

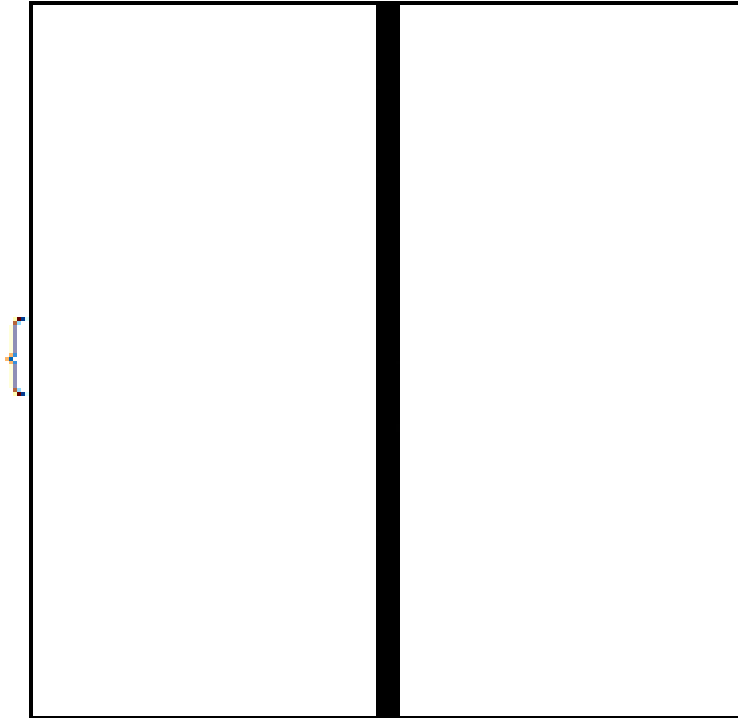
Wykład 2

Przykład zastosowania teorii prawdopodobieństwa: procesy stochastyczne (Markova)

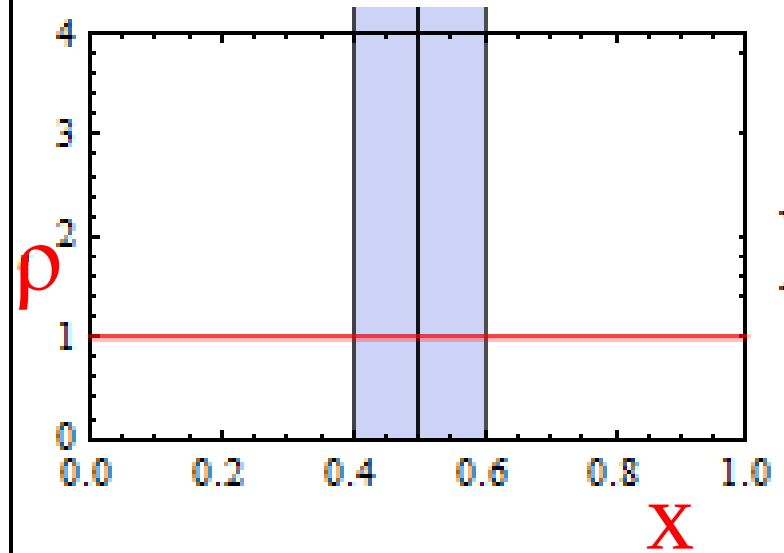
1. Procesy Markova: definicja
2. Równanie Chapmana-Kołmogorowa-Smoluchowskiego
3. Przykład dyfuzji w kapilarze
4. Równanie Master
5. Samodzielne studia: Równania Master dla procesów Markova jednorodnych w czasie i przestrzeni w granicy małych czasów.

Demonstracje: dyfuzja gazu po usunięciu ścianek

Dyfuzja

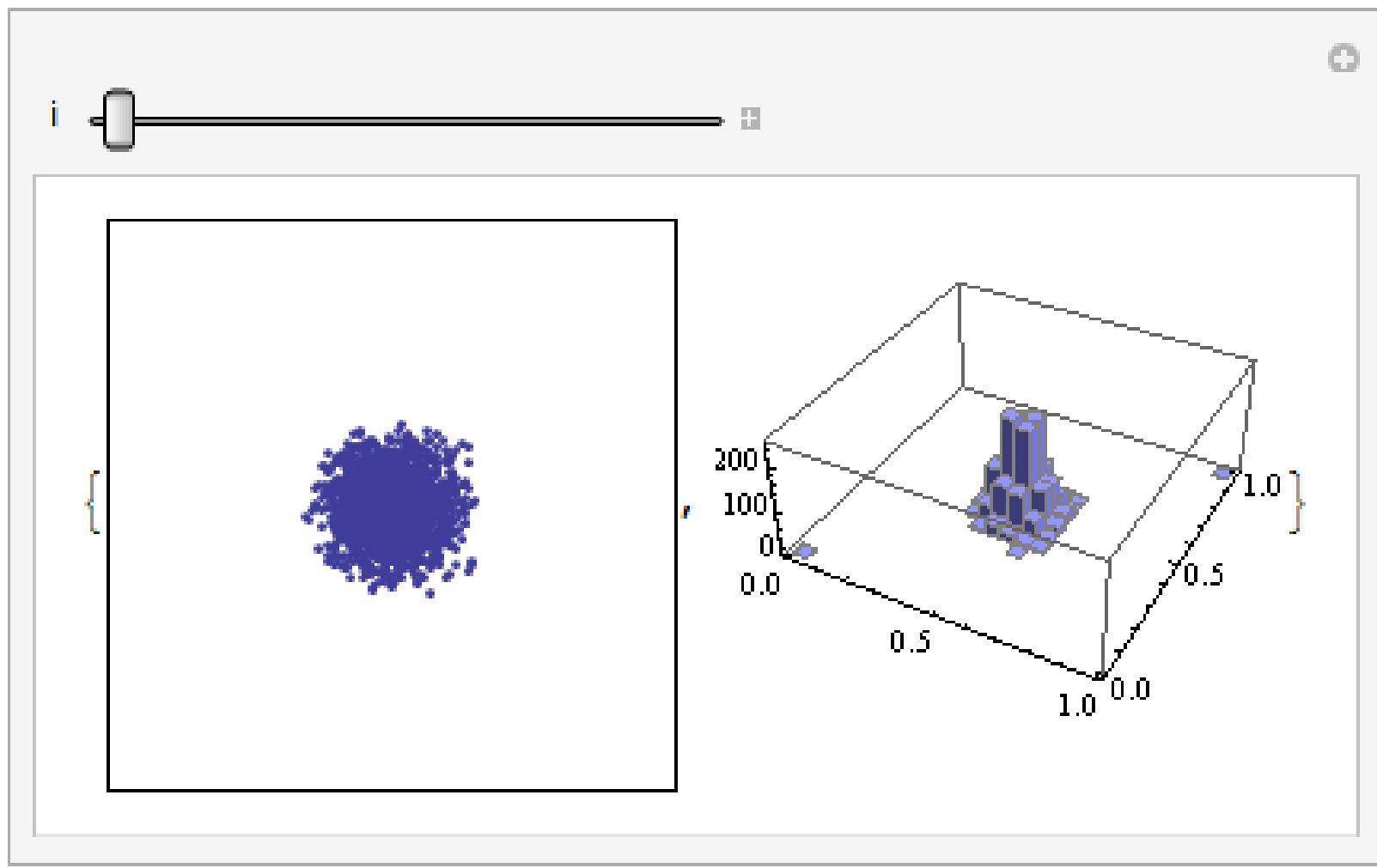


Rozkład $\rho(x,t) \approx N(x)/N$



Jednowymiarowa analiza

(kropla atramentu wstrzyknięta do płaskiego naczynia z wodą)



Dyfuzja Browna

Równania Langevina (cząstka Browna, 1907):

$$F(x, t) = -\frac{\partial U(x, t)}{\partial x}$$

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

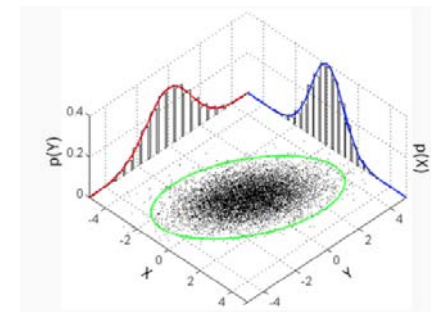
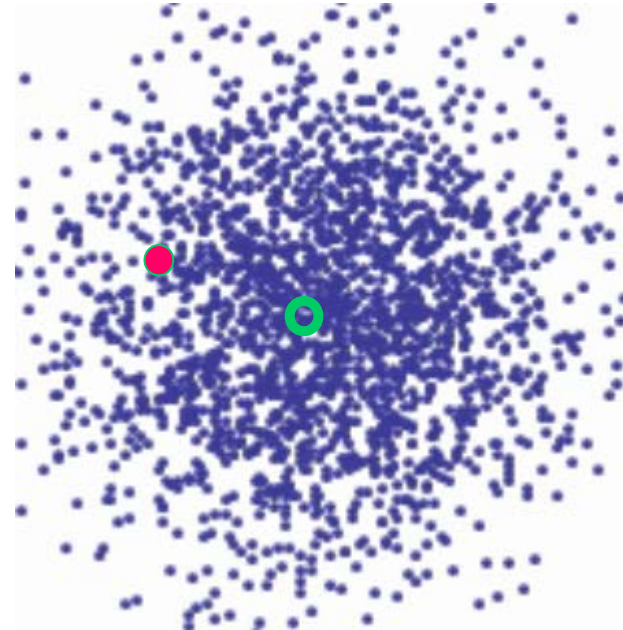
$\mathbf{F}_{losowa}(t)$: zmienna gaussowska

$$\forall t$$

$$\forall t, t'$$

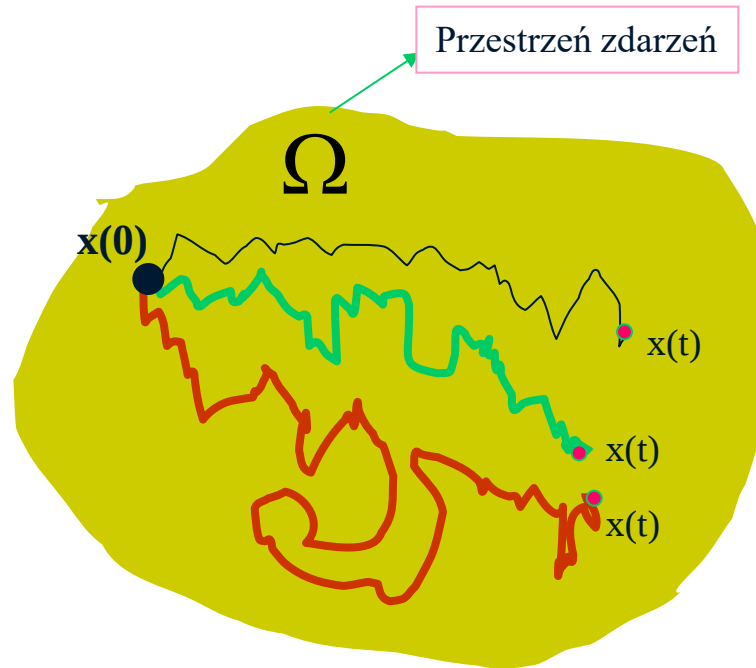
$$\langle \mathbf{F}_{losowa}(t) \rangle = 0$$

$$\langle \mathbf{F}_{losowa}(t) \mathbf{F}_{losowa}(t') \rangle = \sigma^2 \delta(t - t')$$



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.

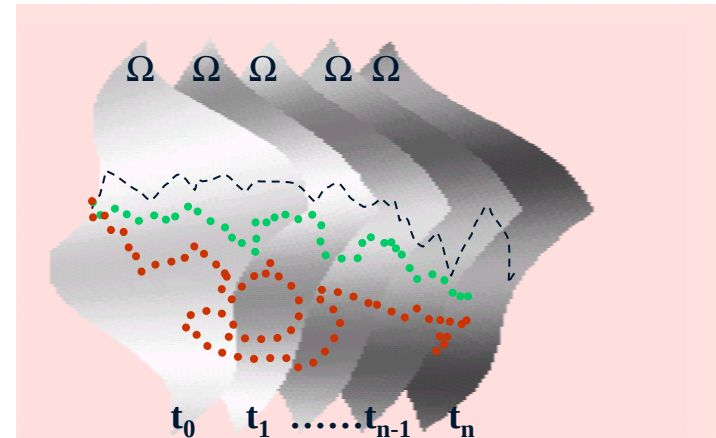


Równania Langevina (cząstka Browna, 1907):

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

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
 $\rho \equiv P$

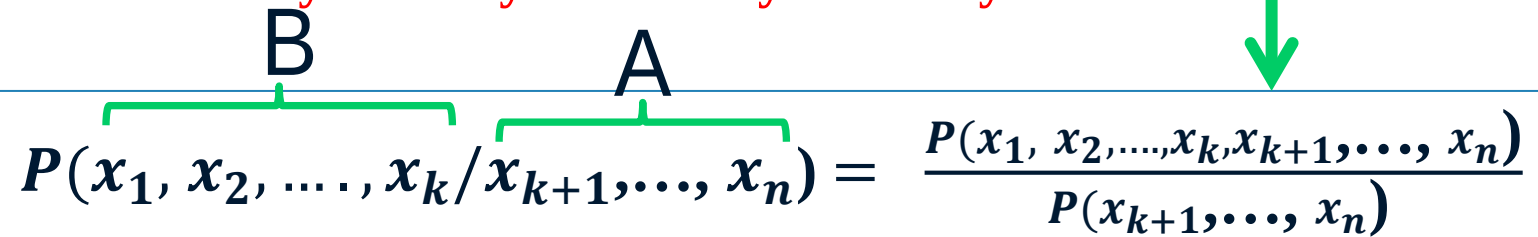
$$P_k (x_1 t_1, x_2 t_2, ..., x_k t_k)$$

$k=1...n$

Zastosowanie t. p. : Procesy stochastyczne

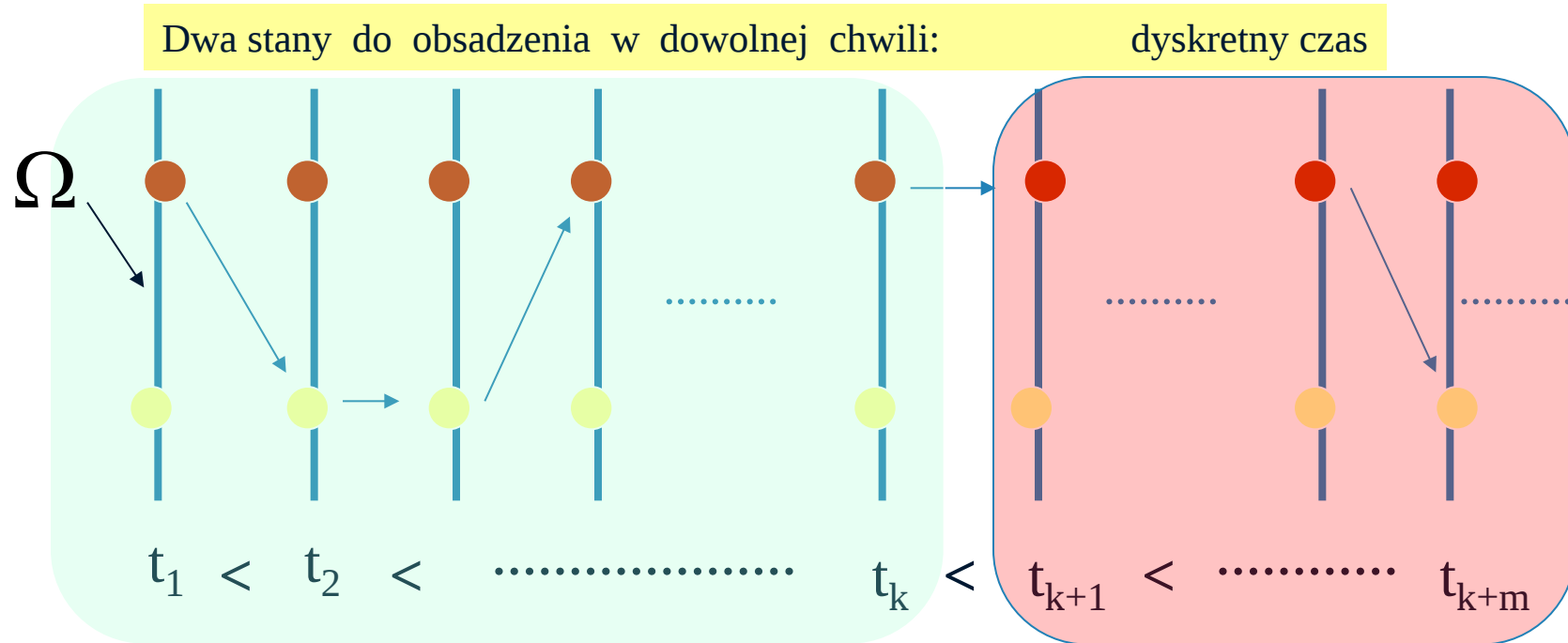
$$P(B/A) = \frac{P(B \cap A)}{P(A)}$$

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


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

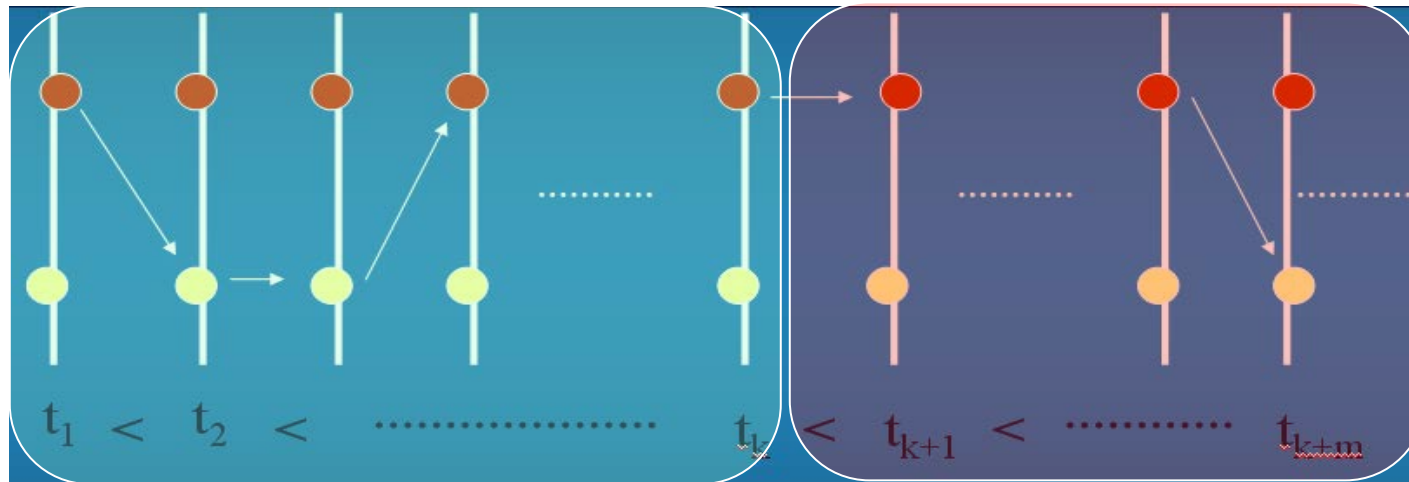
(obszerna dyskusja znajduje się w: **A. Papoulis**
Prawdopodobieństwo, zmienne losowe i procesy stochastyczne
Str. 249)

Procesy stochastyczne



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

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



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

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

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

$$P_k(x_1 t_1, x_2 t_2, \dots, x_k t_k) \quad \forall k, m$$

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

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

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

Przybliżenia: rozkłady niezależne

(proces `nie ma pamięci`)

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

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

$$P_1(x_{k+1} t_{k+1}) P_1(x_k t_k) \dots P_1(x_1 t_1)$$

Weźmy np. $m=1$

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

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

Proces Markowa (z krótką pamięcią)

(proces zależy od jednej chwili czasowej wstecz)

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

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

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

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

Proces Markowa (z krótką pamięcią)

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



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

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

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

krótka pamięć

prawdopodobieństwo
przejścia

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

Równanie Chapmana- Kołmogorowa-Smoluchowskiego

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

W.K.W. aby proces był procesem Markova
($\forall t_1 < t_2 < t_3$)

$$P_1(x_1 t_1)$$

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

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

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

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

Równanie Chapmana- Kołmogorowa-Smoluchowskiego

W.K.W. aby proces był procesem Markova

$$P_1(x_1 t_1)$$

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

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

Konsekwencje

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

Przykład równania Master

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

Proces Markova (podsumowanie)

Indeksy można zmieniać

$$P_1(x_1 t_1)$$

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

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



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

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

Przykład równania Master

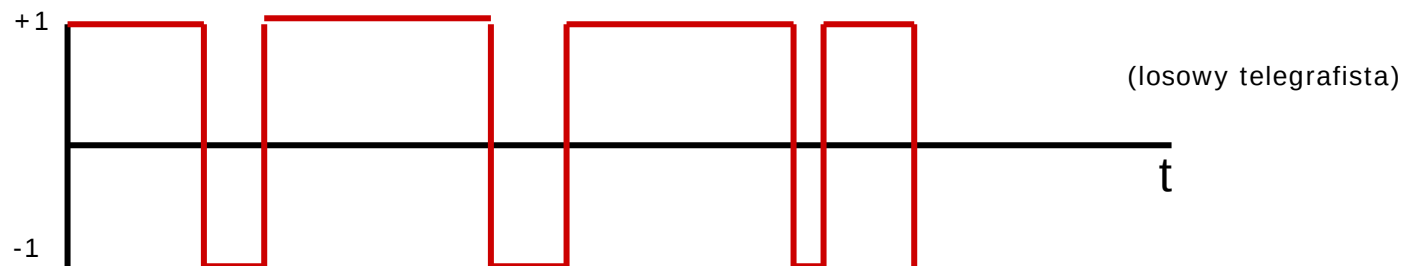
$$P_1(x_{k+1} t_{k+1}) = \sum_{x_k} P_{1/1}(x_{k+1} t_{k+1} / x_k t_k) P_1(x_k t_k)$$

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

Dychotomiczny proces Markova: $s = \pm 1$

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

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



(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 położzeń w chwilach późniejszych.

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

Rozkład prędkości cząstki Browna: (Proces Ornsteina – Uhlenbecka)

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

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

$$\langle y_1(t_1) y_2(t_2) \rangle = e^{-(t_2 - t_1)}$$

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

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

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

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

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

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

Proces Poissona zlicza zdarzenia
jakię 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 Markowa)

Dyskretne Procesy Markova

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

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

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

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

$$P_1 \equiv P$$

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

oznaczymy :

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

Dyskretne Procesy Markova

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

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

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 $= 1$

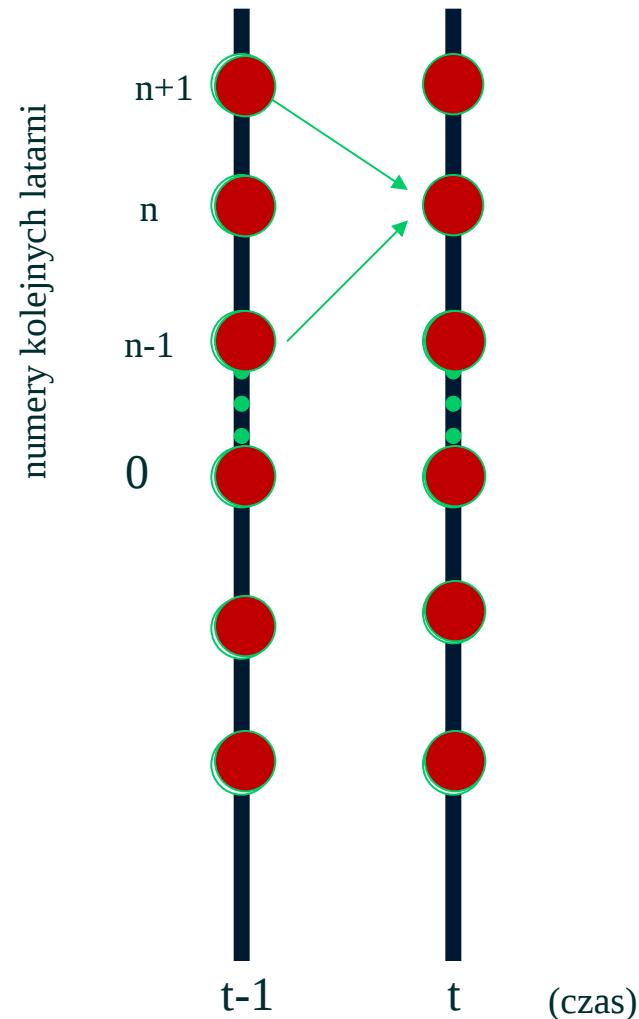
Pokazać, że dla procesów translacyjnych w czasie,
tj. gdy $W_{nm}(t)$ nie zależy od t :

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

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

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

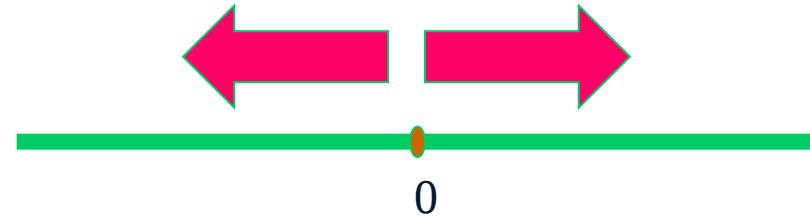
$$P_0(0) = 1 \quad P_n(0) = 0 \quad n \neq 0$$

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:

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

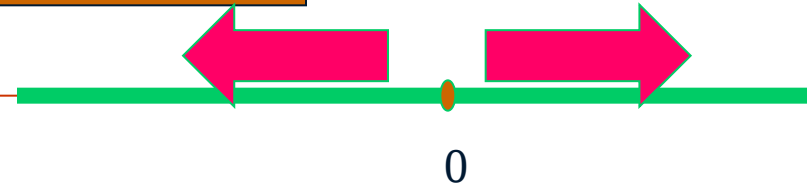


$$P_{1/1}(x_3 - x_1, t_3 - t_1) = \int_{-\infty}^{+\infty} P_{1/1}(x_3 - x_2, t_3 - t_2) P_{1/1}(x_2 - x_1, t_2 - t_1) d x_2$$

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

$$\begin{array}{l} x_3 - x_1 = x \\ x_2 - x_1 = y \\ x_3 - x_2 = x - y \\ d x_2 = d y \end{array}$$

Dyfuzja w nieskończonej jednowymiarowej kapilarze
Proces jednorodny przestrzennie i czasowo:



$$P_{1/1}(x_3 - x_1, t_3 - t_1) = \int_{-\infty}^{+\infty} P_{1/1}(x_3 - x_2, t_3 - t_2) P_{1/1}(x_2 - x_1, t_2 - t_1) dx_2$$

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

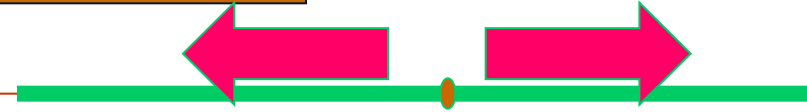
$$\begin{array}{l} x_3 - x_1 = x \\ x_2 - x_1 = y \\ x_3 - x_2 = x - y \\ dx_2 = dy \end{array}$$

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

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

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

Dyfuzja w nieskończonej jednowymiarowej kapilarze
Proces jednorodny przestrzennie i czasowo:



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

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

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

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

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

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

Dyfuzja w nieskończonej jednowymiarowej kapilarze
Proces jednorodny przestrzennie i czasowo:



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

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

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

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

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 $\lim_{t_0 \rightarrow t}$;*

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

$$\frac{\partial \ln(\tilde{P}(k, t))}{\partial t} = h(k) \rightarrow \ln(\tilde{P}(k, t)) = h(k)t + \chi(k) \rightarrow \tilde{P}(k, t) = e^{h(k)t + \chi(k)}; \quad \chi(k): \text{dowolne};$$

przy warunku $\lim_{t \rightarrow 0} P_{1/1}(x, t) = \delta(x) \rightarrow \chi(k)=0$

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:

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

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

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

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

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

Żaden kierunek w kapilarze nie jest wyróżniony

$$h(k) = C + dk^2 + \dots \quad d < 0, C=0$$

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

$$D > 0$$

Dygresja:

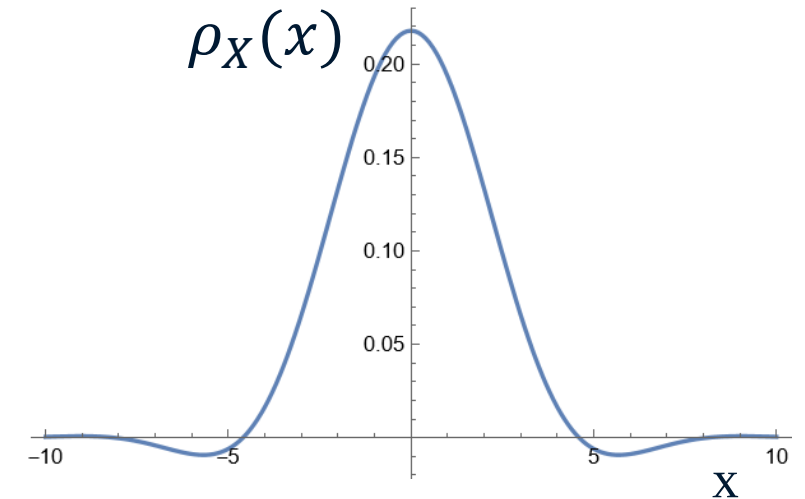
Jeśli funkcja charakterystyczna rozkładu zmiennej losowej X ma postać $\phi_X(k) = e^{Q(k)}$, gdzie $Q(k)$ jest wielomianem, wtedy $Q(k)$ może być co najwyżej wielomianem kwadratowym

(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:

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

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

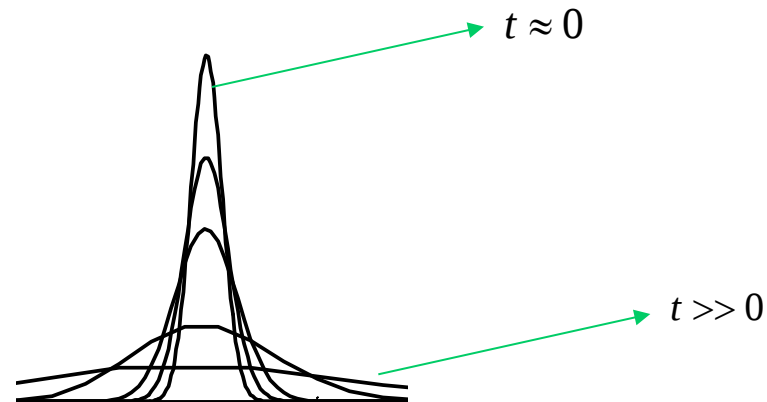
$$\tilde{P}(k, t) = e^{-Dk^2 t}$$

$$D > 0$$

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

(a więc otrzymaliśmy
Proces Wienera-Levy)

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



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

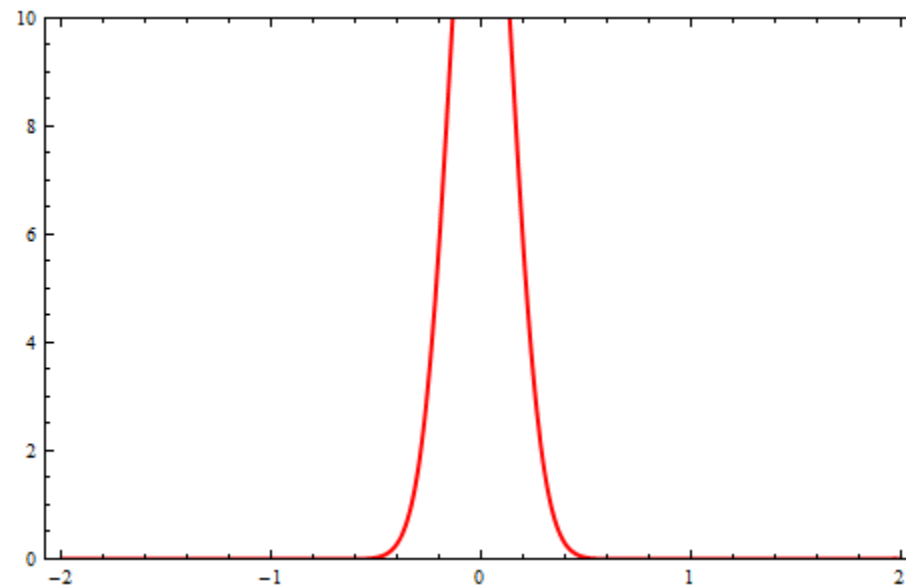
Można sprawdzić, że $P_{1/1}$ spełnia najprostsze równanie dyfuzji (równanie Fokkera-Plancka):

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

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

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

Dyfuzja Browna: film



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

(opisują np. fluktuacje wokół stanu równowagi)

$$\sum_y \dots \equiv \int \dots dy$$

$\delta(x - y)$: *delta Diraca lub Kroneckera*

(w przypadku dyskretnym)

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

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

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

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

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

Prawdopodobieństwo pozostania w y_2 w jednostce czasu

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

$$A(y_3 / y_2) = \alpha \delta(y_3 - y_2) + W(y_3 / y_2)$$

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

W: prawdopodobieństwo przejścia w jednostce czasu od y_2 do y_3

$$\left\{ \begin{array}{l} P_{1/1}(y_3 \tau' / y_2) \approx P_{1/1}(y_3 \tau' = 0 / y_2) + A(y_3/y_2) \tau' \\ P_{1/1}(y_3 \tau' = 0 / y_2) = \delta(y_3 - y_2) \\ A(y_3/y_2) = \alpha \delta(y_3 - y_2) + W(y_3/y_2) \end{array} \right.$$



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

Normalization :

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

(sumowanie wykonujemy po martwej zmiennej y_3')

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

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

prawdopodobieństwo
pozostania
w y_1 w jedn. czasu

⋮

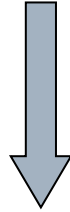
prawdopodobieństwo
przejścia z y_1 do y_2 w
jednostce czasu

Wstawiamy do równania C-K-S

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

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

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



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

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): $\sum \rightarrow \int$ wersja dla ciągłych zmiennych y

(a) dzielę przez τ' i przechodzę z τ' do zera

$$\frac{\partial}{\partial \tau} P_{1/1}(y_3 \tau / y_1) = \int [W(y_3 / y_2) P_{1/1}(y_2 \tau / y_1) - W(y_2 / y_3) P_{1/1}(y_3 \tau / y_1)] dy_2$$

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

Dowolny rozkład; np. jakiś początkowy rozkład prawdopodobieństwa

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

$$\frac{\partial}{\partial \tau} P(y_3 \tau) = \int [W(y_3 / y_2) P(y_2 \tau) - W(y_2 / y_3) P(y_3 \tau)] dy_2$$

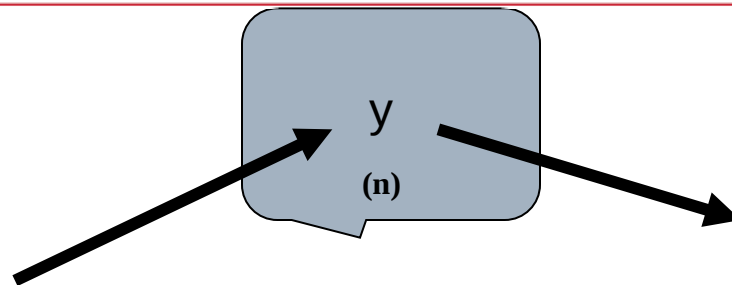
Uprościmy dalej notację: $y_3 \mapsto y$, $y_2 \mapsto y'$, $\tau \mapsto t$

$$\frac{\partial}{\partial t} P_{1/1}(y_3 t / y_1) = \int \left[W(y_3 / y_2) P_{1/1}(y_2 t / y_1) - W(y_2 / y_3) P_{1/1}(y_3 t / y_1) \right] dy_2$$

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

dla przypadku dyskretnego: $y \rightarrow n$, $y' \rightarrow n'$, $\int dy' \rightarrow \sum_{n'}$

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



(przykład) złota reguła Fermiego:

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

(z rachunku perturbacyjnego)

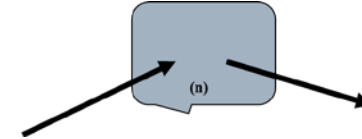
Warunki równowagi oraz równowagi szczegółowej

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

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

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

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



Warunek równowagi szczegółowej:

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

(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)

(Materiał do samodzielnych studiów)

Przykład (ćwiczenia): model dwustanowy; stany stacjonarne

$$\frac{\partial}{\partial t} P_{1/1}(y_3 t / y_1) = \int [W(y_3/y_2) P_{1/1}(y_2 t / y_1) - W(y_2/y_3) P_{1/1}(y_3 t / y_1)] dy_2$$

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



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

Mamy 4 funkcje. Niech

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

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

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

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

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

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

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

Warunki początkowe:

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

Dychotomiczny proces Markova: $s = \pm 1$

$$P_{1/1}(st/s') = \frac{1}{2}[1 + e^{-2at}] \delta_{s,s'} + \frac{1}{2}[1 - e^{-2at}] \delta_{s,-s'}$$

A jak interpretować równanie Master?

$$\int \mathbf{P}_{1/1}(\mathbf{y}_\alpha \tau / \mathbf{y}_1) \mathbf{P}_1(\mathbf{y}_1) d\mathbf{y}_1 = \mathbf{P}_1(\mathbf{y}_\alpha \tau) \equiv \mathbf{P}(\mathbf{y}_\alpha \tau)$$

Dychotomiczny proces Markova: $s = \pm 1$

$$\mathbf{P}_{1/1}(s t / s') = \frac{1}{2} [1 + e^{-2a t}] \delta_{s,s'} + \frac{1}{2} [1 - e^{-2a t}] \delta_{s,-s'}$$

$$\mathbf{P}(s, t) = \sum_{s'=\uparrow\downarrow} \mathbf{P}_{1/1}(s t / s') \mathbf{P}_1(s')$$

$$(a) \quad \mathbf{P}_1(\uparrow) = 1; \quad \mathbf{P}_1(\downarrow) = 0$$

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

$$= \frac{1}{2} [1 + s e^{-2a t}] \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \frac{1}{2}$$

Dychotomiczny proces Markova: $s = \pm 1$

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

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

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

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

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

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

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

- Niezależnie od $P(y't)$: $P(yt) \xrightarrow{t \rightarrow \infty} P_{\text{stacjonarny}}(y)$
- może być więcej niż jeden stan stacjonarny

– stan stacjonarny spełnia równanie :

$$\int \left[W(y/y') P_s(y') - W(y'/y) P_s(y) \right] dy'$$

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?

↑ : pracuje

↓ : nie pracuje

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

$$W = \begin{matrix} & \begin{matrix} \uparrow & \downarrow \end{matrix} \\ \begin{matrix} \uparrow \\ \downarrow \end{matrix} & \begin{pmatrix} 0.6 & 0.3 \\ 0.4 & 0.7 \end{pmatrix} \end{matrix} \begin{matrix} \\ (dzisiaj) \end{matrix}$$

(jutro)

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

pokazać, że stan stacjonarny procesu = $\begin{matrix} \uparrow \\ \downarrow \end{matrix} \begin{pmatrix} 0.4286 \\ 0.5714 \end{pmatrix}$ (przy $\frac{t \equiv n \rightarrow \infty}{\longrightarrow}$)

Dziękuję

