

## Броуновское движение.

Robert Brown был первым, кто систематически описал в 1827 г. *нерегулярное движение* малых частиц пыльцы и суспензий неорганического происхождения (стекла, минералов) в воде. Это "броуновское движение" показано на рис.1. После работ Броуна было много рассуждений о природе явления, но большинство приводимых гипотез в 19 веке можно было опровергнуть, рассматривая эксперимент Броуна, в котором капля воды микроскопических размеров, погруженная в масло и содержащая таким образом только одну частицу, демонстрировала *непрекращающееся движение*. С. Weiner в 1863 г. был первым, кто высказал соображения, близкие к современной теории броуновского движения (то есть, что оно вызвано бомбардировкой броуновской частицы молекулами окружающей её среды). Следует отметить также подробное экспериментальное исследование М. Гоу (1888 г.), которое подерживало молекулярно - кинетическое объяснение броуновского движения. Его выводы могут быть сформулированы в виде следующих *семи пунктов*:

1. Движение очень нерегулярно, состоит из перемещений и вращений, и траектория не имеет касательной.
2. Две частицы двигаются независимо, даже если они приближаются друг к другу на расстояние, меньшее их диаметра.
3. Чем меньше частицы, тем активнее их движение.
4. Состав и плотность частиц не влияют на движение.
5. Уменьшение вязкости жидкости приводит к более активному движению.
6. Увеличение температуры жидкости приводит к более активному движению.
7. Движение никогда не прекращается.

Несмотря на использование ряда молекулярно- кинетических представлений (таких как учет передачи импульса при столкновениях молекул жидкости с частицей, что дает  $m\langle v^2 \rangle / 2 = 3T/2$ , где  $\Delta v$  есть изменение скорости молекул после столкновения, равное  $\Delta v = (m/M)v$ ; или предположение о том, что скорость  $\dot{s}$  частицы должна быть  $M\langle \dot{s}^2 \rangle = (3/2)T$ ), удовлетворительное объяснение броуновского движения появилось только в 1905 г. в работе Эйнштейна "О движении взвешенных в покоящейся жидкости частиц, требуемом молекулярно- кинетической теорией теплоты". Аналогичное объяснение было независимо предложено Смолуховским в 1906 г., который в дальнейшем систематически развивал эту теорию.

Для упрощения мы ограничимся ниже выводом Эйнштейна в одномерном случае. Этот вывод базировался на *двух основных положениях*:

а) причиной движения частицы являются исключительно частые её столкновения с молекулами жидкости.

б) движения этих молекул столь сложное, что его эффект на взвешенную в жидкости частицу может быть описан только *вероятностным образом*, в терминах исключительно частых, *статистически независимых* столкновений.

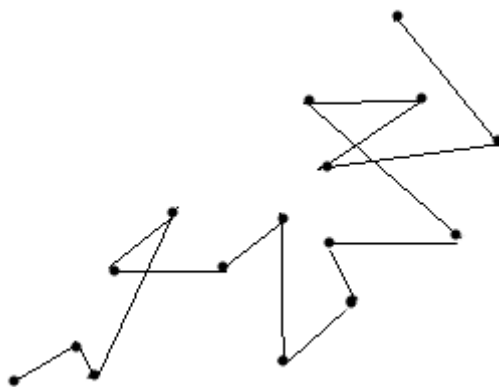


рис.1. Наблюдения положения броуновской частицы через равные промежутки времени  $\tau$ .

Развитие этих двух идей Эйнштейном содержит все основные концепции, которые будут предметом моих лекций по стохастике.

Его аргументы выглядят так: "Необходимо ясно предполагать, что каждая броуновская частица движется независимо от остальных частиц; будем также считать, что движения одной и той же броуновской частицы в различные интервалы времени являются независимыми процессами, если эти интервалы времени не выбраны очень малыми."

"Введем в рассмотрение промежутки времени  $\tau$  очень малый по сравнению с наблюдаемыми промежутками времени, но все же настолько большой, что движение частицы в двух следующих друг за другом промежутках могут рассматриваться как независимые друг от друга события."

Пусть теперь в жидкости находится всего  $n$  взвешенных частиц. Через промежуток времени  $\tau$  координаты  $X$  отдельных частиц определенных частиц увеличится на  $\Delta$ , причем  $\Delta$  для каждой частицы имеет разное (положительное или отрица-

тельное) значение. Для частоты повторения  $\Delta$  существует определенный закон: число  $dn$  частиц, которые за время  $\tau$  перемещаются на величину, лежащую между  $\Delta$  и  $\Delta + d\Delta$ , может быть выражено следующим уравнением:

$$dn = n\varphi(\Delta)d\Delta,$$

причем  $\int_{-\infty}^{\infty} \varphi(\Delta)d\Delta = 1$  и  $\varphi$  отлично от нуля только для очень малых значений  $\Delta$  и удовлетворяет условию  $\varphi(\Delta) = \varphi(-\Delta)$ .

Исследуем теперь, как коэффициент диффузии зависит от  $\varphi$ , причем мы ограничимся случаем, когда число частиц в единице объема зависит только от  $x$  и  $t$ .

Пусть  $\nu = f(x, t)$  есть число частиц в единице объема. Вычислим распределение частиц в момент времени  $t + \tau$ , исходя из распределения в момент  $t$ . Исходя из определения  $\varphi(\Delta)$ , легко найти число частиц, которые в момент времени  $t + \tau$  находятся между двумя перпендикулярными к оси  $X$  плоскостями с абсциссами  $x$  и  $x + dx$ . Тогда имеем

$$f(x, t + \tau)dx = dx \int_{-\infty}^{\infty} f(t, x + \Delta)\varphi(\Delta)d\Delta. \quad (1)$$

Так как  $\tau$  очень мало, то

$$f(x, t + \tau) \approx f(x, t) + \tau(\partial f / \partial t).$$

Разложим теперь  $f(x + \Delta, t)$  в ряд по степеням  $\Delta$ :

$$f(x + \Delta, t) = f(x, t) + \Delta(\partial f(x, t) / \partial x) + (\Delta^2 / 2!)[\partial^2 f(x, t) / \partial x^2] + \dots$$

Это разложение можно внести под интеграл, так как для него существенны только малые значения  $\Delta$ . Тогда

$$f(x, t) + \tau \frac{\partial f}{\partial t} = f \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(\Delta)d\Delta + \frac{\partial f}{\partial x} \int_{-\infty}^{\infty} \Delta\varphi(\Delta)d\Delta + \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\Delta^2}{2}\varphi(\Delta)d\Delta + \dots \quad (2)$$

В правой части (2) благодаря  $\varphi(\Delta) = \varphi(-\Delta)$  второй, четвертый и так далее члены обращаются в нуль, тогда как из первого, третьего, пятого и так далее каждый следующий очень мал по сравнению с предыдущим. Принимая во внимание, что

$$\int_{-\infty}^{\infty} \varphi(\Delta)d\Delta = 1,$$

и полагая

$$\frac{1}{\tau} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\Delta^2}{2} \varphi(\Delta) d\Delta = D, \quad (3)$$

получим из уравнения (2), ограничиваясь только первым и третьим слагаемым в правой части,

$$\frac{\partial f}{\partial t} = D \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}. \quad (4)$$

Это известное дифференциальное уравнение диффузии, и  $D$ - коэффициент диффузии. С этим разложением связано еще одно важное соображение. До сих пор все частицы мы рассматриваем в одной и той же координатной системе. Это, однако, не является необходимым, так как движение отдельных частиц является независимым. Будем теперь рассматривать движение каждой частицы в её собственной координатной системе, начало каждой совпадает с положением центра тяжести данной частицы в момент  $t = 0$  с той только разницей, что теперь  $f(x, t)dx$  обозначает число частиц, координаты  $X$  которых за время от  $t = 0$  до  $t = 1$  возросли на величину, лежащую в пределах от  $x$  до  $x + dx$ . В этом случае функция  $f$  изменяется также согласно уравнению (4). Далее очевидно, что для  $x \geq 0$  и  $t = 0$  должно быть  $f(x, t)dx = 0$  и  $\int_{-\infty}^{\infty} f(x, t)dx = n$ . Теперь задача, совпадающая с задачей о диффузии из одной точки (в пренебрежении взаимодействием диффундирующих частиц), математически вполне определена; её решение имеет вид

$$f(x, t) = \frac{n}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp(-x^2/4Dt). \quad (5)$$

Решение (5) уравнения (4) можно, получить, используя метод интегральных преобразований по  $x$  - координате с помощью преобразования Фурье:

$$F(k, t) = \int dx e^{-ikx} f(x, t),$$

$$f(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int dk e^{ikx} F(k, t).$$

Тогда уравнение диффузии (4) переходит в более простую форму

$$\frac{\partial F}{\partial t} = -Dk^2 F \rightarrow F(k, t) = F(k, 0)e^{-Dk^2 t}.$$

Для начального условия  $f(x, t = 0) = \delta(x)$  преобразование Фурье дает

$$F(k, t = 0) = 1.$$

Тогда используя обратное преобразование Фурье, имеем

$$f(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int dk e^{ikx} e^{-Dk^2 t} = \frac{e^{-x^2/4Dt}}{2\pi} \underbrace{\int dk e^{-Dt(k-ix/2Dt)^2}}_{\sqrt{\pi/Dt}} = \frac{e^{-x^2/4Dt}}{\sqrt{4\pi Dt}},$$

где на втором шаге мы использовали, что  $-Dk^2 t + ikx = -Dt(k - ix/2Dt)^2 - x^2/4Dt$ , и на последнем этапе мы использовали гауссов интеграл  $\int dk e^{-\alpha(k-b)^2} = \sqrt{\pi/\alpha}$ , который справедлив для комплексных  $b$ .

Эйнштейн заканчивает "Пользуясь уравнением (5) подсчитаем перемещение  $\lambda_x$  вдоль оси  $X$ , которое в среднем совершает частица, или выражаясь точнее, корень квадратный из среднего арифметического квадратов перемещений вдоль оси  $X$ , это дает

$$\lambda_x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x_0^2 \rangle} = \sqrt{2Dt}.$$

Таким образом, среднее перемещение пропорционально  $\sqrt{t}$ .

Легко показать, что корень квадратный из среднего значения полных смещений частиц (то есть в 3-х мерном пространстве) равен  $\lambda_x \sqrt{3}$ .

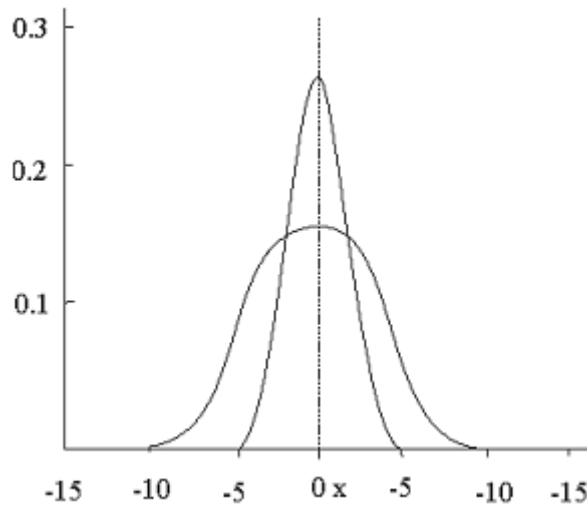


рис.2.

Эволюция во времени неравновесного распределения вероятности по формуле (5).

Приведенный выше вывод Эйнштейна содержит много важных положений, которые впоследствии были разработаны больше и более обобщенно и строго, и которые будут в дальнейшем предметом моих лекций. Например:

**1) Уравнение Чепмена - Колмогорова (Chapman - Kolmogorov)**, появляется как уравнение (1). Оно утверждает, что вероятность для частицы быть в точке  $x$  в момент времени  $t + \tau$  дается суммой вероятностей всех возможных перемещений  $\Delta$  от положений  $x + \Delta$  в момент времени  $t$ . Это предположение основано на независимости  $\Delta$  от предыдущей истории движения; необходимо лишь знать начальное положение частицы в момент  $t$  - а не в предыдущие времена. Это есть *постулат Маркова* и уравнение Чепмена - Колмогорова для каждого уравнения (1) представляет специальную форму, является центральным динамическим уравнением всех марковских процессов.

**2) Разложение Крамерса- Мойала (The Kramers- Moyal expansion)**. Это разложение использовалось при переходе от уравнения Чепмена - Колмогорова (1) к диффузионному уравнению (4).

**3) Уравнение Фоккера - Планка**. Диффузионное уравнение (4) является частным случаем уравнение Фоккера-Планка. Это уравнение является основным в важном классе марковских процессов, для которых система имеет непрерывные траектории.

1. К.В. Гардинер - Стохастические методы в естественных науках. Москва. Мир.1986.

2. Р.Хорстхемке, и Р.Лефер - Индуцированные шумом переходы. Москва.Мир.1987. с.69

Броуновская частица испытывает со стороны молекул жидкости огромное - порядка  $10^{21}$  в секунду - число соударений; так как  $M \gg m$ , то действие отдельного соударения пренебрежимо мало. Но поскольку число непрестанно происходящих соударений велико, возникает *наблюдаемое в микроскоп эффективное движение*. Важно подчеркнуть, что *каждое столкновение* происходит независимо от остальных. Эти факты приводят к математической модели броуновского движения, известной как винеровский процесс.

**К лекции "Уравнение Ланжевена"** по Гардинеру.

Полученное Эйнштейном диффузионное уравнение - это частный случай уравнение Фоккера -Планка, которое описывают *широкий класс* стохастических процессов, обладающих *непрерывными реализациями*. Это означает, что положение броуновских частиц, если считать, что оно подчиняется вероятностному закону, определённого решением уравнения диффузии, можно записать в виде непрерывной слу-

чайной функции  $x(t)$ , (где время  $t$  считается не *дискретным*, как у Эйнштейна, а *непрерывным*). Это приводит к рассмотрению возможности *обобщить динамические уравнения до вероятностных*, чтобы иметь случайное, или стохастическое дифференциальное уравнение для функции  $x(t)$ .

Начало этому направлению в стохастике положил Ланжевен, предложив первым уравнение, которое носит его имя. Его рассуждения, в отличие от рассуждений Эйнштейна, были таковы:

Из статистической механики известно, что *средняя* кинетическая энергия броуновских частиц в равновесии равна

$$\langle \frac{1}{2}mv^2 \rangle = kT/2,$$

где  $T$  - абсолютная температура, а  $k$  - постоянная Больцмана. Этот факт также использовали Эйнштейн и Смолуховский. На частицу с массой  $m$  должны действовать две силы.

1. Сила вязкого торможения, даваемая той же формулой, что и в микроскопической гидродинамике. Она равна  $m\gamma(dx/dt)$  с  $\gamma = 6\pi\mu a$ , где  $\mu$  - вязкость, а  $a$  - диаметр сферической частицы.

2. Флуктуационная сила  $\zeta(t)$ , которая обусловлена постоянными толчками со стороны молекул жидкости на броуновскую частицу. Она с равной вероятностью может быть положительна и отрицательна - это всё, что мы знаем о ней. Без этой силы вязкое трение остановило бы движение частицы.

Тогда уравнение движения для  $x$  - координаты частицы даётся законом Ньютона:

$$m \frac{d^2x}{dt^2} = -m\gamma \frac{dx}{dt} + \zeta(t),$$

Умножив его на  $x$ , получим

$$\frac{m}{2} \frac{d^2(x^2)}{dt^2} - mv^2 = -\frac{m\gamma}{2} \frac{d(x^2)}{dt} + \zeta(t)x,$$

так как

$$x \frac{d^2x}{dt^2} = x \frac{d}{dt} \left( \frac{dx}{dt} \right) = \frac{d}{dt} \left( x \frac{dx}{dt} \right) - \left( \frac{dx}{dt} \right)^2 = \frac{d}{dt} \left( \frac{1}{2} \frac{dx^2}{dt} \right) - \left( \frac{dx}{dt} \right)^2 \text{ и } x \frac{dx}{dt} = \frac{1}{2} \frac{dx^2}{dt},$$

мы воспользовались еще тем, что *после усреднения*  $\langle mv^2 \rangle = kT$ . Тогда

$$\frac{m}{2} \frac{d^2}{dt^2} \langle x^2 \rangle + 3\pi\mu a \frac{d}{dt} \langle x^2 \rangle = kT,$$

с учетом того, что  $\langle x\zeta(t) \rangle = 0$ .

Если  $y(t) = \frac{d}{dt}\langle x^2 \rangle$ , то  $\frac{m}{2} \frac{dy}{dt} + 3\pi\mu a y = kT$ .

Общее решение есть сумма *частного* решения неоднородного уравнения  $y_1$  плюс общее решение однородного решения  $y_2$ . Итак,

$$y_1 = kT/3\pi\mu a; \quad y_2 = C \exp(-6\pi\mu a/m)t, \text{ то есть } y = y_1 + y_2.$$

$$\frac{d\langle x^2 \rangle}{dt} = kT/3\pi\mu a + C \exp\left[-(6\pi\mu a/m)t\right],$$

и при  $t \rightarrow \infty$  тогда  $\langle x^2 \rangle - \langle x_0^2 \rangle = Dt$ , где  $D = kT/6\pi\mu a$ ; или  $D = kT/m\gamma$ , то есть результат Эйнштейна.

"Langevin Equation" стр.171. **Критика уравнения Ланжевена.**

1. В первой главе книги было обсуждено уравнение Ланжевена для *свободной* частицы в предположении, что флуктуирующая сила белого шума удовлетворяет условием

$$\langle F(t_1) \rangle = 0, \quad \langle F(t_1)F(t_2) \rangle = 2D\delta(t_1 - t_2).$$

Такой подход можно подвергнуть критике с нескольких точек зрения. Одна из них состоит в том, что невозможно представить реализации с  $\delta$  - коррелированным шумом, то есть такие реализации для которых  $F(t_1)$  и  $F(t_2)$  полностью *независимы* для произвольно малых  $|t_1 - t_2|$ . Критика уравнения Ланжевена была кратко описана Дубом, который первым показал, что уравнение Ланжевена нужно интерпретировать как *интегральное*, а не *дифференциальное* уравнение. Такой подход привел к далеко идущим математическим и концептуальным упрощениям, последние из которых составляют основную тему этой книги: что иерархия дифференциально - разностных соотношений может быть прямо получена из *уравнения Ланжевена*, то есть полностью исключая подход уравнений Фоккера-Планка. Рассуждения Дуба наиболее понятны, если цитировать его работу (1942 г):

"пусть  $x(t)$  есть координата броуновской частицы в момент времени  $t$ . Эйнштейн и Смолуховский рассматривали  $x(t)$  как стохастическую переменную. Они показали, что функция распределения  $x(t) - x(0)$  гауссова с нулевым средним и дисперсией  $\alpha|t|$ , где  $\alpha$  есть положительная постоянная, которая может быть вычислена через физические характеристики броуновской частицы и жидкости. Более определенно, такой ансамбль случайных переменных  $\{x(t)\}$  теперь может быть описан



как семейство случайных переменных определяющих однородный во времени дифференциальный стохастический процесс: распределение  $x(s+t) - x(t)$  является гауссовым с нулевым средним и дисперсией  $\alpha|t|$ , и если  $t_1 < \dots < t_n$ , то

$$x(t_2) - x(t_1), \dots, x(t_n) - x(t_{n-1}),$$

являются взаимно независимыми случайными переменными. Винер, который первым исследовал этот процесс строго, доказал в 1923 г., что *функции реализации* этого процесса непрерывны с вероятностью 1. Этот результат делает стохастический процесс более приемлемой идеализацией броуновского движения. Однако не предполагалось, что отмеченное распределение  $x(s+t) - x(s)$  окажется справедливым для *малых*  $t$ . Даже если вывод останется справедливым для малых  $t$ , математический факт, что  $x(s+t) - x(s)$  имеет стандартное отклонение  $\sim |t|^{1/2}$ , предполагая что,  $dx(s)/ds$  не может быть конечным, будет приводить к тому, что результат Эйнштейна - Смолуховского должен быть модифицирован.

Другой стохастический процесс для описания  $x(t)$  был предложен Орнштейном и Уленбеком в 1930 г. Для него оказалось, что распределение  $x(s+t) - x(s)$  - гауссово с нулевым средним и дисперсией

$$(\alpha/\beta)(e^{-\beta|t|} - 1 + \beta|t|),$$

которая  $\sim \alpha|t|$  при больших  $t$ , но  $\sim \alpha\beta t^2/2$  для малых  $t$  (где  $\beta$  - вторая константа, определяемая из физических соображений). Функция смещения  $x(t)$ , как показали Орнштейн и Уленбек, *имеет производную*  $u(t)$  и все вероятностные распределения могут быть получены из  $u(t)$ . Но дисперсия  $u(s+t) - u(s)$  есть

$$2\sigma_0^2(1 - e^{-\beta|t|}) \sim 2\sigma_0^2\beta|t|.$$

Тогда снова  $u(s+t) - u(s) \sim |t|^{1/2}$  и  $du/dt$  не существует при  $t \rightarrow 0$ . Физически это значит, что броуновская частица *не имеет конечного ускорения*. Орнштейн и Уленбек исходили из уравнения Ланжевена для  $u(t)$

$$\frac{du}{dt} = -\beta u(t) + A(t),$$

которое есть просто ньютоновское уравнение движения для броуновской частицы, деленное на её массу. Первое слагаемое справа - вязкое, а второе - стохастическое.

Ситуация с функцией распределения для  $u(t)$  повторяется, как для винеровского процесса с  $x(t)$  - то есть  $u(t)$  не имеет *производной во времени*. Поэтому возникает вопрос - что означает *уравнение Ланжевена* для  $u(t)$ . Следуя Дубу, мы покажем, как его надо интерпретировать.

## 2. Интерпретация уравнения Ланжевена Дубом.

Перепишем уравнения для  $u(t)$  в виде:

$$du(t) = -\beta u(t)dt + dB(t),$$

и попытаемся придать смысл этим дифференциалам. Для этого *предположим*, что если  $t_1 < \dots < t_n$  то  $B(t_2) - B(t_1), \dots, B(t_n) - B(t_{n-1})$  являются взаимно независимыми стохастическими переменными. *Предположим* также их однородность по времени, то есть стационарность, так что распределение  $B(s+t) - B(s)$  не зависит от начальной величины  $s$ .

Кроме того, *предположим*, что

$$B(s+t) - B(s) = 0 \quad \text{и} \quad [B(s+t) - B(s)]^2 = c^2 t, \quad t \geq 0,$$

то есть  $B(t)$  удовлетворяет условиям винеровского процесса. Теперь проинтегрируем обе части уравнения в дифференциалах, предварительно умножив обе части на непрерывную функцию времени  $f(t)$ , считая, что для всех  $t$  имеем

$$\int_a^b f(t) du(t) = -\beta \int_a^b f(t) u(t) dt + \int_a^b f(t) dB(t).$$

Если  $f(t)$  - непрерывна, то все эти интегралы хорошо определены. Если  $f(t) = 1$  то

$$u(b) - u(a) = -\beta \int_a^b u(t) dt + B(b) - B(a).$$

В процессе Орнштейна-Уленбека  $u(t) = \dot{X}(t)$ , где  $x(t)$  - смещение, которое существует, поэтому для  $a = 0$  и  $b = t$  можно записать

$$B(t) - B(0) = u(t) - u(0) + \beta(x(t) - x(0)).$$

Предположим теперь, что  $(b - a)$  велико по сравнению со временем между столкновениями, так что  $B(b) - B(a)$  можно записать в виде ряда

$$B(b) - B(a) = \sum_{k=0}^{n-1} [B(t_{k+1}) - B(t_k)],$$

где

$$t_0 = a < t_1 < t_2 \dots < t_{n-1} < t_n = b.$$

Из этого обсуждения мы видим, что слагаемое  $dB(t)$  в уравнении для дифференциалов может быть представлено как винеровский процесс. В будущем, когда мы будем записывать исходное уравнение Ланжевена для  $u(t)$ , мы всегда будем интерпретировать его как интегральное уравнение с  $f(t)$ . Полагая в нем  $e^{\beta t}$ , получаем

$$\int_0^\infty e^{\beta s} du(s) = -\beta \int_0^t e^{\beta s} u(s) ds + \int_0^t e^{\beta s} dB(s).$$

Интегрируя по частям (что возможно), получим

$$u(t)e^{\beta t} - u(0) = \int_0^t e^{\beta s} dB(s) \quad \text{или} \quad u(t) = u(0)e^{-\beta t} + \int_0^t e^{-\beta(t-s)} dB(s).$$

Такова интерпретация (линейного) уравнения Ланжевена для  $u(t)$  Дубом. Его интерпретация уравнения Ланжевена как интегрального уравнения является основной для всего последующего.

### **Введение к уравнению Фоккера – Планка.**

Уравнение Фоккера - Планка было впервые использовано Фоккером в 1914 г. и Планком в 1917 г. для описания броуновского движения. Но для ознакомления с уравнением Фоккера - Планка обсудим сначала броуновское движение макрочастиц в его простейшей форме.

#### **1.1. Броуновское движение.**

##### **1.1.1. Детерминированное дифференциальное уравнение.**

Если малая макрочастица массы  $m$  помещена в жидкость, то при её движении со скоростью  $v$  на неё будет действовать сила Стокса  $F_c = -\alpha v$  где  $\alpha$  - коэффициент вязкости (или "трения"). Если других сил нет, то уравнение движения будет

$$m\dot{v} + \alpha v = 0, \quad \text{или} \quad \dot{v} = (\alpha/m)v \equiv \gamma v, \quad \text{то есть} \quad \gamma = \alpha/m = 1/\tau.$$

Тогда первоначальная скорость  $v(t)$  уменьшится до нуля со временем релаксации  $\tau$  согласно

$$v(t) = v(0)e^{-t/\tau} = v(0)e^{-\gamma t}.$$

Отметим, что уравнение движения в этом рассмотрении является детерминистическим. Уменьшение скорости происходит за счет передачи импульса броуновской частицы молекулам жидкости.

### 1.1.2. Стохастическое дифференциально уравнение.

Детерминистическое уравнение движения, рассмотренное в 1.1.1, имеет смысл лишь тогда, если масса настолько велика, что на скорость частицы *тепловые флуктуации* не влияют. По закону равнораспределения, средняя энергия на одну частицу есть

$$\frac{1}{2}m\langle v^2 \rangle = \frac{1}{2}T,$$

где  $T$  - температура в энергетических единицах. Если  $m$  мала, то *тепловая скорость*  $v_T = \sqrt{\langle v^2 \rangle} = \sqrt{T/m}$  может оказаться наблюдаемой, и тогда скорость достаточно малой массы  $m$  уже не может быть точно описана детерминистическим уравнением.

Но если  $m$  значительно больше массы молекул жидкости, то можно ожидать, что детерминистическое уравнение будет приближённо справедливо. Поэтому оно должно быть так модифицировано, чтобы корректно учесть энергию тепловых флуктуаций. Такая модификация состоит в добавлении к уравнению движения флуктуирующей силы  $F_f(t)$ , то есть уравнение движения теперь будет

$$\dot{v} + \gamma v = \Gamma(t),$$

где  $\Gamma(t)$  - есть *флуктуирующая сила на единицу массы*, то есть  $\Gamma(t) = F_f(t)/m$  и её называют силой Ланжевена. Она является случайной или стохастической силой, свойства которой проявляются только в среднем.

Обсудим теперь её возникновение. Если бы мы умели решить задачу точно (что потребовало бы решения связанных уравнений движений для всех молекул жидкости и броуновской частицы), то стохастическая сила была бы не нужна. Ввиду огромного числа молекул ( $\sim 10^{23}$ ) в единице объема жидкости и отсутствия информации о начальных условиях мы бы получили разную динамику броуновской частицы. Поэтому, аналогично статфизике в термодинамике, мы рассмотрим *ансамбль Гиббса* нашей системы, в котором сила  $F_f(t)$  меняется от системы к системе, так что единственное доступное для нас вычисление есть вычисление средних этой силы для ансамбля.

Для этого знать свойства этой силы Ланжевена  $\Gamma(t)$ .

*Во - первых*, мы предположим, что среднее её по ансамблю должно быть равно нулю, то есть  $\langle \Gamma(t) \rangle = 0$  ввиду того, что уравнение для средней скорости  $\langle v(t) \rangle$

должно быть детерминистическим, то есть  $\langle \dot{v} \rangle = \gamma \langle v \rangle$ .

*Во-вторых*, коррелятор двух значений ланжевеновской силы во времена  $t$  и  $t'$  равен нулю для разностей времен  $t' - t$  больших, чем *время столкновения*  $\tau_0$ , то есть

$$\langle \Gamma(t)\Gamma(t') \rangle = 0 \quad \text{для} \quad |t - t'| \geq \tau_0.$$

Такое предположение представляется разумным ввиду того, что столкновения разных молекул жидкости с броуновской частицей приблизительно независимы. Обычно  $\tau_0 \ll \tau = 1/\gamma$ . Поэтому мы устремим  $\tau_0 \rightarrow 0$  и тогда

$$\langle \Gamma(t)\Gamma(t') \rangle = q\delta(t - t').$$

Появление  $\delta$ -функции связано с тем, что в ином случае средняя энергия броуновской частицы не будет конечной, как это предполагает закон равномерного распределения. В дальнейшем будет показано, что *величина интенсивности "шума"*  $q$  для силы Ланжевена дается соотношением

$$q = 2\gamma T/m.$$

Для определения корреляторов жидкости более высокого порядка типа

$\langle v(t_1)v(t_2)...v(t_n) \rangle$  должны быть известны высшие порядки коррелятора  $\Gamma(t)$ . Обычно предполагается, что  $\Gamma(t)$  имеет гауссово распределение с  $\delta$ -корреляцией. Тогда интегрирование уравнения Ланжевена с использованием гауссова шума позволяет получить коэффициент диффузии. Последний был получен впервые Эйнштейном, который и предложил термин "Броуновское движение" в 1905 г.

Гауссова сила Ланжевена с  $\delta$ -корреляциями называется "*белым шумом*" по причине того, что её спектральное распределение, которое дается Фурье-преобразованием  $\delta$ -коррелятора, не зависит от частоты  $\omega$ . Если же спектральное распределение коррелятора зависит от частоты  $\omega$ , то такой шум называется *цветным*.

### **1.1.3. Уравнение движения для функции распределения.**

Ввиду того, что  $\Gamma(t)$  изменяется в стохастическом ансамбле от одной системы к другой, то есть является стохастической величиной, то величина скорости  $v(t)$  также будет изменяться от одной системы ансамбля до другой, то есть будет также величиной стохастической.

Поэтому можно интересоваться *вероятностью* найти скорость в интервале  $(v, v + dv)$ , или иными словами можно задать вопрос о *числе систем ансамбля*, скорости которых находятся в интервале  $(v, v + dv)$ , *деленном на полное число систем* в ансамбле. Так как  $v$  является непрерывной величиной, то можно говорить о *плотности вероятности*  $W(v)$ , которую часто называют в физической литературе *распределением вероятности*. Произведение  $W(v)dv$  есть тогда *вероятность* найти *броуновскую частицу* в интервале скоростей  $(v, v + dv)$ . Такая *функция распределения* зависит как от времени  $t$ , так и от начального распределения. Уравнение движения для функции распределения  $W(v, t)$ , как будет показано позже, есть

$$\frac{\partial W}{\partial t} = \gamma \frac{\partial(vW)}{\partial v} + \frac{\gamma T}{m} \frac{\partial^2 W}{\partial v^2}.$$

Это уравнение является одним из самых простых уравнений Фоккера - Планка. Его решение с учетом *начального условия*  $W(v, 0) \equiv W(v, t = 0)$  и с учетом соответствующих граничных условий дает  $W(v, t)$  во все последующие моменты времени. Зная  $W(v, t)$ , любая усредненная функция величины скорости  $h(v)$  получается по формуле

$$\langle h(v(t)) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} h(v)W(v, t)dv.$$

## 1.2. Уравнение Фоккера - Планка.

В этом вводном разделе в основном обсуждается то, какой вид имеют уравнения Фоккера- Планка и его ряд специальных форм, как они появляются, и где и как можно использовать уравнение Фоккера- Планка.

### 1.2.1. Уравнение Фоккера - Планка для одной переменной.

В пункте 1.1.3. обсуждалось уравнение движения для функции распределения  $W(v, t)$  одномерного броуновского движения. Как там отмечалось, это специальная форма уравнения Фоккера- Планка. Общий вид уравнения Фоккера- Планка для одной переменной  $x$  есть

$$\frac{\partial W}{\partial t} = \left[ -\frac{\partial}{\partial x} D^{(1)}(x) + \frac{\partial^2}{\partial x^2} D^{(2)}(x) \right] W.$$

Здесь  $D^{(2)}(x) > 0$  называется *коэффициентом диффузии* и  $D^{(1)}(x)$  - *коэффициентом сноса*. Оба эти коэффициента могут также зависеть от времени. Уравнение Фоккера- Планка пункта 1.1.3. является специфической формой уравнения Фоккера- Планка,

у которого коэффициент сноса линеен, а коэффициент диффузии-константа. Приведенное здесь уравнение является *уравнением движения* для функции  $W(x, t)$ .

С точки зрения математики, это *линейное дифференциальное уравнение в частных производных* второго порядка *параболического типа*. Говоря иначе, это диффузионное уравнение с дополнительной производной первого порядка по  $x$ . В математической литературе это уравнение называется также "*второе (forward) уравнение Колмогорова*".

### 1.2.2 Уравнение Фоккера - Планка для N переменных.

Обобщение 1.2.1 на N переменных  $x_1, x_2, \dots, x_N$  имеет вид

$$\frac{\partial W}{\partial t} = \left[ - \sum_{i=1}^N \frac{\partial}{\partial x_i} D_i^{(1)}(\{x\}) + \sum_{i,j=1}^N \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} D_{ij}^{(2)}(\{x\}) \right] W.$$

Вектор сноса  $D_i^{(1)}$  и тензор диффузии  $D_{ij}^{(2)}$  в общем случае зависят от N переменных  $x_1, \dots, x_N = \{x\}$ . Уравнение Фоккера-Планка этого вида является уравнением для функции распределения  $W(\{x\}, t)$  от N *макроскопических переменных*  $\{x\}$ , где  $x_i$  могут быть переменными разного типа, например координат и скоростей.

### 1.2.3. Как возникает уравнение Фоккера - Планка?

Как уже отмечалось, полное решение динамики макросистемы может быть сведено к решению всех микроскопических уравнений движения составляющих её частиц. Ввиду невозможности этого, мы вместо этого используем стохастическое описание системы, то есть описываем систему *макропеременными*, которые стохастически флуктуируют. Уравнение Фоккера-Планка как раз и является уравнением движения для функции распределения флуктуирующих макроскопических переменных.

Для детерминированного описания системы мы пренебрегаем флуктуациями макропеременных. Для уравнения Фоккера-Планка пункта 1.2.2 это означает, что мы пренебрежём диффузионным слагаемым. Тогда это уравнение эквивалентно системе дифференциальных уравнений ( $i = 1, \dots, N$ )

$$dx_i/dt = \dot{x}_i = D_i^{(1)}(x_1, \dots, x_N) = D_i^{(1)}(\{x\}),$$

для N макропеременных  $\{x\}$ .

*Таблица 1.1* дает схематическое представление о взаимосвязи *трех стадий* изучения системы.

Микроскопическое описание		стохастическое описание		детерминистическое описание
уравнения движения для всех микроскопических переменных	$\implies$	уравнения движения для функции распределения макроскопических переменных (или стохастическое дифференциальное уравнение)	$\implies$	система дифференциальных уравнений макроскопических переменных
			$\longleftarrow$	

$\implies$  строгие выводы  $\longleftarrow$  эвристические выводы

Строгий вывод стохастического описания должен начинаться с микроскопического описания. Затем следует детерминированное описание из стохастического, если пренебречь флуктуациями, как показано большими стрелками. Коэффициенты сноса и диффузии  $D_i^{(1)}$  и  $D_{ji}^{(2)}$  должны быть строго получены из микроскопических уравнений. Такой строгий вывод может быть очень сложным или даже невозможным. В таком случае следует начать с детерминированного уравнения и воспользоваться эвристическими аргументами, как это указано малой стрелкой в таблице 1.1. В эвристическом подходе к детерминированному уравнению добавляются некоторые ланжевенковские силы, чтобы получить стохастическое дифференциальное уравнение, которое эквивалентно (при корректно выбранных ланжевенковских силах) уравнению Фоккера - Планка. Интенсивность шума затем определяется из других аргументов, например используя теорему о равномерном распределении. И таким образом можно получить уравнение Фоккера - Планка пункта 1.1.3 для броуновского движения частицы раздела 1.1.

Уравнение Фоккера - Планка не является единственным уравнением движения для функции распределения. Ниже обсуждаются кратко и *другие похожие* уравнения, например уравнение Больцмана и *управляющее уравнение* (master equation). Уравнение Фоккера - Планка лишь является одним из самых простых для описания *непрерывных макропеременных*. Оно обычно возникает для переменных, описывающих макроскопические, но малые (иначе - мезоскопические) подсистемы, подобные положению и скорости для броуновского движения малых частиц, току в электрических цепях и электрическому полю в лазерах. Если же подсистема становится



больше, то обычно можно пренебречь флуктуациями и таким образом прийти к детерминированному описанию. Однако в тех случаях, когда в *детерминированных* уравнениях появляется неустойчивость, стохастическое описание является необходимым даже для больших систем.

#### **1.2.4. Цели уравнения Фоккера – Планка.**

Решив уравнение Фоккера – Планка, мы находим функцию распределения с помощью которой можно получить любое среднее макронаблюдаемых простым интегрированием. Так как применение уравнения Фоккера – Планка не ограничено рассмотрением лишь систем, близких к тепловому равновесию, уравнение Фоккера-Планка может быть использовано для системы вдали от теплового равновесия, например к динамике вихрей в сверхпроводящих пленках в условиях прохождения через них постоянного и переменного тока с произвольно большими амплитудами и частотами. Уравнение Фоккера – Планка описывает не только установившиеся режимы, но также и переходную нестационарную динамику системы, если использовать зависящие от времени решения уравнения Фоккера-Планка.

#### **1.2.5. Решения уравнения Фоккера – Планка.**

Аналитические решения уравнения Фоккера – Планка можно получить в следующих случаях .

1) *Линейный* вектор сноса и *постоянный* тензор диффузии. В этом случае можно получить как стационарные, так и нестационарные решения.

2) При условии *детального баланса*. Если вектор сноса и матрица диффузии подчиняется определенным «потенциальным» условиям, стационарное решение получается в квадратурах.

3) Для уравнения Фоккера – Планка с одной переменной можно также получить решение в квадратурах даже в том случае, если условие детального баланса нарушено, то есть вероятностный ток не равен нулю.

Аналитическое решения уравнения Фоккера – Планка можно найти и в других специальных случаях. В общем случае, однако, получить решение уравнения Фоккера – Планка трудно, если переменные не разделяются или их число велико. В книге Н. Risken «The Fokker – Planck Equation» (Second Edition Springer) детально обсуждаются и другие методы, такие как: компьютерная симуляция (3.6), трансформация уравнения Фоккера – Планка в уравнение Шредингера (5.4, 6.3), методы

численного интегрирования (5.9.2, 6.6.4), аналитические решения для определенных модельных потенциалов (5.7), одномерного уравнения Фоккера – Планка, методы непрерывных матричных цепных дробей для двумерного уравнения Фоккера – Планка (6.6.6) и нестационарные решения для зависящих от времени малых внешних полей (линейные отклик, раздел 7).

### 1.2.6 Уравнения Крамерса и Смолуховского.

Уравнения Клейна – Крамерса или Крамерса (1921, 1940) и Смолуховского (1915) являются специальными формами уравнения Фоккера – Планка. Уравнение Крамерса это уравнение движения для функции распределения в пространстве координат и скоростей броуновского движения частиц во внешнем поле. В одномерном случае оно принимает вид  $[W = W(x, v, t)]$

$$\frac{\partial W}{\partial t} = \left[ -\frac{\partial}{\partial x} v + \frac{\partial}{\partial v} \left( \gamma v - \frac{F(x)}{m} \right) + \frac{\gamma T}{m} \frac{\partial^2}{\partial v^2} \right] W.$$

Здесь  $\gamma$  - коэффициент трения (вязкости),  $m$  - масса частицы,  $T$  - температура жидкости,  $F(x) = -mf'(x)$  внешняя сила, где  $mf(x)$  - её потенциал. В отсутствие внешней силы и зависимости от  $x$  это уравнение сводится к уравнению Фоккера – Планка пункта 1.1.3. *Стохастическое дифференциальное уравнение*, соответствующее уравнению Крамерса есть

$$\begin{cases} \dot{x} = v \\ \dot{v} = -\gamma v + F(x)/m + \Gamma(t) \\ \langle \Gamma(t')\Gamma(t) \rangle = (2\gamma T/m)\delta(t - t'). \end{cases}$$

В отсутствие силы  $F(x)$  два последних уравнения сводятся к уравнению в пункте 1.1.2. Первые два уравнения могут быть записаны как уравнения движения

$$m\ddot{x} + m\gamma\dot{x} = F(x) + m\Gamma(t).$$

Методы решения уравнения Крамерса обсуждаются в разделе 10, а решение и его приложение для периодических потенциалов в разделе 11 книги Н. Risken. Здесь мы лишь отметим, что решение уравнения Крамерса в стационарном состоянии (и подходящих граничных условиях) дается распределением Больцмана ( $N$ - нормировочная константа)

$$W_{st}(x, v) = N \exp[-E/T],$$

$$E = mv^2/2 + mf(x),$$

что легко проверяется непосредственной подстановкой.

В случае большого трения, то есть больших  $\gamma$ , в уравнении для  $x$  можно пренебречь  $\ddot{x}$ , после чего стохастическое уравнение сводится к

$$\dot{x} = F(x)/m\gamma + \Gamma(t)/\gamma,$$

и соответствующее уравнение Фоккера – Планка для функции распределения по координате  $x$  [ $W = W(x, t)$ ] есть

$$\frac{\partial W}{\partial t} = \frac{1}{m\gamma} \left[ -\frac{\partial}{\partial x} F(x) + T \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right] W.$$

Это уравнение Фоккера – Планка называется *уравнением Смолуховского*. Его вывод из уравнения Крамерса и поправки к нему по  $1/\gamma$  обсуждаются в пункте 10.4.

### 1.2.7. Обобщения уравнения Фоккера-Планка.

Используются несколько обобщений уравнения Фоккера-Планка. Если для простоты ограничиться случаем одной переменной, то сначала мы рассмотрим уравнение, для которого появляются более высокие производные по  $x$ , чем вторая производная в предыдущих случаях. В общем случае имеем бесконечное число слагаемых, то есть

$$\frac{\partial W}{\partial t} = \sum_{\nu=1}^{\infty} \left(-\frac{\partial}{\partial x}\right)^{\nu} D^{(\nu)}(x)W,$$

и такое уравнение называется *уравнением Крамерса – Мойала*. Если  $x$  удовлетворяет уравнению Ланжевена с гаусовским  $\delta$  – коррелированным шумом, то как будет показано в дальнейшем, все коэффициенты  $D^{(\nu)}$  с  $\nu \geq 3$  исчезают и тогда это уравнение сводится к уравнению Фоккера-Планка пункта 1.2.1. Если же  $x$  является дискретной переменной, то коэффициенты  $D^{(\nu)}$  в общем случае отличны от нуля.

*Другая возможность* обобщения уравнения Фоккера –Планка состоит в учете *эффектов памяти*. Тогда

$$\frac{\partial W(x, t)}{\partial t} = \int_{-\infty}^t \left[ -\frac{\partial}{\partial x} D^{(1)}(x, t - \tau) + \frac{\partial^2}{\partial x^2} D^{(2)}(x, t - \tau) \right] W(x, \tau) d\tau.$$

Если функция распределения уравнения Фоккера – Планка пункта 1.2.1 полностью определена распределением при  $t = t_0$  (марковский процесс), то стохастический процесс, описываемый уравнением с памятью определяется и всеми более

ранними распределениями (немарковский процесс). Если, однако, коэффициенты «памяти»  $D^{(1)}$  и  $D^{(2)}$  убывают достаточно быстро со временем, то мы снова приходим к уравнению Фоккера -Планка пункта 1.2.1.

### 1.3. Уравнение Больцмана.

Первым уравнение движения для функции распределения разреженного газа в пространстве скоростей и координат частиц было получено Больцманом. Пусть  $f(\vec{x}, \vec{v}, t)d^3x d^3v$  есть число молекул газа в элементе объема  $d^3x d^3v$  пространства координат и скоростей молекул ( $\mu$ - пространства). Для частиц под действием поля сил  $\vec{F}(x)$  уравнение Больцмана принимает форму

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \vec{v}\nabla_{\vec{r}} + \frac{\vec{F}(x)}{m}\nabla_{\vec{v}}\right)f(\vec{x}, \vec{v}, t) = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll},$$

где  $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll} = \int d^3v_1 \int d\Omega |\vec{v}-\vec{v}_1| \sigma(\vec{v}, v_1|\vec{v}', v_1') [f(\vec{x}, \vec{v}', t)f(\vec{x}, v_1', t) - f(\vec{x}, \vec{v}, t)f(\vec{x}, v_1, t)]$ .

В верхнем уравнении  $\nabla_{\vec{r}}$  и  $\nabla_{\vec{v}}$  есть градиенты по координате и скорости. В интеграле столкновений частицы газа (вторая строка)  $\sigma(\vec{v}, v_1|\vec{v}', v_1')$  есть дифференциальное сечение рассеяния двух молекул газа со скоростями  $\vec{v}$  и  $v_1$  перед и  $\vec{v}'$   $v_1'$  после столкновения.  $\Omega$  означает угол между векторами  $\vec{v} - v_1$  и  $\vec{v}' - v_1'$ . Кроме этого, определенные симметрии  $\sigma(\vec{v}, v_1|\vec{v}', v_1')$  и законы сохранения энергии и импульса предполагаются выполненными. Самым серьезным препятствием для нахождения общего решения такого уравнения Больцмана является его нелинейность, связанная с нелинейностью по  $f$  его интеграла столкновений. В некоторых случаях возможно его линеаризовать. Например, для газа, в котором одна из частиц значительно больше, чем остальные, получается линейное уравнение для функции распределения  $f(\vec{p}, \vec{r}, t)$  этой большой частицы. Тогда можно показать, что это уравнение сводится к уравнению Фоккера-Планка типа 1.2.1. или соответствующей трехмерной формы.

В отсутствие внешней силы  $F(x)$  стационарным решением для  $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll}$  является распределение Максвелла  $\exp[-mv^2/2k_B T]$ .

### 1.4. Управляющее уравнение (Master Equation).

Весьма общими *линейными* уравнениями для плотности вероятности являются *управляющее уравнение* и *обобщенное управляющее уравнение*. Если  $x$  переменная

принимает лишь целые значения, то управляющее уравнение имеет вид

$$\partial W_n / \partial t = \dot{W}_n = \sum_m [\omega(m \rightarrow n) W_m - \omega(n \rightarrow m) W_n].$$

Здесь  $W_n$  есть вероятность найти целое значение  $n$  и  $\omega(m \rightarrow n)$  есть скорость перехода (transition rate) от  $m$  к  $n$ , которая должна быть положительной. Для непрерывной переменной сумма переходит в интеграл и тогда

$$\partial W(x, t) / \partial t = \dot{W}(x, t) = \int [\omega(x' \rightarrow x) W(x', t) - \omega(x \rightarrow x') W(x, t)] dx'.$$

**1.1.3. Уравнение движения для функции распределения в задаче Ланжевена**

$$\frac{\partial W}{\partial t} = \gamma \frac{\partial(vW)}{\partial v} + \frac{\gamma T}{m} \frac{\partial^2 W}{\partial v^2},$$

$$W = W(v, t) \quad (\dot{v} + \gamma v) = \Gamma(t) : \quad \langle \Gamma(t) \Gamma(t') \rangle = (2\gamma T \delta / m)(t - t'), \quad \gamma \sim \frac{1}{\tau} \text{ средние:}$$

$$\langle h[v(t)] \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} h(v) W(v, t) dv.$$

**1.2. Уравнение Фоккера-Планка.**

**1.2.1. Уравнение Фоккера-Планка 1D (одномерное).**

$$\frac{\partial W}{\partial t} = \left[ -\frac{\partial}{\partial x} D^{(1)}(x) + \frac{\partial^2}{\partial x^2} D^{(2)}(x) \right] W(x, t).$$

**1.2.2. Уравнение Фоккера-Планка  $n$  ( $n$  - мерное).**

$$\frac{\partial W}{\partial t} = \left[ -\sum_{i=1}^N \frac{\partial}{\partial x_i} D_i^{(1)}(\{x\}) + \sum_{j,i=1}^N \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} D_{ij}^{(2)}(\{x\}) \right] W(x, t).$$

**1.2.3. Как возникает уравнение Фоккера-Планка?**

Детерминированное уравнение:

$$\frac{dx_i}{dt} = \dot{x}_i = D_i^{(1)}(x_1, \dots, x_N) = D_i^{(1)}(\{x\}).$$

**1.2.4. Цели уравнения Фоккера-Планка.**

**1.2.5. Решение уравнения Фоккера-Планка.**

**1.2.6. Уравнение Крамерса и Смолуховского: 1D**

$$\frac{\partial}{\partial t} W(x, v, t) = \left[ -\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial v} \left( \gamma v - \frac{F(x)}{m} \right) + \frac{\gamma T}{m} \frac{\partial^2}{\partial v^2} \right] W,$$

соответствует стохастическому уравнению

$$\begin{cases} \dot{x} = v, \\ \dot{v} = -\gamma v + F(x)/m + \Gamma(t) \rightarrow m\ddot{x} + \underline{m\gamma\dot{x}} = F(x) + m\Gamma(t), \\ \langle \Gamma(t)\Gamma(t') \rangle = (2\gamma T/m)\delta(t-t'), \\ \frac{\partial W(x,t)}{\partial t} = 1/\gamma m \left[ -\frac{\partial}{\partial x} F(x) + T \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right] W, \quad \text{уравнение Смолуховского.} \end{cases}$$

### 1.2.7. Обобщения уравнения Фоккера-Планка.

а) Крамерса - Мойала:

$$\frac{\partial W}{\partial t} = \sum_{\nu=1}^{\infty} \left(-\frac{\partial}{\partial x}\right)^{\nu} D^{(\nu)}(x) W(x, t),$$

для белого шума  $D^{(\nu)} = 0$  с  $\nu \geq 3$ . Для дискретных переменных это не так.

б) учет эффектов памяти:

$$\frac{\partial W(x, t)}{\partial t} = \int_{-\infty}^t d\tau \left[ -\frac{\partial}{\partial x} D^{(1)}(x, t - \tau) + \frac{\partial^2}{\partial x^2} D^{(2)}(x, t - \tau) \right] W(x, \tau).$$

Если происходит быстрое убывание со временем «коэффициентов памяти»  $D^{(1)}$  и  $D^{(2)}$ , то мы приходим к марковскому процессу.

### 1.3. Уравнение Больцмана.

#### 1.4. Управляющее уравнение.

К лекции о *стохастических переменных*.

Эта лекция задумана как сводка фактов и представлений, которые понадобятся нам в дальнейшем, а не как раздел обзора по теории вероятностей стохастических (то есть случайных) величин.

#### 1. Одномерный случай.

##### 1.1 Функция распределения $P_X(x)$ .

Стохастическая или случайная величина есть переменная  $X$ , определенная *множеством своих возможных значений*  $\{x\}$  и *распределением вероятности*  $P_X(x)$  на этом множестве. Это множество может быть *дискретным или непрерывным*, и распределение вероятности есть неотрицательная функция, то есть  $P_X(x) \geq 0$  с условием, что  $P_X(x)dx$  есть вероятность того что,  $X \in (x, x + dx)$ .  $P_X(x)$  нормировано так, что  $\int dx P_X(x) = 1$ , где интегрирование идет по всему диапазону (range)  $X$ , (или «областью значений», или «множеством состояний»).

Если значение  $X$  заданы на дискретном множестве  $\{x_n\}$ , то распределение вероятностей (или плотность вероятностей  $P_X(x)$ ) состоит из определенного числа  $\delta$ -функциональных вкладов, то есть  $P_X(x) = \sum_n p_n \delta(x - x_n)$  и условие нормировки сводится к условию  $\sum_n p_n = 1$ . Например, в случаях бросания кости диапазон значений  $X$  есть  $\{x_n\} = \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$  и  $p_n = 1/6$  для каждого  $x_n$  (если кость «честная»). Тогда, вводя  $\delta$ -функциональные особенности в плотность вероятности  $P_X(x)$ , мы формально можем дискретный случай описывать так же, как непрерывный.

Символически:  $P_X(x)dx = Prob\{X \in [x, x + dx]\}$ .

### 1.1.2. Альтернативное описание распределения вероятностей.

Для этого математики используют функцию  $\mathbf{P}(x) = \int_{-\infty}^{x+0} P_X(x)dx$ , которая есть полная вероятность того, что  $X$  принимает любое значение  $\leq x$ . Тогда  $d\mathbf{P}/dx = P_X(x)$  или  $d\mathbf{P}(x) = P_X(x)dx$ , где  $d\mathbf{P}(x)$  есть вероятность того, что  $x < X \leq x + dx$ . Изобразим связь  $P_X(x)$  и  $\mathbf{P}(x)$  на графиках для значений случайной переменной  $x$ .

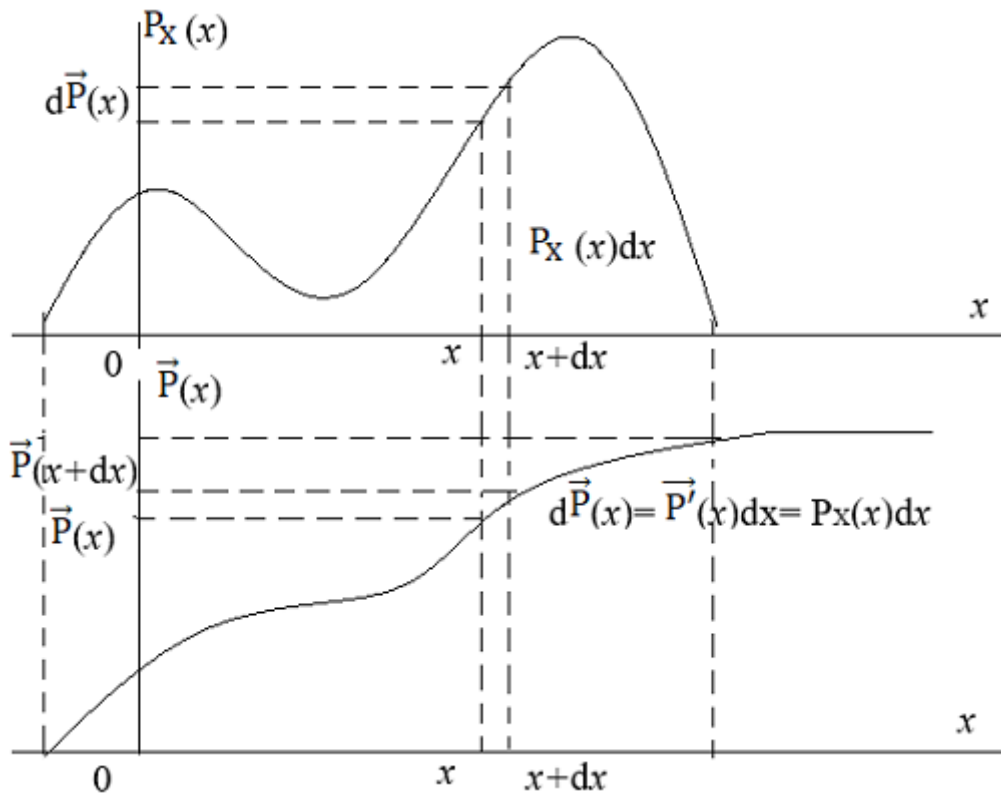


рис.3.

функции  $P_X(x)$  и  $\mathbf{P}(x)$  связаны между собой как производная и интеграл.

Сравнение достоинств и недостатков использования  $P_X(x)$  и  $\mathbf{P}(x)$ .

1. Математики предпочитают  $\mathbf{P}(x)$ , так как она не содержит  $\delta$ -пиков и имеет более простое поведение при преобразовании  $x$ .

2. Физики предпочитают  $P_X(x)$ , так как её величина в точке  $x$  определена самим значением вероятности в точке  $x$ , а также тем, что во многих приложениях она является более простой функцией.

### 1.1.3. Среднее и моменты.

Среднее функции  $f(X)$ , определенное на диапазоне стохастической переменной  $X$  по отношению к распределению вероятностей этой переменной определяется как

$$\langle f(X) \rangle = \int dx f(x) P_X(x).$$

Моменты стохастической переменной  $\mu_m$ , соответствуют специальным случаям  $f(X) = X^m$ , то есть

$$\mu_m = \langle X^m \rangle = \int dx x^m P_X(x), \quad m = 1, 2, \dots$$

### 1.1.4. Характеристическая функция.

Она определяется усреднением  $\exp(ikX)$ , то есть

$$G_X(k) = \langle \exp(ikX) \rangle = \int dx \exp(ikx) P_X(x).$$

Свойства  $G_X(k)$ :  $k$ - действительное,  $G(0) = 1$ ,  $|G(k)| \leq 1$ .

Так как  $G_X(k)$  есть Фурье-образ от  $P_X(x)$ , то обратное преобразование Фурье дает

$$P_X(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \exp(-ikx) G_X(k).$$

Функция  $G_X(k)$  дает альтернативную полную характеристику плотности вероятности.

Разлагая  $\exp$  в интеграле для  $G_X(k)$  и изменяя порядок суммирования и интегрирования, имеем

$$G_X(k) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(ik)^m}{m!} \int dx x^m P_X(x) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(ik)^m}{m!} \mu_m.$$



В результате мы получим, что  $G_X(k)$  есть производящая функция моментов в том смысле, что

$$\mu_m = (-i)^m \frac{\partial^m}{\partial k^m} G_X(k) \Big|_{k=0}.$$

#### 1.1.4 Кумулянты (Семиинварианты).

Кумулянты  $k_m$  определяются как коэффициенты разложения кумулянтной функции  $\ln G_X(k)$  по степеням  $(ik)$ , то есть

$$\ln G_X(k) = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(ik)^m}{m!} k_m.$$

Заметим, что благодаря нормировке  $P_X(x)$ , слагаемое с  $m = 0$  исчезает и ряд начинается с  $m = 1$ . Точные соотношения между первыми четырьмя кумулянтами и соответствующими моментами есть

$$k_1 = \mu_1 = \langle X \rangle,$$

$$k_2 = \mu_2 - \mu_1^2 = \langle X^2 \rangle - \langle X \rangle^2 \equiv \sigma^2$$

и называется дисперсией,

$$k_3 = \mu_3 - 3\mu_2\mu_1 + 2\mu_1^3,$$

$$k_4 = \mu_4 - 4\mu_3\mu_1 - 3\mu_2^2 + 12\mu_2\mu_1^2 - 6\mu_1^4.$$

Имеется общее выражение для  $k_m$  в терминах детерминанта  $m \times m$  матрицы с моментами  $\{\mu_i\}$ , где  $i = 1, \dots, m$ , и биномиальными коэффициентами.

При произвольной  $P_X(x)$  можно показать (если сравнивать её с *гауссовой* функцией, то есть *нормальным* распределением), что

$$P_X(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(-x^2/2) \left[ 1 + \sum_{n=3}^{\infty} \frac{C_n H_n(x)}{\sqrt{n!}} \right],$$

где  $H_n(x)$  - полиномы Эрмита. Тогда можно показать, что

$$C_3 = \frac{1}{\sqrt{3!}} \frac{\mu_3}{\sigma^3} \quad \text{и} \quad C_4 = \frac{1}{\sqrt{4!}} \left( \frac{\mu_4}{\sigma^4} - 3 \right),$$

и так далее.

Величины  $\gamma_1 = \mu_3/\sigma^3$  и  $\gamma_2 = (\mu_4/\sigma^4) - 3$ , от которых зависят коэффициенты  $C_3$  и  $C_4$  обычно называются соответственно *коэффициентом асимметрии* (skewness)

и коэффициентом эксцесса (kurtosis) распределения  $P_X(x)$ . Оказывается, что для нормального распределения  $\gamma_1 = \gamma_2 = 0$ .

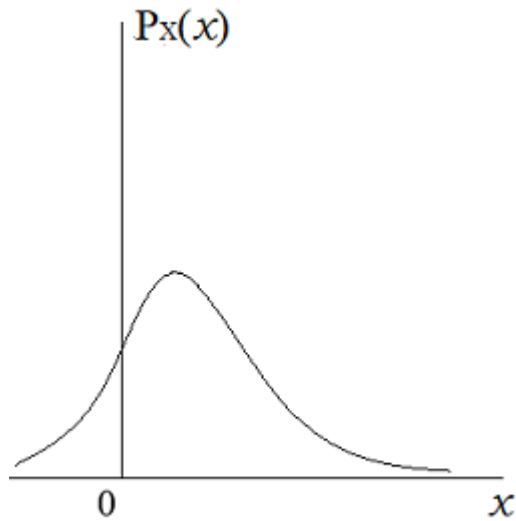


рис.4 асимметрия  $P_X(x)$

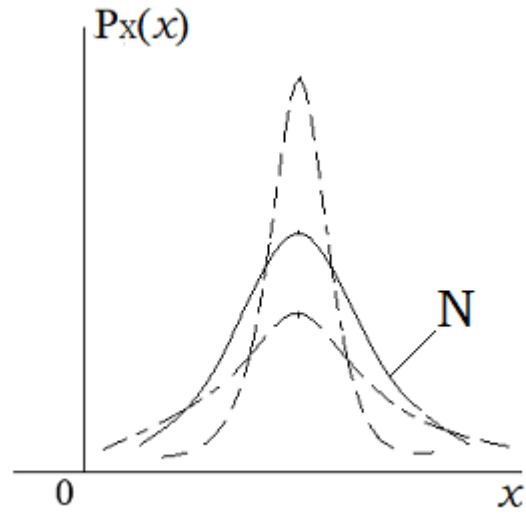


рис.5 эксцесс  $P_X(x)$

### 1.1.6. Четыре важных стохастических переменных.

Это однородное, экспоненциальное, нормальное и Коши(Лоренца).

1.1.6.1. Однородное распределение:  $X = U(a, b)$   $P_X(x) = \begin{cases} 1/(b-a) & \text{если } a \leq x < b, \\ 0 & \text{если } x < a, \quad x > b. \end{cases}$

=

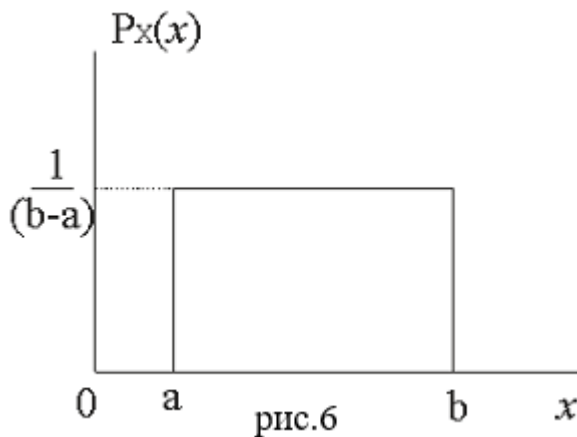


рис.6

$$\langle X^n \rangle = \frac{b^{n+1} - a^{n+1}}{(n+1)(b-a)} = \frac{1}{n+1} \sum_{j=0}^n a^j b^{n-j}$$

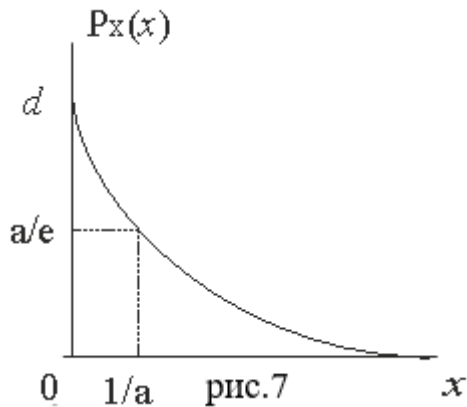
два параметра: a, b.

$$\langle X \rangle = (a+b)/2; \quad \sigma \equiv [ \langle X^2 \rangle - \langle X \rangle^2 ]^{1/2} = (b-a)/2\sqrt{3},$$

$$\lim_{b \rightarrow a} U(a, b) = a,$$

$\sigma \equiv sdev = \text{standart deviation.}$

1.1.6.2 Экспоненциальное распределение:  $X = \mathbf{E}(a)$ ,



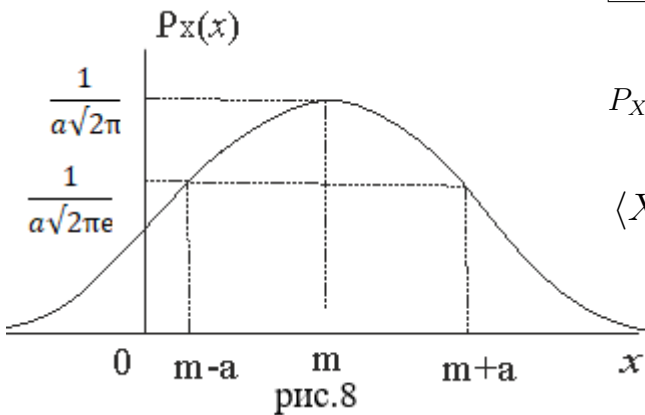
$$P_X(x) = \begin{cases} a \exp(-ax) & x \geq 0 \text{ один параметр,} \\ 0 & x < 0, \quad a > 0, \end{cases}$$

$$\langle X^n \rangle = n! / a^n; \quad \lim_{a \rightarrow \infty} \mathbf{E}(a) = 0,$$

$$\langle X \rangle = \sigma = 1/a; \quad \sigma^2 \equiv \text{variance.}$$

1.1.6.3. Нормальное распределение:

$$X = \mathbf{N}(m, a^2),$$



$$P_X(x) = \frac{1}{(2\pi a^2)^{1/2}} \exp\left[-\frac{(x-m)^2}{2a^2}\right] \quad \begin{matrix} 0 < a < \infty \\ -\infty < m < \infty \end{matrix}$$

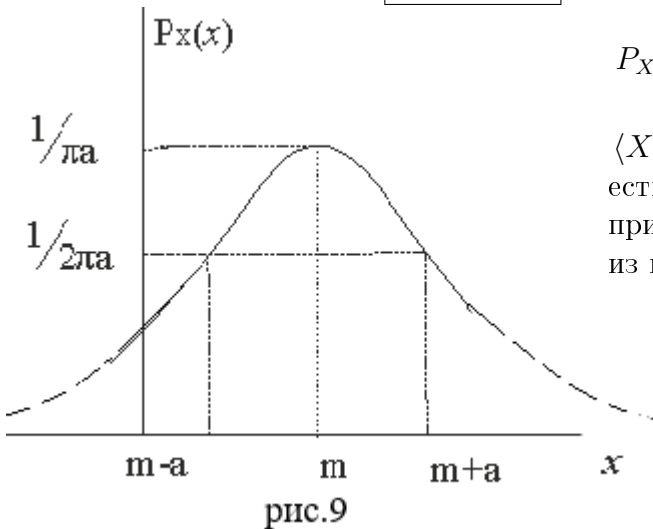
$$\langle X^n \rangle = n! \sum_{k=0}^n \frac{m^{n-k} (a^2)^{k/2}}{(n-k)! (k/2)! 2^{k/2}}$$

$$\begin{cases} \langle X \rangle = m \\ \sigma = a \end{cases}$$

$$\lim_{a \rightarrow 0} \mathbf{N}(m, a^2) = m$$

1.1.6.4. Коши-Лоренца:  $X = \mathbf{C}(m, a)$ ,

$$0 < a < \infty$$



$$P_X(x) = \frac{a/\pi}{(x-m)^2 + a^2}; \quad -\infty < m < \infty,$$

$\langle X^n \rangle$  не определено для всех  $n \geq 1$ , то есть  $\mu_n$  - расходятся,  $\langle X^0 \rangle = 1$ , так как при  $a \rightarrow 0$   $\mathbf{C}(m, a \rightarrow 0)$  является одним из представлений  $\delta(x-m)$ , то

$$\lim_{a \rightarrow 0} \mathbf{C}(m, a) = m.$$

## 2. Многомерные распределения вероятностей.

Все определения, соответствующие случаю одной переменной, можно распространить на случай большего числа измерений. Рассмотрим теперь  $n$ -мерный вектор стохастических переменных  $\mathbf{X} = (X_1, \dots, X_n)$  с распределением вероятности  $P_n(x_1, \dots, x_n)$ . Это распределение можно также называть *совместной функцией распределения* и тогда

$$P_n(x_1, \dots, x_n) dx_1, \dots, dx_n,$$

есть вероятность того, что  $X_1, \dots, X_n$  имеют значения между  $(x_1, x_1 + dx_1), \dots, (x_n, x_n + dx_n)$ .

2.1. *Частные распределения* (partial distributions). Возможно рассматривать распределение вероятностей для некоторых стохастических переменных. Это можно сделать разными способами.

2.1.1. Возьмём подмножество  $s < n$  переменных  $X_1, \dots, X_s$ . Вероятность того, что они имеют определённые значения в  $(x_1, x_1 + dx_1), \dots, (x_s, x_s + dx_s)$  независимо от значений остальных переменных  $X_{s+1}, \dots, X_n$  будет

$$P_s(x_1, \dots, x_s) = \int dx_{s+1}, \dots, dx_n P_n(x_1, \dots, x_s, x_{s+1}, \dots, x_n),$$

и называется частным (marginal) распределением для подмножества  $X_1, \dots, X_s$ . Её нормировка на 1 немедленно следует из нормировки совместной функции распределения.

2.1.2. *Альтернативно*, можно переменным  $X_{s+1}, \dots, X_n$  приписать фиксированные значения и рассматривать *совместную вероятность* распределение остальных переменных  $X_1, \dots, X_s$ . Это называется *условной вероятностью* переменных  $X_1, \dots, X_s$  при условии, что остальные переменные  $X_{s+1}, \dots, X_n$  имеют *заданные значения*  $x_{s+1}, \dots, x_n$ . Условную вероятность обозначим как

$$P_{s/n-s}(x_1, \dots, x_s | x_{s+1}, \dots, x_n).$$

Это распределение построено так, что *полная совместная вероятность*  $P_n(x_1, \dots, x_n)$  равна маргинальной (частной) вероятности для переменных  $x_{s+1}, \dots, x_n$  иметь значение  $x_{s+1}, \dots, x_n$ , умноженную на условную вероятность того, что при этом условии остальные переменные  $X_1, \dots, X_s$  имеют значение  $(x_1, \dots, x_s)$ . Это *правило*

Байеса можно рассматривать как *определение условной вероятности*

$$P_n(x_1, \dots, x_n) = P_{n-s}(x_{s+1}, \dots, x_n)P_{s/n-s}(x_1, \dots, x_s|x_{s+1}, \dots, x_n).$$

Нормировка *условной вероятности* следует из нормировки совместной и частной.

Обычно *правило Байеса* записывают в виде

$$P_{s/n-s}(x_1, \dots, x_s|x_{s+1}, \dots, x_n) = P_n(x_1, \dots, x_n)/P_{n-s}(x_{s+1}, \dots, x_n).$$

Предположим, что  $n$  переменных можно разбить на два множества  $X_1, \dots, X_s$  и  $X_{s+1}, \dots, X_n$  так, что  $P_n$  факторизуется, то есть

$$P_n(X_1, \dots, X_n) = P_s(x_1, \dots, x_s)P_{n-s}(x_{s+1}, \dots, x_n).$$

Тогда эти два множества называются *статистически независимыми* друг от друга. В этом случае множитель  $P_s$  является *частной* плотностью вероятности переменных  $X_1, \dots, X_s$ . В то же время он является условной плотностью вероятностей

$$P_{s/n-s}(x_1, \dots, x_s|x_{s+1}, \dots, x_n) = P_s(x_1, \dots, x_s).$$

Это означает, что задание величин  $X_1, \dots, X_s$  не влияет на распределение переменных  $X_{s+1}, \dots, X_n$  и наоборот.

### 2.1.3. Характеристическая функция: моменты и кумулянты.

Для многомерных вероятностных распределений, *моменты определены* как

$$\langle X_1^{m_1}, \dots, X_n^{m_n} \rangle = \int dx_1, \dots, dx_n x_1^{m_1}, \dots, x_n^{m_n} P_n(x_1, \dots, x_n),$$

тогда как характеристическая функция (то есть производящая функция моментов) зависит от  $n$  вспомогательных переменных  $\mathbf{k} = (k_1, \dots, k_n)$

$$G_X(\mathbf{k}) \langle \exp[i(k_1 X_1 + \dots + k_n X_n)] \rangle = \sum_0^\infty \frac{(ik_1)^{m_1}, \dots, (ik_n)^{m_n}}{m_1!, \dots, m_n!} \langle X_1^{m_1}, \dots, X_n^{m_n} \rangle,$$

Подобно этому, кумулянты многомерных распределений, обозначаемые двойным усреднением, определяются в терминах разложения  $\ln G_X(\mathbf{k})$  как

$$\ln G_X(\mathbf{k}) = \sum_0' \frac{(ik_1)^{m_1}, \dots, (ik_n)^{m_n}}{m_1!, \dots, m_n!} \langle \langle X_1^{m_1}, \dots, X_n^{m_n} \rangle \rangle,$$

где *штрих* означает отсутствие слагаемого со всеми  $m_i$  (одновременно исчезающими, то есть  $=0$ , из-за нормировки  $P_n$ ).

#### 2.1.4. Матрица ковариации.

Моменты второго порядка могут быть объединены в  $n \times n$  матрицу  $\langle X_i X_j \rangle$ . Удобнее, однако, *матрица ковариации*, определяемая *кумулянтами* второго порядка

$$\langle\langle X_i X_j \rangle\rangle = \langle X_i X_j \rangle - \langle X_i \rangle \langle X_j \rangle = \langle [X_i - \langle X_i \rangle][X_j - \langle X_j \rangle] \rangle.$$

Каждый *диагональный* элемент этой матрицы является *дисперсиями*, а *недиагональные* элементы называют *ковариацией*, или *смешанными моментами* второго порядка. Когда последние *нормированы*, их называют *коэффициентами корреляции*

$$\rho_{ij} = \frac{\langle\langle X_i X_j \rangle\rangle}{\sqrt{\langle\langle X_i^2 \rangle\rangle \langle\langle X_j^2 \rangle\rangle}} = \frac{\langle X_i X_j \rangle - \langle X_i \rangle \langle X_j \rangle}{\sqrt{(\langle X_i^2 \rangle - \langle X_i \rangle^2)(\langle X_j^2 \rangle - \langle X_j \rangle^2)}}.$$

#### 2.1.5. Статистическая независимость.

Пусть  $s = 2$ . Мы говорим, что две стохастических переменных  $X_1$  и  $X_2$  *статистически независимы* друг от друга, если их *совместное* распределение вероятности факторизуется, то есть

$$P_{n=2}(x_1, x_2) = P_{X_1, X_2}(x_1, x_2) = P_{X_1}(x_1)P_{X_2}(x_2).$$

*Статистическую независимость*  $X_1$  и  $X_2$  можно также сформулировать на языке *выполнения одного* из следующих *трех* критериев:

- a) Все моменты факторизуются:  $\langle X_1^{m_1} X_2^{m_2} \rangle = \langle X_1^{m_1} \rangle \langle X_2^{m_2} \rangle$ .
- b) Характеристическая функция факторизуется:  $G_{X_1 X_2}(k_1, k_2) = G_{X_1}(k_1)G_{X_2}(k_2)$ .
- c) Кумулянты  $\langle\langle X_1^{m_1} X_2^{m_2} \rangle\rangle$  *исчезают*, когда оба  $m_1$  и  $m_2$  не равны нулю.

Окончательно, переменные  $X_1$  и  $X_2$  называются *некоррелированными*, если их ковариация равна нулю, то есть  $\langle\langle X_1 X_2 \rangle\rangle = 0$ . Это условие является *более слабым*, чем *статистическая независимость*.

#### 2.3. Гауссово распределение.

Оно определено как  $P_X(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left[-\frac{(x-\mu_1)^2}{2\sigma^2}\right]$ .

Если вернуться к 1.1.6.3, где  $X = \mathbf{N}(m, a^2)$ , то там было показано, что  $\langle X \rangle = m = \mu_1$  и  $\sigma^2 = a^2$ . Соответствующая характеристическая функция есть

$$G_X(k) = \exp(i\mu_1 k - \frac{1}{2}\sigma^2 k^2),$$

что следует из её определения

$$G_X(k) = \int dx P_X(x) e^{ikx} \sim \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp \left[ ikx - \frac{(x - \mu_1)^2}{2\sigma^2} \right],$$

и дополнения до квадрата  $x' = x - \mu_1$  и использования интеграла Гаусса  $\int dk e^{-\alpha(k-b)^2} = \sqrt{\pi/\alpha}$  для комплексных  $b$  так, как это делалось для получения решения уравнения диффузии в задаче Эйнштейна о броуновском движении.

Отметим, что  $\ln G_X(k)$  содержит слагаемые по  $k$  в степени выше квадрата. Следовательно все *кумулянты после второго тождественно равны нулю*, что есть специфическое свойство *именно гауссова* распределения.

Для полноты картины, напишем еще распределение Гаусса для  $n$  переменных  $\mathbf{X} = (X_1, \dots, X_n)$  и соответствующую характеристическую функцию

$$P_{\mathbf{X}}(\mathbf{x}) = \sqrt{\frac{\det A}{(2\pi)^n}} \exp \left[ -\frac{1}{2} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) \hat{A} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) \right],$$

$$G_{\mathbf{X}}(\mathbf{k}) = \exp(i\mathbf{x}_0\mathbf{k} - \frac{1}{2}\mathbf{k}\hat{A}^{-1}\mathbf{k}),$$

Здесь средние и ковариации есть  $\langle \mathbf{X} \rangle = \mathbf{x}_0$  и  $\langle \langle X_i X_j \rangle \rangle = (A^{-1})_{ij}$ .

#### 2.4. Преобразование переменных.

Пусть непрерывная однокомпонентная стохастическая переменная  $X$  отображается на новую переменную  $Y$  с помощью соотношения  $Y = f(X)$ .

Примерами таких отображений является переход к *логарифмической шкале* ( $Y = \log X$ ) и преобразование *от частот к длинам волн* ( $Y = 1/X$ ). Области изменения  $X$  и  $Y$  могут отличаться друг от друга. Вероятность того, что  $Y$  принимает значение, лежащие между  $y$  и  $y + \Delta y$  дается формулой

$$P_Y(y)\Delta y = \int dx P_X(x),$$

$$y < f(x) < y + \Delta y,$$

где интеграл берется по всем интервалам области изменения  $X$ , в которых выполняется неравенство. Это же соотношение можно записать как

$$P_Y(y) = \int dx \delta[y - f(x)] P_X(x),$$

из которого формально следует, что  $P_Y(y) = \langle \delta[y - f(X)] \rangle$  (где  $y$ - параметр).

Отсюда для характеристической функции  $G_Y(k)$  имеем:  $G_Y(k) = \int dy \exp(iky) P_Y(y) = \int dx P_X(x) \int dy \exp(iky) \delta[y - f(x)] = \int dx P_X(x) \exp[ikf(x)] = \langle \exp[ikf(X)] \rangle$ .

Как простейший *пример* рассмотрим *линейное* преобразование  $Y = \alpha X$

Из  $G_Y(k) = \langle \exp[ikf(X)] \rangle$  следует  $G_Y(k) = \langle \exp[ik\alpha X] \rangle = G_X(\alpha k)$ .

Эти выражения остаются справедливыми, если  $\mathbf{X}$  и  $\mathbf{Y}$  имеют соответственно, не обязательно равное  $r$  и  $s$  компонент. Типичный пример случая с  $r = 3, s = 1$  – это преобразование распределения Максвелла для  $\mathbf{X} = (v_x, v_y, v_z)$  в распределение по энергиям

$$E = (m/2)(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2),$$

$$P_Y(E) = \int \delta\left(\frac{mv^2}{2} - E\right) \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2} \exp(-mv^2/2) dv_x dv_y dv_z = \frac{2}{\sqrt{\pi}} (kT)^{-3/2} \sqrt{E} \exp(-E/kT),$$

вычислить дома ( $dv_x dv_y dv_z \rightarrow 4\pi v^2 dv$ ),

В *частном* случае, когда только одно значение  $X$  соответствует каждому значению  $Y$ , (и, следовательно,  $r = s$ ), можно обратить  $Y = f(X)$  и получить  $X = g(Y)$ . В этом случае преобразование плотности вероятностей сводится к

$$P_Y(y) = P_X(x) I,$$

где  $I = |dx/dy|$  - модуль определителя Якоби. ( $I \equiv \text{Det} | \partial(x_1, \dots, x_n) / \partial(y_1, \dots, y_n) |$ ).

## 2.5. Суммирование стохастических переменных.

2.5.1. Приведенные в разделе 2.4. формулы для преобразования переменных, как было сказано, остаются справедливыми, если векторы  $\mathbf{X}$  и  $\mathbf{Y}$  имеют не обязательно равное число компонент. Рассмотрим, например, случай суммы двух стохастических переменных, когда  $Y = f(X_1, X_2) = X_1 + X_2$ . Тогда

$$P_Y(y) = \int dx_1 \int dx_2 \delta[y - (x_1 + x_2)] P_{X_1 X_2}(x_1, x_2) = \int dx_1 P_{X_1 X_2}(x_1, y - x_1).$$

### 2.5.2. Свойства суммы стохастических переменных.

Ниже мы получим *три правила*, которые удовлетворяет сумма

2.5.2.1.  $\langle Y \rangle = \langle X_1 \rangle + \langle X_2 \rangle$  вне зависимости от независимости  $X_1$  и  $X_2$ .

Действительно  $\langle Y \rangle = \int dy \cdot y \cdot P_Y(y) = \int dx_1 \int dx_2 P_{X_1 X_2}(x_1, x_2) \int dy \cdot y \delta[y - (x_1 + x_2)] = \int dx_1 \int dx_2 P_{X_1 X_2}(x_1, x_2) (x_1 + x_2) = \langle X_1 \rangle + \langle X_2 \rangle$ .



2.5.2.2. Если  $X_1$  и  $X_2$  коррелированы, то есть  $\langle\langle X_1 X_2 \rangle\rangle = 0$ , то подобное свойство суммы есть и для диагональных элементов, то есть  $\langle\langle Y^2 \rangle\rangle = \langle\langle X_1^2 \rangle\rangle + \langle\langle X_2^2 \rangle\rangle$ , так как

$$\langle Y \rangle^2 = \int dy y^2 P_Y(y) = \int dx_1 \int dx_2 P_{X_1 X_2}(x_1, x_2) (x_1 + x_2)^2 = \langle X_1^2 \rangle + \langle X_2^2 \rangle + 2\langle X_1 X_2 \rangle.$$

Тогда

$$\begin{aligned} \langle\langle Y^2 \rangle\rangle &= \langle Y^2 \rangle - \langle Y \rangle^2 = (\langle X_1^2 \rangle - \langle X_1 \rangle^2) / \langle\langle X_1^2 \rangle\rangle + \langle X_1 \rangle^2 + (\langle X_2^2 \rangle - \langle X_2 \rangle^2) / \langle\langle X_2^2 \rangle\rangle + \langle X_2 \rangle^2 \\ &- (\langle X_1 \rangle + \langle X_2 \rangle)^2 + 2\langle X_1 X_2 \rangle = \underbrace{\langle\langle X_1^2 \rangle\rangle + \langle\langle X_2^2 \rangle\rangle}_{\langle\langle X_1 X_2 \rangle\rangle=0} + 2(\langle X_1 X_2 \rangle - \langle X_1 \rangle \langle X_2 \rangle). \end{aligned}$$

2.5.2.3. Характеристическая функция  $Y = X_1 + X_2$  есть  $G_Y(k) = G_{X_1 X_2}(k_1 k)$ , так как

$$G_Y(k) = \langle \exp[ik f(X_1, X_2)] \rangle = \langle \exp[ik(X_1 + X_2)] \rangle = \sum_0^\infty ((ik)^{m_1} (ik)^{m_2} / m_1! m_2!) \langle X_1^{m_1} X_2^{m_2} \rangle.$$

Таким образом распределение вероятностей суммы двух *независимых* переменных есть *свертка* (convolution) их индивидуальных распределений вероятностей. Соответственно, характеристическая функция суммы (которая есть Фурье-образ распределения вероятностей) есть *произведение* индивидуальных характеристических функций.

Если  $X_1$  и  $X_2$  независимы, то  $P_Y(y) = \int dx_1 P_{X_1 X_2}(x_1, y-x_1) = \int dx_1 P_{X_1}(x_1) P_{X_2}(y-x_1)$ , то есть  $P_Y(y)$  есть свертка.

## 2.6. Центральная предельная теорема.

Сумму произвольного числа стохастических переменных можно рассматривать как специальный случай преобразования переменных. Пусть  $X_1, \dots, X_n$  есть множество  $n$  независимых стохастических переменных, каждая из которых имеет одинаковое распределение вероятностей  $P_X(x)$  с нулевым средним и (конечной) дисперсией  $\sigma^2$ . Тогда из того, что  $\langle Y \rangle = \langle X_1 \rangle + \langle X_2 \rangle$  и  $\langle\langle Y^2 \rangle\rangle = \langle\langle X_1^2 \rangle\rangle + \langle\langle X_2^2 \rangle\rangle$  следует, что их сумма  $Y = X_1 + \dots + X_n$  имеет нулевое среднее и дисперсию  $n\sigma^2$ , которая растёт линейно с  $n$ . С другой стороны, распределение *арифметического среднего* переменных  $(X_1 + \dots + X_n)/n$ , становится уже с ростом  $n$  (дисперсия равна  $\sigma^2/n$ ). Поэтому более удобно определить скейлинговую сумму вида

$$Z = \frac{X_1 + \dots + X_n}{\sqrt{n}},$$

дисперсия которой  $\sigma^2$  не зависит от  $n$ .

Центральная предельная теорема утверждает, что даже когда  $P_X(x)$  не является гауссовой, то вероятностное распределение  $Z$  при  $n \rightarrow \infty$  стремится к гауссовому распределению с нулевым средним и дисперсией  $\sigma^2$ . Этот замечательный результат объясняет ту важную роль гауссова распределения во всех областях, где используется статистика, и, в частности, в равновесной и неравновесной статистической физике.

### 2.6.1. Доказательство центральной предельной теоремы.

Начнем с разложения в ряд по степеням  $k$  характеристической функции произвольной  $P_X(x)$  с нулевым средним

$$G_X(k) = \int dx \exp(ikx) P_X(x) = 1 - \frac{1}{2} \sigma^2 k^2 + \dots$$

Факторизация характеристической функции суммы  $Y = X_1 + \dots + X_n$  статистически независимых переменных дает

$$G_Y(k) = \prod_{i=1}^n G_{X_i}(k) = [G_X(k)]^n,$$

где последнее равенство следует из эквивалентных статистических свойств различных переменных  $X_i$ . Далее, с учетом для  $Z = Y/\sqrt{n}$  и используя то, что  $G_Y(k) = G_X(\alpha k)$  для  $Y = \alpha X$  получим, считая  $\alpha = 1/\sqrt{n}$ ,

$$G_Z(k) = G_Y(k/\sqrt{n}) = [G_X(k/\sqrt{n})]^n \simeq (1 - (\sigma^2 k^2 / 2n))^n \rightarrow_{n \rightarrow \infty} \exp(-\frac{1}{2} \sigma^2 k^2),$$

где мы воспользовались определением экспоненты  $e^x = \lim_{n \rightarrow \infty} (1 + (x/n))^n$ .

Сравнивая полученный результат с определением  $P_X(x)$  для гауссового распределения

$$P_X(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left[-\frac{(x - \mu_1)^2}{2\sigma^2}\right],$$

получим

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

что и требовалось доказать.

### 2.6.2. Замечания о справедливости центральной предельной теоремы.

Доказательство центральной предельной теоремы может быть проведено при более общих предположениях. Например, нет необходимости в существовании всех кумулянтов (моментов). Однако необходимо, чтобы моменты, вплоть до как минимум второго порядка, существовали (или, эквивалентно,  $G_X(k)$  была дважды

дифференцируемой при  $k = 0$ ). Необходимость этого условия может быть проиллюстрирована контрпримером распределения Коши-Лоренца

$$P_C(x) = \frac{1}{\pi} \frac{\gamma}{x^2 + \gamma^2} \quad (-\infty < x < \infty).$$

Можно показать, что если множество  $n$  независимых переменных  $X_i$  имеет распределение Коши-Лоренца, их сумма также имеет это распределение. \* Но для этого распределения не выполнены целевые условия справедливости центральной предельной теоремы, так как интеграл, определяющий момент  $\mu_m$ , не сходится даже для  $m = 1$  \*. Наконец, несмотря на важность условия независимости стохастических переменных  $X_i$ , оно может быть ослаблено для достаточно слабой статистической зависимости переменных.

\*Это можно доказать, вычисляя соответствующую характеристическую функцию, для чего можно использовать  $\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{iax} / (1+x^2) = \pi e^{-|a|}$  который получается, используя вычеты подынтегральных функций в верхний (нижней) полуплоскости для  $a > 0$  ( $a < 0$ ). Таким образом мы получим, что  $G(k) = \exp(-\gamma|k|)$ , где  $G(k)$  из-за наличия  $|k|$ , не имеет производной при  $k = 0$ .

Отметим также, что из условия  $G_{X_i}(k) = \exp(-\gamma_i|k|)$  и формулы о факторизации  $G_Y(k)$  следует, что распределение суммы независимых Коши-Лоренца переменных будет снова Коши-Лоренца распределение с

$$G_Y(k) = \exp\left[-\sum_i \gamma_i |k|\right].$$

## 1. Стохастические процессы – их определение и основные свойства.

В этой лекции мы рассмотрим *два эквивалентных* определения стохастических процессов - *абстрактное*, в терминах их *реализаций*, которые есть *детерминированные* функции двух переменных  $(x, t)$ , и более наглядное – в терминах иерархии плотностей вероятностей (подход Е.Слущкого) состояний системы в различные моменты времени.

### 1.1. Подход через реализации.

Пусть задана *стохастическая переменная*  $X$  и её *плотность вероятности*  $P_X(x)$ , где  $x$  – одно из возможных значений  $X$ . *Случайным процессом*  $Y_X(t)$  называют *любую функцию* от  $X$  и  $t$  (то есть функцию *двух переменных*, одна из которых

есть *время*  $t$ , а другая – стохастическая переменная  $X$ ), то есть

$$Y_X(t) = y(X, t).$$

*Выборочной функцией* или *реализацией* (sample function) случайного процесса  $Y_X(t)$  называют *детерминированную* функцию  $Y_x(t) = y(x, t)$ , которая получится, если вместо  $X$  подставить одно из его возможных значений  $x$ . Тогда случайный процесс можно представлять как ансамбль таких реализаций. Простейшие примеры таких случайных процессов и их реализаций будут даны ниже.

На основе плотности вероятности  $P_X(x)$  можно определить *коррелятор* любого порядка  $n$  в моменты  $t_1, \dots, t_n$  соотношением

$$\langle Y(t_1), \dots, Y(t_n) \rangle = \int dx Y_x(t_1), \dots, Y_x(t_n) P_X(x),$$

то есть

$$\langle Y(t) \rangle = \int Y_x(t) P_X(x) dx.$$

Особый интерес для случайного процесса представляет «автокорреляционная» функция

$K(t_1, t_2) = \langle \langle Y(t_1)Y(t_2) \rangle \rangle = \langle Y(t_1)Y(t_2) \rangle - \langle Y(t_1) \rangle \langle Y(t_2) \rangle = \langle [Y(t_1) - \langle Y(t_1) \rangle][Y(t_2) - \langle Y(t_2) \rangle] \rangle$ , которая для  $t_1 = t_2 = t$  сводится к *зависящей от времени дисперсии*  $\langle \langle Y(t)^2 \rangle \rangle = \sigma^2(t)$ .

Стохастический процесс называется *стационарным*, когда его моменты не изменяются при *сдвиге во времени*, то есть

$$\langle Y(t_1 + \tau), \dots, Y(t_n + \tau) \rangle = \langle Y(t_1), \dots, Y(t_n) \rangle.$$

Тогда, в частности  $\langle Y(t) \rangle$  не зависит от  $t$ , а  $K(t_1, t_2)$  зависит лишь от  $|t_1 - t_2|$ . В последнем случае обычно существует такая *константа*  $\tau_C$ , что  $K(t_1, t_2) \simeq 0$  для  $|t_1 - t_2| > \tau_C$ ;  $\tau_C$  тогда называют *временем автокорреляции стационарного процесса*.

Если стохастическая величина  $X$  есть вектор  $\mathbf{X} = (X_1, \dots, X_n)$ , то автокорреляционная функция заменяется *корреляционной матрицей*  $K_{ij}(t_1, t_2) = \langle \langle Y_i(t_1)Y_j(t_2) \rangle \rangle$ . Её *диагональные элементы* являются автокорреляционными функциями.

## 1.2. Иерархия функций распределения.

Покажем, что из определения *стохастического процесса* как ансамбля реализаций в (1.1) следует альтернативное его представление в виде иерархии функций

распределения. Действительно, если процесс задан, как в пункте 1.1, то *плотность вероятности* получить значение  $y$  в момент времени  $t$  дается выражением

$$P_1(y, t) = \int \delta[y - Y_x(t)]P_X(x)dx = \int \delta[y - y(x, t)]P_X(x)dx.$$

Аналогично, *совместная плотность вероятности* того, что  $Y_X(t)$  принимает значение  $y_1$  в момент  $t_1$ ,  $y_2$  в момент  $t_2$  и так далее до  $y_n$ ,  $t_n$ , есть

$$P_n(y_1, t_1; \dots; y_n, t_n) = \int \delta[y_1 - Y_x(t_1)] \dots \delta[y_n - Y_x(t_n)]P_X(x)dx.$$

Эта иерархия распределений вероятностей  $P_n$ ,  $n = 1, 2, \dots$  позволяет *другим способом* вычислить все средние, которые ранее в п.1.1. вычислялись с помощью ансамбля реализаций. Именно,

$$\langle Y(t_1) \dots Y(t_n) \rangle = \int y_1 \dots y_n P_n(y_1 t_1; \dots; y_n t_n) dy_1 \dots dy_n,$$

что легко доказать подстановкой в последнюю формулу для  $P_n$ . Тогда

$$\langle Y(t) \rangle = \int y P_1(y, t) dy; \quad \langle Y(t_1) Y(t_2) \rangle = \int y_1 y_2 P_2(y_1 t_1; y_2 t_2) dy_1 dy_2, \text{ и так далее.}$$

В этом *подходе определение стационарного* процесса в п.1.1 будет таким

$$P_n(y_1, t_1 + \tau; \dots; y_n, t_n + \tau) = P_n(y_1, t_1; \dots; y_n, t_n).$$

Отсюда следует, что необходимое (но недостаточное) условие стационарности стохастического процесса есть условие независимости  $P_1(y)$  от времени  $t$ .

Отметим еще, что  $P_n$  определены, если все времена различны. Только тогда иерархия  $P_n$  удовлетворяет *четырем условиям непротиворечивости*:

- 1)  $P_n \geq 0$ ;
- 2)  $P_n$  не изменяется при перестановке любых двух пар  $(y_i, t_i)$  и  $(y_j, t_j)$ ;
- 3)  $\int dy_n P_n(y_1, t_1; \dots; y_n, t_n) = P_{n-1}(y_1, t_1; \dots; y_{n-1}, t_{n-1})$ ;
- 4)  $\int dy P_1(y, t) = 1$ .

Так как  $P_n$  позволяет вычислить все средние, то они полностью определяют стохастический процесс. Колмогоровым было доказано, что *произвольный* набор функций, удовлетворяющий четырём условиям непротиворечивости, также определяет стохастический процесс  $Y_X(t)$ , как он был определен в п.1.1.

### 1.3. Гауссовы процессы.

Процесс называется гауссовым, если все его многомерные функции  $P_n$  являются гауссовыми распределениями. В этом случае все кумулянты с  $m > 2$  обращаются в нуль, и вспоминая, что  $\langle\langle Y(t_1)Y(t_2) \rangle\rangle = \langle Y(t_1)Y(t_2) \rangle - \langle Y(t_1) \rangle \langle Y(t_2) \rangle$ , мы видим что гауссов процесс полностью определяется его средним значением  $\langle Y(t) \rangle$  и вторым моментом  $\langle Y(t_1)Y(t_2) \rangle$ . Это процессы просты в обращении и хорошо изучены.

### 1.4. Условные вероятности.

Понятие условной вероятности для многомерных распределений можно применить и к стохастическому процессу, используя *иерархию* введенных в п.1.2. функций  $P_n$ . Так условная вероятность  $P_{1|1}(y_2, t_2|y_1, t_1)$  - это плотность вероятности того, что процесс  $Y(t)$  принимает значение  $y_2$  в момент  $t_2$ , если известно, что его величина в момент  $t_1$  была  $y_1$ . Иными словами, из всех реализации  $Y_x(t)$  ансамбля мы выбираем лишь те, которые удовлетворяют условию, что они проходят через точку  $y_1$  в момент  $t_1$ ; часть этого *подансамбля*, попадающая в интервалах  $(y_2, y_2 + dy_2)$  в момент  $t_2$  есть  $P_{1|1}(y_2, t_2|y_1, t_1)dy_2$ . Вероятность  $P_{1|1}$  неотрицательна и нормирована на единицу, то есть  $\int P_{1|1}(y_2, t_2|y_1, t_1)dy_2 = 1$ . Её называют *вероятностью перехода*.

В более общем случае можно зафиксировать значение  $Y$  при  $n$  различных значениях времени  $t_1, \dots, t_n$  и интересоваться *совместной* (joint) вероятностью в другие  $m$  моментов времени  $t_{n+1}, \dots, t_{n+m}$ . Это приводит к общему *определению* условной вероятности  $P_{m|n}$  по *правилу Байеса*:

$$P_{m|n}(y_{n+1}, t_{n+1}, \dots, y_{n+m}, t_{n+m}|y_1, t_1; \dots; y_n, t_n) = \frac{P_{n+m}(y_1, t_1; \dots; y_{n+m}, t_{n+m})}{P_n(y_1, t_1; \dots; y_n, t_n)}.$$

Отметим, что правая часть этого определения выражается через хорошо определённую ранее иерархию  $P_n$ . Кроме того, из условной их непротиворечивость следует условие нормировки  $P_{m|n}$  на единицу.

### 1.5. Марковские процессы.

Ниже мы кратко опишем подкласс так называемых *марковских* стохастических процессов. Сначала напомним, что условная вероятность  $P_{1|1}(y_2, t_2|y_1, t_1)$  стохастического процесса  $Y(t)$  есть вероятность того, что  $Y(t_2)$  принимает значение  $y_2$  при условии, что  $Y(t_1)$  имеет значение  $y_1$ . В этих терминах величина  $P_2$  есть

$$P_2(y_1, t_1; y_2, t_2) = P_1(y_1, t_1)P_{1|1}(y_2, t_2|y_1, t_1).$$

Для определения  $P_n$  более высокого порядка необходимо использовать *вероятности перехода* более высокого порядка, то есть

$$P_3(y_1, t_1; y_2, t_2; y_3, t_3) = P_2((y_1, t_1; y_2, t_2)P_{1|2}(y_3, t_3|y_1, t_1; y_2, t_2)).$$

Стохастический процесс называется марковским, если для любого множества  $n$  последовательных времен  $t_1 < t_2 < \dots < t_n$  имеем

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

Иными словами, условное распределение вероятностей  $y_n$  в момент  $t_n$  дается величинами его при  $y_{n-1}$  и  $t_{n-1}$  и не определяется знанием этих величин в предыдущие моменты времени.

Существенно, что марковский процесс *полностью* определяется *двумя* функциями  $P_1(y_1, t_1)$  и  $P_{1|1}(y_2, t_2|y_1, t_1)$ . По этим двум функциям можно восстановить всю иерархию  $P_n$ . Действительно, положив  $t_1 < t_2 < t_3$  имеем  $P_3(y_1, t_1; y_2, t_2; y_3, t_3) = P_2(y_1, t_1; y_2, t_2)P_{1|2}(y_3, t_3|y_1, t_1; y_2, t_2) = P_1(y_1, t_1)P_{1|1}(y_2, t_2|y_1, t_1)P_{1|1}(y_3, t_3|y_2, t_2)$ .

### 1.6. Уравнение Чепмена- Колмогорова.

Получим теперь *важное тождество*, которое должно выполняться для *вероятности перехода* любого *марковского* процесса. Интегрируя последнее уравнение по  $y_2$ , получим ( $t_1 < t_2 < t_3$ )

$$P_2(y_1, t_1; y_3, t_3) = P_1(y_1, t_1) \int dy_2 P_2(y_2, t_2|y_1, t_1) P(y_3, t_3|y_2, t_2),$$

где при получении левой части было использовано *условие совместности* иерархии плотностей вероятности  $P_2(1, 3) = \int dy_2 P_3(1, 2, 3)$ . Разделив потом обе части на  $P_1(y_1, t_1)$  и используя правило Байеса, получим уравнение Чепмена- Колмогорова:

$$P(y_3, t_3|y_1, t_1) = \int dy_2 P(y_3, t_3|y_2, t_2) P(y_2, t_2|y_1, t_1). \quad (6)$$

Для его справедливости упорядочение времен существенно -  $t_2$  должно быть между  $t_1$  и  $t_3$ . Это необходимо для того, чтобы исходное уравнение в 1.5 было справедливо, для чего его вторая часть была получена путем использования *определения* марковского процесса.

Наконец, воспользуемся тем, что  $P_2(y_1, t_1; y_2, t_2) = P_1(y_1, t_1)P_{1|1}(y_2, t_2|y_1, t_1)$  и  $P_1(y_2, t_2) = \int dy_1 P(y_2, t_2; y_1, t_1)P_1(y_1, t_1)$  получим, что

$$P_1(y_2, t_2) = \int dy_1 P(y_2, t_2|y_1, t_1)P_1(y_1, t_1).$$

Этот есть дополнительное соотношение, связывающие две характерные плотности вероятности марковского процесса. Обратное, любые *две неотрицательные* функции, связанные полученными двумя соотношениями, однозначно определяют марковский случайный процесс.

*Реализации в двух определениях стохастических процессов.*

1. В иерархии вероятностей  $P_n$ .

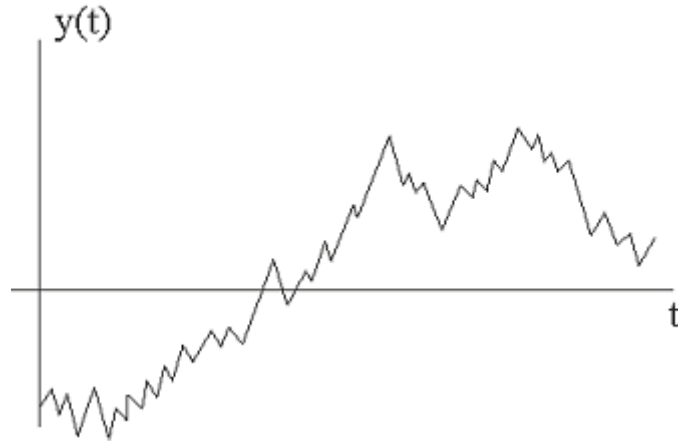


рис.10

## Примеры марковских процессов.

### 1. Процесс Винера-Леви.

Этот стохастический процесс первоначально был использован для описания *положения свободной* броуновской частицы в *одномерном* случае. С другой стороны, он играет центральную роль в строгом обосновании поведения стохастических дифференциальных уравнений (уравнение Ланжевена). Процесс Винера-Леви определен для  $-\infty < y < \infty$  и  $t > 0$  с помощью

$$P_1(y_1, t_1) = \frac{1}{\sqrt{2\pi t_1}} \exp\left(-\frac{y_1^2}{2t_1}\right),$$

$$P_2(y_2, t_2 | y_1, t_1) = \frac{1}{\sqrt{2\pi(t_2 - t_1)}} \exp\left[-\frac{(y_2 - y_1)^2}{2(t_2 - t_1)}\right] \quad (t_1 \leq t_2).$$

Так как  $P_1$  зависит от  $t$ , то это *нестационарный* гауссовский процесс. Докажем, что момент второго порядка есть

$$\langle Y(t_1)Y(t_2) \rangle = \min(t_1, t_2).$$



Действительно, предположим, что  $(t_1 < t_2)$ . Тогда имеем

$$\begin{aligned} \langle Y(t_1)Y(t_2) \rangle &= \int dy_1 \int dy_2 y_1 y_2 P_2(y_1, t_1; y_2, t_2) = \int dy_1 y_1 P_1(y_1, t_1) \\ &\underbrace{\int dy_2 y_2 P_2(y_2, t_2 | y_1, t_1)}_{y_1} = \underbrace{\int dy_1 y_1^2 P_1(y_1, t_1)}_{t_1}, \text{ так как} \\ \int dy_2 y_2 P_2(y_2, t_2 | y_1, t_1) &= \int (dy_2 / \sqrt{2\pi(t_2 - t_1)}) \exp[-((y_2 - y_1^2)/2(t_2 - t_1))] = \int_{-\infty}^{\infty} (dx(x + y_1)/\sqrt{\pi\alpha}) \exp[-x^2/\alpha] \\ &= y_1 \int_{-\infty}^{\infty} (dx/\sqrt{\pi\alpha^2}) \exp(-x^2/\alpha^2) = y_1(\alpha\sqrt{\pi}/\sqrt{\pi\alpha^2}) = y_1, \text{ так как} \\ \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\gamma^2 x^2) dx &= \sqrt{\pi}/\gamma \text{ и } \int dy_1 y_1^2 P_1(y_1, t_1) = \int dy_1 y_1^2 (1/\sqrt{2\pi t_1}) \exp(-y_1^2/2t_1) = \\ &= 1/\sqrt{2\pi t_1} \int dx x^2 \exp(-x^2/2t_1) = (1/\sqrt{2\pi t_1})(\sqrt{\pi}/2(1/2t_1)^3) = (1/\sqrt{2\pi t_1})(\sqrt{\pi}/2t_1) = \\ &= 2(1/\sqrt{2\pi t_1}) = t_1, \\ \text{так как } \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\gamma^2 x^2} dx &= 2\sqrt{\pi}/4\gamma^3 = \sqrt{\pi}/2\gamma^3. \end{aligned}$$

То есть дисперсия  $P_1$  равна  $t_1$ , то есть *зависит от времени*. Иначе: из того, что  $\int dy_1 y_1^2 P_1(y_1, t_1) = \langle Y^2(t_1) \rangle = t_1$  следует, что средний квадрат смещения в момент времени  $t_1$  равен  $t_1$ , то есть  $\langle Y^2(t) \rangle = t$  - *диффузионное движение* с  $D = 1$ . Если в формулах для  $P_1$  и  $P_2$ , определяющих этот процесс, сделать замену  $t_1 \rightarrow Dt_1$ , то получим  $\langle Y^2(t) \rangle = Dt$ .

## 2. Процесс Орнштейн-Уленбека.

Первоначально этот процесс был использован для описания *скорости* свободной броуновской частицы в одномерном случае. Он также описывает положение безинерционной (overdamped) частицы в параболическом (harmonic) потенциале. Он определяется через  $\Delta t = t_2 - t_1 > 0$  с помощью

$$\begin{aligned} P_1(y_1) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{y_1^2}{2}\right). \\ P(y_2, t_2 | y_1, t_1) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi(1 - e^{-2\Delta t})}} \exp\left[-\frac{(y_2 - y_1 e^{-\Delta t})^2}{2(1 - e^{-2\Delta t})}\right]. \end{aligned}$$

Процесс Орнштейна-Уленбека *стационарный* ( $P_1$  не зависит от  $t$ ), гауссов и марковский. Согласно теореме Дуба (Doob), это единственный процесс с такими тремя свойствами. Гауссовость видна из  $P_1$ . Так как  $P_2(y_2, t_2; y_1, t_1) = P_1(y_1)P(y_2, t_2 | y_1, t_1)$  то

$$P_2(y_2, t_2, y_1, t_1) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^2(1 - e^{-2\Delta t})}} \exp\left[-\frac{y_1^2 - 2y_1 y_2 e^{-\Delta t} + y_2^2}{2(1 - e^{-2\Delta t})}\right].$$

Покажем, что автокорреляционная функция  $\langle Y(t_1)Y(t_2) \rangle = e^{-\Delta t}$ . Действительно  $K(t_1, t_2) = \langle Y(t_1)Y(t_2) \rangle - \underbrace{\langle Y(t_1) \rangle \langle Y(t_2) \rangle}_{=0} = \int dy_1 dy_2 y_1 y_2 \underbrace{P_2(y_1, t_1; y_2, t_2)}_{P_1(y_1)P(y_2, t_2 | y_1, t_1)}$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dy_1 y_1 \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(-y_1^2/2) \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dy_2 y_2 \frac{1}{\sqrt{2\pi(1 - e^{-2\Delta t})}} \exp\left[-\frac{(y_2 - y_1 e^{-\Delta t})^2}{2(1 - e^{-2\Delta t})}\right]}_{y_1 \exp(-\Delta t)} =$$

$$\underbrace{e^{-\Delta t} \int_{-\infty}^{\infty} dy_1 y_1^2 \exp(-y_1^2/2) / \sqrt{2\pi}}_1 = e^{-\Delta t}.$$

С учетом этого результата эволюция  $P_2(y_2, t_2; y_1, t_1)$  со временем рассматриваемая как скорость броуновской частицы, имеет простой смысл. На *малых временах*, когда  $\Delta t \ll 1$ , скорость сильно коррелирует с собой:  $e^{-\Delta t} \sim 1$ .

На *больших временах*  $\Delta t \gg 1$  и  $e^{-\Delta t} \ll 1$ , то есть скорость практически теряет всю память о своей величине в первоначальный момент времени благодаря столкновениям, и тогда  $P_2(y_2, t_2; y_1, t_1)$  является *полностью некоррелированной*, то есть  $P_2(y_2, t_2; y_1, t_1) = P_1(y_1)P_1(y_2)$

Корреляции Орнштейна- Уленбека процесса в картинках:

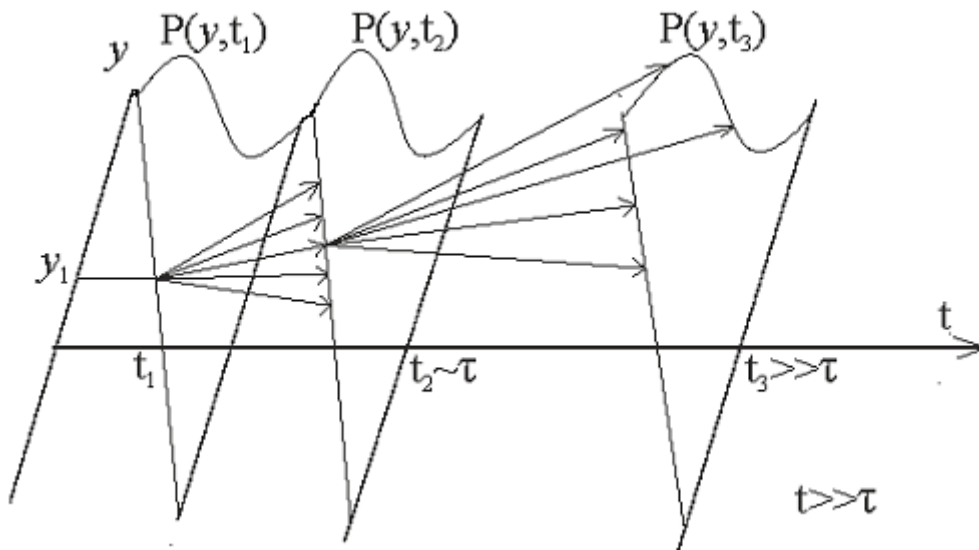


рис.11

#### 4. Основное кинетическое уравнение (управляющее уравнение.)

Разложения Крамерса- Мойала и уравнение Фоккера-Планка.

Уравнение Чепмена-Колмогорова (6) для *марковского процесса* является нелинейным и мало помогает решению проблемы определения  $P_1$  и  $P_2$ . Оно есть в сущности лишь *свойство решения*. Однако, из него можно получить *более полезное соотношение*- основное кинетическое уравнение (master equation.)

Основное кинетическое уравнение есть *интегро-дифференциальное* уравнение для *вероятности перехода*. Поэтому, чтобы вывести его, необходимо сначала рассмотреть поведение вероятности перехода на малых отрезках времени.

Сначала покажем, что из уравнения Чепмена- Колмогорова следует, что для одинаковых времен  $t_1 = t_2 = t$  из (6) следует естественный результат:

$$P(y_3, t_3|y_1, t) = \int dy_2 P(y_3, t_3|y_2, t) P(y_2, t|y_1, t) \rightarrow P(y_2, t|y_1, t) = \delta(y_2 - y_1),$$

который есть член *нулевого* порядка в разложении  $P(y', t'|y, t)$  по малой разности времен  $\Delta t = t' - t$ . С учетом этого можно записать следующее выражение для вероятности перехода при малой разности времен:

$$P(y_2, t + \Delta t|y_1, t) = \delta(y_2 - y_1)[1 - a^{(0)}(y_1, t)\Delta t] + W_t(y_2|y_1)\Delta t + O((\Delta t)^2)\dots \quad (7)$$

где  $W_t(y_2|y_1)$  интерпретируется как *вероятность перехода в единицу времени* [размерность  $W_t$  равна  $1/y \cdot \text{сек}$ ] от  $y_1$  к  $y_2$  во время  $t$ . Тогда коэффициент  $[1 - a^{(0)}(y_1, t)\Delta t]$  интерпретируется как *вероятность отсутствия перехода* за время  $\Delta t$ . Действительно, из условия нормировки  $P(y_2, t_2|y_1, t_1)$  следует

$$1 = \int dy_2 P(y_2, t + \Delta t|y_1, t) \simeq 1 - a^{(0)}(y_1, t)\Delta t + \int dy_2 W_t(y_2|y_1)\Delta t,$$

откуда в первом порядке по  $\Delta t$  имеем

$$a^{(0)}(y_1, t) = \int dy_2 W_t(y_2|y_1), \quad (8)$$

что подтверждает указанию выше интерпретацию:  $a^{(0)}(y_1, t)\Delta t$  есть полная вероятность уйти из состояния  $y_1$  в течении интервала времени  $(t, t + \Delta t)$ , и таким образом  $1 - a^{(0)}(y_1, t)\Delta t$  есть вероятность отсутствия перехода в течении этого времени.

Получим теперь основное кинетическое уравнение из уравнения Чепмена-Колмогорова. Подставляя (7) в (6) имеем

$$P(y_3, t_2 + \Delta t|y_1, t_1) = \int dy_2 \underbrace{P(y_3, t_2 + \Delta t|y_2, t_2)}_{[1 - a^{(0)}(y_3, t_2)\Delta t] + W_{t_2}(y_3|y_2)\Delta t} P(y_2, t_2|y_1, t_1) = \delta(y_3 - y_2)[1 - a^{(0)}(y_2, t_2)\Delta t] + W_{t_2}(y_3|y_2)\Delta t \simeq [1 - a^{(0)}(y_3, t_2)\Delta t]P(y_3, t_2|y_1, t_1) + \Delta t \int dy_2 W_{t_2}(y_3|y_2)P(y_2, t_2|y_1, t_1),$$

и используя уравнение (8) для  $a^{(0)}(y_3, t_2) = \int dy_2 W_{t_2}(y_2|y_3)$ , имеем

$$\frac{1}{\Delta t}[P(y_3, t_2 + \Delta t|y_1, t_1) - P(y_3, t_2|y_1, t_1)] \simeq \int dy_2 [W_{t_2}(y_3|y_2)P(y_2, t_2|y_1, t_1) -$$

$W_{t_2}(y_2|y_3)P(y_3, t_2|y_1, t_1)$ ], которое в пределе  $\Delta t \rightarrow 0$  дает (после некоторых изменений в обозначениях  $y_1, t_1 \rightarrow y_0, t_0$ ;  $y_2, t_2 \rightarrow y', t$  и  $y_3 \rightarrow y$ ) основное кинетическое уравнение ( master equation):

$$\frac{\partial}{\partial t}P(y, t|y_0, t_0) = \int dy' [W_t(y|y')P(y', t|y_0, t_0) - W_t(y'|y)P(y, t|y_0, t_0)]. \quad (9)$$

Основное кинетическое уравнение есть уравнение для вероятности перехода  $P(y, t|y_0, t_0)$ , но не для  $P_1(y_1, t)$ . Однако уравнение для  $P_1(y_1, t)$  может быть получено, используя концепцию «выделение подансамбля».

Предположим, что  $Y(t)$  есть *стационарный марковский процесс*, характеризуемый  $P_1(y)$  и  $P(y, t|y_0, t_0)$ . Определим новый, *нестационарный марковский процесс*  $Y^*(t)$  для  $t > t_0$  полагая

$$P_1^*(y_1, t_1) = P(y_1, t_1|y_0, t_0), \quad (10-a)$$

$$P^*(y_2, t_2|y_1, t_1) = P(y_2, t_2|y_1, t_1). \quad (10-b)$$

Это есть подансамбль  $Y(t)$ , характеризуемый тем, что берется *sharp value*  $y_0$  в момент  $t_0$ , так как  $P_1^*(y_1, t_0) = \delta(y_1 - y_0)$ . С более общей точки зрения, можно выделить подансамбль в котором в данный момент  $t_0$  величины  $Y^*(y_0)$  распределены согласно *заданному* распределению вероятностей  $p(y_0)$  :

$$P_1^*(y_1, t_1) = \int dy_0 P(y_1, t_1|y_0, t_0)p(y_0), \quad (11)$$

и  $P^*(y_2, t_2|y_1, t_1)$ , как в уравнении (10-b). Физически такое выделение ансамбля означает, что мы приготовили систему в определенном состоянии в момент времени  $t_0$ .

По построению, плотность вероятность  $P_1^*(y_1, t_1)$  удовлетворяет тому же уравнению, что и плотность вероятности перехода (по отношению к первой паре аргументов), то есть  $P_1^*(y_1, t_1)$  подчиняется основному кинетическому уравнению. Следовательно, подавляя несущественные индексы, можно писать

$$\frac{\partial P(y, t)}{\partial t} = \int dy' [W(y|y')P(y', t) - W(y'|y)P(y, t)]. \quad (12)$$

Если значения  $Y$  дискретны по индексу  $n$ , это уравнение сводится к

$$\frac{dP_n(t)}{dt} = \sum_{n'} [W_{nn'}P_{n'}(t) - W_{n'n}P_n(t)]. \quad (13)$$

В такой форме (13) его смысл понятен: *основное кинетическое уравнение есть уравнение баланса (прихода и ухода)* для вероятности каждого состояния. Первый член соответствует приходу благодаря переходам из  $n'$  в  $n$ , а второй член уходу из  $n$  в другие конфигурации. Отметим, что  $W_{n'n} \geq 0$  и что член с  $n = n'$  не рассматривается.

Благодаря тому, что  $W(y|y')\Delta t$  есть вероятность перехода за время короткого интервала  $\Delta t$ , она может быть определена для изучаемой системы посредством любого метода, пригодного для коротких времен, например с помощью теории зависящих от времени возмущений Дирака, приводящей к «золотому правилу». В таком случае основное кинетическое уравнение дает возможность определить эволюцию системы на *больших периодах времени за счет постулирования марковости стохастического процесса*.

Основное кинетическое уравнение может быть легко распространено на случай многокомпонентного марковского процесса  $Y_i(t), i = 1, 2, \dots, N$ , на основе того, что уравнение Чепмена - Колмогорова (6) остается справедливым, если заменить  $y$  на  $\mathbf{y} = (y_1, \dots, y_N)$ ,

Тогда с помощью тех же соображений, кажде привели к (12) мы получили многокомпонентную форму основного кинетического уравнения.

$$\frac{\partial P(\mathbf{y}, t)}{\partial t} = \int d\mathbf{y}' [W(\mathbf{y}|\mathbf{y}')P(\mathbf{y}', t) - W(\mathbf{y}'|\mathbf{y})P(\mathbf{y}, t)]. \quad (14)$$

### 5.Разложение Крамерса- Мойала и уравнение Фоккера- Планка.

Разложение Крамерса- Мойола для основного кинетического уравнения приводит это *интегро- дифференциальное уравнение* к виду *дифференциального уравнения* бесконечного порядка. С последним работать не легче, но при определенных условиях его *можно оборвать* на определенном числе членов. Если это сделано на членах после второго порядка, мы получаем уравнение в частных производных *второго* порядка для  $P(y, t)$ , то есть уравнение Фоккера-Планка. Но сначала выразим вероятность перехода  $W$  как функцию величины скачка  $r$  от одного состояния  $y'$  к другому  $y$  и начального состояния  $y'$

$$W(y|y') = W(y'|r), \quad r = y - y'. \quad (15)$$

Основное кинетическое уравнение тогда имеет вид

$$\frac{\partial P(y, t)}{\partial t} = \int dr W(y - r, r) P(y - r, t) - P(y, t) \int dr W(y, -r), \quad (16)$$

где изменение знака, связанное с заменой переменных  $y' \rightarrow r = y - y'$  поглощается в пределах интегрирования из-за симметрии интервала интегрирования от  $-\infty$  до  $\infty$ :

$$\int_{-\infty}^{\infty} dy' f(y') = - \int_{y+\infty}^{y-\infty} dr f(y - r) = - \int_{\infty}^{-\infty} dr f(y - r) = \int_{-\infty}^{\infty} dr f(y - r).$$

Более того, из-за того, что конечные пределы интегрирования содержат дополнительную зависимость от  $y$ , мы ограничимся лишь теми задачами, для которых граница несущественна.

*Предположим* теперь, что изменения  $y$  происходят в виде малых скачков, то есть, что  $W(y'; r)$  есть острая функция  $r$ , но изменяется достаточно достаточно *медленно* с изменением  $y'$ . Второе предположение будет о достаточной медленности изменения  $P(y, t)$  с  $y$ .

Разлагая в ряд Тейлора первое слагаемое в (16) имеем

$$\frac{\partial P(y, t)}{\partial t} = \int dr W(y, r) P(y, t) + \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m!} \int dr r^m \frac{\partial^m}{\partial y^m} [W(y, r) P(y, t)] - P(y, t) \int dr W(y, -r) = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m!} \frac{\partial^m}{\partial y^m} \left\{ \left[ \int dr r^m W(y, r) \right] P(y, t) \right\}.$$

Наконец, вводя *моменты переходов* (jump moments) соотношением

$$a^{(m)}(y, t) = \int dr W(y, r) r^m \quad (17)$$

получаем разложение Крамерса-Мойала основного кинетического уравнения,

$$\frac{\partial P(y, t)}{\partial t} = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m!} \frac{\partial^m}{\partial y^m} \left[ a^{(m)}(y, t) P(y, t) \right]. \quad (18)$$

Формально уравнение (18) идентично с основным кинетическим уравнением и, следовательно, решать его не проще; однако возможны случаи, когда ряд можно оборвать на подходящем числе слагаемых. Например, возможна ситуация для которой при  $m > 2$   $a^{(m)}(y, t)$  обращаются в нуль тождественно или пренебрежимо малы. Тогда мы приходим к уравнению Фоккера-Планка:

$$\frac{\partial P(y, t)}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial y} \left[ a^{(1)}(y, t) P(y, t) \right] + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial y^2} \left[ a^{(2)}(y, t) P(y, t) \right]. \quad (19)$$

Здесь *первое* слагаемое справа называется *дрейфовым* (или транспортным), а *второе-диффузионным*.

Уместно напомнить, что разложение Крамерса-Мойала, будучи полученным из основного кинетического уравнения, а также и уравнение Фоккера-Планка как его специальный случай удовлетворяются вероятностью перехода  $P(y, t|y_0, t_0)$  марковского стохастического процесса, а не только распределением  $P_1(y, t)$ . Однако они могли быть применены к  $P_1^*(y, t)$  каждого subprocessa, который может быть извлечен из марковского стохастического процесса наложением начальных условий (см.(11) и (12)).

### 6. Моменты переходов.

Вероятность перехода в единицу времени  $W(y'/y)$  входит в определение *моментов перехода* (формула (17)). Следовательно, для вычисления  $a^{(m)}(y, t)$  мы должны использовать формулу (7) связывающую  $W(y'/y)$  с вероятностью перехода для малой разности времен.

Сначала, используя уравнение (15), мы видим, что  $W(y'; r) = W(y'/y)$  с  $y = y' + r$ . Соответственно, можно написать, что

$$W(y; r) = W(y'/y).$$

Подставляя это выражение в формулу (17), для моментов перехода имеем

$$a^{(m)}(y, t) = \int dy' (y' - y)^m W(y', y). \quad (20)$$

Для вычисления моментов перехода мы введем величину

$$A^{(m)}(y; \tau, t) = \int dy' (y' - y)^m P(y', t + \tau|y, t), \quad (m \geq 1),$$

которая является средним от  $[Y(t + \tau) - Y(t)]^m$  с заданным (sharp) значением  $Y(t) = y$  (*условное среднее*). Тогда, используя вероятность перехода для малых разностей времени (формула (7)), можно получить

$$A^{(m)}(y; \tau, t) = \int dy' (y' - y)^m \left\{ \delta(y' - y)[1 - a^{(0)}(y, t)\tau] + W(y'/y)\tau + O(\tau^2) \right\} = \tau \int dy' (y' - y)^m W(y', y) + O(\tau^2) = a^{(m)}(y, t)\tau + O(\tau^2), \quad (m \geq 1.)$$

Отсюда следует, что

$$a^{(m)}(y, t) = \left. \frac{\partial}{\partial \tau} A^{(m)}(y; \tau, t) \right|_{\tau=0},$$

то есть моменты переходов равны производной от условных средних. Наконец, если записать, что

$$A^{(m)}(y; \Delta t, t) = \int dy' (y' - y)^m P(y', t + \Delta t | y, t) = \langle [Y(t + \Delta t) - Y(t)]^m \rangle \Big|_{Y(t)=y},$$

то *альтернативное* выражение для моментов перехода будет

$$a^{(m)}(y, t) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \langle [Y(t + \Delta t) - Y(t)]^m \rangle \Big|_{Y(t)=y}. \quad (21)$$

С помощью этой формулы (21) мы вычислим соответствующие моменты переходов в разделе, посвященном уравнению Ланжевена.

## Разложение Крамерса - Мойала и уравнение Фоккера - Планка.

### 7. Многомерный случай.

Полученные выше формулы могут быть распространены на многокомпонентный марковский процесс  $Y_i(t)$ ,  $i = 1, 2, \dots, N$ . Рассматривая разложение Крамерса-Мойала надо использовать многомерное тейлоровское разложение, что дает:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m!} \sum_{j_1 \dots j_m} \frac{\partial^m}{\partial y_{j_1} \dots \partial y_{j_m}} \left[ a_{j_1 \dots j_m}^m(\mathbf{y}, t) P \right]. \quad (22)$$

Соответствующее *уравнение Фоккера-Планка* тогда будет

$$\frac{\partial P}{\partial t} = - \sum_i \frac{\partial}{\partial y_i} \left[ a_i^{(1)}(\mathbf{y}, t) P \right] + \frac{1}{2} \sum_{ij} \frac{\partial^2}{\partial y_i \partial y_j} \left[ a_{ij}^{(2)}(\mathbf{y}, t) P \right]. \quad (23)$$

В этих уравнениях моменты переходов дается обобщением формул (20) и (21) предыдущего пункта 6 на многомерный случай, то есть

$$a_{j_1 \dots j_m}^{(m)}(\mathbf{y}, t) = \int d\mathbf{y}' (y'_{j_1} - y_{j_1}) \dots (y'_{j_m} - y_{j_m}) W(\mathbf{y}', \mathbf{y}). \quad (24)$$

которая может быть вычислена по обобщению формулы (21):

$$a_{j_1 \dots j_m}^{(m)}(\mathbf{y}, t) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \left\langle \prod_{\mu=1}^m \left[ Y_{j_\mu}(t + \Delta t) - Y_{j_\mu}(t) \right] \right\rangle_{Y_k(t)=y_k}, \quad (25)$$

то есть посредством вычисления производной от соответствующего условного среднего.

## 8. Примеры уравнения Фоккера-Планка.

### 8.1. Диффузионное уравнение для координаты частицы.



В анализе Эйнштейна для броуновского движения он получил диффузионное уравнения вида

$$\frac{\partial P}{\partial t} = D \frac{\partial^2 P}{\partial x^2}. \quad (26)$$

Сравнивая его с уравнением Фоккера-Планка (19) мы видим, что в этом случае  $a^{(1)}(x, t) \equiv 0$ , так как на частицу не действуют внешние силы и, следовательно, дрейфовое слагаемое равно нулю. Соответственно  $a^{(2)}(x, t) = 2D$  и не зависит от координаты и времени. Это следует из того, что свойства окружающей среды однородны (в противном случае  $D = D(x)$ ). Решением этого уравнения для  $P(x, t = 0) = \delta(x)$  было  $P(x, t) = \exp(-x^2/4Dt)/\sqrt{4\pi Dt}$ , которое соответствует процессу Винера-Леви.

Это уравнение является частным случаем *уравнения Смолуховского* для частицы с большим коэффициентом затухания  $\gamma$  (overdamped case) и в отсутствие внешних сил, действующих на частицу.

## 8.2. Диффузионное уравнение в фазовом пространстве $(x, v)$ .

Правильное диффузионное уравнение *свободной* броуновской частицы есть

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -v \frac{\partial P}{\partial x} + \gamma \left( \frac{\partial}{\partial v} v + \frac{kT}{m} \frac{\partial^2}{\partial v^2} \right) P. \quad (27)$$

Это уравнение есть уравнение Крамерса - Клейна для частицы с произвольным коэффициентом затухания  $\gamma$  в отсутствие внешнего потенциала. Из этого уравнения можно получить диффузионное уравнение (26), используя *сингулярную теорию возмущений* как ведущий член в разложении по степеням  $1/\gamma$ . Другим способом мы получим доказательство этого в *контексте уравнений Ланжевена*, соответствующих этим уравнениям Фоккера-Планка. (Мы покажем, что уравнение Ланжевена  $m\ddot{x} = -m\gamma x + \xi(t)$  ведет к уравнению (27), тогда как в случае *сильной диссипации*  $m\gamma x = \xi(t)$  ведет к уравнению (26)). Ранее было показано *без доказательства*, что процесс Орнштейна-Уленбека описывает временную эволюцию вероятности перехода *скорости броуновской частицы*. Сейчас мы докажем это, решая уравнение для

$$P_V(v, t) = \int dx P(x, v, t).$$

Уравнение для  $P_V$  получается интегрированием уравнения (27) по  $x$  с использо-

ванием того, что  $\int dx \partial_x P(x, v, t) = 0$ , так как  $P(x = \pm\infty, v, t) = 0$ ; тогда получим

$$\frac{\partial P_V}{\partial t} = \gamma \left( \frac{\partial}{\partial v} v + \frac{kT}{m} \frac{\partial^2}{\partial v^2} \right) P_V. \quad (28)$$

Мы позже покажем, что это уравнение (28) описывает также *положение передемпфированной* частицы в *гармоническом* потенциале. Итак, давайте получим решение основного уравнения

$$\tau \partial_t P = \partial_y (yP) + D \partial_y^2 P. \quad (29)$$

Будем решать (29) методом Фурье- преобразования (или вводя вместо  $P(y, t)$  характеристическую функцию  $G(k, t)$ ), то есть

$$G(k, t) = \int dy e^{iky} P(y, t); \quad P(y, t) = \frac{1}{2\pi} \int dk e^{-iky} G(k, t).$$

Тогда уравнение *второго порядка* (29) сводится к уравнению *первого* порядка для  $G(k, t)$ , то есть

$$\tau \partial_t G + k \partial_k G = -Dk^2 G, \quad (30)$$

которое мы решим *методом характеристик*. Напомним его кратко:

Если имеем уравнение вида  $P \frac{\partial f}{\partial x} + Q \frac{\partial f}{\partial y} = R$  и  $u(x, y, t) = a$  и  $v(x, y, t) = b$  есть два решения *вспомогательной системы*  $\frac{dx}{P} = \frac{dy}{Q} = \frac{df}{R}$ , то *общее решение* исходного уравнения есть произвольная функция от  $u$  и  $v$ , то есть  $h(u, v) = 0$ .

Итак, для уравнения (30) *вспомогательная система* есть

$$\frac{dt}{\tau} = \frac{dk}{k} = -\frac{dG}{Dk^2 G}.$$

Рассматривая системы  $(t, k)$  и  $(k, G)$  имеем *два интеграла*:

$$\frac{dt}{\tau} = \frac{dk}{k} \rightarrow k = a \exp(t/T) \rightarrow u = k \exp(-t/T) = a,$$

$$-Dk dk = dG/G \rightarrow -\frac{1}{2} Dk^2 = \ln G + c \rightarrow v = \exp(Dk^2/2) G = b.$$

Теперь решение  $h(u, v) = 0$  может быть разрешено для  $v$  как  $v = \phi(u)$  с еще произвольной функцией  $\phi$ , что приводит к искомому общему решению уравнения (30):

$$G = \exp(-Dk^2/2) \phi(k \exp(-t/\tau)). \quad (31)$$

Учет начальных значений  $P(y, t = 0) = \delta(y - y_0)$  приводит к  $G(k, t = 0) = \exp(iky_0)$  откуда можно найти функциональную форму функции  $\phi$ :  $\phi(k) = \exp(iky_0 + Dk^2/2)$ .

Окончательно для  $G(k, t)$  получим:

$$G(k, t) = \exp \left[ iy_0 e^{-t/\tau} k - (D/2)(1 - \exp(-2t/\tau))k^2 \right], \quad (32)$$

которая является характеристической функцией распределения Гаусса с  $\mu_1 = y_0 \exp(t/\tau)$  и  $\sigma^2 = D(1 - \exp(-2t/\tau))$ . Следовательно, распределение вероятностей, являющееся решением уравнения (29) будет

$$P(y, t|y_0, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi D(1 - \exp(-2t/\tau))}} \exp \left[ -\frac{(y - y_0 \exp(-t/\tau))^2}{2D(1 - \exp(-2t/\tau))} \right], \quad (33)$$

и которое, как уже отмечалось, есть вероятность перехода процесса Орнштейна - Уленбека.

Наконец, еще отметим, что параметрами для исходного уравнения для  $P_V$  (уравнение (28)) есть  $\mu_1 = v_0 \exp(-t/\tau)$  и  $\sigma^2 = (kT/m)(1 - \exp(-2t/\tau))$ . Тогда для  $t \gg \tau$  имеем  $P_V \sim \exp \left[ -\frac{mv^2}{2}/kT \right]$ , что является равновесной больцмановской функцией распределения для свободных частиц.

### Уравнение Ланжевена.

1. Уравнение Ланжевена для одной переменной (но с мультишумом).

Это "дифференциальное уравнение" вида

$$dy/dt = A(y, t) + B(y, t)\xi(t), \quad (1)$$

где  $\xi(t)$  есть заданный стохастический процесс. Выбор для  $\xi(t)$  такого процесса, который приводит к *марковости* процесса  $y(t)$  [далее будет использовать *одинаковые* символы для *стохастического процесса*  $Y(t)$  и его *реализации*  $y(t)$ ] состоит в выборе *белого шума* для "ланжевенского" процесса, который является *гауссовым* со статистическими свойствами

$$\xi(t) = 0, \quad (2a)$$

$$\langle \xi(t_1)\xi(t_2) \rangle = 2D\delta(t_1 - t_2). \quad (2b)$$

Так как уравнение (1) есть уравнение первого порядка для каждой реализации  $\xi(t)$ , оно определяет  $y(t)$  однозначно лишь в случае однозначного задания  $y(t_0)$ .

Дополнительно, величины флуктуирующего слагаемого в различные времена статистически независимы благодаря  $\delta$  - коррелированности  $\xi(t)$ . Следовательно, величины  $\xi(t)$  в предыдущее времена, скажем  $t < t_0$ , не могут повлиять на условные вероятности во время  $t > t_0$ . Отсюда следует *марковость* решения (1).

Коэффициенты  $A(y, t)$  и  $B(y, t)\xi(t)$  часто называют как *коэффициент сноса* (drift or transport) и *диффузионное слагаемое*, соответственно. Благодаря наличию  $\xi(t)$ , уравнение (1) является *стохастическим дифференциальным уравнением*, то есть дифференциальным уравнением, включающим в себя случайные слагаемые с заданными стохастическими свойствами. Решить уравнение Ланжевена означает определить статистические свойства процесса  $y(t)$ .

Наконец, моменты  $\xi(t)$  более высокого порядка, чем (2b) получаются из (2) с учетом соотношений, подобных таковым для многомерного гауссова распределения, то есть все нечетные моменты  $\xi(t)$  исчезают, и

$$\begin{aligned} \langle \xi_1(t_1)\xi_2(t_2)\xi_3(t_3)\xi_4(t_4) \rangle &= (2D)^2[\langle \xi(t_1)\xi(t_2) \rangle \langle \xi(t_3)\xi(t_4) \rangle + \langle \xi(t_1)\xi(t_3) \rangle \langle \xi(t_2)\xi(t_4) \rangle \\ &\quad + \langle \xi(t_1)\xi(t_4) \rangle \langle \xi(t_2)\xi(t_3) \rangle]. \end{aligned} \quad (3)$$

Что бы проверить этот результат, ниже мы докажем более общее утверждение, известное как *теорема Новикова - Фуруцу*.

### Теорема Новикова и формула Вика.

**1. Теорема Новикова**, утверждает, что для многомерного гауссова распределения с *нулевым средним*, для которого  $\mathbf{X} = \{X_1, \dots, X_n\}$  и

$$P(\mathbf{x}) = \sqrt{\frac{\text{Det}A}{(2\pi)^n}} \exp\left(-\frac{1}{2}\mathbf{x} \cdot A \cdot \mathbf{x}\right), \quad (4)$$

средние типа  $\langle x_i f(\mathbf{x}) \rangle$  вычисляются по формуле

$$\langle x_i f(\mathbf{x}) \rangle = \sum_m \langle x_i x_m \rangle \left\langle \frac{\partial f}{\partial x_m} \right\rangle. \quad (5)$$

Воспользуемся этим результатом для вычисления с  $f(\mathbf{x}) = x_j x_k x_l$  и учетом, что  $\partial x_i / \partial x_m = \delta_{im}$ . Тогда

$$\langle x_i x_j x_k x_l \rangle = \sum_m \langle x_i x_m \rangle \langle \delta_{im} x_k x_l + x_j \delta_{km} x_l + x_j x_k \delta_{lm} \rangle = \langle x_i x_j \rangle \langle x_k x_l \rangle + \langle x_i x_k \rangle \langle x_j x_l \rangle + \langle x_i x_l \rangle \langle x_j x_k \rangle$$

формула Вика. (6)

## 2. Доказательство теоремы Новикова.

Продемонстрируем её тремя простыми шагами:

(1). Если определить  $E(\mathbf{x}) = \sum_{ij} 1/2 x_i A_{ij} x_j = 1/2 \mathbf{x} A \mathbf{x}$  (см. формулу (4))

то  $\partial E / \partial x_m = 1/2 \sum_{ij} (\delta_{im} A_{ij} x_j + x_i \delta_{im} A_{ij}) = 1/2 \sum_j A_{mj} x_j + 1/2 \sum_i x_i A_{im}$ .

Но так как  $A_{ij} = A_{ji}$ , то  $\partial E / \partial x_m = \sum_j A_{mj} x_j$  откуда  $x_i = \sum_m (A^{-1})_{im} \partial E / \partial x_m$ .

(2). Вычислим среднее  $\langle x_i f(\mathbf{x}) \rangle$  с учетом того, что  $P(\mathbf{x}) = C e^{-E}$ , где  $C = \sqrt{\text{Det} A / (2\pi)^n}$ .

Тогда

$$\langle x_i f(\mathbf{x}) \rangle = C \int d\mathbf{x} x_i f(\mathbf{x}) e^{-E} = C \int \sum_m (A^{-1})_{im} d\mathbf{x} f(\mathbf{x}) \underbrace{\frac{\partial E}{\partial x_m} e^{-E}}_{-\partial / \partial x_m e^{-E}} = \sum_{m=1}^n (A^{-1})_{im} C \int d\mathbf{x} \frac{\partial f}{\partial x_m} e^{-E} =$$

$$\sum_m (A^{-1})_{im} \langle \frac{\partial f}{\partial x_m} \rangle = \langle x_i f(\mathbf{x}) \rangle.$$

(3). Наконец, докажем, что  $\langle X_i X_j \rangle = (A^{-1})_{ij}$  (ранее без доказательства было показано, что  $\langle \langle X_i X_j \rangle \rangle = (A^{-1})_{ij}$ ). Действительно, если положить  $f = x_j$  и тогда  $\partial x_j / \partial x_m = \delta_{jm}$ , то  $\langle x_i x_j \rangle = \sum_m (A^{-1})_{im} \delta_{jm} = (A^{-1})_{ij}$ .

## Вывод уравнения Фоккера-Планка из уравнения Ланжевена.

1. Напомним уравнение Ланжевена:

$$dy/dt = A(y, t) + B(y, t)\xi(t), \quad \text{где } \langle \xi(t) \rangle = 0 \text{ и } \langle \xi(t_1)\xi(t_2) \rangle = 2DX\delta(t_1 - t_2).$$

2. Так как решение уравнения Ланжевена есть марковский процесс, который подчиняется master eqn. (управляющему уравнению), то последнее может быть записано в форме Крамерса-Мойала. Итак, разложение Крамерса-Мойала управляющего уравнения есть

$$\frac{\partial P(y, t)}{\partial t} = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m!} \frac{\partial^m}{\partial y^m} \left[ a^{(m)}(y, t) P(y, t) \right], \quad (7)$$

где,  $y = y(t)$ , а

$$a^{(m)}(y, t) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \left\langle \left[ Y(t + \Delta t) - Y(t) \right]^m \right\rangle \Big|_{Y(t)=y}, \quad (8)$$

3. Вначале превратим дифференциальное уравнение Ланжевена в интегральное с учетом того, что

$$\int_t^{t+\Delta t} \frac{dy}{dt'} dt' = y(t + \Delta t) - y(t) = \int_t^{t+\Delta t} dt_1 A \left[ y(t_1), t_1 \right] + \int_t^{t+\Delta t} dt_1 B \left[ y(t_1), t_1 \right] \xi(t_1), \quad (9)$$

где  $y = y(t)$ . Разложим  $A$  и  $B$  в ряд по  $[y(t_1) - y]$ :

$$A[y(t_1), t_1] = A(y, t_1) + A'(y, t_1)[y(t_1) - y] + \dots \quad \text{где} \quad A'(y, t) = \left. \frac{\partial A}{\partial y} \right|_y$$

$$B[y(t_1), t_1] = B(y, t_1) + B'(y, t_1)[y(t_1) - y] + \dots \quad \text{где} \quad B'(y, t) = \left. \frac{\partial B}{\partial y} \right|_y$$

4. Тогда  $y(t+\Delta t) - y = \int_t^{t+\Delta t} dt_1 A(y, t_1) + \int_t^{t+\Delta t} dt_1 A'(y, t_1)[y(t_1) - y] + \int_t^{t+\Delta t} dt_1 B(y, t_1)\xi(t_1) + \int_t^{t+\Delta t} dt_1 B'(y, t_1)\xi(t_1)[y(t_1) - y] + \dots$

(10)

5. Для  $y(t_1) - y$  в интегралах уравнения (10) сделаем его итерацию, и тогда

$$y(t + \Delta t) - y = \int_t^{t+\Delta t} dt_1 A(y, t_1) + \int_t^{t+\Delta t} dt_1 A'(y, t_1) \int_t^{t_1} dt_2 A(y, t_2) +$$

$$+ \int_t^{t+\Delta t} dt_1 A'(y, t_1) \int_t^{t_1} dt_2 B(y, t_2)\xi(t_2) + \dots + \int_t^{t+\Delta t} dt_1 B(y, t_1)\xi(t_1) +$$

$$+ \int_t^{t+\Delta t} dt_1 B'(y, t_1)\xi(t_1) \int_t^{t_1} dt_2 A(y, t_2) + \int_t^{t+\Delta t} dt_1 B'(y, t_1)\xi(t_1) \int_t^{t_1} dt_2 B(y, t_2)\xi(t_2) + \dots$$

(11)

6. Усредним (11) для фиксированного  $y = y(t)$ . Тогда

$$\langle y(t + \Delta t) - y \rangle = \int_t^{t+\Delta t} dt_1 A(y, t_1) + \int_t^{t+\Delta t} A'(y, t_1) dt_1 \int_t^{t_1} dt_2 A(y, t_2) +$$

$$+ 2D \int_t^{t+\Delta t} dt_1 B'(y, t_1) \int_t^{t_1} dt_2 B(y, t_2) \delta(t_1 - t_2) \dots$$

7. Учтем теперь, что  $\int_t^{t_1} dt_2 \delta(t_1 - t_2) f(t_2) = (1/2)f(t_1)$ .

Тогда для  $a^{(1)}(y, t)$  имеем

$$a^{(1)}(y, t) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} 1/\Delta t \left\langle y(t + \Delta t) - y \right\rangle \Big|_{y(t)=y} = A(y, t) + DB(y, t) \partial B(y, t) / \partial y, \quad (12)$$

8. Остальные интегралы, не написанные в этой формуле (12), не дают вклада в пределе  $\Delta t \rightarrow 0$ . Члены *высших* порядков могут быть двух типов:

а) средние от  $\int$  с  $\xi$  (четного числа). Они дают вклады  $\sim (\Delta t)^2$  в силу формулы (3);

б) средние от  $\int$ , не содержащих  $\xi$ , вклады от них  $\sim (\Delta t)^n$ , где  $n$ - число "простых" интегралов. Оба типа вкладов исчезают при делении на  $\Delta t$  и пределе  $\Delta t \rightarrow 0$ .

9. Используя те же самые аргументы для нахождения ряда исчезающих интегралов можно вычислить второй коэффициент в разложении Крамерса - Мойала:

$$a^{(2)}(y, t) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} (1/\Delta t) \left\langle \left[ y(t + \Delta t) - y(t) \right]^2 \right\rangle \Big|_{y(t)=y}, \text{ что даёт}$$

$$a^{(2)}(y, t) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} (1/\Delta t) \int_t^{t+\Delta t} dt_1 B(y, t_1) \int_t^{t+\Delta t} dt_2 B(y, t_2) 2D\delta(t_1 - t_2) = 2DB^2(y, t). \quad (13)$$

Остальные коэффициенты  $a^{(m)} = 0$  для  $m \geq 3$ . Собирая все результаты для  $a^{(m)}$ , имеем:

$$\begin{cases} a^{(1)}(y, t) = A(y, t) + DB(y, t)(\partial B(y)/\partial y), \\ a^{(2)}(y, t) = 2DB^2(y, t), \\ a^{(m)}(y, t) = 0 \quad \text{для } m \geq 3. \end{cases} \quad (13a)$$

10. Теперь из уравнения (7) следует уравнение Фоккера-Планка:

$$\partial P/\partial t = -(\partial/\partial y) \left\{ \left[ A(y, t) + DB(y, t)(\partial B(y, t)/\partial y) \right] P \right\} + D(\partial^2/\partial y^2) \left[ B^2(y, t)P \right]. \quad (14)$$

Отметим, что  $a^{(1)}(y, t)$  содержит, кроме детерминированного сноса  $A(y, t)$ , еще и слагаемое  $DB(y, t)B'(y, t)$ , которое называют *noise-induced drift*.

### 11. Многомерный случай.

Стохастическое дифференциальное уравнение для многомерного случая, то есть стохастическое уравнение Ланжевена для многомерного стохастического процесса  $\mathbf{y} = (y_1, \dots, y_n)$  имеет вид

$$\partial y_i/\partial t = A_i(\mathbf{y}, t) + \sum_k B_{ik}(\mathbf{y}, t)\xi_k(t), \quad (15)$$

где  $\xi_k(t)$  есть  $N_L$  процессов "белого шума".  $N_L$  не обязательно равно  $N$ , то есть может быть даже  $N_L = 1$ , то есть случай *скалярного* белого шума.

Статистические свойства  $\xi_k(t)$  теперь будут

$$\langle \xi_k(t) \rangle = 0, \quad (16 \text{ a})$$

$$\langle \xi_k(t_1)\xi_l(t_2) \rangle = 2D\delta_{kl}\delta(t_1 - t_2), \quad (16 \text{ b})$$

Моменты более высокого порядка получаются из (16 а,б) с использованием соотношений, подобным ранее для однородного гауссового случая.

Коэффициенты вида (13 а) в разложении Крамерса-Мойала вида (7) могут быть подсчитаны, используя те же аргументы, использованные ранее при оценке некоторых "исчезающих" интегралов (смотреть пункт 8). В результате обобщение соотношений (13 а) на многомерный случай имеют вид:

$$\begin{cases} a_i^{(1)}(\mathbf{y}, t) = A_i(\mathbf{y}, t) + D \sum_{j,k} B_{jk}(\mathbf{y}, t) (\partial B_{ik}(\mathbf{y}, t) / \partial y_j), \\ a_{ij}^{(2)}(\mathbf{y}, t) = 2D \sum_k B_{ik}(\mathbf{y}, t) B_{jk}(\mathbf{y}, t), \\ a_{j_1}^{(m)}, \dots, j_m(\mathbf{y}, t) = 0 \quad \text{для } m \geq 3. \end{cases} \quad (17)$$

Тогда из уравнений (15) для марковского стохастического процесса следует уравнение Фоккера-Планка в многомерном случае вида

$$\begin{aligned} \partial P / \partial t = - \sum_i (\partial / \partial y_i) \left\{ \left[ A_i(\mathbf{y}, t) + D \sum_{j,k} B_{jk}(\mathbf{y}, t) (\partial B_{ik}(\mathbf{y}, t) / \partial y_j) \right] P \right\} + \\ + D \sum_{ij} (\partial^2 / \partial y_i \partial y_j) \left\{ \left[ \sum_k B_{ik}(\mathbf{y}, t) B_{jk}(\mathbf{y}, t) \right] P \right\}, \end{aligned} \quad (18)$$

которое полностью определено коэффициентами уравнения Ланжевена (15).

## 12. Примеры уравнений Ланжевена и следующих из них уравнений Фоккера-Планка.

### 12.1. Диффузия в фазовом пространстве: уравнение Клейна-Крамерса.

Здесь мы рассмотрим обобщенное уравнение Ланжевена с включением в него внешнего потенциала  $U(x, t)$  (например, силы тяготения в броуновской задаче)

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = -m\gamma \frac{dx}{dt} - \frac{\partial U}{\partial x} + m\xi(t). \quad (19)$$

Это просто обычное уравнение Ньютона, дополненное *стохастической силой*  $m\xi(t)$ . Разделив (19) на  $m$ , вводя  $V = U$  и обозначая  $V' \equiv \partial V / \partial x$ , представим (19) в виде пары дифференциальных уравнений первого порядка

$$\frac{dx}{dt} = v, \quad (20)$$

$$\frac{dv}{dt} = -(\gamma v + V') + \xi(t). \quad (21)$$

Тогда, сравнив эти уравнения с многомерными уравнениями ланжевена (15), мы примем  $\xi_x(t) = 0$  и  $\xi_v(t) = \xi(t)$ , то есть

$$A_x = v \quad B_{xx} = 0 \quad B_{xv} = 0,$$



$$A_v = -(\gamma v + V') \quad B_{vx} = 0 \quad B_{vv} = 1.$$

Подставляя эти результаты в обобщенное уравнение Фоккера-Планка (18) с учетом  $\partial_j B_{ik} = 0$  имеем

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \left[ -\frac{\partial}{\partial x} v - \frac{\partial}{\partial v} [-(\gamma v + V')] + D \frac{\partial^2}{\partial v^2} \right] P.$$

Переписывая это уравнение с учетом  $D/\gamma = T/m$ , получаем известное уравнение

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -v \frac{\partial P}{\partial x} + V' \frac{\partial P}{\partial v} + \gamma \left( \frac{\partial}{\partial v} v + \frac{T}{m} \frac{\partial^2}{\partial v^2} \right) P, \quad (21)$$

где  $T$  - температура в энергетических единицах. Соотношение  $D/\gamma = T/m$  следует из использования распределения Больцмана  $P_0 \sim \exp \left[ -(mv^2/2 + mV) / T \right]$  и нахождения условий, когда оно будет стационарным распределением.

Это эквивалентно учету Ланжевеном теоремы о равнораспределении для того, чтобы получить  $\langle mv^2 \rangle = T$ . Отметим еще, что в отсутствие внешнего потенциала, уравнение Клейна-Краммерса становится уравнением для диффузии броуновских частиц (см. п.8.1) с решением (для распределения  $P_V(v, t) = \int dx P(x, v, t)$ ), следующим из процесса Орнштейна-Уленбека.

### 12.2. Уравнение Смолуховского- перенормированная частица.

Рассмотрим уравнение Ньютона-Ланжевена (19) в пренебрежении инерционным слагаемым. Тогда

$$\frac{dx}{dt} = -V'/\gamma + \xi(t)/\gamma, \quad (22)$$

Сравнивая (22) с уравнением (1) мы получим  $A = -V'/\gamma$  и  $B = 1/\gamma$ . Вставляя эти результаты в уравнение Фоккера-Планка (14) (и снова считая  $D/\gamma = T/m$ ) получаем уравнение Смолуховского:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \left( \frac{1}{\gamma} \frac{\partial}{\partial x} V' + \frac{T}{m\gamma} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) P, \quad (23)$$

Соотношение  $D/\gamma = T/m$  снова получается путем рассмотрения "граничного" больцмановского распределения  $P_0 \sim \exp \left[ -mV(x)/T \right]$  и нахождения условий, когда оно будет стационарным решением.

В отсутствие потенциала уравнение Смолуховского приводит к уравнению свободной диффузии (8.27) или Эйнштейна с решением, получаемых для процесса Винера-Леви. Отметим также, что для гармонического потенциала  $V(x) = \omega_0^2 x^2 / 2$

уравнение (23) эквивалентно уравнению (8.30) с параметрами  $\tau = \gamma/\omega_0^2$ ,  $D = T/m\omega_0^2$ , решением которого является процесс Орнштейна-Уленбека (8.34). Тогда можно сразу написать для *передемпфированного гармонического осциллятора*

$$P(x, t) = \sqrt{\frac{m\omega_0^2}{2\pi T(1 - \exp(-2t/\tau))}} \exp\left[-\frac{m\omega_0^2(x - x_0 \exp(-t/\tau))^2}{2T(1 - \exp(-2t/\tau))}\right], \quad \tau = \gamma/\omega_0^2, \quad (24)$$

Тогда в пределе больших времен ( $t \gg \tau$ ) мы получим, что

$$P_0 \sim \exp\left[-(m\omega_0^2 x^2/2T)\right],$$

которое является *равновесным* больцмановским распределением для гармонического осциллятора. Уравнение (24), кроме этого, дает нам *описание релаксации к равновесному* распределению.

**Выкладки для домашних заданий.**

1) Вычислить  $I = \int \delta\left(\frac{mv^2}{2} - E\right) \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2} \exp(mv^2/2(kT)) dv_x dv_y dv_z$ . Перейдем к сферическим координатам  $dv_x dv_y dv_z \rightarrow v^2 dv d\phi \sin\theta d\theta \rightarrow 4\pi v^2 dv$ , так как  $\int dO = 2\pi \int_0^\pi \sin\theta d\theta = 2\pi(-) \int_1^{-1} d(\cos\theta) = 4\pi$

кроме того

$$v^2 dv = \frac{v}{2} dv^2 = \frac{\sqrt{v^2}}{2} \left(\frac{2}{m}\right) d\left(\frac{mv^2}{2}\right) = \frac{1}{m} \sqrt{\frac{mv^2}{2}} \frac{2}{m} d\left(\frac{mv^2}{2}\right) = \frac{\sqrt{2}}{m^{3/2}} \sqrt{\frac{mv^2}{2}} d\left(\frac{mv^2}{2}\right).$$

$$I = \int \delta\left(\frac{mv^2}{2} - E\right) \frac{m^{3/2}}{(2\pi kT)^{3/2}} \frac{4\pi\sqrt{2}}{m^{3/2}} \exp(-mv^2/2(kT)) \sqrt{\frac{mv^2}{2}} d\left(\frac{mv^2}{2}\right) =$$

$$= \frac{4\pi\sqrt{2}}{2\pi\sqrt{2\pi}(kT)^{3/2}} \exp(-E/(kT)) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} (kT)^{-3/2} \sqrt{E} \exp(-E/(kT)).$$

2) Вычислить  $I_2 = \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\left[ikx - \frac{(x-\mu_1)^2}{2\sigma^2}\right]$  сдвигка  $x' = x - \mu_1$ ;  $dx' = dx$ .

Тогда  $I_2 = \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\left[ik(x + \mu_1) - \frac{x^2}{2\sigma^2}\right]$ : но  $ikx - x^2/2\sigma^2 = \frac{i2\sigma^2 kx - x^2}{2\sigma^2} = -\frac{(x - ik\sigma^2)^2 + k^2\sigma^4}{2\sigma^2}$ ,

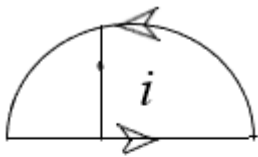
$$I_2 = \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\left[ik\mu_1 - \frac{(x - ik\sigma^2)^2}{2\sigma^2} - \frac{k^2\sigma^4}{2\sigma^2}\right] = \exp\left[ik\mu_1 - \frac{k^2\sigma^2}{2}\right] \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{(x - ik\sigma^2)^2/2\sigma^2} =$$

$$\sqrt{2\pi}\sigma e^{ik\mu_1 - k^2\sigma^2/2},$$

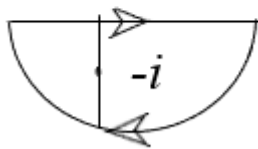
так как  $\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\alpha(x-b)^2} = \sqrt{\pi/\alpha}$ ;  $\alpha = 1/\sigma^2$ ; так как  $P_X(x) \sim 1/\sqrt{2\pi\sigma^2}$ , то  $G_X(k) = \exp[ik\mu_1 - \sigma^2 k^2/2]$ .

3) Вычислить

$$I_3 = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx e^{iax}}{1+x^2} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx e^{iax}}{(x-i)(x+i)}$$



3.1.  $a > 0$  Тогда  $I_3 = 2\pi i \text{Res}_{x=i} \left(\frac{e^{iax}}{x+i}\right) = \frac{2\pi i}{2i} e^{-a} = \pi e^{-a} \quad (a > 0)$ ;



3.2.  $a < 0$  Тогда  $I_3 = -2\pi i \text{Res}_{x=-i} \left(\frac{e^{iax}}{x-i}\right) = -\frac{2\pi i}{-2i} e^a = \pi e^a \quad (a < 0)$ .

рис. 12

Итак  $I_3 = \pi e^{-|a|}$

Формула *полной вероятности* и формула *Байеса* (Пугачев, с.35-37).

1. В некоторых случаях *вероятность* интересующего нас *события*  $A$  непосредственно вычислить *трудно*, но зато *легко вычисляются* условные вероятности появления события  $A$  относительно некоторых *несовместных* событий  $E_1, \dots, E_n$ , образующих *полную* группу. В этом случае  $\sum_{i=1}^n E_i$  представляет *достоверное событие*, то есть  $\sum_{i=1}^n E_i = 1$  (смотреть формулу 1.3.3.).

Но если с данным опытом связано некоторое *достоверное* событие  $E$ , то любое событие  $A$  может появиться только совместно с этим достоверным событием  $E$  то есть  $A = AE$  (конец стр.34). Тогда

$$P(A) = P(AE) = P\left(A \sum_{i=1}^n E_i\right) = P\left(\sum_{i=1}^n AE_i\right).$$

Тогда, применяя *принцип сложения вероятностей*  $\{P(A_1 + A_2 + \dots) = P(A_1 + A_2) + \dots\}$  (формула 1.3.2.),

Получаем

$$P(A) = \sum_{i=1}^n P(AE_i).$$

Применяя теперь *принцип умножения вероятностей*  $\{P(AB) = P(A)P(B|A) = P(B)P(A|B)\}$  (формула 1.3.7.). имеем

$$P(A) = \sum_{i=1}^n P(E_i)P(A|E_i) \quad (1.3.10.) \text{ формула полной вероятности.}$$

2. *Формула Байеса (принцип обратной вероятности)*.

*При тех же условиях* часто возникает *другая зада*: в результате произведенного опыта *появилось событие*  $A$  и на основании этого требуется высказать суждение о том, какое из *несовместных* событий  $E_1, \dots, E_n$ , образующих полную группу, имеет место: также *найти вероятности* событий  $E_1, \dots, E_n$ , *зная лишь*, что в результате опыта *произошло событие*  $A$ .

Иначе: зная  $P(A|E_k)$ , найти  $P(E_k|A)$ , то есть *обратную вероятность*.

Это легко сделать, если учесть, что

$$P(AE_k) = P(A)P(E_k|A) = P(E_k)P(A|E_k).$$

Откуда

$$P(E_k|A) = \frac{P(E_k)P(A|E_k)}{P(A)} = \frac{P(E_k)P(A|E_k)}{\sum_{i=1}^n P(E_i)P(A|E_i)} \quad (1.3.11.) \text{ формула Байеса.}$$

Оценка вероятности гипотез по формуле Байеса.

Пусть событие  $A$  может наступить *только* при появлении *одного* из *попарно несовместимых* событий  $E_1, \dots, E_n$ . Поскольку заранее (до опыта) неизвестно, какое из этих событий наступит, их называют *гипотезами*.

Предполагаются известными вероятности гипотез  $P(E_k)$  и условные вероятности  $P(A|E_k)$  появления события  $A$  при каждой из гипотез. При этих условиях безусловная вероятность события  $A$  дается формулой (1.3.10.). Допустим, что произведено испытание, в результате которого появилось событие  $A$ . Формула Байеса позволяет оценить вероятности гипотез  $P(E_k|A)$  после того, как стал известен результат испытания, в итоге которого появилось событие  $A$ .  $P(E_k)$  - *априорные* вероятности гипотез, а  $P(E_k|A)$  - *апостериорные* вероятности гипотез.

3. Простейший пример (Пугачев, пример 1.3.7.)

а) Вероятность того, что в принимаемом радиосигнале присутствует полезный сигнал, равна  $p$ . Вероятность не заметить полезный сигнал, когда он присутствует в принимаемом сигнале, равна  $\alpha$ , а вероятность ошибочно обнаружить полезный сигнал, когда принимается один шум, есть  $\beta$ .

б) Найти вероятность ошибочного решения задачи обнаружения полезного сигнала и вероятность правильного решения.

с) В данном случае событие  $A$  является *ошибочное решение*, событие  $E_1$  - *присутствие полезного сигнала* в принимаемом радиосигнале, а событие  $E_2$  - *отсутствие полезного сигнала* (то есть прием одного шума).

По условию :  $p(E_1) = p$ ,  $P(A|E_1) = \alpha$ ,  $P(A|E_2) = \beta$ .

Кроме того :  $P(E_2) = 1 - p$  так как,  $\sum_i P(E_i) = 1$ .

д) Решение: применяя формулу полной вероятности (1.3.10), получим

$$\begin{cases} P_{\text{ошиб}} = P(A) = P(E_1)P(A|E_1) + P(E_2)P(A|E_2) = p\alpha + (1 - p)\beta, \\ P_{\text{прав}} = P(\bar{A}) = 1 - P(A) = 1 - p\alpha - (1 - p)\beta. \end{cases}$$

Для этой же задачи предположим, что принятый радиосигнал обработан приемником, и обработанный сигнал превзошел пороговый уровень, вследствие чего система обнаружения приняла решение, что полезный сигнал есть.

Требуется найти вероятность того, что действительно присутствует полезный сигнал, и вероятность того, что он отсутствует.

Здесь событие  $A$  является факт, что обратный сигнал превзошел пороговый уровень.

По условию:  $P(A|E_1) = 1 - \alpha$  - вероятность принятия решения, что полезный сигнал есть, в случае его присутствия в принимаемом сигнале.

$P(A|E_2) = \beta$  - вероятность принятия решения, что полезный сигнал есть, в случае его отсутствия ( то есть приема лишь шума).

Решение: пользуясь формулой Байеса (1.3.11), получим:

$$P(E_1|A) = \frac{P(E_1)P(A|E_1)}{P(A)} = \frac{p(1 - \alpha)}{p(1 - \alpha) + (1 - p)\beta} = \frac{1}{1 + [(1 - p)\beta/p(1 - \alpha)]},$$

$$P(E_2|A) = \frac{P(E_2)P(A|E_2)}{P(A)} = \frac{(1 - p)\beta}{p(1 - \alpha) + (1 - p)\beta} = \frac{1}{1 + [(1 - \alpha)p/(1 - p)\beta]},$$

так как  $P(A) = P(E_1)P(A|E_1) + P(E_2)P(A|E_2) = p(1 - \alpha) + (1 - p)\beta$

если  $Z \equiv ((1 - p)\beta)/(p(1 - \alpha))$ , то  $P(E_1|A) = 1/(1 + z)$ ;  $P(E_2|A) = 1/(1 + 1/z) = z/(1 + z)$ .

Условные вероятности. (§ 3 по Ягломам)

1) Для их введения наиболее просто работать со схемой  $m$  черных и  $n - m$  белых шаров в урне. Пусть  $A$  событие, состоящее в извлечении черного шара из урны,  $B$  - событие, состоящее также в извлечении черного шара из урны. Тогда  $\bar{A}$  - извлечение белого шара.

Если черный шар возвращается в урну перед следующей выемкой, то  $P(B) = P(A)$ , так как  $B = A$ .

2. Но если вынутый шар не возвращается, то  $P(B) \neq P(A)$ .

3. Ранее два события  $A$  и  $B$  мы называли независимым, если результат опыта с которым связано появления события  $A$ , не влияет на условия опыта, с которым связано  $B$ . В случае 1.  $A$  и  $B$  независимы и  $P(B) = P(A)$ .

В случае 2  $A$  и  $B$  зависимы и  $P(B) \neq P(A)$ .

4. Вероятность, которую имеет событие  $B$  в том случае, когда событие  $A$  имело место, называется условной вероятностью  $P(B|A)$ .

Она легко вычисляется в данной схеме:

а) Если  $A$  - вытаскивание черного шара, то  $P(B|A) = (m - 1)/(n - 1) < m/n$ ,

б) Если  $A = \bar{A}$ , то есть вытащили белый шар, то  $P(B|\bar{A}) = m/(n - 1) > m/n$ .

5. То есть *условная вероятность* может быть как меньше, так и больше *безусловной* вероятности. Так,  $P(B) = m/n$  и  $P(B|A) = (m-1)/(n-1) < P(B) = m/n$ , а  $P(B|\bar{A}) = m/(n-1) > P(B) = m/n$ .

Если же события  $A$  и  $B$  *независимы*, то  $P(B|A) = P(B)$ .

Последнее можно считать *определением* независимости событий  $A$  и  $B$ .

6. *Условные вероятности* можно *вычислять* так же, как *безусловные* (см. 1).

Используя подход с  $M$  и  $N$  (стр.31), можно показать, что

$$P(AB) = P(A)P(B|A),$$

то есть получить *общее* правило для определения вероятности *произведения*  $AB$  двух событий. Тогда в силу  $P(AB) = P(BA)$  имеем

$$P(BA) = P(B)P(A|B),$$

и окончательно  $P(B)P(A|B) = P(A)P(B|A)$  или

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

откуда следует, что зная  $P(A)$ ,  $P(B)$  и  $P(B|A)$ , можно найти  $P(A|B)$ .