

Fizyka statystyczna

Procesy stochastyczne

P. F. Góra

<http://th-www.if.uj.edu.pl/zfs/gora/>

2015

Procesy stochastyczne — motywacja

Układy makroskopowe mają bardzo dużo stopni swobody, rzędu liczby Avogadra, czyli rzędu 10^{23} . Demon Laplace’a, czyli hipotetyczna istota zdolna śledzić *wszystkie* cząstki mikroskopowe, jest w praktyce nieralizowalny, tym bardziej, że tak naprawdę interesuje nas albo zachowanie wybranych, *obserwowalnych* stopni swobody, albo też zmiennych *makroskopowych*, odpowiadających pewnym wielkościom uśrednionym. Wpływ licznych nieobserwowalnych stopni swobody zastępujemy *procesem stochastycznym*, którego własności statystyczne umiemy podać.

Jeśli ograniczamy się do fizyki klasycznej, procesy stochastyczne są “protezą naszej niewiedzy”.

Proces stochastyczny

Proces stochastyczny to rodzina zmiennych losowych indeksowana pewną zmienną t . Zmienną indeksującą t zwyczajowo nazywamy “czasem”, choć w niektórych zastosowaniach może ona oznaczać jakąś współrzędną przestrzenną.

Niech $f(\cdot)$ będzie jakąś funkcją, X — zmienną losową. $f(X)$ jest jakąś inną zmienną losową. Proces stochastyczny można interpretować jako rodzinę

$$f(X, t)$$

gdzie t oznacza zmienną indeksującą. Jeżeli dla każdej wartości t wybierzemy jakąś konkretną wartość zmiennej losowej X , dostaniemy funkcję zmiennej t

$$y(t) = f(x, t)$$

którą nazywamy *realizacją procesu stochastycznego*. Inne wybory wartości zmiennej X , zachodzące z odpowiednimi prawdopodobieństwami, prowadzą do innych realizacji tego samego procesu. Oczekujemy jednak, że pewne własności samego procesu stochastycznego, rozumianego na ogół jako kolekcja realizacji, będzie dało się wydedukować ze znajomości rozkładu prawdopodobieństwa zmiennej X oraz z własności funkcji $f(\cdot)$.

Procesy Markowa

Weźmy pewien ciąg zmiennych indeksujących $t_1 < t_2 < \dots < t_n$. Niech $P_{1|n-1}(y_n, t_n | y_1, t_1; y_2, t_2; \dots; y_{n-1}, t_{n-1})$ oznacza prawdopodobieństwo warunkowe, iż pewien proces stochastyczny w chwili t_n przyjął wartość y_n , pod warunkiem, że w chwili t_{n-1} przyjął wartość y_{n-1} oraz w chwili t_{n-2} przyjął wartość y_{n-2} oraz w chwili t_{n-3} przyjął wartość y_{n-3} oraz Jeżeli dla każdego n i dla każdego możliwego wyboru $t_1 < t_2 < \dots < t_n$ zachodzi

$$P_{1|n-1}(y_n, t_n | y_1, t_1; y_2, t_2; \dots; y_{n-1}, t_{n-1}) = P_{1|1}(y_n, t_n | y_{n-1}, t_{n-1}) \quad (1)$$

proces taki nazywamy **procesem Markowa**.



Anderi Andreiewicz Markow

Własność (1) mówi, że proces “nie ma długiej pamięci”: Gęstość prawdopodobieństwa warunkowego w chwili t_n jest jednoznacznie wyznaczona przez wartości w chwili t_{n-1} i żadne informacje na temat wartości przyjmowanych we wcześniejszych chwilach nie mają na nią wpływu. Prawdopodobieństwo $P_{1|1}$ nazywamy *prawdopodobieństwem przejścia*.

Proces Markowa jest w całości wyznaczony przez dwie funkcje: Prawdopodobieństwo początkowe $P_1(y_1, t_1)$ oraz prawdopodobieństwo przejścia $P_{1|1}(y_2, t_2|y_1, t_1)$. Istotnie, biorąc dowolne $t_1 < t_2 < t_3$ otrzymamy dla prawdopodobieństwa łącznego

$$\begin{aligned} P_3(y_1, t_1; y_2, t_2; y_3, t_3) &= P_{1|2}(y_3, t_3|y_2, t_2; y_1, t_1)P_2(y_1, t_1; y_2, t_2) \\ &= P_{1|1}(y_3, t_3|y_2, t_2)P_{1|1}(y_2, t_2|y_1, t_1)P_1(y_1, t_1) \end{aligned} \quad (2)$$

Definicję procesu Markowa oraz powyższą własność można z łatwością uogólnić na przypadek wielowymiarowy.

Równanie Chapmana-Kołmogorowa

Jeżeli scałkujemy (2) po y_2 dla $t_1 < t_2 < t_3$ otrzymamy

$$P_2(y_1, t_1; y_3, t_3) = P_1(y_1, t_1) \int P_{1|1}(y_3, t_3 | y_2, t_2) P_{1|1}(y_2, t_2 | y_1, t_1) dy_2. \quad (3)$$

Jeśli podzielimy powyższą równość przez $P_1(y_1, t_1)$, otrzymamy **równanie Chapmana-Kołmogorowa**:

$$P_{1|1}(y_3, t_3 | y_1, t_1) = \int P_{1|1}(y_3, t_3 | y_2, t_2) P_{1|1}(y_2, t_2 | y_1, t_1) dy_2, \quad (4)$$

gdzie całkowanie rozciąga się po całym zakresie zmiennej y_2 oraz musi być spełniony warunek $t_1 < t_2 < t_3$. Prawdopodobieństwo przejścia musi być całką (sumą) prawdopodobieństw przejścia po wszystkich możliwych drogach pośrednich.

Tak naprawdę to równanie Chapmana-Kołmogorowa stanowi poprawną matematyczną definicję procesu Markowa: Każda funkcja $P_{1|1}(\cdot|\cdot)$ spełniająca równanie (4) jest prawdopodobieństwem przejścia w pewnym procesie Markowa. Musi także zachodzić

$$P_1(y_2, t_2) = \int P_{1|1}(y_2, t_2|y_1, t_1) P_1(y_1, t_1) dy_1 . \quad (5)$$

Prawdopodobieństwo przejścia $P_{1|1}$ i jednopunktowa funkcja rozkładu P_1 procesu Markowa spełniają równania (4) i (5). Na odwrót, każde dwie funkcje spełniające te równania wyznaczają pewien proces Markowa.

Proces Wienera

Rozpatrzmy proces zadany prawdopodobieństwem przejścia ($y_1, y_2 \in \mathbb{R}$, $t_2 > t_1$)

$$P_{1|1}(y_2, t_2 | y_1, t_1) = \frac{1}{\sqrt{2\pi(t_2 - t_1)}} \exp \left[-\frac{(y_2 - y_1)^2}{2(t_2 - t_1)} \right], \quad (6)$$

Łatwo sprawdzić, że funkcja (6) spełnia równanie Chapmana-Kołmogorowa. Jeżeli przyjmiemy, że $P_1(y_1, 0) = \delta(y_1)$, z (5) otrzymamy

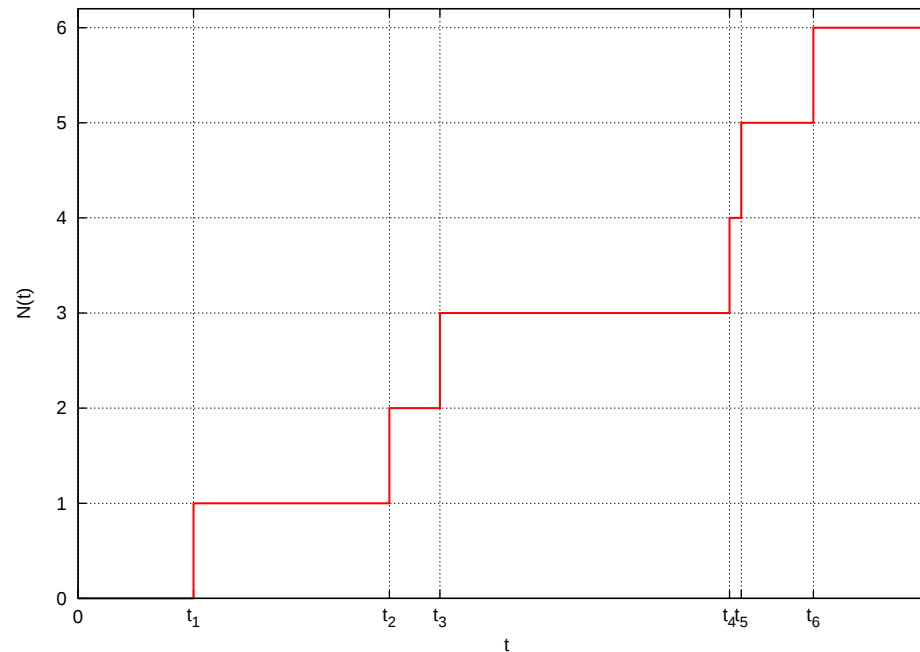
$$P_1(y, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi t}} \exp \left[-\frac{y^2}{2t} \right], \quad t > 0. \quad (7)$$

Jest to tak zwany *proces Wienera*. Gęstość (7) jest, jak zobaczymy, zależną od czasu gęstością położenia cząstki podlegającej jednowymiarowej dyfuzji.

Proces Poissona

Proces Poissona zlicza jakieś elementarne zdarzenia, jakie zaszły do danej chwili czasu t_0 . Rozważamy zatem pewien proces $N(t)$, o którym zakładamy, że

- i. $\forall h > 0$: rozkład zmiennej losowej $N(t + h) - N(t)$ jest taki sam, to znaczy, nie zależy on od t .
- ii. Zmienne losowe $N(t_j) - N(t'_j)$, $N(t_k) - N(t'_k)$ są niezależne, jeśli tylko $[t'_j, t_j] \cap [t'_k, t_k] = \emptyset$ (przedziały nie przecinają się).
- iii. $N(0) = 0$, $N(t)$ jest liczbą całkowitą, prawostronnie ciągłą i niemalejącą jako funkcja t .
- iv. $P(N(t + h) - N(t) \geq 2) = P(N(h) \geq 2) = o(h)$ gdy $h \rightarrow 0$ (prawdopodobieństwo, że w bardzo krótkim przedziale N wzrośnie o 2 lub więcej jest zaniedbywalnie małe).



Przykładowa realizacja procesu Poissona: Jednostkowe przyrosty pewnej wielkości w losowo wybranych chwilach czasu. Czas oczekiwania na kolejne skoki ma rozkład wykładniczy.

Przy tych założeniach można pokazać*, że

- $N(t)$ jest funkcją schodkową, narastającą w krokach o wysokości 1.
- Istnieje $\lambda \geq 0$ taka, że zmienna losowa $N(t + s) - N(s)$ ma rozkład Poissona z parametrem λt .
- Czas oczekiwania na przeskok jest zmienną losową o rozkładzie wykładniczym: Jeżeli $\tau_1, \tau_2, \dots$, są czasami oczekiwania na kolejne skoki, prawdopodobieństwo skoku spełnia

$$P(\tau_j \geq x) = e^{-\lambda x}.$$

*Patrz na przykład tutaj.

- Prawdopodobieństwo warunkowe wynosi

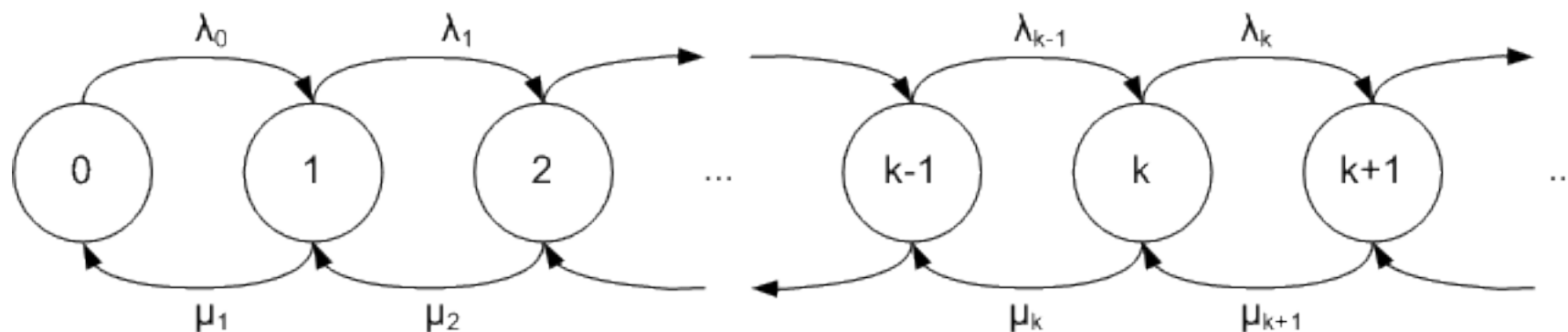
$$P_{1|1}(N_2, t_2 | N_1, t_1) = \frac{[\lambda(t_2 - t_1)]^{N_2 - N_1}}{(N_2 - N_1)!} e^{-\lambda(t_2 - t_1)} \quad (8)$$

dla $N_2 \geq N_1, t_2 > t_1$ ($P_{1|1} = 0$ poza tym).

Można łatwo sprawdzić, że prawdopodobieństwo przejścia (8) spełnia równanie Chapmana-Kołmogorowa, a zatem wraz z warunkiem $N(0) = 0$ definiuje pewien proces Markowa.

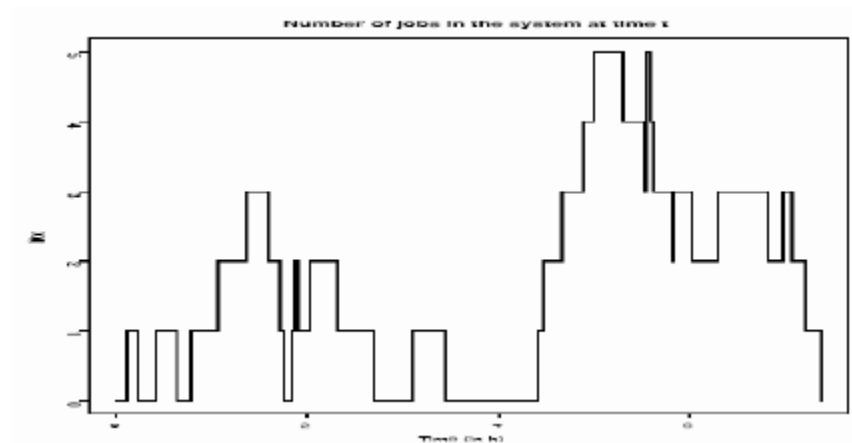
Procesy narodzin i śmierci

Procesy narodzin i śmierci (Birth and Death Processes) są uogólnieniem procesu Poissona. Zliczana zmienna może zwiększać się, ale także zmniejszać się o 1 w losowo dobranych momentach. $N(t)$ nazywamy *stanem procesu w chwili t* . Proces narodzin i śmierci można zilustrować za pomocą *diagramu stanów*:



λ_k oznaczają prędkości (ang. rate) “narodzin”, μ_k prędkości “śmierci” w stanie k .

Prawdopodobieństwo czasu oczekiwania na przeskok, podobnie jak w procesie Poissona, dane jest rozkładem wykładniczym. Jeżeli prawdopodobieństwa “narodzin” (zwiększenia się wartości, czyli ruchu do wyższego stanu) i “śmierci” (zmniejszenia się wartości, czyli ruchu do niższego stanu) nie zależą od wartości stanu, proces taki nazywamy *jednorodnym*. Proces narodzin i śmierci jest procesem Markowa.



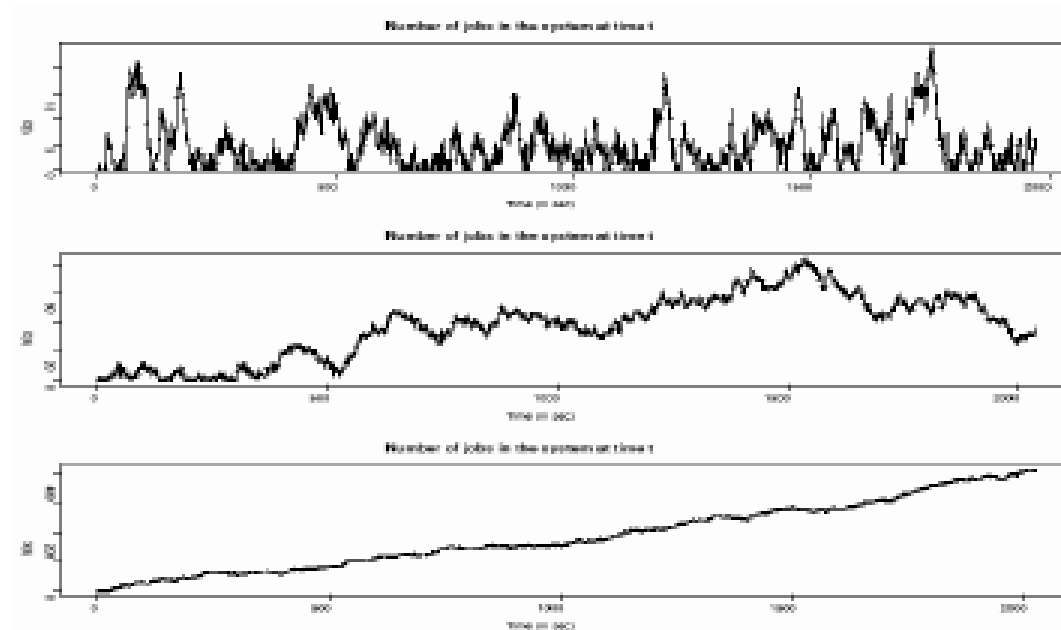
Przykład realizacji procesu narodzin i śmierci

Niech $P_1(k, t)$ oznacza prawdopodobieństwo, że w chwili t proces jest w stanie k . Jeżeli granica

$$\lim_{t \rightarrow \infty} P_1(k, t)$$

istnieje dla każdego k , mówimy, że proces osiąga stan równowagi. Dla procesu jednorodnego osiągnięcie stanu równowagi jest możliwe tylko gdy $\lambda < \mu$ (prędkość narodzin jest mniejsza od prędkości śmierci).

Procesy narodzin i śmierci, podobnie jak proces Poissona, są wykorzystywane w teorii kolejek.



Realizacje jednorodnego procesu narodzin i śmierci. Górny panel: $\lambda < \mu$,
środkowy panel: $\lambda = \mu$ (błądzenie przypadkowe), dolny panel: $\lambda > \mu$
(eksplozja)

Łańcuchy Markowa

Proces Poissona i jednorodne procesy narodzin i śmierci są przykładami **łańcuchów Markowa**, czyli procesów Markowa, w których

- zmienna losowa może przyjmować tylko dyskretny (skończony lub co najwyżej przeliczalny) zbiór wartości, zwanych *stanami*,
- prawdopodobieństwo przejścia zależy wyłącznie od różnicy czasów.

Jeśli dodatkowo przyjmiemy, że

- zmienna czasowa jest dyskretna i może przyjmować tylko wartości całkowite $\dots, -2, -1, 0, 1, 2, \dots$

proces taki nazywamy **dyskretnym łańcuchem Markowa**. Ten przypadek jest najczęstszy; często domyślnie zakłada się, że jeśli mówimy o łańcuchu Markowa, mamy na myśli dyskretny łańcuch Markowa. Jeśli dostępna przestrzeń stanów jest skończona, łańcuch nazywamy skończonym.

Macierz przejścia

Dla dyskretnego łańcucha Markowa prawdopodobieństwa przejścia zapisujemy jako

$$P_{1|1}(k, 2|l, 1) = W_{kl} . \quad (9)$$

W_{kl} jest prawdopodobieństwem przejścia w jednym kroku ze stanu l do stanu k .

Dla skończonego, N -stanowego, dyskretnego łańcucha Markowa, liczby W_{kl} tworzą macierz $\mathbf{W} \in \mathbb{R}^{N \times N}$, zwaną **macierzą przejścia**.

Własności macierzy przejścia

- $W_{kl} \geq 0$: prawdopodobieństwa nie mogą być ujemne.
- $\forall l: \sum_{k=1}^N W_{kl} = 1$: Suma elementów w każdej *kolumnie* równa się jeden, gdyż jest to prawdopodobieństwo całkowite na to, że układ ze stanu l pójdzie *gdziekolwiek*.

Niech $\mathbf{p}(n) \in \mathbb{R}^N$ oznacza wektor prawdopodobieństw, że w chwili n układ znajduje się w poszczególnych stanach: $p_1(n)$ jest prawdopodobieństwem tego, że w chwili n układ jest w stanie 1, $p_2(n)$ jest prawdopodobieństwem tego, że w chwili n układ jest w stanie 2 itd. Musi zachodzić $p_i(n) \geq 0$, $\sum_{i=1}^N p_i(n) = 1$. Równanie (5) przybiera postać

$$\mathbf{p}(2) = \mathbf{W}\mathbf{p}(1). \quad (10)$$

Przykład

Cząstka może znajdować się w jednym z trzech stanów: A , B , C . Jeśli w chwili n cząstka jest w stanie A , w chwili $n+1$ znajdzie się z prawdopodobieństwem $2/3$ w stanie B lub z prawdopodobieństwem $1/3$ w stanie C . Jeśli w chwili n cząstka jest w stanie B , w chwili $n+1$ z równym prawdopodobieństwem znajdzie się w którymś z pozostałych stanów lub pozostanie w stanie bieżącym. Jeśli w chwili n cząstka jest w stanie C , w chwili $n+1$ z prawdopodobieństwem $2/3$ znajdzie się w stanie A lub z prawdopodobieństwem $1/3$ znajdzie się w stanie B . W chwili $n=1$ cząstka znajduje się w stanie A .

Dla tego przykładu

$$W = \begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{3} & \frac{2}{3} \\ \frac{2}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} \\ \frac{1}{3} & \frac{2}{3} & 0 \end{bmatrix} \quad (11a)$$

$$\begin{aligned} p(1) &= \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad p(2) = Wp(1) = \begin{bmatrix} 0 \\ \frac{2}{3} \\ \frac{1}{3} \end{bmatrix}, \\ p(3) &= Wp(2) = \begin{bmatrix} \frac{4}{9} \\ \frac{3}{9} \\ \frac{2}{9} \end{bmatrix}, \quad p(4) = Wp(3) = \begin{bmatrix} \frac{7}{27} \\ \frac{13}{27} \\ \frac{7}{27} \end{bmatrix}, \quad \dots \end{aligned} \quad (11b)$$

Równowagowy rozkład prawdopodobieństwa

Przypuśćmy, że istnieje taki wektor p^* , że zadany przez niego rozkład prawdopodobieństwa nie zmienia się po przekształceniu przez macierz przejścia W :

$$Wp^* = p^* . \quad (12)$$

Mówimy, że p^* zadaje **równowagowy rozkład prawdopodobieństwa**. Wiadąc, że **rozkład równowagowy jest wektorem własnym macierzy przejścia do wartości własnej 1**, o ile wektor taki istnieje. W takim wypadku

$$\lim_{n \rightarrow \infty} W^n p(1) = p^* .$$

Dla przykładu ze strony 22,

$$p^* = \begin{bmatrix} \frac{5}{16} \\ \frac{7}{16} \\ \frac{4}{16} \end{bmatrix} . \quad (13)$$

Równanie master

Weźmy *jednorodny* proces Markowa, to znaczy taki, w którym prawdopodobieństwa przejścia zależą wyłącznie od różnicy czasów. Zapisujemy

$$P_{1|1}(y_2, t_2 | y_1, t_1) = T_\tau(y_2 | y_1), \quad \tau = t_2 - t_1. \quad (14)$$

W tych oznaczeniach równanie Chapmana-Kołmogorowa (4) ma postać

$$T_{\tau+\tau'}(y_3 | y_1) = \int T_{\tau'}(y_3 | y_2) T_\tau(y_2 | y_1) dy_2. \quad (15)$$

Jak zachowuje się $T_{\tau'}(y_2 | y_1)$ dla *bardzo małych* czasów τ' ?

Postulujemy, że w bardzo małym czasie τ'

- przejście nie nastąpi, lub, jeśli przejście nastąpi,
- prawdopodobieństwo przejścia jest proporcjonalne do τ' :

$$T_{\tau'}(y_2|y_1) = \left(1 - \tau' \int W(y_2|y_1) dy_2\right) \delta(y_2 - y_1) + \tau' W(y_2|y_1) + o(\tau'), \quad (16)$$

gdzie $W(y_2|y_1) \geq 0$ jest *prawdopodobieństwem przejścia w jednostce czasu* od y_1 do y_2 . $\int W(y_2|y_1) dy_2$ jest prawdopodobieństwem tego, że w jednostce czasu nastąpi przejście z y_1 *gdziekolwiek*.

Podstawiamy (16) do (15):

$$\begin{aligned} T_{\tau+\tau'}(y_3|y_1) &= \left(1 - \tau' \int W(y_2|y_3) dy_2\right) T_{\tau}(y_3|y_1) \\ &+ \tau' \int W(y_3|y_2) T_{\tau}(y_2|y_1) dy_2, \end{aligned} \quad (17)$$

Po uporządkowaniu wyrazów, podzieleniu przez τ' i przejściu do granicy $\tau' \rightarrow 0$, dostajemy

$$\frac{\partial}{\partial \tau} T_{\tau}(y_3|y_2) = \int (W(y_3|y_2) T_{\tau}(y_2|y_1) - W(y_2|y_3) T_{\tau}(y_3|y_1)) dy_2. \quad (18)$$

Na koniec mnożymy obie strony (18) przez $P_1(y_1)$, całkujemy po y_1 i dostajemy **równanie master**:

$$\frac{\partial P(y, t)}{\partial t} = \int (W(y|y') P(y', t) - W(y'|y) P(y, t)) dy'. \quad (19)$$

Dla łańcuchów Markowa równanie master ma szczególnie wygodną postać:

$$\frac{dp_n(t)}{dt} = \sum_{n'} [W_{nn'}p_{n'}(t) - W_{n'n}p_n(t)]. \quad (20)$$

Równanie master jest równaniem bilansu: Prawdopodobieństwo znalezienia się w stanie n rośnie, gdy układ przechodzi z innego stanu do stanu n . Prawdopodobieństwo to spada, gdy układ przechodzi ze stanu n do jakiegoś innego stanu. Trzeba to teraz wysumować po wszystkich stanach, z których układ może przejść do stanu n lub do których może z tego stanu uciec.

Równanie master wyprowadziliśmy z równania Chapmana-Kołmogorowa dla procesów jednorodnych w czasie; można je uważać za różniczkową postać tego równania.

Warunek równowagi

Układ pozostaje *w stanie stacjonarnym*, gdy prawdopodobieństwa obsadzenia wszystkich stanów w łańcuchu Markowa nie zmieniają się w czasie. Z równania master (20) widzimy, że oznacza to, iż

$$\forall n: \sum_{n'} [W_{nn'}p_{n'}(t) - W_{n'n}p_n(t)] = 0. \quad (21)$$

Warunek równowagi (21) oznacza, w każdym stanie suma “wpływów” i “wy wpływów” bilansuje się: Sumaryczne przejścia do danego stanu z wszystkich innych stanów są zrównoważone przez ucieczki z tego stanu do wszystkich innych możliwych stanów.

Warunek równowagi szczegółowej

Jeżeli w (21) położymy

$$\forall n, n': \quad W_{nn'}p_{n'}(t) - W_{n'n}p_n(t) = 0 \quad (22)$$

warunek równowagi rzecz jasna będzie spełniony. Warunek (22) nazywa się **warunkiem równowagi szczegółowej**. Oznacza on, że nie tylko sumaryczne przepływy się równoważą, ale że **dla każdej pary stanów** wzajemne przepływy w stanie równowagi bilansują się: Ile przejdzie ze stanu n' do stanu n , tyle przejdzie ze stanu n do stanu n' .

Warunek równowagi szczegółowej jest silniejszy, niż warunek równowagi: z (22) wynika (21), ale nie na odwrót.

Konsekwencje warunku równowagi szczegółowej

Jedną z konsekwencji warunku równowagi szczegółowej jest to, że nie może być cyklicznych przepływów prawdopodobieństwa: Dla każdej trójki stanów m, n, s

$$W_{nm}W_{sn}W_{ms} = W_{sm}W_{ns}W_{mn} \quad (23)$$

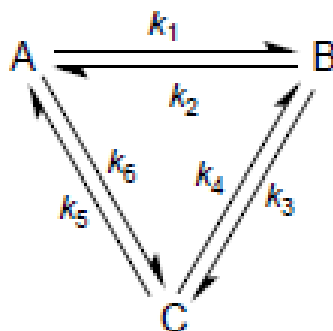
i podobnie dla bardziej rozbudowanych cykli. Łańcuch Markowa, który spełnia warunek równowagi szczegółowej, nazywamy odwracalnym.

Można pokazać, że w skończonych, zamkniętych (izolowanych) układach fizycznych warunek równowagi szczegółowej **musi** być spełniony. Jest to związane z mikroskopową odwracalnością równań ruchu. W mechanice kwantowej odpowiednikiem warunku równowagi szczegółowej jest “złota reguła Fermiego”.

Układy otwarte — na przykład wymieniające z otoczeniem energię — mogą nie spełniać warunku równowagi szczegółowej, choć spełniają warunek równowagi (21). Przykładem na to są oscylacyjne reakcje chemiczne, a także (przynajmniej w pewnym przybliżeniu) niektóre zjawiska meteorologiczne. *Trywialnym* przykładem jest... zegar: uśrednione po czasie (lub po ze-spole statystycznym) prawdopodobieństwo, że duża wskazówka pokazuje którąś minutę nie zmienia się w czasie, podczas gdy zegar, czerpiąc energię z zewnątrz, wykazuje ruch cykliczny ☺.

Przykład

Dla cyklicznych reakcji chemicznych



zachodzących bez wymiany energii (ani cząstek, ani niczego innego) z otoczeniem, warunek równowagi szczegółowej może być spełniony jedynie gdy stałe kinetyczne spełniają

$$k_1 k_3 k_5 = k_2 k_4 k_6 . \quad (24)$$

Jeśli warunek (24) nie byłby spełniony, układ nie osiągałby stanu równowagi. Konieczność spełnienia warunku (24) wynika z mikroskopowej odwracalności reakcji.