

Anhang C

Von Markov-Prozessen und der Mastergleichung

Das Fundament für die von Metropolis vorgeschlagene Methode der Monte-Carlo-Simulation [43] sind die Konzepte der Markov-Prozesse, Markov-Ketten und der Mastergleichung. Deshalb wird es in diesem Abschnitt darum gehen, diese Begrifflichkeiten zu erarbeiten, um mit deren Verständnis das gewünschte Ziel sicher erreichen zu können. Dabei folgen wir einem Weg, wie er ausführlich im Standardwerk über stochastische Prozesse [75] vorgezeichnet wird und beziehen unsere Zitationen darauf, sofern nicht anders gekennzeichnet.

C.1 Definitionen

Ein stochastischer Prozess ist eine Folge von Zufallserscheinungen, die die zeitliche Entwicklung eines Systems beschreibt. Sei Γ die Menge aller möglichen Zustände, die das System einnehmen kann. Dabei kann Γ sowohl diskret als auch kontinuierlich sein, oder sich aus diskreten und kontinuierlichen Teilmengen zusammensetzen. Sei weiter $p(x, t)$ die durch den stochastischen Prozess festgelegte Wahrscheinlichkeitsverteilung auf Γ . Für die Wahrscheinlichkeitsverteilung gilt, dass sie für jeden Zustand $x \in \Gamma$ und für jede beliebige Zeit t durch eine positiv semidefinite Funktion $p(x, t) \geq 0$ gegeben ist, wobei $p(x, t)dx$ die Wahrscheinlichkeit angibt, dass während des Prozesses zur beliebigen Zeit t ein Wert im Intervall zwischen x und $x + dx$ angenommen wird. Im Fall diskreter Mengen ist $p(x, t)$ die Wahrscheinlichkeit dafür, dass zur Zeit t der Prozess in den Zustand x gerät.

Die Wahrscheinlichkeitsverteilung besitzt für beliebiges t eine Normierungseigenschaft, die für eine kontinuierliche Menge Γ

$$\int_{\Gamma} p(x, t) dx = 1$$

lautet, während sie für diskrete Γ in der Form

$$\sum_{x \in \Gamma} p(x, t) = 1$$

dargestellt werden kann. Besteht Γ aus diskreten und kontinuierlichen Teilmengen, so kann die Normierungseigenschaft von $p(x, t)$ als Summe der Normierungseigenschaften beider Teile ausgedrückt werden.

Aus der Wahrscheinlichkeitsverteilung des stochastischen Prozesses lässt sich eine Verbundwahrscheinlichkeit $p(x_1, t_1; x_2, t_2; \dots; x_n, t_n)$ definieren. Diese ist die Wahrscheinlichkeit, dass sich der Prozess zur Zeit t_1 im Zustand x_1 befindet und zur Zeit t_2 im Zustand x_2 und \dots und zur Zeit t_n im Zustand x_n . Weiter brauchen wir zur Definition von Markov-Prozessen die bedingte Wahrscheinlichkeit $p(x_1, t_1 | x_2, t_2)$. Das ist die Wahrscheinlichkeit des Auftretens von Zustand x_1 zur Zeit t_1 , unter der Bedingung, dass sich das System zur Zeit t_2 im Zustand x_2 befindet. Allgemein definieren wir für die Zeitfolge $t_1 \geq t_2 \geq \dots \geq t_m \geq t_{m+1} \geq \dots \geq t_n$ die bedingte Wahrscheinlichkeit zu

$$\begin{aligned} & p(x_1, t_1; \dots; x_m, t_m | x_{m+1}, t_{m+1}; \dots; x_n, t_n) \\ &= \frac{p(x_1, t_1; \dots; x_m, t_m; x_{m+1}, t_{m+1}; \dots; x_n, t_n)}{p(x_{m+1}, t_{m+1}; \dots; x_n, t_n)}. \end{aligned} \quad (\text{C.1})$$

Für die bedingte Wahrscheinlichkeit gilt die Normierungseigenschaft und sie ist positiv semi-definit.

Der Begriff der bedingten Wahrscheinlichkeit ermöglicht uns, eine Definition für Markov-Prozesse zu geben.

Definition 5 *Ein Markov-Prozess ist ein stochastischer Prozess mit der Eigenschaft, dass für alle n aufeinanderfolgenden Zeiten ($t_1 \geq t_2 \geq \dots \geq t_n$) die Beziehung*

$$p(x_1, t_1 | x_2, t_2; \dots; x_n, t_n) = p(x_1, t_1 | x_2, t_2) \quad (\text{C.2})$$

gilt.

Markov-Prozesse sind die bei weitem wichtigsten Prozesse der Physik. Laut Definitionsgleichung (C.2), zeichnen sie sich dadurch aus, dass die Wahrscheinlichkeitsverteilung zum Zeitpunkt t_1 nicht durch das Wissen aller Zustände beeinflusst wird, die das System zu früheren Zeitpunkten eingenommen hat, sondern dass sich dieses nur an genau einen Zustand erinnert, nämlich an den unmittelbaren Vorgänger des betrachteten Zustands. Die Wahrscheinlichkeit $p(x_1, t_1 | x_2, t_2)$ heisst Übergangswahrscheinlichkeit.

Strikte Anwendung von Gleichung (C.1) und der Definitionsgleichung für Markov-Prozesse (C.2) führt zu

$$\begin{aligned} p(x_1, t_1; x_2, t_2; x_3, t_3) &= p(x_1, t_1 | x_2, t_2; x_3, t_3) p(x_2, t_2; x_3, t_3) \\ &= p(x_1, t_1 | x_2, t_2) p(x_2, t_2 | x_3, t_3) p(x_3, t_3), \end{aligned}$$

was sich verallgemeinern lässt zu

$$\begin{aligned} p(x_1, t_1; x_2, t_2; \dots; x_n, t_n) &= p(x_1, t_1 | x_2, t_2; \dots; x_n, t_n) p(x_2, t_2; \dots; x_n, t_n) \\ &= p(x_1, t_1 | x_2, t_2) p(x_2, t_2 | x_3, t_3) \cdot \dots \\ &\quad \dots \cdot p(x_{n-1}, t_{n-1} | x_n, t_n) p(x_n, t_n). \end{aligned}$$

Es ist erkennbar, dass allgemein ein Markov-Prozess vollständig durch die Funktion der Wahrscheinlichkeitsverteilung $p(x_n, t_n)$ und durch die Funktion der Übergangswahrscheinlichkeit $p(x_{n-1}, t_{n-1} | x_n, t_n)$ bestimmt wird. Die ganze Hierarchie aller $p(x_1, t_1; \dots; x_n, t_n)$ kann durch sie konstruiert werden.

Markov-Ketten sind ein Spezialfall von Markov-Prozessen.

Definition 6 Eine Markov-Kette ist ein Markov-Prozess, mit der Eigenschaft, dass der Bereich der möglichen Zustände für Γ eine diskrete Menge von Zuständen ist

$$\Gamma = \{\gamma_i\}_{i=1}^N, \quad \text{mit } N \in \mathbb{N} \cup \{\infty\}.$$

Beschränken wir uns nun auf Markov-Ketten. Durch die Einführung der Übergangswahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit ($t_j \geq t_i$)

$$W(x_j|x_i) = \frac{p(x_j, t_j|x_i, t_i)}{t_j - t_i} \geq 0$$

von Zustand x_i in den Zustand x_j (üblicherweise wird $W(x_i|x_i) = 0$ vereinbart) kann aus den Eigenschaften der Markov-Prozesse die Mastergleichung in der Form

$$\frac{\partial p(x_i, t)}{\partial t} = \sum_{\substack{x_j \neq x_i \\ x_j \in \Gamma}} [W(x_i|x_j)p(x_j, t) - W(x_j|x_i)p(x_i, t)], \quad \forall x_i \in \Gamma \quad (\text{C.3})$$

hergeleitet werden. Die Mastergleichung gibt Auskunft darüber, wie $p(x_i, t)$ zunehmen kann bei Übergängen $x_j \rightarrow x_i$, und wie $p(x_i, t)$ abnehmen kann bei Übergängen $x_i \rightarrow x_j$. Somit kann sie als eine Gewinn-Verlust-Gleichung für die Wahrscheinlichkeit jedes Zustands x_i gesehen werden. Es gilt zu beachten, dass die Mastergleichung eine Gleichung für Übergangswahrscheinlichkeiten und nicht für Wahrscheinlichkeitsverteilungen ist.

Die Mastergleichung (C.3) ist eine Beschreibung diskreter Markov-Prozesse. Diskrete Beschreibungen eignen sich gut für Computer-Simulationen. Für kontinuierliche Markov-Prozesse lässt sich für die Mastergleichung durch den Übergang der Summation in eine Integration eine kontinuierliche Formulierung herleiten. An ihrer Stelle wird aber meist die Fokker-Planck-Gleichung verwendet, die wiederum aus dieser kontinuierlichen Formulierung gewonnen wird. Neben der Mastergleichung und der Fokker-Planck-Gleichung gibt es zur Charakterisierung stochastischer Prozesse noch die Langevin-Gleichung, die das Verhalten des Prozesses mit Hilfe einer Bewegungsgleichung und einem additiven weissen Rauschen beschreibt. Da für die Theorie der Monte-Carlo-Simulationen die Mastergleichung die geeignete Beschreibung darstellt, verzichten wir hier auf die Formulierung der übrigen Gleichungen zur Charakterisierung stochastischer Prozesse.

C.2 Stationäre Lösungen der Mastergleichung

Die Eigenschaften der Mastergleichung, die in diesem Abschnitt erläutert werden, können mathematisch korrekt eingegrenzt und bewiesen werden. Für eine ausführlichere Darstellung der Zusammenhänge als es hier möglich ist, sei an dieser Stelle noch einmal auf [75] verwiesen.

Eine fundamentale Eigenschaft der Mastergleichung (C.3) ist es, dass für grosse Zeiten ($t \rightarrow \infty$) alle ihre Lösungen einer stationären Lösung $p_S(x_i)$ zustreben.¹ Es gilt also

$$p_S(x_i) = \lim_{t \rightarrow \infty} p(x_i, t).$$

¹Von einem streng mathematischen Standpunkt aus gesehen ist diese Aussage zwar nur für Markov-Ketten mit endlich vielen Zuständen beweisbar, mit für die Physik in der Regel irrelevanten Ausnahmen aber gilt sie aber sogar für den allgemeinen Fall der Markov-Prozesse.

Stationäre Zustände sind durch ihre Zeitunabhängigkeit definiert. Es gilt somit für die stationären Lösungen der Mastergleichung (C.3) die Bedingung

$$\frac{\partial p_S(x_i)}{\partial t} = 0 .$$

Daraus folgt mit (C.3)

$$0 = \sum_{x_j \neq x_i} [W(x_i|x_j)p_S(x_j) - W(x_j|x_i)p_S(x_i)] ,$$

oder anders geschrieben

$$\sum_{x_j \neq x_i} W(x_i|x_j)p_S(x_j) = \sum_{x_j \neq x_i} W(x_j|x_i)p_S(x_i) . \quad (\text{C.4})$$

Beachten wir, dass ein physikalisches System, das sich im Zustand x_i befindet, in jedem Fall einen Übergang in einen der möglichen Zustände $x_j \in \Gamma$ macht, dass also keine Zustände während eines Übergangs verloren gehen können

$$\sum_{x_j \neq x_i} W(x_j|x_i) = 1 ,$$

so lässt sich die Mastergleichung für stationäre Zustände als Eigenwertgleichung

$$\sum_{x_j \neq x_i} W(x_i|x_j)p_S(x_j) = p_S(x_i)$$

schreiben. Unter physikalisch realistischen Annahmen, d.h. für geschlossene isolierte Systeme gilt, dass (C.4) genau eine nichttriviale stationäre Lösung mit der Eigenschaft $p_S(x_i) \geq 0$ besitzt. Diese Lösung muss gerade der Gleichgewichtszustand und $p_S(x_i)$ die Gleichgewichtsverteilung sein.

Es sei darauf hingewiesen, dass (C.4), gleich wie die ursprüngliche Mastergleichung, eine Beziehung zwischen den Übergangswahrscheinlichkeiten $W(x_i|x_j)$ ist. Sie gibt an, dass im Gleichgewicht die Summe aller Übergänge pro Zeiteinheit $x_j \rightarrow x_i$ durch die Summe aller Übergänge $x_i \rightarrow x_j$ ausgeglichen werden muss. Für geschlossene, isolierte, endliche physikalische Systeme kann oft anstelle von (C.4) die starke Bedingung des detaillierten Gleichgewichts (detailed balance) postuliert werden. Es drückt sich in der Annahme

$$W(x_i|x_j)p_S(x_j, t) = W(x_j|x_i)p_S(x_i, t)$$

aus. Detailliertes Gleichgewicht impliziert, dass im stationären Fall, also bei Gleichgewichtsprozessen die Anzahl der Übergänge in beide Richtungen (sowohl $x_j \rightarrow x_i$ als auch $x_i \rightarrow x_j$) die gleiche ist. Die Richtung der Zeitachse ist für einen Prozess im Gleichgewicht somit nicht mehr erkennbar.