\tau_2\ldots d\tau_s\, Q_s(\tau_1\ldots\tau_2) \\
&= \sum_{s=1}^{\infty}\frac{1}{(s-1)!}\int_{t_a}^{t_b} d\tau_1\int_{-\infty}^{+\infty} d\tau_2\ldots d\tau_s\, Q_s(\tau_1\ldots\tau_s) \qquad (1.52)
\end{aligned}$$

Poisson-Verteilung

Die Zufalls-Ereignisse heißen **unabhängig**, wenn alle Q_s faktorisieren in der Form

$$\boxed{Q_s(\tau_1\ldots\tau_s) = e^{-\nu}q(\tau_1)q(\tau_2)\ldots q(\tau_s)\,,\; Q_0 = e^{-\nu}} \qquad (1.53)$$

Normierung:

$$\forall\tau : q(\tau)\geq 0\,,\quad \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau\, q(\tau) = \nu \qquad (1.54)$$

Für die mittlere Anzahl von Punkten im Intervall $[t_a, t_b]$ ergibt (1.52) :

$$\begin{aligned}
\langle N\rangle &= e^{-\nu}\left(\sum_{s=1}^{\infty}\frac{1}{(s-1)!}\int_{t_a}^{t_b} d\tau_1\, q(\tau_1)\cdot\nu^{s-1}\right) \\
&= \int_{t_a}^{t_b} d\tau\, q(\tau) \qquad (1.55)
\end{aligned}$$

analog $\langle N\rangle^2 = \langle N\rangle^2 + \langle N\rangle$
Man kann sogar die gesamte Wahrscheinlichkeitsverteilung von N ausrechnen. Dabei ist die charakteristische Funktion gegeben durch:

$$\begin{aligned}
\langle e^{ikN}\rangle &= \langle \exp\, ik \sum_{\sigma=1}^{s} \chi(\tau_\sigma)\rangle \\
&= e^{-\nu} \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{1}{s!} \left(\int_{-\infty}^{+\infty} d\tau\, e^{ik\chi(\tau)} q(\tau) \right)^s \\
&= \exp \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau (e^{ik\chi(\tau)} - 1)\, q(\tau)\, d\tau \right\} \\
&= \exp \left\{ (e^{ik} - 1) \int_{t_a}^{t_b} d\tau\, q(\tau) \right\} \\
&= \exp \left[(e^{ik} - 1) \langle N\rangle \right] \\
&= e^{-\langle N\rangle} \sum_{N=0}^{\infty} \frac{\langle N\rangle^N}{N!} e^{ikN} \qquad (1.56)
\end{aligned}$$

$$\underbrace{\equiv}_{\text{Def. char. Funktion}} \sum_{N=0}^{\infty} P_N e^{ikN} \qquad (1.57)$$

$\Rightarrow$

$$\boxed{P_N = \frac{\langle N\rangle^N}{N!} e^{-\langle N\rangle}} \qquad (1.58)$$

Wahrscheinlichkeit, dass exakt N der unabhängigen Zufalls-Punkte in das gegebene Intervall fallen! **Poisson-Verteilung**

Die Poisson-Verteilung beschreibt ganz allgemein die Verteilung unabhängiger Ereignisse in einer beschränkten Region - wie Regentropfen, die einen bestimmten Ziegel treffen.

- 1 Parameter (Mittelwert $< N >$)
- unabhängige Ereignisse

Def. Shot-Noise
$q(\tau) = \rho =$ const. für $\tau \in [-T, T]$, $\rho = \nu/2T$. Im Limes $T \to \infty, \nu \to \infty$ mit ρ fest, ergibt sich eine **stationäre** Verteilung von Punkten - genannt **Shot-Noise**.

Kapitel 2

Stochastische Prozesse

Stochastische Variable $X \to$ definiert beliebige andere stochastische Variablen z.B. $Y = f(X)$, oder mit zusätzlicher Variable:

$$\boxed{Y_X(t) = f(X,t)} \tag{2.1}$$

$Y(t)$ ist "Zufalls-Funktion", meistens entspricht t der **Zeit**: $\boxed{\text{stochastischer Prozess}}$

Einsetzen eines möglichen Wertes x für X ergibt

$$Y_x(t) = f(x,t) \tag{2.2}$$

"Sample-Funktion" oder "**Realisierung des Prozesses**"

Mittelwerte

$$\langle Y(t) \rangle = \int Y_x(t)\, P_X(x)\, dx \tag{2.3}$$

Allgemeiner: n Zeiten $t_1, t_2, \ldots, t_n \to n$-tes Moment

$$\langle Y(t_1)Y(t_2)\ldots Y(t_n) \rangle = \int Y_x(t_1)Y_x(t_2)\ldots Y_x(t_n)P_X(x)\, dx \tag{2.4}$$

Autokorrelationsfunktion

$$K(t_1,t_2) = \langle\langle Y(t_1)Y(t_2) \rangle\rangle \;=\; \langle Y(t_1)Y(t_2) \rangle - \langle Y(t_1) \rangle \langle Y(t_2) \rangle \tag{2.5}$$

für $t_1 = t_2 \to$ zeitabhängige Varianz $\langle\langle Y(t)^2 \rangle\rangle \;=\; \sigma^2(t)$

Stationarität

$$\langle Y(t_1+\tau)\,Y(t_2+\tau)\dots Y(t_n+\tau)\rangle \;=\; \langle Y(t_1)Y(t_2)\dots Y(t_n)\rangle \qquad (2.6)$$

Meistens $K(t_1,t_2)\approx 0$ für $t_1-t_2>\tau_c$, wobei τ_c **Autokorrelationszeit**

Mehrere Komponenten: $\vec{Y}(t)=(Y_1(t),\dots,Y_r(t))$

Korrelationsmatrix $K_{ij}(t_1,t_2)=\langle\langle Y_i(t_1)Y_j(t_2)\rangle\rangle$
($i=j$: Autokorrelation, $i\neq j$: Cross-Korrelation)
für Mittelwert 0 und stationär: $K_{ij}(\tau)=\langle Y_i(0)Y_j(\tau)\rangle=K_{ji}(-\tau)$

Beispiel

a) Sei $\theta(t)$ Funktion von t, X eine Zufallsvariable.
$Y(t)=\theta(t)X$ ist stochastischer Prozess.

b) Seien $\tau_1,\tau_2,\dots$ unabhängige, stationäre "Random Dots" (d.h. Shot-Noise) mit $q(\tau)=\rho$.
$Y(t)=\sum\limits_{\sigma=1}^{s}\Psi(t-\tau_\sigma)$ "Campbell's Prozess"
$\langle Y\rangle=\rho\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\Psi(\tau)d\tau,$
$K(t)=\rho\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\Psi(\tau)\,\Psi(t+\tau)d\tau,$
$\langle\langle Y(t)^m\rangle\rangle=\rho\int\limits_{-\infty}^{+\infty}(\Psi(\tau))^m\,d\tau$

Bemerkungen

a) **Warum** kommen stochastische Prozesse in die Physik ?
(Mikro $\to$ Makro, nicht "Unkenntnis", sondern "scheinbare Irrelevanz" von mikroskopischen Details.)

b) **Wie** kommen stochastische Prozesse in die Physik?
(Mittelung über Anfangsbedingungen, Ensemble, Zeitmittelwert und Ensemblemittel.)

c) Zeitentwicklung? (Liouville-Gleichung)
$\Rightarrow$ "Stoßzahl-Ansatz", "Molekulares Chaos", "Random Phase Approx".
$\Rightarrow$ Makroskopische Gleichung für Mittelwert und Fluktuationen
(Reversibilität $\Leftrightarrow$ Irreversibilität)

d) Quantenmechanik

Fourier-Transformation eines stochastischen Prozesses

$Y(t)$ ist ein reeller, einkomponentiger Prozess, $t \in [0, T]$

$$Y_x(t) = \sum_{n=1}^{\infty} A_{n,x} \sin\left(\frac{n\pi}{T} t\right) \tag{2.7}$$

$$A_{n,x} = \frac{2}{T} \int_0^T \sin\left(\frac{n\pi}{T} t\right) Y_x(t)\, dt \tag{2.8}$$

Parseval'sche Gleichung:

$$\frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} A_{n,x}^2 = \frac{1}{T} \int\limits_0^T Y_x(t)^2\, dt \tag{2.9}$$

Übergang von Koeffizienten $A_{n,x} \rightarrow$ zur stochastischen Variable A_n

$$\langle A_n \rangle = \frac{2}{T} \int\limits_0^T \sin\left(\frac{\pi^n}{T} t\right) \langle Y(t) \rangle dt \tag{2.10}$$

(2.9) $\Rightarrow$

$$\boxed{\frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \langle A_n^2 \rangle = \frac{1}{T} \int\limits_0^T \langle Y(t)^2 \rangle dt} \tag{2.11}$$

Angenommen $Y(t)$ ist stationär mit Mittelwert 0 und endlicher Autokorrelationszeit τ_c:

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{2} \langle A_n^2 \rangle = \langle Y^2 \rangle \tag{2.12}$$

Wie verteilt sich das totale Quadrat der Fluktuation auf die einzelnen Frequenzen (Moden)? $S(\omega)$: Spektral-Dichte

$$S(\omega)\Delta\omega = \sum_{\omega < \pi n/T < \omega + \Delta\omega} \frac{1}{2} \langle A_n^2 \rangle \tag{2.13}$$

T groß $\rightsquigarrow \Delta\omega$ klein, und viele n fallen in $\Delta\omega$.

Wiener-Khinchin Theorem

$$\boxed{S(\omega) = \frac{2}{\pi}\int_0^\infty \cos(\omega\tau)\,K(\tau)\,dt} \tag{2.14}$$

Beweis

$$\begin{aligned}
< A_n^2 > &= \frac{4}{T^2}\int_0^T dt \int_0^T dt' \,\sin\frac{\pi n t}{T}\sin\frac{\pi n t'}{T}\langle Y(t)Y(t')\rangle \\
&= \frac{4}{T^2}\int_0^T \sin\frac{\pi n t}{T}\,dt \underbrace{\int_{-t}^{T-t} \sin\frac{\pi n(t+\tau)}{T}\underbrace{K(\tau)}_{\sim 0 \text{ für } \tau>\tau_c}}_{\int_{-\infty}^{+\infty}\sin\frac{\pi n(t+\tau)}{T}\,d\tau}\,d\tau \\
&= \frac{4}{T^2}\int_0^T \sin^2\frac{\pi n t}{T}\,dt\int_{-\infty}^{+\infty}\cos\frac{\pi n\tau}{T}\,K(T)\,d\tau \\
&\quad + \frac{4}{T^2}\int_0^T \sin\frac{\pi n t}{T}\cos\frac{\pi n t}{T}dt\int_{-\infty}^{+\infty}\sin\frac{\pi n\tau}{T}\,K(\tau) \\
&= \frac{4}{T^2}\frac{T}{2}\underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty}\cos\frac{\pi n\tau}{T}\,K(\tau)\,d\tau}_{\int_{-\infty}^{+\infty}\cos(\omega\tau)\,K(\tau)\,d\tau}
\end{aligned} \tag{2.15}$$

Wenn $K(\tau)$ hinreichend glatt und wegen $(T/\pi)\Delta\omega$ Terme im Intervall $\Delta\omega$ gilt:

$$S(\omega)\Delta(\omega) = \frac{T}{\pi}\Delta\omega\cdot\frac{1}{2}\cdot\frac{4}{T^2}\cdot\frac{T}{2}\int\cos(\omega\tau)\,K(\tau)\,d\tau \tag{2.16}$$

Beispiele:

a) Spektraldichte für Campbell's Prozess: $S(\omega) = 2\nu|\hat{\Psi}(\omega)|^2$ ($\hat{\Psi}$ Fouriertransformierte von $\Psi(t)$)

b) Response eines kritisch gedämpften Galvanometers auf einen Streu-Puls zur Zeit $t = 0$ ist $\theta(t) = cte^{-\gamma t}$. Was ist die Spektraldichte eines stationären Stroms unabhängiger Zufalls-Pulse.

c) Kathode emittiert Elektronen zu unabhängigen Zufalls-Zeiten. Spektraldichte der Strom-Fluktuationen: $S_I(f) = 2e\langle I\rangle$ $(f = \frac{\omega}{2\pi})$

Die Hierarchie der Verteilungs-Funktionen

Gegeben sei ein stochastischer Prozess $Y_X(t)$.
Wahrscheinlichkeitsdichte dass $Y_X(t)$ den Wert y z.Zt. t annimmt

$$p_1(Y,t) = \int \delta(y - Y_X(t))\, p_X(x)\, dx \tag{2.17}$$

Analog (y_1 bei t_1, y_2 bei $t_2, \ldots, y_n$ bei t_n)

$$\begin{aligned} &p_n(y_1,t_1;y_2,t_2;\ldots;y_n,t_n) = \\ &\quad\int \delta(y_1 - Y_x(t_1))\, \delta(y_2 - Y_x(t_2)) \ldots \delta(y_n - Y_x(t_n))\, p_x(x)\, dx \end{aligned} \tag{2.18}$$

$\Rightarrow$ definiert unendliche Hierarchie von Wahrscheinlichkeitsdichten p_n.

Mittelwert:

$$\begin{aligned} &\langle Y(t_1)Y(t_2)\ldots Y(t_n)\rangle = \\ &\quad\int y_1y_2\ldots y_n p_n(y_1,t_1;y_2,t_2;\ldots;y_n,t_n)\; dy_1dy_2\ldots dy_n \end{aligned} \tag{2.19}$$

Konsistenz-Bedingungen für Hierarchie

i $p_n \geq 0$

ii p_n ist invarinat unter Vertauschung zweier Paare (x_n, t_n) und (x_l, t_l)

iii $\int p_n(y_1,t_1;y_2,t_2;\ldots;y_n,t_n)\, dy_n = p_{n-1}(y_1,t_1;y_2,t_2;\ldots;y_{n-1},t_{n-1})$

iv $\int p_1(y_1,t_1) = 1$

Kolmogorov: Jeder Satz von Funktionen p_n mit (i)-(iv) definiert eindeutig einen stochastischen Prozess $Y(t)$.

Konditionierte Wahrscheinlichkeit

$p_{1|1}(y_2,t_2|y_1,t_1)$ ist die Wahrscheinlichkeitsdichte für Y, den Wert y_2 zur Zeit t_2 anzunehmen, vorausgesetzt, dass zur Zeit t_1 sein Wert y_1 gewesen ist (d.h. man bestrachtet Sub-Ensemble): $\int dy_2\, p_{1|1}(y_2,t_2|y_1,t_1) = 1$.

Allgemeiner: Fixiere die Werte von Y zu k verschiedenen Zeiten $t_1, ..., t_k$, frage dann nach Wahrscheinlichkeit zu l anderen Zeiten $t_{k+1}, ..., t_{k+l}$:

$$p_{l|k}(y_{k+1}, t_{k+1}; \ldots; y_{k+l}, t_{k+l} | y_1, t_1; \ldots; y_k, t_k) = \frac{p_{k+l}(y_1, t_1; \ldots; y_k, t_k; y_{k+1}, t_{k+1}; \ldots; y_{k+l}, t_{k+l})}{p_k(y_1, t_1; \ldots; y_k, t_k)} \tag{2.20}$$

Charakteristisches Funktional

Sei $Y(t)$ ein stochastischer Prozess und k(t) Raum von Testfunktionen

$$\begin{aligned} G[k] &= \langle \exp\left\{ i \int_{-\infty}^{\infty} dt\, k(t) Y(t) \right\} \rangle \\ &= \sum_{m=0}^{\infty} \frac{i^m}{m!} \int dt_1 \ldots dt_m\, k(t_1) \cdot \ldots \cdot k(t_m) \langle Y(t_1) \cdot \ldots \cdot Y(t_m) \rangle \end{aligned} \tag{2.21}$$

$\leadsto$ Berechnung der Momente durch Funktional-Ableitung. Analog:

$$\ln G[k] = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{i^m}{m!} \int dt_1 \ldots dt_m\, k(t_1) \cdot \ldots \cdot k(t_m) \langle\langle Y(t_1) \cdot \ldots \cdot Y(t_m) \rangle\rangle$$

Ein Prozess ist genau dann **stationär**, wenn:

$$P_n(y_1, t_1 + \tau; y_2, t_2 + \tau; \ldots; y_n, t_n + \tau) = P_n(y_1, t_1; y_2, t_2; \ldots; y_n, t_n)$$

Ein Prozess ist Gaußisch:

$\Leftrightarrow$ alle P_n sind multivariate Gauss-Verteilungen

$\Leftrightarrow$ $G[k] = \exp\left\{ i \int dt_1\, k(t_1) \langle Y(t_1) \rangle - \frac{1}{2} \int \int dt_1 dt_2\, k(t_1) k(t_2) \langle\langle Y(t_1) Y(t_2) \rangle\rangle \right\}$

(Oft studierte, besonders einfache Prozesse.)

Beispiel: Schwingende Seite (Nicht-Markov'sch)

Elastische Energie

$$E = \frac{1}{2} \int_0^L \left(\frac{dy}{dx} \right)^2 dx$$

+thermische Fluktuationen: $P[y] \propto \exp(-E[y]/kT)$

Integration im „Funktionen-Raum“:$0 < x_1 < x_2 < \ldots < x_n < L$

$$\Rightarrow \quad E(y_1, \ldots, y_n) = \frac{1}{2} \sum_{\nu=0}^{n} \frac{(y_{\nu+1} - y_\nu)^2}{x_{\nu+1} - x_\nu}$$

$$\Rightarrow P_n(y_1,x_1;\ldots;y_n,x_n) = \left(\frac{2\pi L}{\beta}\right)^{\frac{1}{2}} \prod_{\nu=0}^{n} \left(\frac{\beta}{2\pi(x_{\nu+1}-x_\nu)}\right)^{\frac{1}{2}} \exp\left[-\frac{\beta}{2}\frac{(y_{\nu+1}-y_\nu)^2}{x_{\nu+1}-x_\nu}\right]$$

Erfüllt also die Konsistenzbedingungen (i)-(iv) und beschreibt einen Gaußprozess (nicht stationär):

$$\langle Y(x_1)\rangle = 0 \qquad \langle Y(x_1)Y(x_2)\rangle = \frac{x_1(L-x_2)}{p\,L}$$

Kapitel 3

Markov-Prozesse

Wir formulieren die Markov-Eigenschaft eines stochastischen Prozesses für n aufeinander folgende Zeiten t_i $(t_1 < t_2 < \ldots < t_n)$ wie folgt:

$$P_{1|n-1}(y_n, t_n | y_1, t_1; \ldots; y_{n-1} t_{n-1}) = P_{1|1}(y_n, t_n | y_{n-1}, t_{n-1}), \tag{3.1}$$

d.h. die bedingte Wahrscheinlichkeit zur Zeit t_n ist durch y_{n-1} bei t_{n-1} eindeutig bestimmt und ist nicht beeinflußt durch das Wissen von früheren Zeiten:

$$P_{1|1} = \text{„Übergangswahrscheinlichkeit“}$$

Ein Markov-Prozess ist vollständig bestimmt durch $P_1(y_1, t_1)$ und $P_{1|1}(y_2, t_2|y_1, t_1)$. Daraus ergibt sich die gesamte Hierarchie, z.B:

$$\begin{aligned} P(y_1, t_1; y_2, t_2; y_3, t_3) &= P_2(y_1, t_1; y_2, t_2) \cdot P_{1|2}(y_3, t_3 | y_1, t_1; y_2, t_2) \\ &= P_1(y_1, t_1) \cdot P_{1|1}(y_2, t_2 | y_1, t_1) \cdot P_{1|1}(y_3, t_3 | y_2, t_2) \end{aligned} \tag{3.2}$$

etc. Darum sind Markov-Prozesse gut handhabbar und finden zahlreich Anwendung.

Bemerkung

a) Anzahl der Neutronen im Kernreaktor ist Markov'sch.

b) Spiel Kopf oder Zahl, $Y(t)$ Gewinn, ist Markov'sch.

c) Betrachte gewöhnliche DGL: $\dot{x} = f(x)$ mit $x(t_0) = x_0$.
$x = \phi(x_0, t - t_0)$ genügt der Definition eines Markov-Prozesses:

$$P_{1|1}(x, t | x_0, t_0) = \delta[x - \phi(x_0, t - t_0)]$$

$\Rightarrow$ Jeder *deterministische* Prozess ist Markov'sch.

Beispiel

Ältestes und bekanntestes Beispiel eines Markov-Prozesses ist die Brown'sche Bewegung: leichte Moleküle kollidieren mit schweren Teilchen in „zufälliger“ Weise. Dadurch variiert deren Geschwindigkeit in Form von kleinen, anscheinend unkorrelierten Sprüngen δv. Je größer v, um so mehr Kollisionen von „vorne“ finden statt. Also hängt δv in $[t, t + \delta t]$ von v zur Zeit t ab, jedoch nicht von früheren Zeiten. Somit handelt es sich um einen Markov-Prozess. (Nähere Behandlung später)
Aber: Dieses Bild ergab keine Übereinstimmung mit dem Experiment.
Einstein & Smoluchowski: Zwischen zwei Beobachtungen der Position des Brown'schen Teilchens hat sich die Geschwindigkeit viele Male geändert ($\tau_{obs.} \gg \tau_{corr.}$). $\Rightarrow$ Man beobachtet die Gesamt-Verschiebung nach *vielen* Änderungen der Geschwindigkeit.

Sei $x_1, x_2, \ldots$ eine Reihe von (Positions-)Messungen, dann ist $x_{k+1} - x_k$ zufällig und unabhängig von $x_{k-1}, x_{k-2}, \ldots \rightsquigarrow$ (v_t und) x_t Markov-Prozess (auf der groben Zeitskala des Experiments).
$\rightsquigarrow$ Basis für *Theorie* der Brown'schen Bewegung.

Bemerkung

a) Makov-Eigenschaft lediglich Näherung:
$x_{k+1} - x_k$ groß $\Rightarrow v_k$ wahrscheinlich groß
$\Rightarrow x_{k+2} - x_{k+1}$ auch eher groß
$\Rightarrow$ Autokorrelations-Zeit der *Geschwindigkeit* resultiert in Korrelationen zwischen aufeinander folgenden Verschiebungen (kleiner Effekt, wenn $\tau_{obs.} \gg \tau_{corr.}$)

b) Kollisionen nicht instantan $\rightsquigarrow v_t$ ebenfalls nicht Markov'sch
außerdem: Annahme, dass die Bewegung des Brown'schen Teilchens keinen geordneten Fluss in umgebender Flüssigkeit erzeugt. ($\rightarrow$ Gedächtnis, z.B. Gasmoleküle nicht Markov'sch)

c) Allgemein: Dasselbe physikalische System kann durch *verschiedene* Markov-Prozesse beschrieben werden
$\rightarrow$ abhängig vom Level der Beschreibung
Beispiel: Dissoziation eines Gases von binären Molekülen
AB $\rightarrow$ A + B
1. Level: Wahrscheinlichkeit für AB aufzuspalten abhängig von augenblicklicher Konzentration
$\Rightarrow$ ist Markov-Prozess
2. Level: Berücksichtigt Schwingungszustände der Moleküle
$\rightsquigarrow$Random Walk über Schwingungszustände ist ebenfalls Markov'sch

Konzept eines Markov-Prozesses auch für Prozesse $Y(t)$ mit r Komponenten. (3 Geschwindigkeiten des Brown'schen Teilchens, r chemische Komponenten einer reagierenden Mixtur)

Wichtig: sei r komponentiger stochastischer Prozess Markov'sch
$\longrightarrow$ s komponentiger Prozess (ignoriere $r - s$ Komponenten) i.a. *nicht* Markov'sch

Umgekehrt: Ist ein physikalischer Prozess *nicht* Markov'sch, so gelingt es manchmal, ihn durch Hinzunahme von Komponenten in einen Markov-Prozess einzubetten.
z.B.: Brown'sche Bewegung mit äußerem Feld
$\rightsquigarrow v_t(x_t)$, v_t alleine nicht Markov'sch, aber (x_t, v_t).

Im Prinzip kann jedes abgeschlossene physikalische System als Markov-Prozess beschreiben werden, wenn man alle mikroskopischen Variablen als Komponenten hinzunimmt (s.o. Bsp. c)).

Kunst des Physikers: Finde einen signifikant kleinen Satz von Variablen (coarse-grained level, Kontraktion oder Projektion)

Chapman-Kolmogorov-Gleichungen

Integriere (3.2) über y_2 $(t_1 < t_2 < t_3)$

$$\rightarrow P_2(y_1, t_1; y_3, t_3) = P_1(y_1, t_1) \int dy_2\, P_{1|1}(y_2, t_2|y_1, t_1) P_{1|1}(y_3, t_3|y_2, t_2)$$

$$\boxed{P_{1|1}(y_3, t_3|y_1, t_1) \quad = \quad \int dy_2\, P_{1|1}(y_3, t_3|y_2, t_2) P_{1|1}(y_2, t_2|y_1, t_1)} \tag{3.3}$$

Chapman-Kolmogorov-Gleichung

Maß für die Übergangswahrscheinlichkeit eines *jeden* Markov-Prozesses.
Ein Markov-Prozess ist vollständig bestimmt durch P_1 und $P_{1|1}$, welche beliebig gewählt werden können, sofern sie:

1) Chapman-Kolmogorov-Gleichung
2) $P_1(y_2, t_2) = \int dy_1\, P_{1|1}(y_2, t_2|y_1, t_1) P_1(y_1, t_1)$ (*)

erfüllen.

Beispiel

$Y_t \in -1, 1$ und
$P_{1|1}(y, t|y', t') = \frac{1}{2}\{1 + \exp(-2\gamma(t - t'))\}\delta_{y,y'} + \frac{1}{2}\{1 - \exp(-2\gamma(t - t'))\}\delta_{y,-y'}$

Übung

1. Zeige $P_{1|1}(y,t|y',t')$ genügt CK-Gleichung und ist konsistent mit $P_1(y,t) = \frac{1}{2}(\delta_{y,1} + \delta_{y,-1})$.
   $\rightarrow$ Y_t „dichotomischer Markov-Prozess“ oder „Random-Telegraph-Process“
2. Y_t habe in jedem δt Wahrscheinlichkeit $\gamma\delta t$ zu flippen $\rightsquigarrow$ Y_t ist wie in 1.)
3. Sei Y_t Prozess mit $Y \in \{0,1\}$, $t \in \{1,2,3\}$ $\rightsquigarrow$ 8 Sample-Funktionen; wähle daraus nur 4 mit der jeweiligen Wahrscheinlichkeit 1/4.
   (1,0,0); (0,1,0); (0,0,1); (1,1,1)

Wiener-Prozess (od. Wiener-Levy-Prozess)

Sei $-\infty < y < \infty$ und $t_2 > t_1$

$$P_{1|1}(y_2,t_2|y_1,t_1) = \frac{1}{\sqrt{2\pi(t_2-t_1)}} \exp\left\{-\frac{(y_2-y_1)^2}{2(t_2-t_1)}\right\} \tag{3.4}$$

genügt Chapman-Kolmogorov-Gleichung; mit $P_1(y_1,0) = \delta(y_1)$ $\rightarrow$ **nicht-stationärer** Markov-Prozess. (Ursprünglich formuliert zur Beschreibung des Verhaltens der **Position** eines Brownschen Teilchens)
Es folgt aus (*)

$$P_1(y,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi t}} \exp\left\{-\frac{y^2}{2t}\right\} \; (t > 0) \tag{3.5}$$

Übung

1) Wie lautet die Hierarchie P_n?
2) Zeige $\langle Y(t_1)Y(t_2)\rangle = \min(t_1,t_2)$
   $\langle\{Y(t_1) - Y(t_2)\}\{Y(t_3) - Y(t_4)\}\rangle = \{[t_1,t_2] \cap [t_3,t_4]\}$
3)

$$\begin{aligned} 0 \le t_1 \le t_2 \,:\, \langle y_2\rangle_{y_1} &= y_1 \,,\, \langle\langle y_2^2\rangle\rangle = t_2 - t_1 \\ \langle y_1\rangle_{y_2} &= \frac{t_1}{t_2} y_2 \,,\, \langle\langle y_1^2\rangle\rangle_{y_2} = \frac{t_1}{t_2}(t_2 - t_1) \end{aligned}$$

4) Berechne die Momente $\langle Y(t_1)Y(t_2)\ldots Y(t_n)\rangle$
5) Zeige P_1 genügt der Diffusionsgleichung $\frac{\partial P}{\partial t} = D\frac{\partial^2 P}{\partial y^2}$, $D = \frac{1}{2}$
6) $P_{1|1}(y,t|y_0,0)$ genügt $\dot{P}(t) = \int G(t,t')P(t')dt'$ mit dem Integral-Kern

$$G(y,t|y',t') = \frac{\partial}{\partial t}\frac{1}{t}\frac{1}{\sqrt{2\pi(t-t')}} \exp\left\{-\frac{(y-y')^2}{2(t-t')}\right\}$$

Poisson-Prozess

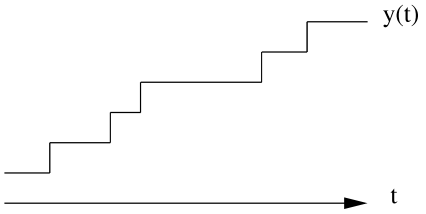
$Y(t) = 0, 1, 2, \ldots$ und $t \geq 0$

Def. *Markov-Prozess* über $(t_2 \geq t_1 \geq 0)$

$$P_{1|1}(n_2, t_2|n_1, t_1) = \frac{(t_2 - t_1)^{n_2 - n_1}}{(n_2 - n_1)!} e^{-(t_2 - t_1)} \, ; \, P_1(n, 0) = \delta_{n,0} \tag{3.6}$$

$(P_{1|1} = 0$ für $n_2 < n_1)$

Jede Sample-Funktion $y(t)$ ist eine Abfolge von Schritten der Höhe 1 zu zufälligen Momenten (random Dots auf der Zeit-Achse). Die Anzahl dieser Momente zwischen t_1 und t_2 genügt der **Poisson**-Verteilung $\Rightarrow Y(t)$ Poisson-Prozess.

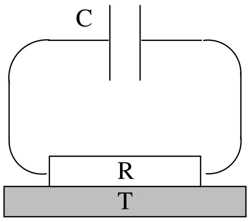


Übung

Zeige, dass Definition (3.6) konsistent ist.

Stationäre Markov-Prozesse

Wichtig für "Gleichgewichts-Fluktuationen" $Y(t)$
$\rightsquigarrow P_1$ zeitunabhängig $\equiv$ Gleichgewichtsverteilung der Größe Y, z.B. $\alpha e^{-\beta H(Y)}$



$V = Y$, $P_1(y_1) = \left(\frac{C}{2\pi kT}\right)^{1/2} \exp\left[-\frac{Cy_1^2}{2kT}\right]$
weiteres Beispiel: Brown'sches Teilchen in homogenen Gravitationsfeld $\rightarrow$ vertikale Geschwindigkeit stationärer Prozess

Da $P_{1|1}$ nicht von zwei Zeiten, sondern nur dem Zeitintervall abhängt, wählen wir eine spezielle Notation:

$$T_\tau(y_2|y_1) \;:=\; P_{1|1}(y_2, t_2|y_1, t_1)$$

mit $\tau = t_2 - t_1$. Damit lautet die Chapman-Kolmogorov-Gleichung nun:

$$\boxed{T_{\tau+\tau'}(y_3|y_1) = \int T_{\tau'}(y_3|y_2)T_\tau(y_2|y_1)dy_2} \tag{3.7}$$

oder in Matrix-Form:

$$T_{\tau+\tau'} = T_{\tau'}T_\tau \; (\tau, \tau' > 0)$$

Übung

$K(\tau) = \int\int y_1 y_2 \, T_\tau(y_2|y_1) \, P(y_1) dy_1 dy_2$ (**)

Berühmtes Beispiel: **Ornstein-Uhlenbeck-Prozess**

$$\boxed{\begin{aligned} P_1(y_1) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \, e^{-\frac{1}{2}y_1^2} \\ T_\tau(y_2|y_1) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi(1-e^{-2\tau})}} \exp\left\{-\frac{(y_2 - y_1 e^{-\tau})^2}{2(1-e^{-2\tau})}\right\} \end{aligned}} \tag{3.8}$$

Übung

Zeige, dass Konsistenz-Bedingungen erfüllt sind.

Ursprünglich: Verhalten der **Geschwindigkeit** eines Brownschen Teilchens

$$\langle y_t \rangle = 0 \, , \; K(\tau) = e^{-\tau} \tag{3.9}$$

Doob's Theorem: Ornstein-Uhlenbeck-Prozess ist der **einzige** stationäre, Gaußische, Markov-Prozess (bis auf lineare Transformationen von y und t).

$$G[k] = \exp\left\{-\frac{1}{2}\int\int k(t_1)k(t_2)e^{-\gamma|t_1-t_2|} \, dt_1 dt_2\right\} \tag{3.10}$$

Weiteres Theorem: Ist Y Gaußisch und $K = e^{-\tau} \Rightarrow Y$ Ornstein-Uhlenbeck-Prozess (d.h. auch Markov'sch).

Beweis-Skizze

Y Gaußisch, stationär und Markov'sch, dann ist P_1 schon wie gewünscht (o.B.d.A.): $T_\tau(y_2|y_1) = De^{-\frac{1}{2}(Ay_2^2 + 2By_1y_2 + Cy_1^2)}$,

$$D = \sqrt{A/2\pi}, C = B^2/A, B^2 = A(A-1)$$

Wegen (**) $A = (1-K^2)^{-1}$, K unbekannt

$$\Rightarrow T_\tau(y_2|y_1) = \frac{1}{\sqrt{2\pi(1-K^2)}} \exp\left\{-\frac{(y_2-Ky_1)^2}{2(1-K^2)}\right\} \tag{3.11}$$

Weiter

$$\begin{aligned} K(t_3-t_1) &= \int y_3 dy_3 \int T_{\tau'}(y_3|y_2)dy_2\, T_\tau(y_2|y_1)y_1 P_1(y_1)dy_1 \\ &= K(t_3-t_2)K(t_2-t_1) \end{aligned} \tag{3.12}$$

$\Rightarrow K(T) = e^{-\gamma\tau}$

Übung

1) $\underline{Y}$ sei r-komponentiger Gauß-Prozess, Markov'sch, wobei o.B.d.A. gelte $P_1(\underline{y},t) \sim \exp(-\frac{1}{2}\underline{y}^2)$
   - Zeige für die Autokorrelations-Matrix $\underline{\underline{K}}(t_3,t_1) = \underline{\underline{K}}(t_3,t_2)\underline{\underline{K}}(t_2,t_1)$, mit $(t_3 \geq t_2 \geq t_1)$
   - Falls Y stationär: $\underline{\underline{K}}(\tau) = e^{-\tau\underline{\underline{G}}}$, $\underline{\underline{G}}$ Konstante Matrix.

2) $Y(t)$ Ornstein-Uhlenbeck-Prozess, $Z(t) = \int\limits_0^t Y(t')dt'$ $(t \geq 0)$

   Zeige $Z(t)$ ist Gaußisch, aber weder stationär noch Markov'sch, und $\langle Y(t_1)Y(t_2)\rangle = e^{-t_2} + e^{-t_2} - 1 - e^{-|t_1-t_2|} + 2 \text{ Min } (t_1,t_2)$

Kapitel 4

Master-Gleichung, Ein-Schritt-Prozesse, ASEP

[1] Die Master-Gleichung ist äquivalent zur Chapman-Kolmogorov-Gleichung für Markov-Prozesse, ist aber leichter handhabbar (und enger an physikalische Konzepte angelehnt).

Betrachte einen Markov-Prozess Y, der Einfachheit halber homogen, T_τ sei die Übergangswahrscheinlichkeit. Für $\tau' \to 0$ gilt dann folgende Entwicklung von $T_{\tau'}$:

$$T_{\tau'}(y_2|y_1) = (1 - a_0\tau')\,\delta(y_2 - y_1) + \tau'\,W(y_2|y_1) + \mathcal{O}(\tau'^2) \tag{4.1}$$

$(1-a_0\tau')$ ist dabei die Wahrscheinlichkeit dafür, dass **kein** Übergang während τ' stattgefunden hat. $W(y_2|y_1)$ ist die Übergangswahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit von y_1 nach y_2, weshalb $W(y_2|y_1) \geq 0$. Wegen $\int dy_2\,T_{\tau'}(y_2|y_1) = 1$ gilt:

$$a_0(y_1) = \int dy_2\,W(y_2|y_1)$$

Mit $T_{\tau+\tau'}(y_3|y_1) = \int T_{\tau'}(y_3|y_2)\,T_\tau(y_2|y_1)$ (Chapman-Kolmogorov-Gleichung) ergibt sich

$$T_{\tau+\tau'}(y_3|y_1) = [1 - a_0(y_3)\tau']\,T_\tau(y_3|y_1) + \tau' \int W(y_3|y_2)\,T_\tau(y_2|y_1)\,dy_2 \tag{4.2}$$

Dies können wir im Grenzfall $\tau' \to 0$ überführen in die **Master-Gleichung**

$$\boxed{\frac{\partial T_\tau(y_3|y_1)}{\partial \tau} = \int dy_2\,\{W(y_3|y_2)T_\tau(y_2|y_1) - W(y_2|y_3)T_\tau(y_3|y_1)\}} \tag{4.3}$$

[1] ASEP=Asymmetric Random Average Processes

Andere Notationen: $T_\tau(y_2|y_1) \equiv P(y_2, \tau)$, entsprechend einem Subensemble mit Anfangswert y_1 bei $\tau = 0$. Also:

$$\boxed{\frac{\partial P(y,t)}{\partial t} = \int dy' \left\{ W(y|y')\, P(y',t) - W(y'|y)\, P(y,t) \right\}} \tag{4.4}$$

Achtung $P(y,t)$ enspricht **nicht** $P_1(y,t)$.

Für Y diskret:

$$\boxed{\frac{dP_n(t)}{dt} = \sum_{n'} \{ W_{n,n'}\, P_{n'}(t) - W_{n'n}\, P_n(t) \}} \tag{4.5}$$

Die Master-Gleichung ist somit als Bilanz-Gleichung der Wahrscheinlichkeit von einzelnen Zuständen n zu verstehen!

Bemerkung: Chapman-Kolmogorov-Gleichung ist eine nichtlineare Gleichung, die lediglich den Markov-Charakter eines Prozesses ausdrückt.

Die Master-Gleichung hingegen ist eine lineare Gleichung und enthält die Übergangswahrscheinlichkeiten des betrachteten Systems während einer kurzen Zeit $\Delta\tau$ - ($W(y|y')\Delta t$ oder $W_{nn'\Delta t}$); diese können mit Hilfe von Näherungsmethoden für kurze Zeiten berechnet werden.

Beispiel: Dirac's zeitabhängige Störungsrechnung $\rightsquigarrow$ Fermis goldene Regel:

$$\boxed{W_{nn'} = \frac{2\pi}{\lambda} |H_{nn'}|^2 \rho(E_n)} \tag{4.6}$$

Beispiel: Zerfalls-Prozess
n radioaktive Teilchen, Zerfallswahrscheinlichkeit $\gamma\Delta t$ pro Teilchen

$$\Rightarrow T_{\Delta t}(n|n') = \begin{cases} 0 & n > n' \\ n'\gamma\, \Delta t & n = n' - 1 \\ \mathcal{O}(\Delta t^2) & n < n' - 1 \end{cases} \tag{4.7}$$

Für die Übergangswahrscheinlichkeit erhalten wir $W_{nn'} = \gamma n' \delta_{n,n'-1} \qquad n \neq n'$ und somit:

$$\boxed{\dot{P}_n(t) = \gamma(n+1)P_{n+1}(t) - \gamma n P_n(t)} \tag{4.8}$$

Übung: Löse (4.8). Tipp: betrachte erzeugende Funktion und anschließend $P_n(t) = \frac{1}{2\pi i}\oint dz\, z^{-n-1}F_t(z)$

Notation

Definiere sog. $\mathbb{W}$-matrizen:

$$\mathbb{W}_{nn'} = \begin{cases} W_{nn'}(\geq 0) & ,n \neq n' \\ -\sum\limits_{n'(\neq n)} W_{n'n} & ,n = n' \end{cases} \tag{4.9}$$

Damit gilt auch: $\sum\limits_{n} W_{nn'} = 0$ für alle n', was u.a. bedeutet, dass ein Eigenvektor zum Eigenwert 0 existiert.

$$\boxed{\begin{aligned} \dot{P}_n(t) &= \sum_{n'} \mathbb{W}_{nn'} P_n(t) \\ \underline{\dot{P}}(t) &= \mathbb{W}\underline{P}(t) \rightarrow \underline{P}(t) = e^{t\mathbb{W}}\underline{P}(0) \end{aligned}} \tag{4.10}$$

(formal wie Schrödingergleichung)

Für $t \rightarrow \infty$ können wir auf die Theoreme von Perron und Frobenius für *endliche* Matrizen zurückgreifen: $\rightsquigarrow P(t) \longleftrightarrow P_\infty$, wobei P_∞ eine zeitunabhängige, stationäre Lösung ist.

Bemerkungen:

Eigenschaft $W_{nn'} \geq 0$ für $n \neq n'$ und insbesondere $\sum\limits_{n} W_{nn'} = 0$ bleibt erhalten, wenn eine Permutation gleichzeitig auf Reihen und Spalten angewendet wird, was einer Umbenennung der Zustände gleichkommt.

Man nennt $\mathbb{W}$ **vollständig reduzibel** oder **zerlegbar**, wenn man diese durch gleichzeitige Permutation von Zeilen und Spalten in eine Form $\mathbb{W} = \binom{A\,0}{0\,B} \mathrel{\hat{=}}$ überführen kann. D.h. man betrachtet zwei unabhängige, nicht-wechselwirkende Subsysteme mit den zum Eigenwert 0 gehörigen Eigenvektoren $(\Phi_A, 0)$ und $(0, \Phi_B)$. Als Beispiel könnten hier Systeme mit energie-erhaltenden Übergängen dienen.

Man nennt $\mathbb{W}$ (unvollständig) **reduzibel**, wenn ein Überführen in die Form $\mathbb{W} = \binom{A\,D}{0\,B}$ möglich ist. Damit besitzt $\mathbb{W}$ wiederum einen Eigenvektor

$\Phi = (\Phi_A, 0)$ mit Eigenwert 0.

Beachte: aus $\dot{P}_b = \sum\limits_{b'} \mathbb{B}_{bb'} P_b$ (geschlossen) folgt

$$\frac{d}{dt} \sum_b P_b = \sum_{b'} \left(\sum_b \mathbb{B}_{b\,b'} \right) p_{b'} = - \sum_{b'} \left(\sum_a \mathbb{D}_{a\,b'} \right) p_{b'} < 0$$

Den Zustand b nennt man daher **transient**, da alle seine Komponenten nach ausreichend langer Zeit verschwinden; den Zustand a nennt man **absorbierend**, da in ihm die Wahrscheinlichkeit gesammelt wird.

Eine $\mathbb{W}$-matrix bezeichnet man als "splitting matrix", wenn

$$\mathbb{W} = \begin{pmatrix} \mathbb{A} & 0 & \mathbb{D} \\ 0 & \mathbb{B} & \mathbb{E} \\ 0 & 0 & \mathbb{C} \end{pmatrix}$$

Hierbei sind $\mathbb{A}$ und $\mathbb{B}$ beide $\mathbb{W}$-Matrizen, $\mathbb{C}$ ist quadratisch und wenigstens einige Elemente von $\mathbb{D}$ und $\mathbb{E}$ verschwinden nicht.

Geschlossene isolierte physikalische Systeme

Hierbei bedeutet

physikalisch: es existiert eine mikroskopische Beschreibung (Hamilton- oder Schrödingergleichung)
geschlossen: es findet kein Teilchenaustausch mit der Umgebung statt (Satz mikroskopischer Variablen ist fest)
isoliert: keine äußeren, zeitabhängigen Kräfte (Energie-Erhaltung)

Die stationäre Lösung P_n^s eines solchen durch die Master-Gleichung beschriebenen Systems muss übereinstimmen mit der aus der statistischen Mechanik bekannten (Gleichgewichts-)Lösung P_n^e. Insbesondere muss gelten:

$$\sum_{n'} W_{nn'} P_{n'}^e = \left(\sum_{n'} W_{n'n} \right) P_n^e$$

Da $P_n^e > 0$ für alle n, ist $\mathbb{W}$ irreduzibel!

Eine stärkere Forderung als die Gleichheit beider Summen, stellt die **Detaillierte Bilanz** dar:

$$\boxed{W_{nn'} P_{n'}^e = W_{n'n} P_n^e} \tag{4.11}$$

Diese fordert die Gleichheit für ein jedes Paar n und n'.

Üblicherweise schreibt man diese Gleichnung unter Verwendung *kontinuierlicher Variablen* auf:

$$W(y|y')P^e(y') = W(y'|y)P^e(y)$$

Hierbei steht y für einen Satz makroskopischer Variablen $Y(q,p)$. Diese Beziehung ist gültig, falls:

- der Hamiltonian des betrachteten Systems, welcher die mikroskopische Bewegung beschreibt, eine *gerade* Funktion aller Impulse p_k ist ($\rightarrow$ kein Magnetfeld, keine Rotation),
- die Variablen Y ebenfalls ëmphgerade Funktionen der Impulse sind.

Makroskopische Gleichung

Sei Y eine physikalische Größe mit Makov-Charkter und Anfangswert y_0 bei $t = 0$. Dann bestimmt nun die Master-Gleichung die Wahrscheinlichkeitsverteilung für $t > 0$. Die gewöhnliche makroskopische Physik vernachlässigt Fluktuationen und behandelt Y wie eine nicht-statistische eindeutige Größe $\mathbf{y}$. Deren Entwicklung wird durch deterministische Gleichungen beschrieben, welche als *makroskopische* oder *phänomenologische* Gleichungen bezeichnet werden.

Wie erhält man diese makroskopische Gleichung aus der Master-Gleichnung?

mit $\mathbf{y}(t) := \langle Y \rangle_t = \int dy\, y\, P(y,t)$ folgt:

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\langle Y \rangle_t &= \int dy\, y \frac{\partial P(y,t)}{\partial t} \\
&= \int\int dy\, dy' y \{W(y|y')P(y',t) - W(y',y)P(y,t)\} \\
&= \int\int dy\, dy' (y'-y)\, W(y',y)\, P(y,t)
\end{aligned}$$

Sprung-Momente:

$$a_\nu(y) = \int dy'\, (y'-y)^\nu\, W(y',y) \tag{4.12}$$

Dann gilt:

$$\boxed{\frac{d}{dt}\langle Y \rangle_t = \int dy\, a_1(y) P(y,t) = \langle a_1(Y) \rangle_t} \tag{4.13}$$

I.a. ist $a_1(y)$ nicht linear in y. Eine Entwicklung um $\langle Y \rangle$ liefert dann:

$$\langle a_1(Y) \rangle = a_1(\langle Y \rangle) + \frac{1}{2} \langle (Y - \langle Y \rangle)^2 \rangle \, a_1''(\langle Y \rangle) + \ldots$$

Die makroskopische Näherung besteht nun darin, dass die hier auftretenden Fluktuationen vernachlässigt werden.

Makroskopische Näherung

$$\boxed{\dot{\mathbf{y}} = a_1(\mathbf{y})} \tag{4.14}$$

Eine ähnliche Überlegung führt zu einer Gleichung, welche näherungsweise das zeitliche Verhalten der Breite der Verteilung beschreibt:

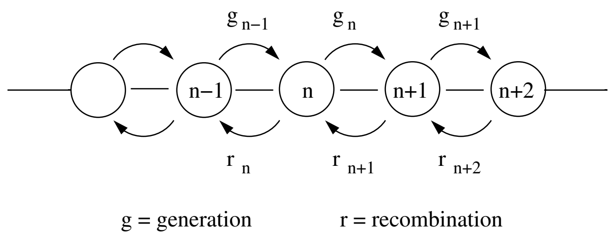
$$\frac{d}{dt} \sigma^2 = a_2(\mathbf{y}(t)) + 2\sigma^2 \, a_1'(\mathbf{y}(t))$$

Damit erhalten wir

$$\boxed{\dot{\mathbf{y}} = a_1(\mathbf{y}) + \frac{1}{2} \sigma^2 \, a_1''(\mathbf{y})} \tag{4.15}$$

Ein-Schritt-Prozesse

Wir betrachten einen speziellen Markov-Prozess in kontinuierlicher Zeit mit diskreten Zuständen n, wobei die Matrix $\mathbb{W}$ lediglich Sprünge zwischen benachbarten Plätzen erlaubt.



$$\begin{aligned} \mathbb{W}_{nn'} &= r_{n'} \delta_{n,n'-1} + g_n' \delta_{n,n'+1} \quad (n \neq n'), \\ \mathbb{W}_{nn'} &= -(r_n + g_n) \end{aligned} \tag{4.16}$$

also

$$\boxed{\dot{P}_n = r_{n+1}P_{n+1} + g_{n-1}P_{n-1} - (r_n + g_n)P_n} \tag{4.17}$$

Beispiel:

- Emission/Absorption von Photonen/Teilchen
- An/Abregung von Atomen/Kernen/Elektronen im Halbl.
- Geburt/Tod von Individuen
- Ankunft/Weggang von Kunden etc.

Ein-Schritt-Prozesse können wir unterteilen in die folgenden Unterklassen.

Unterklassen:

i) $-\infty < n < \infty$

ii) $n = 0, 1, 2, \ldots$

iii) $n = 0, 1, 2, \ldots, N$

Falls der Bereich Lücken aufweist, exitsiert kein Übergang über diese hinweg, sondern der Prozess zerfällt in verschiedene, unabhängige Prozesse des Typs ii) oder iii).

Eine andere Unterteilung kann entsprechend der Art der Koeffizienten erfolgen:

a) Konstante Koeffizienten (**Random Walks**)

b) Koeffizienten linear in n (**lineare Ein-Schritt-Prozesse**)

c) nichtlineare Koeffizienten (Beachte: Master-Gleichung selbst ist immer linear.)

Beachte: Änderung der Master-Gleichung an den Rändern:

$$\begin{aligned} n = 0 \quad &\Rightarrow \quad \dot{P}_0 = r_1 P_1 - g_0 P_0 \\ n = N \quad &\Rightarrow \quad \dot{P}_N = r_{N-1} P_{N-1} - r_N P_N \end{aligned}$$

Wir betrachten nun die erzeugende Funktion eines allgemeinen Ein-Schritt-Prozesses sowie deren zeitliche Entwicklung.

Erzeugende Funktion

$$F(z,t) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} P_n(t)\, z^n \tag{4.18}$$

Es gilt:

$$\frac{\partial F(z,t)}{\partial t} = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{\partial P_n(t)}{\partial t}\, z^n, \quad z\frac{\partial}{\partial z}\, F(z,t) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} P_n(t)\, n z^n$$

$$\sum_{n=-\infty}^{+\infty} [r(n+1)\, P_{n+1}(t) - r(n)\, P_n(t)] z^n = (\frac{1}{z} - 1)\, r(z\frac{\partial}{\partial z}) F(z,t)$$

$$\sum_{n=-\infty}^{+\infty} [g(n-1)\, P_{n-1}(t) - g(n)\, P_n(t)] z^n = (z-1)\, g(z\frac{\partial}{\partial z}) F(z,t)$$

Hierbei sind r und g Funktionen von n (linke Seite) und somit (Potenzreihenentwicklung) Funktionen von $z \cdot \partial/\partial z$. Addiert man beide Gleichungen, so folgt

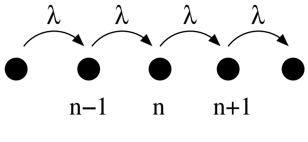
$$\boxed{\frac{\partial F(z,t)}{\partial t} = \left\{ (\frac{1}{z} - 1)\, r\,(z\frac{\partial}{\partial z}) + (z-1)\, g\,(z\frac{\partial}{\partial z}) \right\} F(z,t)} \tag{4.19}$$

wobei von der Master-Gleichung Gebrauch gemacht wurde. Zum Auffinden einer Lösung müssen wir stets noch eine Anfangs-Bedingung $F(z,t=0) = \sum\limits_{n=-\infty}^{+\infty} P_n(0) z^n$ wählen.

Bemerkung:

$$\langle n^k \rangle = \left(z\frac{\partial}{\partial z} \right)^k F(z,t)|_{z=1} = \left. \frac{\partial^k F(z,t)}{\partial (\ln z)^k} \right|_{z=1} \tag{4.20}$$

Beispiel Poisson-Prozess



Sei $n \geq 0$, $g(n) = \lambda$, $r(n) = 0$ (Punktprozess, n = Anzahl von Ereignissen in der Zeit t, Wahrscheinlichkeit für ein Ereignis λdt)

$$\begin{aligned} \dot{P}_n(t) &= \lambda P_{n-1}(t) - \lambda P_n(t) \\ \dot{P}_0(t) &= -\lambda P_1(t) \end{aligned} \tag{4.21}$$

Mit der Anfangsbedingung: $P_n(0) = \delta_{n,m}$ mit $m \geq 0$ erhalten wir

$$\boxed{P_n(t) = \frac{(\lambda t)^{n-m}}{(n-m)!}\, e^{-\lambda t}} \tag{4.22}$$

wobei $n \geq m$, $P_n(t) = 0$ für $n < m$, denn mit Hilfe der erzeugenden Funktion erhalten wir:

$$\begin{aligned} \frac{\partial F(z,t)}{\partial t} &= \lambda(z-1)\, F(z,t) \;\text{ mit }\; F(z,0) = z^m \\ \Rightarrow F(z,t) &= e^{\lambda t(z-1)} z^m \;= e^{-\lambda t} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\lambda t)^n}{n!}\, z^{n+m} \end{aligned} \tag{4.23}$$

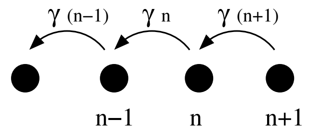
Die Momente ergeben sich hier zu:

$$\begin{aligned} \langle n \rangle &= \left(z \frac{\partial}{\partial z} \right) e^{\lambda t(z-1)} z^m \Big|_{z=1} = \lambda t + m \\ \langle n^2 \rangle &= \left(z \frac{\partial}{\partial z} \right)^2 e^{\lambda t(z-1)} z^m \Big|_{z=1} = \lambda t + (\lambda t + m)^2 \\ \langle\langle n^2 \rangle\rangle &= \lambda t \end{aligned}$$

Für die Übergangswahrscheinlichkeit finden wir:

$$\begin{aligned} P(n,t|m,0) &= \frac{(\lambda t)^{n-m}}{(n-m)!} e^{-\lambda t} \qquad n \geq m \\ &= (1 - t\lambda)\delta_{n,m} + t\, \underbrace{\lambda\, \delta_{n,m+1}}_{w_{n,m}} + \mathcal{O}(t^2) \end{aligned}$$

Beispiel Radioaktiver Zerfall

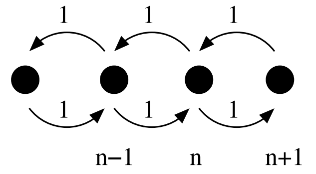


Sei $n \geq 0$, $r(n) = \gamma n$, $g(n) = 0$, $F(z,0) = z^{n_0}$. Dann gilt:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} F(z,t) &= \gamma(\frac{1}{z} - 1)\, z\, \frac{\partial}{\partial z}\, F(z,t) \\ F(z,t) &= [1 + (z-1)\, e^{-\gamma t}]^{n_0} \\ &= \sum_{n=0}^{n_0} \binom{n_0}{n} e^{-n\gamma t} (1 - e^{-\gamma t})^{n_0 - n}\, z^n \end{aligned}$$

$$\boxed{P_n(t) = \binom{n_0}{n} e^{-n\gamma t}(1-e^{-\gamma t})^{n_0-n}} \tag{4.24}$$

Beispiel Random Walk



(in kontinuierlicher Zeit); sei $n \geq 0$, $r(n) = g(n) = 1$ (symmetrischer Random Walk), $P_n(0) = \delta_{n,0}$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t}F(z,t) &= (z+\frac{1}{z}-2)\,F(z,t), \qquad F(z,0)=1 \\
F(z,t) &= e^{(z+\frac{1}{z}-2)t} \\
&= e^{-2\,t} \underbrace{\sum_{k,l=0}^{\infty} \frac{t^{k+l}}{k!\,l!}\, z^{k-l}}_{\sum_{n=0}^{\infty} z^n \underbrace{\left(\sum_l \frac{t^{2l+n}}{l!\,(l+n)!}\right)}_{I_n(t)}}
\end{aligned}$$

$$\boxed{P_n(t) = e^{-2t}\, I_n(2t)} \tag{4.25}$$

Eigenschaft (der modifizierten Besselfunktion $I_n(x)$):

$$\begin{aligned}
I_n(x) &= I_{-n}(x) \\
I_n(x) &\to \frac{1}{\sqrt{2\pi x}}\, e^x\,(1+\mathcal{O}(\frac{1}{x})) \text{ für } x\to\infty
\end{aligned}$$

Die Momente ergeben sich hier zu: $\langle n\rangle(t) = 0$ bzw. $\langle\langle n^2\rangle\rangle(t) = 2t$. Weiterhin ist das asymptotische Verhalten ($t, n\to\infty$, n^2/t fest) gegeben durch:

$$P_n(t) \to \frac{1}{\sqrt{4\pi t}} \exp(-\frac{n^2}{4t})$$

Im Falle eines asymmetrischen Random Walk ($r(n) = \alpha$, $g(n) = \beta$) erhält man eine Diffusion mit Drift.

Allgemein erhalten wir für $\dot{P}_n = r_{n+1}P_{n+1} + g_{n-1}P_{n-1} - (r_n + g_n)P_n$ die Eigenschaften:

$$\frac{d}{dt}\langle n\rangle = -\langle r_n\rangle + \langle g_n\rangle \tag{4.26}$$

$$\frac{d}{dt}\langle n^2\rangle = 2\langle n\,(g_n - r_n)\rangle + \langle g_n + r_n\rangle \tag{4.27}$$

Betrachte beispielsweise das Populationswachstum: $r_n = \alpha n$, $g_n = \beta n$. Dann gilt

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle n\rangle &= (\beta-\alpha)\,\langle n\rangle \qquad \text{(Malthus-Gesetz)}\\ \frac{d}{dt}\langle n^2\rangle &= 2(\beta-\alpha)\,\langle n^2\rangle + (\beta+\alpha)\langle n\rangle\end{aligned}$$

Stationäre Lösung

Sei J der Gesamt-Wahrscheinlichkeits-Fluß von n nach $n-1$:

$$r_n P_n^s - g_{n-1}P_{n-1}^s = J$$

(J unabhängig von n)

a) $n = 0, 1, \ldots, N \rightsquigarrow J = 0 \Rightarrow r_n p_n^s = g_{n-1}P_{n-1}^s$

$$\boxed{P_n^s = \frac{g_{n-1}\,g_{n-2}\cdots g_1\,g_0}{r_n\,r_{n-1}\ldots r_2\,r_1}\,P_0^s} \tag{4.28}$$

b) $n = 0, 1, 2, \ldots$ analog

c) falls $n \leq 0$

$$P_n^s = \frac{r_{n+1}\,r_{n+2}\cdots r_{-1}\,r_0}{g_n\,g_{n+1}\cdots g_{-2}\,g_{-1}}\,P_0^s$$

Aber: Es existieren Situationen mit $J \neq 0$ (z.B. asymmetrischer Random Walk $\to$ konstanter Fluss von $-\infty$ nach ∞). $\Rightarrow$ Lösung hängt parametrisch von J ab.

Beispiel

$n \geq 0$, $g(n) = \lambda$, $r(n) = \mu$ für $n > 0$ und $\lambda < \mu$
(Kunden-Warteschlange, $\lambda dt \to$ neuer Kunde, $\mu dt \to$ Bedienung); es folgt mit (4.28)

$$P_n^s = \left(\frac{\lambda}{\mu}\right)^n P_0^s$$

Aus der Normierungsbedingung $\sum_n P_n^s = 1$ ergibt sich $P_0^s = 1 - \frac{\lambda}{\mu}$ und somit ($n \geq 0$)

$$P_n^s = \left(\frac{\lambda}{\mu}\right)^n \left(1 - \frac{\lambda}{\mu}\right)$$

Natürliche Randbedingungen

Die Übergangsraten sind häufig keine beliebige Zahlen, sondern analytische Funktionen des Gitterplatzes, die sich aus dem physikalischen Prozess ergeben. In diesen Fällen kommt den Rändern eine besondere Bedeutung zu, d.h. sie müssen separat angegeben werden. Man gibt dann die Master-Gleichung in der Form

$$\dot{P}_n = r(n+1)P_{n+1} + g(n-1)P_{n-1} - \{r(n) + g(n)\}P_n \tag{4.29}$$

für $n = 1, 2, \ldots, N-1$ und

$$\begin{aligned} \dot{P}_0 &= r(1)P_1 - g(0)P_0 \text{ sowie} && (4.30) \\ \dot{P}_N &= g(N-1)P_{N-1} - r(N)P_N && (4.31) \end{aligned}$$

an.

Bemerkung: Es kann vorkommen, dass nicht nur die Randsites $n = 0$ bzw. $n = N$ ausgezeichnet sind, sondern auch weitere (z.B. bei ungeordneten Systemen). Diese müssen dann analog behandelt werden.

Die Randbedingungen können den Charakter des Prozesses wesentlich beeinflussen und spielen bei der Lösung eine wesentliche Rolle. Ein besonders *einfacher Fall von Rändern* sind die sogenannten **natürlichen Randbedingungen**, bei denen

- (4.29) bis hin zu $n = 1$ gültig ist, so dass nur (4.30) spezifiziert werden muss
- und $r(0) = 0$ gilt.

Ein solches System kann nach folgendem Schema gelöst werden: Wir erklären die Gleichung (4.29) als im gesamten Raumbereich $-\infty < n < \infty$ gültig. Dann betrachten wir aber nur solche Lösungen, die mit den Anfangsbedingungen $P_n(0) = 0$ für $(n < 0)$ kompatibel sind. Dies garantiert auch, dass die Lösungen für $t > 0$ mit den Randbedingungen vertrräglich sind, da es wegen $r(0) = 0$ keinen Wahrscheinlichkeitsfluss zu Sites $n < 0$ gibt.

Lösung eines linearen Prozesses und die Methode der Charakteristiken

Wir betrachten den linearen Prozess

$$\dot{P}_n = a\left[(n+1+r)\,P_{n+1} - (r+n)\,P_n\right] \tag{4.32}$$
$$+b\left[(n-1+g)\,P_{n-1} - (n+g)\,P_n\right] \tag{4.33}$$

- Wir erweitern den Gültigkeitsbereich auf $-\infty < n < \infty$
- multiplizieren mit z^n und summieren über n

$$\begin{aligned}\frac{\partial F(z,t)}{\partial t} &= a\sum(z^{n-1} - z^n)(r+n)\,P_n + b\sum(z^{n+1} - z^n)(g+n)\,P_n \\ &= (1-z)(a-bz)\frac{\partial F}{\partial z} + (1-z)(\frac{ar}{z} - bg)\,F(z,t)\end{aligned}$$

Lösung der linearen partiellen DGL durch die Methode der Charakteristiken.

Künstliche Randbedingungen

Künstliche Randbedingungen sind solche, bei denen die analytischen Funktionen $g(n)$ und $r(n)$ nicht an den Rändern fortgesetzt werden können. Hier gibt es unendlich viele Möglichkeiten, wir betrachten aber nur sogenannte "reine" Randbedingungen, d.h. solche Gleichungen, bei denen nur **ein Randsite** einer besonderen Gleichung bedarf.

Weiterhin unterscheidet man:

$$\left.\begin{array}{c}\text{reflektierende}\\ \text{absorbierende}\end{array}\right\}\text{Ränder}\left\{\begin{array}{c}\text{mit}\\ \text{ohne}\end{array}\right\}\begin{array}{c}\text{Erhaltung der}\\ \text{Wahrscheinlichkeit}\end{array}$$

Beispiel für absorbierende Ränder

$$\begin{aligned}\dot{P}_n &= P_{n+1} + P_{n-1} - 2P_n \\ \dot{P}_0 &= P_1 - 2P_0\end{aligned}$$

Damit ist der Platz 0 ein reiner künstlicher Rand.

Die Gesamtwahrscheinlichkeit ist **nicht** erhalten, denn

$$\frac{d}{dt}\sum_{n=0}^{\infty} P_n = -P_0$$

Interpretation

Z.B. Ensemble von Teilchen, die am Platz 0 absorbiert werden.
Formal kann dies durch die Einführung eines "Arrest"-Sites (Index $\star$) gelöst werden: $\dot{P}_\star = \frac{d}{dt}(1 - \sum_{n=0}^{\infty} P_n) = P_0$

Dies spielt jedoch für die Lösung keine Rolle, da das System auch ohne den Arrest-Site vollständig definiert ist.

Lösung von Systemen mit künstlichen Rändern

i) *Die Spiegelmethode*
   Wir lösen die Master-Gleichung des **unbeschränkten** Prozesses mit der Anfangsbedingung

$$P_n(0) = \delta_{n,m} - \delta_{n,-m}$$

   Dann gehorcht die Lösung für $n > 1$ der Master-Gleichung

$$\begin{aligned} \dot{P}_n &= P_{n+1} + P_{n-1} - 2P_n \\ \dot{P}_1 &= P_2 - 2P_1 \end{aligned}$$

   (da $P_0(0) = 0$) $\rightsquigarrow$ absorbierender Rand bei $n = 1$; also:

$$\begin{aligned} P_n(t) &= e^{-2t}\,[S(n,m) - S(n,-m)] \qquad \text{mit} \\ S(n,m) &= \sum_l \frac{t^{2l+(n-m)}}{(l+n-m)!\,l!}, \end{aligned}$$

   wobei l so gewählt wird, dass $l \geq 0$ und $n + l - m \geq 0$.

   Für einen **reflektierenden** Rand wählt man entsprechend die Anfangsbedingung: $P_n(0) = \delta_{n,m} + \delta_{n,-m-1}$.

ii) *Künstliche Ränder und Normalmoden*
   Die Methode der Normalmoden ist im Prinzip auf alle Typen von künstlichen Rändern anwendbar.

   Allgemeine Form der Lösung:

$$P_n(t) = \Phi_n\, e^{-2t}$$

mit $t > 0, t$ reell, wobei Φ_n ein Eigenvektor der Master-Gleichung sein muss.

Wir diskutieren diese Lösungsmethode nun am Beispiel der Diffusions-kontrollierten chemischen Reaktion

$$\begin{aligned}
\dot{P}_n &= P_{n+1} + P_{n-1} - 2P_n \,, \; (n \geq 2) \\
\dot{P}_1 &= P_2 + \gamma P_0 - 2P_1 \\
\dot{P}_0 &= P_1 - \gamma P_0
\end{aligned}$$

Hierbei beschreibt die erste Gleichung die Diffusion von A im Lösungsmittel und die beiden verbleibenden die Bildung und Dissoziation des Moleküls AB am Site 0.

Da Φ_n Eigenvektor der Master-Gleichung ist, gilt:

$$\begin{aligned}
\rightsquigarrow (2-\lambda)\Phi_n &= \Phi_{n+1} + \Phi_{n-1} \; (n \geq 2) && (4.34) \\
(2-\lambda)\Phi_1 &= \Phi_2 + \gamma\Phi_0 && (4.35) \\
(\gamma-\lambda)\Phi_0 &= \Phi_1 && (4.36)
\end{aligned}$$

Die Lösung von (4.36) finden wir mit dem Ansatz $\Phi_n = z^n$
Anpassung an den Rand etc. führt auf die explizite Lösung (Übungen)

Einschub: Lösung von partiellen DGLen 1ter Ordnung mit der Methode der Charakteristiken

Wir betrachten ein DGL der Form

$$A(x,y)\frac{\partial u}{\partial x} + B(x,y)\frac{\partial u}{\partial y} + C(x,y)\,u = 0 \qquad (4.37)$$

wobei wir uns zunächst auf den Fall beschränken, in dem $C(x,y) = 0$ gilt, also

$$A(x,y)\frac{\partial u}{\partial x} + B(x,y)\frac{\partial u}{\partial y} = 0. \qquad (4.38)$$

Eine Lösung dieser DGL werden wir nicht finden, ohne eine Randbedingung festzulegen. Dies geschieht dadurch, dass wir eine Kurve γ in der xy-Ebene festlegen, welche durch die Variable s parametrisiert werde, und schließlich die Funktionswerte $u(x,y)$ für $(x,y) \in \gamma$ spezifizieren. D.h. es muss gelten:

$$u(x_0,y_0) = \Phi(s_0), \qquad x_0 = x(s_0), y_0 = y(s_0)$$

Wir nehmen nun an, dass es Funktionen $p(x,y)$ und f gibt, so dass $u(x,y) = f(p)$ gilt. Damit transformiert sich (4.38) auf

$$\left[A(x,y)\frac{\partial p}{\partial x} + B(x,y)\frac{\partial p}{\partial y}\right]\frac{d\,f(p)}{d\,p} = 0 \qquad (4.39)$$

Weiter nehmen wir an, dass $p(x,y)$ konstant sei. Eine Erklärung für diese Annahme skizzieren wir weiter unten. Somit gilt nun also weiter:

$$\frac{\partial p}{\partial x}dx + \frac{\partial p}{\partial y}dy = 0. \tag{4.40}$$

(4.39) und (4.40) bilden nun ein homogenes System von Gleichungen, für das wir eine nicht-triviale Lösung finden, wenn die Koeffizienten-Determinante verschwindet, also:

$$\frac{d\,y}{d\,x} = \frac{B(x,y)}{A(x,y)}. \tag{4.41}$$

Wenn wir nun diesen Ausdruck integrieren, kennen wir die Form von p, da die dabei auftretende Integrationkonstante mit p identisch sein muss.

Entlang des Randes gilt, wie wir oben festgelegt haben, $u(x,y) = \Phi(s)$ und wegen $x = x(s)$ sowie $y = y(s)$ ist zusätzlich $p = p(x,y) = \psi(s)$. Gewährleistet die Randbedingung nun, dass

$$\Phi(s) = \chi(\psi(s))$$

gilt, so ist $u(x,y)$ gegeben durch

$$u(x,y) = \chi(\psi^{-1}(p)) = \chi(\psi^{-1}(x,y))$$

Beispiel

Wir betrachten die DGL

$$x\frac{\partial u}{\partial x} - 2y\frac{\partial u}{\partial y} = 0.$$

Es ist also $A(x,y) = x$ und $B(x,y) = -2y$. Gleichung (4.40) liefert dann:

$$\frac{dx}{x} = \frac{dy}{-2y} \rightsquigarrow x = p\,y^{-\frac{1}{2}} \rightsquigarrow p = x\,y^{\frac{1}{2}}$$

Der Rand γ sei durch $x(s) = 1$ und $y(s) = s$ festgelegt, so dass $p = \psi(s) = s^{\frac{1}{2}}$, und weiter gelte

$$u(1,s) = \Phi(s) = 2s + 1.$$

Damit ist $\chi = 2 \cdot \psi^2(s) + 1$ und damit

$$u(x,y) = 2 \cdot p^2(x,y) + 1 = 2 \cdot x^2 y + 1$$

Wenn wir noch einmal die Parametrisierung des Randes betrachten, so sehen wir, dass wir durch $x = x(s)$ und $y = y(s)$ folgende DGL finden:

$$\frac{d\,u}{ds} = \frac{d\,\Phi}{ds} = \frac{\partial u}{\partial x}\frac{d\,x}{d\,s} + \frac{\partial u}{\partial y}\frac{d\,y}{d\,s} \tag{4.42}$$

Diese zusammen mit (4.38) stellt ein *inhomogenes* Gleichungssystem dar, welches dann keine Lösung besitzt, wenn

$$\begin{vmatrix} \frac{dx}{ds} & \frac{dy}{ds} \\ A(x,y) & B(x,y) \end{vmatrix}$$

verschwindet. Das Verschwinden dieser Determinante heißt nun aber, dass

$$B(x,y)\frac{dx}{ds} - A(x,y)\frac{dy}{ds} = 0$$

Diese Gleichung stimmt nun gerade mit (4.41) überein und liefert ein Richtungsfeld, entlang dessen Kurven eine Lösung von (4.38) nicht existiert. p tritt hier also als Scharparameter des Feldes auf. Dieses wird von Kurven gebildet, die man als **Charakteristiken** bezeichnet. Um eine Lösung $u(x,y)$ zu finden, müssen wir also gewährleisten, dass der von uns gewählte Rand γ nirgendwo Tangente einer solchen Charakteristik ist. Da $\Phi(s)$ keine Konstante ist, können wir davon ausgehen, dass diese Forderung erfüllt ist, wenn $\psi(s)$ und damit p entlang des Randes nicht konstant ist. Wir wählen also $p = konstant$, um den „verbotenen“ Verlauf des Randes zu finden. Der Rand selbst besteht schließlich aus einer Kurve, entlang der sich der Scharparameter dieser „verbotenen“ Kurven ändert. Somit kann γ nirgendwo Tangente einer Charakteristik sein.

Inhomogene PDGL

Wir betrachten nun also den allgemeineren Fall

$$A(x,y)\frac{\partial u}{\partial x} + B(x,y)\frac{\partial u}{\partial y} + C(x,y)\,u = 0 \tag{4.43}$$

mit $C(x,y) \neq 0$. Hier wählen wir den Ansatz

$$u(x,y) = h(x,y) \cdot f(p)$$

Dies führt auf

$$\begin{aligned} &\left(A(x,y)\frac{\partial h}{\partial x} + B(x,y)\frac{\partial h}{\partial y} - C(x,y)\,h\right) f(p) \\ &\quad + \left(A(x,y)\frac{\partial p}{\partial x} + B(x,y)\frac{\partial p}{\partial y}\right) h \frac{d\,f(p)}{dp} = 0 \end{aligned} \tag{4.44}$$

D.h. ist h irgendeine (möglichst einfache Lösung) von (4.43), so verbleibt der uns bereits aus (4.39) bekannte Ausdruck zur Bestimmung von $p(x,y)$.

Kapitel 5

Fokker-Planck Gleichung

Die Fokker-Planck Gleichung ist eine **spezielle** Master-Gleichung, in der, ausgehend von $\underline{\dot{P}}(t) = \mathbb{W}\underline{P}(t)$ (4.10), $\mathbb{W}$ ein Differential-Operator zweiter Ordnung ist.

$$\boxed{\frac{\partial P(y,t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial y} A(y) P + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial y} B(y) P} \tag{5.1}$$

wobei $A(y)P$ der Beschreibung von Transport, Korrelation bzw. Drift und $B(y)P$ der von Diffusion oder auch Fluktuation dient. Dabei fordert man $y \in [-\infty, +\infty]$, $A(y), B(y)$ reell und differenzierbar sowie $B(y) > 0$. (5.1) können wir aufspalten in

$$\begin{array}{lrcl} \text{Kontinuitätsgleichung} & \dfrac{\partial P(y,t)}{\partial t} & = & -\dfrac{\partial J(y,t)}{\partial y} \\ \text{Konstitutive Gleichung} & J(y,t) & = & A(y)P - \dfrac{1}{2}\dfrac{\partial}{\partial y} B(y) P \end{array}$$

Stationäre Lösung der Fokker-Planck Gleichung im Falle, dass $P^s(y)$ integrabel (i.e. **normierbar**) ist

$$\boxed{P^s(y) = \frac{\text{const.}}{B(y)} \exp\left\{ 2 \int_0^y \frac{A(y')}{B(y')}\, dy' \right\}} \tag{5.2}$$

Falls $P_1(y, t=0) = P^s(y)$, ist der durch die Fokker-Planck Gleichung beschriebene Markov-Prozess **stationär**.

Notation

Da die Fokker-Planck Gleichung linear in P ist, überträgt man diese Bezeichnung auf die Funktionen $A(y)$ und $B(y)$. Man spricht also von einer **linearen** FP-Gleichung $\Leftrightarrow$

$$\begin{aligned} A(y) &= A_0 + A_1 y \\ B(y) &= B_0 \end{aligned} \tag{5.3}$$

Für $A_1 < 0$ ist $P^s(y)$ **Gaußisch**

$\Rightarrow$ Gemäß Doob's Theorem ist der **stationäre Markov**-Prozess, definiert durch die **lineare** Fokker-Planck Gleichung, der **Ornstein-Uhlenbeck-Prozess**!

Sei nun $P(y, t|y_0, t_0)$ die Lösung der Fokker-Planck Gleichung; setzt man $t = t_0 + \Delta t$, $y = y_0 + \Delta y$, so gilt für $\Delta t \to 0$:

$$\frac{\langle \Delta y \rangle}{\Delta t} = A(y_0), \; \frac{\langle (\Delta y)^2 \rangle}{\Delta t} = B(y_0), \; \frac{\langle (\Delta y)^\nu \rangle}{\Delta t} = 0 \tag{5.4}$$

Die so gewonnene Kenntnis von $A(y)$ und $B(y)$ ermöglicht es uns, in einem physikalischen System die Fokker-Planck Gleichung zu bestimmen.

Herleitung der Fokker-Planck Gleichung

Betrachte die allgemeine Master-Gleichung (4.4) mit Übergangswahrscheinlichkeit $W(y|y')$. Sei $r = y - y'$ die Größe des "Sprungs" und $W(y|y') = W(y'; r)$ (somit gilt auch $W(y'|y) = W(y; r)$). Wir erhalten dann:

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(y,t)}{\partial t} &= \int W(y-r;r) P(y-r,t) dr - P(y,t) \int W(y;-r)\, dr \\ &= \int \left\{ W(y;r)P(y,t) + \sum_{\nu=1}^{\infty} \frac{(-1)^\nu}{\nu!} r^\nu \frac{\partial^\nu}{\partial' y^\nu} (W(y;r)P(y,t)) \right\} dr \\ & \quad -P(y,t) \int W(y;r)\, dr \end{aligned} \tag{5.5}$$

Mit den Sprung-Momenten $a_\nu(y) = \int r^\nu w(y;r)\, dr$ (4.12) bedeutet dies

$$\boxed{\frac{\partial P(y,t)}{\partial t} = \sum_{\nu=1}^{\infty} \frac{(-1)^\nu}{\nu!} \left(\frac{\partial^\nu}{\partial y^\nu} \right) \{a_\nu(y) P(y,t)\}} \tag{5.6}$$

Kramers-Moyal-Entwicklung

Annahme

1.) Nur **kleine** Sprünge r, d.h. $W(y', r)$ ist scharf gepeakt bzgl. r, und $W(y', r)$ variiert langsam mit y':

$$\begin{aligned} &W(y', r) \approx 0 && \text{falls } |r| > \delta \\ &W(y' + \Delta y; r) \approx W(y', r) && \text{falls } |\Delta y| < \delta \end{aligned}$$

2.) $P(y, t)$ variiert langsam mit y

$\Rightarrow$ Dann können wir die KM-Entwicklung nach dem zweitem Glied abbrechen und verbleiben mit

$$\frac{\partial P(y,t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial y}\{a_1(y)P\} + \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial y^2}\{a_2(y)P\} \tag{5.7}$$

Fokker-Planck Gleichung

Brownsche Bewegung

Auf einer grober Zeitskala stellt die Orts-Koordinate X eines Brownschen Teilchens einen Markov-Prozess dar, d.h das Teilchen springt auf der x-Achse zufällig vorwärts und rückwärts, wobei die Sprünge beliebige Länge haben, die Wahrscheinlichkeit für große Sprünge jedoch rasch abnimmt.

Die Sprünge seien beliebig und unabhängig von der Startposition:

$$a_1 = \frac{\langle \Delta x \rangle_x}{\Delta t} = 0, \qquad a_2 = \frac{\langle (\Delta x)^2 \rangle_x}{\Delta t} = \text{const.} \tag{5.8}$$

$\Rightarrow$

$$\boxed{\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = \frac{a_2}{2}\frac{\partial^2 P(x,t)}{\partial x^2}} \tag{5.9}$$

Dies stellt eine *Diffusionsgleichung* dar, mit der phänomenologischen Diffusionskonstante $D = \frac{a_2}{2}$

$$\boxed{D = \frac{\langle (\Delta x)^2 \rangle}{2\Delta t}} \tag{5.10}$$

Diese Gleichung, welche die makroskopische Konstante D mit den mikroskopischen Sprüngen verbindet, bezeichnet man als *Einstein-Relation*

Die Lösung der Diffusionsgleichung für $P(x,t=0)=\delta(x)$ ist gegeben durch

$$\boxed{P(x,t)=\frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}}\exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right)} \tag{5.11}$$

mit $\sqrt{\langle x^2(t)\rangle}=\sqrt{2Dt}$

An dieser Stelle weisen wir noch einmal darauf hin, was unter $P(x,t)$ zu verstehen ist:

$$P(x,t)=P_{1|1}(x,t|x=0,t=0)\ !!$$

Mit (5.11) ist der durch x_t (ein Ensemble von Brownschen Teilchen) beschriebene Markov-Prozess also der **Wiener-Prozess**.

Betrachte nun ein Brownsches Teilchen im konstanten Kraftfeld z.B. Gravitationsfeld $M\,g$ in Richtung $-X$. Sei $M\,\gamma$ die Reibung des Teilchens mit der umgebender Flüssigkeit. Damit ergibt sich eine mittlere Drift-Geschwindigkeit $-g/\gamma$, welche der ursprünglicher Brownschen Bewegung überlagert ist.

$$a_1=\frac{\langle\Delta X\rangle_x}{\Delta t}=-\frac{g}{\gamma},\quad a_2=2D$$

Die Fokker-Planck Gleichung lautet dann:

$$\boxed{\frac{\partial P(x,t)}{\partial t}=\frac{g}{\gamma}\frac{\partial P}{\partial x}+D\,\frac{\partial^2 P}{\partial x^2}} \tag{5.12}$$

Lösung mittels Randbedingung $J(x,t)=0$ für $x=0$ $((J=\frac{g}{\gamma}P+D\frac{\partial P}{\partial x}))$, für $x>0$ folgt:

$$P^s(x)=\text{ const. }\exp\left(-\frac{gx}{\gamma D}\right)$$

Andererseits sollte die stationäre Verteilung der barometrischen Höhenformel

$$\boxed{P^{eq}(x)=\text{ const. }\exp\left(-\frac{Mg}{k_BT}\,x\right)} \tag{5.13}$$

genügen.

Durch Vergleich erhalten wir die *2. Einstein-Relation*

$$\boxed{D = \frac{k_B T}{M\gamma}} \tag{5.14}$$

und somit

$$\boxed{\frac{\langle(\Delta X)^2\rangle}{\Delta t} = \frac{2k_B T}{M\gamma}} \tag{5.15}$$

Diese **Fluktuations-Dissipations-Relation** verknüpft den Dämpfungs-Koeffizient γ mit dem mittlerem Schwankungsquadrat der Fluktuation.

Das Rayleigh-Teilchen

Das Rayleigh-Teilchen entspricht dem Brownschen Teilchen mit dem Unterschied, dass man sich auf einer **feineren** Zeitskala bewegt.

Δt sei dabei **klein** gegenüber der Zeitskala auf der die **Geschwindigkeit** v relaxiert, aber immer noch groß gegenüber der Dauer der Kollision selbst.

1-dimensional: (Rayleigh-Kolben)

$$\dot{V} = -\gamma V$$

(Makroskopisches Dämpfungsgesetz., linear, V nicht zu groß)

$$\begin{aligned} a_1(V) &= \frac{\langle\Delta V\rangle_V}{\Delta t} = -\gamma V \\ a_2(V) &= a_{2,0} + (V^2) \approx a_{2,0} > 0\,! \end{aligned}$$

Wir erhalten die Fokker-Planck Gleichung

$$\boxed{\frac{\partial P(V,t)}{\partial t} = \gamma \frac{\partial}{\partial V} VP + \frac{a_{2,0}}{2} \frac{\partial^2 P}{\partial V^2}} \tag{5.16}$$

Die statistischen Mechanik sagt nun über den Gleichgewichtszustand, dass:

$$P^{eq}(V) = \left(\frac{M}{2\pi K_B T}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{M}{2K_B T} V^2\right)$$

Der Vergleich liefert hier

$$\boxed{\frac{a_{2,0}}{2} = \gamma \frac{K_B T}{M}} \tag{5.17}$$

Dies führt auf die Rayleigh-Gleichung (für die Wahrscheinlichkeitsdichte der Geschwindigkeit eines schweren Teilchens):

$$\boxed{\frac{\partial P(V,t)}{\partial t} = \gamma \left\{ \frac{\partial}{\partial V} VP + \frac{KT}{M} \frac{\partial^2 P}{\partial V^2} \right\}} \tag{5.18}$$

Eine solche Gleichung erfüllt auch die Übergangswahrscheinlichkeit $P_{1|1}$ des **Ornstein-Uhlenbeck-Prozesses**.

Es folgt aus (5.18): (mit $V(0) = V_0$)

$$\begin{aligned} \langle V(t) \rangle_{V_0} &= V_0 e^{-\gamma t} && (5.19) \\ \langle V(t)^2 \rangle_{V_0} &= V_0^2 \, e^{-2\gamma t} + \frac{KT}{M} (1 - e^{-2\gamma t}) && (5.20) \\ \langle \langle V(t) V(t+\tau) \rangle \rangle^{eq} &= \frac{KT}{M} \, e^{-\gamma \tau} && (5.21) \end{aligned}$$

Lösung von (5.18) ist:

$$P(V,t) = \left(\frac{2\pi k_B T}{M} (1 - e^{-2\gamma t}) \right)^{-1/2} \exp \left\{ -\frac{M}{k_B T} \frac{(V - V_0 \, e^{-\gamma t})^2}{1 - e^{-2\gamma t}} \right\} \tag{5.22}$$

Es sollte nun möglich sein, von der feineren Zeitskala für das Rayleigh-Teilchen zur gröberen für das Brownsche Teilchen überzugehen. Wir betrachten dazu ein Ensemble unabhängiger Brownscher Teilchen, welche zur Zeit $t = 0$ durch $X(t = 0) = 0$ beschrieben werden. Die Geschwindigkeiten der Brownschen Teilchen sei gemäß $P^{eq}(V)$ gegeben und $V(t)$ sei Ornstein-Uhlenbeck-Prozess. Betrachte nun

$$X(t) = \int_0^t dt' \, V(t')$$

X ist Gaußisch, da es eine Summe von Gaußischen Variablen darstellt.

$$\rightsquigarrow \langle X(t) \rangle = \int_0^t dt' \, V(t') = 0 \qquad (V_0 = 0)$$

Es sei nun $0 < t_1 < t_2$

$$
\begin{aligned}
\langle X(t_1)X(t_2)\rangle &= \int\limits_0^{t_1} dt' \int\limits_0^{t_2} dt'' \, \langle V(t')V(t'')\rangle \\
&= \langle V^2\rangle \int\limits_0^{t_1} dt' \int\limits_0^{t_2} dt'' \, e^{-\gamma|t'-t''|} \\
&= \frac{KT}{M}\left[\frac{2}{\gamma}\, t_1 - \frac{1}{\gamma^2} + \frac{1}{\gamma^2}\left\{e^{-\gamma t_1} + e^{-\gamma t_2} - e^{-\gamma(t_2-t_1)}\right.\right]
\end{aligned}
$$

$X(t)$ ist damit (als Gaußischer Prozess) vollständig spezifiziert, **aber** ist offensichtlich **nicht** der Wiener-Prozess. Letztlich ist $X(t)$ nicht einmal Markovsch, da wir uns noch immer auf der Zeitskala des Rayleigh-Teilchens bewegen.

Dies ändert sich beim Übergang zu $t \gg \frac{1}{\gamma}$ und $t_1 - t_2 \gg \frac{1}{\gamma}$.

Kapitel 6

Analyse statistischer Daten

Schätzung der Maßzahlen einer Zufallsgröße

Sei im folgenden X eine Zufallsvariable. Wir stellen uns nun vor, dass wir einen Datensatz bezüglich seiner Wahrscheinlichkeitsverteilung (Verteilungsfunktion) charkterisieren möchten. Dazu nehmen wir an, dass die vorliegenden Daten durch N-malige Durchführung eines Zufallsexperimentes bestimmt worden sind. Durch diese „Stichprobe“ können wir nun Rückschlüsse auf die Verteilung der Zufallsvariable X ziehen.

Betrachten wir zunächst den **Mittelwert**:

$$\bar{X} = \frac{1}{N} \sum_{i=0}^{N} X_i \tag{6.1}$$

Da wir die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Variable X nicht kennen, stellen wir uns die Frage, ob die in (6.1) definierte Größe eine sinnvolle Wahl zur Schätzung des Mittelwertes der Verteilung darstellt. Dies ist dann der Fall, wenn *der Erwartungswert von $\bar{X}$ mit dem Mittelwert μ der Verteilung übereinstimmt.* Diesen können wir i.a. nicht wirklich bestimmen, da wir dazu den gesamten Wahrscheinlichkeitsraum durch unsere Experimente abdecken müßten, doch können wir darüber entscheiden, ob wir mittels $\bar{X}$ eine gute Schätzung von μ erhalten.

Für den *Erwartungswert einer Summe zweier Zufallsgrößen X_1 und X_2* gilt nun:

$$\langle \alpha X_1 + \beta X_2 \rangle = \alpha \langle X_1 \rangle + \beta \langle X_2 \rangle$$

und somit ist

$$\boxed{\langle \bar{X} \rangle = \frac{1}{N} N \langle X_i \rangle = \mu} \tag{6.2}$$

Nehmen wir nun an, dass wir den Mittelwert μ im folgenden kennen. Dann können wir fragen, ob

$$\frac{1}{N}\sum_{i=0}^{N}(X_i-\mu)^2$$

eine sinnvolle Schätzgröße für die Varianz der Verteilung darstellt. Betrachten wir also wieder den Erwartungswert dieser Größe ($\langle X\rangle=\mu$):

$$\begin{aligned}\langle\frac{1}{N}\sum_{i=0}^{N}(X_i-\mu)^2\rangle &= \frac{1}{N}\langle\sum_{i=0}^{N}(X_i^2-2X_i\mu+\mu^2)\rangle\\ &= \frac{1}{N}(N\langle X^2\rangle-N2\langle X\rangle\mu+N\mu^2)\\ &= \langle X^2\rangle-\langle X\rangle^2=\sigma^2\end{aligned}$$

Würden wir also μ kennen, so wäre die oben definierte Größe die korrekte Schätzgröße für die Varianz der Verteilung. Nun ist es jedoch so, dass wir *den Mittelwert μ tatsächlich nicht kennen*, sondern diesen durch $\bar{X}$ nur annähern können. Ersetzen wir daher μ durch $\bar{X}$, wobei wir bedenken, dass für den *Erwartungswert eines Produkts zweier Zufallsgrößen X_1 und X_2* gilt

$$\langle X_1\cdot X_2\rangle=\langle X_1\rangle\cdot\langle X_2\rangle$$

Daraus folgt:

$$\begin{aligned}\langle\frac{1}{N}\sum_{i=0}^{N}(X_i-\bar{X})^2\rangle &= \frac{1}{N}\langle\sum_{i=0}^{N}(X_i^2-2X_i\bar{X}+\bar{X}^2)\rangle\\
&= \frac{1}{N}\left(N\langle X^2\rangle-2\sum_{i=0}^{N}\langle X_i\frac{1}{N}\sum_{j=0}^{N}X_j\rangle+\sum_{i=0}^{N}\langle\frac{1}{N}\sum_{j=0}^{N}X_j\cdot\frac{1}{N}\sum_{k=0}^{N}X_k\rangle\right)\\
&= \langle X^2\rangle-\frac{2}{N^2}\sum_{i=0}^{N}\sum_{j=0}^{N}\langle X_iX_j\rangle+\frac{1}{N^3}\sum_{i=0}^{N}\sum_{j=0}^{N}\sum_{k=0}^{N}\langle X_jX_k\rangle\\
&= \langle X^2\rangle-\frac{2}{N^2}\sum_{i=0}^{N}\sum_{j=0}^{N}\langle X_iX_j\rangle+\frac{1}{N^2}\sum_{j=0}^{N}\sum_{k=0}^{N}\langle X_jX_k\rangle\\
&= \langle X^2\rangle-\frac{1}{N^2}\sum_{i=0}^{N}\sum_{j=0}^{N}\langle X_iX_j\rangle\\
&= \langle X^2\rangle-\frac{1}{N^2}(\sum_{i=0}^{N}\langle X_iX_i\rangle+\sum_{\substack{i,j=0\\ i\neq j}}^{N}\langle X_iX_j\rangle)\\
&= \langle X^2\rangle-\frac{1}{N}\langle X^2\rangle-\frac{1}{N^2}N(N-1)\langle X_iX_j\rangle\\
&= \frac{N-1}{N}\left(\langle X^2\rangle-\langle X\rangle^2\right)\end{aligned}$$

D.h. der Erwartungswert dieser Größe stimmt nicht mit der Varianz der Verteilung überein. Dies können wir beheben, indem wir die Summe nicht durch N sondern durch $N-1$ teilen. Daraus folgern wir, dass die **Varianz** der Verteilung geschätzt werden kann durch:

$$\boxed{Var(X_1,\ldots,X_N) = \frac{1}{N-1}\sum_{i=0}^{N}(X_i-\bar{X})^2} \tag{6.3}$$

Größen zur Charakterisierung von Daten

Wenn Datenpunkte um einen Punkt verteilt sind, kann man sie durch einige **Messgrößen**, die mit den Momenten einer Verteilung in Verbindung stehen, charakterisieren:

1) **Mittelwert**

$$\bar{X} = \frac{1}{N}\sum_{\gamma=1}^{N} X_\gamma \tag{6.4}$$

2) **Die Breite der Verteilung**
durch die Varianz

$$\mathrm{Var}(X_1,\ldots,X_N) = \frac{1}{N-1}\sum_{\gamma=1}^{N}(X_\gamma-\bar{X})^2 \tag{6.5}$$

bzw. die Standardabweichung

$$\sigma(X_1,\ldots,X_N) = \sqrt{\mathrm{Var}\,(X_1,\ldots,X_N)} \tag{6.6}$$

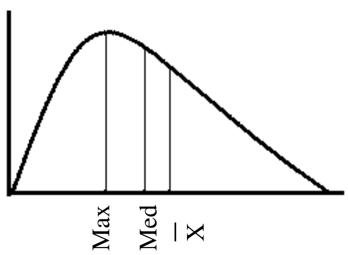
Robuster (numerisch): Die mittlere Abs. Abweichung

$$\mathrm{ADEV}\,(X_1,\ldots,X_N) = \frac{1}{N}\sum_{\gamma=1}^{N}|X_\gamma-\bar{X}| \tag{6.7}$$

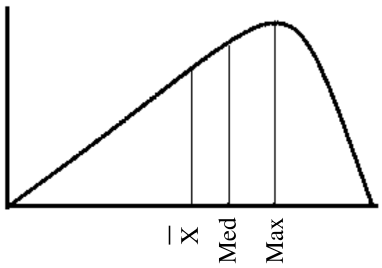
3) **Die Schiefe der Verteilung**

$$\mathrm{Skew}\,(X_1,\ldots,X_N) = \frac{1}{N}\sum_{\gamma=1}^{N}\left[\frac{X_\gamma-\bar{X}}{6}\right]^3 \tag{6.8}$$

Interpretation: Man unterscheidet zwischen rechtsschief ($\bar{X} < Med < Max$) und linksschief ($Max < Med < \bar{X}$)
Vorsicht: Bei endlichen Datensätzen ist Skew (...) immer verschieden von Null, auch wenn die Verteilung symmetrisch ist.
Standardabweichung für N Gaußverteilte Zufallszahlen $\sim \sqrt{6/N}$



linksschief



rechtsschief

Kurtosis oder Exzess

Misst, ob die Verteilung flach oder gepeakt ist (relativ zur Normalverteilung)

$$Kurt(X_1,\ldots,X_N) = \left\{ \frac{1}{N} \sum_{\gamma=1}^{N} \left[\frac{X_\gamma - \bar{X}}{6} \right]^4 \right\} - 3 \tag{6.9}$$

Standardabweichung Gauß: $\sqrt{24/N}$

Haben zwei Verteilungen den gleichen Mittelwert?

Frage: Angenommen zwei Messungen ergeben unterschiedliche Werte, stellt dies dann eine tatsächliche Abweichung dar oder sind die Daten im Rahmen der Messungenauigkeit verträglich?

Beispiel: Student's t-test

Annahme: Zwei Verteilungen haben die gleiche Varianz, aber verschiedene Mittelwerte.

$$S_D = \sqrt{\frac{\sum\limits_{i\in A}(X_i - \bar{X}_A)^2 + \sum\limits_{i\in B}(X_i - \bar{X}_B)^2}{N_A + N_B - 2} \left(\frac{1}{N_A} + \frac{1}{N_B} \right)} \tag{6.10}$$

$N_{A(B)} = \sharp$ der Datenpunkte in Sample $A(B)$.

Signifikanz

$$\boxed{t = \frac{\overline{X}_A - \overline{X}_B}{S_D}} \tag{6.11}$$

$t \approx 0 \rightarrow$ Mittelwerte sind verschieden
$t \approx 1 \rightarrow$ Mittelwerte sind gleich

Signifikanztest für gepaarte Verteilungen

Z.B. Zeugnis zweier Schüler - paarweiser Vergleich der Noten in den einzelnen Fächern

Definition: Die Kovarianz (Korrelationsfaktor) wird zur Untersuchung der Korrelation zwischen zwei verschiedenen zufälligen Größen benutzt

$$Cov(a_A, x_B) = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^{N} (x_{Ai} - \overline{x}_A)(x_{Bi} - \overline{x}_B) \tag{6.12}$$

$$S_D = \left[\frac{\mathrm{Var}\,(x_A) + \mathrm{Var}\,(x_B) - 2C_{OV}(x_A, x_B)}{N} \right]^{\frac{1}{2}} \tag{6.13}$$

$\rightsquigarrow$

$$\boxed{t = \frac{\overline{x}_A - \overline{x}_B}{S_D}} \tag{6.14}$$

Sind zwei Verteilungen gleich?

Verteilungen auf endlichen Intervallen $\rightarrow$ $\mathcal{X}^2$**-Test**: man betrachtet eine Verteilung als gegeben (Test einer Hypothese)

$$\begin{aligned} \mathcal{X}^2 &= \sum_i \frac{(N_i - n_i)^2}{n_i} \\ N_i &= \sharp \text{ von Messwerten im Intervall } i \\ n_i &= \text{vorgegebener Wert} \end{aligned}$$

Interpretation: Ein großer Wert spricht für die Falsifizierung der Hypothese

Beachte: $n_i = N_i = 0$ ist zu verwerfen; $N_i \neq 0$ und $n_i = 0 \Rightarrow \mathcal{X}^2 \rightarrow \infty$

Vergleich von zwei Datensätzen:

$$\mathcal{X}^2 = \sum_i \frac{(R_i - S_i)^2}{R_i + S_i} \tag{6.15}$$

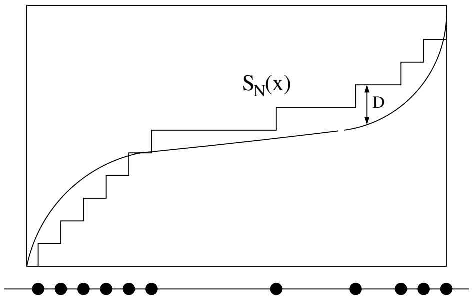
Beachte: Bei den Verteilungen addiert sich die Varianz!

Der Kolmogorov-Smirnov Test

Bei manchen Messungen ist eine Unterteilung in diskrete Intervalle problematisch bzw. nicht natürlich $\rightarrow \mathcal{X}^2$-Test nicht anwendbar.

$\rightarrow$ kumulative Verteilungsfunktion

$$S_N(x) = \text{Anteil der Ereignisse „unterhalb“ von } x$$



$$D = \max_{-\infty < x < \infty} |S_N(x) - p(x)|$$

bzw.

$$D = \max_{-\infty < x < \infty} |S_{N_1}(x) - S_{N_2}(x)|$$

Vorteil der Methode: Invariant gegenüber Skalentransformationen.

Signifikanz:

$$Q_{KS}(\lambda) = 2\sum_{\gamma=1}^{\infty} (-1)^{\gamma-1}\, e^{-2\gamma^2\lambda^2} \tag{6.16}$$

monotone Funktion; Grenzwerte $Q_{KS}(0) = 1; Q_{KS}(\infty) = 0$.

Damit ergibt sich für die Wahrscheinlichkeit, dass es Abweichungen gibt, die größer als das gemessene D sind: Wahrscheinlichkeit ($D >$ beobachtet) $= Q_{KS}([\sqrt{N_c} + 0.12 + 0.11\sqrt{N_c}]D)$ mit:

$$\begin{aligned} N_c &= \sharp \quad \text{der Datenpunkte (1 Datensatz)} \\ &= \frac{N_1 + N_2}{N_1 + N_2} \quad \text{(2 Datensätze)} \end{aligned}$$

Erzeugung von Verteilungen auf dem Computer

Zufallszahlengeneratoren wie der Generator (Linear-Kongruenz-Methode)

[$r_{n+1} = (ar_n + b)$mod m mit $(m, a, b) = (714025, 1366, 150889)$ und Tabelle mit Startwerten]

erzeugen in einem Intervall I gleichverteilte Zahlen ($I = [0, m-1]$). Häufig ist man aber an anderen Verteilungen interessiert $\Rightarrow$ Transformation der Verteilungsfunktion.

(i) Transformationsmethode

Wir betrachten eine **normierte** Verteilung $p(x)$, $x \in [0,1]$,

$$p(x) = \begin{cases} 1 & 0 < x < 1 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

Transformation: mit y bezeichnen wir jene Zufallszahlen, welche der gewünschten Verteilung $\tilde{p}(y)$ folgen. $|...|$ bezeichnet die Funktionaldeterminante oder Jacobische Determinante.

$$\rightsquigarrow \tilde{p}(y) = p(x) \left| \frac{dx}{dy} \right| \tag{6.17}$$

Beispiel: Exponential Verteilung

$$\begin{aligned} y(x) &= -\ln(1-x) \\ \rightsquigarrow \tilde{p}(y)\, dy &= \left| \frac{dx}{dy} \right| dy = e^{-y} dy \end{aligned} \tag{6.18}$$

$\Rightarrow$ Exponentialverteilung

Allgemein: Wir brauchen die Lösung der DGL

$$\frac{dx}{dy} = f(y) \tag{6.19}$$

für beliebige Funktionen mit $\int dy\, f(y) = 1$

$\rightsquigarrow$ Lösung: $x = F(y) = \int\limits_{-\infty}^{y} dy' f(y')$

$\rightsquigarrow y(x) = F^{-1}(x)$

(ii) Rejection-Methode

Die Verteilung $\tilde{p}(y)$ kann nun beliebig kompliziert sein. Wir gehen im weiteren davon aus, dass diese Verteilung beschränkt ist ($\tilde{p}(y) \leq B$) und außerdem

$\int \tilde{p}(y)\, dy = M < \infty$ existiert. Weiter *können* wir einschränkend annehmen, dass $\tilde{p}(y) > 0\ \forall\ y \in [a, b]$. $p(x)$ sei wie oben definiert.

Die einfachste Methode, diese Verteilung von Zufallszahlen zu generieren, besteht nun darin, dass wir zunächst zwei Zufallszahlen gemäß $p(x)$ erzeugen: x_1 und x_2. Die erste transformieren wir auf das Intervall $[a, b]$ durch

$$x_1 \quad \to \quad \tilde{x}_1 = a + (b - a)x_1$$

Da wir angenommen haben, dass $0 \leq \tilde{p}(y)/B \leq 1$, können wir nun mittels x_2 entscheiden, ob wir $\tilde{x}_1$ akzeptieren oder nicht: ist $\tilde{p}(\tilde{x}_1)/B \leq x_2$, so akzeptieren wir $\tilde{x}_1$. Durch dieses Vorgehen reproduzieren wir sukzessive die gewünschte Verteilung $\tilde{p}(y)$.

Diese Herangehensweise kann sehr ineffizient sein, wenn $\tilde{p}(y)$ beispielsweise einen starken Peak besitzt, des weiteren jedoch für große y nur langsam abfällt. Dann wäre fast immer $\tilde{p}(\tilde{x}_1)/B \leq x_2$. In diesem Fall erzeugen wir uns mit Hilfe der Transformationsmethode daher zunächst eine Verteilung $f(y)$, welche die gesuchte $\tilde{p}(y)$ „einhüllt“ und welche wir problemlos integrieren können. Damit ist $f(y)$ i.a. nicht mehr normiert - $\int f(y)\, dy = c$, so dass wir x_1 wieder transformieren müssen

$$x_1 \quad \to \quad \tilde{x}_1 = c\, x_1$$

Den funktionalen Zusammenhang zwischen y und x, welchen wir durch Transformation von $p(x)$ auf $f(y)$ gefunden haben

$$x - 0 = \int_a^y f(y')\, dy' = F(y)$$

nutzen wir nun, um $\tilde{x}_1$ auf y_1 abzubilden: $y_1 = F^{-1}(\tilde{x}_1)$. Ist dann

$$\tilde{p}(y_1) \leq f(y_1),$$

so akzeptiern wir y_1 wieder und generieren so die Verteilung $\tilde{p}(y)$.

Kapitel 7

Statistik realer Preise

Nach obiger beschränkung der Zeitskale können die *Preisänderungen* δx_k als Zufallsvariable angesehen werden.

Eigenschaften der δx_k

(i) für $\tau > 10$min: Unabhängigkeit (Liquide Märkte)

(ii) Identisch verteilt (abgeschnittene Lévy-Verteilung)

$$P_1(\delta x) = L_\mu^{(+)}(\delta x), \qquad \mu \approx \frac{3}{2}$$

Lévy-Verteilung

Die bisher vorgestellten und im folgenden dargelegten Aussagen sind Erfahrungswerte. Insbesondere die Feststellung, dass die Preisänderungen δx_k durch eine abgeschnittene Lévy-Verteilung beschrieben werden können bedarf einer nähreren Erläuterung.

Nach dem Zentralen Grenzwertsatz konvergiert die Summe von N unabhängigen und identisch verteilten Zufallsvariablen x_n im Grenzwert $N \to \infty$ gegen eine Gaußverteilung, vorausgesetzt, dass das erste und zweite Moment der x_n nicht divergieren. Nun gibt es ein ganze Klasse von Verteilungen, welche lange Tails mit Potenzgesetzverhalten besitzen:

$$p(x) \sim \frac{1}{|x|^{1+\mu}}, \qquad 0 < \mu < 2 \qquad (|x| \to \infty)$$

Dies schließt zwar die Konvergenz gegen die Gaußverteilung für $N \to \infty$ aus, doch ist damit noch nichts über die Existenz einer Grenzverteilung gesagt. Wenn man von einer Lévy-Verteilung oder stabilen Verteilung spricht, bezieht man sich auf solche Grenzverteilungen.

Als *stabile Verteilungen* bezeichnet man solche, welche unter Faltung ihre Form bewahren:

$$\begin{aligned} p(a_1 l + b_1) * p(a_2 l + b_2) &= \int_{-\infty}^{\infty} dl\, p(a_1(z-l) + b_1) p(a_2 l + b_2) \qquad (7.1) \\ &= p(az+b) \end{aligned}$$

Außerdem besitzen sie noch die Skaleneigenschaft

$$p_N(x) = \frac{1}{N^{1/\alpha}} p\left(\frac{x}{N^{1/\alpha}}\right), \qquad (7.2)$$

wobei $p_N(x)$ für die Wahrscheinlichkeitsdichte einer Summe von N Zufallsvariablen steht.

Eine Wahrscheinlichkeitsdichte $L(x)$ kann nur dann eine Grenzfunktion einer Summe $S_N = \frac{1}{B_N} \sum\limits_{n=1}^{N} l_n - A_N$ sein (l_n unabhängig und zufällig), wenn sie stabil ist. Eine stabile Verteilung verhält sich im Grenzwert $x \to \pm\infty$ wie

$$L_\alpha(x) \sim \frac{1}{|x|^{1+\alpha}}, \qquad x \to \pm\infty \qquad (7.3)$$

und besitzt endliche absolute Momente der Ordnug δ

$$\left\langle |x|^\delta \right\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, |x|^\delta L_\alpha, \quad \text{wenn} \quad 0 < \delta < \alpha \qquad (7.4)$$

Die Wahrscheinlichkeitsdichte $p(l)$ gehört genau dann zur „domain of attraction“ einer stabile Verteilung L_α mit charakteristischem Exponent α $(0 < \alpha < 2)$, wenn

$$\boxed{p(l) \sim \frac{\alpha a^\alpha c_\pm}{|l|^{1+\alpha}} \qquad l \to \pm\infty} \qquad (7.5)$$

wobei $c_+ \leq 0$, $c_- \leq 0$ und $a > 0$ Konstanten sind. Ist $\alpha = 2$, so wird $L_\alpha(x)$ zur Gaußverteilung. Während α also das Verhalten für große x bestimmt, beschreibt β die Asymmetrie:

$$\beta = \begin{cases} \frac{c_- - c_+}{c_+ + c_-} & \text{falls } \alpha \neq 1 \\ \frac{c_+ - c_-}{c_+ + c_-} & \text{falls } \alpha = 1 \end{cases}$$

Aus (7.4) können wir ersehen, dass die Varianz einer stabilen Verteilung $(\delta = 2)$ nicht existiert, wenn α nicht gerade 2 ist, und außerdem Mittelwert

($\delta = 1$) und Varianz nicht existieren, wenn $\alpha < 1$ gilt. Für die A_N und B_N kann man zeigen:

$$\begin{aligned} B_N &= aN^{1/\alpha} \\ A_N &= 0, \text{wenn } 0 < \alpha < 1 \\ A_N B_N &= N\langle x\rangle, \text{wenn } 1 < \alpha < 2 \end{aligned}$$

Ein großer Unterschied zwischen Gauß- und Lévy-Verteilung besteht darin, dass *alle* Verteilungen, welche für große l schnell genug (wenigstens wie $|l|^{-3}$) abfallen zur domain of attraction der Gaußverteilung gehören, wohingegen stabile Verteilungen mit $\alpha < 2$ *nur solche* $p(l)$ anziehen, die das gleiche asymptotische Verhalten (α) besitzen wie die Grenzverteilung selbst. In diesem Fall muss also gelten:

$$\left\langle |l|^\delta \right\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dl\, |l|^\delta p(l) \begin{cases} < \infty & \text{falls } 0 \leq \delta < \alpha \quad (\alpha \leq 2) \\ = \infty & \text{falls } \delta > \alpha \quad (\alpha < 2) \end{cases}$$

Die charakteristische Funktion der Lévy-Verteilung ist gegeben durch

$$\ln L_\alpha(k) = i\gamma k - c|k|^\alpha \left(1 + i\beta \frac{k}{|k|}\omega(k,\alpha)\right) \tag{7.6}$$

mit c, α, β und γ Konstanten mit: γ beliebig, $c \geq 0$, $0 < \alpha \leq 2$ und $-1 \leq \beta \leq 1$ und der Funktion

$$\omega(k,\alpha) = \begin{cases} \tan(\pi\alpha/2) & \text{falls } \alpha \neq 1 \\ (2/\pi)\ln|k| & \text{falls } \alpha = 1 \end{cases}$$

Die Eigenschaft der Skaleninvarianz (7.2) macht diese Art von Verteilungen gerade für Physiker interessant, bedeutet dies nämlich nichts anderes, als dass ein Teil aussieht wie das Ganze (Stichwort: fraktale Eigenschaft). Andererseits ist es sehr unbefriedigend, dass die Varianz einer solchen Verteilung divergiert, obwohl a priori klar ist (Messdaten), dass diese existiert.

Ein Ausweg aus diesem Dilemma kann man nun finden, indem man den Tail abschneidet - *truncated Lévy flight*:

$$p(l) = \begin{cases} \mathcal{N} L_\alpha(l) & \text{falls } -l_{cut} \leq l \leq l_{cut} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \tag{7.7}$$

Abgeschnittene Lévy-Verteilung

Hierbei ist $\mathcal{N}$ eine Normierungskonstante und l_{cut} der cutoff-Parameter. Ist l_{cut} ausreichend groß gewählt, so besitzt $p(l)$ deutlichen Lévy-Charakter.

Eine weitere Möglichkeit, die Verteilung abzuschneiden, besteht darin, eine glatte, exponentielle Dämpfung einzubauen:

$$p(l) = \begin{cases} c_- e^{-\lambda|l|}|l|^{-(1+\alpha)} & l < 0 \\ c_+ e^{-\lambda l}|l|^{-(1+\alpha)} & l > 0 \end{cases} \tag{7.8}$$

Damit erhält man einen *Crossover von der Lévy- zur Gaußverteilung für große N*.

Dieser Abschnitt stellt die empirischen Grundlagen für die spätere Modellierung von Finanzmärkten und -produkten dar. Im Gegensatz zu anderen Forschungsgebieten in der Physik oder den Naturwissenschaften allgemein, ist es nicht möglich, kontrollierte Experimente durchzuführen. Dieser Nachteil wird zunächst teilweise durch die Fülle an Daten wettgemacht, die ein solides empirisches Fundament für die theoretische Modellierung bietet.

Bei der Auswertung der empirischen Daten zeigt es sich, dass es sinnvoll ist, die Preisentwicklung der Finanzprodukte nach verschiedenen Markttypen zu klassifizieren:

- **Sehr liquide Märkte**: Märkte mit großem Handelsvolumen. Diese Märkte werden durch die zugeordneten Indizes beschrieben (z.B. DAX, S&P 500, Dow Jones)

- **Sehr volatile Märkte**: (Volatilität $\hat{=}$ Varianz): Märkte, deren Preisentwicklung sehr instabil verläuft, bzw. junge aufstrebende Märkte (z.B. NEMAX, Kursverhältnis US$ / mexikanischer Peso).

- **Volatilitätsmärkte**: Finanzprodukte, die z.B. zur Kursabsicherung von Aktien dienen (Optionsscheine). Der Preis dieser Produkte wird durch das Verlustrisiko bestimmt, das mit der Volatilität verknüpft ist.

- **Zinsmärkte**: Die Zinssätze, die angeboten werden, sind laufzeitabhängig. Die Variation der Zinssätze ist aber nicht unabhängig, da sie von den Rahmenbedingungen des Geldmarktes abhängen.

Eine Beschränkung gibt es bei der Analyse auf Zeitskalen (von Minuten bis zu Monaten), um den Einfluss des Hintergrundes, d.h. der systematischen Preisentwicklung, vernachlässigen zu können. Die Rechtfertigung für dieses Vorgehen ergibt sich aus einem Vergleich der Größenordnungen.

Typische jährliche Veränderung des Preises: ~ 10 %

- $\rightarrow$ Mittelwert ändert sich nur um ~ 0.04 % pro Tag

- $\rightarrow$ klein gegenüber Fluktuationen mit kurzen Zeitskalen

Zentrales Thema dieses Kapitels ist die Analyse und Modellierung der zeitlichen Entwicklung von Preisen. Eine Möglichkeit besteht darin, die Zeitreihe $x(T)$ des Preises eines Vermögenswertes X durch ein sog. additives Modell

$$x(T) = x_0 + \sum_{k=0}^{N-1} \delta x_k \tag{7.9}$$

darzustellen (mit $N = T/\tau$).

Die Preisänderungen $\delta x_K = x_{k+1} - x_k \quad (x_k = x(k\tau))$ sind als Zufallsvariablen anzusehen, deren Eigenschaften wir untersuchen wollen. Bei liquiden Märkten können wir die δx_k für $\tau > 10$ min als unkorreliert betrachten. Es zeigt sich ferner, dass die empirischen Verteilungsfunktionen der δx_k konsistent beschrieben werden durch eine abgeschnittene Lévy-Verteilung.

Dieses simple additive Modell ist allerdings nur eingeschränkt gültig. Zum einen werden wir sehen, dass die statistische Unabhängigkeit der δx_k nicht in jedem Fall gewährleistet ist, zum anderen muss auf größeren Zeitskalen auch die systematische Wertentwicklung berücksichtigt werden. Es zeigt sich, dass für große Zeiten nicht das Preisinkrement die natürliche Variable darstellt, sondern der sog. Return $\eta_n = \frac{\delta x_n}{x_n}$, d.h. die relative Preisänderung.

Die Zeitreihe des Preises wird in diesem Fall von einem *multiplikativen Modell* beschrieben:

$$\boxed{x(T) = x_0 \cdot \prod_{n=0}^{N-1} (1 + \eta_n) = x_0 \cdot \prod_{n=0}^{N-1} \frac{x_{n+1}}{x_n}} \tag{7.10}$$

Ist die Volatilität sehr viel kleiner als der Preis selbst, d.h. für kleine relative Preisänderungen nicht vehement, ergibt sich

$$\ln \frac{x_{n+1}}{x_n} \approx \frac{\delta x_n}{x_n} \approx \frac{\delta x_n}{x_0}$$

(Die erste Näherung ist hierbei keineswegs trivial.)

Übergang zwischen additivem und multiplikativem Modell

Für $\eta_n \ll 1$ kann man das multiplikative Modell in das additive Modell überführen:

$$\ln(1+\eta_k) \approx \eta_k \approx \frac{\delta x_n}{x_0}$$

Wobei wir im letzten Schritt vorausgesetzt haben, dass die Preisänderungen klein sind. Mit dieser Näherung und der zusätzlichen Annahme, dass auch $\sum\limits_{k=0}^{N-1} \frac{\delta x_n}{x_0} \ll 1$ ist, erhalten wir das additive Modell

$$\boxed{x_N = x_0 + \sum_{n=0}^{N-1} \delta x_n} \tag{7.11}$$

Die Gültigkeitsbereiche der Modelle kann man anhand der Varianz überprüfen. Wenn der Return die natürlich stochastische Variable ist, sollte gelten:

$$\sqrt{\left.\langle \delta x^2 \rangle\right|_x} = \sigma_1 x$$

wobei $\left.\langle \delta x^2 \rangle\right|_x$ den Mittelwert von $(\delta x)^2$ für einen vorgegebenen Preis x angibt. Die obige Beziehung würde bedeuten, dass die Varianz des Returns konstant ist. Dies beobachtet man nur im Langzeitverhalten; es muss also eine charakteristische Zeit T_σ geben, bei der man den Übergang vom additiven zum multiplikativen Verhalten beobachtet.

$\Rightarrow$ Crossover bei T_σ

Damit:

- additives Regime $\tau \ll \tau_\sigma$

$$\begin{aligned} \langle (x(\tau) - x_0)^2 \rangle &= D\tau = \sigma^2, x_0^2 \\ &= \sigma_1^2 x_0^2 \end{aligned}$$

- multiplikatives Regime $T \gg T_\sigma$

$$\langle \ln^2 \left(\frac{x(T)}{x_0} \right) \rangle = \sigma^2 T$$

Für liquide Märkte liegt T_σ in der Größenordnung von Monaten.

Autokorrelation

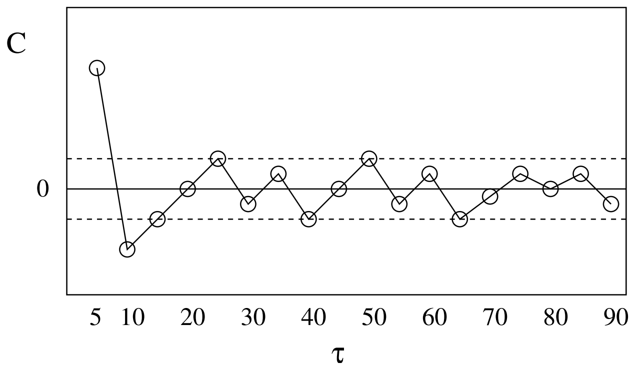
Eine weitere wichtige Eigenschaft der Zeitreihen ist die statistische Unabhängigkeit der Daten. Eine notwendige Bedingung für statistische Unabhängigkeit ist das Verschwinden der Autokorrelationsfunktion.

Definition

$$C_{kl}^{\tau} = \frac{1}{D\,\tau}\langle \delta x_k \delta x_l \rangle$$

Autokorrelation in diskreter Zeit (z.B. $\tau = 5$ min)

Typischer Verlauf



Man macht die folgenden Beobachtungen:

- Signifikante Korrelationen sind auf Zeitskalen der Größenordnung 15 min zu beobachten. Die Autokorrelationszeiten sind für liquide Märkte am kürzesten.

- Die Anwesenheit von Korrelationen suggeriert die Möglichkeit, durch schnelles Kaufen und Verkaufen systematisch Gewinne zu erzielen. Dies ist jedoch nicht der Fall, da die Amplituden zu gering sind, d.h. der Profit zu gering ist, um die Kosten der Transaktionen zu decken.

Zeitliche Entwicklung von Fluktuationen

Betrachtet man die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Preisänderungen δx_k für Zeitintervalle $\tau = 1, \ldots, 10^3$ min, so sieht man sehr deutlich, dass die abgeschnittene Lévy-Verteilung sehr gut die empirischen Daten beschreibt. Dies gilt über einen Bereich von 3 Größenordnungen der Wahrscheinlichkeit sowie bis zu 6σ in den Schwankungen δx_k (σ ist Standardverteilung der Daten) (Abb 7.1). Wie wir oben gesehen haben, sind die Preisänderungen erst für $\tau \geq \tau^* = 15\text{min}$ als unabhängige Variable zu betrachten. Es ist daher naheliegend, die folgende Annahme zu machen:

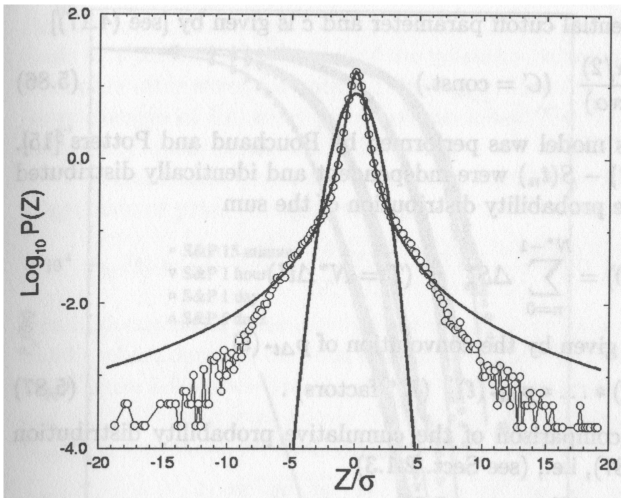


Fig. 5.6. Probability distribution $p_{\Delta t}(\ell)$ of the price variations $\ell\, [= S(t+\Delta t) - S(t)]$ for the S&P500, determined from all records between 1984 and 1989 (about 1.5 million records). $p_{\Delta t}(\ell)$ [denoted by $P(Z)$] is plotted versus ℓ/σ for $\Delta t = 1$ min, where σ (= 0.0508) is the standard deviation calculated from the data points. The Gaussian distribution (*thick solid line*) corresponding to this value of σ is compared to the best fit with a Lévy distribution (*thin solid line*). The Lévy distribution [with $\alpha = 1.4$ and $c = 3.75 \times 10^{-3}$, see (5.83)] gives a much better representation of the data for $\ell/\sigma \leq 6$. If $\ell/\sigma \geq 6$, the distribution of the index decays approximately exponentially. Reproduced with permission from [105]

Abbildung 7.1: Die abgeschnittene Lévy-Verteilung beschreibt sehr gut die empirischen Daten.

Die Preisänderungen werden durch eine abgeschnittene Lévy-Verteilung beschrieben, wenn wir Preise betrachten, die wenigstens um τ^* zeitlich auseinanderliegen.

In diesem Fall sollten die Preisänderungen zeitlich unabhängig sein. Ist dies der Fall, so sollte auf jeden Fall für die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Summe

$$x_N - x_0 = \sum_{n=0}^{N-1} \delta x_n$$

gelten, dass sie der N-fachen Faltung von $p_\tau(\delta x)$

$$p_N(x) = \underbrace{p_\tau(\delta x) * \ldots * p_\tau(\delta x)}_{Nx} = [p_1(\delta x)]^{*^N}$$

entspricht. (Eigenschaft von statistisch unabhängigen Variablen, vgl. (1.25)) Die so gewonnene Wahrscheinlichkeitsverteilung können wir mit den kumulativ aufgetragenen empirischen Daten vergleichen, d.h. wir betrachten:

$$P_{1_>}(\delta x) = \int_{\delta x}^{\infty} dx\, p_N(x)$$

[1]

Man stellt nun Folgendes fest (s.a. Abb. 7.2):

- Die Einzelverteilungen $p_1(\delta x)$ werden durch eine abgeschnittenen Lévy-Verteilung mit $\mu = 3/2$ gut beschrieben. Die Beibehaltung dieses Exponenten zur Beschreibung von $p_N(x)$ ist mit den Daten kompatibel.
- Das über die N Faltungen gewonnene p_N ist eine gute Näherung der Wahrscheinlichkeitsverteilung für $N \gg 1$.
- Man beobachtet eine Konvergenz gegen die Gaußverteilung, jedoch langsamer als die theoretische Vorhersage erwarten läßt. Dies kann als Hinweis auf fehlende statistische Unabhängigkeit verstanden werden.

Vorlesung vom 03.06. wird nachgereicht

Marktmodelle (Physikermodelle)

(i) *Perkolationsmodell*
Annahmen:

- Die Preisänderung δx_k spiegelt die Diskrepanz zwischen Angebot und Nachfrage wider:

$$\delta x_k \propto q \sum_{\alpha} \varphi_\alpha$$

q =Menge des Bedarfs, α Marktteilnehmer

$$\varphi_\alpha = \begin{cases} -1 & \text{verkaufen} \\ 0 & \text{halten} \\ 1 & \text{kaufen} \end{cases}$$

[1]Bei empirischen Daten, die nicht a priori von diskreten Variablen abhängen, ist der Vergleich der kumulativen Verteilungen günstiger, da jede Unterteilung der Datensätze in diskrete Intervalle mit dem Verlust von Informationen verbunden ist.

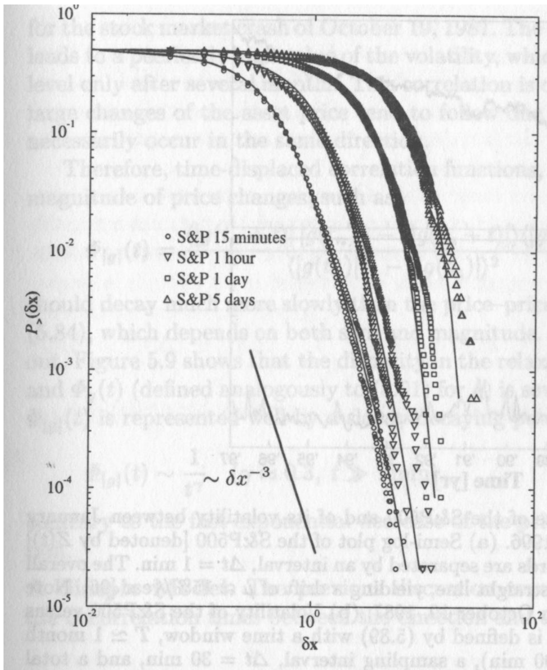


Fig. 5.7. Cumulative probability distributions (5.88) of the S&P500 (data from November 1991 to February 1995) versus the price variations ΔS (denoted by δx in the figure) for $\Delta t^* = 15$ min (○) and for $T = 1$ h (▽), 1 day (□) and 5 days (△). Two data points are shown for each time; they correspond to $\text{Prob}[x \geq \Delta S]$ for $\Delta S > 0$ and to $\text{Prob}[x \leq -\Delta S] = F(-\Delta S)$ for $\Delta S < 0$ [see (2.11)]. The empirical results are compared to the hypothesis of a convolution (5.87) of a truncated Lévy flight (*solid lines*). The parameters of the truncated Lévy flight (5.86) are optimized for $\Delta t^* = 15$ min after fixing $\alpha = 3/2$: $\lambda^{-1} = 2.21$ and $c = 0.17$. The splaying-out of the probabilities for positive and negative ΔS could partly result from statistical inaccuracies of rare events, but could also indicate an asymmetry of the distribution perhaps due to drift in the index. The power law $\text{Prob}[x \geq \Delta S] \sim (\Delta S)^{-3}$ [see (5.99)] is indicated (*thick solid line*). This power law is not contained in the original figure which we reproduce with permision from [15]

Abbildung 7.2: Darstellung von $P_{1_>}(\delta x)$

- Die Marktteilnehmer sind verbunden mit der Wahrscheinlichkeit $p/\mathcal{N}$, $\mathcal{N} = \sharp$ der Marktteilnehmer

  Korrelierte Teilnehmer haben die gleiche Strategie, d.h. $\varphi_a = \varphi_b$ $\Rightarrow$ Entscheidung in Gruppen ($\hat{=}$ Perkolationsproblem für $d = \infty$)[2]

Damit Preisänderungen:

$$\delta x_k \propto q \sum_A N(A)\varphi(A)$$

[2] $d = \infty$, da jeder Merktteilnehmer mit jedem anderen verbunden sein kann. Perkolation bedeutet, daß jeder Teilnehmer mit jedem anderen über eine Kette von Links verbunden und der Markt somit gleichgeschaltet ist.

mit $\sum\limits_A N(A) = (N)$, $N(A) = \sharp$ Marktteilnehmer in einer Gruppe

Falls $p < 1$ bleiben die Gruppen endlich $\rightarrow$ Entwicklung für $1 - p = \epsilon \ll 1$. Verteilung der Clustergröße ($\mathcal{N} \gg 1$):

$$p(N) \propto \frac{1}{N^{\frac{5}{2}}} \exp\left[-\epsilon^2 N\right] \qquad N \ll \mathcal{N}$$

Diskussion $p = 1 \rightarrow p(N) \sim N^{\frac{5}{2}}$

> Damit sind die δx_k Summen von Zufallszahlen, die einer algebraischen Verteilung entsprechen $\rightarrow \mu = 3/2$ (Lévy-Verteilung)

$p \lesssim 1$ abgeschnittene Lévy-Verteilung
$p \gtrsim 1$ Crash (Es gibt mit Wahrscheinlichkeit 1 einen Cluster der Größe $\mathcal{N}$)

Problem: Wie ensteht die Struktur der Gruppen? $\rightarrow$ erfordert Modell zur Meinungsbildung

(ii) *Rückkopplungsmodell*
Idee: $x_{k+1} = x_k + \sigma_k \zeta_k$

mit ζ_k Zufallszahl mit Varianz 1
σ_k hängt von der früheren Volatilität ab

Toy-Modell

$$\sigma_{k+1} - \sigma_0 = (1-\epsilon)(\sigma_k - \sigma_0) + \epsilon|\sigma_k \zeta_k|$$

$\Rightarrow$ Kopplung an den letzten Tag[3]

Führt auf Fokker-Planck Gleichung für $p(\sigma, t)$

$$\frac{\partial p(\sigma,t)}{\partial t} = \epsilon \frac{\partial(\sigma - \tilde{\sigma}_0)p(\sigma,t)}{\partial \sigma} + c^2 \epsilon \frac{\partial^2 \sigma^2 p(\sigma,t)}{\partial \sigma^2}$$

mit c^2 =Varianz von $\delta\zeta$
$\tilde{\sigma}_0 = \sigma_0 - \epsilon\bar{\sigma} \qquad \bar{\sigma} = \langle|\sigma\zeta|\rangle$
$|\sigma_k \zeta_k| = \bar{\sigma} + \sigma\delta\zeta$

[3]Ist $\sigma_k = \sigma_0$, so addieren wir also lediglich eine kleine Zahl hinzu. Ist $\sigma_k = \alpha\sigma_0$, $\alpha > 1$, so gilt $\sigma_{k+1} < \sigma_k$, falls $|\zeta_k| < 1 - 1/\alpha$.

Gleichgewichtslösung:

$$P_\sigma(\sigma) = \frac{\exp(-\tilde{\sigma}_0\sigma)}{\sigma^{1+\mu}}$$

mit $\mu = 1 + (c^2\epsilon)^{-1} > 1$

$\Rightarrow$ Für viele Verteilungen des Rauschens hat man asymptotisch Potenzgesetze mit dem Exponent μ.

$$\left.\begin{array}{ll} \epsilon \to 1 \text{ (Short memory) :} & \text{Power-laws} \\ \epsilon \to 0 : & \mu \to \infty \end{array}\right\} \begin{array}{l}\text{Überreaktionen führen} \\ \text{zu dem Potenzgesetz}\end{array}$$

Zusammenfassung

Tatsächliche Statistik realer Preise und Brown'sche Modelle stimmen nicht überein.

Brown'sche Modelle

- Man nimmt an, dass die relativen Returns unabhängige Zufallsvariablen sind.
- Man nimmt an, dass die elementare Zeitskala $\tau \to 0$ konvergiert (d.h. dass man einen Prozess in kontinuierlicher Zeit hat), so dass man den zentralen Grenzwertsatz für endliche Zeitskalen immer verwenden kann.

$\Rightarrow$ Preisänderungen gehorchen der Log-Normal-Verteilung. Der Prozess ist skaleninvariant.

Aber

Asymptotik der Verteilung wird nur sehr schlecht von einer Gaußverteilung beschrieben.

- Man hat Korrelationen auf einer Zeitskala von ~ 30 min $\Rightarrow \tau \to 0$ ist Unsinn
- $T^* = N * \tau$: Zeitskala auf der nicht-gaußische Effekte wichtig sind liegen in der Größenordnung von Tagen
- Zeitskala von Volatitlitätsschwankungen in der Größenordnung von Tagen bis 1 Monat
- τ_σ: Zeitskala auf der Crossover von additiven Variablen zu multiplikativen Variablen stattfindet liegt in der Größenordnung von Monaten

$\Rightarrow$ Modelle, deren einziger Parameter die Volatilität ist, müssen fehlschlagen.

Extremes Risiko und optimale Portfolios

Risiko bei Anlagen ist natürlicherweise mit der Volatitliät verknüpft.

Logarithmischer Return:

$$R(T) = \ln \left[\frac{x(T)}{x_0} \right]$$

mit $x(T)$ Preis eines Werpapiers zur Zeit T

$P(x, T|x_0, 0)dx$: Wahrscheinlichkeit, dass der Preis zur Zeit T im Intervall $[x(T), x(T) + dx]$ ist

Damit Volatilität Varianz von $R(T)$:

$$\sigma^2 = \frac{1}{T} \left[\int dx\, P(x, T|x_0, 0) R^2 - (\int dx\, P(x, t|x_0, 0) R(T))^2 \right]$$

Die so definierte Volatilität wird als Maß für das Risiko genommen. Multiplikatives Modell

$$R(T) = \ln \left[\frac{x(T)}{x_0} \right] = \sum_{k=0}^{N-1} \ln(1 + \eta_k)$$

mit $N = T/\tau$.

Gewöhnlich: $N \to \infty \Rightarrow R(T)$ wird gaußverteilte Zufallszahl (zentraler Grenzwertsatz, Annahme: η_k sind unabhängig)

- Mittlerer Return: $\tilde{m}T$ mit $\tilde{m} = \langle \ln(1 + \eta_k) \rangle / \tau$
- Standardabweichung $\sigma\sqrt{T}$

Damit: Verteilung von $R(T)$ wird durch zwei Werte parametrisiert und zwar $\tilde{m}$ und σ

Problem: $N \to \infty$ ist ungerechtfertigt wegen der Autokorrelationen

Interpretation (für $N \to \infty$):
Preis von X: $x(T) = x_0 \exp[\tilde{m}T + \sigma\sqrt{T}\zeta]$; ζ Zufallszahl mit $\langle \zeta \rangle = 0$; $\langle \zeta^2 \rangle = 1$

Wenn $T \gg \hat{T} \equiv \sigma^2/\tilde{m}$ wird der Preis vom Mittelwert dominiert, d.h. Verlustrisiko wird gering. Typische Werte sind $\tilde{m} = 10\%$, $\sigma = 20\%$ (Jahreswerte) $\Rightarrow \hat{T} = 4$ Jahre

Sharp-Verhältnis

$$S = \frac{\tilde{m}T}{\sigma\sqrt{T}} = \sqrt{T/\hat{T}}$$

misst Signal / Rausch Verhältnis

Bemerkung: Für kurze Zeiten hat man additives Modell:

Preis für kurze Zeiten:

$$X(T) = x_0 \exp \underbrace{[\tilde{m}T + \sigma\sqrt{T}\zeta]}_{\ll 1} = x_0 + mT + \sqrt{DT}\zeta$$

mit $m = \tilde{m}x_0$ und $x_0^2\sigma^2 = D$

Beachte: ζ ist nicht gaußverteilt; wesentlich für die Risikobestimmung.

Verlustrisiko und Verknüpfung von Wert und Risiko (VaR)

Zentrale Rolle der Volatilität durch Gaußverteilung
Probleme:

- Risiko ist verknüpft mit Verlusten, bei der Schwankung sind Gewinne und Verluste gleichwertig
- ZGS nur im Zentrum der Verteilung gerechtfertigt, Risiko wird aber durch extreme Sprünge definiert
- Man sollte kumulative Effekte berücksichtigen

Def. Wahrscheinlichkeit mehr als Λ zu verlieren:

$$P[\delta x < -\Lambda] = P_<[-\Lambda] = \int\limits_{-\infty}^{-\Lambda} d(\delta x)\, P_\tau(\delta x)$$

mit $\delta x = x(T) - x_0$, $P_\tau(\delta x) = P(\delta x + x_0,\, t + \tau | x_0, t)$

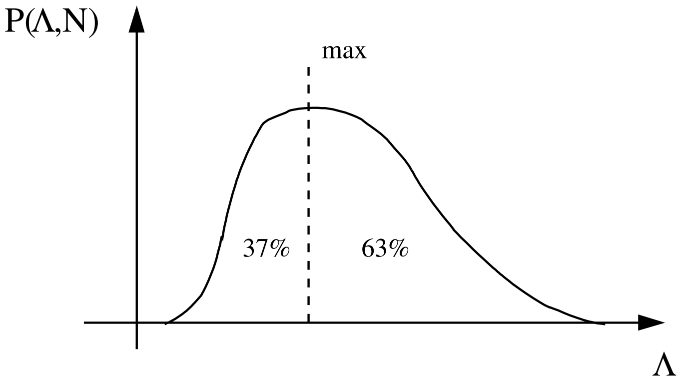
Alternative:
Man gibt $P_{\text{VaR}} = P[\delta x < \Lambda_{\text{VaR}}]$ vor und bestimmt Λ_{VaR} nachher.

Interpretation:
$P_{\text{VaR}} = 0.01$; $\tau = 1$ Tag $\Rightarrow \delta x \leq \Lambda_{\text{VaR}}$ passiert nur alle 100 Tage.

Weitere wichtige Größe:
Wahrscheinlichkeit, dass der größte Einzelverlust, der in einem Zeitraum T_{VaR} von $N\tau$ auftritt, Λ ist:

$$P(\Lambda, N) = N\,\overbrace{[P_>(-\Lambda)]^{N-1} P_\tau(-\Lambda)}^{1\text{ Tag}}$$

mit $P_>$ = Wahrscheinlichkeit $\delta x > -\Lambda$ und P_τ = Wahrscheinlichkeit für $-\Lambda$. Es gilt $P_>(-\Lambda) = \int\limits_{-\Lambda}^{\infty} d(\delta x)\, P_\tau(\delta x)$.



$P_\tau(\Lambda)$ zerfällt schneller als jedes Potenzgesetz.

Für große N wird $P(\Lambda, N)$ durch die Asymptotik von $P_\tau(\Lambda)$ bestimmt. Unter der Voraussetzung (7) findet man $P(\Lambda, N \to \infty) = e^{-e^{-\Lambda}} e^{-\Lambda}$.

Das Maximum liegt bei $\Lambda = \Lambda_{\text{VaR}}$, wenn $P_{\text{VaR}} = \frac{1}{N}$

Beispiele:
Gaußverteilung

$$P_{G<}\left(-\frac{\Lambda_{\text{VaR}} + m_1}{\sigma_1 x_0}\right) = P_{\text{VaR}}$$
$$\Rightarrow \quad \Lambda_{\text{VaR}} = \sqrt{2}\,\sigma_1 x_0\, erfc^{-1}\,[2P_{\text{VaR}}] - m_1$$

$\Rightarrow$ Direkte Verknüpfung mit der Volatilität.

Im Allgemeinen gibt es diese direkte Verknüpfung nicht, Gaußverteilung ist nicht sehr realistisch.

Man kann aber die Verlustwahrscheinlichkeit selbst für solche Verteilungen berechnen, deren Varianz divergiert, Beispiel Lévy-Verteilung

$$P_\tau(\delta x) \simeq \frac{\mu\, A^\mu}{|\delta x|^{1+\mu}},\ \text{für } \delta x \to 0 \text{ und } \mu < 2$$

$$\rightarrow \Lambda_{\text{VaR}} = A\, P_{\text{VaR}}^{-1/\mu}$$

$\Rightarrow$ Die Verlustwahrscheinlichkeit wird von A bestimmt.

Zeitliche Aspekte

Problem: Der Verlust in der bisherigen Betrachtung bezog sich auf den Verlust zum Ende des Zeitintervalles $[k\tau, (k+1)\tau]$.

Im Allgemeinen wird aber der größte Verlust **innerhalb** des Zeitintervalls liegen.

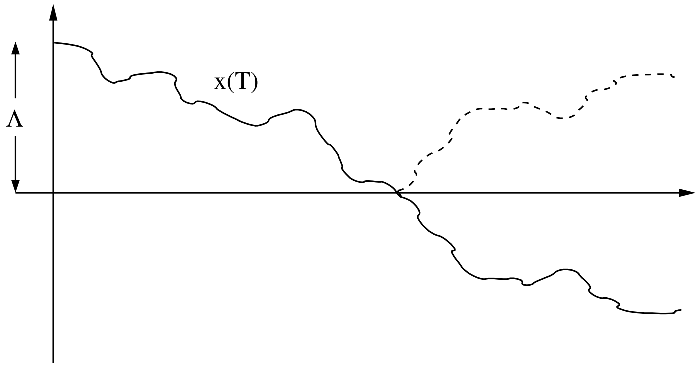
Die Wahrscheinlichkeit, dass der maximale Verlust innerhalb des Intervalls einen bestimmten Wert überschreitet, ist:

$$P[x_{lo} - x_{op} < -\Lambda] = 2P[x_{cl} - x_{op} < -\Lambda]$$

mit: x = Preis; lo: niedrigster, op: open (z.B. der Intervalls) und cl: close (zum Ende des Intervalls)

$\Rightarrow$ Verdoppelung der Wahrscheinlichkeit gegenüber der Analyse zum Intervallende.

Begründung: Betrachte eine ??? von $x(T)$



beide Pfade haben gleiches Gewicht

Verluste in unendlichen Intervallen

Fragestellung: Was ist die Wahrscheinlichkeit dafür, dass der minimale zukünftige Preis $x_{\min}$ ist? (x_0: Ausgangspreis)

Es sei

$$\Lambda_{\max} = x_0 - x_{\min}$$

Falls $P(\delta x)$ **exponentiell** für $\delta x \to -\infty$ abfällt

$$\rightsquigarrow P(\Lambda_{\max} \underset{\Lambda_{\max} \to \infty}{\alpha} \exp\left(-\frac{\Lambda_{\max}}{\Lambda_0}\right)$$

mit Λ_0 als Lösung von

$$\int d(\delta x) \exp[-\frac{\delta x}{\Lambda_0} P_\tau(\delta x) = 1 \tag{7.12}$$

Begründung (Selbstkonsistenzbedingung):

Def.

$$P_>(\Lambda) = \int_\Lambda^\infty d\Lambda_{\max} P(\Lambda_{\max}) \tag{7.13}$$

Betrachte das Problem zur Zeit $t = t_0 + \tau \Rightarrow x = x_0 + \delta x_k$

$$\delta x_k \begin{cases} < -\Lambda \Rightarrow & \Lambda_{\max} > \Lambda \\ > -\Lambda \Rightarrow & \text{Ausgangsproblem (wg. unbeschränkter Zeit)} \\ & \text{wg. verschobenem Startwert} \end{cases}$$

$\Rightarrow$ (Integration über alle δx_k)
$P_>(\Lambda) = \int_{-\infty}^{-\Lambda} d\delta x\, P_\tau(\delta x) + \int_{-\Lambda}^{\infty} d\delta x\, P_\tau \delta x\, P_\tau(\delta x) P_>(\Lambda + \delta x)$

Falls $1 \gg \Lambda$, ist der erste Term zu vernachlässigen (checken!).

Ansatz: $P_>(\Lambda) = \Lambda \exp(-\Lambda/\Lambda_0)$ führt auf ??.

Einfache Beispiele:

Gemischte Fluktuationen

$$P_\tau(\delta x) = \frac{\Lambda}{\sqrt{2\pi D\tau}} \exp\left[-\frac{(\delta x - m\tau)^2}{D\tau}\right]$$

??, quadratische Ergänzung $\Rightarrow \Lambda_0 = D/2m$

Konsequenzen:

- Ohne Drift macht der maximale Verlust keinen Sinn

- Λ_0 ist das Maß der Fluktuationen für Zeitskala $\hat{T} = D/2m$.

Auswertung für den exponentiellen Fall

$$P_\tau(\delta x) = \frac{\Lambda}{2a} \exp(-\alpha|\delta x - m\tau|)$$

Bedingung:

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} d(\delta x) \exp(-\frac{\delta x}{\Lambda_0} P_\tau(\delta x) = \Lambda$$

führt auf:

$$\frac{\alpha^2}{\alpha^2 - \Lambda_0^{-2}} \exp\left(-\frac{m\tau}{\Lambda_0}\right) = \Lambda$$

Falls $m\tau\alpha \ll \Lambda$ (Entwicklung von exp), findet man $\Lambda_0 = \frac{1}{m\tau\alpha^2}$

Lebensdauer der großen Verluste: Berechnung der Returnwahrscheinlichkeit zu x_0. Für große Zeiten hat man die Form

$$P(T) \simeq \frac{\tau^{1/2}}{T^{3/2}} \exp(-\frac{T}{\hat{T}})$$

$\Rightarrow \hat{T}$ ist die charakteristische Zeit (i.A. größer als $\langle T \rangle \sim \sqrt{\tau\hat{T}}$), die man für die unterschiedlichen Prozesse zu bestimmen hat.

Begründung der Selbstkonsistenzgleichung

Λ_{max} =maximaler Verlust= $x - x_{\text{min}}$

Falls $P_\tau(\delta x) \sim \exp(-a\,\delta x)$

$$P(\Lambda_{\text{max}}) \propto \exp(-\Lambda_{\text{max}}/\Lambda_0)$$

Λ_0 geht aus Selbstkonsistenzgleichung hervor.

Wenn wir zum Zeitpunkt $t' = t_0$ einen Preis $x = x_0$ festsetzen, so ist die Wahrscheinlichkeit dafür, dass der maximale Verlust größer als Λ sein wird (zu einem beliebigen späteren Zeitpunkt), gegeben durch

$$P_> = \int_\Lambda^\infty d\Lambda_{\text{max}} P(\Lambda_{\text{max}})$$

Wenn nun zum Zeitpunkt $t' = t_0 + \tau$ ein Preis $x = x_0 + \delta_x$ vorliegt, so haben wir eine Wahrscheinlichkeit von $P_>(\Lambda + \delta x)$, dass doch noch zu einem beliebigen späteren Zeitpunkt mindestens der Verlust Λ verglichen mit dem Anfangswert x_0 realisiert wird. Die Wahrscheinlichkeit, dass sich der Preis im Zeitschritt τ gerade um δx geändert hat, ist jedoch gegeben durch $P_\tau(\delta x)$. D.h. entweder wird der Verlust Λ bereits im ersten Zeitschritt „erreicht" oder in einem späteren. Somit schreibt sich $P_>(\Lambda)$ als

$$P_>(\Lambda) = \int_{-\infty}^{-\Lambda} d(\delta x)\, P_\tau(\delta x) + \int_{-\Lambda}^{\infty} d(\delta x)\, P_\tau(\delta x) P_>(\Lambda + \delta x)$$

Portfolios nicht korrelierter Wertpapiere

Bemerkungen

- Zusammensetzung der Portfolios
  - M risikoreiche Wertpapiere mit Preis x_i, $i = 1, \ldots, M$
  - 1 weniger risikoreiches Papier mit Preis x_0
- Wert des Portfolios:

  $$S = \sum_{i=0}^{M} n_i\, x_i(T), \qquad W = S(T=0) = \sum n_i\, x_i^0$$

  Anfangsbedingung: $x_i^0 = 1 \forall i = 0, \ldots, M$
  $\Rightarrow W = \sum n_i$, Anteile $p_i = n_i / W$
- Die Risikoparameter m_i (Drift) und D_i (Varianz) seien bekannt (Problem: man kann immer nur historische Werte annehmen, um diese Größen abzuschätzen)

Unkorrelierte „gaußische" Wertpapiere

Es sei die Preisänderung des Papiers i gaußverteilt um $m_i T$ mit Varianz $D_i T$. Wegen der Stabilität der Gaußverteilung ist auch der Preis des Portfolios gaußverteilt.

$$m_p = \sum_{i=0}^{M} p_i\, m_i = m_0 + \sum_{i=1}^{M} p_i (m_i - m_0), \qquad \text{mit } \sum p_i = 1$$

Varianz ($D_0 = 0$)

$$D_p = \sum_{i=1}^{M} p_i^2 D_i$$

- Minimierung der Varianz ohne Randbedingung $\Rightarrow p_0 = 1$
- Maximierung des Returns $\Rightarrow$ Wertpapier mit dem größten Return wird ausgewählt

Interessant: Bestimmung des Portfolios, das für vorgegebenen Return m_p das Risiko minimiert

$\Rightarrow$ Einführung des Lagrange Multiplikators:

$$\left.\frac{\partial(D_p - \zeta m_p)}{\partial p_i}\right|_{p_i=p_i^*} = 0$$

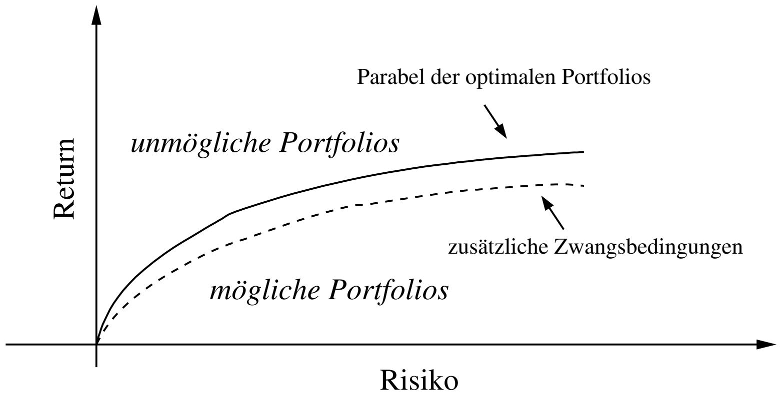
Nebenbedingung: ζ so, dass der mittlere Return genau m_p ist. Dies ergibt für gegebenes ζ:

$$\begin{aligned} 2p_i^* D_i &= \zeta(m_i - m_0) \qquad i = 1, \ldots, M \\ p_0^* &= 1 - \sum_{i=1}^{M} p_i^* \end{aligned}$$

Gleichung für ζ (aus der Zwangsbedingung (7.14))

$$\boxed{m_p - m_0 = \frac{\zeta}{2} \sum_{i=1}^{M} \frac{(m_i - m_0)^2}{D_i}} \tag{7.14}$$

$$\boxed{D_p^* = \frac{\zeta^2}{4} \sum_{i=1}^{M} \frac{(m_i - m_0)^2}{D_i}} \tag{7.15}$$



Unkorrelierte Wertpapiere mit algebraischen Preisfluktuationen

Fluktuationen des Assetpreises:

$$P_\tau(\delta x_i) \simeq \frac{\mu A_i^\mu}{|\delta x_i|^{1+\mu}}, \qquad \delta x_i \to \infty$$

mit $\mu > 1$; algebraische Verteilungen sind stabil unter Additionen ($\mu < 2$)

Tail-Parameter für das gesamte Portfolio

$$A_p^\mu = \sum p_i^\mu A_i^\mu$$

(beschreibt das asymptotische Verhalten des gesamten Portfolios); Wahrscheinlichkeit, dass der Verlust den Wert Λ überschreitet

$$P_>(\Lambda) = \frac{A_p^\mu}{\Lambda^\mu}$$

Diese führt auf

$$\mu\, p_i^{*\,\mu-1} A_i^\mu = \zeta\,(m_i - m_0)$$

mit ζ aus

$$\left(\frac{\zeta}{\mu}\right)^{1/(\mu-1)} \sum_{i=1}^{M} \frac{(m_i - m_0)^{\frac{\mu}{\mu-1}}}{A_i^{\frac{\mu}{\mu-1}}} = m_p - m_0$$

Damit ist die Verlustwahrscheinlichkeit des optimalen Portfolios gegeben durch

$$P^* = \frac{1}{\Lambda^\mu}\left(\frac{\zeta^{\frac{\mu}{\mu-1}}}{\mu}\right) \sum_{i=1}^{M} \frac{(m_i - m_0)^{\frac{\mu}{\mu-1}}}{A_i^{\frac{\mu}{\mu-1}}}$$

Eliminierung von $\zeta \Rightarrow P^* \sim (m_p - m_0)^\mu$

- Für $\mu > 2$ ist nur die Asymptotik stabil $\Rightarrow$ die Mitte wird gaußverteilt.
- Crossover, ab dem die Korrelationen von Gauß zum algebraischen Verhalten übergehen.

Kapitel 8

Futures und Optionen

Futures und Optionen

Dieses Kapitel soll in die Preisfindung von sog. Futures und Optionsscheinen einführen. Bei Futures handelt es sich uhrenm börsennotierte Forward-Kontrakte, d.h. um Verträge über den zukünftigen Preis eines Wertpapiers, eines Rohstoffes etc. zu einem festgelegten Zeitpunkt. Bei einem Optionsschein erwirbt man sich das Recht (aber nicht die Pflicht!) einen Asset (s.o.) zu einem bestimmten Zeitpunkt kaufen (call) oder verkaufen (put) zu können.

Für die Preisbildung ist es wichtig, ob die Preisänderungen als korreliert anzusehen sind oder nicht. Solche Korrelationen werden durch die *Effizienz des Marktes* unterdrückt: Da das eingesetzte Kapital endlich ist, kann es keine *offensichtlichen* Handelsstrategien geben, die zu *systematischen Gewinnen* oberhalb des Marktniveaus führen. Dies impliziert aber nicht, dass Preissprünge unkorreliert sein müssen, sondern nur, dass sie die Transaktionskosten nicht decken.

Futures und Forwards

Forward-Vertrag F: Kauf eines Assets X zum jetzigen Zeitpunkt $t = 0$ mit dem Auslieferungsdatum $T = N\tau$ in der Zukunft. *Was ist der Preis?* Der Preis sollte fair sein, also weder Käufer noch Verkäufer systematisch benachteiligen. Bilanz (aus Sicht des Verkäufers):

$$\Delta W_F = \mathcal{F} - x(T)$$

wobei $\mathcal{F}$ der Preis des Forwards und $x(T)$ der Marktpreis zum Zeitpunkt T ist.

$$\Rightarrow \mathcal{F}_3 = \langle x(T) \rangle \equiv \int dx \times P(xT)x_0, 0)$$

Dieser Preis kann aber nicht der tatsächliche Marktpreis sein, da er keine Risikoüberlegungen miteinbezieht. Eine *risikofreie* Strategie, an der der Preis orientiert sein sollte, ist die folgende: Man kauft den Asset zum gegebenen Zeitpunkt x_0, um ihn dann zur Zeit T wieder zu verkaufen.

Dabei entstehen durch die Kapitalbindung Kosten, da man sich das Kapital in einer risikolosen Anlage verzinsen lassen könnte.

$$\mathcal{F} = x_0 \tau^{\Gamma T}$$

mit dem Zinssatz pro Zeiteinheit τ.

Gobale Balance

Wir betrachten nun die Wertentwicklung, die eine mögliche Handelsstrategie mitberücksichtigt.

Gesamtkapital (zur Zeit $t_n = n\tau$)

$$\boxed{W_n = \phi_n x_n + B_n} \tag{8.1}$$

B_n ist die Investition in ein festverzinsliches Papier und ϕ_n die Investition in Asset X.

Wertentwicklung

$$W_{n+1} - W_n = \underbrace{\phi_n(x_{n+1} - x_n)}_{\text{Preisänderung}} + B_n\rho \quad (\rho = \Gamma\tau)$$

mit $\rho =$ Zinsen

Handel: Änderung von B_n unter Berücksichtigung des Zukaufs:

$$B_{n+1} - B_n = B_n\rho - x_{n+1} \qquad \underbrace{(\phi_{n+1} - \phi_n)}_{\text{Menge des gekauften Assets}}$$

Lösung:

$$B_n = (1+\rho)^n B_0 - \sum_{k=1}^{k} x_k(\phi_k - \phi_{k-1})(1+\rho)^{k-k}$$

in (8.1):

$$W_n = W_0(1+\rho)^n + \sum_{k=0}^{k-1} \theta_k^n (x_{k+1} - x_n - \rho x_k)$$

mit $\theta_k^{(n)} = \phi_k\,(1+\rho)^{n-k-1}$

Alternative Darstellung durch sog. reduzierte Preise

$$\tilde{x}_k \equiv x_k\,(1+\rho)^{-k}$$

$$\rightsquigarrow W_n = (1+\rho)^k\,(W_0 + \sum_{k=0}^{k-1} \phi_k\,(\tilde{x}_{k+1} + \tilde{x}_k))$$

Die letzte Darstellung hat den Vorteil, dass man die Preisänderungen des risikobehafteten Wertes direkt der Gewinnerwartung des festverzinslichen Papiers gegenüberstellt.

Die Gesamtbilanz muss noch zwei weitere Preise berücksichtigen: den des Forwards und den Preis des Assets zum "Liefertermin". Wir finden also (aus Sicht des Verkäufers):

$$W_N = \mathcal{F} - x_N + (1+\rho)^N\ \underbrace{(W_0 + \sum_{k=0} \phi(\tilde{x}_{k+1} + \tilde{x}_k)}_{\text{Ergebnis des Handelns}}$$

wobei $\mathcal{F}$ der Preis des Forwards (Einnahme), x_N der Preis des Assets (Wert, der dem Käufer übergeben wird) ist.

$$= \mathcal{F} + (1+\rho)^N[W_0 - x_0 + \sum_{k=0}^{N-1} (\phi_k - 1)(\tilde{x}_{k+1} - \tilde{x}_k)]$$

Der Zufall (und damit das Risiko) lässt sich vollständig eliminieren, falls $\boxed{\phi_k = 1}$
$\rightsquigarrow W_N = \mathcal{F} + (1+\rho)^N(W_0 - x_0)$

Damit finden wir, wie schon durch die Plausibilitätsüberlegung vermutet:

$$\mathcal{F} = x_0(1+\rho)^N \simeq x_0\,\Gamma^{\tau T}$$

unabhängig von dem statistischen Eig.

Optionen

Wir betrachten europäische Kaufoptionen, die im Gegensatz zu den amerikanischen Optionen nur zu einem bestimmten Tag geltend gemacht werden können.

Die Preistheorie wurde im Jahre 1900 von Bachelier begründet, der einen fairen Kaufpreis anhand des zu erwartenden Assetpreises $x(T)$ errechnet hat. Ähnlich wie bei den Futures ist jedoch nicht dieser Preis der relevante, sondern derjenige, der eine Handelsstrategie berücksichtigt. Dieses Problem wurde von Black & Scholes 1973 für einen kontinuierlichen Gaußprozess gelöst: Es existiert eine Strategie mit Risiko 0, wenn die Preisänderungen durch einen kontinuierlichen Gaußprozess beschrieben werden.

Bilanz für den Wert: (für den Zeichner der Option)

$$W_N = [W_0 + C](1+\rho)^N - \max \quad (x_N - x_S, 0) + \sum \theta_k^N (x_{k+1} - x_k - Sx_k)$$

wobei x_S den "Strike" Preis, also den durch die Option festgelegten Preis zur Zeit T, bezeichnet.

Der Bilanz liegt zu Grunde, dass:

- die Prämie (Preis der Option) C sofort gezahlt wird
- ein Verlust nur dann eintritt, wenn $x_N > x_S$
- einen Hedging Strategie angewandt wird

Wichtig: Durch $Y(x_N)$ max $(x_N - x_S, 0)$ wird eine Nichtlinearität eingeführt, die, wenn die Fluktuationen nicht gaußverteilt sind, eine risikofreie Strategie ausschließen.

Aus $\langle \Delta W \rangle = 0$ folgt $[\Delta W = W_N - W_0(1+\rho)^N$:

$$(1+\rho)^N C = [\langle \max(x_N - x_S, 0) \rangle - \sum_{k=0}^{N-1} \langle \theta_k^N (x_{k+1} - x_k - \rho x_k) \rangle]$$

$\Rightarrow$ Der Preis hängt von der Hedging Strategie ab $(\theta_k^N = \phi_k^N (1+\rho)^{N-k-1})$. Der oben angegebene Preis ist der faire Preis; es wird in der Regel einen Risikoaufschlag geben.

Größenordnungen

Lange Laufzeiten führen zur Verteilung von $x(T)$, was durch die Gaußverteilung genähert werden kann (Mittelwert mT, Varianz $DT = \sigma^2 x_0^2 T$)

Berechnung für $x_S = x_0$ ("at the money")

$$\begin{aligned}\langle \max(x(T) - x_S, 0) \rangle &= \int_{x_S}^{\infty} dx \, \frac{x - x_S}{\sqrt{2\pi DT}} \exp(-\frac{(x - x_0 - mT)^2}{2DT}) \\ &\simeq \sqrt{\frac{DT}{2\pi}} + \frac{mT}{2} + \Theta\left(\sqrt{\frac{m^4T^3}{D}}\right)\end{aligned}$$

falls $mT \ll \sqrt{DT}$

Beispiel: $T = 100$ Tage, tägliche Volatilität $\sigma = 1$ %; $m = 5$ %; $x_0 = 100$ Punkte

$$\begin{aligned}\rightsquigarrow \sqrt{\frac{DT}{2\pi}} &\simeq 4 \quad \text{Punkte} \\ \frac{mT}{2} &\simeq 0.67 \quad \text{Punkte}\end{aligned}$$

Der Effekt der nicht verschwindenden Returns wird durch den Handel noch weiter abgeschwächt. In einer ersten Näherung kann man daher mit $m = 0$ rechnen. Die *Zinsen* $(H\rho)^N C$ haben für typische Laufzeiten einen geringen Effekt (z.B. $\Gamma = \rho\tau \sim 5$ % /Jahr $\Rightarrow$ Korrektur für 100 Tage $\simeq 0.06$ Punkte). Die Kosten für die Hedging Strategie sind nicht zu vernachlässigen: $\sim \langle \phi \rangle x_0 \tau T \simeq \frac{2}{3}$ Punkte (= 16 % des Optionspreises).

Quantitative Analyse des Optionspreises

Annahme: Preissprünge können dargestellt werden als

$$x_{k+1} - x_k = \rho x_k + \delta x_k$$

mit: $\langle \delta x_k \rangle \equiv m, = m\tau$; Wir betrachten zunächst (s.o.) $m = 0$: Die Hedging Strategie hängt offensichtlich nicht von δx_k ab, da der Kauf vorher festgelegt werden muss.

$$\begin{aligned}\langle \theta_k \delta x_k \rangle &= \langle \theta_k \rangle \langle \delta x_k \rangle = 0 \quad (m = 0) && (8.2) \\ \Rightarrow C &= (1 + \rho)^{-N} \langle \max(x_N - x_S, o) \rangle && (8.3) \\ &\equiv (1 + \rho)^{-N} \int_{x_S}^{\infty} dx (x - x_S) \, P(x, N | x_0, 0) && (8.4)\end{aligned}$$

[wegen (8.3) gilt: $(x_{k+1} - x_k - \rho x_K = \rho x_k + \delta x_k - \rho x_k = \delta x_k)$]

Wir brauchen nun also ein Modell für die Preisentwicklung. Es sei $\delta x_k = \eta_k x_k$ (mit $\eta_k \ll 1$); η_k sei verteilt wie $P(\eta_k)$

Die η_k sind unabhängige Zufallszahlen. Damit kann dann $P(x, N|x_0, 0)$ einfach berechnet werden.

Transformation der Variablen

$$x \to x_0(1+\rho)^N c^y$$

$$\Rightarrow C = x_0 \int\limits_{ys}^{\infty} dy\,(c^y - c^{yS}) P_N(y)$$

mit: $y_S = \log\left(\frac{x_S}{x_0[1+\rho]^N}\right)$ und $P_N(y) \equiv P(y, N|0, 0)$

$$\begin{aligned} x_k &= x_0\,(1+\rho)^k c^{yk} \\ y_{k+1} - y_k &\sim \frac{\eta_k}{1+\rho} - \frac{\eta_k^2}{2} \quad y_0 = 0 \end{aligned}$$

$+\Theta(\eta^3, \eta^2\rho, \ldots)$

Verteilung von $y_N = \sum\limits_{k=0}^{N-1} \left[\frac{\eta_k}{1+\rho} - \frac{\eta_k}{2}\right]$ im Fourierraum

$$\hat{P}_N(z) = [\tilde{P}, (z)]^N \tag{8.5}$$

mit

$$\boxed{\tilde{P}(z) = \int d\eta\, P_1(\eta)\, \exp\left[iz\left(\frac{\eta}{1+\rho} - \frac{\eta^2}{2}\right)\right]} \tag{8.6}$$

Der Limes von Black & Scholes

$P_1(\eta)$ sei gaußverteilt mit Mittelwert $\langle\eta\rangle = 0$; $\sigma_1 = \sqrt{\langle\eta^2\rangle} = \sigma\sqrt{\tau}$ aus (8.6) und (8.5).

Damit erhält man für $N \gg 1$:

$$P_N(y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi N_{\sigma_1}^{-2}}} \exp\left(-\frac{(y + N\sigma_1 2/2}{2N\sigma_1}\right)$$

Wir betrachten also den (unrealistischen!) Limes $N = T/\tau \to \infty$ mit: $N\sigma_1^2 = T\sigma^2$ endlich.

$\Rightarrow$ Man erhält den log-normal Prozess [1] in kontinuierlicher Zeit.

Das führt (mit der Ersetzung $(1+\rho)^N \to e^{\tau T}$) auf dem Black & Scholes Preis:

$$\begin{aligned} C_{BS}(x_0, x_S, T) &= x_0 \int_{yS}^{\infty} \frac{dy(e^y - e^{y_S})}{\sqrt{2\pi\sigma^2 T}} \exp\left(-\frac{(y+\sigma^2 T/2)^2}{2\sigma^2 T}\right) \\ &= x_0 P_{G>}\left(\frac{y-}{\sigma\sqrt{T}}\right) - x_S\, c^{-\tau T}\, P_{G>}\left(\frac{y_x}{\sigma\sqrt{T}}\right) \end{aligned}$$

mit x_0 als Ausgangspreis und x_S als Strike Preis.

Wobei $y_x = \log(x_s/x_0) - \tau T \pm \sigma^2 T/2$ und $P_{G>}$ die kumulative Gaußverteilung sind.

Diskussion: Die Eigenschaften von C_{BS} lassen sich durch die sog. "Greeks" beschreiben, also: den Ableitungen nach den Variablen von C_{BS}.

Die Abhängigkeit vom Ausgangspreis x_0 wird durch $\Delta = \frac{\partial C}{\partial x_0} > 0$ beschrieben, d.h. der Preis der Option wächst mit x_0, da es wahrscheinlicher wird, dass die Option den Strike-Preis passiert. Weiterhin hängt der Preis von der Laufzeit der Option T und der Volatilität σ ab. Dies wird durch $\Theta = \frac{\partial C}{\partial T} < 0$ und $\nu = \frac{\partial C}{\partial \sigma} > 0$ charakterisiert. Für $\tau T \ll 1$ kommen die Variablen nur in der Kombination $\sigma\sqrt{T}$ vor. Für wachsendes $\sigma\sqrt{T}$ wird der Optionsschein teurer.

Additive Modelle (Bachelier Limes)

Wir betrachten nun ein additives Modell:

$$x_N = x_0(1+\rho)^N + \sum_{k=0}^{N-1} \delta x_k (1+\rho)^{N-k-1}$$

wobei δx_k die stochastische Variable ist. Für große N wird $x_N - x_0(1+\rho)^N$ gaußverteilt mit Mittelwert 0 (falls $m = 0$). Aus dem zentralen Grenzwertsatz ergibt sich dann sofort für die Varianz $c_2(T)$:

$$c_2(T) = D\tau \sum_{l=0}^{N-1} (1+\rho)^2 \simeq DT[1 + \rho\,(N-1) + 0(\rho^2 N^2)]$$

[1] Wir sprechen deshalb von einem log-normal verteilten Preis, weil wir das multiplikative Modell benutzen, in dem die Returns η_k die natürlichen Variablen sind.

$D\tau$ ist die Varianz der δx_k, wobei die Volatilität durch $D \equiv \sigma^2 x_0^2$ gegeben ist.

Damit ergibt sich für den Preis

$$C_S(x_0, x_S, T) = e^{-\tau T} \int\limits_{x_S}^{\infty} \frac{dx}{\sqrt{2\pi c_2(T)}} (x - x_S) \exp\left(-\frac{(x - x_0 e^{\tau T})^2}{2c_2(T)}\right)$$

Falls Zinseffekte keine Rolle spielen, erhält man

$$C_S(x_0, x_S, T) = \int\limits_{x_S}^{\infty} dx (x - x_S) \frac{1}{\sqrt{2\pi DT}} \exp\left(-\frac{(x - x_0)^2}{2DT}\right)$$

Dieses Ergebnis lässt sich auch aus der Black-Scholes Formel gewinnen, wenn $\frac{x_N}{x_0} - 1 \ll 1$ ist.

Reale Optionspreise

Wir wenden uns nun realistischen Verteilungen für die Optionsscheine zu. Dazu betrachten wir zunächst den Fall, dass:

- die Verteilung der δx_k beliebig sei.
- Zinseffekte keine Rolle spielen, d.h. $\rho = 0$.
- Der Preisunterschied $x_N - x_0$ als Summe von $N = T/\tau$ unabhängig und identisch verteilten Zufallsvariablen darstellbar ist. N sei *endlich* $\Rightarrow$ man muss die "Fat Tails" der Verteilungen berücksichtigen.

In der Praxis werden diese Effekte empirisch berücksichtigt, durch die Einführung einer implizierten Volatilität (x_S, T), die die Differenz zwischen realem und Black & Scholes Preis korrigiert. Die Einführung von (x_S, T) macht aus der eigentlich vorgegebenen Volatilität einen variablen Parameter, der an die historischen Daten angepasst wird. Die empirischen Daten zeigen, dass (x_S, T) mit $|x_S - x_0|$ wächst (daher die Bezeichnung "volatility smile".

Die Einführung eines solchen ad hoc Parameters ist aus theoretischer Sicht natürlich nicht sehr befriedigend. Eine einfache Korrekturmöglichkeit besteht darin, dass man eine nicht verschwindende Kurtosis κ_1 berücksichtigt. Man kann zeigen (Übung), dass sich für $\kappa_1 \neq 0$ der folgende Preisunterschied zum Bachelier Preis ergibt:

$$\Delta C_\kappa = C_\kappa - C_{\kappa=0} = \frac{K, \tau}{2\theta T} \sqrt{\frac{DT}{2\pi}} \exp\left[-\frac{(x_S - x_0)^2}{2DT}\right] \left(\frac{x_S - x_0}{2DT} - 1\right)$$

Andererseits führt die Änderung von $C_{k=0}(x_0, x_S, T)$ durch $\delta D = 2\sigma x_0^2 \delta\sigma$ auf:

$$\delta C_{k=0}(x_0, x_S, T) = \delta\sigma x_0 \sqrt{\frac{T}{2\pi}} \exp\left[-\frac{(x_S - x_0)^2}{2DT}\right]$$

$\Rightarrow \kappa_1 \neq 0$ kann durch die Einführung einer effektiven Volatilität $\sum(x_S, T) = \sigma + \delta\sigma$ produziert werden:

$$\sum(x_S, \tau) = \sigma\left[1 + \frac{\kappa(T)}{2\theta}\left(\frac{(x_S - x_0)^2}{DT} - 1\right)\right]$$

mit $\kappa(T) = \kappa/N$.

Diskussion:
• Die Korrektur von $\kappa_1 \neq 0$ reicht bereits aus, um ruhige Märkte (d.h. mit konstanter Volatilität) zu beschreiben.
• Die quadratische Form ist verantwortlich für den sog. "volatility smile" (Skizze Fehlt)
• Es können auch andere Effekte wie die Nichtstationarität berücksichtigt werden.

Optimale Strategie und Restrisiko

Bislang wurde die Hedging Strategie vernachlässigt, da wir $\langle\psi_k \delta x_k\rangle = 0$ vorausgesetzt haben.

Im allgemeinen Fall wird es aber wichtig sein, das Hedging in die Preisbilanz miteinzubeziehen. Wir werden sehen, dass es im Black & Scholes Limes eine optimale Hedging Strategie $\phi^\star$ gibt, die auf das Risiko $R^\star = 0$ führt. Wenn man aber reale Annahmen über den Kursverlauf macht, ist eine solche risikofreie Strategie nicht möglich. Wir erhalten dann das Restrisiko $R^\star = \sqrt{\langle \Delta W^2[\phi\star]\rangle}$.

Zur Veranschaulichung des Problems behandeln wir zunächst den folgenden einfachen Fall:

Man kauft mit dem Ausstellen der Option die optimale Menge des betreffenden Assets (bei hohen Transaktionskosten evtl. eine geeignete Strategie):

$$\rightsquigarrow \Delta W = C - \max(x_N - x_S, 0) + \phi \sum_{k=0}^{N-1} \delta x_k \quad (\rho = 0)$$

Für $\langle\delta x_k\rangle = 0$ und $\langle\delta x_k \delta x_l\rangle = D\tau\delta_{kl}$ folgt

$$\begin{aligned} R^2 &= \langle(\Delta W)^2\rangle - \langle\Delta W\rangle^2 \\ &= ND\tau\phi^2 - 2\phi\langle(x_N - x_0)\max(x_N - x_S, 0)\rangle + R_0^2 \end{aligned}$$

mit $R_0^2 = \langle\ \max\ (x_N - x_S, 0)^2\rangle - \langle\ \max\ (x_N - x_S, 0)\rangle$

(intrinsisches Risiko $\hat{=}$ Risiko ohne Hedging).

Der optimale Wert $\phi^\star$ für den Parameter ϕ ergibt sich aus $\left.\frac{dR}{d\phi}\right|_{\phi=\phi^x} = 0$:

$$\rightsquigarrow \phi^\star = \frac{1}{D\tau N} \underbrace{\int_{x_S}^{\infty} dx (x - x_S)(x - x_0)\, P(x, N|x_0, 0)}_{=\langle (x_N - x_0)\max(x_N - x_S, 0)\rangle}$$

Im Fall, dass $P(x, N|x_0, 0)$ gaußverteilt ist, ergibt sich ($N\tau = T$):

$$\begin{aligned} \phi^\star &= \frac{1}{DT} \int_{x_S}^{\infty} \frac{dx}{\sqrt{2\pi DT}} (x - x_S)(x - x_0) \exp\left[-\frac{(x - x_0)^2}{2DT}\right] \\ &= -\int_{x_S}^{\infty} \frac{dx}{\sqrt{2\pi DT}} (x - x_S) \frac{\partial}{\partial x} \exp\left[-\frac{(x - x_0)^2}{2DT}\right] \end{aligned}$$

$\rightsquigarrow$

$$\boxed{\phi^\star = \int_{x_S}^{\infty} dx\, P(x, N|x_0, 0)} \tag{8.7}$$

Dies entspricht der Wahrscheinlichkeit, dass die Option ausgeführt wird.
Skizze fehlt
Vorgehen wie in der Variationsrechnung. Man gibt eine Familie von Strategien vor, die dann optimiert wird.

Allgemeiner Fall

Im allgemeinen Fall hängt die Strategie ψ_k^N von den Preisen x_k ab, so dass:

$$\Delta W = C(1+\rho)^N - \max(x_N - x_S, 0) + \sum_{k=0}^{N-1} \underbrace{\psi_k^N}_{(1+\rho)^{N-k-1}\phi_k} (x_k)\delta x_k$$

Wir erhalten wiederum einen Term $\propto \psi^4$, einen $\propto \psi$ und einen unabhängig von ψ (und damit unwesentlich für die Optimierung). Die wesentlichen Terme sind also:

$$\sum_{k=0}^{N-1} \langle (\psi_k^N)^2 \rangle \langle \delta x_k^2 \rangle - 2 \sum_{k=0}^{N-1} \langle \psi_k^N \delta x_k \max(x_N - x_S, 0) \rangle$$

wieder mit:

$$\langle \delta x_k \rangle = 0 \quad \text{und} \quad \langle \delta x_k \delta x_l \rangle = \langle \delta x_k^2 \rangle \delta_{k,l}.$$

Es gilt nun (die Strategie ψ_k^N hängt von x_k ab):

$$\langle (\psi_k^N)^2 \rangle \langle \delta x_k^2 \rangle = \int dx [\psi_k^N(x)]^2 \, P(x,k|x_0,0) \, \langle \delta x_k^2 \rangle$$

und

$$\begin{aligned}\langle \psi_k^N \delta x_k \max(x_N - x_S, 0) \rangle = \int dx \, \psi_k^N(x) \, P(x,k|x_0,0) x \\ x \int\limits_{x_S}^{\infty} dx' \langle \delta x_k \rangle_{(x,k)\to(x',N)} (x' - x_S) \, P(x', N|x,k)\end{aligned}$$

$\langle \delta x_k \rangle_{(x,k)\to(x',N)}$ bedeutet, dass wir solche Preisinkremente nehmen, die von x zur Zeit $k\tau$ nach x' zur Zeit $T = N\tau$ führen (ohne die Beschränkung hätte man natürlich $\langle \delta x_k \rangle = 0$).

Die Funktionen ψ_k^N müssen so gewählt werden, dass R minimiert wird. Dies wird durch die Funktionalableitungen $\partial / \partial \psi_k^N(x)$ bewerkstelligt.

Funktionalableitungen lassen sich plausibel machen, indem man die Funktion $\psi_k^N(x)$ an den n-Stützstellen $\psi_k^N(i)$ betrachtet. Nach diesen Variablen kann dann wie gewöhnlich abgeleitet werden. Die Funktionalableitung entspricht dann dem Kontinuumslimes dieser Ableitungen.

$$\begin{aligned}\rightsquigarrow \frac{\partial R}{\partial \psi_k^N(x)} &= 2\psi_k^N(x) \, P(x,k|x_0,0) \, \langle \delta x_k^2 \rangle \\ &\quad -2P(x,k|x_0,0) \int\limits_{x_S}^{\infty} dx' \langle \delta x_k \rangle_{(x,k)\to(x',N)} (x' - x_S) \, P(x', N|x,k)\end{aligned}$$

Damit erhalten wir

$$\boxed{\psi_k^{N\star}(x) = \frac{1}{\langle \delta x_k^2 \rangle} \int\limits_{x_S}^{\infty} dx' \langle \delta x_k \rangle_{(x,k)\to(x',N)} (x' - x_S) \, P(x', N|x,k)} \tag{8.8}$$

Die einzige Annahme, die dieser optimalen Strategie zugrunde liegt, ist, dass die δx_k unkorreliert sind.

Falls die δx_k identisch verteilt sind, gilt

$$\langle \delta x_k \rangle_{(x,k)\to(x',N)} = \frac{x' - x}{N - k}$$

(intuitiv klar: jedes δx_k trägt im Mittel gleich viel dazu bei, um von x nach x' zu kommen.)

Damit erhalten wir dann

$$\phi_k^{N^\star}(x) = \int\limits_{x_S}^{\infty} dx' \frac{x'-x}{DT(N-k)} (x'-x_S)\, P(x',N|x,k).$$

Falls $P(x',N|x,k)$ durch eine Gaußverteilung approximiert werden kann, gilt:

$$\frac{x'-x}{D\tau(N-k)} P_G(x',N|x,k) \equiv \frac{\partial P_G(x',N|x,k)}{\partial x}$$

$$\begin{aligned} \rightsquigarrow \phi_k^{N^\star}(x=x_k) &= \left.\frac{\partial C_{BS}[x,x_S,N-k]}{\partial x}\right|_{x=x_k} \\ &= \Delta(x_k, N-k) \end{aligned}$$

Dies ist das sog. "Delta"-Hedging.

Die Formel besagt, dass Preisänderungen δx_k der Optionspreise zwischen k und $k+1$ exakt durch den Gewinn oder Verlust $\phi_k^\star(x=x_k)dx_k$ kompensiert werden.

Restrisiko (durch Einsetzen von $\phi^\star$)

$$R^{\star^2} = R_0^2 - D\tau \sum_{k=0}^{N-1} \int dx\, P(x,k|x_0,0)\, [\phi_k^{N^\star}(x)]^2$$

Im Black & Scholes Limes kompensieren sich die beiden Terme, so dass $R^{\star^2} = 0$. Dies ist für reale Preise jedoch nicht der Fall:

Beispiel: δx_k sei gaußverteilt, aber τ *endlich*:

$$R^\star = \sqrt{\frac{D\tau}{2} P(1-P) + 0(\tau^2)}$$

mit P als Wahrscheinlichkeit, dass die Option ausgeführt wird.

Sei nun z.B. $P = \frac{1}{2}$ (d.h. $x_S = x_0$; ohne Drift)

$$\Rightarrow Q = \frac{R^\star}{\tau} \simeq \sqrt{\frac{\pi}{\theta N}}$$

mit $N = \frac{T}{\tau}$; wenn $N \simeq 25$ erhalten wir $Q \simeq 0.2$, also 20 % des Optionspreises. Wenn die Preise nicht gaußverteilt sind, ist es ebenfalls nicht möglich, eine perfekte Hedging-Strategie anzugeben. Dieses Ergebnis zeigt, dass der Black & Scholes Limes nicht das generische Verhalten wiederspiegelt, da alle Voraussetzungen, die dem Limes zugrunde liegen, gleichzeitig erfüllt sein müssen. Jede Anpassung an reale Preisentwicklungen führt auf ein endliches Restrisiko.

Kapitel 9

Numerische Verfahren zur Lösung von Master-Gleichungen

Stochastic many partiell systems

Die Master-Gleichung

Für kontinuierliche Zeit kann man die Master-Gleichung eines stochastischen Prozesses schreiben als:

$$\frac{\partial}{\partial t} P(s,t) = \underbrace{\sum_{s'} W_{s' \to s}\, P(s',t)}_{\text{Gewinn}} - \underbrace{W_{s \to s'}\, P(s,t)}_{\text{Verlust}}$$

wobei $P(s,t)$ die Wahrscheinlichkeit bezeichnet, den Zustand s zur Zeit t zu finden. Wir nehmen an, dass die Zustände diskret sind. Damit ergibt sich für die Normierung $\sum\limits_{s} P(s,t) = 1$.

Es wird im Weiteren nützlich sein, eine *Vektornotation* einzuführen. Damit lässt sich die Master-Gleichung schreiben als

$$\boxed{P_t\, |P(t)\rangle = -\mathcal{L} |P(t)\rangle} \tag{9.1}$$

Die Komponenten des Wahrscheinlichkeitsvektors geben die Wahrscheinlichkeit für einen bestimmten Zustand s an. Der *Liouville-Operator* $\mathcal{L}$ beinhaltet die Übergangsraten. Die Matrixelemente sind gegeben durch

$$\langle s' | \mathcal{L} | s \rangle = -W_{s' \to s} + \delta_{s,s'} \sum_{s''} W_{s \to s''}$$

Beispiel: 3 Zustandssystem; Zustände A, B, C

$$w_{AB} = W(A \to B)\,;\; w_{BA} = W(B \to A)\,;\; \text{etc.}$$

$$|P(t)\rangle = \begin{pmatrix} P(A,t) \\ P(B,t) \\ P(C,t) \end{pmatrix}$$

$$\mathcal{L} = \begin{pmatrix} (w_{AB} + w_{AC}) & -w_{BA} & w_{CA} \\ -w_{AB} & (w_{BA} + w_{BC}) & w_{CB} \\ -w_{AC} & -w_{BC} & (w_{CA} + w_{CB}) \end{pmatrix}$$

Damit:

$$\frac{\partial}{\partial t}|P(t)\rangle = -\mathcal{L}|P(t)\rangle$$

$$\Rightarrow \frac{\partial P(A,t)}{\partial t} = w_{BA}\,P(B,t) + w_{CA}\,P(C,t) - (w_{AB} + w_{AC}\,P(A,t)$$

Die formale Lösung von (??) kann sofort angegeben werden:

$$|P(t)\rangle = \exp(-\mathcal{L}\,t)\,|P_0\rangle$$

mit der Anfangsverteilung $|P_0\rangle \Rightarrow \mathcal{L}$ muss dia??? werden, um den Prozess zu lösen. Im Allgemeinen sind die Prozesse irreversibel, so dass $\mathcal{L}$ nicht hermitisch ist.

Weitere Eigenschaften:

- Nicht Hermitizität $\Rightarrow$ komplexe Eigenwerte sind möglich, die auf oszillatorisches Verhalten führen (realisiert in chemischen Reaktionen).
- Übergangsraten positiv $\Rightarrow$ Eigenwerte haben positiven Realteil $\Rightarrow$ die Amplituden der angeregten Zustände verschwinden exponentiell mit der Zeit.
- Stationärer Zustand (mindestens einer) $|P_s\rangle$ mit $\mathcal{L}|P_s\rangle = 0$
- Erhaltung der Wahrscheinlichkeit: $\langle||P_t\rangle = 1$ mit $\langle|| = \begin{pmatrix} \vdots \end{pmatrix} \Rightarrow \langle||\mathcal{L}\rangle = 0 \mathrel{\hat{=}}$ die Spaltensummen verschwinden (siehe Entwicklung von (9.2) und $\langle||P(0)\rangle = 1$

Master-Gleichung in diskreter Zeit

Übergangswahrscheinlichkeiten $Ps \to s' \in [0,1]$.

$$P_{t+1}(s) = P_t(s) + \underbrace{\sum_{s'} Ps' \to s\, P_t(s')}_{\text{Gewinn}} - \underbrace{\sum_{s'} Ps \to s'\, P_t(s)}_{\text{Verlust}}$$

Wieder in Vektornotation:

$$|P_{t+1}\rangle = \mathcal{T}|P_t\rangle \text{ mit der Transfer-Matrix } \mathcal{T}$$

Formale Lösung: $|P_t\rangle = \mathcal{T}^t\,|P_0\rangle$

Wahrscheinlichkeitserhaltung: $\langle||\mathcal{T} = \langle||$; d.h. die Spaltensummen sind 1.

Diffusion vieler Teilchen:

Der asymmetrische Exklusionsprozess

Kontinuierliche Zeit

Teilchen hüpfen mit der Rate q nach rechts und mit der Rate q^{-1} nach links, wenn der Platz frei ist, also:

$$\begin{array}{ccc} 1\phi & \xrightarrow{q} & \phi 1 \\ \phi 1 & \xrightarrow{q^{-1}} & 1\phi \\ & \overrightarrow{t} & t+dt \end{array}$$

Bemerkungen zur Simulation

(geschlossene Randbedingungen) Simulation besteht aus zwei Schritten, die iteriert werden müssen.

(1) Zufällige Auswahl zweier benachbarter Gitterplätze
Unleserlich
(2) Übergänge mit den Wahrscheinlichkeiten:

$$\begin{array}{ccc} \dfrac{q}{\max(q,q^{-1})} & \& & \dfrac{q^{-1}}{\max(q,q^{-1})} \\ |\phi \to \phi| & & \phi| \to |\phi \end{array}$$

Jeder Updateversuch entspricht einem Zeitinkrement $dt = \frac{1}{N\max(q,q^{-1})}$

Die Übergänge des N-site Problems werden definiert durch

$$W_{s\to s'} = \sum_{i=1}^{N-1}\left(\prod_{j=1}^{i-1}\delta s_j, s'_j\right)\left(\prod_{j=i+2}^{N}\delta s_j, s'_j\right)$$
$$\left(q\,\delta s_1\,\delta s_{i+1,0}\,\delta s'_{i,0}\,\delta s_{i+1,1} + q^{-1}\,\delta s_{i,0}\,\delta s_{i+1,1}\,\delta s'_{i,1}\,\delta s'_{i+1,0}\right)$$

Der zugehörige Liouville Operator ergibt sich zu:

$$\mathcal{L} = \sum_{i=1}^{N-1}\prod\otimes\prod\otimes\ldots\otimes L:\otimes\ldots\otimes\prod =: \sum_{i+1}^{N-1}\mathcal{L}_i$$

mit $L_i = 4\times 4$ Matrix, die das Hüpfen beschreibt und $\prod = 2\times 2$ Einheitsmatrix

In der Standardbasis lautet L_i:

$$L = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & q^{-1} & -q & 0 \\ 0 & -q^{-1} & q & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Der stationäre Zustand ist durch das Tensorprodukt

$$|P_s\rangle = \begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}\otimes\begin{pmatrix}q^{-1}\\q\end{pmatrix}\otimes\ldots\otimes\begin{pmatrix}q^{-N}\\q^{N}\end{pmatrix} = \otimes_{j=1}^{N}\begin{pmatrix}q^{-j}\\q^{j}\end{pmatrix}$$

gegeben. Da der Zustand als Tensorprodukt darstellbar ist, liegen keine Korrelationen vor.

Ergänzung Vektorrotation und Tensorprodukt:
Diskretes System mit N Gitterplätzen und l Zuständen $\Rightarrow l^N$ dimensionaler Vektorraum.
Hier Zustände besetzt $??\rangle = \binom{0}{1}$ und $|0\rangle = \binom{1}{0}$ unbesetzt.

Die Basisvektoren ergeben sich aus

$$|s\rangle = |s_1\rangle\otimes|s_2\rangle\otimes\ldots\otimes|s_3$$

wobei $\otimes$ das Tensorprodukt zweier Vektoren beschreibt, also:

$$\begin{pmatrix}a_1\\a_2\end{pmatrix}\otimes\begin{pmatrix}b_1\\b_2\end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 & b_1 \\ a_1 & b_2 \\ a_2 & b_1 \\ a_2 & b_2 \end{pmatrix}$$

Der ??vektor $\langle s|$ sei der transponierte Vektor von $|s\rangle$. In diesem Vektorraum könnnen die Wahrscheinlichkeitsverteilungen $P(t,s)$ geschrieben werden als

$$|P(t)\rangle = \sum_s P(t,s)|s\rangle$$

Summe über alle Zustände:

$$\langle 1| = \sum_s \langle s| = (1,1)^{\otimes N} = (1,1,\ldots,1)$$

$\Rightarrow$

- Erhaltung der Wahrscheinlichkeit $\langle ||P(t)\rangle = 1$

- Ensemblemittel $\langle A(t)\rangle = \langle ||A|P(t)\rangle$

- Lokale Operatoren wirken nur auf benachbarten Sites, z.B.:

$$A_i = 1 \otimes 1 \ldots \otimes \underbrace{A_i \otimes \ldots \otimes 1}_{i-\text{te Position}}$$

mit $1 = \binom{10}{01}$; $A =$ Single-Site-Operator

Tensorprodukt

$$\begin{pmatrix} a_1 & a_2 \\ a_3 & a_4 \end{pmatrix} \otimes B = \begin{pmatrix} a_1 B & a_2 B \\ a_3 B & a_4 B \end{pmatrix}$$

$B_{i,i+1}$: Zwei-Site-Operator (4×4)-Matrix

Teilchenzahloperator

?? $= \sum m_i$; mit $m_i = 1 \otimes 1 \otimes \ldots \otimes \overset{m}{i -}$ te Position $\otimes \ldots \otimes 1$ und $m = \binom{01}{00}$
?? kommutiert mit dem Teilchenzahloperator.

$\Rightarrow$ Man muss auf einen Sektor des Konfigurationsraumes projizieren, der der vorgegebenen Teilchenzahl entspricht.

Exklusionsprozess in diskreter Zeit

In diskreter Zeit hat man die Möglichkeit verschiedene Varianten des Updates zu wählen:

- *geordnet sequentieller Update* (von $1 \to N$ oder von $N \to 1$): Die Paare werden in einer festen Reihenfolge betrachtet und nach den lokalen Regeln aktualisiert.
- *Paralleler Update*: Die Aktualisierung erfolgt für alle Sites gleichzeitig (d.h. z.B. $10110 \to 01101$)

In diskreter Zeit muss die Stochastizität explizit eingeführt werden, d.h. es muss Wahrscheinlichkeiten geben, die von 0 oder 1 verschieden sind.

Als Mischform kann der untergitter-parallele Update aufgefasst werden. Man kann zeigen, dass diese Art der Aktualisierung aus mathematischer Sicht sehr eng mit dem geordnet sequentiellen Update verwandt ist. Andererseits entspricht die Implementierung eher dem parallelen Update:
Skizze fehlt

Die Transfer-Matrix lautet (N ungerade):

$$\mathcal{T} = (T_2 \otimes T_4 \otimes T_6 \otimes \ldots \otimes T_{N-1}) \quad (T_1 \otimes T_3 \otimes \ldots \otimes T_{N-2})$$

mit

$$\mathcal{T} = \frac{1}{q+q^{-1}} \begin{pmatrix} q+q^{-1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & q & q & 0 \\ 0 & q^{-1} & q^{-1} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & q+q^{-1} \end{pmatrix}$$

Dieser Prozess hat die gleiche stationäre Lösung wie die in kontinuierlicher Zeit.

Relation des asymetrischen Exklusionsprozesses mit anderen Modellen
Skizze fehlt

Reaktion-Diffusions Prozesse

Reaktions-Diffusions Prozesse sind stochastische Modelle für chemische Prozesse, in denen sich die Teilchen diff?? bewegen. Die verschiedenen (komplexen) Moleküle werden durch die Buchstaben A, B, C beschrieben, katalytische Prozesse, Zwischenprodukte etc. werden ignoriert und durch probabilistische *Übergangswahrscheinlichkeiten* ersetzt.

Beispiel: Adsorption an einer katalytischen Oberfläche $\Rightarrow$ effektive Teilchenerzeugung $\phi \to A$.

Weitere Prozesse:

- $A \to \phi$ (Auslöschung)
- $A \to 2A$ Bildung von "Nachkommen"
- $A \to B$ Transmutation
- $A \to A + B$ Induzierte Teilchenbildung
- etc.

Binäre Reaktion:

- $2A \to \phi$ Paar-Auslöschung
- $A + B \to \phi$ Zwei-Spezies-Auslöschung

Dazu: Diffusion von Teilchen

Beispiele:
(1) Koagulationsmodell

$$A\phi \overset{D}{\leftrightarrow} \phi A\,;\; AA \overset{\lambda}{\to} A\phi, \phi A\,;\; A\phi, \phi A \overset{\kappa}{\to} AA$$

$\rightsquigarrow$

$$\mathcal{L}^{\text{koag}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \\ 0 & D+\kappa & -D & -\lambda \\ 0 & -D & D+\kappa & -\lambda \\ 0 & -\kappa & -\kappa & 2\lambda \end{pmatrix}$$

Besonderheit: Der Vakuumzustand wird nicht dynamischer erreicht (man braucht zwei Teilchen zum Auslöschen).

(2) A???modell

$$A\phi \overset{D}{\leftrightarrow} \phi A\,;\; AA \to \phi\phi$$

Die Mean-Field-Näherung

Die Mean-Field Gleichungen können einfach durch Übersetzen der Reaktionsgleichungen in eine Differentialgleichung für die Teilchendichten übersetzt werden.

Für den Koagulationsprozess hat man die Prozesse:

$$\begin{array}{rcll} A & \xrightarrow{\kappa} & 2A & \text{Gewinnterm} \\ 2A & \xrightarrow{\lambda} & A & \text{Verlustterm} \end{array}$$

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial t}\rho = \kappa\rho - \lambda\rho^2(t)$$

$\Rightarrow$ 2 stationäre Lösungen: $\rho = 0$ und $\rho = \frac{\kappa}{\lambda}$

Interpretation: Die Lösung für $\rho = 0$ ist instabil, d.h. sobald wir einige Teilchen hinzufügen.

Zeitabhängige Lösung ($\rho(0) = 1$):

$$\rho(t) = \frac{\kappa}{\lambda - (\lambda - \kappa)\, e^{-\kappa t}}$$

Im Limes $\kappa \to 0$ gibt es nur noch eine Lösung des Systems, sie wird allerdings sehr langsam erreicht:

$$\lim_{\kappa \to 0} \rho(t) = \frac{1}{1 + \lambda t}$$

Mean-Field-Gleichungen und Diffusionsprozesse

Wir betrachten Hüpfen in eine Richtung. Damit haben wir für die Zeitentwicklung der Dichte

$$\tau_i(t + dt) = \begin{cases} \tau_i(t) & \text{mit Wahrsch. } 1 - 2\,dt \\ \tau_i(t) + [1 - \tau_i(t)]\tau_i & \text{mit Wahrsch. } dt \\ \tau_i(t)\,\tau_{i+1}(t) & \text{mit Wahrsch. } dt \end{cases}$$

$$\begin{aligned} \rightsquigarrow \frac{d\langle\tau_i\rangle}{dt} &= \langle\tau_{i-1}(1 - \tau_i)\rangle - \langle\tau_i(1 + \tau_{i+1})\rangle \\ &= \langle\tau_{i-1}\rangle - \langle\tau_i\rangle - \langle\tau_{i-1}\tau_i\rangle + \langle\tau_i\tau_{i+1}\rangle \end{aligned} \tag{9.2}$$

$\Rightarrow$ Die Dichten sind mit den Korrelationsfunktionen verknüpft. Exakte Lösung verlangt Lösung der kompletten Hierarchie.

Randbedingungen

- unendliches System $\rightarrow$ (9.2) ist überall gültig
- endliches periodisches System (Transaktionsinvarianz)
- offene Randbedingungen:
  - Input an Platz 1 mit Wahrscheinlichkeit $\alpha\, dt$
  - Output an Platz N mit Wahrscheinlichkeit $\beta\, dt$

$$
\begin{aligned}
\rightsquigarrow \frac{d\langle\tau_i\rangle}{dt} &= \alpha\langle(1-\tau_i)\rangle - \langle\tau_i(1-\tau_2)\rangle \\
\frac{d\langle\tau_N\rangle}{dt} &= \langle\tau_{N-1}(1-\tau_N)\rangle - \beta\langle\tau_N\rangle
\end{aligned}
$$

Die *Mean-Field-Näherung* besteht nun darin, dass man die Korrelationen entkoppelt, also:

$$
\frac{d\langle\tau_i\rangle}{dt} = \dot{\rho}_i = \rho_{i-1}(1-\rho_i) - \rho_i\,(1-\rho_{i+1})
$$

Periodische Randbedingungen

- Im stationären Fall ist das System translationsinvariant, d.h. $\rho_i = \rho_{i+1} = \rho$
- Man kann zeigen, dass die Mean-Field Lösung die exakte stationäre Lösung für das unendliche System darstellt (endliche Systeme: Auch Produktmaß, aber Projektion auf die feste Teilchenzahl!)

Offenes System

- Stationäre Lösung durch Iteration der Randgleichungen
- Kontinuumslimes:

$$
\rho_i \rightarrow \rho(x)\ ;\ \rho_{i\pm1} = \rho(x \pm dx) = \rho(x) \pm \rho'(x)dx + \frac{1}{2}\rho''(x)(dx^2)
$$

$$
\begin{aligned}
\Rightarrow \frac{\partial\rho(x)}{\partial t} &= (1-\rho)(\rho - \rho'(x)dx + \frac{1}{2}\rho''(x)dx^2) \\
&- \rho(1-\rho+\rho' dx + \frac{1}{2}\rho'' dx^2) \\
&= -(1-2\rho)\,\rho'(x)dx + \Theta dx^2
\end{aligned}
$$

wobei $dx = \frac{1}{N}$ und $N = \sharp$-Sites

mit den Randbedingungen:

$$
\rho(0) = \alpha \quad \text{und} \quad \rho(t) = (t-\beta)
$$

Die IPDF-Methode

Voraussetzungen:

- ID Gitter mit Gitterabstand Δx
- Prozess $A + A \to A$
- Translationsinvarianz

Es sei $E_n(t)$ die Wahrscheinlichkeit, dass n zufällig ausgewählte zusammenhängende Plätze leer sind.

Zusammenhang mit Messgrößen:

$$\text{Dichte:} \quad c(t) = (1 - E,(t))|\Delta x$$

Wir betrachten nun die Wahrscheinlichkeit, dass sich neben n leeren Sites ein Teilchen befindet:

$$\text{Prob} \quad (\overbrace{\circ \ldots \circ}^{n} \underbrace{\ n\ }_{n+1}) = E_n - E_{n+1}$$

Mit den $E_n(t)$ lässt sich auch die Wahrscheinlichkeit ausdrücken, dass der nächste Nachbar den Abstand n hat:

- $p_1(t)$: Das nächste Teilchen befindet sich auf dem Nachbar-Site
- $$p_2(t): \quad \underbrace{\bullet\circ}_{2}\bullet \quad \text{etc.}$$

Normierung: $\sum p_n = 1$

Mittlerer Abstand

$$\langle n\Delta x\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} np_n \Delta x - \frac{1}{c} = \sum_{n=1} np_n \quad (\text{mit} \quad \Delta x = 1)$$

Für einen zufällig gewählten Gitterplatz kann man die Wahrscheinlichkeit E_n, dass die nächsten n-Sites leer sind, durch die p_n ausdrücken: Bsp.: Werte SKIZZE FEHLT

$$\Rightarrow E_3 = P_4 c + 2E_4 - E_5$$
$$\text{bzw.} \quad p_n c = E_{n-1} - 2E_n + E_{n+1}$$

Rand: $cp_1 = 1 - 2E_1 + E_2$
aus Prob($\bullet\bullet$) $= 1 -$ [Prob (00)+ Prob (01)+ Prob (10)]

Der Kontinuumslimes

Wir führen die Koordinaten $x = n\Delta x$ ein, die Wahrscheinlichkeiten $E_n(t)$ werden durch die Funktionen $E(x,t)$ ersetzt. Im Limes $\Delta x \to 0$ erhalten wir:

$$\begin{aligned} c(t) &= -[\partial E(x,t)/\partial x]_{x=0} \quad (\text{aus}\, c(t) = (1-E_1)/\Delta x) \\ \text{und} \quad c(t)\, p(x,t) &= \partial^2 E(x,t)/\partial x \end{aligned}$$

Anwendung auf das Ein-??Koaleszensmodell:

$$A + A \to A \quad + \text{Diffusion}$$

Implementierung in den Variablen $E_n(t)$:

$$\text{Diffusion} \quad \underbrace{\circ\circ\circ\ldots\circ\circ}_{n}\bullet \quad (\text{Prob.}\, E_n - E_{n+1})$$

Hüpfrate: $D/(\Delta x)^2$

$$\left(\frac{\partial E_n}{\partial t}\right)_{\text{diffusion}} = 2\frac{D}{(\Delta x)^2}\left[\overbrace{(E_{n-1} - E_n)}^{\text{Gewinn}} - \overbrace{(E_n - E_{n-1})}^{\text{Verlust}}\right]$$

Hier gilt: 2 bezeichnet beide Seiten, $(\Delta x)^2$ gibt die Hüpfrate an, $E_{n-1} - E_n$ bedeutet Prob $(n-1)$ Sites frei zu haben und $E_n - E_{n-1}$ Prob n-Sites frei zu haben.

"**Geburt**": Das Teilchen am Rand erzeugt ein neues Teilchen im Segment mit der Rate $\frac{v}{\Delta x}$

$$\rightsquigarrow \left(\frac{\partial}{\partial t} E_n\right)_{\text{birth}} = -\frac{v}{\Delta x}(E_n - E_{n+1})$$

wobei $(E_n - E_{n+1})$ die Wahrscheinlichkeit für die Konfiguration oben ist.

Input $(\partial_t E_n)_{\text{input}} = -Rn\Delta x E_n$

für einen Input mit der Rate $R\Delta x$ auf jedem Site. Der Faktor n kommt von der Zahl der Möglichkeiten. Hier Näherung, d.h. keine Bilanz für die Erzeugung verschiedener neuer E_n.

Koaleszens

Durch die Koaleszens wird eine Randbedingung erzeugt. Wir betrachten die Koaleszens nicht nur der eigenen Rate, sondern als durch Diffusion auf einen besetzten Gitterplatz generiert.

$$\Rightarrow (\partial E_1)_{\text{diff}} = \frac{2D}{(\Delta x)^2}(1 - 2E_1 + E_2)$$

Die Konsistenz mit generellem Diffusionsterm heißt $E_0 = 1$.

Damit lautet die **Gesamtgleichung**:

$$\partial_t E_n = 2\frac{D}{(\Delta x)^2}\,(E_{n-1} - 2E_n + E_{n+1}) - \frac{v}{\Delta x}\,(E_n - E_{n+1}) \; - Rn\Delta x E_n$$

mit den Randbedingungen

$$E_0 = 1 \quad \text{und} \quad E_\infty = 0 \quad \text{bei endlicher Dichte}$$

Die Gleichung kann man mit Methoden der diskreten Mathematik lösen. Häufig ist es aber einfacher zum Kontinuumslimes überzugehen:

$$\boxed{\frac{\partial E(x,t)}{\partial t} = 2D\,\frac{\partial^2 E}{\partial x^2} + V\,\frac{\partial E}{\partial x} - RxE} \tag{9.3}$$

mit den Randbedingungen $E(0,t) = 1$ und $E(\infty,t) = 0$.

Irreversible Koaleszens

d.h. $v = 0$ und $R = 0$

$$\Rightarrow c(t) \to \frac{1}{\sqrt{2\pi D t}} \quad \text{für} \quad t \to \infty$$

und $p(x,t) \to \frac{x}{4Dt}\,\exp(-\frac{x^2}{8Dt})$, wenn $t \to \infty$ geht.

In dimensionslosen Variablen: $\xi = c(t)x$

$$P(\xi,t) = c(t)\,p(x,t) \to \frac{1}{2}\pi\xi\,\exp(-\frac{1}{4}\pi\xi^2) \quad \text{für} \quad t \to \infty$$

Skizze fehlt
$\Rightarrow$ Die Teilchen ordnen sich an!

Lösungsmethoden in diskreter Zeit

Eine Abstandsmethode in diskreter Zeit wurde für den TASEP mit paralleler Dynamik aufgestellt.

Die Bilanz wird über die Lücken zwischen zwei Teilchen aufgestellt, d.h. $P_0(t)$ bezeichnet die Wahrscheinlichkeit, dass sich auf dem benachbarten Gitterplatz ein Teilchen befindet. Analog steht $P_n(t)$ für die Wahrscheinlichkeit, dass das nächste Teilchen den Abstand $n+1$ hat.

Wir führen weiterhin die Wahrscheinlichkeit $g(t)$ ein, d.h. die Wahrscheinlichkeit, dass der Nachbar im nächsten Teilschritt hüpft. Schließlich sei die Hüpfwahrscheinlichkeit q und $p = 1 - q$.

Damit gilt für die Zeitentwicklung der Zustände:

$$P_k(t+1) = p\,g(t)\,P_{n-1}(t) + [\overbrace{qg(t)}^{\text{beide hüpfen}} + p\underbrace{\overline{g}(t)}_{\text{keiner hüpft}}]P_k(t) + q\overline{g}(t)\,P_{n+1}(t)$$

mit $g(t) =$ der Vordermann hüpft.

Randgleichungen

$$\begin{aligned} P_0(t+1) &= \overline{g}(t)[P_0(t) + q\,P_1(t)] \\ P_1(t+1) &= g(t)P_0(t) + [qg(t) + p\overline{g}(t)]\,P_1(t) + q\overline{g}(t)P_2(t) \end{aligned}$$

Die $P_k(t)$ müssen normiert sein, also

$$\sum_{n=0}^{\infty} P_1(t) = 1$$

Damit:

$$\begin{aligned} g(t) &= q\sum_{n=1}^{\infty} P_n(t) = q[1 - P_0(t)] \\ \text{und}\quad \overline{g}(t) &= 1 - g(t) = 1 - q + q\,P_0(t) = p \times q\,P_0(t) \end{aligned}$$

Die Dichte ($\Delta x = 1$) ergibt sich aus

$$\sum_{n=0}^{\infty}(n+1)\,P_k(t) = \frac{1}{c}\left(= \frac{L}{N} = \frac{\sum\limits_{n=0}^{\infty}(n+1)\,N_n}{N}\right)$$

Wir interessieren uns für die stationäre Verteilung, d.h. $P_k(t+1) = P_k(t) = P_k$.

Lösung des Gleichungssystems durch die erzeugende Funktion:

$$P(z) = \sum_{n=0}^{\infty} P_k\,z^{n+1}$$

Multiplikation der Gleichungen mit z^{k+1} führt auf

$$P(z) = \frac{q(\overline{g} + gz)z\,P_0}{q\overline{g} - pqz}$$

aus $P(1) = 1$ und $P^1(1) = 1/c$

$$\begin{aligned} P_0 &= \frac{2qc - 1 + \sqrt{1 - 4qc(1-c)}}{2qc} \\ P_k &= \frac{P_0}{P}\left(\frac{Pg}{q\bar{g}}\right)^k = \frac{P_0}{P}\left(\frac{P(1-P_o)}{P_0 + p(1-P_o)}\right)^k \end{aligned}$$

Der Fluss ergibt sich zu:

$$\begin{aligned} \phi(\rho, p) &= \rho g = qc\,(1 - P_0) \\ &= \frac{1 - \sqrt{1 - 4q\rho(t-\rho)}}{2} \end{aligned}$$

Der Fluss ist also verschieden von ??-Fluss $\phi ng(\phi, p) = p\rho(1-\rho)$.

Die Cluster-Approximation

Wir werden die Cluster-Approximation am Beispiel des *Nagel-Schreckenberg-Modells* einführen, einem einfachen Verkehrsmodell. Das Modell wird durch die folgenden Regeln definiert:

- R1: **Beschleunigung**
  $v_j(t + 1/3) = \min\left(v_j(t) + 1, v_{\max}\right.$
- R2: **Bremsen**
  $v_j(t + 2/3) = \min\left[a_j(t),\, v_j(t + 1/3)\right];\ d_j = x_{j+1}(t) - x_j(t) - 1$
- R3: Zufälliges Bremsen
  $v_j(t+1) \stackrel{P}{=} \max(v_j(t + 2/3) - 1, 0)$
- R4: Fahren
  $x_j(t+1) = x_j(t) + v_j$

Wir werden die Analyse nach dem Beschleunigungsschritt durchführen, d.h. alle Autos haben mindestens die Geschwindigkeit 1.

Die Cluster-Approximation ist eine systematische Erweiterung der Mean-Field Theorie. In dem n-Cluster beispielsweise wird die Entwicklung auf n-Sites exakt behandelt.

Wir müssen also die Evolutionsgleichung für die Wahrscheinlichkeiten $P(\tau_j(t), \ldots, \tau_{j+n-1}(t))$ bestimmen. Dazu muss man beachten, dass die Autos von $v_{\max}$-Zellen in den Cluster hineinfahren und den Cluster auf den $v_{\max}$ benachbarten Zellen verlassen. $\to$ Man analysiert $n + 2v_{\max}$ Zellen. Damit hat die Master-Gleichung für einen Cluster der Länge (n) die Form:

$$P(\tau^{(n)}) = \sum_{\{\tau^{(n+2v_{\max})}\}} W(\tau^{(n+2v_{\max})} \to \tau^{(n)}\, P(\tau^{(n+2v_{\max})})$$

mit $\tau^{(n+2v_{\max})} = (\tau_{j-v_{\max}}, \dots \tau_{j+n+v_{\max}-1})$

Die Übergangswahrscheinlichkeiten werden aus den Updateregeln bestimmt. Für translationsinvariante Systeme sind die Wahrscheinlichkeiten unabhängig von j.

Damit die Hierarchie abbricht, muss man die Wahrscheinlichkeiten der $(n+2v_{\max})$-Cluster durch die n-Cluster ausdrücken. Graphisch sei dies für $n=3$, $v_{\max}=2$ illustriert:

Skizze fehlt

Damit erhalten wir:

$$\begin{aligned} P(\tau^{(7)}) &= P(\tau_{j-2}\,|\tau_{j-1},\,\tau_j)\,P(\tau_{j-1}\,|\tau_j,\tau_{j+1})\,P(\tau_j,\tau_{j+1},\tau_{j+2}) \\ &\quad P(\tau_{j+1},\tau_{j+2}\,|\tau_{j+3})\,P(\tau_{j+2}\tau_{j+3}\,|\tau_{j+4}) \end{aligned}$$

Wobei:

$$P(\tau_1\,\tau_2,\dots\tau_n) = \frac{P(\tau_1,\dots,\tau_N)}{\sum\limits_{\{\tau\}} P(\tau,\tau_2,\dots,\tau_N)}$$

$$\text{und} \quad P(\tau_1,\dots\tau_{n-1}\,|\tau_n) = \frac{P(\tau_1,\dots,\tau_N)}{\sum\limits_{\{\tau\}} P(\tau_1,\dots,\tau_{n-1}\tau)}$$

Mit diesem Ansatz erhalten wir $(v_{\max}+1)^n$ nichtlineare Gleichungen. Die Zahl der Gleichungen kann aber durch die sog. Kolmogorov Konsistenzbedingungen reduziert werden:

$$\begin{aligned} \sum_{\tau=0}^{v_{\max}} P(\tau_1,\dots,\tau_{n-1},\tau) &= P(\tau_1,\dots,\tau_{n-1}) \\ &= \sum_{\tau=0}^{v_{\max}} P(\tau,\tau_1,\dots,\tau_{n-1}) \end{aligned}$$

Wir betrachten nun explizit den Fall $v_{\max}=1$ und $n=2$.

Konsistenzbedingungen:

$$\begin{aligned} &\text{(i)} && P(0,0)+P(1,0) = P(0) = 1-\rho \Rightarrow P(0,0) = 1-\rho-P(1,0) \\ &\text{(ii)} && P(1,0)+P(1,1) = P(1) = \rho \Rightarrow P(1,1) = \rho - P(1,0) \\ &\text{(iii)} && \text{Translationsinvarianz}:\ P(0,1) = P(1,0) \end{aligned}$$

Damit verbleibt die Gleichung für $P(1,0)$:

$$\begin{aligned}
P(1,0) &= q[\underbrace{P(1,0,0,0)+P(1,0,0,1)}_{=P(1,0,0)}] \\
&+ q^2 P(1,0,1,0) \\
&+ p[\underbrace{P(0,1,0,0)+P(1,1,0,0)+P(0,1,0,0)+P(0,1,0,1)}_{=P(1,0)}] \\
&+ q[\underbrace{P(0,1,1,0)+P(1,1,1,0)}_{=P(1,1,0)}]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\Rightarrow qP(1,0) &= q\,\frac{P(1,0)P(0,0)}{\underbrace{\sum P(1,0)+P(0,0)}_{=1-\rho}} \\
&+ q^2\,\frac{P(1,0)P(0,1)P(1,0)}{\underbrace{(P(1,0)+P(0,0))}_{1-\rho}\times\underbrace{(P(1,0)+P(1,1))}_{\rho}} \\
&+ q\,\frac{p(1,1)P(1,0)}{\underbrace{\sum P(1,0)+P(1,1)}_{\rho}}
\end{aligned}$$

$\Rightarrow 1 = P(0,0)\,/\,(1-\rho) + q\,P(1,0)^2\,/\,\rho(1-\rho) + P(1,1)\,/\rho$

Insgesamt ergibt sich dann:

$$P(1,0) = \frac{1}{2q}\,[1-\sqrt{1-4q\,\rho(1-\rho)}] + \rho(1-\rho)$$

Und für den Fluss ergibt sich dann:

$$\mathcal{J}(\rho) = \frac{1}{2}\,[1-\sqrt{1-4q\,\rho(1-\rho)}]$$

Durch den parallelen Update werden also lokale Korrelationen erzeugt, die den Fluss erhöhen. Man kann zeigen, dass dieses Ergebnis bereits das exakte Ergebnis für den stationären Zustand darstellt.

Garten-Eden-Zustände

Beim parallelen Update gibt es Zustände, die keinen Vorgänger haben. Solche Zustände, die Garten-Eden-Zustände, können im stationären Zustand nicht auftauchen. Wertet man die Mastergleichung nach dem Fahren aus, kann es für $v_{\max} = 1$ keine Zustände geben, in denen hinter einem bewegten Teilchen ein weiteres zu finden ist. Dies kann man in den Mean-Field-Gleichungen berücksichtigen:

$$\begin{aligned}\rho_0 &= N(\rho_0 + p(1-\rho))\rho \quad \text{mit} \quad \rho = \rho_0 + \rho_1 \\ \rho_1 &= N\, q\rho(1-\rho)\end{aligned}$$

Die erste Gleichung berücksichtigt, dass es vor einem Teilchen (Wahrscheinlichkeit ρ) nur ein Loch (Prob. $(1-\rho)$) oder ruhendes Teilchen (Prob. ρ_0) geben kann. N muss so gewählt werden, dass $\rho_0 + \rho_1 = \rho$ gilt $\Rightarrow N = \frac{1}{c_0+d}$

Mit dieser Methode wird das exakte Ergebnis reproduziert.

Systeme mit Unordnung

Bislang haben wir uns auf solche Systeme beschränkt, die weder teilchen- noch platzabhängige Übergangswahrscheinlichkeiten besitzen. Es zeigt sich jedoch, dass gerade für niedrig dimensionale Systeme sehr große Effekte durch die Unordnung hervorgerufen werden. Wir wollen dies am Beispiel von teilchenabhängigen Hüpfraten in kontinuierlicher Zeit studieren.

Teilchenabhängige Hüpfraten lassen sich am leichtesten durch Abstandsvariablen handhaben. Für die Abstände hat man folgende Zeitentwicklung:

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t} P_i(n) = &- p_i\, P_i(n) - p_{i+1} P(n)[1 - P_{i+1}(0)] \\ &+ P_{i+1}[1 - P_{i+1}(0)]\, P(n-1) + p_i\, P_i(n+1)\end{aligned} \tag{9.4}$$

(Zur Vereinfachung der Notation haben wir die Zeitabhängigkeit der $P_i(n)$ nicht aufgeführt.)

mit der Randgleichung:

$$\frac{\partial}{\partial t} P_i(0) = -p_{i+1}\, P_i(0)[1 - P_{i+1}(0)] + p_i P_i(1) \tag{9.5}$$

Die stationäre Lösung ergibt sich aus dem Ansatz:

$$P_i(n) = (1 - \alpha_i)\, \alpha_i^n \tag{9.6}$$

Dieser Ansatz ist die stationäre Lösung des Prozesses, falls

$$\alpha_i p_i = P_{i+1}\, \alpha_{i+1} = \text{ const } = v \tag{9.7}$$

(9.6) ist natürlich nur dann eine Lösung, wenn alle Verteilungen normierbar sind, d.h., falls $\alpha_i < 1$; $i = 1, 2, \ldots, N$.

Wir betrachten nun solche p_i, die unabhängig verteilt sind gemäß $f(p)$ auf dem Intervall $[c, 1]$; $c > 0$.

Damit erhalten wir implizit für die Geschwindigkeit:

$$\frac{1-\rho}{\rho} = \overline{\langle n_i \rangle} = v \int_c^1 \frac{dp\, f(p)}{p - v}$$

Die x-ste Gleichung ergibt sich aus:

$$\begin{aligned} L &= \sum_{i=1}^{N} \langle w_i \rangle + 1 \qquad \left(\langle w_i \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} n\, P_i(n) = \frac{\alpha_i}{1-\alpha} \right) \\ \frac{L}{N} &= \frac{1}{\rho} = \frac{1}{N} \sum \langle n_i \rangle + 1 = \overline{\langle n_i \rangle} + 1 \rightsquigarrow \frac{1-\rho}{\rho} = \overline{\langle n_i \rangle} \end{aligned}$$

Mit:

$$\frac{\alpha_i}{1-\alpha_i} = \frac{v}{(P_i - v)} = \frac{v}{p_i - v}$$

Es ergibt sich im Kontinuumslimes:

$$\overline{\langle n_i \rangle} = v \int_c^1 dp\, \frac{f(p)}{p-v}$$

Für die Varianz der Abstandsverteilung ergibt sich

$$\Delta^2 \equiv \overline{\langle n_i^2 \rangle - \langle n_i \rangle^2} = -v\rho^2 \left(\frac{dv}{d\rho} \right)^{-1}$$

Es gibt einen Phasenübergang bei einer Dichte $\rho^\star$, der mit der Existenz des Integrals:

$$\int_c^1 dp\, \frac{f(p)}{p-v} \quad \text{für} \quad v = c$$

Damit hängt der Phasenübergang davon ab, ob $f(p)$ schnell genug für $p \to c$ verschwindet. Wenn $f(p) \sim (p-c)^n$ gilt, kann man die Phasenübergänge nach dem Wert von n klassifizieren:

- (i) Für $n \leq 0$ gibt es keinen Phasenübergang für $\rho > 0$.
  Für $\rho \to 0$ divergieren die Fluktuationen der Lücken wie $\Delta^2 \sim \exp(1/\rho)$.
- (ii) Für $0 < n \leq 1$: $\Delta^2 \sim (\rho - \rho^\star)^{-(1-n)/n}$; d.h. die Fluktuationen divergieren bei $\rho^\star$

- (iii) $n < 1$: Δ^2 divergiert nicht für $\rho \to \rho^\star$
- (iv) $n > 0$: $\overline{\text{Prob}\,[n_i = k]}|_{\rho=\rho^\star} \sim k^{-(n+2)}$ für $k \gg 1$.
  $\Rightarrow$ Die Momente von höherer Ordnung als $k+1$ divergieren am Phasenübergang.

Die Beschreibung ist nur gültig, wenn $\rho > \rho^\star$. Unterhalb von $\rho = \rho^\star$ muss man ausnutzen, dass $v(\rho) = c$ gilt. Die Vorstellung ist dann, dass sich vor dem langsamsten Teilchen eine große Lücke bildet.

Der Matrix-Produktansatz

Der Matrix-Produktansatz ist eine wichtige Technik, um den exakten stationären Zustand eines stochastischen Prozesses zu berechnen. Der Matrix-Produktansatz stellt eine Generalisierung der einfachen Produktzustände dar.

Der Matrix-Produktansatz für den Exklusionsprozess

Skizze fehlt

Wir betrachten den Exklusionsproess mit In- und Output an den Rändern. Der Liouville-Operator des Systems lautet:

$$\mathcal{L} = \rho_1 + \rho_N + \sum_{i=1}^{N-1} \mathcal{L}_i$$

mit

$$\mathcal{L}_i = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & q^{-1} & -q & 0 \\ 0 & -q^{-1} & q & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\rho_i = \begin{pmatrix} \alpha & 0 \\ -\alpha & 0 \end{pmatrix} \quad ; \quad \rho_N = \begin{pmatrix} 0 & -\beta \\ 0 & \beta \end{pmatrix}$$

in der Standardbasis.

Der Matrix-Produktansatz besteht nun darin, dass man den stationären Zustand durch

$$|P_S\rangle = \frac{1}{t} \quad \langle W| \begin{pmatrix} E \\ D \end{pmatrix}^{\otimes N} |V\rangle$$

Die i.A. nicht-kommutierenden Matrizen E, D und die Vektoren sind auf einem beliebigen Hilfsraum definiert.

Die Lösung vereinfacht sich auf der Linie $\alpha + \beta = q - q^{-1}$. Entlang dieser Linie ist der stationäre Zustand gegeben durch:

$$|P_S\rangle = \frac{1}{z}\begin{pmatrix} e \\ d \end{pmatrix} \otimes \ldots \otimes \begin{pmatrix} e \\ \alpha \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e \\ d \end{pmatrix}^{\otimes N}$$

mit $e = 1/\alpha$ und $d = 1/\beta$ sowie $Z = (c+d)^N$.

Die Stationarität kann durch die Beziehungen

$$\begin{aligned} \rho_1 \begin{pmatrix} e \\ d \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad ; \quad S_N \begin{pmatrix} e \\ d \end{pmatrix} = -\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \\ \text{und } \mathcal{L}_i \left[\begin{pmatrix} e \\ d \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} e \\ d \end{pmatrix} \right] &= -\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} e \\ d \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} e \\ d \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

einfach hergeleitet werden, da sich eine Teleskopsumme ergibt. Explizit für ein System mit $L = 3$:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}\,|P_S\rangle \ : \ S_1 \ [(a) \otimes (a) \otimes a] &= \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \otimes (a) \otimes (a) \\ \mathcal{L}_1 \ [(a) \otimes (a) \otimes a] &= -\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \otimes (a) \otimes (a) + (a) \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \otimes (a) \\ \mathcal{L}_2 \ [(a) \otimes (a) \otimes a] &= -(a) \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \otimes (a) + (a) \otimes (a) \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \\ S_2 \ [(a) \otimes (a) \otimes a] &= -(a) \otimes (a) \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Durch diesen formalen Trick kann der Beweis der Stationarität einfach erbracht werden.

Im allgemeinen Fall kann für die Operatoren E, D aber keine einfache Form gefunden werden. Es gilt vielmehr:

$$\begin{aligned} \langle W| S_1 \begin{pmatrix} E \\ D \end{pmatrix} &= \langle W \left| \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \right. \\ S_N \begin{pmatrix} E \\ D \end{pmatrix} + V\rangle &= -\left. \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \right| V\rangle \end{aligned}$$

Diese beiden Gleichungen geben die Ränder an.

Und

$$\mathcal{L}_i \left[\begin{pmatrix} E \\ D \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} E \\ D \end{pmatrix} \right] = -\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} E \\ D \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} E \\ D \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

Dies führt auf die Algebra

$$qDE \ - q^{-1}ED = D + E$$

mit den Randbedingungen

$$\langle W|E = \alpha^{-1}\langle W| \ ; \ D|V\rangle = \beta^{-1}|V\rangle$$

Durch diese Algebra können wir alle n-Punkt-Korrelationen für endliche Systeme berechnen, z.B.

$$\langle \tau_i \tau_j \rangle = \frac{\langle W|C^{i-1}D\,C^{j-i-1}D\,C^{N-j}|V\rangle}{\langle W|C^N|V\rangle}$$

mit $C = D + E$.

Zur Berechnung der Mittelwerte muss man die Operatoren in "Normalform" bringen, damit die Randgleichungen angewendet werden können.

Zur Vereinfachung der Rechnungen betrachten wir den Fall, dass das Hüpfen nur nach rechts erfolgt. Dann gilt ($q = 1$)

$$DE = D + E$$

Für ein 3-Site System berechnen wir dann leicht

$$\begin{aligned} P(0,0,0) &= \frac{\langle V|E^3|W\rangle}{\langle V|C^3|W\rangle} = \frac{1}{\alpha^3}\,z^{-1} \\ P(1,0,0) &= \frac{\langle V|DE^2|W\rangle}{z} = \frac{\langle V|DE|W\rangle + \langle V|E^2|W\rangle}{z} \\ &= \frac{1}{\alpha} + \frac{1}{\beta} + \frac{1}{\alpha^2} \end{aligned}$$

usw.

Für den Strom ergibt sich ebenfalls leicht

$$J = \frac{\langle V|C^{i-1}DE\,C^{N-i-1}|W\rangle}{\langle V|C^N|W\rangle} = \frac{V|C^{N-1}|W}{\langle V|C^N|W}$$

Die Zustandssumme z kann man explizit berechnen:

$$z = \frac{\langle V|C^N|W\rangle}{\langle V|W\rangle} = \sum_{P=1}^{N} \frac{P(2N-1-p)!}{N!(N-p)!} \quad \frac{\beta^{-p-1} - \alpha^{-p-1}}{\beta^{-1} - \alpha^{-1}}$$