Wykład 2

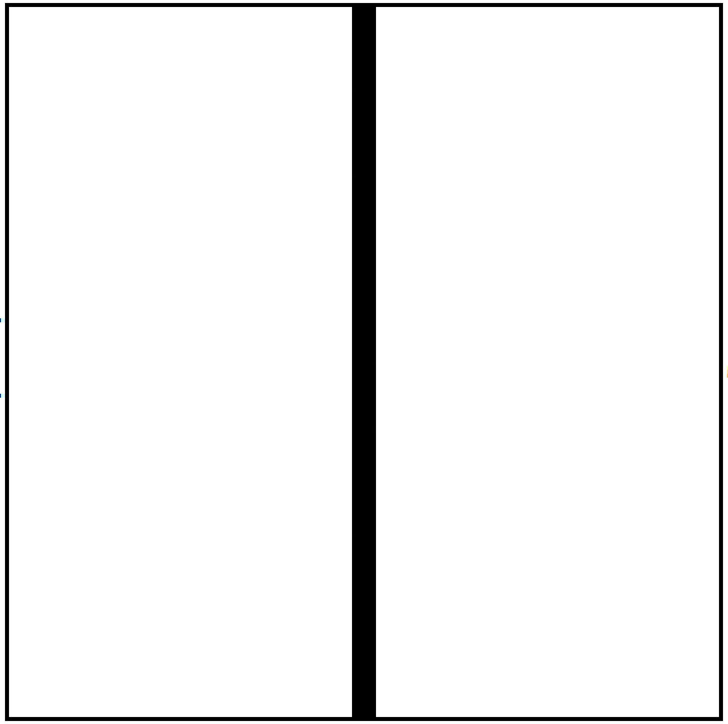
Przykład zastosowania teorii prawdopodobieństwa: procesy stochastyczne (Markova)

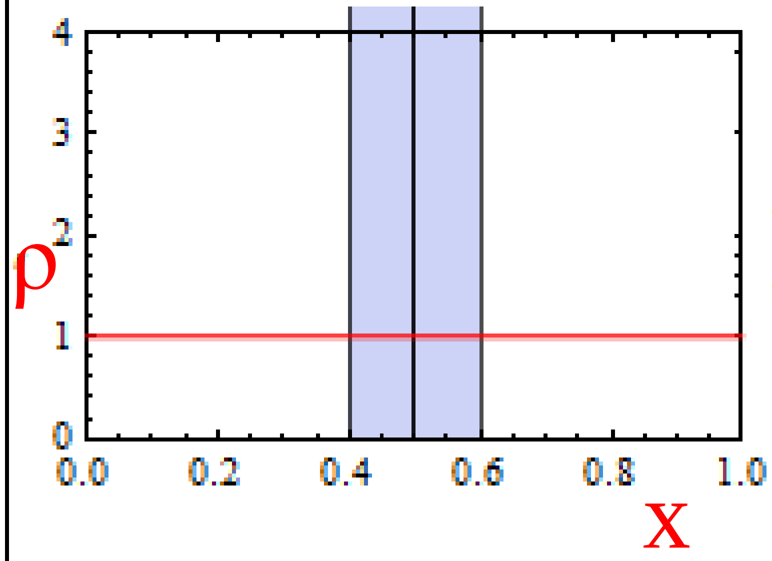
1. Procesy Markova: definicja
2. Równanie Chapmana-Kołmogorowa-Smoluchowskiego
3. Przykład dyfuzji w kapilarze
4. Równanie Master
5. Samodzielne studia: Równania Master dla procesów Markova jednorodnych w czasie i przestrzeni w granicy małych czasów.

Demonstracje: dyfuzja gazu po usunięciu ścianek

Dyfuzja

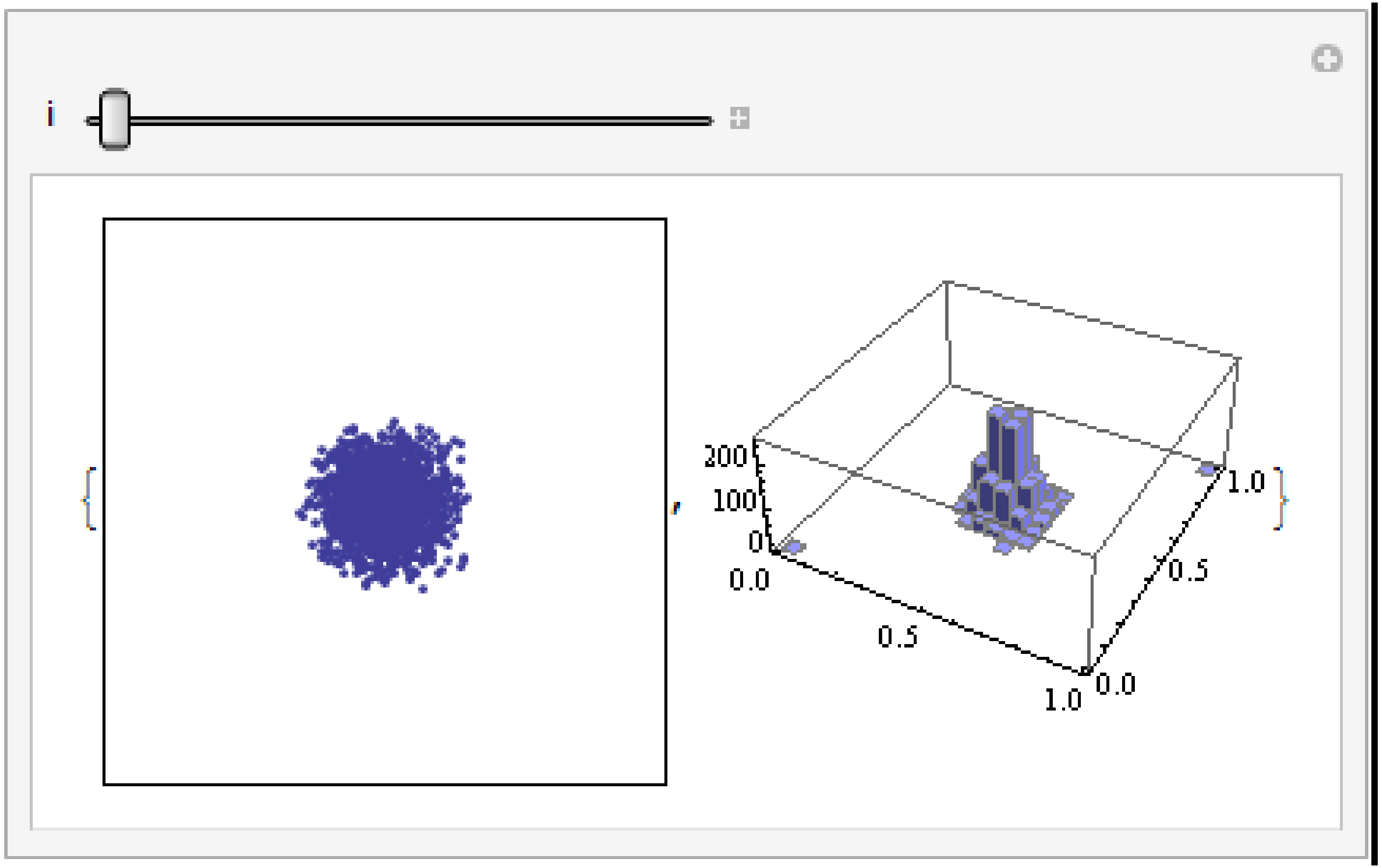
Rozkład $\rho(x,t) \approx N(x)/N$





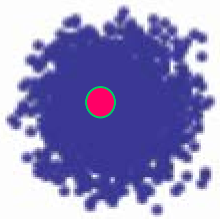
Jednowymiarowa analiza

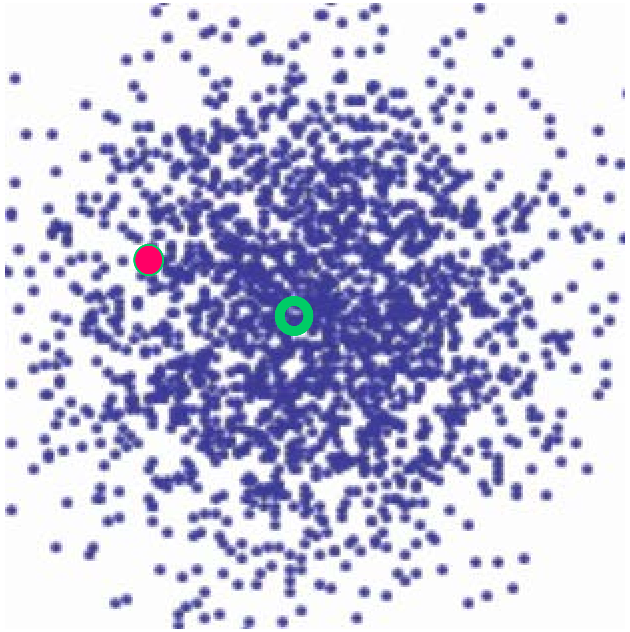
(kropla atramentu wstrzyknięta do płaskiego naczynia z wodą)



Dyfuzja Browna

Równania Langevina (cząstka Browna, 1907):



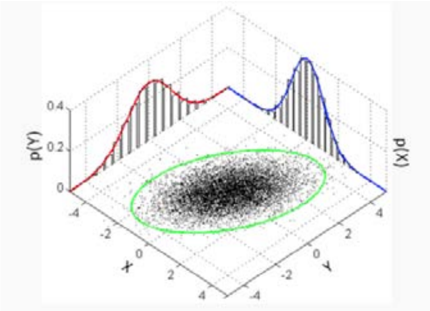


$$m \frac{d^2}{dt^2} \boldsymbol{x}(t) = -\gamma\, \boldsymbol{v}(t) + \boldsymbol{F}_{losowa}(t)$$

$\boldsymbol{F}_{losowa}(t)$: zmienna gaussowska

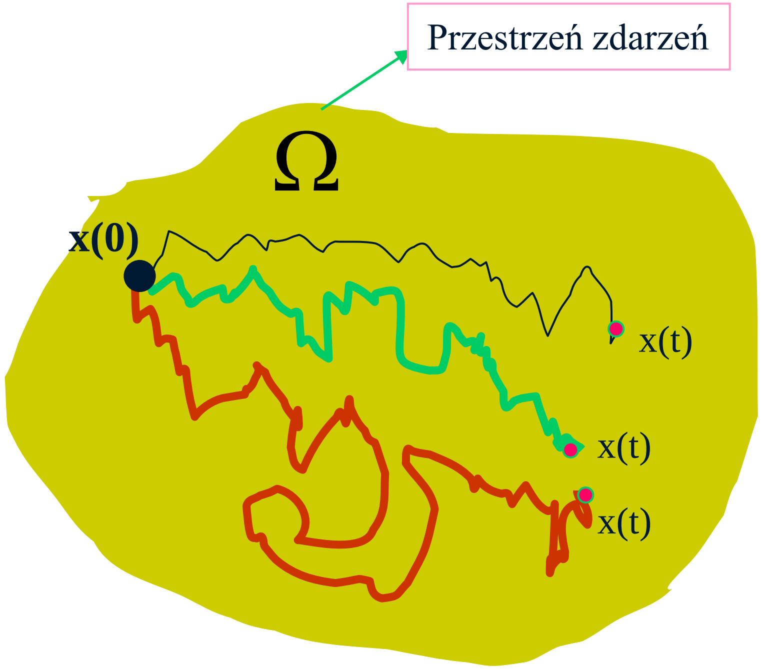
$\forall t$ $\quad < \boldsymbol{F}_{losowa}\ (t) > = 0$

$\forall\ t, t`$ $\quad < \boldsymbol{F}_{losowa}\ (t)\ \boldsymbol{F}_{losowa}(t') > = \sigma^2 \delta(t - t')$



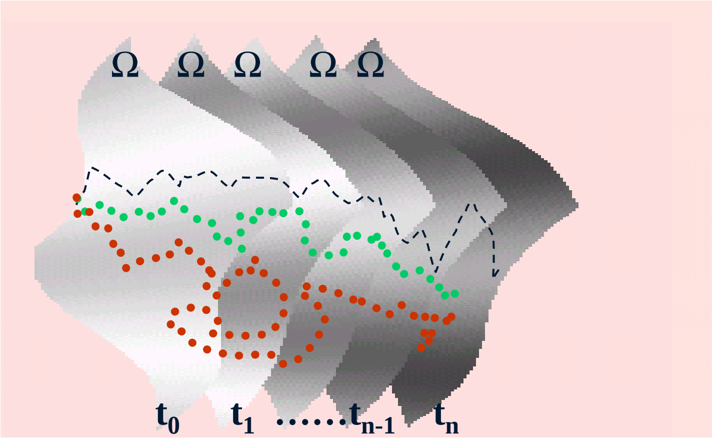
Zastosowanie teorii prawdopodobieństwa: Procesy stochastyczne

(proces stochastyczny: zastąpienie skomplikowanej dynamiki układu makroskopowego (o liczbie stopni swobody rzędu liczby Avogadro) poprzez opis probabilistyczny dynamiki jedynie kilku interesujących nas stopni swobody; wpływ nieuwzględnionych stopni swobody redukujemy do praw statystycznych). Okazuje się, że w wielu interesujących przypadkach jest to możliwe. Poznamy ważną klasę takich procesów, które w literaturze nazywają się procesami Markova.



Z każdym zdarzeniem (zmienną stochastyczną x) zwiążemy inne zdarzenie x(t), gdzie t (tutaj czas) będzie dodatkową zmienną opisującą (indeksującą) ten związek.

x(t) - zmienna losowa, bądź - w naszym przypadku – proces stochastyczny



Zakładamy chronologię czasu;
x: ciągła bądź dyskretna zmienna
$\rho \equiv P$

Równania Langevina (cząstka Browna, 1907):

$$m\,\frac{d^2}{dt^2}\boldsymbol{x}(t) = -\gamma\,\boldsymbol{v}(t) + \boldsymbol{F}_{losowa}(t)$$

$$P_k\,(x_1\,t_1,\; x_2\,t_2,\; \ldots,\; x_k\,t_k)$$

k=1…n

Zastosowanie t. p. : Procesy stochastyczne

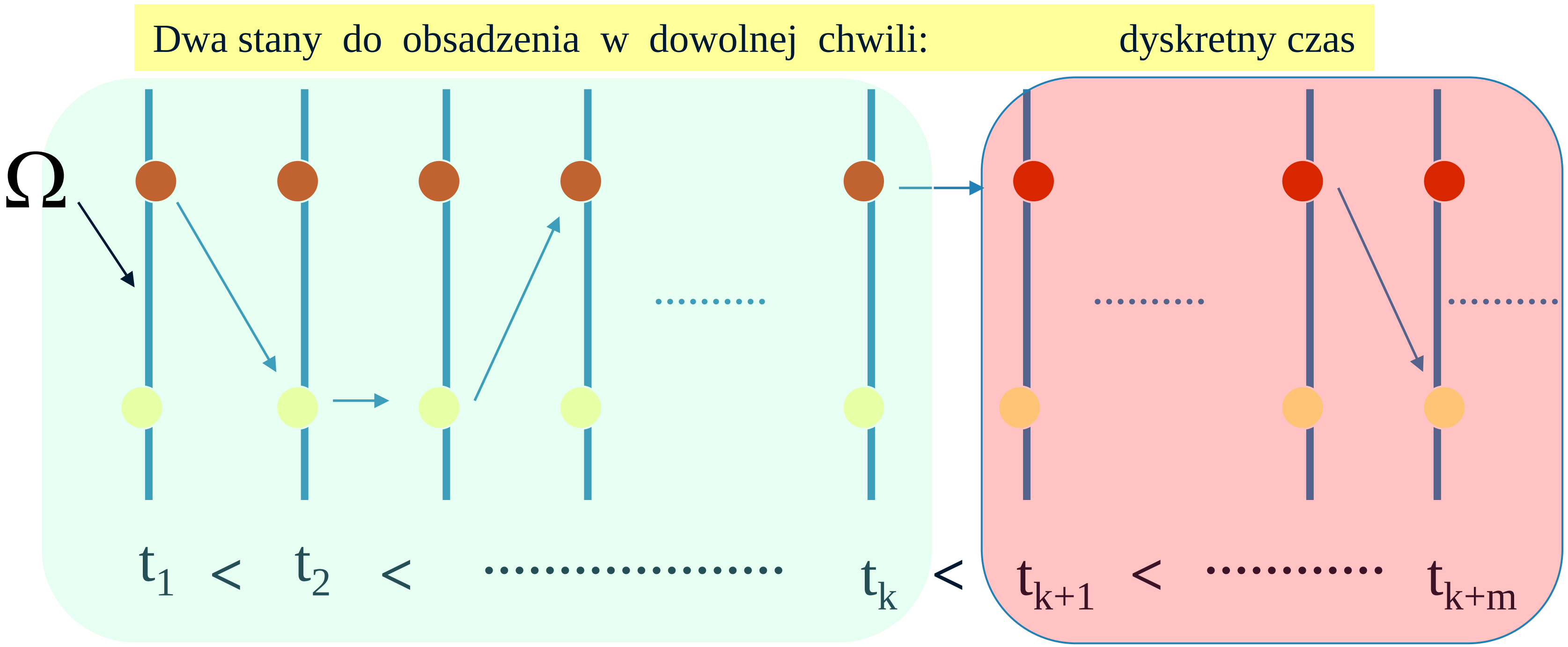
$$P(B/A) = \frac{P(B \cap A)}{P(A)}$$

Wzór Bayesa dla ciągów zmiennych losowych: gęstości i prawdopodobieństwa warunkowe dla wielowymiarowych zmiennych losowych

$$P(\overbrace{x_1, x_2, \ldots, x_k}^{B} / \overbrace{x_{k+1}, \ldots, x_n}^{A}) = \frac{P(x_1, x_2, \ldots, x_k, x_{k+1}, \ldots, x_n)}{P(x_{k+1}, \ldots, x_n)}$$

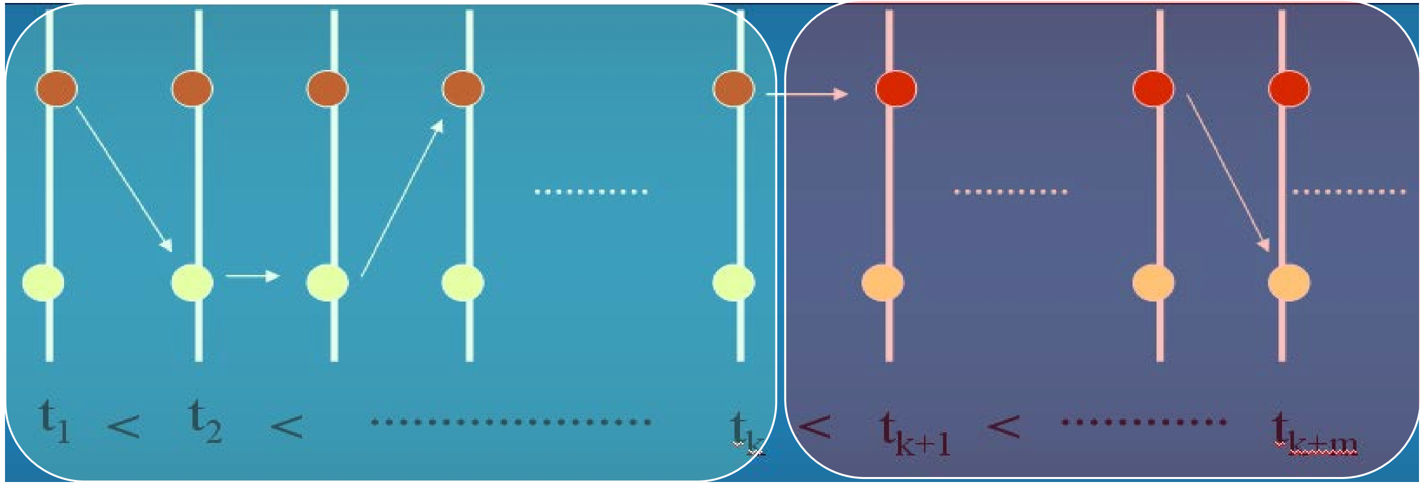
(obszerna dyskusja znajduje się w: **A. Papoulis Prawdopodobieństwo, zmienne losowe i procesy stochastyczne Str. 249)**

Procesy stochastyczne



$$P(A \cap B) = P(B/A)\,P(A) = P(A/B)\,P(B)$$

$$P_{k+m}(x_1\, t_1,\; x_2\, t_2,\; \ldots,\; x_k\, t_k,\; x_{k+1}\, t_{k+1},\; \ldots,\; x_{k+m}\, t_{k+m}) \quad ?$$



$$\boxed{P(A \cap B) = P(B/A)\,P(A)}$$

$$P_{k+m}(x_1 t_1,\ x_2 t_2,\ \dots,\ x_k t_k,\ x_{k+1} t_{k+1},\ \dots,\ x_{k+m} t_{k+m}) =$$

$$P_{m/k}(x_{k+1} t_{k+1},\ \dots,\ x_{k+m} t_{k+m} / \overbrace{x_1 t_1,\ x_2 t_2,\ \dots,\ x_k t_k}^{\text{pamięć}}) \times$$

$$P_k(x_1 t_1,\ x_2 t_2,\ \dots,\ x_k t_k) \qquad \boxed{\forall\ k,\ m}$$

Terminologia: $P_{m/k}(\dots/\dots)$ - prawdopodobieństwo warunkowe znalezienia układu w stanach x_{k+1} w chwili t_{k+1}, ….. … w stanie x_{k+m} w chwili t_{k+m} pod warunkiem, że wcześniej był w stanach x_1 w chwili t_1 ….., x_k w chwili t_k;

symbol m/k w $P_{m/k}$ informuje, że mamy prawdopodobieństwo warunkowe z k stanami przed t_k i m stanami po t_k

(zakładamy chronologię czasów jak na rysunku)

Weźmy np. m=1

$$P_{k+1}(x_1\, t_1,\ x_2\, t_2,\ \ldots,\ x_k\, t_k,\ x_{k+1}\, t_{k+1}) =$$

$$P_{1/k}(x_{k+1}\, t_{k+1}\ /\ x_1\, t_1,\ x_2\, t_2,\ \ldots,\ x_k\, t_k) \times P_k(x_1\, t_1,\ x_2\, t_2,\ \ldots,\ x_k\, t_k)$$

Przybliżenia: rozkłady niezależne (proces `nie ma pamięci`)

$$P_{1/k}(x_{k+1}\, t_{k+1}\ /\ \cancel{x_1\, t_1,\ x_2\, t_2,\ \ldots,\ x_k\, t_k}) = P_1(x_{k+1}\, t_{k+1}) \quad \forall k$$

$$\boxed{P_{k+1}(x_1\, t_1,\ x_2\, t_2,\ \ldots,\ x_k\, t_k,\ x_{k+1}\, t_{k+1}) = P_1(x_{k+1}\, t_{k+1})\, P_1(x_k\, t_k)\ \ldots\ldots\ P_1(x_1\, t_1)}$$

Weźmy np. m=1

$$P_{k+1}(x_1 t_1,\ x_2 t_2,\ \ldots,\ x_k t_k,\ x_{k+1} t_{k+1}) =$$

$$P_{1/k}(x_{k+1} t_{k+1}\ /\ x_1 t_1,\ x_2 t_2,\ \ldots,\ x_k t_k) \times P_k(x_1 t_1,\ x_2 t_2,\ \ldots,\ x_k t_k)$$

Proces Markova (z krótką pamięcią)

(proces zależy od jednej chwili czasowej wstecz)

$$P_{1/k}(x_{k+1} t_{k+1}\ /\ \cancel{x_1 t_1,\ x_2 t_2,\ \ldots,}\ x_k t_k) = P_{1/1}(x_{k+1} t_{k+1}\ /\ x_k t_k) \quad \forall k$$

$$P_{k+1}(x_1 t_1,\ x_2 t_2,\ \ldots,\ x_k t_k,\ x_{k+1} t_{k+1}) =$$

$$P_{1/1}(x_{k+1} t_{k+1}\ /\ x_k t_k)\ P_{1/1}(x_k t_k\ /\ x_{k-1} t_{k-1}) \ldots\ldots$$

$$P_{1/1}(x_2 t_2\ /\ x_1 t_1)\ P_1(x_1 t_1)$$

Proces Markova (z krótką pamięcią)

(N.C. van Kampen Procesy stochastyczne w fizyce i chemii)

Andrei Andreyevich Markov

$$P_{k+1}(x_1 t_1,\ x_2 t_2,\ \ldots,\ x_k t_k,\ x_{k+1} t_{k+1}) =$$

$$P_{1/1}(x_{k+1} t_{k+1} / x_k t_k)\ P_{1/1}(x_k t_k / x_{k-1} t_{k-1})\ \ldots\ldots$$

$$P_{1/1}(x_2 t_2 / x_1 t_1)\ P_1(x_1 t_1)$$

krótka pamięć

prawdopodobieństwo przejścia

Wszystkie funkcje rozkładu można odtworzyć ze znajomości dwóch funkcji $P_{1/1}$ *oraz* P_1

Równanie Chapmana- Kołmogorowa-Smoluchowskiego

$$P_{k+1}(x_1 t_1,\ x_2 t_2,\ \ldots,\ x_k t_k,\ x_{k+1} t_{k+1}) = P_{1/1}(x_{k+1} t_{k+1} / x_k t_k)$$
$$P_{1/1}(x_k t_k / x_{k-1} t_{k-1}) \cdot\cdot P_{1/1}(x_2 t_2 / x_1 t_1)\ P_1(x_1 t_1)$$

W.K.W. aby proces był procesem Markova

$(\forall\ t_1 < t_2 < t_3)$

$$P_1(x_1 t_1)$$
$$P_2(x_1 t_1,\ x_2 t_2) = P_{1/1}(x_2 t_2 / x_1 t_1)\ P_1(x_1 t_1) \quad \text{(ścisły wzór)}$$

$$\sum_{x_2} \boxed{P_3(x_1 t_1,\ x_2 t_2,\ x_3 t_3)} = \sum_{x_2} P_{1/1}(x_3 t_3 / x_2 t_2)\ P_{1/1}(x_2 t_2 / x_1 t_1)\ \cancel{P_1(x_1 t_1)}$$

$$\boxed{P_2(x_1 t_1,\ x_3 t_3) = P_{1/1}(x_3 t_3 / x_1 t_1)\ \cancel{P_1(x_1 t_1)}}$$

$$\boxed{P_{1/1}(x_3 t_3 / x_1 t_1) = \sum_{x_2} P_{1/1}(x_3 t_3 / x_2 t_2)\ P_{1/1}(x_2 t_2 / x_1 t_1)}$$

Równanie Chapmana- Kołmogorowa-Smoluchowskiego

W.K.W. aby proces był procesem Markova

$P_1(x_1 t_1)$

$P_2(x_1 t_1, x_2 t_2) = P_{1/1}(x_2 t_2 / x_1 t_1)\ P_1(x_1 t_1)$ (ścisły wzór)

$$\boxed{P_{1/1}(x_3 t_3 / x_1 t_1) = \sum_{x_2} P_{1/1}(x_3 t_3 / x_2 t_2)\ P_{1/1}(x_2 t_2 / x_1 t_1) \quad (\forall\, t_1 < t_2 < t_3)}$$

Konsekwencje

$\sum_{x_k} P_2(x_{k+1} t_{k+1}, x_k t_k) = P_{1/1}(x_{k+1} t_{k+1} / x_k t_k)\ P_1(x_k t_k)$ (ścisły wzór)

Przykład równania Master

$$\boxed{P_1(x_{k+1} t_{k+1}) = \sum_{x_k} P_{1/1}(x_{k+1} t_{k+1} / x_k t_k)\, P_1(x_k t_k)}$$

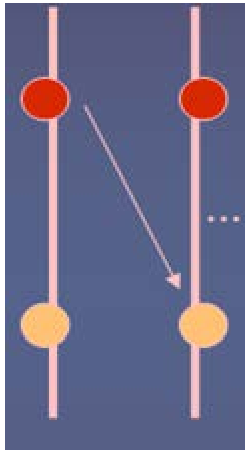
Proces Markova (podsumowanie)

Indeksy można zmieniać

$$P_1(x_1\, t_1)$$

$$P_2(x_1\, t_1,\ x_2\, t_2) = P_{1/1}(x_2\, t_2 \,/\, x_1\, t_1)\ P_1(x_1\, t_1) \quad \textbf{(ścisły wzór)}$$

$$P_{1/1}(x_3\, t_3 \,/\, x_1\, t_1) = \sum_{x_2} P_{1/1}(x_3\, t_3 \,/\, x_2\, t_2)\ P_{1/1}(x_2\, t_2 \,/\, x_1\, t_1)$$



t_1 t_2

$$\sum_{x_2} P_{1/1}(x_2\, t_2 \,/\, x_1\, t_1) = \cancel{\sum_{x_1} P_{1/1}(x_2\, t_2 \,/\, x_1\, t_1)} = 1$$

$$\sum_{x_1} P_1(x_1\, t_1) = 1$$

?

Przykład równania Master

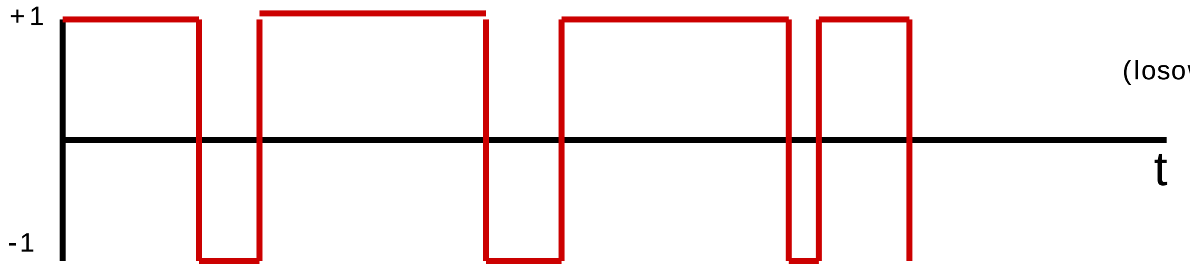
$$\boxed{P_1(x_{k+1}\, t_{k+1}) = \sum_{x_k} P_{1/1}(x_{k+1}\, t_{k+1} \,/\, x_k\, t_k)\, P_1(x_k\, t_k)}$$

Przykłady prawdopodobieństw warunkowych spełniających r.
Chapmana- Kołmogorowa-Smoluchowskiego (ćwiczenia):

Dychotomiczny proces Markova: $s = \pm 1$

$$P_{1/1}(s_2 t_2 / s_1 t_1) = \frac{1}{2}\left[1 + e^{-2\gamma(t_2 - t_1)}\right] \delta_{s_1 s_2} + \frac{1}{2}\left[1 - e^{-2\gamma(t_2 - t_1)}\right] \delta_{s_1 - s_2}$$

$$P_1(s\,t) = \frac{1}{2}[\delta_{s\,1} + \delta_{s\,-1}]$$



(losowy telegrafista)

(dwustanowy proces Markova: losowy ciąg impulsów)

Przykłady prawdopodobieństw warunkowych spełniających r.
Chapmana- Kołmogorowa-Smoluchowskiego:

Proces Wienera – Levy :

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

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

$$t_2 > t_1; \quad -\infty < y_\alpha < \infty$$

Jest to matematyczny model ruchów Browna w jednym wymiarze przestrzennym (późniejszy przykład dyfuzji w kapilarze). Funkcja rozkładu P_1 jest gęstością położenia (y) cząstki podlegającej jednowymiarowej dyfuzji. (późniejszy przykład z dyfuzją w kapilarze)

Przy założeniu $P_1(y_1,0) = \delta(y_1)$ otrzymujemy Gaussowski rozkład położeń w chwilach późniejszych.

Przykłady prawdopodobieństw warunkowych spełniających r.
Chapmana- Kołmogorowa-Smoluchowskiego:

Rozkład prędkości cząstki Browna: (Proces Ornsteina – Uhlenbecka)

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

$$P_1(y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{y^2}{2}\right]$$

$$< y_1(t_1)\; y_2(t_2) > \; = e^{-(t_2 - t_1)}$$

$$t_2 > t_1; \quad -\infty < y_\alpha < \infty$$

Tutaj zmienna \`y\` pełni rolę prędkości cząstki (w jednym wymiarze)

Przykłady prawdopodobieństw warunkowych spełniających r. Chapmana- Kołmogorowa-Smoluchowskiego:

Proces Poissona : $n = 0, 1, 2, \ \ldots \ t_2 \geq t_1 \geq 0; \ \ n_2 \geq n_1$

$$P_{1/1}(n_2\, t_2 / n_1\, t_1) = \frac{[\lambda (t_2 - t_1)]^{n_2 - n_1}}{(n_2 - n_1)!} e^{-\lambda (t_2 - t_1)}$$

$$= 0, \quad n_2 < n_1$$

Proces Poissona zlicza zdarzenia jakie zaszły do danej chwili;
$1/\lambda$ jest średnim czasem oczekiwania na kolejne zdarzenie.

Z warunku początkowego:
$P_1(n_1,0) = \delta_{n_1,0}$ możemy wyznaczyć P_1 w dowolnej innej chwili czasowej:

$$P_1(n_1, t_1) = \frac{e^{-\lambda t_1} (\lambda t_1)^{n_1}}{n_1!}$$

(funkcje $P_{1/1}$ oraz P_1 definiują proces Markova)

Dyskretne Procesy Markova

$$\left(\begin{array}{c} n: \text{ dyskretne stany } \quad 1, 2, \quad \ldots, \quad M \\ t: \text{ dyskretny czas} \end{array} \right)$$

$$P_1 \equiv P$$

$$P_{1/1}(n\,t / n_0\,t_0) = \sum_{m=1}^{M} P_{1/1}(n\,t / m\,\tau)\, P_{1/1}(m\,\tau / n_0\,t_0)$$

$$P(n\,t) = \sum_{m=1}^{M} P_{1/1}(n\,t / m\,\tau)\, P(m\,\tau)$$

$$\sum_{n=1}^{M} P_{1/1}(n\,t / m\,\tau) = 1 \qquad t > \tau > t_0$$

Dla dyskretnych procesów najważniejsza jest macierz między kolejnymi krokami czasowymi: $P_{1/1}(n\,t+1 / m\,t)$ nazywana w literaturze macierzą przejść

oznaczmy:

$$P_{1/1}(n\,t+1 / m\,t) \stackrel{df}{=} W_{nm}(t) \geq 0$$

Dyskretne Procesy Markova

Jeśli dodatkowo W nie zależy of czasu, wtedy W: dowolna macierz nieujemnych liczb taka, że

$$\sum_{n=1}^{M} W_{nm} = 1; \qquad W \in \mathbb{R}^{M\times M}$$

Obecnie twierdzenie C.K.S. jest automatycznie spełnione i
wyraża regułę mnożenia macierzy:

$$W_{mn}^{t_3-t_1} = \sum_k W_{mk}^{t_3-t_2} W_{kn}^{t_2-t_1}$$

Stany stacjonarne: P*=W P*

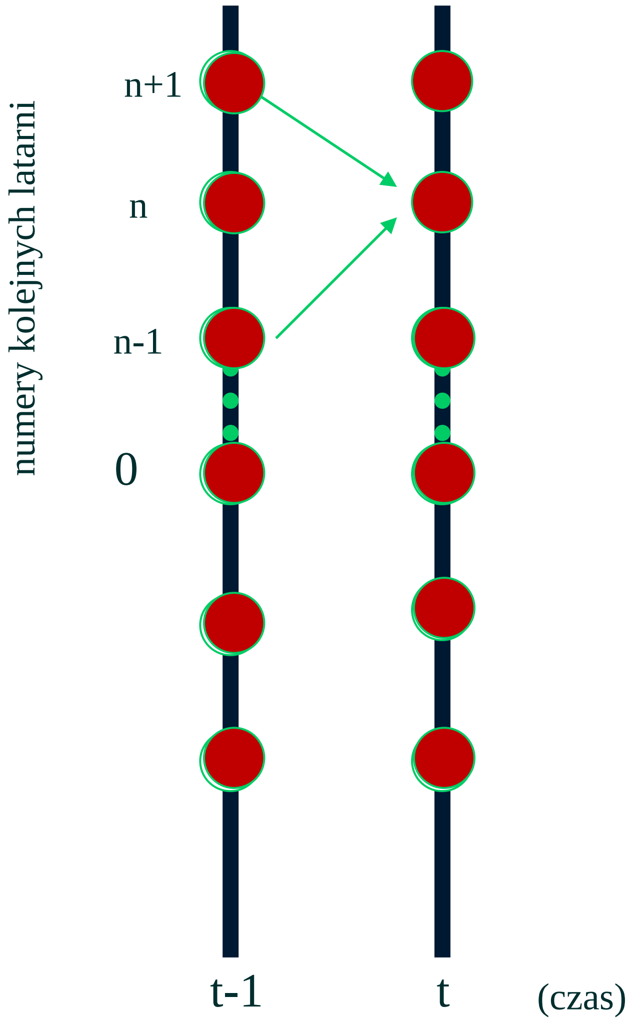
Stany stacjonarne: wektory własne macierzy W do wartości własnej = 1

Pokazać, że dla procesów translacyjnych w czasie,
tj. gdy $W_{nm}(t)$ nie zależy od t:

$P_{1/1}(nt/m\tau) = (W^{t-\tau})_{nm}$ oraz $P(nt) = (W^{t})_{nm}\, P(m0)$

Przykład 1

Pijak błądzi po nieskończonej prostej od latarni do latarni (pełne rozwiązanie-ćwiczenia): (P_1=P).
Założenie: w jednostce czasu może przejść jedynie do sąsiednich latarni z prawdopodobieństwem 1/2



$$P(n,t) \equiv P_n(t) = \sum_m W_{nm} P_m(t-1)$$

$$W_{nm} = \frac{1}{2}\delta_{n,m-1} + \frac{1}{2}\delta_{n,m+1}$$

r. Master

$$P_n(t) = \frac{1}{2}P_{n-1}(t-1) + \frac{1}{2}P_{n+1}(t-1)$$

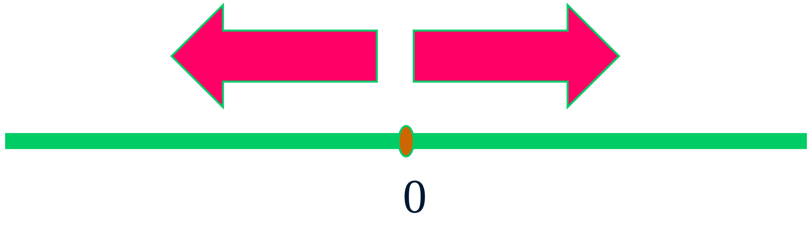
$$P_0(0) = 1 \qquad P_n(0) = 0 \qquad n \neq 0$$

Przykład 2 : dyfuzja Brownowska w kapilarze

$$P_{1/1}(x_3\, t_3 \,/\, x_1\, t_1) = \sum_{x_2} P_{1/1}(x_3\, t_3 \,/\, x_2\, t_2)\;\; P_{1/1}(x_2\, t_2 \,/\, x_1\, t_1)$$

Dyfuzja w nieskończonej jednowymiarowej kapilarze
Proces jednorodny przestrzennie i czasowo:

$$\sum_{x_2} \rightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} d\, x_2$$

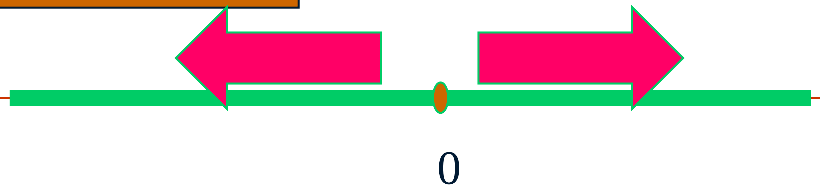


$$P_{1/1}(x_3 - x_1,\, t_3 - t_1) = \int_{-\infty}^{+\infty} P_{1/1}(x_3 - x_2,\, t_3 - t_2)\;\; P_{1/1}(x_2 - x_1,\, t_2 - t_1)\, d\, x_2$$

$$\left.\begin{aligned} t_3 - t_1 &= t \\ t_3 - t_2 &= t_0 \end{aligned}\right\} \; t_2 - t_1 = t - t_0$$

$$\boxed{\begin{aligned} x_3 - x_1 &= x \\ x_2 - x_1 &= y \\ x_3 - x_2 &= x - y \\ d\, x_2 &= d\, y \end{aligned}}$$

Dyfuzja w nieskończonej jednowymiarowej kapilarze
Proces jednorodny przestrzennie i czasowo:



$$P_{1/1}(x_3 - x_1, t_3 - t_1) = \int_{-\infty}^{+\infty} P_{1/1}(x_3 - x_2, t_3 - t_2)\; P_{1/1}(x_2 - x_1, t_2 - t_1)\, d\,x_2$$

$$\left.\begin{aligned} t_3 - t_1 &= t \\ t_3 - t_2 &= t_0 \end{aligned}\right\} t_2 - t_1 = t - t_0$$

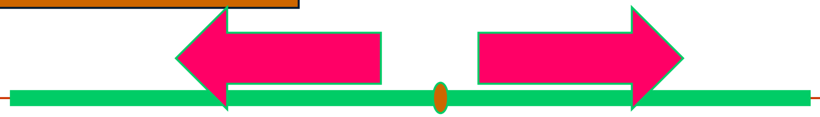
$$\begin{aligned} x_3 - x_1 &= x \\ x_2 - x_1 &= y \\ x_3 - x_2 &= x - y \\ d\,x_2 &= d\,y \end{aligned}$$

$$\boxed{P_{1/1}(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} P_{1/1}(x - y, t_0)\;\; P_{1/1}(y, t - t_0)\, d\,y} \quad \Big|\; e^{ikx} \quad \Big|\; \int d\,x$$

$$\tilde{P}(k, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx}\, P_{1/1}(x, t)\, d\,x$$

$$P_{1/1}(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ikx}\, \tilde{P}(k, t)\, d\,k$$

Dyfuzja w nieskończonej jednowymiarowej kapilarze
Proces jednorodny przestrzennie i czasowo:



$$\boxed{P_{1/1}(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} P_{1/1}(x-y,t_0)\; P_{1/1}(y,t-t_0)\, dy} \quad \Big|\; e^{ikx} \;\Big|\; \int dx$$

$$\tilde{P}(k,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} P_{1/1}(x,t)\, dx$$

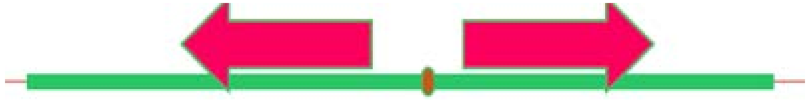
$$P_{1/1}(x,t) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ikx}\tilde{P}(k,t)\, dk$$

$$\tilde{P}(k,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} dy \int_{-\infty}^{+\infty} dx\; e^{ikx}\; P_{1/1}(x-y,t_0)\, P_{1/1}(y,t-t_0)$$

$$e^{ik(x-y)} \qquad e^{iky}$$

$$= \tilde{P}(k,t_0)\,\tilde{P}(k,t-t_0)$$

Dyfuzja w nieskończonej jednowymiarowej kapilarze
Proces jednorodny przestrzennie i czasowo:



$$\tilde{P}(k,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} P_{1/1}(x,t)\,dx$$

$$P_{1/1}(x,t) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ikx}\tilde{P}(k,t)\,dk$$

$$\tilde{P}(k,t) = \tilde{P}(k,t_0)\tilde{P}(k,t-t_0)$$

$$\boxed{\tilde{P}(k,t) = e^{h(k)t} \qquad h(k):\ \text{dowolna funkcja}}$$

spełniająca warunek:
h(0)=0

dowód (dla zainteresowanych):

równość $\tilde{P}(k,t) = \tilde{P}(k,t_0)\tilde{P}(k,t-t_0)$ *różniczkujemy po* t,
a następnie po obu stronach równania wykonujemy granicę $\lim\limits_{t_0\to t}$;

otrzymamy $\frac{\partial\tilde{P}(k,t)}{\partial t} = \tilde{P}(k,t)\tilde{P}'(k,0)$; *podstawiając* $\tilde{P}'(k,0) = \mathrm{h}(k)$ równanie redukuje się do

$\frac{\partial \ln(\tilde{P}(k,t))}{\partial t} = h(k) \to \ln\left(\tilde{P}(k,t)\right) = \mathrm{h}(k)t + \chi(k) \to \tilde{P}(k,t) = e^{h(k)t+\chi(k)}$; *χ(k): dowolne;*

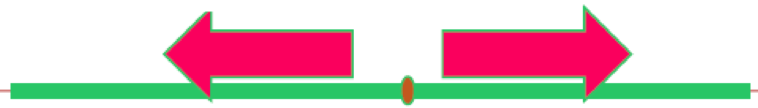
przy warunku $\lim\limits_{t\to o} P_{1/1}(x,t) = \delta(x) \longrightarrow \chi(k)=0$

z kolei z warunku normalizacji $\int_{-\infty}^{\infty} P_{1/1}(x,t)\,dx = 1$ wynika, że h(0)=0 C.B.D.O

Najprostszy model otrzymamy rozwijając h(k) w szereg:

$$\tilde{P}(k,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} P_{1/1}(x,t)\, dx$$

$$P_{1/1}(x,t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ikx} \tilde{P}(k,t)\, dk$$



$$\tilde{P}(k,t) = \tilde{P}(k,t_0)\tilde{P}(k,t-t_0)$$

$$\boxed{\tilde{P}(k,t) = e^{h(k)\,t} \qquad h(k): \text{dowolna funkcja}}$$

$P_{1/1}(x,t)$ zależy jedynie od x^2 ...

Żaden kierunek w kapilarze nie jest wyróżniony

$$h(k) = C + d\,k^2 + \ldots$$

$\boxed{d<0,\ C=0}$

$$\tilde{P}(0,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, e^{i0x} P_{1/1}(x,t) = 1 \Rightarrow \boxed{C=0} \Rightarrow \boxed{\tilde{P}(k,t) = e^{-Dk^2 t}}$$

D>0

Dygresja:

Jeśli funkcja charakterystyczna rozkładu zmiennej losowej

X ma postać $\phi_X(k) = e^{Q(k)}$, gdzie Q(k) jest wielomianem,

wtedy Q(k) może być co najwyżej wielomianem kwadratowym

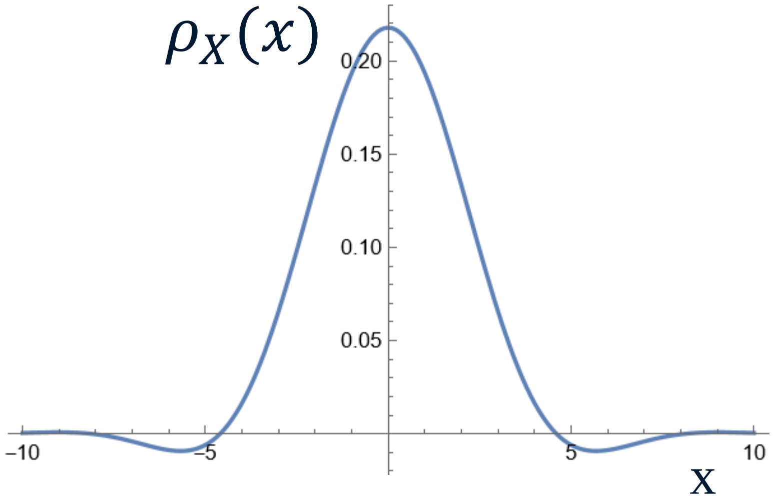
(wielomiany wyższego stopnia 'łamią dodatnią określoność' rozkładów $\rho_X(x) \geq 0$)

jest to twierdzenie Marcinkiewicza (Mathematische Zeitschrift vol. ***44****, str. 612–618 (1939))*

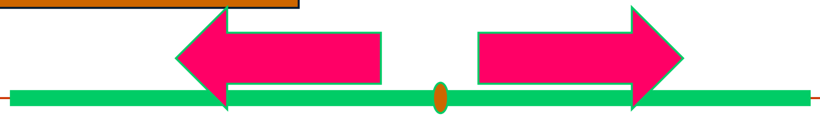
(Józef Marcinkiewicz był profesorem Uniwersytetu w Wilnie, zginął w 1940 - najprawdopodobniej w Katyniu)

$na\ przykład, gdy\ \phi_X(k) = e^{-k^2-k^4},$

wtedy gęstość rozkładu byłaby:



Dyfuzja w nieskończonej jednowymiarowej kapilarze
Proces jednorodny przestrzennie i czasowo:



$$\tilde{P}(k,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} P_{1/1}(x,t)\, dx$$

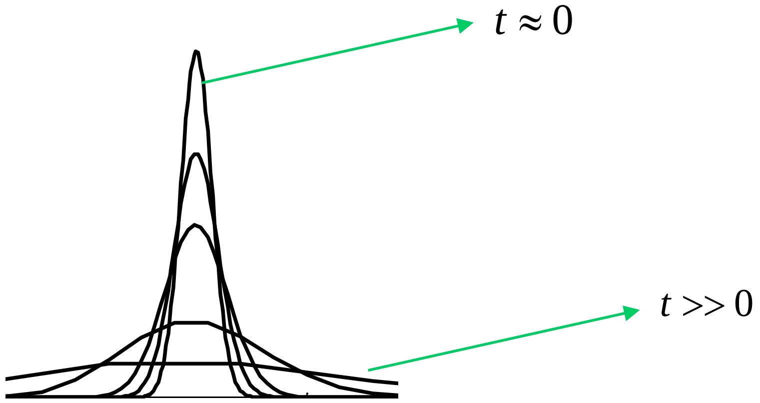
$$P_{1/1}(x,t) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ikx}\tilde{P}(k,t)\, dk$$

$$\boxed{\tilde{P}(k,t) = e^{-Dk^2t}}$$

$\boxed{D>0}$

$$\boxed{P_{1/1}(x,t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}}\exp\left\{\frac{-x^2}{4Dt}\right\}}$$

(a więc otrzymaliśmy
Proces Wieniera-Levy)



$$P(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} P_{1/1}(x-y,t)P(y,0)$$

$$\boxed{P_{1/1}(x,t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi D t}} \exp\left\{\frac{-x^2}{4Dt}\right\}}$$

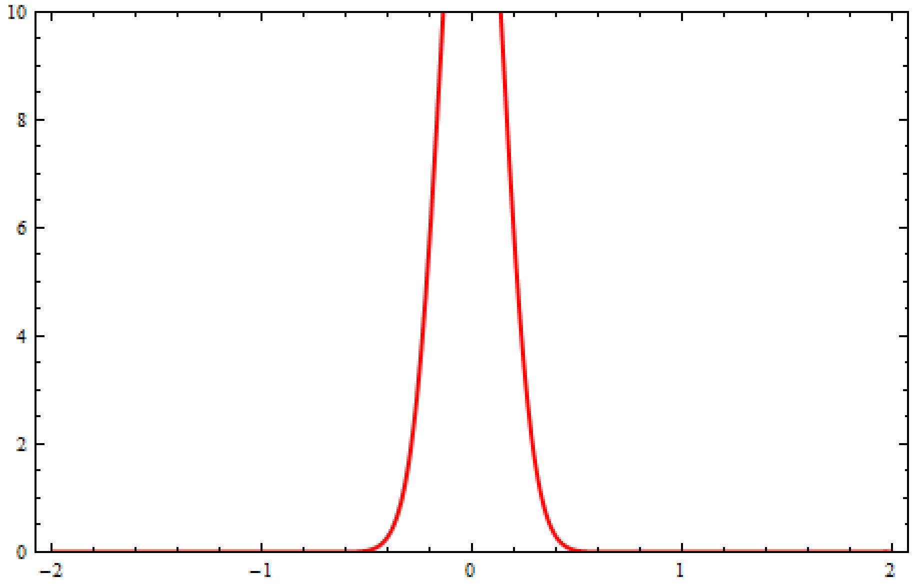
Można sprawdzić, że $P_{1/1}$ spełnia najprostsze równanie dyfuzji (równanie Fokkera-Plancka):

$$\boxed{D\frac{\partial^2}{\partial x^2} P_{1/1}(x,t) = \frac{\partial}{\partial t} P_{1/1}(x,t)}$$

UWAGA: jest to szczególny przypadek ogólnego równania dyfuzji (z dryftem)

$$\boxed{P_{1/1}(x,t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi D t}} \exp\left\{\frac{-(x-vt)^2}{4Dt}\right\}; \qquad D\frac{\partial^2}{\partial x^2} P_{1/1}(x,t) - v\frac{\partial}{\partial x} P_{1/1}(x,t) = \frac{\partial}{\partial t} P_{1/1}(x,t)}$$

Dyfuzja Browna: film



Stacjonarne procesy: twierdzenie C.K.S w granicy małych czasów; Równania Master

(opisują np. fluktuacje wokół stanu równowagi)

$$\sum_y \ldots \equiv \int \ldots dy$$

$\delta(x-y)$: *delta Diraca lub Kronneckera* (w przypadku dyskretnym)

$$P_{1/1}(y_3 t_3 / y_1 t_1) = \sum_{y_2} P_{1/1}(y_3 t_3 / y_2 t_2)\; P_{1/1}(y_2 t_2 / y_1 t_1)$$ *równanie C.K.S.*

$$\Longrightarrow P_{1/1}(y_3\, t_3 - t_1 / y_1) = \sum_{y_2} P_{1/1}(y_3\, t_3 - t_2 / y_2)\; P_{1/1}(y_2\, t_2 - t_1 / y_1)$$ *równanie C.K.S. dla procesów translacyjnych w czasie*

$$\Longrightarrow P_{1/1}(y_3\, \tau + \tau' / y_1) = \sum_{y_2} P_{1/1}(y_3\, \tau' / y_2)\; P_{1/1}(y_2\, \tau / y_1)$$

rozwijamy $P_{1/1}(y_3\, \tau' / y_2)$ wokół $\tau' = 0$

$$P_{1/1}(y_3\, \tau' / y_2) \approx P_{1/1}(y_3\, \tau' = 0 / y_2) + A(y_3/y_2)\, \tau'$$

$$P_{1/1}(y_3\, \tau' = 0 / y_2) = \delta(y_3 - y_2)$$

Układ nie wyszedł z y_2 bo $\tau` = 0$

$$A(y_3/y_2) = \underbrace{\alpha\, \delta(y_3 - y_2)}_{\text{Prawdopodobieństwo pozostania w } y_2 \text{ w jednostce czasu}} + W(y_3/y_2)$$

W: prawdopodobieństwo przejścia w jednostce czasu od y_2 do y_3

twierdzenie C.K.S w granicy małych czasów τ`

$$\begin{cases} P_{1/1}(y_3\,\tau' / y_2) \approx P_{1/1}(y_3\,\tau'=0 / y_2) + A(y_3/y_2)\,\tau' \\ P_{1/1}(y_3\,\tau'=0 / y_2) = \delta(y_3-y_2) \\ A(y_3/y_2) = \alpha\,\delta(y_3-y_2) + W(y_3/y_2) \end{cases}$$

$$\Downarrow$$

$$P_{1/1}(y_3\,\tau' / y_2) \approx (1+\alpha\tau')\,\delta(y_3-y_2) + W(y_3/y_2)\,\tau'$$

Normalization:

$$\sum_{y_3} P_{1/1}(y_3\,\tau' / y_2) \equiv \int P_{1/1}(y_3\,\tau' / y_2)\,dy_3 = 1 \quad \Rightarrow \quad \alpha = -\sum_{y_3'} W(y_3'/y_2)$$

(sumowanie wykonujemy po martwej zmiennej y_3')

$$\boxed{P_{1/1}(y_3\,\tau' / y_2) \approx \left[1 - \tau' \sum_{y_3'} W(y_3'/y_2)\right] \delta(y_3-y_2) + W(y_3/y_2)\,\tau'}$$

$$\boxed{P_{1/1}(y_3\,\tau'/y_2) \approx \left[1 - \tau' \sum_{y_3'} W(y_3'/y_2)\right] \delta(y_3 - y_2) + W(y_3/y_2)\;\tau'}$$

prawdopodobieństwo
pozostania
w y_1 w jedn. czasu

prawdopodobieństwo
przejścia z y_1 do y_2 w
jednostce czasu

Wstawiamy do równania C-K-S

$$P_{1/1}(y_3\,\tau+\tau'/y_1) = \sum_{y_2} P_{1/1}(y_3\,\tau'/y_2)\;P_{1/1}(y_2\,\tau/y_1)$$

$$\boxed{P_{1/1}(y_3\,\tau'/y_2) \approx \left[1 - \tau' \sum_{y_3'} W(y_3'/y_2)\right] \delta(y_3 - y_2) + W(y_3/y_2)\,\tau'}$$

$$P_{1/1}(y_3\,\tau+\tau'/y_1) = \sum_{y_2} \underbrace{P_{1/1}(y_3\,\tau'/y_2)}_{\text{(Wstawiamy rozwinięcie)}}\ \underbrace{P_{1/1}(y_2\,\tau/y_1)}_{\text{(pozostawiamy bez zmian)}}$$

$$\Downarrow$$

$$P_{1/1}(y_3\,\tau+\tau'/y_1) - P_{1/1}(y_3\,\tau/y_1) = \tau' \sum_{y_2} W(y_3/y_2)\,P_{1/1}(y_2\,\tau/y_1)$$

$$- \tau' \sum_{y_3'} W(y_3'/y_3)\,P_{1/1}(y_3\,\tau/y_1)$$

Zostawiam wyrazy liniowe w τ i τ′; dzielę przez τ′ i przechodzę z τ′ do zera

Upraszczam notację: $y_3' \equiv y_2$

$$P_{1/1}(y_3\,\tau+\tau'/\,y_1) - P_{1/1}(y_3\,\tau/\,y_1) = \tau' \sum_{y_2} W(y_3/y_2)\,P_{1/1}(y_2\,\tau/\,y_1) - \tau' \sum_{y_2} W(y_2/y_3)\,P_{1/1}(y_3\,\tau/\,y_1)$$

Równania Master (2 i 3): $\sum \to \int$ *wersja dla ciągłych zmiennych y*

(a) dzielę przez τ′ i przechodzę z τ’ do zera

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial\tau} P_{1/1}(y_3\,\tau/\,y_1) = \int\Big[W(y_3/y_2)P_{1/1}(y_2\,\tau\,/\,y_1) - W(y_2/y_3)P_{1/1}(y_3\,\tau\,/\,y_1)\Big]\,d\,y_2}$$

Dowolny rozkład; np. jakiś początkowy rozkład prawdopodobieństwa

(b) Mnożę stronami przez $P_1(y_1)$, całkuję po y_1
dzielę przez τ′ i przechodzę z τ’ do zera

$$\int P_{1/1}(y_\alpha\,\tau\,/\,y_1)\,P_1(y_1)\,d\,y_1 = P_1(y_\alpha\,\tau) \equiv P(y_\alpha\,\tau)$$

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial\tau} P(y_3\,\tau) = \int\Big[W(y_3/y_2)P(y_2\,\tau) - W(y_2/y_3)P(y_3\,\tau)\Big]\,d\,y_2}$$

Uprośćmy dalej notację: $y_3 \mapsto y,\ \ y_2 \mapsto y'\,,\ \tau \mapsto t$

Równania Master

$$\frac{\partial}{\partial t} P_{1/1}(y_3 t / y_1) = \int \left[W(y_3/y_2) P_{1/1}(y_2 t / y_1) - W(y_2/y_3) P_{1/1}(y_3 t / y_1) \right] d y_2$$

$$\frac{\partial}{\partial t} P(yt) = \int \left[W(y/y') P(y't) - W(y'/y) P(yt) \right] d y'$$

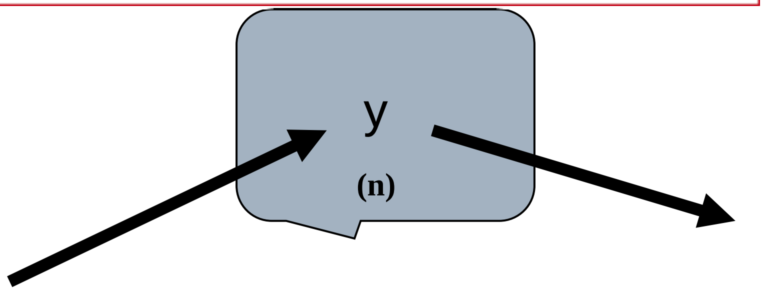
dla przypadku dyskretnego: $y \to n, \quad y' \to n', \quad \int d y' \to \sum_{n'}$

$$\frac{d}{dt} P_n(t) = \sum_{n'} \left[W_{nn'} P_{n'}(t) - W_{n'n} P_n(t) \right]$$

(przykład) złota reguła Fermiego:

$$W_{nn'} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| (H')_{nn'} \right|^2 \rho(E_n)$$

(z rachunku perturbacyjnego)



Równanie Master: równanie zysków i strat dla prawdopodobieństwa

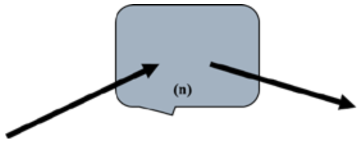
Warunki równowagi oraz równowagi szczegółowej

(równanie Master jest równaniem na bilans prawdopodobieństw.
Dla procesów jednorodnych w czasie jest to różniczkowa postać r. C.K.S)

$$\boxed{\frac{d}{dt} P_n(t) = \sum_{n'} \left[W_{nn'} P_{n'}(t) - W_{n'n} P_n(t) \right]}$$

Warunek równowagi: w każdym stanie prawdopodobieństwa wypływające oraz wpływające `kasują się`

$$\sum_{n'} \left[W_{nn'} P_{n'}(t) - W_{n'n} P_n(t) \right] = 0 \qquad \forall\, n$$



Warunek równowagi szczegółowej:

$$W_{nn'} P_{n'}(t) - W_{n'n} P_n(t) = 0 \qquad \forall\, n, n'$$

(można pokazać, że mikroskopowa odwracalność równań ruchu w czasie
dla układów izolowanych implikuje spełnienie warunku równowagi szczegółowej)

Podsumowanie

Równanie C-K-S jest nieliniowym równaniem wyrażającym markowowskość procesu, jednak nie zawiera informacji o żadnym konkretnym procesie Markova;

W równaniach Master (2,3) rozważamy prawdopodobieństwa przejść w jednostce czasu dla **konkretnego** systemu; znając je rozwiązujemy liniowe równania na prawdopodobieństwa (określające mezoskopowy stan układu)

Przykład (ćwiczenia): model dwustanowy; stany stacjonarne

$$\frac{\partial}{\partial t} P_{1/1}(y_3 t / y_1) = \int \left[W(y_3/y_2) P_{1/1}(y_2 t / y_1) - W(y_2/y_3) P_{1/1}(y_3 t / y_1) \right] d y_2$$

$$s \equiv n = \uparrow, \downarrow$$

$$\frac{d}{dt} P_{1/1}(s_3 t / s_1) = \sum_{s_2 = \uparrow\downarrow} \left[W(s_3/s_2) P_{1/1}(s_2 t / s_1) - W(s_2/s_3) P_{1/1}(s_3 t / s_1) \right]$$

Mamy 4 funkcje. Niech

$$P_{1/1}(\uparrow t / \uparrow) \equiv P_{1/1}(\downarrow t / \downarrow)$$

$$P_{1/1}(\uparrow t / \downarrow) \equiv P_{1/1}(\downarrow t / \uparrow)$$

$$W(\uparrow / \downarrow) = W(\downarrow / \uparrow) = a > 0 \text{ (parametr)}$$

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} P_{1/1}(\uparrow t / \uparrow) = a\left[P_{1/1}(\uparrow t / \downarrow) - P_{1/1}(\uparrow t / \uparrow) \right] \\ \frac{d}{dt} P_{1/1}(\uparrow t / \downarrow) = a\left[P_{1/1}(\uparrow t / \uparrow) - P_{1/1}(\uparrow t / \downarrow) \right] \end{cases}$$

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} P_{1/1}(\uparrow t/\uparrow) = a[P_{1/1}(\uparrow t/\downarrow) - P_{1/1}(\uparrow t/\uparrow)] \\ \frac{d}{dt} P_{1/1}(\uparrow t/\downarrow) = a[P_{1/1}(\uparrow t/\uparrow) - P_{1/1}(\uparrow t/\downarrow)] \end{cases}$$

$$P_{1/1}(\uparrow t/\uparrow) = c_1 + c_2\, e^{-2at} = P_{1/1}(\downarrow t/\downarrow)$$

$$P_{1/1}(\uparrow t/\downarrow) = c_1 - c_2\, e^{-2at} = P_{1/1}(\downarrow t/\uparrow)$$

Warunki początkowe:

$$\begin{pmatrix} P_{1/1}(\uparrow 0/\uparrow) = 1 \\ P_{1/1}(\uparrow 0/\downarrow) = 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} c_1 + c_2 = 1 \\ c_1 - c_2 = 0 \end{pmatrix} \Longrightarrow c_1 = c_2 = \frac{1}{2}$$

Dychotomiczny proces Markova: $s = \pm 1$

$$P_{1/1}(s\,t/s') = \frac{1}{2}\left[1 + e^{-2at}\right]\delta_{s,s'} + \frac{1}{2}\left[1 - e^{-2at}\right]\delta_{s,-s'}$$

A jak interpretować równanie Master?

$$\int P_{1/1}(y_\alpha\,\tau\,/\,y_1)\,P_1(y_1)\,dy_1 = P_1(y_\alpha\,\tau) \equiv P(y_\alpha\,\tau)$$

Dychotomiczny proces Markova: $s = \pm 1$

$$P_{1/1}(s\,t/s') = \frac{1}{2}\left[1 + e^{-2at}\right]\delta_{s,s'} + \frac{1}{2}\left[1 - e^{-2at}\right]\delta_{s,-s'}$$

$$P(s,t) = \sum_{s'=\uparrow\downarrow} P_{1/1}(s\,t/s')\,P_1(s')$$

(a) $P_1(\uparrow) = 1; \quad P_1(\downarrow) = 0$

$$P(s,t) = \frac{1}{2}\left[1 + e^{-2at}\right]\delta_{s,\uparrow} + \frac{1}{2}\left[1 - e^{-2at}\right]\delta_{s,\downarrow}$$

$$= \frac{1}{2}\left[1 + s\,e^{-2at}\right] \xrightarrow{t\to\infty} \frac{1}{2}$$

Dychotomiczny proces Markova: $s = \pm 1$

$$P_{1/1}(s\,t/s') = \frac{1}{2}\left[1 + e^{-2\,a\,t}\right]\delta_{s,s'} + \frac{1}{2}\left[1 - e^{-2\,a\,t}\right]\delta_{s,-s'}$$

$$P(s,t) = \sum_{s'=\uparrow\downarrow} P_{1/1}(s\,t/s')\,P_1(s')$$

(b) $P_1(s)$ arbitrary: $P_1(\uparrow) + P_1(\downarrow) = 1$

$$P(s,t) = \frac{1}{2}\left[1 + e^{-2\,a\,t}\right]P_1(s) + \frac{1}{2}\left[1 - e^{-2\,a\,t}\right]P_1(-s)$$

$$\xrightarrow{t\to\infty} \frac{1}{2}\left[P_1(s) + P_1(-s)\right] = \frac{1}{2}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} P(yt) = \int \Big[W(y/y')P(y't) - W(y'/y)P(yt) \Big] \, dy'$$

Twierdzenie: w granicy nieskończonych czasów wszystkie rozwiązania powyższego równania zdążają do rozwiązania stacjonarnego (do jednego z rozwiązań stacjonarnych) (dla dużej klasy funkcji W(y/y'))

– Niezależnie od $P(y't)$: $P(yt) \xrightarrow{t\to\infty} P_{\text{stacjonarny}}(y)$

– może byc więcej niż jeden stan stacjonarny

– stan stacjonarny spełnia równanie :

$$\int \Big[W(y/y')P_s(y') - W(y'/y)P_s(y) \Big] \, dy'$$

Zadanie (model dwustanowy)

Przypuśćmy, że mamy aparaturę doświadczalną na której wykonujemy jakieś doświadczenie.
Niestety, w lecie, aparatura czasami pracuje a czasami nie.
Przypuśćmy, że udało nam się ustalić, że jeśli aparatura pracuje w jakimś dniu wtedy jest 60% szans, że będzie pracować w dniu następnym.
Ale jeśli w danym dniu nie pracuje wtedy jest 70% szans, że nie będzie pracować w dniu następnym.

Jaki jest stan stacjonarny dla takiego procesu?

$\uparrow$: **pracuje**

$\downarrow$: **nie pracuje**

$W(\uparrow / \uparrow)$: **jutro będzie pracowała / dzisiaj pracuje**

$$W = \begin{array}{cc} & \begin{array}{cc} \uparrow & \downarrow \end{array} \text{ (dzisiaj)} \\ \begin{array}{c} \uparrow \\ \downarrow \end{array} & \begin{pmatrix} 0.6 & 0.3 \\ 0.4 & 0.7 \end{pmatrix} \end{array}$$

(jutro)

niech $P_1(s) = \begin{array}{c} \uparrow \\ \downarrow \end{array} \begin{pmatrix} 0.5 \\ 0.5 \end{pmatrix}$

pokazać, że stan stacjonarny procesu $= \begin{array}{c} \uparrow \\ \downarrow \end{array} \begin{pmatrix} 0.4286 \\ 0.5714 \end{pmatrix} \left(\text{przy } \xrightarrow{t \equiv n \to \infty} \right)$


Dziękuję