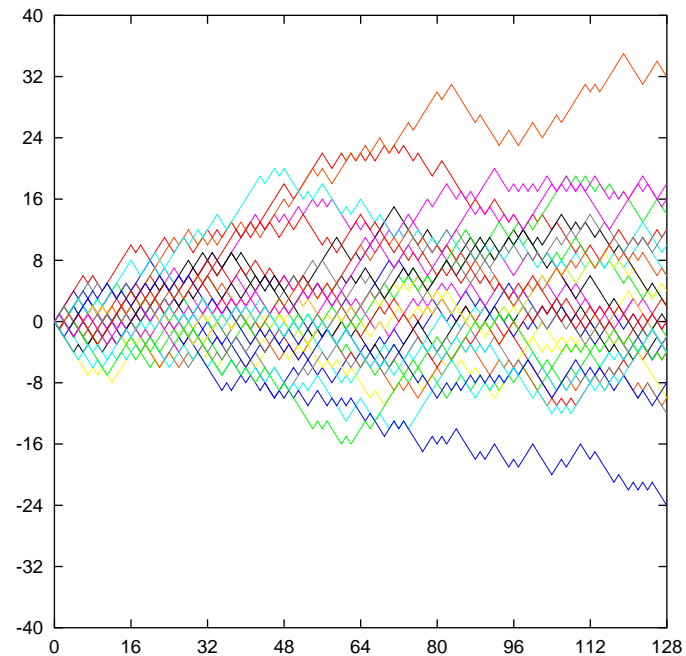
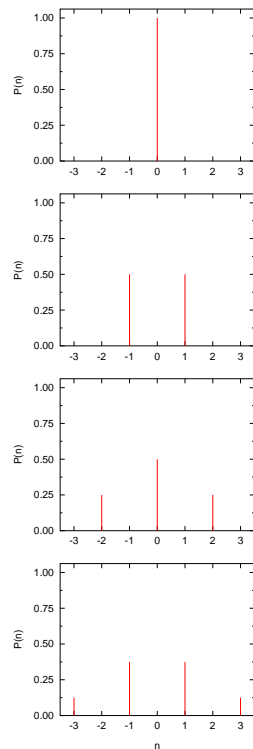


# Błądzenie przypadkowe i dyfuzja

P. F. Góra

29 listopada — 6 grudnia 2006

Błądzenie przypadkowe w jednym wymiarze — cząstka w kolejnych chwilach wykonuje krok w lewo lub w prawo z jednakowym prawdopodobieństwem



## Procesy Markowa

Cząstka (układ) może znajdować się w jednym z  $n$  ( $1 \leq n \leq \infty$ ) stanów. Układ może przejść ze stanu  $j$  w chwili  $t_1$  do stanu  $k$  w chwili  $t_2$  z prawdopodobieństwem  $P_{jk}(t_1, t_2)$ . Zakładamy, że prawdopodobieństwo to nie zależy od tego, gdzie układ znajdował się *zanim* znalazł się w  $j$  w chwili  $t_1$  — prawdopodobieństwa  $P_{jk}(t_1, t_2)$  oraz  $P_{ls}(t_2, t_3)$  ( $t_1 < t_2 < t_3$ ) odnoszą się do zdarzeń wzajemnie niezależnych.

Jakie jest prawdopodobieństwo przejścia ze stanu  $j$  w chwili  $t_1$  do stanu  $s$  w chwili  $t_3$ ? Należy wysumować po wszystkich możliwych stanach pośrednich:

$$P_{js}(t_1, t_3) = \sum_r P_{jr}(t_1, t_2) P_{rs}(t_2, t_3), \quad t_1 < t_2 < t_3 \quad (1)$$

Równanie to nosi nazwę *równania Chapmana-Kołmogorowa*.

## Rozwiązanie naszego problemu

Równanie Chapmana-Kołmogorowa ma postać\*

$$P_{kj}(n) = \frac{1}{2}P_{k,j+1}(n-1) + \frac{1}{2}P_{k,j-1}(n-1). \quad (2)$$

Zastosujmy dyskretną transformację Fouriera:

$$F_k^n(\phi) = \sum_{j=-\infty}^{\infty} e^{ij\phi} P_{kj}(n). \quad (3)$$

Z równania (2) dostaję

$$F_k^n(\phi) = \frac{1}{2}e^{-i\phi} F_k^{n-1}(\phi) + \frac{1}{2}e^{i\phi} F_k^{n-1}(\phi) = F_k^{n-1}(\phi) \cos \phi. \quad (4)$$

\*Omawiany problem jest **jednorodny**:  $P_{kj}(t_1, t_2) = P_{kj}(|t_1 - t_2|)$ .

Stosując to równanie  $n$ -krotnie dostanę

$$F_k^n(\phi) = e^{ik\phi} \cos^n \phi \quad (5)$$

Obliczam odwrotną transformatę Fouriera:

$$\begin{aligned} P_{jk}(n) &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{-ij\phi} F_k^n(\phi) d\phi = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{-ij\phi} e^{ik\phi} \cos^n \phi d\phi \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{-ij\phi + ik\phi + in\phi} (1 + e^{-2i\phi})^n \frac{d\phi}{2^n} \\ &= \frac{1}{2^n} \sum_{s=0}^n \binom{n}{s} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{i(-j+k+n-2s)\phi} d\phi = \frac{1}{2^n} \sum_{s=0}^n \binom{n}{s} \delta_{s, \frac{k+n-j}{2}}. \end{aligned} \quad (6)$$

Ostatecznie

$$P_{kj}(n) = \begin{cases} \frac{1}{2^n} \binom{n}{\frac{k+n-j}{2}} & k + n - j \text{ parzyste} \\ 0 & k + n - j \text{ nieparzyste} \\ 0 & |j - k| > n. \end{cases} \quad (7)$$

Jest to prawdopodobieństwo tego, że cząstka startując z  $k$  po  $n$  krokach znajdzie się w punkcie  $j$ . Dla uproszczenia przyjmijmy, że cząstka startuje z  $k = 0$

## Średnie przemieszczenie po $n$ krokach

$$\langle j \rangle = \sum_{j=-\infty}^{\infty} j \cdot P_{0j} = 0, \quad (8)$$

gdyż  $P_{0j} = P_{0-j}$ .

## Średni kwadrat przemieszczenia po $n$ krokach

$$\langle j^2 \rangle = \sum_{j=-\infty}^{\infty} j^2 \cdot P_{0j} = \frac{1}{2^n} \sum_{j=-n}^n j^2 \binom{n}{\frac{n-j}{2}}, \quad (9)$$

przy czym sumowanie przebiega po takich  $j$ , że  $n - j$  jest parzyste. Oznaczmy  $s = (n - j)/2$ . Wówczas

$$\langle j^2 \rangle = \frac{1}{2^n} \sum_{s=0}^n \binom{n}{s} (n - 2s)^2 = \frac{1}{2^n} \left[ n^2 \sum_{s=0}^n \binom{n}{s} - 4n \sum_{s=0}^n \binom{n}{s} s + 4 \sum_{s=0}^n \binom{n}{s} s^2 \right] \quad (10)$$



Mamy

$$\sum_{s=0}^n \binom{n}{s} = 2^n \quad (11a)$$

$$\sum_{s=0}^n \binom{n}{s} s = \lambda \frac{d}{d\lambda} \sum_{s=0}^n \binom{n}{s} \lambda^s \Big|_{\lambda=1} = \lambda \frac{d}{d\lambda} (1 + \lambda)^n \Big|_{\lambda=1} = n2^{n-1} \quad (11b)$$

$$\begin{aligned} \sum_{s=0}^n \binom{n}{s} s^2 &= \left( \lambda^2 \frac{d^2}{d\lambda^2} + 2\lambda \frac{d}{d\lambda} \right) \sum_{s=0}^n \binom{n}{s} \lambda^s \Big|_{\lambda=1} \\ &= n(n-1)2^{n-2} + n2^{n-1} \end{aligned} \quad (11c)$$

$$\begin{aligned}\langle j^2 \rangle &= \frac{1}{2^n} \left[ n^2 2^n - 4n \cdot n 2^{n-1} + 4n(n-1) 2^{n-2} + 4n 2^{n-1} \right] \\ &= n^2 - 2n^2 + n^2 - n + 2n = n\end{aligned}\tag{12}$$

Podsumowując,

$$\begin{aligned}\langle j \rangle &= 0, \\ \langle j^2 \rangle &= n.\end{aligned}$$

Średni kwadrat przemieszczenia jest proporcjonalny do ilości wykonanych kroków.

## Procesy gaussowskie

$\xi(t)$  — szum gaussowski. Rodzina *zmiennych losowych* indeksowanych czasem, takich, że

$\forall n$  oraz  $\forall t_1 < t_2 < \dots < t_n$  :

$$\text{Prob}(\xi) \equiv \text{Prob}(\xi(t_1), \xi(t_2), \dots, \xi(t_n)) \sim \exp\left[-\frac{1}{2}\xi^T \mathbf{G}^{-1}\xi\right] \quad (13)$$

gdzie  $\mathbf{G}$  jest pewną macierzą symetryczną, dodatnio określoną. Z gaussowskości wynika, iż do określenia wystarczą dwa pierwsze momenty.

**Szum biały:**

$$\langle \xi(t) \rangle = 0, \quad \langle \xi(t_1)\xi(t_2) \rangle = \delta(t_1 - t_2) \quad (14)$$

Dlaczego szum biały? Bo jest *znakomitym* przybliżeniem *fluktuacji równowagowych* układu makroskopowego.

## Całka z procesu stochastycznego

$$\int_a^b f(\xi(t))dt = ?$$

W myśl definicji Riemanna, całka nie może zależeć od wyboru punktów pośrednich. Jeśli jednak  $\xi$  jest procesem stochastyczny, całka *najprawdopodobniej zależy* od wyboru punktów pośrednich. **Co zrobić?**

## Interpretacja Ito

Definiujemy

$$\underbrace{\int_a^b f'(W(s)) dW(s)}_{\text{notacja matematyczna}} = f(W(b)) - f(W(a)) - \frac{1}{2} \int_a^b f''(W(s)) ds \quad (15)$$

$W(s)$  to *proces Wienera*. Drugi człon w (15) nazywa się poprawką Ito.

Analogicznie

$$\int_a^b g(s) \xi(t) dt = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{k=0}^N g(t_k) (W(t_{k+1}) - W(t_k)) \quad (16)$$

gdzie  $a \equiv t_0 < t_1 < \dots < t_{N+1} \equiv b$ . **Wartość funkcji obliczana zawsze na lewym krańcu przedziału!** Jest to **interpretacja Ito**.

„Konkurencyjna” **interpretacja Stratonowicza**:

w (16) bierzemy  $g\left(\frac{t_k + t_{k+1}}{2}\right)$ . (Wówczas w (15) nie ma dodatkowego członu.)

## Błądzenie przypadkowe

Niech zmiany położenia cząstki będą losowe, zadane białym szumem gaussowskim

$$x(t + \Delta t) = x(t) + \Delta x, \quad (17)$$

gdzie  $\Delta x$  są pewnymi zmiennymi gaussowskimi. W opisie ciągłym

$$\dot{x} = \sqrt{D} \xi(t) \quad (18)$$

Wówczas

$$x(t) = x_0 + \sqrt{D} \int_0^t \xi(t') dt' = x_0 + \sqrt{D} \Xi(t). \quad (19)$$

Jakie są własności liczby losowej  $\Xi(t)$ ? Jest to zmienna gaussowska, bo suma zmiennych gaussowskich jest gaussowska. Wartość oczekiwana  $\langle \Xi(t) \rangle = 0$ .

A jaka jest wariancja?

$$\begin{aligned}\langle (\Xi(t))^2 \rangle &= \left\langle \left( \int_0^t \xi(t') dt' \right)^2 \right\rangle = \left\langle \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \xi(t_1) \xi(t_2) \right\rangle \\ &= \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \langle \xi(t_1) \xi(t_2) \rangle = \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \delta(t_1 - t_2) \\ &= \int_0^t dt_1 = t.\end{aligned}\tag{20}$$

Wobec tego  $\langle x(t) \rangle = x_0$ ,  $\langle (x(t) - x_0)^2 \rangle = Dt$ .



## Równanie dyfuzji

Ponieważ  $x(t)$  jest zmienną gaussowską, do określenia rozkładu prawdopodobieństwa wystarcza podanie dwu pierwszych momentów. Zatem

$$P(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi Dt}} \exp \left[ -\frac{(x - x_0)^2}{2Dt} \right] \quad (21)$$

Ten rozkład prawdopodobieństwa spełnia następujące równanie różniczkowe

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x, t) = \frac{1}{2} D \frac{\partial^2}{\partial x^2} P(x, t) \quad (22)$$

zwane *równaniem dyfuzji*.

## Duża cząstka w kąpeli cieplnej

Hamiltonian:

$$H = \frac{P^2}{2M} + U(Q) + \sum_{i=1}^N \left[ \frac{p_i^2}{2m_i} + \frac{1}{2} m_i \omega_i^2 (q_i - c_i Q)^2 \right] \quad (23)$$

Równania ruchu — układ  $N + 1$  równań pierwszego rzędu:

$$\dot{Q} = \frac{1}{M}P \quad (24a)$$

$$\dot{P} = -\frac{dU(Q)}{dQ} + \sum_{i=1}^N c_i m_i \omega_i^2 (q_i - c_i Q) \quad (24b)$$

$$\dot{q}_i = \frac{1}{m_i} p_i \quad (24c)$$

$$\dot{p}_i = -m_i \omega_i^2 (q_i - c_i Q) \quad (24d)$$

Możemy obserwować „dużą” cząstkę. Trajektorie „małych” cząstek są nieciekawe lub nieobserwowalne, a zatem próbujemy je wyeliminować.

**Ścisłe** rozwiązanie równań ruchu małych cząstek daje

$$\ddot{Q} + \int_0^t \gamma(t-t') \dot{Q}(t') dt' + \frac{1}{M} \frac{dU(Q)}{dQ} = \frac{1}{M} R(t), \quad (25a)$$

gdzie

$$\gamma(t-t') = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^N m_i c_i^2 \omega_i^2 \cos \omega_i(t-t'), \quad (25b)$$

$$R(t) = \sum_{i=1}^N m_i c_i \omega_i^2 \left[ (q_i(0) - c_i Q(0)) \cos \omega_i t + \frac{p_i(0)}{m_i \omega_i} \sin \omega_i t \right] \quad (25c)$$

Jeżeli  $q_i(0)$ ,  $p_i(0)$  są nieskorelowanymi gaussowskimi liczbami losowymi, to  $R(t)$  też jest gaussowską liczbą losową.

Ponieważ  $\langle q_i(0) \rangle = \langle p_i(0) \rangle = 0$ , mamy  $\langle R(t) \rangle = 0$ . Obliczmy  $\langle R(t)R(t') \rangle$ . Człony zawierające  $p_i q_j$ ,  $p_i p_{j \neq i}$ ,  $q_i q_{j \neq i}$  znikają. Zostaje tylko  $\langle q_i(0)^2 \cos \omega_i t \cos \omega_i t' + p_i(0)^2 / (m_i \omega_i)^2 \sin \omega_i t \sin \omega_i t' \rangle$ , a to daje **średnią energię  $i$ -tego oscylatora**. Zakładamy, że oscylatory wykonują drgania termiczne. Ostatecznie

$$\langle R(t)R(t') \rangle = M k_B T \gamma(t - t'). \quad (26)$$

Związek (26) nazywa się **twierdzeniem fluktuacyjno-dysypacyjnym**.

## Wnioski z twierdzenia fluktuacyjno-dysypacyjnego

- Fluktuacje termiczne są źródłem „lepkości”.
- Natężenie fluktuacji, lepkość i temperatura są ze sobą powiązane.
- Szum pojawia się jako proteza naszej niewiedzy — nie znamy i nie umiemy śledzić trajektorii wszystkich „małych” cząstek, więc kolektywny efekt ich działania zastępujemy procesem losowym o znanych własnościach.
- Gaussowskość wynika z przyjętego założenia o istnieniu równowagi termodynamicznej.

## Jądro pamięci

Jądro pamięci ma postać (25b). Jeśli fazy  $\omega_i$  są przypadkowe oraz  $N$  jest bardzo duże, dla  $t \neq t'$  przyczynki od poszczególnych oscylatorów *prawie* się kasują, przy czym kasowanie jest niewielkie dla  $|t - t'| \simeq 0$ . Spodziewamy się zatem, że  $\gamma(\cdot)$  jest szybko zanikającą funkcją swojego argumentu. W skrajnym przypadku  $\gamma(t - t') = \gamma \cdot \delta(t - t')$ . Równanie różniczkowo-całkowe (25a) przechodzi wówczas w

$$\ddot{Q} + \gamma\dot{Q} + \frac{1}{M} \frac{dU}{dQ} = \sqrt{D} \xi(t), \quad (27)$$

gdzie  $\xi(t)$  jest białym szumem gaussowskim oraz

$$D = \frac{\gamma}{M} k_B T. \quad (28)$$

Związek (28) został po raz pierwszy wyprowadzony przez Einsteina i Smoluchowskiego.

## Ruch przetłumiony

„Fizyczny” ruch w polu potencjału  $U(x)$  z tłumieniem opisujemy równaniem

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} + \gamma \frac{dx}{dt} + \frac{dU(x)}{dx} = 0. \quad (29)$$

Jeżeli  $\left| m \frac{d^2 x}{dt^2} \right| \ll \gamma \frac{dx}{dt}$ , możemy napisać

$$\frac{dx}{dt} = -\frac{1}{\gamma} \frac{dU}{dx}. \quad (30)$$



## Równania Langevina i Fokkera-Plancka

Wprowadźmy zaburzenie stochastyczne

$$\dot{x} = A(x) + \sqrt{D} \xi(t). \quad (31)$$

Równanie takie nazywa się *równaniem Langevina*. Odpowiada mu następujące równanie na dyfuzję rozkładu prawdopodobieństwa:

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} [A(x)P(x, t)] + \frac{1}{2}D \frac{\partial^2 P(x, t)}{\partial x^2}, \quad (32)$$

zwane *równaniem Fokkera-Plancka*. Pierwszy człon po prawej stronie równania (32) nazywa się *członem dryfu*. Pochodzi on od siły deterministycznej. Drugi człon nazywa się *członem dyfuzji*. Pochodzi on od zaburzenia stochastycznego.

## Rozwiązanie stacjonarne

Rozwiązanie stacjonarne znajdujemy z warunku  $\partial P / \partial t = 0$ , co prowadzi do równania

$$-A(x)P_{\text{st}}(x) + \frac{1}{2}D\frac{dP_{\text{st}}(x)}{dx} = 0. \quad (33)$$

Rozwiązanie stacjonarne nie zawsze istnieje! (Za rozwiązania “istniejące” uznajemy tylko rozwiązania *normalizowalne*.)

## Przykład: Ruch w potencjale harmonicznym

Niech  $V(x) = \frac{1}{2}\omega^2 x^2$ . Stacjonarne równanie Fokkera-Plancka przybiera postać

$$\omega^2 x P_{\text{st}}(x) + \frac{1}{2}D \frac{dP_{\text{st}}(x)}{dx} = 0, \quad (34)$$

którego rozwiązaniem jest

$$P_{\text{st}}(x) = \sqrt{\frac{\omega^2}{\pi D}} \exp\left[-\frac{\omega^2 x^2}{D}\right]. \quad (35)$$

Im dyfuzja silniejsza, tym rozkład bardziej rozmyty. Im potencjał sztywniejszy (im  $\omega^2$  większe), tym rozkład węższy.

## Szum multiplikatywny

W równaniu (31) szum jest *addytywny* — siła stochastyczna tylko *dodaje się* do siły deterministycznej. W sytuacji najbardziej ogólnej szum mógłby sprzęgać się *multiplikatywnie*:

$$\dot{x} = A(x) + C(x) \xi(t). \quad (36)$$

(Stałą  $D$  włączyliśmy do funkcji  $C(x)$ .) Wówczas równanie Fokkera-Plancka przybiera postać

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} [A(x)P(x, t)] + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} [(C(x))^2 P(x, t)] \quad (37)$$

i trzeba *strasznie* uważać na to, której interpretacji szumu się używa.

## Numeryczne całkowanie równania Langevina

Przypuśćmy, że dane jest równanie Langevina

$$\dot{x} = A(x) + C(x) \xi(t) \quad (38)$$

gdzie  $\xi(t)$  jest białym szumem gaussowskim. (Jeżeli  $C(x) = \text{const}$ , szum nazywam addytywnym.)

Jak *numerycznie* wygenerować trajektorię  $x(t)$ ?

Niech  $x_n = x(t_n) = x(t_0 + nh)$ , gdzie  $h$  jest krokiem całkowania. Chodzi zatem o numeryczne wygenerowanie ciągu  $\{x_n\}_{n=0}^N$ .

Zauważmy, że

$$x_{n+1} = x_n + \int_{t_n}^{t_{n+1}} A(x(t')) dt' + \int_{t_n}^{t_{n+1}} C(x(t')) \xi(t') dt'. \quad (39)$$

Wzór (39) jest wzorem dokładnym. Przyjmujemy interpretację Ito. Wówczas

$$\begin{aligned} x_{n+1} &\simeq x_n + A(x(t_n)) \int_{t_n}^{t_{n+1}} dt' + C(x(t_n)) \int_{t_n}^{t_{n+1}} \xi(t') dt' \\ &= x_n + A(x_n) \underbrace{\int_{t_n}^{t_{n+1}} dt'}_h + C(x_n) \underbrace{\int_{t_n}^{t_{n+1}} \xi(t') dt'}_{\Xi_n}. \end{aligned} \quad (40)$$

Liczby  $\Xi_n$  są gaussowskimi liczbami losowymi,  $\langle \Xi_n \rangle = 0$ . Ile wynosi ich wariancja?

$$\begin{aligned}
 \langle \Xi_n \Xi_m \rangle &= \int_{t_n}^{t_{n+1}} dt' \int_{t_m}^{t_{m+1}} dt'' \langle \xi(t') \xi(t'') \rangle \\
 &= \int_{t_n}^{t_{n+1}} dt' \int_{t_m}^{t_{m+1}} dt'' \delta(t' - t'') = \begin{cases} 0 & \text{dla } m \neq n \\ \int_{t_n}^{t_{n+1}} dt' = h & \text{dla } m = n. \end{cases} \quad (41)
 \end{aligned}$$

W szczególności widać, iż  $\langle \Xi_n^2 \rangle = h$ .

## Metoda Eulera-Maryuamy

Ostatecznie otrzymujemy

$$x_{n+1} = x_n + h A(x_n) + \sqrt{h} C(x_n) \eta_n, \quad (42)$$

gdzie  $\eta_n$  są nieskorelowanymi zmiennymi gaussowskimi z rozkładu  $N(0, 1)$ .

Metoda (42) jest obarczona dużym błędem, niemniej jednak stosuje się ją bardzo często z uwagi na znaczną komplikację metod o wyższych rzędach zbieżności i jednocześnie zgodnych z interpretacją Ito.