

# Fizyka statystyczna

## Procesy stochastyczne

P. F. Góra

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

2020

## 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. Mówiąc w języku fizyki statystycznej, nie interesują nas *mikroskany*, ale *makrostany*. 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

Jeśli 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).

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  $\lambda t$ .
- 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

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

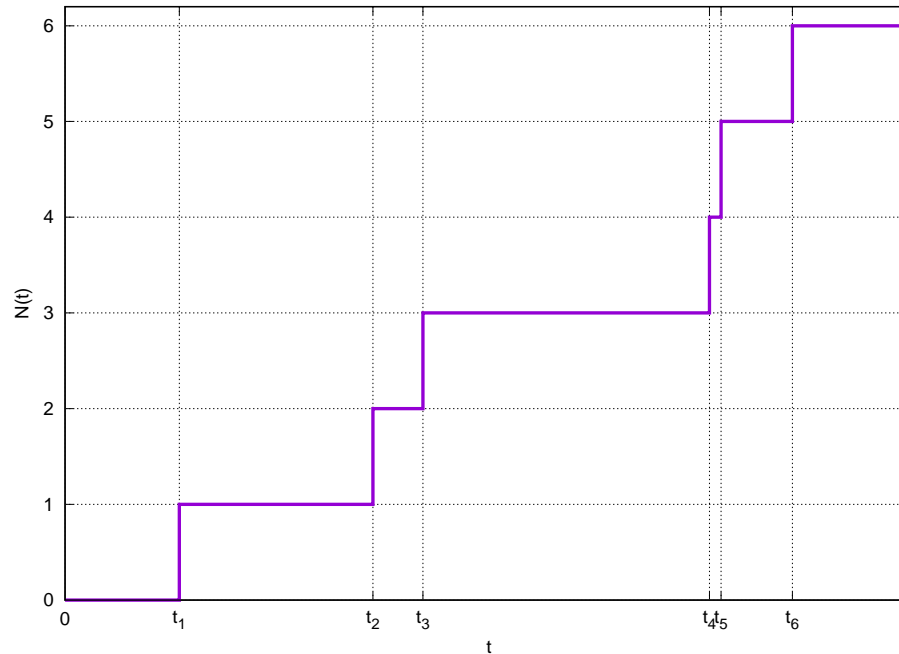
\*Patrz na przykład tutaj.

- 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).

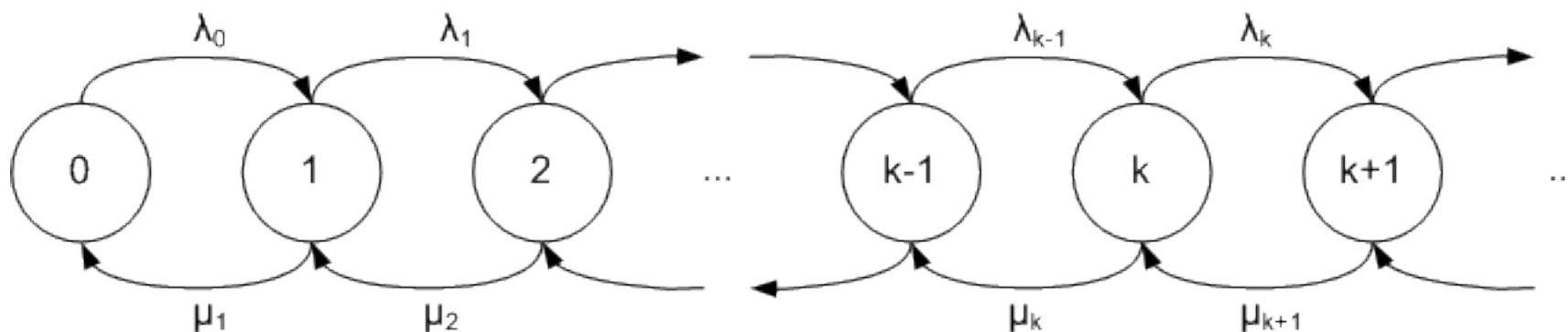
Można łatwo sprawdzić, że prawdopodobieństwo przejścia (8) spełnia równanie Chapmana-Kołmogorowa, a zatem wraz z warunkiem  $N(0) = 0$  definiuje pewien proces Markowa.



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

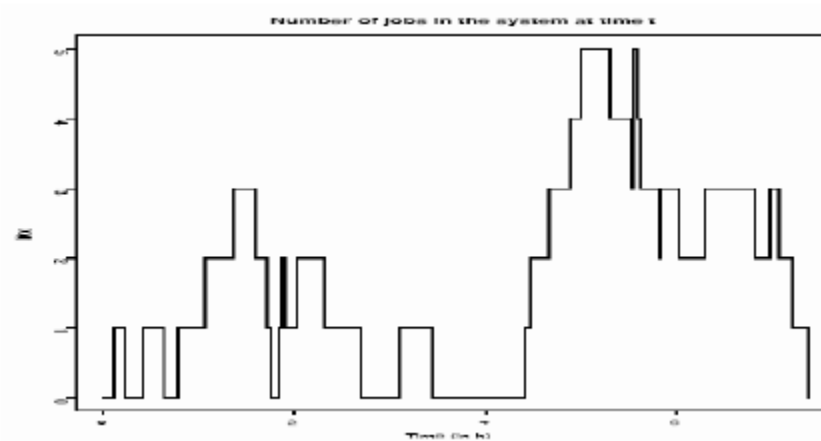
## Procesy narodzin i śmierci

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*:



$\lambda_k$  oznaczają prędkości (ang. rate) “narodzin”,  $\mu_k$  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

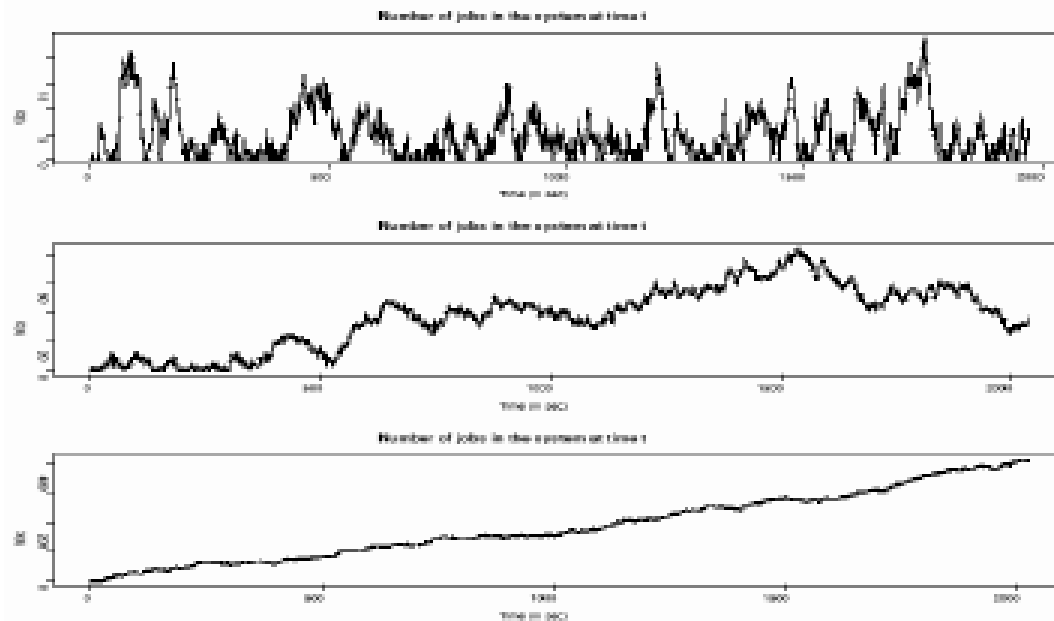


Niech  $P_1(k, t)$  oznacza prawdopodobieństwo, że w chwili  $t$  proces jest w stanie  $k$ . Jeżeli granica

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

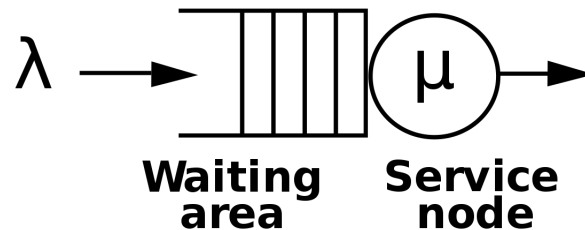
istnieje dla każdego  $k$ , mówimy, że proces osiąga stan równowagi. Dla procesu jednorodnego osiągnięcie stanu równowagi jest możliwe tylko gdy  $\lambda < \mu$  (prędkość narodzin jest mniejsza od prędkości śmierci).

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)

## Przykład — kolejka M/M/1



W teorii kolejek rozważa się proces, w którym

- sygnały przybywają zgodnie z procesem Poissona o parametrze  $\lambda$ , przesuając system ze stanu  $i$  do stanu  $i+1$ ,
- sygnał jest obsługiwany zgodnie z rozkładem wykładniczym, dla którego średni czas oczekiwania wynosi  $1/\mu$ ; po obsłudze układ przechodzi ze stanu  $i$  do  $i-1$ ,
- układ jest obsługiwany przez pojedynczy serwer.

Zakładamy, że bufor oczekiwania ma nieskończoną pojemność. Stan  $i$  oznacza, że na obsłużenie czeka  $i$  sygnałów (klientów, samochodów przed szlabanem, ...). Jest to jednorodny proces narodzin i śmierci. Aby był on stacjonarny, musi zachodzić  $\lambda < \mu$ . Proces ten jest opisywany przez układ równań

$$\frac{dp_0(t)}{dt} = \mu p_1(t) - \lambda p_0(t) \quad (9a)$$

$$\frac{dp_i(t)}{dt} = \lambda p_{i-1}(t) + \mu p_{i+1}(t) - (\lambda + \mu)p_i(t), \quad i = 1, 2, \dots \quad (9b)$$

$\{p\}_{i=0}^{\infty}$  jest rozkładem prawdopodobieństwa obsadzenia poszczególnych stanów, z warunkiem początkowym

$$\sum_{i=0}^{\infty} p_i = 1. \quad (9c)$$

## 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

$$P_{1|1}(k, 2|l, 1) = W_{kl} . \quad (10)$$

$W_{kl}$  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

$$\mathbf{p}(2) = \mathbf{W}\mathbf{p}(1). \quad (11)$$

## 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

$$\mathbf{W} = \begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{3} & \frac{2}{3} \\ \frac{2}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & 0 \end{bmatrix} \quad (12a)$$

$$\mathbf{p}(1) = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{p}(2) = \mathbf{W}\mathbf{p}(1) = \begin{bmatrix} 0 \\ \frac{2}{3} \\ \frac{1}{3} \end{bmatrix},$$

$$\mathbf{p}(3) = \mathbf{W}\mathbf{p}(2) = \begin{bmatrix} \frac{4}{9} \\ \frac{3}{9} \\ \frac{2}{9} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{p}(4) = \mathbf{W}\mathbf{p}(3) = \begin{bmatrix} \frac{7}{27} \\ \frac{13}{27} \\ \frac{7}{27} \end{bmatrix}, \quad \dots \quad (12b)$$

## Równowagowy rozkład prawdopodobieństwa

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

$$\mathbf{W}\mathbf{p}^* = \mathbf{p}^* . \quad (13)$$

Mówimy, że  $\mathbf{p}^*$  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

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

Dla przykładu ze strony 24,

$$\mathbf{p}^* = \begin{bmatrix} \frac{5}{16} \\ \frac{7}{16} \\ \frac{4}{16} \end{bmatrix} . \quad (14)$$

## Równanie master

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

$$P_{1|1}(y_2, t_2 | y_1, t_1) = T_\tau(y_2 | y_1), \quad \tau = t_2 - t_1. \quad (15)$$

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

$$T_{\tau+\tau'}(y_3 | y_1) = \int T_{\tau'}(y_3 | y_2) T_\tau(y_2 | y_1) dy_2. \quad (16)$$

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

*Postulujemy*, że w bardzo małym czasie  $\tau'$

- przejście nie nastąpi, lub, jeśli przejście nastąpi,
- prawdopodobieństwo przejścia jest proporcjonalne do  $\tau'$ :

$$T_{\tau'}(y_2|y_1) = \left(1 - \tau' \int W(y_2|y_1) dy_2\right) \delta(y_2 - y_1) + \tau' W(y_2|y_1) + o(\tau'), \quad (17)$$

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 (17) do (16):

$$\begin{aligned} T_{\tau+\tau'}(y_3|y_1) &= \left(1 - \tau' \int W(y_2|y_3)dy_2\right) T_{\tau}(y_3|y_1) \\ &+ \tau' \int W(y_3|y_2)T_{\tau}(y_2|y_1)dy_2, \end{aligned} \quad (18)$$

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

$$\frac{\partial}{\partial \tau} T_{\tau}(y_3|y_2) = \int (W(y_3|y_2)T_{\tau}(y_2|y_1) - W(y_2|y_3)T_{\tau}(y_3|y_1)) dy_2. \quad (19)$$

Na koniec mnożymy obie strony (19) przez  $P_1(y_1)$ , całkujemy po  $y_1$  i dostajemy **równanie master**:

$$\frac{\partial P(y, t)}{\partial t} = \int (W(y|y')P(y', t) - W(y'|y)P(y, t)) dy'. \quad (20)$$

Dla łańcuchów Markowa równanie master ma szczególnie wygodną postać:

$$\frac{dp_n(t)}{dt} = \sum_{n'} [W_{nn'}p_{n'}(t) - W_{n'n}p_n(t)]. \quad (21)$$

**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. **Przykład:** Układ równań (9), opisujący kolejkę M/M/1, jest równaniem master.

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 (21) widzimy, że oznacza to, iż

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

Warunek równowagi (22) oznacza, w każdym stanie suma “wpływów” i “wypływów” 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 (22) położymy

$$\forall n, n': \quad W_{nn'}p_{n'}(t) - W_{n'n}p_n(t) = 0 \quad (23)$$

warunek równowagi rzecz jasna będzie spełniony. Warunek (23) 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 (23) wynika (22), 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  $m, n, s$

$$W_{nm}W_{sn}W_{ms} = W_{sm}W_{ns}W_{mn} \quad (24)$$

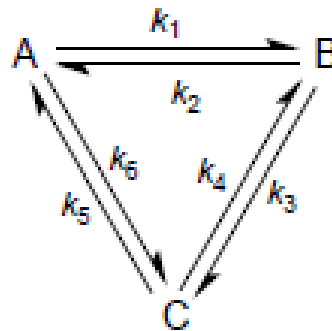
i podobnie dla bardziej rozbudowanych cykli. Łańcuch Markowa, który spełnia warunek równowagi szczegółowej, nazywamy odwracalnym.

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 (22). 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 zespole 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

$$k_1 k_3 k_5 = k_2 k_4 k_6 . \quad (25)$$

Jeśli warunek (25) nie byłby spełniony, układ nie osiągałby stanu równowagi. Konieczność spełnienia warunku (25) wynika z mikroskopowej odwracalności reakcji.

## Ciągłe rozkłady prawdopodobieństwa

Mamy równanie master dla ciągłych rozkładów prawdopodobieństwa:

$$\frac{\partial P(y, t)}{\partial t} = \int \left( W(y|y')P(y', t) - W(y'|y)P(y, t) \right) dy'. \quad (26)$$

$W(y|y')$  jest prawdopodobieństwem przejścia na jednostkę czasu ze stanu  $y'$  do stanu  $y$ . Potraktujmy je jako funkcję stanu początkowego i przesunięcia:

$$W(y|y') = W(y'; r), \quad r = y - y'. \quad (27)$$

W tych oznaczeniach równanie master przyjmuje postać

$$\frac{\partial P(y, t)}{\partial t} = \int W(y - r; r)P(y - r, t)dr - P(y, t) \int W(y; -r)dr. \quad (28)$$

Interesuje nas co dzieje się dla *małych* przeskoków.

Założenie o małych przeskokach oznacza, że

- $W(y'; r)$  jako funkcja  $r$  ma ostre maksimum w zerze,
- $W(y'; r)$  zmienia się powoli jako funkcja  $y'$ ,
- $P(y, t)$  także zmienia się powoli jako funkcja  $y$ .

Przy tych założeniach rozwijamy funkcję podcałkową w pierwszym wyrazie prawej strony (28) w szereg Taylora po  $r$  do drugiego rzędu, otrzymujemy

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(y, t)}{\partial t} = & - \int r \frac{\partial}{\partial y} \{W(y; r)P(y, t)\} dr \\ & + \frac{1}{2} \int r^2 \frac{\partial^2}{\partial y^2} \{W(y; r)P(y, t)\} dr . \end{aligned} \quad (29)$$

Zmieniwszy kolejność całkowania i różniczkowania w (29), otrzymamy następujące **równanie Fokkera-Plancka**:

$$\frac{\partial P(y, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial y} \{A(y)P\} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial y^2} \{B(y)P\}, \quad (30a)$$

$$A(y) = \int r W(y; r) dr, \quad (30b)$$

$$B(y) = \int r^2 W(y; r) dr. \quad (30c)$$

Równanie Fokkera-Plancka jest równaniem różniczkowym cząstkowym na zależną od czasu gęstość prawdopodobieństwa  $P(y, t)$ .  $A(t)$  i  $B(t)$  noszą nazwę **momentów przeskoku**. Są to, odpowiednio, wartość oczekiwana przesunięcia **na jednostkę czasu**, jeżeli wychodzimy ze stanu  $y$ , oraz wartość oczekiwana kwadratu takiego przesunięcia. Całkowania rozciągają się na całą dziedzinę możliwych przeskoków.

## Biały szum gaussowski

Cząstka w bardzo krótkim przedziale czasowym  $[t, t + \Delta t]$  wykonuje skok o długości  $\xi(t)$  (dla uproszczenia założymy, że ruch jest jednowymiarowy), przy czym

$$\begin{cases} \xi(t) \text{ jest zmienną gaussowską} \\ \langle \xi(t) \rangle = 0 \\ \langle \xi(t)\xi(t') \rangle = \sigma^2 \delta(t - t') \end{cases} \quad (31)$$

Proces (31) nazywamy *gaussowskim białym szumem*. Przymiotnik “biały” pochodzi stąd, że funkcja korelacji nie wyróżnia żadnych częstości. Z ostatniego z warunków (31) wynika natychmiast, że

$$\langle (\xi(t))^2 \rangle = \sigma^2 \quad (32)$$



**Bardzo ważny komentarz:** Obecność delty Diraca w (31), a więc stwierdzenie, że w białym szumie gaussowskim nie ma żadnych korelacji czasowych, oznacza tyle, że wszelkie charakterystyczne skale czasowe obecne w *fizycznym* procesie, który *modelujemy* poprzez (31), są o wiele mniejsze, niż skale czasowe dostępne nam w pomiarze. Pomiary, odbywające się za pomocą jakiegoś procesu makroskopowego, są o wiele wolniejsze, niż “fundamentalne” procesy fizyczne. **W efekcie to, co obserwujemy, jest uśrednione po bardzo wielu zdarzeniach “fundamentalnych”.**

Przykład: Typowy pomiar fizyczny zajmuje rzędu  $10^{-7} - 10^0$ s. Charakterystyczny czas wibracji atomów w sieci krystalicznej jest rzędu  $10^{-15}$ s — ludzkość obecnie zbiera się do dokonywania pomiarów z taką dokładnością czasową. Cząstka brownowska doznaje w warunkach normalnych około  $10^{21}$  zderzeń na sekundę. Interwałów czasowych rzędu  $10^{-21}$ s nie jesteśmy w stanie mierzyć przy użyciu żadnej dostępnej nam aparatury.

## Ruch Browna

Niech cząstka wykonuje skoki modelowane przez (31). Natychmiast widać, że dla tego procesu momenty przeskoku (patrz (30)) wynoszą

$$A(t) = 0, \quad B(t) = \sigma^2,$$

a zatem równanie Fokkera-Plancka przybiera postać **równania dyfuzji**

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = \frac{1}{2} \sigma^2 \frac{\partial^2 P(x, t)}{\partial x^2}, \quad (33)$$

którego rozwiązaniem z warunkiem początkowym  $P(x, 0) = \delta(x)$  jest

$$P(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp\left[-\frac{x^2}{4Dt}\right], \quad (34)$$

gdzie  $D = \sigma^2/2$ . Jest to proces Wienera, o którym była mowa powyżej.

## Cząstka Rayleigha

Przyjmijmy, że cząstkę brownowską obserwujemy w mniejszej skali czasowej: przedziały  $\Delta t$  są małe w porównaniu z czasem, w jakim następuje relaksacja *prędkości*. Cząstka podlega przy tym tłumieniu na skutek tarcia lepkości: siła oporu jest proporcjonalna do prędkości, ale ma przeciwny znak,  $dv/dt = -\gamma v$ . Mamy zatem

$$A(t) = \frac{\langle \Delta v \rangle}{\Delta t} = -\gamma v, \quad B(t) = a_2 = \text{const} = 2\gamma kT, \quad (35)$$

gdzie ostatnia równość pochodzi z klasycznej termodynamiki. Równanie Fokkera-Plancka przybiera postać

$$\frac{\partial P(v, t)}{\partial t} = \gamma \frac{\partial}{\partial v} (vP) + \frac{a_2}{2} \frac{\partial^2 P}{\partial v^2}. \quad (36)$$

Równanie to nazywane jest **równaniem Ornsteina-Uhlenbecka**. Jego rozwiązaniem równowagowym jest

$$P(v) = \sqrt{\frac{M}{2\pi kT}} \exp\left[-\frac{M}{2kT}v^2\right]. \quad (37)$$

Procesowi Ornsteina-Uhlenbecka odpowiada funkcja przejścia

$$T_\tau(v_2|v_1) = \sqrt{\frac{M}{2\pi kT(1 - e^{-2\gamma\tau})}} \exp\left[-\frac{M}{kT} \frac{(v_2 - v_1 e^{-\gamma\tau})^2}{2(1 - e^{-2\gamma\tau})}\right] \quad (38)$$

Funkcja autokorelacji procesu Ornsteina-Uhlenbecka jest proporcjonalna do  $\exp(-\gamma\tau)$ . Można pokazać, że proces ten jest jedynym stacjonarnym, gaussowskim procesem Markowa.

## Fenomenologiczne uzasadnienie równania dyfuzji

Równanie dyfuzji było znane zanim sformułowano teorię procesów Markowa i zanim podano mikroskopowe wyjaśnienie ruchów Browna.

Przypuśćmy, że  $B(y) = \text{const} = 2D$ , a zamiast o prawdopodobieństwach, mówimy o zależnej od czasu gęstości jakiejś substancji,  $\phi$ . Wówczas równanie Fokkera-Plancka przyjmuje postać równania ciągłości dla gęstości:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial J}{\partial y} = 0, \quad (39)$$

gdzie strumień  $J$  ma postać

$$J = -D \frac{\partial \phi}{\partial y} + A(y)\phi. \quad (40)$$

Można przyjąć, że równanie to, zwane pierwszym prawem Ficka, jest równaniem fenomenologicznym. Pod nieobecność dryfu ( $A(y) \equiv 0$ ) głosi ono, że strumień jest proporcjonalny do gradientu gęstości i skierowany przeciwnie, niż gradient (dyfuzja stara się zniwelować gradienty).

W przypadku wielowymiarowym równanie dyfuzji (bez dryfu) ma postać

$$\frac{\partial \phi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = D \nabla^2 \phi(\mathbf{x}, t) . \quad (41)$$

## Dyfuzja i dyfuzja anomalna

Dla cząstki brownowskiej, czyli opisywanej procesem Wienera, zachodzi  $\langle x^2(t) \rangle = 2Dt$ . Zależność ta nosi nazwę *relacji Einsteina*. Można ją uogólnić i rozważać procesy, dla których

$$\langle x^2(t) \rangle \sim t^\alpha \quad (42)$$

Po lewej stronie mamy średni kwadrat przesunięcia w czasie  $t$ . Gdy  $\alpha = 1$ , mamy normalną dyfuzję. Gdy  $0 < \alpha < 1$ , cząstka pokrywa mniejszy obszar, niż w dyfuzji normalnej w takim samym czasie. Taki ruch nazywamy *subdyfuzją*. Gdy  $\alpha > 1$ , cząstka pokrywa większy obszar; taki ruch nazywamy *superdyfuzją*. Ogólnie przypadki  $\alpha \neq 1$  nazywamy *dyfuzją anomalną*.

**Komentarz:** Nie jest to, tak naprawdę, ściśle. O tym, czy ruch jest dyfuzją normalną czy anomalną decydują procesy mikroskopowe odpowiedzialne za ten ruch. Znane są przypadki, w których  $\alpha = 1$ , ale mechanizm mikroskopowy jest inny od dyfuzyjnego, więc także zaliczane są do dyfuzji anomalnej.

Przykładem subdyfuzji jest ruch, w którym “dyfundująca” cząstka jest pułapkowana — na przykład ruch ładunków elektrycznych w półprzewodniku amorficznym. W superdyfuzji od czasu do czasu występują bardzo długie skoki, a trajektoria nie musi być ciągła.



## Cząstka brownowska w polu grawitacyjnym

Niech na cząstkę brownowską działa doatkowa, stała siła, na przykład siła  $-Mg$  działająca przeciwnie do pionowego położenia cząstki. Na cząstkę działa siła tarcia (lepkości), więc średnia prędość dryfu  $-g/\gamma$ , gdzie  $\gamma$  jest współczynnikiem tarcia. Ta prędość dodaje się do prędości cząstki brownowskiej, a więc mamy teraz

$$A(y) = -\frac{g}{\gamma}, \quad B(y) = 2D = \text{const}.$$

Równanie Fokkera-Plancka ma postać

$$\frac{\partial P(y, t)}{\partial t} = \frac{g}{\gamma} \frac{\partial P}{\partial y} + D \frac{\partial^2 P}{\partial y^2}. \quad (43)$$

Nie ma ono rozwiązania stacjonarnego. Jeśli jednak przyjmiemy, że w  $y = 0$  jest ścianka odbijająca, równanie (43) wystarczy rozwiązać dla  $y \geq 0$

z warunkiem, że strumień znika dla  $y = 0$ :

$$\frac{g}{\gamma} P + D \frac{\partial P}{\partial y} = 0 \text{ dla } y = 0. \quad (44)$$

Rozwiązaniem równowagowym jest

$$P(y) \sim \exp \left[ -\frac{Mg}{kT} y \right]. \quad (45)$$

Jest to tak zwany *wzór barometryczny*.

**Uwaga:** Warunek znikania strumienia na ogół *nie działa* dla procesów wielowymiarowych!

## Dyfuzja w polu sił zewnętrznych

Uogólniając powyższy przykład, jeśli na cząstkę działa siła pochodząca od pewnego pola sił  $F(y)$ , równanie Fokkera-Plancka (w jednostkach fizycznych) przybiera postać

$$\frac{\partial P(y, t)}{\partial t} = -\frac{1}{M\gamma} \frac{\partial}{\partial y} (F(y)P) + D \frac{\partial^2 P}{\partial y^2}. \quad (46)$$

## Stacjonarne rozwiązanie równania Fokkera-Plancka

Rozważmy równanie Fokkera-Plancka w zewnętrznym polu sił (46). Jeżeli siły nie zależą od czasu, można zastanawiać się, czy istnieje rozwiązanie *stacjonarne*, czyli czy istnieje *niezależny od czasu rozkład prawdopodobieństwa* spełniający to równanie.

Równowaga może wystąpić wtedy, gdy wpływy zewnętrznego pola sił i sił stochastycznych prowadzących do dyfuzji w jakimś sensie się balansują. Praca wykonywana przez zewnętrzne siły musi być rozpraszana przez fluktuacje (mikroskopowy mechanizm tarcia), gdyż w przeciwnym razie zewnętrzne siły jakoś zmieniłyby układ. Efekt sił stochastycznych musi być powstrzymywany przez zewnętrzny potencjał, gdyż w przeciwnym wypadku układ zostałby zmodyfikowany na skutek dyfuzji. *Nie ma dyssypacji*

bez fluktuacji. Nie ma fluktuacji bez dyssypacji. Pomijając formalizm matematyczny, jest to istota *twierdzenia fluktuacyjno-dyssypacyjnego*.

Jeżeli rozwiązanie stacjonarne istnieje,  $\frac{\partial P(y)}{\partial t} = 0$  i otrzymujemy

$$-\frac{1}{M\gamma}F(y)P(y) + D\frac{dP(y)}{dy} = 0, \quad (47)$$

którego rozwiązaniem jest

$$P(y) = \mathcal{N} \exp\left(\frac{1}{MD\gamma} \int F(y) dy\right), \quad (48)$$

gdzie  $\mathcal{N} > 0$  jest stałą normalizacyjną.  $P(y)$  jest rozkładem prawdopodobieństwa, a zatem

$$\mathcal{N} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(\frac{1}{MD\gamma} \int F(y) dy\right) dy = 1. \quad (49)$$

Istnienie całki w (49) jest warunkiem koniecznym istnienia stacjonarnego rozwiązania równania Fokkera-Plancka.

## Dyfuzja w polu potencjału

Jeżeli pole sił, o jakim mowa była wyżej, jest potencjalne,  $F(y) = -dU(y)/dy$  (w przypadku jednowymiarowym), (48) daje

$$P(y) = \mathcal{N} \exp\left(-\frac{1}{MD\gamma} U(y)\right), \quad (50)$$

a stałą  $\mathcal{N}$  także oblicza się z warunku normalizacji.

## Przykład: Cząstki brownowskie w potencjale harmonicznym

Jeżeli gaz nieoddziałujących cząstek jest uwięziony w potencjale harmonicznym  $U(y) = \frac{1}{2}ky^2$ ,

$$P(y) = \sqrt{\frac{k}{2\pi MD\gamma}} \exp\left(-\frac{ky^2}{2MD\gamma}\right). \quad (51)$$

Większość cząstek przebywa blisko centrum potencjału, ale istnieje niezerowe, choć **bardzo** małe, prawdopodobieństwo oddalenia się na dowolnie dużą odległość. Gaussowski rozkład (51) ma, rzecz jasna, skończoną średnią i skończoną wariancję. Gdyby kształt potencjału był inny tak, w ogólności, nie musiałoby być.



Jeśli w równaniu Fokkera-Plancka wyraz  $B(y) \neq \text{const}$ , analiza staje się znacznie trudniejsza. Oznacza to obecność *szumu parametrycznego*, a wynik zależy od **interpretacji procesu stochastycznego**: całki stochastyczne nie są dobrze zdefiniowane w sensie Riemanna i trzeba je dookreślić (interpretacja Ito, interpretacja Stratonowicza, interpretacja antykauzalna). Zagadnienie to wykracza poza ramy niniejszego wykładu.