

Procesy stochastyczne

Krzysztof Golec–Biernat
Instytut Fizyki Jądrowej PAN w Krakowie

(24 października 2023)

Wersja robocza nie do dystrybucji

Kraków
2006-23

Spis treści

1	Podstawy	6
1.1	Prawdopodobieństwo	6
1.2	Prawdopodobieństwo warunkowe i wzór Bayesa	9
1.3	Zmienne losowe	9
1.4	Momenty zmiennej losowej	10
1.5	Funkcja charakterystyczna	11
1.6	Kumulanty	12
2	Przykłady rozkładów prawdopodobieństw	13
2.1	Rozkład dwumianowy	13
2.2	Błądzenie przypadkowe	14
2.3	Rozkład Poissona	15
2.4	Rozkład Gaussa	16
2.5	Rozkład Poissona a rozkład Gaussa	17
2.6	Błądzenie przypadkowe a rozkład Gaussa	18
3	Momenty i kumulanty faktorialne	19
3.1	Funkcja tworząca	19
3.2	Momenty i kumulanty faktorialne	20

4	Rozkłady wielu zmiennych losowych	22
4.1	Momenty	22
4.2	Kumulanty	23
4.3	Wielowymiarowy rozkład Gaussa	24
4.4	Stała normalizacyjna	25
4.5	Funkcja charakterystyczna rozkładu Gaussa	26
4.6	Twierdzenie Wicka	27
4.7	Centralne twierdzenie graniczne	29
5	Procesy stochastyczne	30
5.1	Definicja	30
5.2	Prawdopodobieństwo warunkowe	31
5.3	Procesy Markowa	32
5.4	Równanie Chapmana-Kołmogorowa-Smoluchowskiego	33
5.5	Stacjonarny proces Markowa	34
5.6	Proces dwudzielny – losowego telegrafu	34
5.7	Proces Poissona	35
5.8	Proces Ornsteina-Uhlenbecka	37
5.9	Proces Wienera	38
6	Równanie Master	40
6.1	Małe różnice czasów	40
6.2	Wyprowadzenie równania Master	41

7	Stany dyskretne	43
7.1	Równanie Master	43
7.2	Rozwiązanie dla dwóch stanów	44
7.3	Rozumowanie Einsteina	46
7.4	Rozwiązanie dla trzech stanów	47
7.5	Funkcjonał H	49
7.6	Związek z fizyką statystyczną	50
7.7	Druga zasada termodynamiki	51
8	Procesy jednokrokowe	55
8.1	Proces Poissona	56
8.2	Symetryczne błądzenie przypadkowe	57
9	Równanie ewolucji w QCD	59
9.1	Równanie Altarelliego-Parisiego	59
10	Ruchy Browna	64
10.1	Równanie Fokkera-Plancka	64
10.2	Interpretacja współczynników funkcyjnych	66
10.3	Równanie dyfuzji	66
10.4	Błądzenie przypadkowe	67
10.5	Dyfuzja a procesy Wienera	68

Rozdział 1

Podstawy

1.1 Prawdopodobieństwo

Rachunek prawdopodobieństwa jest działem matematyki badającym własności modeli opisujących zjawiska przypadkowe.

Zjawisko przypadkowe (lub statystyczne) to zjawisko, które w wyniku wielokrotnego powtarzania przy tych samych warunkach początkowych daje różne wyniki.

Pojęciem pierwotnym w rachunku prawdopodobieństwa jest *zdarzenie elementarne* ω . Na przykład, wynik rzutu monetą - orzeł lub reszka - jest takim zdarzeniem. Zbiór zdarzeń elementarnych oznaczamy przez Ω . W naszym przykładzie

$$\Omega = \{\omega_O, \omega_R\}. \quad (1.1)$$

Niech 2^Ω oznacza zbiór wszystkich podzbiorów zbioru Ω :

$$2^\Omega = \{A; A \subset \Omega\}. \quad (1.2)$$

W naszym przykładzie

$$2^\Omega = \{\emptyset, \{\omega_O\}, \{\omega_R\}, \{\omega_O, \omega_R\}\}, \quad (1.3)$$

gdzie \emptyset oznacza zbiór pusty.

Rodzinę zbiorów $\mathcal{M} \subset 2^\Omega$ nazywamy σ -algebrą zbiorów, gdy spełnione są następujące warunki:

1. $\Omega \in \mathcal{M}$
2. $A \in \mathcal{M} \Rightarrow \Omega \setminus A \in \mathcal{M}$
3. $A_n \in \mathcal{M}$ dla $n = 1, 2, \dots \Rightarrow \bigcup_{n=1}^{\infty} A_n \in \mathcal{M}$

Elementy sigma algebry, $A \in \mathcal{M}$, nazywamy *zdarzeniami losowymi*.

Przykładami sigma algebry zbiorów są:

$$\mathcal{M} = \{\emptyset, \Omega\}, \quad \mathcal{M} = 2^\Omega. \quad (1.4)$$

Wprowadza się następującą terminologię:

- $A = \emptyset$ nazywa się zdarzeniem niemożliwym.
- $A = \Omega$ nazywa się zdarzeniem pewnym.
- $A' = \Omega \setminus A$ nazywa się zdarzeniem przeciwnym do zdarzenia A .

Odwzorowanie sigma algebry w zbiór liczb rzeczywistych

$$P: \mathcal{M} \rightarrow \mathbb{R} \quad (1.5)$$

nazywamy *miarą unormowaną* gdy

1. $P(A) \geq 0$
2. $P(\Omega) = 1$
3. P jest funkcją przeliczalnie addytywną, tzn.

$$P\left(\bigcup_{n=1}^{\infty} A_n\right) = \sum_{n=1}^{\infty} P(A_n) \quad (1.6)$$

dla każdego ciągu zbiorów $A_n \in \mathcal{M}$ parami rozłącznych, tzn. $A_i \cap A_j = \emptyset$ dla dowolnych $i, j \in \mathbb{N}$.

Trójkę

$$(\Omega, \mathcal{M}, P) \tag{1.7}$$

nazywamy *przestrzenią prawdopodobieństwa*, gdy $\Omega \neq \emptyset$ jest zbiorem zdarzeń elementarnych, \mathcal{M} jest sigma algebrą zdarzeń losowych, natomiast P jest miarą unormowaną określoną na \mathcal{M} . Nazywamy ją wtedy *prawdopodobieństwem*.

Wypiszmy kilka własności prawdopodobieństwa:

1. $P(\emptyset) = 0$
2. $A \subset B \Rightarrow P(B \setminus A) = P(B) - P(A)$
3. $A \subset B \Rightarrow P(A) \leq P(B)$
4. $0 \leq P(A) \leq 1$
5. $P(A') = 1 - P(A)$
6. $P(A_1 \cup A_2) = P(A_1) + P(A_2) - P(A_1 \cap A_2)$

Ostatni wzór możemy uogólnić korzystając z własności 6. Dla trzech zdarzeń losowych otrzymujemy

$$\begin{aligned} P(A_1 \cup A_2 \cup A_3) &= P(A_1) + P(A_2) + P(A_3) \\ &\quad - P(A_1 \cap A_2) - P(A_2 \cap A_3) - P(A_1 \cap A_3) \\ &\quad + P(A_1 \cap A_2 \cap A_3). \end{aligned} \tag{1.8}$$

natomiast dla dowolnego n mamy

$$\begin{aligned} P\left(\bigcup_{i=1}^n A_i\right) &= \sum_{i=1}^n P(A_i) - \sum_{i_1 < i_2} P(A_{i_1} \cap A_{i_2}) + \sum_{i_1 < i_2 < i_3} P(A_{i_1} \cap A_{i_2} \cap A_{i_3}) \\ &\quad - \dots + (-1)^{n+1} P(A_1 \cap \dots \cap A_n). \end{aligned} \tag{1.9}$$

Podobne wzory otrzymujemy dla prawdopodobieństwa przecięć zbiorów. Dla $n = 2$ ze wzoru 6, otrzymujemy

$$P(A_1 \cap A_2) = P(A_1) + P(A_2) - P(A_1 \cup A_2) \tag{1.10}$$

Podstawiając tę relację do wzoru (1.8) dostajemy wynik dla $n = 3$,

$$\begin{aligned} P(A_1 \cap A_2 \cap A_3) &= P(A_1) + P(A_2) + P(A_3) \\ &\quad - P(A_1 \cup A_2) - P(A_2 \cup A_3) - P(A_1 \cup A_3) \\ &\quad + P(A_1 \cup A_2 \cup A_3). \end{aligned} \tag{1.11}$$

Stosując metodę indukcji można udowodnić wzór dla dowolnego n ,

$$P\left(\bigcap_{i=1}^n A_i\right) = \sum_{i=1}^n P(A_i) - \sum_{i_1 < i_2} P(A_{i_1} \cup A_{i_2}) + \sum_{i_1 < i_2 < i_3} P(A_{i_1} \cup A_{i_2} \cup A_{i_3}) - \dots + (-1)^{n+1} P(A_1 \cup \dots \cup A_n). \quad (1.12)$$

Przedstawione sformułowanie teorii prawdopodobieństwa nazywamy schematem prawdopodobieństwa Kołmogorowa.

1.2 Prawdopodobieństwo warunkowe i wzór Bayesa

Prawdopodobieństwo warunkowe zdarzenia A pod warunkiem, że zaszło zdarzenie B jest określone przez

$$P(A|B) = \frac{P(A \cap B)}{P(B)}. \quad (1.13)$$

Zauważmy, że

$$\begin{aligned} P(A \cap B) &= P(A|B) P(B) \\ P(B \cap A) &= P(B|A) P(A), \end{aligned} \quad (1.14)$$

Ponieważ lewe strony obu równań są sobie równe to

$$P(B|A) P(A) = P(A|B) P(B) \quad (1.15)$$

Stąd otrzymujemy *wzór Bayesa*

$$\boxed{P(B|A) = \frac{P(A|B) P(B)}{P(A)}} \quad (1.16)$$

1.3 Zmienne losowe

Zmienną losową X jest odwzorowanie zbioru zdarzeń elementarnych w zbiór liczb rzeczywistych

$$X : \Omega \rightarrow \mathbb{R}. \quad (1.17)$$

W praktyce zmienna losowa jest określona jeśli podamy:

- zbiór I jej **dopuszczalnych wartości** liczbowych
- **rozkład prawdopodobieństwa** zadany na tym zbiorze.

Zbiór dopuszczalnych wartości I może być dyskretny, ciągły lub dyskretny i ciągły. Zbiór ten może być wielowymiarowy.

W przypadku pojedynczej dyskretnej zmiennej losowej rozkład prawdopodobieństwa dany jest nieujemną funkcją

$$P(x_i) \geq 0, \quad i = 1, 2, \dots \quad (1.18)$$

unormowaną do jedynki

$$\sum_i P(x_i) = 1. \quad (1.19)$$

Dla zmiennej losowej o wartościach ciągłych definiujemy *gęstością prawdopodobieństwa* $p(x)$ taką, że iloczyn

$$p(x) dx \quad (1.20)$$

jest prawdopodobieństwem tego że zmienna losowa X przyjmuje wartości z przedziału $(x, x + dx)$. Warunek unormowania przyjmuje teraz postać

$$\int_I p(x) dx = 1. \quad (1.21)$$

1.4 Momenty zmiennej losowej

Jeśli $f(X)$ jest funkcją liczbową określona na tym samym zbiorze co zmienna losowa X to jej *wartość średnia* to

$$\langle f(X) \rangle = \int f(x) p(x) dx \quad (1.22)$$

W szczególności m -ty moment zmiennej losowej X to

$$\mu_m = \langle X^m \rangle = \int x^m p(x) dx. \quad (1.23)$$

Liczba μ_1 to **wartość średnia** zmiennej losowej X ,

$$\mu_1 = \langle X \rangle = \int x p(x) dx, \quad (1.24)$$

natomiast **wariancja** X to

$$\sigma_X^2 = \langle (X - \langle X \rangle)^2 \rangle = \int (x - \langle X \rangle)^2 p(x) dx = \mu_2 - (\mu_1)^2. \quad (1.25)$$

Nie wszystkie rozkłady prawdopodobieństwa posiadają skończone momenty, na przykład rozkład Lorentza,

$$p(x) = \frac{1}{\pi} \frac{P}{(x-a)^2 + P^2}, \quad x \in R, \quad (1.26)$$

ich nie posiada. Ze względu na symetrię możemy jednak przyjąć $\mu_1 = a$.

1.5 Funkcja charakterystyczna

Funkcja charakterystyczna zmiennej losowej X to

$$G(k) = \langle e^{ikX} \rangle = \int_I dx e^{ikx} p(x) \quad (1.27)$$

łatwo się przekonać, że zachodzi

$$G(0) = 1, \quad |G(k)| < 1. \quad (1.28)$$

$G(k)$ jest *funkcją tworzącą* dla momentów μ_m . Rozwijając bowiem eksponentę pod całką w szereg Taylora znajdziemy

$$G(k) = \int_I dx \left\{ \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(ikx)^m}{m!} \right\} p(x) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(ik)^m}{m!} \left\{ \int_I dx x^m p(x) \right\}.$$

i ostatecznie

$$G(k) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(ik)^m}{m!} \mu_m \quad (1.29)$$

Stąd wynika następujący wzór dla momentów

$$\mu_m = \left. \frac{d^m G}{d(ik)^m} \right|_{k=0}. \quad (1.30)$$

Tak więc pochodne $G(k)$ w punkcie $k = 0$ istnieją do tego samego rzędu co momenty.

1.6 Kumulanty

Logarytm funkcji charakterystycznej służy do zdefiniowania *kumulant* κ_m zmiennej losowej X

$$\ln G(k) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(ik)^m}{m!} \kappa_m \quad (1.31)$$

i stąd otrzymujemy wzór dla kumulant

$$\kappa_m = \left. \frac{d^m \ln G(k)}{d(ik)^m} \right|_{k=0}. \quad (1.32)$$

Kumulanty są kombinacjami momentów, przykładowo

$$\begin{aligned} \kappa_1 &= \mu_1 \\ \kappa_2 &= \mu_2 - \mu_1^2 = \sigma^2 \\ \kappa_3 &= \mu_3 - 3\mu_2\mu_1 + 2\mu_1^3 \\ \kappa_4 &= \mu_4 - 4\mu_3\mu_1 - 3\mu_2^2 + 12\mu_2\mu_1^2 - 6\mu_1^4. \end{aligned} \quad (1.33)$$

Pierwsza kumulanta jest więc równa wartości średniej zmiennej μ_X losowej, a druga jej wariancji σ_X^2 .

Rozdział 2

Przykłady rozkładów prawdopodobieństw

2.1 Rozkład dwumianowy

Rozpatrzmy N prób. Pytamy jakie jest prawdopodobieństwo n sukcesów jeśli prawdopodobieństwo pojedynczego sukcesu wynosi p . Jeśli próby są niezależne to prawdopodobieństwo jest iloczynem trzech czynników:

- liczby sposobów, na które n sukcesów realizuje się w N próbach: $\binom{N}{n}$
- prawdopodobieństwa odniesienia n sukcesów: p^n
- prawdopodobieństwa porażki w pozostałych próbach: $(1 - p)^{N-n}$.

Stąd wzór dla rozkładu dwumianowego, w którym zmienna losowa przyjmuje skończoną liczbę wartości, $n = 0, 1, 2, \dots, N$:

$$P_N(n, p) = \binom{N}{n} p^n (1 - p)^{N-n} \quad (2.1)$$

gdzie symbol Newtona

$$\binom{N}{n} = \frac{N!}{n!(N - n)!} \quad (2.2)$$

Prawdopodobieństwo p jest parametrem tego rozkładu. Jest on unormowany do jedynki

$$\sum_{n=0}^N P_N(n, p) = \sum_{n=0}^N \binom{N}{n} p^n (1-p)^{N-n} = (p+1-p)^N = 1. \quad (2.3)$$

Funkcja charakterystyczna rozkładu dwumianowego to

$$\begin{aligned} G_N(k) &= \sum_{n=0}^N e^{ikn} P_N(n, p) = \sum_{n=0}^N \binom{N}{n} (e^{ik}p)^n (1-p)^{N-n} \\ &= (1-p + e^{ik}p)^N. \end{aligned} \quad (2.4)$$

Stąd funkcjonal generujący dla kumulant

$$\ln G_N(k) = N \ln(1 + p(e^{ik} - 1)) \quad (2.5)$$

Licząc kumulanty ze wzoru (1.32), znajdujemy wartość średnią i dyspersję

$$\kappa_1 = \mu_1 = N \left. \frac{pe^{ik}}{1 + p(e^{ik} - 1)} \right|_{k=0} = Np \quad (2.6)$$

$$\kappa_2 = \sigma^2 = Np(1-p). \quad (2.7)$$

2.2 Błądzenie przypadkowe

Szczególnym przypadkiem rozkładu dwumianowego jest rozkład opisujący jednowymiarowe błądzenie przypadkowe z równymi prawdopodobieństwami ruchu w prawo i w lewo, $p = q = 1/2$,

$$P_N(n, 1/2) = \frac{1}{2^N} \binom{N}{n}. \quad (2.8)$$

Wartość średnia i dyspersja w tym przypadku to

$$\mu_1(n) = \frac{N}{2}, \quad \sigma^2(n) = \frac{N}{4}. \quad (2.9)$$

Sumaryczne przesunięcie r z punktu startowego po N krokach jest zmienną losową równą

$$r = n - (N - n) = 2n - N. \quad (2.10)$$

o zakresie $-N \leq r \leq N$. Zauważmy, że r i N są obie parzyste lub nieparzyste.

Rozkład prawdopodobieństwa r otrzymujemy z rozkładu (2.8) wyliczając $n = (N + r)/2$ z (2.10) i podstawiając do (2.8),

$$P_N(r) = \frac{1}{2^N} \frac{N!}{((N - r)/2)!((N + r)/2)!}. \quad (2.11)$$

Wartość średnia i dyspersja sumarycznego przesunięcia to odpowiednio

$$\mu_1(r) = 0, \quad \sigma^2(r) = N. \quad (2.12)$$

2.3 Rozkład Poissona

Dla dużej liczby prób N i małego prawdopodobieństwa pojedynczego sukcesu rozkład dwumianowy przechodzi w rozkład Poissona w następującej granicy

$$N \rightarrow \infty, \quad p \rightarrow 0, \quad Np = \mu = \text{const}. \quad (2.13)$$

Podstawiając $p = \mu/N$ do (2.1), otrzymujemy

$$\begin{aligned} P_N\left(n, \frac{\mu}{N}\right) &= \frac{N!}{n!(N - n)!} \left(\frac{\mu}{N}\right)^n \left(1 - \frac{\mu}{N}\right)^{N-n} \\ &= \frac{N!}{(N - n)!} \frac{1}{N^n (1 - \mu/N)^n} \left(\frac{\mu^n}{n!}\right) \left(1 - \frac{\mu}{N}\right)^N \\ &= \frac{N(N - 1) \dots (N - n + 1)}{(N - \mu)^n} \left(\frac{\mu^n}{n!}\right) \left(1 - \frac{\mu}{N}\right)^N \\ &= \frac{\left(1 - \frac{1}{N}\right) \dots \left(1 - \frac{n-1}{N}\right)}{\left(1 - \frac{\mu}{N}\right)^n} \left(\frac{\mu^n}{n!}\right) \left(1 - \frac{\mu}{N}\right)^N \end{aligned} \quad (2.14)$$

Wykonując granicę $N \rightarrow \infty$ przy ustalonej liczbie sukcesów n , znajdujemy

$$\lim_{N \rightarrow \infty} P_N\left(n, \frac{\mu}{N}\right) = \frac{\mu^n}{n!} \lim_{N \rightarrow \infty} \left(1 - \frac{\mu}{N}\right)^N = \frac{\mu^n}{n!} e^{-\mu}. \quad (2.15)$$

Stąd rozkład Poissona zmiennej losowej $n = 0, 1, 2, \dots$

$$\boxed{P(n, \mu) = \frac{\mu^n}{n!} e^{-\mu}}. \quad (2.16)$$

Jest to rozkład unormowany do jedynki

$$\sum_{n=0}^{\infty} P(n, \mu) = e^{-\mu} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\mu^n}{n!} = e^{-\mu} e^{\mu} = 1. \quad (2.17)$$

Policzmy funkcję charakterystyczną

$$\begin{aligned} G(k) &= \sum_{n=0}^{\infty} e^{ikn} P(n, \mu) = e^{-\mu} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(e^{ik}\mu)^n}{n!} = e^{-\mu} \exp\{e^{ik}\mu\} \\ &= \exp\{\mu(e^{ik} - 1)\}. \end{aligned} \quad (2.18)$$

Stąd funkcjonal generujący dla kumulant

$$\ln G(k) = \mu(e^{ik} - 1) = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(ik)^m}{m!} \mu. \quad (2.19)$$

Widzimy, że wszystkie kumulanty są identyczne i równe wartości średniej

$$\boxed{\kappa_m = \mu} \quad (2.20)$$

Stąd wartość średnia i wariancja rozkładu Poissona są sobie równe

$$\sigma^2 = \langle n \rangle = \mu. \quad (2.21)$$

2.4 Rozkład Gaussa

Rozkład Gaussa jest określony dla zmiennej losowej X o wartościach rzeczywistych $x \in (-\infty, \infty)$:

$$\boxed{p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-(x-\mu)^2/2\sigma^2}} \quad (2.22)$$

Normalizacja jest tak dobrana, że rozkład jest unormowany do jedynki

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx p(x) = 1. \quad (2.23)$$

Licząc funkcję charakterystyczną otrzymujemy

$$G(k) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} P(x) dx = e^{ik\mu - \frac{1}{2}\sigma^2 k^2}. \quad (2.24)$$

Stąd funkcjonal generujący dla kumulant

$$\ln G(k) = ik\mu - \frac{1}{2}\sigma^2 k^2 = ik\mu + \frac{(ik)^2}{2!}\sigma^2. \quad (2.25)$$

Wykorzystując definicję (1.31), znajdujemy różne od zera tylko dwie pierwsze kumulanty

$$\kappa_1 = \mu, \quad \kappa_2 = \sigma^2, \quad \kappa_{k>2} = 0. \quad (2.26)$$

Z relacji (1.33) wynika, że μ to wartość średnia, a σ^2 to wariancja zmiennej losowej X . Wielkość $\sigma = \sqrt{\sigma^2}$ to dyspersja, która określa szerokość rozkładu Gaussa.

2.5 Rozkład Poissona a rozkład Gaussa

Dla dużych wartości parametru $\mu \gg 1$, rozkład Poissona,

$$P(n, \mu) = \frac{\mu^n}{n!} e^{-\mu}, \quad (2.27)$$

dąży do rozkładu Gaussa dla wartości zmiennej losowych n bliskich μ , $n \approx \mu$. Korzystając ze wzoru Stirlinga dla dużych n

$$n! \approx n^n e^{-n} \sqrt{2\pi n}, \quad (2.28)$$

zapiszemy wzór (2.27) w postaci

$$P(n, \mu) \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi n}} \frac{e^{n \ln \mu - \mu}}{e^{n \ln n - n}} = \frac{1}{\sqrt{2\pi n}} e^{n - \mu + n \ln(\mu/n)}. \quad (2.29)$$

Dla wartości $n \approx \mu$ możemy rozwinąć

$$\ln(\mu/n) = \ln(1 + (\mu/n - 1)) \approx (\mu/n - 1) - \frac{1}{2}(\mu/n - 1)^2. \quad (2.30)$$

Stąd otrzymujemy

$$P(n, \mu) \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi n}} e^{-(n-\mu)^2/(2n)}. \quad (2.31)$$

Wykorzystując następnie warunek $n \approx \mu$, znajdujemy rozkład Gaussa,

$$P(n, \mu) \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi\mu}} e^{-(n-\mu)^2/(2\mu)}, \quad (2.32)$$

o wartości średniej μ i szerokości $\sqrt{\mu}$

2.6 Błądzenie przypadkowe a rozkład Gaussa

Dla dużej liczby kroków N , rozkład (2.11) błądzenia przypadkowego jest bliski rozkładowi Gaussa. Korzystając ze wzoru Stirlinga (2.28) znajdujemy

$$P_N(r) = \frac{1}{2^N} \frac{N!}{((N-r)/2)!((N+r)/2)!}$$

$$\approx \frac{N^N \sqrt{2\pi N}}{(N-r)^{(N-r)/2} (N+r)^{(N+r)/2} \sqrt{\pi^2(N-r)(N+r)}} \quad (2.33)$$

Porządkując to wyrażenie otrzymujemy

$$P_N(r) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi N(1-r^2/N^2)}} \frac{1}{(1-r/N)^{(N-r)/2} (1+r/N)^{(N+r)/2}} \quad (2.34)$$

$$= \sqrt{\frac{2}{\pi N(1-r^2/N^2)}} \exp\left\{-\frac{N-r}{2} \ln(1-r/N) - \frac{N+r}{2} \ln(1+r/N)\right\}$$

Wykorzystując przybliżenie $\ln(1+x) = x - x^2/2$ dla $x \ll 1$ dostajemy dla $r \ll n$

$$P_N(r) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi N}} \exp\left\{-\frac{N-r}{2} \left(-\frac{r}{N} - \frac{r^2}{2N^2}\right) - \frac{N+r}{2} \left(\frac{r}{N} - \frac{r^2}{2N^2}\right)\right\}$$

$$\approx 2 \frac{1}{\sqrt{2\pi N}} \exp\left\{-\frac{r^2}{2N}\right\} \quad (2.35)$$

Otrzymaliśmy w ten sposób rozkład proporcjonalny (z czynnikiem 2) do rozkładu Gaussa o wartości średniej i dyspersji

$$\mu_1(r) = 0, \quad \sigma^2(r) = N. \quad (2.36)$$

Rozdział 3

Momenty i kumulanty faktorialne

3.1 Funkcja tworząca

Rozkłady prawdopodobieństwa $P(n)$ zmiennej dyskretnej n można generować przy pomocy funkcji tworzącej

$$Z(x) = \sum_{n=0}^{\infty} x^n P(n) \quad (3.1)$$

Zakładając, że jest to szereg zbieżny w zmiennej x w pewnym przedziale zbieżności o promieniu $R > 1$ wokół $x = 0$ widzimy, że $P(n)$ są proporcjonalne do współczynników rozwinięcia funkcji tworzącej w szereg Taylora. Stąd

$$P(n) = \frac{1}{n!} \left. \frac{d^n Z}{dx^n} \right|_{x=0} \quad (3.2)$$

Warunek unormowania prawdopodobieństwa to

$$Z(1) = \sum_{n=0}^{\infty} P(n) = 1 \quad (3.3)$$

Przykładowo, dla prawdopodobieństwa Poissona

$$P(n, \mu) = \frac{\mu^n}{n!} e^{-\mu} \quad (3.4)$$

znajdujemy

$$Z(x) = \sum_{n=0}^{\infty} x^n \frac{\mu^n}{n!} e^{-\mu} = e^{-\mu} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(x\mu)^n}{n!} = e^{\mu(x-1)} \quad (3.5)$$

3.2 Momenty i kumulanty faktorialne

Zdefiniujmy nową funkcję

$$F(x) = \ln Z(x) \quad (3.6)$$

Zauważmy, że

$$F(1) = 0 \quad (3.7)$$

Rozwińmy więc tę funkcję w szereg Taylora wokół $x = 1$

$$F(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{c_n}{n!} (x-1)^n \quad (3.8)$$

Współczynniki rozwinięcia dla $n \geq 1$

$$c_n = \left. \frac{d^n F(x)}{dx^n} \right|_{x=1} \quad (3.9)$$

nazywamy **kumulantami faktorialnymi** lub **korelacjami** rozkładu prawdopodobieństwa $P(n)$,

Dla rozkładu Poissona otrzymujemy z równania (3.5)

$$F(x) = \mu(x-1), \quad (3.10)$$

w więc tylko pierwszy współczynnik jest różny od zera

$$c_1 = \mu, \quad c_{n \geq 2} = 0. \quad (3.11)$$

Przypomnijmy, że normalne kumulanty dla rozkładu Poissona to

$$\kappa_k = \mu^k \quad (3.12)$$

natomiast dla rozkładu Gaussa jedyne niezerowe kumulanty to

$$\kappa_1 = \mu, \quad \kappa_2 = \sigma^2 \quad (3.13)$$

Tak więc kumulanty faktorialne c_k pełnią dla rozkładu Poissona taką samą rolę jaką pełnią normalne kumulanty κ_k dla rozkładu Gaussa. Oba rodzaje kumulant pozwalają scharakteryzować te rozkłady jako rozkłady graniczne z punktu widzenia innych rozkładów.

Moment faktorialny k -tego rzędu rozkładu prawdopodobieństwa $P(n)$ to

$$\langle n \rangle_k = \sum_{n=k}^{\infty} n(n-1) \dots (n-k+1) P(n) \quad (3.14)$$

gdzie $k = 1, 2, \dots$. Dla $k = 1$ otrzymujemy wartość średnią

$$\langle n \rangle_1 = \sum_{n=1}^{\infty} n P(n) = \bar{n} \quad (3.15)$$

Natomiast dla $k = 2$ mamy

$$\langle n \rangle_2 = \sum_{n=2}^{\infty} n(n-1) P(n) \quad (3.16)$$

Momenty faktorialne można generować przy pomocy funkcji tworzącej $Z(x)$ poprzez kolejne różniczkowania po zmiennej x

$$\langle n \rangle_k = \left. \frac{d^k Z(x)}{dx^k} \right|_{x=1} \quad (3.17)$$

Otrzymujemy więc je ze współczynników rozwinięcia Taylora $Z(x)$ wokół $x = 1$,

$$Z(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \left. \frac{d^k Z}{dx^k} \right|_{x=1} (x-1)^k = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\langle n \rangle_k}{k!} (x-1)^k \quad (3.18)$$

gdzie dodatkowo zdefiniowaliśmy $\langle n \rangle_0 = 1$. Dla rozkładu Poissona znajdujemy

$$Z(x) = e^{\mu(x-1)} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\mu^k}{k!} (x-1)^k \quad (3.19)$$

i stąd

$$\langle n \rangle_k = \mu^k = \bar{n}^k \quad (3.20)$$

Momenty faktorialne $\langle n \rangle_k$ są powiązane z korelacjami c_n . Dla kolejnych współczynników otrzymujemy, wykorzystując warunek $Z(1) = 1$,

$$\begin{aligned} c_1 &= \left. \frac{d \ln Z}{dx} \right|_{x=1} = \left. \frac{1}{Z} \frac{dZ}{dx} \right|_{x=1} = \langle n \rangle_1 \quad (3.21) \\ c_2 &= \left(-\frac{1}{Z^2} \left(\frac{dZ}{dx} \right)^2 + \frac{1}{Z} \frac{d^2 Z}{dx^2} \right) \Big|_{x=1} = \langle n \rangle_2 - \langle n \rangle_1^2 \\ c_3 &= \left(\frac{2}{Z^3} \left(\frac{dZ}{dx} \right)^3 - \frac{3}{Z^2} \frac{dZ}{dx} \frac{d^2 Z}{dx^2} + \frac{1}{Z} \frac{d^3 Z}{dx^3} \right) \Big|_{x=1} = \langle n \rangle_3 - 3 \langle n \rangle_1 \langle n \rangle_2 + 2 \langle n \rangle_1^3 \end{aligned}$$

Związek pomiędzy kumulantami faktorialnymi, a momentami faktorialnymi jest taki sam jak związek pomiędzy kumulantami, a momentami rozkładu, równanie (1.33).

Rozdział 4

Rozkłady wielu zmiennych losowych

Dla wielu zmiennych losowych X_1, X_2, \dots, X_n definiuje się *łączny rozkład gęstości prawdopodobieństwa*,

$$P_n(x_1, x_2, \dots, x_n) \geq 0, \quad (4.1)$$

że przyjmują one wartości odpowiednio z przedziałów $(x_i, x_i + dx_i)$. Rozkład ten jest unormowany do jedynki.

$$\int P_n(x_1, \dots, x_n) dx_1 \dots dx_n = 1. \quad (4.2)$$

Całkując po $k < n$ zmiennych otrzymuje się *rozkłady brzegowe*

$$P_m(x_1, \dots, x_m) = \int P_n(x_1, \dots, x_m, \underline{x_{m+1}, \dots, x_n}) \underline{dx_{m+1} \dots dx_n} \quad (4.3)$$

Jeżeli zmienne losowe X_i są *niezależne* to rozkład (4.1) jest iloczynem rozkładów prawdopodobieństwa poszczególnych zmiennych losowych

$$P_n(x_1, x_2, \dots, x_n) = \prod_{i=1}^n P^{(i)}(x_i) \quad (4.4)$$

4.1 Momenty

Dla rozkładów wielu zmiennych losowych funkcja charakterystyczna to transformata Fouriera

$$G_n(k_1, \dots, k_n) = \int e^{i(k_1 x_1 + \dots + k_n x_n)} P_n(x_1, \dots, x_n) dx_1 \dots dx_n. \quad (4.5)$$

Jeśli zmienne losowe są niezależne to z (4.4) wynika wzór

$$G_n(k_1, \dots, k_n) = \prod_{i=1}^n G^{(i)}(k_i), \quad (4.6)$$

gdzie $G^{(i)}(k_i)$ to funkcje charakterystyczne rozkładów pojedynczej zmiennej.

Momenty wielowymiarowego rozkładu

$$\langle X_1^{m_1} \dots X_n^{m_n} \rangle = \int x_1^{m_1} \dots x_n^{m_n} P_n(x_1, \dots, x_n) dx_1 \dots dx_n. \quad (4.7)$$

są generowane przez rozwinięcie funkcji charakterystycznej w szereg Taylora

$$\boxed{G_n(k_1, \dots, k_n) = \sum_{(m_1 \dots m_n)=0}^{\infty} \frac{(ik_1)^{m_1} \dots (ik_n)^{m_n}}{(m_1)! \dots (m_n)!} \langle X_1^{m_1} \dots X_n^{m_n} \rangle} \quad (4.8)$$

gdzie sumujemy po wszystkich ciągach n -wyrazowych (m_1, \dots, m_n) .

4.2 Kumulanty

Wielowymiarowe kumulanty $\langle\langle X_1^{m_1} \dots X_n^{m_n} \rangle\rangle$ definiujemy poprzez rozwinięcie w szereg Taylora logarytmu funkcji charakterystycznej (4.8):

$$\boxed{\ln G_n(k_1, \dots, k_n) = \sum_{(m_1 \dots m_n)'=0}^{\infty} \frac{(ik_1)^{m_1} \dots (ik_n)^{m_n}}{(m_1)! \dots (m_n)!} \langle\langle X_1^{m_1} \dots X_n^{m_n} \rangle\rangle} \quad (4.9)$$

gdzie z sumowania wyłączony jest człon z $m_1 = \dots = m_n = 0$.

Ważną kumulantą jest $(n \times n)$ wymiarowa macierz kowariancji

$$\langle\langle X_i X_j \rangle\rangle = \langle\langle (X_i - \langle X_i \rangle)(X_j - \langle X_j \rangle) \rangle\rangle = \langle X_i X_j \rangle - \langle X_i \rangle \langle X_j \rangle. \quad (4.10)$$

Diagonalne elementy tej macierzy to *wariancje* poszczególnych zmiennych losowych,

$$\sigma_i^2 = \langle\langle X_i^2 \rangle\rangle = \langle X_i^2 \rangle - (\langle X_i \rangle)^2, \quad (4.11)$$

natomiast elementy pozadiagonalne to *kowariancje*.

$$\text{cov}_{ij} = \langle\langle X_i X_j \rangle\rangle, \quad i \neq j. \quad (4.12)$$

Współczynniki korelacji to

$$\rho_{ij} = \frac{\langle\langle X_i X_j \rangle\rangle}{\sqrt{\langle\langle X_i^2 \rangle\rangle \langle\langle X_j^2 \rangle\rangle}}. \quad (4.13)$$

Rozważmy przypadek $n = 2$ ze zmiennymi losowymi X_1 i X_2 . Zmienne są *statystycznie niezależne* jeśli spełniony jest któryś spośród poniższych warunków. Implikuje on wtedy pozostałe.

- wszystkie momenty faktoryzują się:

$$\langle X_1^{m_1} X_2^{m_2} \rangle = \langle X_1^{m_1} \rangle \langle X_2^{m_2} \rangle$$

- funkcja charakterystyczna faktoryzuje się:

$$G(k_1, k_2) = G_1(k_1)G_2(k_2)$$

- kumulanty znikają:

$$\langle\langle X_1^{m_1} X_2^{m_2} \rangle\rangle = 0, \quad \text{jeśli } m_1, m_2 \neq 0.$$

Słabszym warunkiem od statystycznej niezależności jest *brak korelacji*, co wyraża się znikaniem kowariancji

$$\langle\langle X_1 X_2 \rangle\rangle = 0. \quad (4.14)$$

4.3 Wielowymiarowy rozkład Gaussa

Wprowadzając notację wektorową $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ wielowymiarowy rozkład Gaussa jest określony przez wzór

$$P_n(\mathbf{x}) = C \exp \left\{ -\frac{1}{2} \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} + \mathbf{b}^T \mathbf{x} \right\} \quad (4.15)$$

gdzie $\mathbf{A} = \mathbf{A}^T$ jest *dodatnio określoną macierzą symetryczną* o wymiarze $(n \times n)$, natomiast \mathbf{b} jest stałym wektorem n -wymiarowym. Stała C jest tak dobrana by rozkład $P(\mathbf{x})$ był unormowany do jedynki

$$\int d^n \mathbf{x} P_n(\mathbf{x}) = 1. \quad (4.16)$$

gdzie $d^n \mathbf{x} = dx_1 dx_2 \dots dx_n$. Tak więc należy policzyć

$$C^{-1} = \int d^n \mathbf{x} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} + \mathbf{b}^T \mathbf{x} \right\}. \quad (4.17)$$

4.4 Stała normalizacyjna

Z symetryczności macierzy \mathbf{A} wynika, że istnieje macierz ortogonalna \mathbf{O} , diagonalizująca \mathbf{A}

$$\Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n) = \mathbf{O}^T \mathbf{A} \mathbf{O}. \quad (4.18)$$

Z dodatniej określoności \mathbf{A} wynika, że wartości własne $\lambda_i > 0$. Ponadto

$$\Lambda^{-1} = \text{diag}\left(\frac{1}{\lambda_1}, \frac{1}{\lambda_2}, \dots, \frac{1}{\lambda_n}\right) = \mathbf{O}^{-1} \mathbf{A}^{-1} (\mathbf{O}^T)^{-1} = \mathbf{O}^T \mathbf{A}^{-1} \mathbf{O}, \quad (4.19)$$

gdź własność ortogonalności macierzy \mathbf{O} prowadzi do $\mathbf{O}^{-1} = \mathbf{O}^T$.

Wykonując więc transformację $\mathbf{x} = \mathbf{O}\mathbf{y}$ we wzorze (4.17), dostajemy

$$\begin{aligned} C^{-1} &= \int d^n \mathbf{y} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \mathbf{y}^T \Lambda \mathbf{y} + (\mathbf{O}^T \mathbf{b})^T \mathbf{y} \right\} \\ &= \prod_{i=1}^n \int_{-\infty}^{\infty} dy_i \exp \left\{ -\frac{1}{2} \lambda_i y_i^2 + b'_i y_i \right\}, \end{aligned} \quad (4.20)$$

gdzie wprowadziliśmy oznaczenie $b'_i = (\mathbf{b}')_i = (\mathbf{O}^T \mathbf{b})_i$. Wykładnik eksponenty można zapisać w następującej formie

$$-\frac{\lambda_i}{2} \left(y_i^2 - 2 \frac{b'_i}{\lambda_i} y_i \right) = -\frac{\lambda_i}{2} \left(y_i - \frac{b'_i}{\lambda_i} \right)^2 + \frac{b_i'^2}{2\lambda_i}. \quad (4.21)$$

Zmieniając więc zmienne

$$x'_i = \sqrt{\frac{\lambda_i}{2}} \left(y_i - \frac{b'_i}{\lambda_i} \right), \quad (4.22)$$

i pamiętając, że

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-x^2} = \sqrt{\pi}, \quad (4.23)$$

znajdujemy

$$\begin{aligned} C^{-1} &= \sqrt{\frac{2^n}{\lambda_1 \dots \lambda_n}} \exp \left\{ \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \frac{b_i'^2}{\lambda_i} \right\} \prod_{i=1}^n \int_{-\infty}^{\infty} dx'_i e^{-x_i'^2} \\ &= \sqrt{\frac{(2\pi)^n}{\lambda_1 \dots \lambda_n}} \exp \left\{ \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \frac{b_i'^2}{\lambda_i} \right\}. \end{aligned} \quad (4.24)$$

Iloczyn wartości własnych jest równy wyznacznikowi macierzy Λ , stąd

$$\lambda_1 \dots \lambda_n = \det \Lambda = \det \mathbf{A} (\det \mathbf{O})^2 = \det \mathbf{A}. \quad (4.25)$$

gdyż $\det \mathbf{O} = 1$. Korzystając z wzoru (4.19) możemy zapisać sumę z eksponenty we wzorze (4.24) w postaci:

$$\sum_{i=1}^n \frac{b_i'^2}{\lambda_i} = (\mathbf{b}')^T \Lambda^{-1} \mathbf{b}' = \mathbf{b}^T (\mathbf{O} \Lambda^{-1} \mathbf{O}^T) \mathbf{b} = \mathbf{b}^T \mathbf{A}^{-1} \mathbf{b}. \quad (4.26)$$

Ostatecznie otrzymujemy

$$C^{-1} = \sqrt{\frac{(2\pi)^n}{\det \mathbf{A}}} \exp\left\{\frac{1}{2} \mathbf{b}^T \mathbf{A}^{-1} \mathbf{b}\right\} \quad (4.27)$$

i stała normalizacyjna rozkładu Gaussa wynosi

$$C = \sqrt{\frac{\det \mathbf{A}}{(2\pi)^n}} \exp\left\{-\frac{1}{2} \mathbf{b}^T \mathbf{A}^{-1} \mathbf{b}\right\} \quad (4.28)$$

łącąc wzór (4.19) z wynikiem (4.27), otrzymujemy przy tej okazji następujący ważny wzór

$$\boxed{\int d^n \mathbf{x} \exp\left\{-\frac{1}{2} \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} + \mathbf{b}^T \mathbf{x}\right\} = \sqrt{\frac{(2\pi)^n}{\det \mathbf{A}}} \exp\left\{\frac{1}{2} \mathbf{b}^T \mathbf{A}^{-1} \mathbf{b}\right\}} \quad (4.29)$$

4.5 Funkcja charakterystyczna rozkładu Gaussa

Obliczmy funkcję charakterystyczną rozkładu Gaussa (4.15)

$$\begin{aligned} G_n(\mathbf{k}) &= \int d^n \mathbf{x} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} P_n(\mathbf{x}) \\ &= C \int d^n \mathbf{x} \exp\left\{-\frac{1}{2} \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} + (\mathbf{b} + i\mathbf{k})^T \mathbf{x}\right\} \\ &= C \sqrt{\frac{(2\pi)^n}{\det \mathbf{A}}} \exp\left\{\frac{1}{2} (\mathbf{b} + i\mathbf{k})^T \mathbf{A}^{-1} (\mathbf{b} + i\mathbf{k})\right\}. \end{aligned} \quad (4.30)$$

Stąd po podstawieniu wartości stałej normalizacyjnej, znajdujemy

$$\boxed{G_n(\mathbf{k}) = \exp\left\{-\frac{1}{2} \mathbf{k}^T \mathbf{A}^{-1} \mathbf{k} + i \mathbf{k}^T \mathbf{A}^{-1} \mathbf{b}\right\}} \quad (4.31)$$

Logarytm funkcji korelacji to

$$\begin{aligned} \ln G_n(\mathbf{k}) &= -\frac{1}{2} \mathbf{k}^T \mathbf{A}^{-1} \mathbf{k} + i \mathbf{k}^T \mathbf{A}^{-1} \mathbf{b} \\ &= \sum_{i,j=1}^n \frac{(ik_i)(ik_j)}{2} (\mathbf{A}^{-1})_{ij} + \sum_{i=1}^n (ik_i)(\mathbf{A}^{-1} \mathbf{b})_i. \end{aligned} \quad (4.32)$$

Stąd jedynie niezerowe kumulanty to wartości średnie

$$\langle X_i \rangle = \langle\langle X_i \rangle\rangle = (\mathbf{A}^{-1} \mathbf{b})_i \quad (4.33)$$

oraz macierz kowariancji

$$\langle\langle X_i X_j \rangle\rangle = (\mathbf{A}^{-1})_{ij}. \quad (4.34)$$

Rozkład Gaussa jest więc całkowicie określony przez wartości średnie i macierz kowariancji zmiennych.

Jeżeli zmienne losowe nie są skorelowane, tzn. $\langle\langle X_i X_j \rangle\rangle \sim \delta_{ij}$, to macierz \mathbf{A}^{-1} jest diagonalna, a zatem i \mathbf{A} jest diagonalna. Wtedy wielowymiarowy rozkład Gaussa faktoryzuje się co oznacza, że zmienne losowe są statystycznie niezależne. Tak więc dla rozkładu Gaussa brak korelacji oznacza niezależność statystyczną. Niezależność tą można zawsze uzyskać dokonując liniowej transformacji zmiennych (4.22).

4.6 Twierdzenie Wicka

Rozważmy rozkład Gaussa z $\mathbf{b} = 0$:

$$P_n(\mathbf{x}) = C \exp \left\{ -\frac{1}{2} \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} \right\}, \quad (4.35)$$

co oznacza, że wartość średnia każdej zmiennej losowej jest równa zero. Wtedy zachodzi

$$\langle\langle X_i X_j \rangle\rangle = \langle X_i X_j \rangle = (\mathbf{A}^{-1})_{ij}, \quad (4.36)$$

a funkcja charakterystyczna to

$$\begin{aligned} G_n(\mathbf{k}) &= \exp \left\{ -\frac{1}{2} \mathbf{k}^T \mathbf{A}^{-1} \mathbf{k} \right\} \\ &= \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^n (\mathbf{A}^{-1})_{ij} k_i k_j \right\} \\ &= \prod_{i,j=1}^n \exp \left\{ -\frac{1}{2} (\mathbf{A}^{-1})_{ij} k_i k_j \right\}. \end{aligned} \quad (4.37)$$

Rozwijając eksponentę w szereg Taylora, znajdujemy

$$\begin{aligned} G_n(\mathbf{k}) &= \prod_{i,j=1}^n \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} \left(\frac{(ik_i)(ik_j)}{2} \langle X_i X_j \rangle \right)^m \\ &= \prod_{i,j=1}^n \left(1 + \frac{(ik_i)(ik_j)}{2} \langle X_i X_j \rangle + \dots \right). \end{aligned} \quad (4.38)$$

W sumie występuje tylko parzysta liczba czynników (ik_i) . Oznacza to, że różne od zera są tylko momenty z parzystą liczbą $(m_1 + \dots + m_n)$ we wzorze

$$G_n(\mathbf{k}) = \sum_{(m_1 \dots m_n)=0}^{\infty} \frac{(ik_1)^{m_1} \dots (ik_n)^{m_n}}{(m_1)! \dots (m_n)!} \langle X_1^{m_1} \dots X_n^{m_n} \rangle. \quad (4.39)$$

Interesują nas momenty z $m_i \leq 1$,

$$\langle X_{i_1} X_{i_2} \dots X_{i_{2k}} \rangle, \quad (4.40)$$

w których liczba składników jest parzysta, a wskaźniki różnią się między sobą

$$i_1 < i_2 < \dots < i_{2k}. \quad (4.41)$$

Wtedy wyrażenia reprezentowane przez kropki w (4.38) nie dają wkładu do momentów. Porównując prawe strony wyrażen (4.39) i (4.38), otrzymujemy

$$\langle X_{i_1} X_{i_2} \dots X_{i_{2k}} \rangle = \sum \langle X_i X_j \rangle \langle X_k X_l \rangle \dots \langle X_m X_n \rangle, \quad (4.42)$$

gdzie sumujemy po wszystkich podziałach ciągu $(i_1, i_2, \dots, i_{2k})$ na uporządkowane pary. Liczba takich podziałów to

$$(2k-1)(2k-3) \dots 3 \cdot 1 = \frac{(2k)!}{2^k k!}. \quad (4.43)$$

Czynnik $1/2$ ze wzoru (4.38) nie pojawia się po prawej stronie (4.42), gdyż każda para wskaźników występuje dwukrotnie w iloczynie w tym wzorze.

Przykładowo, dla $k=2$ znajdujemy

$$\langle X_1 X_2 X_3 X_4 \rangle = \langle X_1 X_2 \rangle \langle X_3 X_4 \rangle + \langle X_1 X_3 \rangle \langle X_2 X_4 \rangle + \langle X_1 X_4 \rangle \langle X_2 X_3 \rangle.$$

4.7 Centralne twierdzenie graniczne

Rozważmy n niezależnych zmiennych losowych X_1, X_2, \dots, X_n posiadających taką samą wartość średnią μ i wariancję σ^2 . Poza tym ich indywidualne rozkłady prawdopodobieństwa są dowolne. Centralne twierdzenie graniczne orzeka, że dla $n \rightarrow \infty$, zmienna losowa

$$Y = \frac{X_1 + X_2 + \dots + X_n - n\mu}{\sigma\sqrt{n}} \quad (4.44)$$

jest opisywana rozkładem Gaussa z wartością średnią $\langle Y \rangle = 0$ i wariancją $\sigma^2 = 1$.

Dowód przeprowadzimy definiując nowe zmienne losowe $\bar{X}_i = X_i - \mu$, dla których wartość średnia $\langle \bar{X}_i \rangle = 0$. Nie wpływa to na wariancję, gdyż dla nowej zmiennej mamy

$$\sigma_{\bar{X}_i}^2 = \langle \bar{X}_i^2 \rangle = \langle (X_i - \mu)^2 \rangle = \sigma^2. \quad (4.45)$$

Funkcja charakterystyczna zmiennej Y to

$$\begin{aligned} G(k) &= \int e^{ik(\bar{x}_1 + \dots + \bar{x}_n)/(\sigma\sqrt{n})} P^{(1)}(\bar{x}_1) \dots P^{(n)}(\bar{x}_n) d\bar{x}_1 \dots d\bar{x}_n \\ &= \prod_{i=1}^n G^{(i)}\left(\frac{k}{\sigma\sqrt{n}}\right) = \left(1 - \frac{k^2}{2n} + \dots\right)^n \rightarrow e^{-\frac{1}{2}k^2}. \end{aligned}$$

W granicy dużych n otrzymaliśmy funkcję charakterystyczną rozkładu Gaussa (2.24) o zerowej wartości średniej i wariancji $\sigma^2 = 1$. Zaniebane wyrazy w nawiasie są co najmniej rzędu $1/n^2$ i mogą być pominięte w rozważanej granicy.

Rozdział 5

Procesy stochastyczne

5.1 Definicja

Funkcja losowa Y to odwzorowanie liczb rzeczywistych w zbiór zmiennych losowych

$$Y : t \rightarrow Y(t). \quad (5.1)$$

W zależności od tego jaką zmienną jest t , funkcję losową nazywamy

- *procesem stochastycznym* gdy $t \in [0, \infty)$,
- *łańcuchem stochastycznym*, gdy $t \in \mathbb{Z}$,
- *polem stochastycznym* jeśli $t \in \mathbb{R}^D$.

Proces stochastyczny jest całkowicie określony poprzez zbiór *łącznych (gęstości) prawdopodobieństw* dla dowolnych chwil t_i :

$$P_n(y_1, t_1; \dots; y_n, t_n), \quad n = 1, 2, \dots \quad (5.2)$$

W przypadku ciągłych wartości zmiennych losowych, wielkość

$$P_n(y_1, t_1; \dots; y_n, t_n) dy_1 dy_2 \dots dy_n \quad (5.3)$$

określa prawdopodobieństwo, że zmienne losowe $Y_i(t_i)$ przyjmują wartości z przedziałów, odpowiednio, $(y_i, y_i + dy_i)$. Zbiór łącznych (gęstości) prawdopodobieństw nazywamy **hierarchią**.

Znajomość hierarchii pozwala policzyć każdą średnią, na przykład

$$\langle Y(t_1) \dots Y(t_n) \rangle = \int y_1 \dots y_n P_n(y_1, t_1; \dots; y_n, t_n) dy_1 \dots dy_n. \quad (5.4)$$

Hierarchia (5.2) spełnia cztery podstawowe warunki zgodności:

- (i) $P_n \geq 0$
- (ii) P_n nie zmienia się przy zamianie dwóch par (y_k, t_k) i (y_l, t_l)
- (iii) $\int P_n(y_1, t_1; \dots; y_n, t_n) dy_n = P_{n-1}(y_1, t_1; \dots; y_{n-1}, t_{n-1})$
- (iv) $\int P_1(y_1, t_1) dy_1 = 1$

Kolmogorow udowodnił, że każdy układ funkcji spełniających te cztery własności wyznacza pewien proces stochastyczny $Y(t)$.

Proces stochastyczny jest *stacjonarny* jeśli wszystkie P_n zależą jedynie od różnic czasów:

$$\boxed{P_n(y_1, t_1 + \tau; \dots; y_n, t_n + \tau) = P_n(y_1, t_1; \dots; y_n, t_n)} \quad (5.5)$$

Dla rozkładu P_1 zachodzi wtedy

$$P_1(y_1, t_1 + \tau) = P_1(y_1, t_1). \quad (5.6)$$

Tak więc, warunkiem koniecznym, ale niewystarczającym by proces był stacjonarny jest by P_1 nie zależało od czasu.

5.2 Prawdopodobieństwo warunkowe

Prawdopodobieństwo warunkowe zdefiniowane poniżej

$$\boxed{P_{1|1}(y_2, t_2 | y_1, t_1) = \frac{P_2(y_2, t_2; y_1, t_1)}{P_1(y_1, t_1)}} \quad (5.7)$$

określa prawdopodobieństwo że dla t_2 zmienna losowa $Y(t_2) = y_2$ *pod warunkiem*, że dla t_1 zmienna losowa przyjmuje wartość $Y(t_1) = y_1$. Prawdopodobieństwo warunkowe jest nieujemne i unormowane

$$\boxed{\int dy_2 P_{1|1}(y_2, t_2 | y_1, t_1) = 1} \quad (5.8)$$

Ogólnie, ustalając wartości zmiennej losowej $Y(t)$ w k zadanych chwilach, pytamy jakie jest prawdopodobieństwo przyjęcia określonych wartości w l innych chwilach. Wprowadzając oznaczenie

$$k = (y_k, t_k) \quad (5.9)$$

otrzymujemy następujący wzór na prawdopodobieństwo warunkowe

$$P_{l|k}(k+l \dots k+1 | k \dots 1) = \frac{P_{k+l}(k+l \dots k+1, k \dots 1)}{P_k(k \dots 1)}. \quad (5.10)$$

Warunek unormowania przyjmuje teraz postać

$$\int dy_{k+l} \dots dy_{k+1} P_{l|k}(k+l \dots k+1 | k \dots 1) = 1. \quad (5.11)$$

Dodajmy, że uporządkowanie czasowe nie odgrywa roli w podanych definicjach, ze względu na własność (ii) hierarchii.

5.3 Procesy Markowa

Jest to proces stochastyczny o własności takiej, że dla każdego zbioru kolejnych chwil

$$t_n > \dots > t_2 > t_1 \quad (5.12)$$

zachodzi następujący warunek dla prawdopodobieństwa warunkowego

$$\boxed{P_{1|(n-1)}(y_n, t_n | y_{n-1}, t_{n-1}; \dots; y_1, t_1) = P_{1|1}(y_n, t_n | y_{n-1}, t_{n-1})} \quad (5.13)$$

Tym samym rozkład $P_{1|(n-1)}$ zależy tylko od chwili t_{n-1} i żadna informacja o chwilach wcześniejszych nie ma na niego wpływu.

Wielkość $P_{1|1}$ nazywamy *prawdopodobieństwem przejścia*. Wprowadzając oznaczenie $k \equiv (y_k, t_k)$, zapiszemy warunek Markowa w postaci

$$P_{1|(n-1)}(n | n-1; \dots; 1) = P_{1|1}(n | n-1) \quad (5.14)$$

Proces Markowa jest określony przez prawdopodobieństwo jednocząstkowe P_1 oraz prawdopodobieństwo przejścia $P_{1|1}$. **Na ich podstawie można odtworzyć całą hierarchię prawdopodobieństw.**

Na przykład, dla rozkładu dwucząstkowego z $t_2 > t_1$ otrzymujemy ze definicji prawdopodobieństwa warunkowego

$$P_2(2, 1) = P_{1|1}(2 | 1) P_1(1). \quad (5.15)$$

Podobnie, dla rozkładu trójcząstkowego z $t_3 > t_2 > t_1$, korzystając dodatkowo z definicji procesów Markowa, mamy

$$P_3(3, 2, 1) = P_{1|1}(3 | 2, 1) P_2(2, 1) = P_{1|1}(3 | 2) P_{1|1}(2 | 1) P_1(1). \quad (5.16)$$

Powyższe równania służą do wyprowadzenia podstawowych równań jakie muszą spełniać P_1 i $P_{1|1}$ w procesach Markowa.

5.4 Równanie Chapmana-Kołmogorowa-Smoluchowskiego

Całkując obie strony równania (5.15) po y_1 znajdujemy warunek dla prawdopodobieństwa jednocząstkowego

$$\boxed{P_1(y_2, t_2) = \int dy_1 P_{1|1}(y_2, t_2 | y_1, t_1) P_1(y_1, t_1)} \quad (5.17)$$

Zapisując to równanie dla $t_1 = t_2$ otrzymujemy dodatkowy warunek

$$P_{1|1}(y_2, t_1 | y_1, t_1) = \delta(y_2 - y_1). \quad (5.18)$$

Całkując obie strony równania (5.16) po y_2 otrzymujemy

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

Dzieląc obie strony przez $P_1(y_1, t_1)$, a następnie korzystając z definicji prawdopodobieństwa warunkowego (5.7), otrzymujemy *równania Chapmana-Kołmogorowa-Smoluchowskiego* dla prawdopodobieństw przejścia

$$\boxed{P_{1|1}(y_3, t_3 | y_1, t_1) = \int dy_2 P_{1|1}(y_3, t_3 | y_2, t_2) P_{1|1}(y_2, t_2 | y_1, t_1)} \quad (5.19)$$

Każde dwie *nieujemne* funkcje P_1 i $P_{1|1}$ spełniające równania (5.17) i (5.19) definiują jednoznacznie proces Markowa.

5.5 Stacjonarny proces Markowa

Definiuje się stacjonarne procesy Markowa, dla których P_1 nie zależy od czasu, natomiast $P_{1|1}$ zależy od czasów poprzez ich różnicę

$$\boxed{P_{1|1}(y_2, t_2 | y_1, t_1) = P_{1|1}(y_2 | y_1; t_2 - t_1)} \quad (5.20)$$

Wtedy funkcje hierarchii (5.2) spełniają warunek stacjonarności (5.5).

Na przykład, dla funkcji dwucząstkowej zachodzi

$$P_{1|1}(y_2, t_2 + \tau | y_1, t_1 + \tau) = P_{1|1}(y_2 | y_1; t_2 - t_1) = P_{1|1}(y_2, t_2 | y_1, t_1).$$

Warunki konsystencji przyjmują teraz postać

$$P_{1|1}(y_3 | y_1; \tau' + \tau) = \int dy_2 P_{1|1}(y_3 | y_2; \tau') P_{1|1}(y_2 | y_1; \tau) \quad (5.21)$$

$$P_1(y_2) = \int dy_1 P_{1|1}(y_2 | y_1; \tau) P_1(y_1) \quad (5.22)$$

W dalszych rozważaniach przyjmiemy oznaczenie

$$P_{1|1}(y_2 | y_1; \tau) \equiv P_\tau(y_2 | y_1). \quad (5.23)$$

W dalszej części rozdziału podamy przykłady kilku procesów Markowa.

5.6 Proces dwudzielny – losowego telegrafu

Jest to proces, w którym zmienna losowa przyjmuje wartości $y \in \{-1, 1\}$, natomiast prawdopodobieństwo przejścia jest jednorodnie w czasie i zadane przez

$$P_{1|1}(y, t | y', t') = \frac{1}{2}\{1 + e^{-2(t-t')}\}\delta_{yy'} + \frac{1}{2}\{1 - e^{-2(t-t')}\}\delta_{y(-y')} \quad (5.24)$$

Ponadto prawdopodobieństwo jednocząstkowe jest niezależne od czasu i równe

$$P_1(1, t) = P_1(-1, t) = \frac{1}{2}. \quad (5.25)$$

Otrzymujemy więc **proces stacjonarny**.

Możemy wtedy użyć oznaczeń z poprzedniego rozdziału i zapisać prawdopodobieństwa przejścia między poszczególnymi stanami w następującej postaci

$$\begin{aligned} P_\tau(1|1) &= P_\tau(-1|-1) = \frac{1}{2}\{1 + e^{-2\tau}\} \\ P_\tau(-1|1) &= P_\tau(1|-1) = \frac{1}{2}\{1 - e^{-2\tau}\} \end{aligned}$$

Łatwo sprawdzić warunki unormowania sumy prawdopodobieństw przejścia z danego stanu początkowego do dowolnego stanu końcowego

$$P_\tau(1|1) + P_\tau(-1|1) = P_\tau(1|-1) + P_\tau(-1|-1) = 1. \quad (5.26)$$

Podobnie, spełnione są równania Chapmana-Kołmogorowa-Smoluchowskiego, np. dla stanów $y_3 = y_1 = 1$ zachodzi

$$\begin{aligned} P_{\tau'+\tau}(1|1) &= P_{\tau'}(1|-1)P_\tau(-1|1) + P_{\tau'}(1|1)P_\tau(1|1) \\ &= \frac{1}{4}\{1 - e^{-2\tau'}\}\{1 - e^{-2\tau}\} + \frac{1}{4}\{1 + e^{-2\tau'}\}\{1 + e^{-2\tau}\} \\ &= \frac{1}{2}\{1 + e^{-2(\tau'+\tau)}\}. \end{aligned} \quad (5.27)$$

Podobnie dla pozostałych konfiguracji stanów. Ponadto, spełnione jest równanie (5.17). Na przykład

$$\begin{aligned} P_1(1, t) &= P_t(1|1)P_1(1, 0) + P_t(1|-1)P_1(-1, 0) \\ &= \frac{1}{4}\{1 + e^{-2\tau}\} + \frac{1}{4}\{1 - e^{-2\tau}\} = \frac{1}{2} \end{aligned} \quad (5.28)$$

i podobnie dla

$$\begin{aligned} P_1(-1, t) &= P_t(-1|1)P_1(1, 0) + P_t(-1|-1)P_1(-1, 0) \\ &= \frac{1}{4}\{1 - e^{-2\tau}\} + \frac{1}{4}\{1 + e^{-2\tau}\} = \frac{1}{2} \end{aligned} \quad (5.29)$$

Prawdopodobieństwa jednocząstkowe nie zmieniają się zatem z czasem.

5.7 Proces Poissona

W procesie tym zmienna losowa przyjmuje wartości *dyskretne* $n = 0, 1, 2, \dots$. Prawdopodobieństwo przejścia dla chwil $t_2 \geq t_1 \geq 0$ oraz $n_2 \geq n_1$ to

$$P_{1|1}(n_2, t_2 | n_1, t_1) = \frac{(t_2 - t_1)^{n_2 - n_1}}{(n_2 - n_1)!} e^{-(t_2 - t_1)}. \quad (5.30)$$

Dodatkowo, w chwili początkowej prawdopodobieństwo jednocząstkowe jest zadane przez

$$P_1(n, 0) = \delta_{n0}. \quad (5.31)$$

Stąd wzór na prawdopodobieństwo jednocząstkowe w dowolnej chwili czasu zgodny z relacją (5.17)

$$\sum_m P_{1|1}(n, t | m, 0) P_1(m, 0) = P_{1|1}(n, t | 0, 0) = \frac{t^n}{n!} e^{-t} = P_1(n, t). \quad (5.32)$$

Proces Poissona **nie jest stacjonarny**, gdyż prawdopodobieństwo jednocząstkowe (5.32) zależy od czasu. $P_1(n, t)$ opisuje rozkład prawdopodobieństwa liczby znaków punktowych wygenerowanych w przedziale czasowym $[0, t]$.

Udowodnijmy jeszcze, że spełnione jest równanie Chapmana-Kołmogorowa. Dla $t_3 \geq t_2 \geq t_1 \geq 0$ oraz $n_3 \geq n_2 \geq n_1$ zachodzi

$$\begin{aligned} P_{1|1}(n_3, t_3 | n_1, t_1) &= \sum_{n_2 \geq n_1}^{n_3} P_{1|1}(n_3, t_3 | n_2, t_2) P_{1|1}(n_2, t_2 | n_1, t_1) \\ &= \sum_{n_2 \geq n_1}^{n_3} \frac{(t_3 - t_2)^{n_3 - n_2}}{(n_3 - n_2)!} e^{-(t_3 - t_2)} \frac{(t_2 - t_1)^{n_2 - n_1}}{(n_2 - n_1)!} e^{-(t_2 - t_1)} \\ &= \frac{(t_3 - t_2)^{n_3}}{(t_2 - t_1)^{n_1} (n_3 - n_1)!} \sum_{n_2 \geq n_1}^{n_3} \left(\frac{t_2 - t_1}{t_3 - t_2} \right)^{n_2} \frac{(n_3 - n_1)!}{(n_3 - n_2)! (n_2 - n_1)!} \end{aligned} \quad (5.33)$$

Wyrażenie z sumą po zmianie wskaźnika na $n'_2 = n_2 - n_1$ to

$$\begin{aligned} &\sum_{n'_2=0}^{n_3 - n_1} \left(\frac{t_2 - t_1}{t_3 - t_2} \right)^{n'_2 + n_1} \frac{(n_3 - n_1)!}{(n_3 - n_1 - n'_2)! (n'_2)!} \\ &= \left(\frac{t_2 - t_1}{t_3 - t_2} \right)^{n_1} \sum_{n'_2=0}^{n_3 - n_1} \binom{n_3 - n_1}{n'_2} \left(\frac{t_2 - t_1}{t_3 - t_2} \right)^{n'_2} \\ &= \left(\frac{t_2 - t_1}{t_3 - t_2} \right)^{n_1} \left(1 + \frac{t_2 - t_1}{t_3 - t_2} \right)^{n_3 - n_1} = \left(\frac{t_2 - t_1}{t_3 - t_2} \right)^{n_1} \left(\frac{t_3 - t_1}{t_3 - t_2} \right)^{n_3 - n_1} \\ &= \frac{(t_2 - t_1)^{n_1}}{(t_3 - t_2)^{n_2}} (t_3 - t_1)^{n_3 - n_1} \end{aligned}$$

Podstawiając do wzoru (5.32) otrzymamy oczekiwany wynik

$$P_{1|1}(n_3, t_3 | n_1, t_1) = \frac{(t_3 - t_1)^{n_3 - n_1}}{(n_3 - n_1)!} e^{-(t_3 - t_1)}. \quad (5.34)$$

Wzór (5.17) można udowodnić korzystając z relacji $P_1(n, t) = P_{1|1}(n, t | 0, 0)$ i równania Chapmana-Kołmogorowa:

$$\begin{aligned} P_1(n_2, t_2) &= P_{1|1}(n_2, t_2 | 0, 0) = \sum_{n_1} P_{1|1}(n_2, t_2 | n_1, t_1) P_{1|1}(n_1, t_1 | 0, 0) \\ &= \sum_{n_1} P_{1|1}(n_2, t_2 | n_1, t_1) P_1(n_1, t_1). \end{aligned} \quad (5.35)$$

5.8 Proces Ornsteina-Uhlenbecka

Jest to proces **stacjonarny** zdefiniowany dla zmiennej losowej przyjmującej wartości rzeczywiste, $-\infty < y < \infty$, poprzez

$$P_1(y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left\{-\frac{1}{2}y^2\right\} \quad (5.36)$$

$$P_\tau(y_2 | y_1) = \frac{1}{\sqrt{2\pi(1 - e^{-2\tau})}} \exp\left\{-\frac{(y_2 - y_1 e^{-\tau})^2}{2(1 - e^{-2\tau})}\right\}. \quad (5.37)$$

Sprawdzimy, że spełnione jest równanie Chapmana-Kołmogorowa. Wprowadzając oznaczenie: $\Delta_\tau = 1 - e^{-2\tau}$, otrzymujemy

$$\begin{aligned} P_{\tau'+\tau}(y_3 | y_1) &= \int_{-\infty}^{\infty} dy_2 P_{\tau'}(y_3 | y_2) P_\tau(y_2 | y_1) \\ &= \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^2 \Delta_{\tau'} \Delta_\tau}} \int_{-\infty}^{\infty} dy_2 \exp\left\{-\frac{(y_3 - y_2 e^{-\tau'})^2}{2\Delta_{\tau'}} - \frac{(y_2 - y_1 e^{-\tau})^2}{2\Delta_\tau}\right\} \end{aligned} \quad (5.38)$$

Wykładnik w eksponencie możemy zapisać w następujący sposób

$$\exp\left\{-\frac{\Delta_{\tau+\tau'}}{\Delta_\tau \Delta_{\tau'}}(y_2 - a)^2 - \frac{(y_3 - y_1 e^{-(\tau+\tau')})^2}{2\Delta_{\tau+\tau'}}\right\}$$

gdzie a jest wyrażeniem niezależnym od y_2 . Całkując po tej zmiennej w równaniu (5.38) zgodnie ze wzorem

$$\int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-Ay^2/2} = \sqrt{\frac{2\pi}{A}}, \quad (5.39)$$

otrzymujemy oczekiwany wynik

$$\begin{aligned}
P_{\tau'+\tau}(y_3 | y_1) &= \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^2 \Delta_{\tau'} \Delta_{\tau}}} \sqrt{2\pi \frac{\Delta_{\tau} \Delta_{\tau'}}{\Delta_{\tau+\tau'}}} \exp \left\{ -\frac{(y_3 - y_1 e^{-(\tau+\tau')})^2}{2\Delta_{\tau+\tau'}} \right\} \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi(1 - e^{-2(\tau+\tau')})}} \exp \left\{ -\frac{(y_3 - y_1 e^{-(\tau+\tau')})^2}{2(1 - e^{-2(\tau+\tau')})} \right\}. \quad (5.40)
\end{aligned}$$

Równanie konsystencji (5.17) jest również spełnione na mocy związku

$$P_1(y) = \lim_{\tau \rightarrow \infty} P_{\tau}(y | y_1) \quad (5.41)$$

i równania Chapmana-Kołodmogorowa-Smoluchowskiego, w którym wykonujemy powyższą granicę.

Wartość średnia dla procesu Ornsteina-Uhlenbecka jest równa zeru

$$\langle Y(t) \rangle = \int y P_1(y) dy = 0, \quad (5.42)$$

natomiast dwupunktowa funkcja *autokorelacji* to

$$\begin{aligned}
\kappa(\tau) = \langle Y(t+\tau)Y(t) \rangle &= \int y_1 y_2 P_2(y_2, t+\tau; y_1, t) dy_1 dy_2 \\
&= \int y_1 y_2 P_{\tau}(y_2 | y_1) P_1(y_1) dy_1 dy_2 = e^{-\tau}. \quad (5.43)
\end{aligned}$$

Twierdzenie Dooba orzeka, że jest to jedyny proces Markowa, który jest stacjonarny i gausowski.

5.9 Proces Wienera

Bardzo ważnym procesem Markowa jest proces Wienera, w którym zmienna losowa przyjmuje wartości *rzeczywiste* $-\infty < y < \infty$. Opisuje on losowe położenie cząstki Browna, co pokażemy w jednym z dalszych rozdziałów.

Prawdopodobieństwo przejścia jest zdefiniowane dla $t_2 > t_1$ wzorem:

$$P_{1|1}(y_2, t_2 | y_1, t_1) = \frac{1}{\sqrt{2\pi(t_2 - t_1)}} \exp \left\{ -\frac{(y_2 - y_1)^2}{2(t_2 - t_1)} \right\}. \quad (5.44)$$

Dodatkowo zakładamy, że dla $t = 0$ prawdopodobieństwo jednocząstkowe

$$P_1(y, 0) = \delta(y). \quad (5.45)$$

Wtedy z równania (5.17) wynika

$$P_1(y, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi t}} \exp\left\{-\frac{y^2}{2t}\right\}. \quad (5.46)$$

Tak więc proces Wienera **nie jest procesem stacjonarnym** ze względu na zależność P_1 od czasu.

Wartość średnia dla procesu Wienera jest równa zero

$$\langle Y(t) \rangle = \int y P_1(y, t) dy = 0, \quad (5.47)$$

natomiast dwupunktowa funkcja korelacji dla czasów $t_2 > t_1$ to

$$\begin{aligned} \langle Y(t_1)Y(t_2) \rangle &= \int y_1 y_2 P_2(y_2, t_2; y_1, t_1) dy_1 dy_2 \\ &= \int y_1 y_2 P_{1|1}(y_2, t_2 | y_1, t_1) P_1(y_1, t_1) dy_1 dy_2 \\ &= t_1 = \min\{t_1, t_2\}. \end{aligned} \quad (5.48)$$

Rozdział 6

Równanie Master

6.1 Małe różnice czasów

Zapiszmy prawdopodobieństwo przejścia w procesie Markowa, $P_{1|1}(y_2, t_2 | y_1, t_1)$, dla małych wartości różnicy czasu $t_2 - t_1 \equiv \delta t$.

Pamiętając o warunku (5.18),

$$P_{1|1}(y_2, t_1 | y_1, t_1) = \delta(y_2 - y_1), \quad (6.1)$$

zapiszemy z dokładnością do członów liniowych w δt :

$$P_{1|1}(y, t + \delta t | y', t) \simeq \delta(y - y') A(y', \delta t) + W_t(y | y') \delta t, \quad (6.2)$$

gdzie

$$A(y', \delta t = 0) = 1. \quad (6.3)$$

Funkcja $W_t(y | y')$ jest *prawdopodobieństwem przejścia na jednostkę czasu* ze stanu y' do stanu y w chwili t . Dla stacjonarnych procesów Markowa $W_t(y | y')$ nie zależy od czasu.

Całkując obie strony równania (6.2) po y i wykorzystując warunek unormowania prawdopodobieństwa przejścia,

$$\int dy P_{1|1}(y, t + \delta t | y', t) = 1 \quad (6.4)$$

otrzymujemy

$$A(y, \delta t) + \delta t \int dy W_t(y | y') = 1. \quad (6.5)$$

Stąd wynika następujące równanie

$$A(y, \delta t) = 1 - \delta t \int dy W_t(y | y') = 1 - \delta t a_0(y', t).$$

Wielkość

$$a_0(y', t) = \int dy W_t(y | y') \quad (6.6)$$

jest całkowitym prawdopodobieństwem przejścia na jednostkę czasu ze stanu y' do jakiegokolwiek innego stanu. Stąd $1 - a_0(y', t)$ jest prawdopodobieństwem na jednostkę czasu, że układ pozostanie w stanie y' .

Ostatecznie, prawdopodobieństwo przejścia (6.2) dla małych czasów przyjmuje postać

$$\boxed{P_{1|1}(y, t + \delta t | y', t) \simeq \delta(y - y') (1 - a_0(y', t) \delta t) + W_t(y | y') \delta t} \quad (6.7)$$

6.2 Wyprowadzenie równania Master

Napiszmy równanie Chapmana-Kołmogorowa dla uporządkowanych chwil czasowych: $t + \delta t > t > t_0$,

$$P_{1|1}(y, t + \delta t | y_0, t_0) = \int dy' P_{1|1}(y, t + \delta t | y', t) P_{1|1}(y', t | y_0, t_0). \quad (6.8)$$

Po podstawieniu równania (6.7) otrzymujemy

$$\begin{aligned} P_{1|1}(y, t + \delta t | y_0, t_0) &\simeq (1 - a_0(y, t) \delta t) P_{1|1}(y, t | y_0, t_0) \\ &+ \delta t \int dy' W_t(y | y') P_{1|1}(y', t | y_0, t_0). \end{aligned} \quad (6.9)$$

stąd otrzymujemy

$$\begin{aligned} \frac{P_{1|1}(y, t + \delta t | y_0, t_0) - P_{1|1}(y, t | y_0, t_0)}{\delta t} &= \int dy' W_t(y | y') P_{1|1}(y', t | y_0, t_0) \\ &- a_0(y, t) P_{1|1}(y, t | y_0, t_0) \end{aligned} \quad (6.10)$$

Podstawiając relację (6.6) w formie

$$a_0(y, t) = \int dy' W_t(y' | y) \quad (6.11)$$

i wykonując granicę $\delta t \rightarrow 0$, otrzymujemy równanie Master dla **prawdopodobieństwa przejścia** ze stanu y_0 w chwili t_0

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t} P_{1|1}(y, t | y_0, t_0) = \int dy' \{W_t(y | y') P_{1|1}(y', t | y_0, t_0) - W_t(y' | y) P_{1|1}(y, t | y_0, t_0)\}} \quad (6.12)$$

Identyczne w formie równanie otrzymujemy dla **prawdopodobieństwa jednocząstkowego** powstałego z uśrednienia prawdopodobieństwa przejścia po rozkładzie jednocząstkowym w chwili początkowej t_0 ,

$$P_1(y, t) = \int dy_0 P_{1|1}(y, t | y_0, t_0) P_1(y_0, t_0) \quad (6.13)$$

Tak więc mamy

$$\frac{\partial P_1(y, t)}{\partial t} = \int dy' \{W_t(y | y') P_1(y', t) - W_t(y' | y) P_1(y, t)\} \quad (6.14)$$

Pierwszy wyraz po prawej stronie opisuje zmianę $P_1(y, t)$ wynikającą z przejść do stanu y w czasie δt , natomiast drugi wyraz z ujemnym znakiem opisuje analogiczną zmianę wynikającą z opuszczenia stanu y . Równanie Master jest więc równaniem bilansu przyjsć dla ustalonego stanu.

Zauważmy, że całkowite prawdopodobieństwo jednocząstkowe jest zachowane w czasie

$$\frac{d}{dt} \int dy P_1(y, t) = 0 \quad (6.15)$$

Rzeczywiście, całkując obustronnie równanie (6.14) otrzymujemy po prawej stronie wyrażenie

$$R = \int dy \int dy' \{W_t(y | y') P_1(y', t) - W_t(y' | y) P_1(y, t)\} \quad (6.16)$$

Zmieniając zmienne $y \leftrightarrow y'$ w drugiej całce otrzymujemy identyczne wyrażenie podcałkowe jak w pierwszej całce i stąd $R = 0$.

Rozdział 7

Stany dyskretne

7.1 Równanie Master

Dla dyskretnychwartościami n zmiennej losowej y , równanie Master (6.14) dla prawdopodobieństwa jednocząstkowego przyjmuje postać

$$\frac{dp_n(t)}{dt} = \sum_{n'} \{W_{nn'}(t) p_{n'}(t) - W_{n'n}(t) p_n(t)\}. \quad (7.1)$$

Równanie to można zapisać w formie macierzowej

$$\frac{dp_n(t)}{dt} = \sum_{n'} \mathbb{W}_{nn'}(t) p_{n'}(t), \quad (7.2)$$

gdzie macierz $\mathbb{W}_{nn'}$ jest zadana wzorem

$$\mathbb{W}_{nn'} = W_{nn'} - \left(\sum_{n''} W_{n''n} \right) \delta_{nn'} = \begin{cases} W_{nn'} & \text{dla } n \neq n' \\ - \sum_{n'' \neq n} W_{n''n} & \text{dla } n = n' \end{cases} \quad (7.3)$$

Suma wyrazów dowolnej kolumny macierzy \mathbb{W} wynosi zero, gdyż zachodzi

$$\sum_{n''} \mathbb{W}_{n''n} = \mathbb{W}_{nn} + \sum_{n'' \neq n} \mathbb{W}_{n''n} = - \sum_{n'' \neq n} W_{n''n} + \sum_{n'' \neq n} W_{n''n} = 0. \quad (7.4)$$

Warunek ten jest konieczny do zachowania całkowitego prawdopodobieństwa w dowolnej chwili czasu

$$\frac{d}{dt} \sum_n p_n(t) = \sum_n \sum_{n'} \mathbb{W}_{nn'}(t) p_{n'}(t) = \sum_{n'} \left(\sum_n \mathbb{W}_{nn'}(t) \right) p_{n'}(t) = 0. \quad (7.5)$$

Podsumowując, macierz \mathbb{W} spełnia dwa warunki

$$W_{nn'} \geq 0, \quad \sum_n W_{nn'} = 0 \quad (7.6)$$

Przykładowo, dla trzech stanów, $n = 1, 2, 3$, macierz \mathbb{W} ma postać

$$\mathbb{W} = \begin{pmatrix} -(W_{21} + W_{31}) & W_{12} & W_{13} \\ W_{21} & -(W_{12} + W_{32}) & W_{23} \\ W_{31} & W_{32} & -(W_{13} + W_{23}) \end{pmatrix}. \quad (7.7)$$

Zauważmy, że poprzez dodawanie wierszy (lub kolumn) do siebie zawsze możemy otrzymać macierz \mathbb{W} z zerowym wierszem (lub kolumną). Oznacza to, że wyznacznik macierzy \mathbb{W} wynosi zero,

$$\det \mathbb{W} = 0, \quad (7.8)$$

gdyż dodawanie wierszy (lub kolumn) macierzy nie zmienia jej wyznacznika. Tym samym, jedna z wartości własnych macierzy \mathbb{W} , spełniających równanie,

$$\det(\mathbb{W} - \lambda \cdot \mathbb{1}) = 0, \quad (7.9)$$

jest równa zeru, $\lambda = 0$. Jak pokażemy na przykładach, dla niezależnego od czasu prawdopodobieństwa przejścia prowadzi ona do stacjonarnego rozwiązania równania Master,

$$\frac{dp_n}{dt} = 0. \quad (7.10)$$

7.2 Rozwiązanie dla dwóch stanów

W przypadku dwóch stanów dyskretnych równanie Master to

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} p_1 \\ p_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -W_{21} & W_{12} \\ W_{21} & -W_{12} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_1 \\ p_2 \end{pmatrix} \quad (7.11)$$

gdzie prawdopodobieństwa przejścia na jednostkę czasu $W_{ij} \geq 0$. Zakładając, że są one także stałe w czasie, poszukajmy rozwiązania w postaci

$$\begin{pmatrix} p_1 \\ p_2 \end{pmatrix} = e^{\lambda t} \begin{pmatrix} p_1^\lambda \\ p_2^\lambda \end{pmatrix} \quad (7.12)$$

Po podstawieniu dostaniemy równanie w postaci

$$\begin{pmatrix} -W_{21} - \lambda & W_{12} \\ W_{21} & -W_{12} - \lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_1^\lambda \\ p_2^\lambda \end{pmatrix} = 0 \quad (7.13)$$

Aby istniały niezerowe rozwiązania wyznacznik powyższej macierzy musi zniknąć

$$(\lambda + W_{21})(\lambda + W_{12}) - W_{12}W_{21} = \lambda(\lambda + W_{12} + W_{21}) = 0 \quad (7.14)$$

Stąd możliwe wartości λ :

$$\lambda_0 = 0, \quad \lambda_1 = -(W_{12} + W_{21}) < 0. \quad (7.15)$$

i ogólne rozwiązanie

$$p_i(t) = p_i^0 + e^{-(W_{12}+W_{21})t} p_i^1, \quad (7.16)$$

gdzie $p_i^{0,1}$ to wektory własne odpowiadające dwóm wartościom własnym. W granicy $t \rightarrow \infty$ otrzymujemy

$$\lim_{t \rightarrow \infty} p_i = p_i^0. \quad (7.17)$$

Jest to rozwiązanie stacjonarne równania Master, gdyż podstawiając $\lambda = 0$ do równania (7.13) dostajemy

$$\begin{pmatrix} -W_{21} & W_{12} \\ W_{21} & -W_{12} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_1^0 \\ p_2^0 \end{pmatrix} = \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} p_1^0 \\ p_2^0 \end{pmatrix} = 0, \quad (7.18)$$

Warunek stacjonarności rozwiązania można więc zapisać w postaci

$$W_{12} p_2^0 = W_{21} p_1^0 \quad (7.19)$$

Jest to tzw. **warunek równowagi szczegółowej**: prawdopodobieństwo populacji stanu 1 (lewa strona) jest równe prawdopodobieństwu jego depopulacji (prawa strona). Podobnie, prawdopodobieństwo populacji stanu 2 (prawa strona) jest równe prawdopodobieństwu depopulacji tego stanu (lewa strona).

W przypadku równych prawdopodobieństw przejść,

$$W_{12} = W_{21}, \quad (7.20)$$

znajdujemy

$$p_1^0 = p_2^0 = \frac{1}{2}. \quad (7.21)$$

Odpowiada to przypadkowi układu dwustanowemu, który jest izolowany od otoczenia.

7.3 Rozumowanie Einsteina

Ciekawy jest przypadek, układu dwustanowego pozostającego w równowadze termodynamicznej z promieniowaniem elektromagnetycznym w temperaturze T . Prawdopodobieństwa stacjonarne są dane wtedy rozkładem Boltzmanna,

$$p_i^0 = \frac{1}{Z} e^{-E_i/T}, \quad i = 1, 2 \quad (7.22)$$

gdzie

$$Z = e^{-E_1/T} + e^{-E_2/T}, \quad (7.23)$$

Warunek równowagi szczegółowej (7.19) przyjmuje postać

$$W_{12} e^{-E_2/T} = W_{21} e^{-E_1/T}. \quad (7.24)$$

Załóżmy, że $E_1 < E_2$. Prawdopodobieństwo przejścia na jednostkę czasu pomiędzy stanami $1 \rightarrow 2$ dane jest wzorem

$$W_{21} = A_{21} I(\omega), \quad (7.25)$$

gdzie A_{21} jest **współczynnikiem absorpcji** fotonu o częstotliwości ω przez układ dwustanowy (atom dwupoziomowy), natomiast $I(\omega)$ jest gęstością promieniowania. Innymi słowy

$$I(\omega) d\omega = \frac{\text{energia promieniowania w przedziale } (\omega, \omega + d\omega)}{V}, \quad (7.26)$$

gdzie V jest objętością przestrzeni, w której znajduje się promieniowanie. Podobnie, prawdopodobieństwo na jednostkę czasu przejścia $2 \rightarrow 1$ jest dane wzorem

$$W_{12} = A_{12} I(\omega) + B_{21}, \quad (7.27)$$

gdzie A_{12} to współczynnik **emisji wymuszonej** fotonu, a dodatkowy współczynnik B_{12} to współczynnik **emisji spontanicznej**. Postawiając wzory na W_{12} i W_{21} do równania równowagi szczegółowej (7.24) otrzymujemy

$$\frac{W_{12}}{W_{21}} = \frac{A_{12} I(\omega) + B_{12}}{A_{21} I(\omega)} = e^{(E_2 - E_1)/T}. \quad (7.28)$$

Zakładając równość współczynników absorpcji i emisji wymuszonej

$$A_{21} = A_{12} \quad (7.29)$$

oraz relację Einsteina

$$\omega = \frac{E_2 - E_1}{\hbar}, \quad (7.30)$$

dostajemy

$$\frac{B_{12}}{A_{12} I(\omega)} = e^{\hbar\omega/T} - 1 \quad (7.31)$$

co daje wzór na gęstość promieniowania

$$I(\omega) = \frac{B_{12}/A_{12}}{e^{\hbar\omega/T} - 1}. \quad (7.32)$$

Zgodność ze wzorem Plancka na gęstość promieniowania otrzymuje się dla stosunku

$$\frac{B_{12}}{A_{12}} = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3}. \quad (7.33)$$

Tak więc przy odpowiednio dobranych współczynnikach absorpcji i emisji, układ dwupoziomowy pozostaje w stanie równowagi z termicznym promieniowaniem elektromagnetycznym, opisywanym wzorem Plancka. Prawdopodobieństwa obsadzenia poziomów atomowych są natomiast zadane przez rozkład Boltzmann.

7.4 Rozwiązanie dla trzech stanów

Rozwiążemy równanie Master

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} p_1 \\ p_2 \\ p_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -(W_{21} + W_{31}) & W_{12} & W_{13} \\ W_{21} & -(W_{12} + W_{32}) & W_{23} \\ W_{31} & W_{32} & -(W_{13} + W_{23}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_1 \\ p_2 \\ p_3 \end{pmatrix} \quad (7.34)$$

w przypadku niezależnej od czasu macierzy \mathcal{W} , postulując rozwiązanie w postaci

$$\begin{pmatrix} p_1 \\ p_2 \\ p_3 \end{pmatrix} = e^{\lambda t} \begin{pmatrix} A \\ B \\ C \end{pmatrix} \quad (7.35)$$

Stąd równanie do rozwiązania

$$\begin{pmatrix} -W_{21} - W_{31} - \lambda & W_{12} & W_{13} \\ W_{21} & -W_{12} - W_{32} - \lambda & W_{23} \\ W_{31} & W_{32} & -W_{13} - W_{23} - \lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \\ C \end{pmatrix} = 0 \quad (7.36)$$

Warunkiem istnienia niezerowych rozwiązań jest znikanie wyznacznika dla

$$\lambda_0 = 0 \quad (7.37)$$

$$\lambda_{\pm} = -\frac{1}{2}(W_{12} + W_{13} + W_{23} + W_{21} + W_{31} + W_{32}) \pm \frac{1}{2}\sqrt{\Delta} \quad (7.38)$$

gdzie

$$\Delta = (W_{12} - W_{13} - W_{23} + W_{21} - W_{31} + W_{32})^2 + 4(W_{21} - W_{23})(W_{31} - W_{32}) \quad (7.39)$$

Można łatwo pokazać, że zachodzi

$$\frac{1}{2}\sqrt{\Delta} < (W_{12} + W_{13} + W_{23} + W_{21} + W_{31} + W_{32}) \quad (7.40)$$

Stąd wniosek

$$\lambda_{\pm} = -\frac{1}{2} \left(W_{12} + W_{13} + W_{23} + W_{21} + W_{31} + W_{32} \mp \sqrt{\Delta} \right) < 0 \quad (7.41)$$

Ogólne rozwiązanie jest sumą rozwiązań odpowiadających kolejnym wartościom własnym

$$p_n(t) = p_n^0 + e^{\lambda_- t} p_n^- + e^{\lambda_+ t} p_n^+, \quad (7.42)$$

gdzie $p_n^{0,\pm}$ to odpowiednie wektory własne.

Ze względu na warunek $\lambda_{\pm} < 0$ zachodzi

$$\lim_{t \rightarrow \infty} p_n(t) = p_n^0. \quad (7.43)$$

Jest to rozwiązanie stacjonarne równanie Master. Wektor własny p_n^0 wyznaczymy rozwiązując układ równań (7.36) dla $\lambda_0 = 0$,

$$\begin{pmatrix} -W_{21} - W_{31} & W_{12} & W_{13} \\ W_{21} & -W_{12} - W_{32} & W_{23} \\ W_{31} & W_{32} & -W_{13} - W_{23} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_1^0 \\ p_2^0 \\ p_3^0 \end{pmatrix} = 0, \quad (7.44)$$

Dla równych prawdopodobieństw przejścia $n \leftrightarrow m$,

$$\begin{aligned} W_{12} &= W_{21} = w_1 \\ W_{23} &= W_{32} = w_2 \\ W_{31} &= W_{13} = w_3, \end{aligned} \quad (7.45)$$

otrzymujemy równanie

$$\begin{pmatrix} -w_1 - w_3 & w_1 & w_3 \\ w_1 & -w_1 - w_2 & w_2 \\ w_3 & w_2 & -w_2 - w_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_1^0 \\ p_2^0 \\ p_3^0 \end{pmatrix} = 0, \quad (7.46)$$

którego rozwiązaniem po unormowaniu do jedynki jest rozkład jednorodny

$$p_1^0 = p_2^0 = p_3^0 = \frac{1}{3}. \quad (7.47)$$

7.5 Funkcjonał H

Jak pokazaliśmy w rozdziale 7.1, dla **niezależnych od czasu** prawdopodobieństw przejścia równanie Master (7.1) posiada rozwiązanie stacjonarne, niezależne do czasu,

$$p_n(t) = p_n^0. \quad (7.48)$$

Innymi słowy, stacjonarny rozkład prawdopodobieństwa spełnia równanie

$$\frac{dp_n^0}{dt} = \sum_{n'} \{W_{nn'} p_{n'}^0 - W_{n'n} p_n^0\} = 0 \quad (7.49)$$

Zdefiniujmy funkcjonal rozkładu prawdopodobieństwa $p_n(t)$ spełniającego równanie Master z niezależnymi od czasu prawdopodobieństwami przejścia,

$$H(t) = \sum_n p_n^0 f\left(\frac{p_n(t)}{p_n^0}\right), \quad (7.50)$$

gdzie $f(x)$ jest dowolną funkcją wypukłą, dla której zachodzi

$$\forall x \geq 0; \quad f''(x) \geq 0. \quad (7.51)$$

natomiast p_n^0 jest rozwiązaniem stacjonarnym równania Master. Policzmy pochodną po czasie,

$$\frac{dH(t)}{dt} = \sum_n f'(p_n(t)/p_n^0) \frac{dp_n}{dt} \quad (7.52)$$

Wykorzystując równanie Master dostajemy

$$\frac{dH(t)}{dt} = \sum_{n,n'} f'(p_n(t)/p_n^0) \{W_{nn'} p_{n'}(t) - W_{n'n} p_n(t)\} \quad (7.53)$$

Wprowadzając oznaczenie $x_n = p_n(t)/p_n^0$ otrzymujemy

$$\frac{dH}{dt} = \sum_{n,n'} f'(x_n) \{W_{nn'} x_{n'} p_{n'}^0 - W_{n'n} x_n p_n^0\} \quad (7.54)$$

Zamieniając $n \leftrightarrow n'$ w drugiej sumie, mamy

$$\frac{dH}{dt} = \sum_{n,n'} W_{nn'} p_{n'}^0 \{x_{n'} f'(x_n) - x_{n'} f'(x_{n'})\} \quad (7.55)$$

Dla dowolnych liczb u_n zachodzi

$$I \equiv \sum_{n,n'} W_{nn'} p_{n'}^0 (u_n - u_{n'}) = \sum_n u_n \sum_{n'} (W_{nn'} p_{n'}^0 - W_{n'n} p_n^0) = 0 \quad (7.56)$$

gdzie zamieniliśmy $n \leftrightarrow n'$ w drugim składniku sumy, po czym wykorzystaliśmy warunek stacjonarności (7.49) rozkładu p_n^0 . Wybierzmy więc w (7.56)

$$u_n = f(x_n) - x_n f'(x_n) \quad (7.57)$$

otrzymując

$$I = \sum_{n,n'} W_{nn'} p_{n'}^0 (f(x_n) - x_n f'(x_n) - f(x'_n) + x'_n f'(x'_n)) \quad (7.58)$$

Dodajmy to zerowe wyrażenie do prawej strony (7.55), otrzymując

$$\frac{dH}{dt} = \sum_{n,n'} W_{nn'} p_{n'}^0 \{(x_{n'} - x_n) f'(x_n) + f(x_n) - f(x_{n'})\} \quad (7.59)$$

Dla funkcji wypukłych zachodzi

$$f(x_{n'}) \geq f(x_n) + f'(x_n)(x_{n'} - x_n) \quad (7.60)$$

Stąd wynika, że wyrażenie w nawiasie w (7.59) jest ujemne i zachodzi

$$\boxed{\frac{dH}{dt} \leq 0} \quad (7.61)$$

co oznacza, że H jest funkcjonałem nierosnącym.

7.6 Związek z fizyką statystyczną

W fizyce statystycznej wykorzystuje się ograniczoną od dołu funkcję wypukłą

$$f(x) = x \ln x, \quad x \geq 0 \quad (7.62)$$

co prowadzi do dodatnio określonego funkcjonału

$$H(t) = \sum_n p_n(t) \ln(p_n(t)/p_n^0) \geq 0 \quad (7.63)$$

Dodatniość $H(t)$ wynika z nierówności

$$x \ln(x/y) \geq (x - y), \quad x \geq 0, \quad y > 0 \quad (7.64)$$

gdyż zachodzi

$$\sum_n p_n \ln(p_n/p_n^0) \geq \sum_n (p_n - p_n^0) = \sum_n p_n - \sum_n p_n^0 = 1 - 1 = 0. \quad (7.65)$$

Zakładając, że p_n^0 jest rozkładem Boltzmana, otrzymujemy funkcjonal H Boltzmana, który spełnia warunek

$$\frac{dH}{dt} \leq 0 \quad (7.66)$$

Funkcjonał (7.63) ma własność addytywności. Rozważmy dwa układy nieoddziaływających między sobą stanów. Niech będą one opisane odpowiednio rozkładami prawdopodobieństwa $p_n = p_n(t)$ oraz $q_m = q_m(t)$ z odpowiednimi rozkładami stacjonarnymi: p_n^0 i q_m^0 . Układ sumaryczny jest opisany rozkładem prawdopodobieństwa $p_n q_m$ z rozkładem stacjonarnym $p_n^0 q_m^0$. Wtedy

$$H(pq) = \sum_{n,m} p_n q_m \ln(p_n q_m / p_n^0 q_m^0) \quad (7.67)$$

Wykorzystując własności logarytmu otrzymujemy

$$\begin{aligned} H(pq) &= \sum_{n,m} p_n q_m \left\{ \ln(p_n/p_n^0) + \ln(q_m/q_m^0) \right\} \\ &= \sum_n p_n \ln(p_n/p_n^0) + \sum_m q_m \ln(q_m/q_m^0) \\ &= H(p) + H(q), \end{aligned} \quad (7.68)$$

gdzie wykorzystaliśmy warunki unormowania prawdopodobieństw do jedynki,

$$\sum_n p_n = \sum_m q_m = 1. \quad (7.69)$$

7.7 Druga zasada termodynamiki

Rozważamy skończoną liczbę stanów N . Dla prawdopodobieństw przejścia między stanami na jednostkę czasu spełniającymi relację:

$$W_{nn'} = W_{n'n}, \quad (7.70)$$

otrzymujemy rozkład stacjonarny

$$p_n^0 = \frac{1}{N}, \quad (7.71)$$

co zilustrowaliśmy w poprzednim rozdziale przykładem dla trzech stanów.

Obliczmy funkcjonal H dla tego przypadku,

$$\begin{aligned} H(t) &= \sum_{n=1}^N p_n(t) \ln(p_n(t)/p_n^0) \\ &= \sum_{n=1}^N p_n(t) \ln p_n(t) + \ln N \end{aligned} \quad (7.72)$$

Definiując entropię Gibbsa rozkładu prawdopodobieństwa $p_n(t)$,

$$S(t) = - \sum_{n=1}^N p_n(t) \ln p_n(t) \quad (7.73)$$

oraz entropię Boltzmana dla **rozkładu mikrokanonicznego**, dla którego wszystkie mikrostany są równoprawdopodobne,

$$S_0 = \ln N, \quad (7.74)$$

dostajemy relację

$$S_0 - S(t) = H(t). \quad (7.75)$$

Z równania (7.61) wynika, że entropia Gibbsa $S(t)$ jest funkcją niemalejącą, gdyż

$$\frac{dS(t)}{dt} \geq 0 \quad (7.76)$$

oraz spełniającą warunek

$$S(t) \leq S_0, \quad (7.77)$$

gdyż $H(t) \geq 0$. Entropia nierównowagowa $S(t)$ dąży więc do S_0 dla $t \rightarrow \infty$.

Otrzymujemy w ten sposób drugą zasadę termodynamiki - dla układów mikrokanonicznych (izolowanych) w stanie równowagi entropia Gibbsa przyjmuje wartość maksymalną równą entropii Boltzmana S_0 .

Dla **zespołu kanonicznego** prawdopodobieństwo p_n^0 jest dane rozkładem Boltzmana,

$$p_n^0 = \frac{1}{Z} e^{-E_n/T}, \quad Z = \sum_n e^{-E_n/T} \quad (7.78)$$

Stąd funkcjonal H ,

$$\begin{aligned}
H(t) &= \sum_n p_n(t) \ln p_n(t) - \sum_n p_n(t) \ln p_n^0 \\
&= \sum_n p_n(t) \ln p_n(t) + \sum_n p_n(t) \left(\ln Z + \frac{E_n}{T} \right) \\
&= \sum_n p_n(t) \ln p_n(t) + \ln Z + \frac{1}{T} \sum_n p_n(t) E_n.
\end{aligned} \tag{7.79}$$

gdzie w drugiej linijce wykorzystaliśmy warunek unormowania

$$\sum_n p_n(t) = 1 \tag{7.80}$$

Pierwszy wyraz we wzorze (7.79) to minus entropia Gibbsa rozkładu $p_n(t)$, natomiast ostatni jest proporcjonalny do średniej energii zespołu

$$U(t) = \sum_n p_n(t) E_n \tag{7.81}$$

Stąd

$$H(t) = -S(t) + \ln Z + \frac{U(t)}{T} \tag{7.82}$$

Definiując energię swobodną dla rozkładu $p_n(t)$ wzorem

$$F(t) = U(t) - TS(t) \tag{7.83}$$

otrzymujemy

$$H(t) = \frac{F(t) + T \ln Z}{T} \tag{7.84}$$

Policzmy energię swobodną dla rozkładu Boltzmana

$$\begin{aligned}
F_0 &= \sum_n p_n^0 E_n + T \sum_n p_n^0 \ln p_n^0 \\
&= \sum_n p_n^0 E_n - T \sum_n p_n^0 \left(\ln Z + \frac{E_n}{T} \right)
\end{aligned} \tag{7.85}$$

Wykorzystując warunek unormowania

$$\sum_n p_n^0 = 1 \tag{7.86}$$

dostajemy

$$F_0 = -T \ln Z. \tag{7.87}$$

Ostatecznie

$$H(t) = \frac{F(t) - F_0}{T} \geq 0 \quad (7.88)$$

Ponieważ $F(t)$ jest funkcją nierosnącą

$$\frac{dF(t)}{dt} = \frac{dH(t)}{dt} \leq 0 \quad (7.89)$$

to $F(t) \rightarrow F_0$ od góry dla $t \rightarrow \infty$.

Otrzymujemy więc drugą zasadę termodynamiki dla układów wymieniających energię z otoczeniem - w stanie równowagi energia swobodna przyjmuje wartość minimalną F_0 .

Rozdział 8

Procesy jednokrokowe

Rozważmy proces Markowa z ciągłym czasem, w którym zbiorem dopuszczalnych wartości są *liczby całkowite* n . W procesach jednokrokowych przejścia następują tylko pomiędzy najbliższymi sąsiadami, $n \rightarrow (n - 1)$ z prawdopodobieństwem przeskoku w dół r_n oraz $n \rightarrow (n + 1)$ z prawdopodobieństwem przeskoku w górę g_n . Macierz przejścia przyjmuje więc postać

$$W_{nn'} = r_{n'} \delta_{n(n'-1)} + g_{n'} \delta_{n(n'+1)}, \quad (8.1)$$

co prowadzi do równania Master

$$\frac{dP_n}{dt} = r_{n+1} P_{n+1} + g_{n-1} P_{n-1} - (r_n + g_n) P_n \quad (8.2)$$

Człony z dodatnim znakiem po prawej stronie opisują przejścia z sąsiednich poziomów *na poziom* n , natomiast człony z ujemnym znakiem opisują przejścia *z poziomu* n na sąsiednie (rozpad poziomu). Poniżej dyskutujemy dwa przykłady procesów jednokrokowych.

Zauważmy, że warunek (??) wzrostu entropii

$$\sum_{n'} W_{n'n} \geq \sum_{n'} W_{nn'} \quad (8.3)$$

przyjmuje postać

$$r_n + g_n \geq r_{n+1} + g_{n-1} \quad (8.4)$$

dla wszystkich możliwych wartości n .

8.1 Proces Poissona

Proces Poissona opisuje błędzenie przypadkowe ze stałym prawdopodobieństwem po zbiorze liczb naturalnych $n = 0, 1, 2, \dots$ z **krokami tylko w prawo**

$$r_n = 0, \quad g_n = \lambda > 0. \quad (8.5)$$

Zauważmy, że warunek (8.4) jest spełniony. W szczególności, dla $n = 0$ otrzymujemy $\lambda \geq 0$, zakładając, że $g_{-1} = 0$. Entropia rozkładu Poissona jest więc funkcją rosnącą.

Równanie Chapmana-Kolmogorowa dla procesu Poissona przyjmuje postać

$$P_n(t + \delta t) = \lambda \delta t P_{n-1}(t) + P_n(t)(1 - \lambda \delta t), \quad (8.6)$$

prowadzącą w granicy $\delta t \rightarrow 0$ do równania Master

$$\frac{dP_n(t)}{dt} = \lambda P_{n-1}(t) - \lambda P_n(t). \quad (8.7)$$

Zakładamy, że w chwili $t = 0$ cząstka znajduje się w punkcie $n = 0$, tzn.

$$P_n(0) = \delta_{n0}. \quad (8.8)$$

Poszukajmy rozwiązania metodą funkcji tworzącej

$$F(z, t) = \sum_n z^n P_n(t). \quad (8.9)$$

Dla $z = 1$ dostajemy oczekiwany wynik

$$F(1, t) = \sum_n P_n(t) = 1. \quad (8.10)$$

Wykonując takie sumowanie po obu stronach równania (8.9), następnie zmieniając odpowiednio zmienne sumowania, otrzymujemy równanie

$$\frac{\partial F(z, t)}{\partial t} = \lambda(z - 1)F(z, t). \quad (8.11)$$

Rozwiązaniem spełniającym warunek początkowy $F(z, 0) = 1$ jest

$$F(z, t) = \exp\{\lambda t(z - 1)\} = e^{-\lambda t} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\lambda t)^n}{n!} z^n, \quad (8.12)$$

co prowadzi do rozkładu Poissona (5.7) dla $n = 0, 1, 2, \dots$

$$P_n(t) = \frac{(\lambda t)^n}{n!} e^{-\lambda t}. \quad (8.13)$$

Wartości średnia wynosi

$$\mu = \sum_{n=0}^{\infty} n P_n(t) = \lambda t. \quad (8.14)$$

Ten sam wynik otrzymujemy dla wariancji

$$\sigma^2 = \sum_{n=0}^{\infty} (n - \lambda t)^2 P_n(t) = \lambda t. \quad (8.15)$$

W dowodach możemy posłużyć się metodą z rozdziału 2.3.

8.2 Symetryczne błędzenie przypadkowe

Symetryczne błędzenie przypadkowe po zbiorze liczb $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ jest zdefiniowane przez warunek:

$$r_n = g_n = c. \quad (8.16)$$

Warunek (8.4) jest w tym przypadku spełniony dla wszystkich n i otrzymany rozkład będzie miał rosnącą w czasie entropię.

Równanie Chapmana-Kołmogorowa to

$$P_n(t + \delta t) = c \delta t P_{n+1}(t) + c \delta t P_{n-1}(t) + P_n(t)(1 - 2c \delta t). \quad (8.17)$$

Po włączeniu parametru c do definicji jednostki czasu, równanie Master przyjmuje postać

$$\frac{dP_n(t)}{dt} = P_{n+1}(t) + P_{n-1}(t) - 2P_n(t), \quad (8.18)$$

z warunkiem początkowym takim jak dla procesu Poissona:

$$P_n(0) = \delta_{n0}. \quad (8.19)$$

Rozwiązując to równanie metodą funkcji tworzącej (8.9), otrzymujemy

$$\frac{\partial F(z, t)}{\partial t} = \left(z + \frac{1}{z} - 2 \right) F(z, t). \quad (8.20)$$

Korzystając z warunku początkowego $F(z, 0) = 1$, znajdujemy rozwiązanie

$$F(z, t) = \exp \left\{ t \left(z + \frac{1}{z} - 2 \right) \right\}. \quad (8.21)$$

Rozwijając w szereg potęg z otrzymamy

$$\begin{aligned} F(z, t) &= e^{-2t} \left(\sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^k t^k}{k!} \right) \left(\sum_{l=0}^{\infty} \frac{z^{-l} t^l}{l!} \right) \\ &= e^{-2t} \sum_{n=-\infty}^{\infty} z^n \sum_{l=0}^{n+l>0} \frac{t^{2l+n}}{l!(n+l)!}. \end{aligned} \quad (8.22)$$

Stąd prawdopodobieństwo

$$P_n(t) = e^{-2t} \sum_{l=0}^{n+l>0} \frac{t^{2l+n}}{l!(n+l)!} = e^{-2t} I_{|n|}(2t),$$

gdzie I_n jest funkcją Bessela. W granicy $t \rightarrow \infty$, $n \rightarrow \infty$ przy ustalonym n^2/t otrzymujemy jako wyrażenie asymptotyczne rozkład Gaussa

$$P_n(t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi t}} \exp \left\{ -\frac{n^2}{4t} \right\}. \quad (8.23)$$

o wartości średniej i wariancji

$$\mu = 0, \quad \sigma^2 = 2t. \quad (8.24)$$

Rozdział 9

Równanie ewolucji w QCD

9.1 Równanie Altarelliego-Parisiego

Przykładem procesów Markowa jest opis emisji kwarkowo gluonowej w chromodynamice kwantowej w przybliżeniu wiodących logarytmów.

Niech $q_x(t)$ będzie prawdopodobieństwem znalezienia kwarku w nukleonie z ułamkiem pędu podłużnego nukleonu $x \in [0, 1]$ przy skali $t = \ln(Q^2/Q_0^2)$, zwanej odtąd czasem. Napiszmy równanie bilansu (6.7) dla naszego prawdopodobieństwa w chwili $t + \delta t$

$$q_x(t + \delta t) = \delta t \underbrace{\sum_{x' > x} P_{xx'}(t) q_{x'}(t)}_{\text{emisja rzeczywista}} + q_x(t) \underbrace{\left(1 - \sum_{x' < x} P_{x'x}(t) \delta t\right)}_{\text{emisja wirtualna}}. \quad (9.1)$$

Funkcja $P_{xx'}(t)$ jest *prawdopodobieństwem na jednostkę czasu emisji rzeczywistego gluonu przez kwark o ułamku pędu x' , w wyniku której kwark uzyskuje ułamek $x < x'$* . Suma w nawiasie po prawej stronie równania (9.1),

$$\sum_{x' < x} P_{x'x}(t) \delta t, \quad (9.2)$$

to całkowite prawdopodobieństwo *zmiany* ułamka pędu kwarku x w czasie δt . Nowy ułamek $x' < x$, gdyż parton traci pęd. Stąd wyrażenie w nawiasie,

$$1 - \sum_{x' < x} P_{x'x}(t) \delta t, \quad (9.3)$$

to prawdopodobieństwo, że w czasie δt ułamek x pędu kwarku *nie ulega zmianie*. Opisuje więc ono *emisję wirtualną*.

Tak sformułowane równanie zachowuje normalizację całkowitego prawdopodobieństwa

$$\sum_x q_x(t + \delta t) = \sum_x q_x(t). \quad (9.4)$$

Mamy bowiem

$$\sum_x q_x(t + \delta t) = \sum_x q_x(t) + \sum_x \left\{ \sum_{x' > x} P_{xx'}(t) q_{x'}(t) - \sum_{x' < x} P_{x'x}(t) q_x(t) \right\} \delta t.$$

Wysumowane po x wyrażenie w nawiasie znika, gdyż

$$\begin{aligned} \sum_x \{ \dots \} &= \sum_x \sum_{x'} \Theta(x' > x) P_{xx'} q_{x'} - \sum_x \sum_{x'} \Theta(x' < x) P_{x'x} q_x \\ &= \sum_x \sum_{x'} \Theta(x' > x) P_{xx'} q_{x'} - \sum_{x'} \sum_x \Theta(x < x') P_{xx'} q_{x'} \\ &= \sum_x \sum_{x'} \Theta(x' > x) P_{xx'} q_{x'} - \sum_x \sum_{x'} \Theta(x' > x) P_{xx'} q_{x'} = 0, \end{aligned}$$

gdzie w drugim członie zmieniliśmy najpierw oznaczenie $x \leftrightarrow x'$, a następnie kolejność sumowania.

Wykonując granicę $\delta t \rightarrow 0$ w równaniu (9.1), otrzymujemy “równanie ewolucji”, będące w istocie równaniem Master

$$\frac{dq_x(t)}{dt} = \underbrace{\sum_{x' > x} P_{xx'}(t) q_{x'}(t)}_{\text{emisja rzeczywista}} - \underbrace{q_x(t) \sum_{x' < x} P_{x'x}(t)}_{\text{emisja wirtualna}}. \quad (9.5)$$

Sumowanie dla części rzeczywistej i wirtualnej odpowiada całkowaniu, odpowiednio

$$\sum_{x' > x} \rightarrow \int_x^1 dx', \quad \sum_{x' < x} \rightarrow \int_0^x dx', \quad (9.6)$$

co prowadzi do następującego równania ewolucji w lekko zmienionych oznaczeniach

$$\frac{dq(x, t)}{dt} = \int_x^1 dx' P(x, x'; t) q(x', t) - q(x, t) \int_0^x dx' P(x', x; t). \quad (9.7)$$

Prawdopodobieństwo przejścia zależą od ułamków pędu w następujący sposób

$$P(x, x'; t) = \frac{1}{x'} P\left(\frac{x}{x'}, t\right), \quad (9.8)$$

co daje

$$\frac{dq(x, t)}{dt} = \int_x^1 \frac{dx'}{x'} P\left(\frac{x}{x'}, t\right) q(x', t) - q(x, t) \int_0^x \frac{dx'}{x} P\left(\frac{x'}{x}, t\right). \quad (9.9)$$

Zmieniając zmienną całkowania na $z = x/x'$ w pierwszej całce, a w drugiej całce na $z = x'/x$, znajdujemy równanie ewolucji Altarelliego-Parisiego

$$\frac{dq(x, t)}{dt} = \int_x^1 \frac{dz}{z} P(z, t) q(x/z, t) - q(x, t) \int_0^1 dz P(z, t). \quad (9.10)$$

Prawdopodobieństwo przejścia ma niecałkowalną osobliwość dla $z = 1$,

$$P(z, t) \sim \frac{1}{1-z} \quad (9.11)$$

i górna granica całkowania powinna być zastąpiona przez $1 - \epsilon$. Można jednak rozbić ostatnią całkę: $\int_0^1 = \int_0^x + \int_x^1$, by zapisać

$$\frac{dq(x, t)}{dt} = \int_x^1 \frac{dz}{z} P(z, t) \{q(x/z, t) - zq(x, t)\} - q(x, t) \int_0^x dz P(z, t). \quad (9.12)$$

W pierwszym wyrażeniu podcałkowym pojawia się wielkość

$$\frac{q(x/z, t) - zq(x, t)}{1-z}, \quad (9.13)$$

która jest nieosobliwa dla $z = 1$, jeśli istnieje skończona granica dla $z \rightarrow 1$.

Równanie (9.12) można zapisać przy pomocy definicji dystrybucji $[\dots]_+$

$$[P(z)]_+ = P(z) - \delta(1-z) \int_0^1 dy P(y). \quad (9.14)$$

Działa ona na dowolną funkcję próbną $f(z)$ w następujący sposób, regularyzując osobliwość $P(z)$ dla $z = 1$,

$$\int_0^1 dz [P(z)]_+ f(z) = \int_0^1 dz P(z) \{f(z) - f(1)\}, \quad (9.15)$$

Adaptując ten wzór dla prawej strony równania (9.12), znajdujemy

$$\begin{aligned} \int_x^1 \frac{dz}{z} [P(z)]_+ q(x/z) &= \int_0^1 dz [P(z)]_+ \frac{1}{z} q(x/z) - \int_0^x \frac{dz}{z} P(z) q(x/z) \\ &= \int_0^1 dz P(z) \left\{ \frac{1}{z} q(x/z) - q(x) \right\} - \int_0^x \frac{dz}{z} P(z) q(x/z) \\ &= \int_x^1 dz P(z) \left\{ \frac{1}{z} q(x/z) - q(x) \right\} - q(x) \int_0^x dz P(z). \end{aligned}$$

Stąd ostatecznie równanie ewolucji (9.12) przyjmuje postać

$$\frac{dq(x, t)}{dt} = \int_x^1 \frac{dz}{z} [P(z, t)]_+ q(x/z, t). \quad (9.16)$$

Powyższe równanie można zapisać również w postaci

$$\frac{dq(x, t)}{dt} = \int_0^1 dz \int_0^1 dw \delta(x - zw) [P(z, t)]_+ q(w) \quad (9.17)$$

Stąd całkując obie strony po x dostajemy

$$\frac{d}{dt} \left[\int_0^1 dx q(x, t) \right] = \int_0^1 dz [P(z, t)]_+ \int_0^1 dw q(w) \quad (9.18)$$

Z równania (9.15) dla $f(z) = 1$ otrzymujemy

$$\int_0^1 dz [P(z)]_+ = 0 \quad (9.19)$$

co oznacza zachowanie w czasie całki po rozkładzie kwarkowym

$$\int_0^1 dx q(x, t) = C = \text{const} \quad (9.20)$$

Jest to tzw. reguła zachowania liczby kwarków walencyjnych.

Rozdział 10

Ruchy Browna

10.1 Równanie Fokkera-Plancka

Rozważmy równanie Master

$$\frac{\partial P(y, t)}{\partial t} = \int dy' \{W_t(y|y') P(y', t) - W_t(y'|y) P(y, t)\}. \quad (10.1)$$

Popatrzmy na prawdopodobieństwo przejścia $W_t(y|y')$ jako na funkcje punktu startowego y' i skoku $r = y - y'$:

$$W_t(y|y') = W_t(y - y', y') = W_t(r, y - r). \quad (10.2)$$

Podobnie dla prawdopodobieństwa $W_t(y'|y)$ mamy

$$W_t(y'|y) = W_t(y' - y, y) = W_t(-r, y). \quad (10.3)$$

Tak więc, otrzymujemy

$$\frac{\partial P(y, t)}{\partial t} = \int dr \{W_t(r, y - r) P(y - r, t) - W_t(-r, y) P(y, t)\}. \quad (10.4)$$

Przyjmijmy następujące założenia:

1. Dla ustalonego punktu początkowego y' możliwe są tylko *małe przeskoki* r , tzn. prawdopodobieństwo przejścia

$$W_t(r, y') \approx 0 \quad \text{dla} \quad |r| > \delta.$$

2. Przy zmianie punktu początkowego y' prawdopodobieństwo przejścia *zmienia się powoli*

$$W_t(r, y') \approx W_t(r, y' + \Delta y) \quad \text{dla} \quad |\Delta y| < \delta.$$

3. Prawdopodobieństwo $P(y', t)$ również zmienia się wolno z y' .

Możemy wtedy rozwinąć pierwsze wyrażenie pod całką w (10.4) względem drugiego argumentu wokół y dla $|r| < \delta$:

$$W_t(r, y - r) P(y - r, t) = W_t(r, y) P(y, t) + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-r)^k}{k!} \frac{\partial^k}{\partial y^k} \{W_t(r, y) P(y, t)\}. \quad (10.5)$$

Po podstawieniu do równania (10.4) i założeniu, że $W_t(r, y) = W_t(-r, y)$ otrzymujemy *równanie Moyala*

$$\boxed{\frac{\partial P(y, t)}{\partial t} = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!} \frac{\partial^k}{\partial y^k} \{a_k(y, t) P(y, t)\}} \quad (10.6)$$

gdzie współczynniki funkcyjne $a_k(y, t)$ to momenty przeskoku

$$a_k(y, t) = \int_{|r| < \delta} dr r^k W_t(r, y). \quad (10.7)$$

Zgodnie z definicją skoku, r jest zawsze różnicą między punktem końcowym a początkowym, w tym wypadku y . Współczynniki te zawierają informację o mikroskopowym prawdopodobieństwie przejścia na jednostkę czasu W_t .

Równania Fokkera-Plancka otrzymujemy zachowując tylko dwa pierwsze wyrazy sumy w równaniu Moyala

$$\boxed{\frac{\partial P(y, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial y} \{a_1(y, t) P(y, t)\} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial y^2} \{a_2(y, t) P(y, t)\}} \quad (10.8)$$

Jest to równanie typu równania dyfuzji, w którym pierwszy wyraz po prawej stronie nazywa się członem dryfowym, natomiast drugi członem dyfuzyjnym.

10.2 Interpretacja współczynników funkcyjnych

Obliczmy momenty zmiennej losowej

$$\Delta Y = Y(t + \Delta t) - Y(t), \quad (10.9)$$

opisującej przeskok w procesie Markowa w krótkich chwilach czasu δt . Zakładając, że $Y(t) = y$ znajdujemy dla k -tego momentu

$$\langle (\Delta Y)^k \rangle = \int dy' (y' - y)^k P_{1|1}(y', t + \delta t | y, t). \quad (10.10)$$

Podstawiając postać (6.7) prawdopodobieństwa przejścia dla małych δt w procesie Markowa:

$$P_{1|1}(y', t + \delta t | y, t) = \delta(y' - y) (1 - a_0 \delta t) + W_t(y' | y) \delta t,$$

znajdujemy

$$\langle (\Delta Y)^k \rangle = \delta t \int dy' (y' - y)^k W_t(y' | y) = \delta t a_k(y, t).$$

Stąd wzór na współczynniki przejścia

$$a_k(y, t) = \lim_{\delta t \rightarrow 0} \frac{\langle (\Delta Y)^k \rangle}{\delta t} \quad (10.11)$$

Aby więc znaleźć dwa współczynniki $a_{1,2}(y, t)$ w równaniu Fokkera-Plancka wystarczy dobrąć δt tak małe by zmiana $(y' - y)$ była mała, a jednocześnie tak duże by słuszne było założenie Markowa. Następnie liczymy średnie przesunięcie $\langle \Delta Y \rangle$ oraz średni kwadrat przesunięcia $\langle (\Delta Y)^2 \rangle$ do pierwszego rzędu w δt , co pozwala znaleźć współczynniki $a_{1,2}$ na podstawie wzoru (10.11).

10.3 Równanie dyfuzji

Dobrym przykładem ilustrującym metodę obliczania współczynników a_k są ruchy Browna. Cząstka wykonuje wtedy losowe przeskoki wzdłuż osi X dla skal czasowych dostatecznie dużych by traktować je ruch jako proces Markowa. Długość skoków jest dowolna, ale prawdopodobieństwo dużych skoków jest bardzo małe. Co więcej, jest

ono funkcją symetryczną ze względu na kierunek i niezależną od punktu startowego. Wtedy mamy

$$a_1 = \frac{\langle \Delta X \rangle}{\Delta t} = 0, \quad a_2 = \frac{\langle (\Delta X)^2 \rangle}{\Delta t} = \text{const}. \quad (10.12)$$

Stąd równanie Fokkera-Plancka dla prawdopodobieństwa przejścia

$$P(x, t) \equiv P_{1|1}(x, t | x_0, t_0) \quad (10.13)$$

przyjmuje postać *równania dyfuzji*

$$\boxed{\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 P(x, t)}{\partial x^2}} \quad (10.14)$$

gdzie *stała dyfuzji* $D = a_2/2$. Otrzymaliśmy w ten sposób relację Einsteina wiążącą stałą dyfuzji ze średnim kwadratem skoku cząstki

$$D = \frac{\langle (\Delta X)^2 \rangle}{2 \Delta t}. \quad (10.15)$$

10.4 Błądzenie przypadkowe

Równanie dyfuzji możemy otrzymać rozważając równanie Master dla losowych przeskoków wzdłuż osi X . Załóżmy, że cząstka przeskakuje w prawo i lewo o wielkość Δ z równym prawdopodobieństwem na jednostkę czasu, zadany przez

$$W(x \pm \Delta | x) = \frac{D}{\Delta^2}. \quad (10.16)$$

Spełniony jest warunek niezależności od kierunku oraz założenie, że duże przeskoki są mało prawdopodobne. Wtedy równanie bilansu dla odstępu czasowego $\delta t \rightarrow 0$ to

$$P(x, t + \delta t) = P(x + \Delta, t) \frac{D}{\Delta^2} \delta t + P(x - \Delta, t) \frac{D}{\Delta^2} \delta t + P(x, t) \left(1 - 2 \frac{D}{\Delta^2} \delta t \right).$$

Przepisując, otrzymamy

$$\frac{P(x, t + \delta t) - P(x, t)}{\delta t} = D \frac{P(x + \Delta, t) - 2P(x, t) + P(x - \Delta, t)}{\Delta^2} \quad (10.17)$$

W granicy $\delta t \rightarrow 0$ oraz $\Delta \rightarrow 0$, dostajemy równanie dyfuzji

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 P(x, t)}{\partial x^2}. \quad (10.18)$$

Zaburzymy symetrię przeskoków przy utrzymanym warunku ich małości. Na przykład, preferując przeskoki w lewo mamy

$$W(x - \Delta|x) = \frac{D}{\Delta^2} + \frac{B}{\Delta}, \quad W(x + \Delta|x) = \frac{D}{\Delta^2}. \quad (10.19)$$

Otrzymujemy w tym przypadku równanie dyfuzji z dryfem

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = -B \frac{\partial P(x, t)}{\partial x} + D \frac{\partial^2 P(x, t)}{\partial x^2}. \quad (10.20)$$

10.5 Dyfuzja a procesy Wienera

Rozwiązaniem równania dyfuzji bez dryfu jest prawdopodobieństwo przejścia

$$P_{1|1}(x_2, t_2 | x_1, t_1) = \frac{1}{\sqrt{2\pi D(t_2 - t_1)}} \exp \left\{ -\frac{(x_2 - x_1)^2}{2D(t_2 - t_1)} \right\}. \quad (10.21)$$

Jeśli założymy, że w chwili początkowej cząstka była w położeniu $x = 0$,

$$P_1(x, 0) = \delta(x), \quad (10.22)$$

to otrzymamy *proces Wienera* z prawdopodobieństwem jednocząstkowym

$$P_1(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi Dt}} \exp \left\{ -\frac{x^2}{2Dt} \right\}, \quad (10.23)$$

które również spełnia równanie dyfuzji. Średnie przesunięcie dla ruchów Browna jest równe zero

$$\langle X_t \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx x P_1(x, t) = 0, \quad (10.24)$$

natomiast średni kwadrat przesunięcia jest proporcjonalny do czasu

$$\langle X_t^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx x^2 P_1(x, t) = Dt. \quad (10.25)$$

Literatura

- [1] N. G. van Kampen, *Procesy stochastyczne w fizyce i chemii*, 2 wydanie, PWN, 1990.
- [2] C. Gardiner, *Handbook of Stochastic Methods: for Physics, Chemistry and the Natural Sciences*, 3rd ed., Springer, 2004.
- [3] H. Risken, *The Fokker-Planck Equation: Methods of Solutions and Applications*, Springer, 1996.