

Brauno judėjimas ir stochastiniai procesai

- Įvadas

- Empirinė Brauno judėjimo teorija

Brauno judėjimas, kaip stochastinis procesas

Elementari Brauno judėjimo teorija

Markovo procesai

Brauno judėjimas, atsitiktinis klaidžiojimas ir centrinė ribinė teorema

- Lanževeno (Langevin) lygtis

Deterministinė ir stochastinė judėjimo lygtys

Tiesioginis Lanževeno lygties sprendimas

Spektrinis tankis, Vinerio-Khintčeno (Wiener-Khintchine) teorema

Ergodiškumas

Lanževeno lygties sprendimas Furjė transformacijos metodu

Brauno judėjimas ir stochastiniai procesai

- **Gausinis procesas ir Fokero-Planko lygtis**

Gausinis procesas

Fokero-Planko lygtis

Didelės trinties riba

Trumpalaikė greičio relaksacija

- **Pagrindinė kinetinė lygtis (Master equation)**

Pagrindinės kinetinės lygties išvedimas

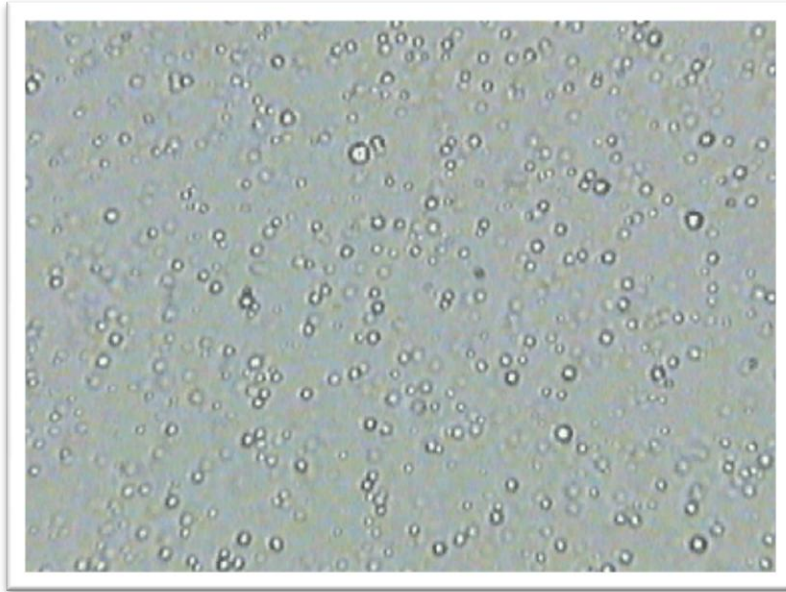
Stacionarus sprendinys ir detalusis balansas

Pavyzdys: artėjimas prie pusiausvyros dviejų indų modelyje

Pavyzdys: populiacijų kinetika

Pavyzdys: cheminių reakcijų kinetika

Išvadas (I)



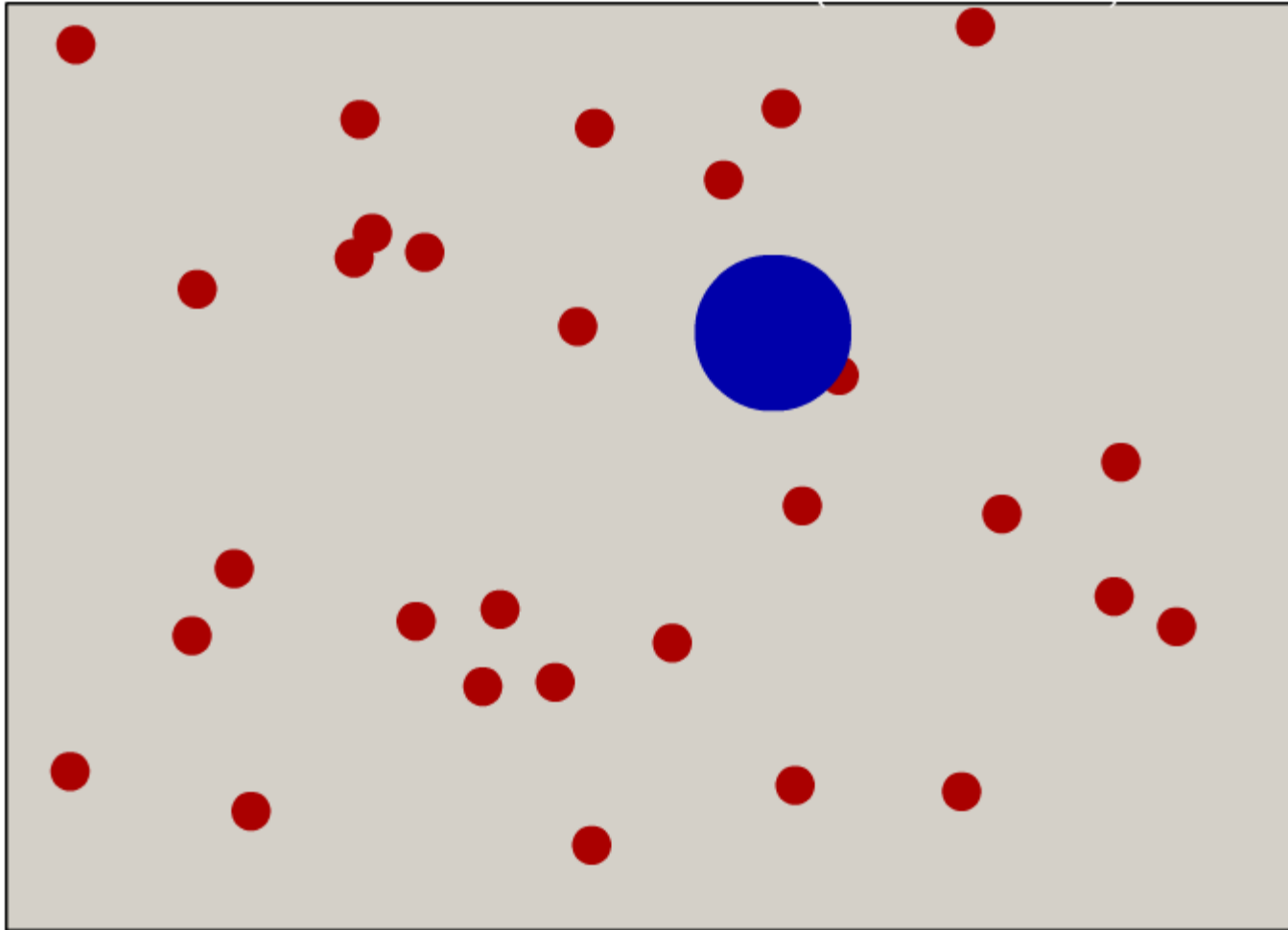
Eksperimentinis Brauno dalelių judėjimo vaizdas



Robert Brown (1773-1858)

- 1827 m škotų botanikas Braunas mikroskopu tyrinėjo pamirkytas į vandenį žiedadulkes ir pastebėjo jų netvarkingą judėjimą. Pradžioje jis manė, kad šis judėjimas yra gyvybės požymis. Norėdamas patikrinti šią hipotezę, jis atliko eilę eksperimentų su labai senom žiedadulkėm, žuvusioms prieš šimtmetį, ir labai nustebė, pamatęs, kad jos taip pat juda. Šiuos eksperimentus Braunas aiškino nepaprastu žiedadulkių ląstelių gyvingumu, ilgai išliekančiu po gėlės žuvimo.
- Vėliau jis atliko tyrimus su mažom uolienos dalelėm ir priėjo išvados, kad judėjimo priežastis yra fizikinė, o ne biologinė. Tačiau kokia ta konkreti fizikinė priežastis jis paaiškinti nesugebėjo.

19 amžiaus pabaigoje dalis mokslininkų Brauno dalelės judėjimą aiškino mažų nematomų molekulių smūgiais. Tačiau kiekybinis šio reiškinio aprašymas nebuvo žinomas.



Click on a big blue particle and drag it around (if you want...)

Brauno judėjimo paaiškinimas

- 1905 m. **A. Einšteinas** paskelbė garsų straipsnį:

A. Einstein „Über die von molekular - kinetischen Theorie der Wärme geforderte Bewegung von in ruhenden Flüssigkeiten suspendenten Teilchen,“

Ann. Phys. (Leipzig), 14, 549 (1905),

kuriame pasiūlė kiekybinę Brauno judėjimo teoriją (nors rašydamas šį straipsnį jis nežinojo Brauno eksperimentų).

- Šios teorijos rėmuose buvo gautas sąryšis tarp makroskopiškai matuojamo dydžio – difuzijos koeficiento D – ir mikroskopinių medžiagos parametrų:

$$D = \frac{RT}{N_A 6\pi\eta a}$$

R – dujų konstanta, T – temperatūra, η – skysčio klampumas,
 a – Brauno dalelės spindulys.

$N_A = 6.02 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$ – Avagadro skaičius



Albert Einstein (1879-1955)

Taigi pagal Einšteino teoriją, išmatavus difuzijos koeficientą, galima apskaičiuoti mikroskopinį medžiagos parametą – Avagadro skaičių, t.y. nustatyti kiek yra molekulių 18 – oje gramų vandens.

- 1910 m. prancūzų mokslininkas **J. Perrin** straipsnyje:

M. J. Perrin „*Brownian movement and molecular reality*,“
(Tailor and Francis, London, 1910)

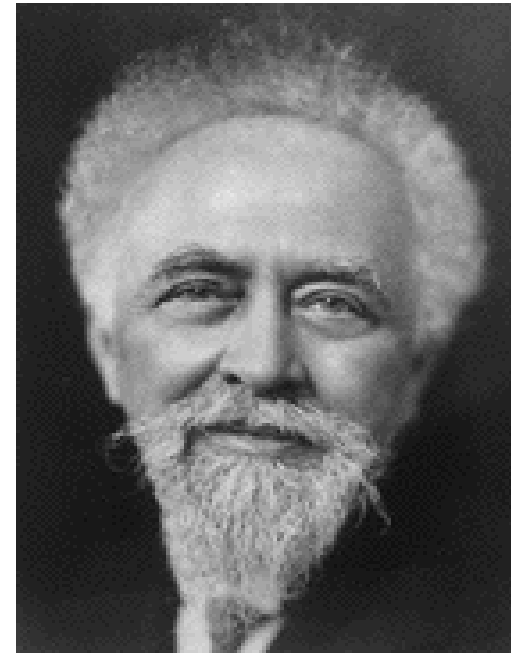
aprašė eksperimentinius Brauno judėjimo tyrimus,
paremtus Einšteino teorija.

- Difuzijos koeficientą jis nustatė stebėdamas Brauno dalelės judėjimą ir skaičiuodamas vidutinį kvadratinį nuokrypį:

$$\langle (x(t) - x(0))^2 \rangle = 2Dt$$

$x(t)$ – Brauno dalelės koordinatė laiko momentu t

Pritaikęs Einšteino sąryšį J. Perrin ganėtinai tiksliai apskaičiavo Avagadro skaičių. Laiške Einšteinui jis rašė: „Aš nesitikėjau, kad Brauno judėjimą galima tirti tokiu tikslumu“



Jean Perrin (1870-1942)

Po Einšteino ir Perrino straipsnių molekulinė medžiagos teorija tapo visuotinai pripažintu mokslu, nors prieš tai buvo nemažai skeptikų.

Empirinė Brauno judėjimo teorija (I)

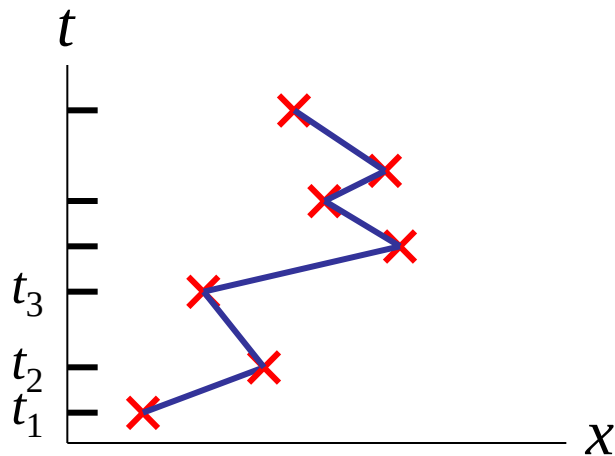
Brauno judėjimas, kaip stochastinis procesas

- Tarkime, kad tam tikrą laiką $0 < t < T$ eksperimentiškai stebime Brauno dalelės judėjimą. Kad būtų paprasčiau, nagrinėsime vienmatį uždavinį, t.y. tirsime dalelės x projekcijas. Mes pakartojame šiuos eksperimentus N kartų (arba kartu stebime N vienodų tarpusavyje nesąveikuojančių Brauno dalelių) ir gauname N realizacijų (įrašų):

$$x_1(t), x_2(t), \dots, x_N(t)$$

- Aišku, kad visos šios realizacijos yra skirtingos, nes eksperimentų rezultatai neatsikartoja. Skirtingai nuo mechanikos mokslo, mes čia negalime tikėtis dalelės judėjimą aprašyti deterministinėmis lygtimis. Šis judėjimas yra sąlygotas daugelio molekulių smūgių (deterministiniame aprašyme tektų užduoti visų molekulių pradinės sąlygas) ir todėl natūralu taikyti statistinį aprašymą.
- Mes tariame, kad dalelės nuokrypis nuo pradinės padėties X_t laiko momentu t yra atsitiktinis dydis ir kiekvienas įrašas $x_j(t)$ yra atskira **statistinio ansamblio** realizacija. Jeigu N artintume prie begalybės, mes turėtume galimybę empiriškai nustatyti nuokrypių pasiskirstymo funkcijas. Aišku, kad tos funkcijos parametriškai priklausys nuo laiko t . Tokią situaciją, kai tikimybės tankio funkcija priklauso nuo laiko, mes jau turėjome atsitiktinio klaidžiojimo uždavinyje.
- Brauno dalelės judėjimas yra **stochastinio proceso** pavyzdys, nes čia atsitiktinis dydis X_t **kinta laike**.

- Stochastiniai procesai lengviau suprantami, kai jie nagrinėjami diskretinio laiko skalėje: $0 < t_1 < t_2 \cdots < t_n < T \Rightarrow x(t_1), x(t_2), \dots, x(t_n)$ - kintamojo X_t realizacija.



- Stochastiniam procesui aprašyti apibrėžiamos tokios tikimybės:

$$W_1(x, t)dx \equiv \Pr\{x < x(t) \leq x + dx\}$$

Tai yra tikimybė, kad momentu t kintamojo X_t vertė bus intervale tarp x ir $x + dx$. Ši tikimybė nenusako vienareikšmiškai stochastinio proceso.

Reikia dar apibrėžti tokias daugiamates tikimybes:

$$W_2(x_1, t_1; x_2, t_2)dx_1dx_2 \equiv \Pr\{x_1 < x(t_1) \leq x_1 + dx_1, x_2 < x(t_2) \leq x_2 + dx_2\}$$

Tai yra tikimybė, kad kintamojo X_t vertė momentu t_1 bus intervale tarp x_1 ir $x_1 + dx_1$ ir momentu t_2 bus intervale tarp x_2 ir $x_2 + dx_2$.

- Bendresnė n – matė tikimybė apibrėžiama taip:

$$W_n(x_1, t_1; x_2, t_2; \dots, x_n, t_n)dx_1dx_2 \cdots dx_n \equiv \Pr\{x_j < x(t_j) \leq x_j + dx_j, j = 1, 2, \dots, n\}$$

Stochastinis procesas X_t yra pilnai apibrėžtas, jeigu yra žinomos šios tikimybės bet kuriai laiko taškų sekai iš n ($n = 1, 2, \dots, \infty$).

- Akivaizdu, kad integruojant daugiamatę tikimybę pagal vieną iš kintamųjų galima pažeminti jos eilę:

$$\int W_n(x_1, t_1; x_2, t_2; \dots, x_n, t_n) dx_n = W_{n-1}(x_1, t_1; x_2, t_2; \dots, x_{n-1}, t_{n-1})$$

- Iš aukščiau apibrėžtų tikimybių galima išvesti eilę kitokių tikimybių. Labai svarbi yra **perėjimo (sąlyginė) tikimybė**, kuri apibrėžiama kaip tikimybė, kad momentu t_1 Brauno dalelė atsiras intervale tarp x_1 ir $x_1 + dx_1$, jeigu momentu t_0 ji buvo ties x_0 :

$$P(x_0, t_0 | x_1, t_1) dx_1 = \frac{W_2(x_0, t_0; x_1, t_1) dx_1}{W_1(x_0, t_0)}$$

(čia sąlyga rašoma kairioje vertikalaus brūkšnio pusėje)

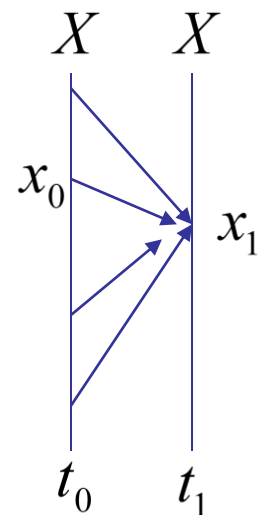
- Šią formulę galima perrašyti taip:

$$\int dx_0 \Big| \quad W_2(x_0, t_0; x_1, t_1) = W_1(x_0, t_0) P(x_0, t_0 | x_1, t_1)$$

- Suintegravę pagal x_0 dėl W_1 gauname

$$W_1(x_1, t_1) = \int W_1(x_0, t_0) P(x_0, t_0 | x_1, t_1) dx_0$$

- Tikimybė, kad momentu t_1 dalelė yra taške x_1 , gaunama susumavus visus galimus perėjimus iš visų įmanomų taškų prieš tai esančiu laiko momentu $t_0 < t_1$.



- Perėjimo tikimybė tarp dviejų laiko taškų yra dažniausiai naudojamas dydis, nors galima pateikti ir bendresnių perėjimo tikimybės apibrėžimo pavyzdžiui:

$$P(x_0, t_0 \mid x_1, t_1; \dots; x_n, t_n) dx_1 \cdots dx_n = \frac{W_{n+1}(x_0, t_0; x_1, t_1; \dots; x_n, t_n) dx_1 \cdots dx_n}{W_1(x_0, t_0)}$$

Tai tikimybė, kad dalelė būdama pradiniu momentu t_0 taške x_0 laiko momentais $t_1, \dots, t_n$ pereis į atitinkamus taškus $x_1, \dots, x_n$.

Apibrėžtų tikimybių taikymas nesiriboja Brauno judėjimo teorija, jomis grindžiama žymiai bendresnė *stochastinių procesų teorija*.

Elementari Brauno judėjimo teorija

- Brauno judėjimas yra labai sudėtingas reiškinys ir gali būti nagrinėjamas įvairiais sudėtingumo lygiais. Mes pradėsime nuo pačio paprasčiausio šio reiškinio modelio.
- Nagrinėsime terpę, kurioje yra daug Brauno dalelių ir jų tankį aprašysime funkcija $n(x,t)$. Iš eksperimento žinome, kad bet koks pradinis tankio nehomogeniškumas pranyksta – sistema artėja prie būsenos su homogeniniu dalelių pasiskirstymu. Toks procesas aprašomas **difuzijos lygtimi**. Pagal **Fiko (A. Fick) dėsnį** bet koks nehomogeniškumas sukuria dalelių srautą proporcingą koncentracijos gradientui:

$$j_d = -D \frac{\partial n}{\partial x} \quad \xrightarrow{\text{tolydumo lygtis}} \quad \boxed{\frac{\partial n}{\partial t} = -\frac{\partial j_d}{\partial x} = D \frac{\partial^2 n}{\partial x^2}} \quad - \text{Difuzijos lygtis}$$

- Jeigu daleles veikia homogeninis laukas, pavyzdžiui gravitacijos laukas, tai atsiranda papildomas dalelių srautas, sąlygotas šio lauko:

$$j_F = nu = \frac{nF}{m\gamma} \quad \begin{array}{l} (u - \text{dalelės greitis, } F - \text{išorinė jėga, } m - \text{dalelės masė,} \\ \gamma - \text{trinties koeficientas } (m\gamma = 6\pi a \eta)) \end{array}$$

Tuomet pilnas srautas ir tolydumo (difuzijos) lygtis atrodys taip:

$$j = j_F + j_d = \frac{nF}{m\gamma} - D \frac{\partial n}{\partial x} \quad \xrightarrow{\quad} \quad \boxed{\frac{\partial n}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{nF}{m\gamma} \right) + D \frac{\partial^2 n}{\partial x^2}}$$

- Iš statistinės fizikos kurso žinome, kad Brauno dalelės gravitaciniame lauke po pakankamai ilgo laiko turi pasiekti pusiausvyrinį Boltzmano pasiskirstymą:

$$n(x) = n(x_0) \exp\left(-\frac{E(x)}{kT}\right) = n(x_0) \exp\left(\frac{F(x - x_0)}{kT}\right) \quad \begin{array}{l} (k - \text{Boltzmano konstanta,} \\ T - \text{skysčio temperatūra}) \end{array}$$

Šis pasiskirstymas turi tenkinti difuzijos lygtį su nuliniu srautu $j=0$, t.y. pusiausvyroje difuzijos ir išorinės jėgos srautai kompensuoja vienas kitą (paprastas **detaliosios pusiausvyros** pavyzdys):

$$j = j_F + j_d = \frac{nF}{m\gamma} - D \frac{\partial n}{\partial x} = 0 \quad \longrightarrow \quad \left(\frac{F}{m\gamma} - \frac{DF}{kT}\right) n(x_0) \exp\left(\frac{F(x - x_0)}{kT}\right) = 0$$

$$\left(\frac{F}{m\gamma} - \frac{DF}{kT}\right) = 0 \quad \longrightarrow \quad \boxed{D = \frac{kT}{m\gamma} = \mu kT} \quad - \text{Einšteino sąryšis} \quad \mu = \frac{1}{m\gamma} = \frac{u}{F} \quad - \text{judrumas}$$

- Einšteino sąryšis yra fundamentalus nepusiausvyrinės statistinės fizikos rezultatas.** Jis nustato ryšį tarp dviejų skirtingų disipacinių procesų, kurie nusako sistemos artėjimą prie pusiausvyros. Konstanta D apibūdina nehomogeninių fluktuacijų difuziją, o konstanta μ aprašo sistemos atsaką į išorinę jėgą ir charakterizuoja Brauno dalelės energijos praradimą dėl trinties.

- Grįžkime prie laisvų (be išorinės jėgos) Brauno dalelių judėjimo uždavinio. Jeigu dalelių koncentracija nėra labai didelė, tai galime nepaisyti dalelių sąveikos ir tuomet jų koncentraciją skirtingais laiko momentais galime susieti su pradine koncentracija. Panaudodami anksčiau apibrėžtą perėjimo tikimybę galime užrašyti:

$$n(x, t) = \int n(x_0, t_0) P(x_0, t_0 | x, t) dx_0$$

Kadangi $n(x, t)$ tenkina difuzijos lygtį bet kuriai pradiniai sąlygai $n(x_0, t_0)$, tai tą pačią difuzijos lygtį turi tenkinti ir perėjimo tikimybė:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D \frac{\partial^2 n}{\partial x^2}$$



$$\frac{\partial}{\partial t} P(x_0, t_0 | x, t) = D \frac{\partial^2}{\partial x^2} P(x_0, t_0 | x, t)$$

pradinė sąlyga:

$$P(x_0, t_0 | x, t) \Big|_{t=t_0} = \delta(x - x_0)$$

Šios lygties sprendinys, tenkinantis pradinę sąlygą, yra Gauso funkcija:

$$P(x_0, t_0 | x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi D(t - t_0)}} \exp\left(-\frac{(x - x_0)^2}{4D(t - t_0)}\right)$$

Markovo procesai

- Iš perėjimo tikimybės išraiškos matome, kad tikimybė surasti dalelę taške x momentu t , kai momentu t_0 ji tikrai buvo taške x_0 , nepriklauso nuo to, kur dalelė buvo prieš momentą t_0 . Šią savybę bendruoju atveju galima suformuluoti taip:

$$P(x_{-n}, t_{-n}; \dots; x_{-1}, t_{-1}; x_0, t_0 | x, t) = P(x_0, t_0 | x, t) \quad (t_{-n} < \dots < t_{-1} < t_0 < t)$$

- Stochastiniai procesai, kurie tenkina šią sąlygą vadinami **Markovo procesais**. Taigi Markovo procesai yra procesai **be atminties**. Perėjimo tikimybė priklauso tik nuo dalelės padėties prieš tai esančiu laiko momentu t_0 ir nepriklauso nuo to, kur ta dalelė buvo ankstesniais laiko momentais. **Brauno dalelės judėjimas yra Markovo proceso pavyzdys**, nes jo perėjimo tikimybė tenkina šią sąlygą.

Markovo procesas pilnai aprašomas dviem funkcijom: $W_1(x, t)$ ir $P(x_0, t_0 | x, t)$

- Visos aukštesnės eilės tikimybės redukuojamos į šias dvi funkcijas, pavyzdžiui:

$$\begin{aligned} \int dx_1 \Big| \quad W_3(x_0, t_0; x_1, t_1; x_2, t_2) &= W_2(x_0, t_0; x_1, t_1) P(x_0, t_0; x_1, t_1 | x_2, t_2) \\ &= W_1(x_0, t_0) P(x_0, t_0 | x_1, t_1) P(x_1, t_1 | x_2, t_2) \end{aligned}$$

Suintegravę šią lygybę pagal x_1 gauname:

$$W_2(x_0, t_0; x_2, t_2) = W_1(x_0, t_0) \int P(x_0, t_0 | x_1, t_1) P(x_1, t_1 | x_2, t_2) dx_1$$

- Kadangi $W_2(x_0, t_0; x_2, t_2) / W_1(x_0, t_0) = P(x_0, t_0 | x_2, t_2)$

tai perėjimo tikimybei gauname integralinę lygtį:

$$P(x_0, t_0 | x_2, t_2) = \int P(x_0, t_0 | x_1, t_1) P(x_1, t_1 | x_2, t_2) dx_1 \quad (t_0 < t_1 < t_2)$$

Tai yra **suderinamumo** arba **Čapmano ir Kolmogorovo lygtis**.

Ši lygtis reiškia kad perėjimą $(x_0, t_0) \rightarrow (x_2, t_2)$ galima suskaldyti į du procesus

$$(x_0, t_0) \rightarrow (x_1, t_1) \rightarrow (x_2, t_2)$$

t.y. **perėjimas vyksta per tarpinę būseną** (x_1, t_1) . Proceso Markoviškumas pasireiškia tuo, kad dviejų nuoseklių procesų tikimybės dauginasi. Tai reiškia, kad šie du nuoseklūs procesai yra **statistiškai nepriklausomi**. Perėjimo $(x_1, t_1) \rightarrow (x_2, t_2)$ tikimybė nepriklauso nuo prieš tai buvusio perėjimo $(x_0, t_0) \rightarrow (x_1, t_1)$.

- Galima tiesiogiai patikrinti ir įsitikinti, kad Brauno dalelės perėjimo tikimybė

$$P(x_0, t_0 | x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi D(t-t_0)}} \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{4D(t-t_0)}\right)$$

kurią gavome iš paprastų empirinių dėsnių, tenkina Čapmano ir Kolmogorovo lygtį. Tai iš esmės yra pasekmė to, kad ši perėjimo tikimybė aprašoma pirmos eilės pagal laiką diferencialine lygtimi (difuzijos lygtis yra pirmos eilė pagal laiką diferenc. lygtis).

Brauno judėjimas ir centrinė ribinė teorema

- Nesunku pastebėti, kad Brauno dalelės perėjimo tikimybė

$$P(x_0, t_0 | x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi D(t-t_0)}} \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{4D(t-t_0)}\right)$$

sutampa su tikimybės išraiška, kurią gavome atsitiktinio klaidžiojimo uždavinyje. Iš tikrųjų, jeigu čia įrašysime $x_0 = 0$ ir $t_0 = 0$, t. y., kaip ir klaidžiojimo uždavinyje, pradiniu laiko momentu dalelę patalpinsime koordinačių pradžioje, tai gausime tiksliai tą pačią tikimybės išraišką, kaip ir atsitiktinio klaidžiojimo uždavinyje:

$$P_X(x, t) = P(0, 0 | x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right)$$

- Tai reiškia, kad **Brauno dalelės judėjimas gerai aproksimuojamas atsitiktiniu klaidžiojimu**, kai dalelė mažais žingsniais su vienoda tikimybė juda tai į kairę tai į dešinę. Atsitiktinio klaidžiojimo uždavinyje turėjome tokią difuzijos koeficiento išraišką:

$$D = \frac{\Delta^2}{2\tau}$$

Čia Δ yra dalelės elementaraus žingsnio ilgis, o τ - žingsnio trukmė.

- Atsitiktinio klaidžiojimo uždavinyje darėme daug specifinių prielaidų apie dalelės judėjimą. Mes tarėme kad dalelės judėjimo žingsnis Δ nekinta, be to mes postulavome, kad judėjimas į kairę ir dešinę vienodai tikimi. Tačiau Gausinis Brauno dalelės pasiskirstymas gaunamas iš žymiai silpnesnių prielaidų. Šis pasiskirstymas, iš esmės yra centrinės ribinės teoremos pasekmė.

- Tarkime, kad Brauno dalelės judėjimas susideda iš daugelio mažų (nebūtinai vienodų) žingsnių Δx_i taip, kad atstumas, kurį dalelė nukeliavo iš koordinatų pradžios per laiką $t = N\tau$ (N – žingsnių skaičius, τ – žingsnio trukmė) yra:

$$x(t) = \Delta x_1 + \Delta x_2 + \dots + \Delta x_N$$

Tuomet: $\langle x(t) \rangle = \langle \Delta x_1 + \Delta x_2 + \dots + \Delta x_N \rangle = \langle \Delta x_1 \rangle + \langle \Delta x_2 \rangle + \dots + \langle \Delta x_N \rangle = 0$

$$\langle x^2(t) \rangle = \left\langle \sum_{i=1}^N \Delta x_i \sum_{j=1}^N \Delta x_j \right\rangle = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \langle \Delta x_i \Delta x_j \rangle = \sum_{j=1}^N \langle (\Delta x_j)^2 \rangle = N \langle (\Delta x)^2 \rangle$$

Čia mes tariame, kad procesas yra Markovo ir todėl atskiri žingsniai statistiškai nepriklausomi, todėl: $\langle \Delta x_i \Delta x_j \rangle = 0$, kai $i \neq j$

- Taigi iš gana bendrų prielaidų gauname pažįstamas formules:

$$\langle x^2(t) \rangle = t \frac{\langle (\Delta x)^2 \rangle}{\tau} = 2Dt, \quad D = \frac{\langle (\Delta x)^2 \rangle}{2\tau}$$

Empirinė Brauno judėjimo teorija (XII)

- Pažymėkime, kad šiame išvedime mums neprireikė detalių žinių apie atskirų žingsnių tikimybės pasiskirstymo funkciją $P_{\Delta x}(\Delta x)$. Mes panaudojome tik du postulatus:

$$\langle \Delta x \rangle = 0 \quad \text{ir} \quad \langle \Delta x_i \Delta x_j \rangle = \langle (\Delta x)^2 \rangle \delta_{i,j} \quad (\delta_{i,j} - \text{kronekiris})$$

- Ištikrųjų žinios apie atskirų žingsnių pasiskirstymo funkciją nereikalingos ir nustatinėjant detalesnę informaciją apie Brauno dalelės judėjimą. Jeigu tas judėjimas susideda iš daugelio statistiškai nepriklausomų žingsnių sumos

$$X = \Delta x_1 + \Delta x_2 + \dots + \Delta x_N$$

tai uždavinys apie atsitiktinio dydžio X tankio funkcijos $P_X(x)$ nustatymą yra ekvivalentus uždaviniui apie paklaidų pasiskirstymo funkcijos suradimą, kurį mes sprendėme aptariant centrinę ribinę teoremą. Skirtumas tik toks, kad ten nagrinėjome suvidurkintą sumą, t.y. sumą padalintą iš N . Mes gavome, kad didelių N riboje sumos tikimybės tankio funkcija artėja prie Gausinio skirstinio. Taip kad čia pakanka tik nusirašyti seną atsakymą (reikia tik atsižvelgti į tai, kad dabar suma nedalinama iš N ir kad $N=t/\tau$):

$$P_X(x, t) \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right), \quad D = \frac{\langle (\Delta x)^2 \rangle}{2\tau}$$

Taigi Gausinis Brauno dalelės tikimybės pasiskirstymo dėsnis iš esmės išplaukia iš labai bendros centrinės ribinės teoremos.

Lanževeno (Langevin) lygtis (I)

- Iki šiol Brauno dalelės judesius nagrinėjome remiantis statistikos principais ir kai kuriomis fenomenologinėmis lygtimis. Mes nenaudojome jokio Brauno dalelės judėjimo modelio. Dabar pagrindinius Einšteino rezultatus išvesime startuojant nuo Brauno dalelės judėjimo lygties.

Deterministinė judėjimo lygtis

- Skystyje judančią Brauno dalelę veikia trinties jėga, kuri pagal **Stokso dėsnį** proporcinga greičiui. Tad galime užrašyti tokią judėjimo lygtį:

$$\boxed{m\dot{v} = F_s = -m\gamma v} \quad (m\gamma = 6\pi a\eta) \quad \begin{array}{l} (v - \text{dalelės greitis, } m - \text{masė, } a - \text{spindulys} \\ \gamma - \text{trinties koeficientas, } \eta - \text{skysčio klampumas}) \end{array}$$

Tai yra **deterministinė (diferencialinė) judėjimo lygtis** – dalelės greičio elgesys pilnai nusakomas pradine sąlyga $v(0)$. Greitis eksponentiškai mažėja:

$$\boxed{v(t) = v(0)e^{-\gamma t} = v(0)e^{-t/\tau}} \quad (\tau = 1/\gamma)$$

- Kokia yra fizikinė trinties jėgos prigimtis? Atsitiktinai judančios skysčio molekulės susiduria su dalele. Krippingai judančios dalelės impulsas yra perduodamas atsitiktinai judančioms molekulėms ir dėl to dalelės greitis mažėja. Tačiau deterministinis aprašymas galioja tik kol dalelės masė yra pakankamai didelė, t.y. kol dalelės šiluminės greičio fluktuacijos yra mažos.

Stochastinė judėjimo lygtis

- Kai Brauno dalelė yra termodinaminėje pusiausvyroje su skysčiu, jos šiluminį greitį galima apskaičiuoti panaudojus **tolygaus šiluminės energijos pasiskirstymo pagal laisvės laipsnius principą**:

$$\frac{m\langle v^2 \rangle}{2} = \frac{kT}{2} \quad \longrightarrow \quad v_T = \sqrt{\langle v^2 \rangle} = \sqrt{\frac{kT}{m}}$$

- Jeigu dalelės masė yra maža, tai šiluminis greitis v_T gali tapti pastebimas. Todėl skysčio poveikio modeliavimas Stokso jėga „mažos“ masės dalelei yra netikslus. Jeigu mažos Brauno dalelės masė yra žymiai didesnė už skysčio molekulės masę, tai Stokso jėga vis dar apytiksliai aprašys skysčio poveikį. Tačiau judėjimo lygtį reikia modifikuoti taip, kad aukščiau užrašyta šiluminio greičio išraiška būtų teisinga.

- Lanževenas** (Langevin) pasiūlė tokią judėjimo lygties modifikaciją:

$$m\dot{v} = F_S + F_L(t) = -m\gamma v + F_L(t)$$

Papildomai prie Stokso jėgos jis pasiūlė pridėti **fliktuojančią jėga** $F_L(t)$. Ši jėga yra stochastinė, arba atsitiktinė, jos savybės užduodamos tik vidurkiams. Diferencialinė lygtis su atsitiktine nuo laiko priklausančia jėga vadinama **stochastine diferencialine lygtimi**.

- Kokia yra stochastinės jėgos prigimtis? Jeigu norėtume tiksliai spręsti Brauno judėjimo uždavinį, tai tektų užrašyti judėjimo lygtis visoms skysčio molekulėms, kurių skaičius yra eilės 10^{23} . Tokį lygčių kiekį išspręsti neįmanoma. Netgi jeigu pavyktų jas išspręsti reiktų užduoti visoms joms pradinės sąlygas. Akivaizdu, kad eksperimentiškai nustatyti skysčio molekulių pradinės sąlygas neįmanoma. Jeigu mes nagrinėtume kitą identišką sistemą (skystis ir Brauno dalelė), su vieninteliu skirtumu, kad jos vandens molekulių pradinės sąlygos yra kitokios, tai mes gautume kitą Brauno dalelės trajektoriją. Kaip paprastai daroma statistinėje mechanikoje, mes nagrinėsime tokių sistemų ansamblį (**Gibso ansamblį**). Tuomet atskiri ansamblio nariai turės skirtingas atsitiktinės jėgos $F_L(t)$ realizacijas ir vienintelis „protingas“ tokios sistemos tyrimo būdas yra šios jėgos poveikio **vidurkinimas pagal ansamblį**.
- Bendruoju atveju Gibso ansamblį sunku realizuoti eksperimentiškai - tai tik patogus tikimybių vaizdavimo būdas. Nors kartais Gibso ansambliai savaime realizuojasi fizinėse sistemose. Taip, jeigu mes nagrinėjame daugelio nesąveikaujančių Brauno dalelių judėjimą, tai tokią sistemą galime interpretuoti kaip Gibso ansamblį. Tokiu atveju vidurkinimas pagal ansamblį reiškia vidurkinimą pagal atskiras Brauno daleles.
- Alternatyvus tikimybių vaizdavimo būdas yra **statistinis ansamblis** (jį jau aptarinėjome anksčiau). Brauno dalelės atveju statistinis ansamblis gaunamas daug kartų atliekant tą patį eksperimentą su viena Brauno dalele. Vidurkinimai pagal Gibso ar statistinį ansamblį iš esmės yra ekvivalentūs, tik statistinis ansamblis yra universalesnis eksperimentinės realizacijos prasme.

Tiesioginis Lanževeno lygties sprendimas

- Taigi pagal Lanževeną Brauno dalelės judėjimas modeliuojamas tokiomis lygtimis:

$$\begin{cases} \dot{v} = -\gamma v + \xi(t) \\ \dot{x} = v \end{cases} \quad \text{– Lanževeno lygtys} \quad (\xi(t) = F_L(t)/m \text{ – atsitiktinė Lanževeno jėga})$$

Kadangi Lanževeno lygtyse yra atsitiktinis dydis $\xi(t)$, tai dinaminiai kintamieji $v(t)$ ir $x(t)$ taip pat bus atsitiktiniai dydžiai. Viršutinė lygtis nepriklauso nuo apatinės, todėl ją galima spręsti atskirai. Nuo jos ir pradėsime.

- Pradžioje reikia postuluoti atsitiktinės jėgos statistines savybes. Du pagrindiniai postulatai yra tokie:

$$\langle \xi(t) \rangle_\xi = 0 \quad \langle \xi(t) \xi(t') \rangle_\xi = q \delta(t - t') \quad (\delta(\cdot) \text{ – delta Dirako funkcija, } q \text{ – Lanževeno šaltinio intensyvumas})$$

Čia $\langle \rangle_\xi$ reiškia vidurkinimą pagal ansamblį, tiksliau kalbant pagal atsitiktinės jėgos realizacijų tikimybės tankį:

$$\langle \xi(t) \rangle_\xi = \int \xi W_1(\xi, t) d\xi, \quad \langle \xi(t) \xi(t') \rangle_\xi = \iint \xi \xi' W_2(\xi, t; \xi', t') d\xi d\xi'$$

- Pirmas postulatas reiškia, kad jėgos vidurkis pagal ansamblį yra nulis. Iš jo išplaukia, kad greičio vidurkis tenkina anksčiau užrašytą deterministinę lygtį:

$$\frac{d}{dt} \langle v \rangle_\xi = -\gamma \langle v \rangle_\xi$$

- Antras postulatas $\langle \xi(t)\xi(t') \rangle_\xi = q\delta(t-t')$ nusako atsitiktinės jėgos koreliaciją skirtingais laiko momentais. Bendroju atveju, stochastinio proceso dydis

$$K_{\xi, \xi}(t, t') \equiv \left\langle \left(\xi(t) - \langle \xi(t) \rangle_\xi \right) \left(\xi(t') - \langle \xi(t') \rangle_\xi \right) \right\rangle_\xi$$

vadinamas **dvilaike koreliacine funkcija**. Mes jį kartais paprastai vadinsime **koreliacine funkcija** arba dar trumpiau **koreliatoriumi**.

- Labai svarbią stochastinių procesų klasę sudaro **stacionarieji stochastiniai procesai**. Tai procesai, kurių **statistinės savybės nepriklaus nuo laiko**. Matematinis **stacionaraus atsitiktinio proceso apibrėžimas yra toks**:

$$W_n(\xi_1, t_1; \xi_2, t_2; \dots; \xi_n, t_n) = W_n(\xi_1, t_1 + \Delta t; \xi_2, t_2 + \Delta t; \dots; \xi_n, t_n + \Delta t) \quad (n=1, 2, \dots, \infty)$$

- Iš šio apibrėžimo išplaukia, kad stacionaraus proceso vienvietė tikimybė nepriklauso nuo laiko, o dvivietė – priklauso tik nuo laikų skirtumo:

$$W_1(\xi, t) = W_1(\xi)$$

$$W_2(\xi_1, t_1; \xi_2, t_2) = W_2(\xi_1; \xi_2, t_2 - t_1)$$

Tai reiškia, kad ir vidurkis nepriklauso nuo laiko: $\langle \xi(t) \rangle_\xi = \int \xi W_1(\xi) d\xi = const.$

Jeigu vidurkis lygus nuliui $\langle \xi(t) \rangle_\xi = 0$, tai dvilaikis koreliatorius lygus: $K_{\xi, \xi}(t, t') \equiv \langle \xi(t)\xi(t') \rangle_\xi$

Nesunku įsitikinti, kad **bet kokio stacionaraus stochastinio proceso dvilaukė koreliacinė funkcija priklauso tik nuo laikų skirtumo**:

$$K_{\xi, \xi}(t, t') = \langle \xi(t) \xi(t') \rangle_{\xi} = \iint \xi \xi' W_2(\xi, \xi', t-t;) d\xi d\xi' = K_{\xi, \xi}(t'-t)$$

• Po šių bendrų teiginių, aptarsime antrą Lanževeno jėgos postulata: $\langle \xi(t) \xi(t') \rangle_{\xi} = q \delta(t-t')$
Matome, kad Lanževeno jėgos koreliatorius priklauso tik nuo laikų skirtumo. Tai reiškia, kad ši jėga atitinka stacionarų stochastinį procesą. Tai natūrali prielaida, nes termodinaminėje pusiausvyroje statistinės sistemos savybės neturi priklausyti nuo laiko.

• Rašydami, kad Lanževeno jėgos koreliatorius proporcingas Dirako delta funkcijai mes turime omenyje, kad molekulių dūžių procesas yra labai greitas. Toks atsitiktinis procesas vadinamas **delta koreliuotu arba baltu triukšmu**. Toliau mes pamatysime, kad šio proceso spektras yra tolygus visame dažnio diapazone. Delta koreliuotos atsitiktinės jėgos artėjimas yra pateisinamas, jeigu jos **koreliacijos laikas** τ_{ξ} yra žymiai mažesnis už visus charakteringus sistemos laikus. Brauno daleliai tai atitinka nelygybę:

$$\tau_{\xi} \ll \tau_v \equiv 1/\gamma \quad (\tau_v - \text{charakteringas greičio relaksacijos laikas})$$

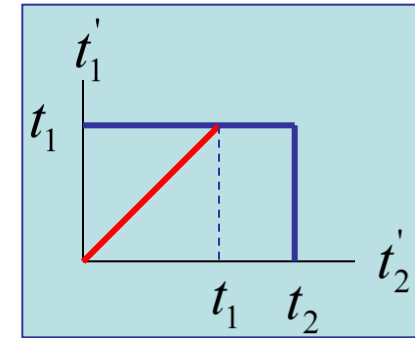
• Natūralu manyti, kad skirtingų molekulių dūžiai į Brauno dalelę yra nepriklausomi. Todėl charakteringas **atsitiktinės jėgos koreliacijos laikas** τ_{ξ} **pagal eilę lygus molekulės dūžio laikui**. Ši laikų hierarchija (greiti molekulių dūžiai ir lėta Brauno dalelės greičio relaksacija) leidžia atskirti šiuos procesus ir užrašyti suvidurkintas lygtis sąlyginai lėtam Brauno dalelės judėjimui.

Lanževeno lygties $\dot{v} = -\gamma v + \xi(t)$ sprendinys yra

$$v(t) = v_0 e^{-\gamma t} + \int_0^t e^{-\gamma(t-t')} \xi(t') dt' \quad (v_0 - \text{pradinis dalelės greitis})$$

Tuomet:

$$\langle v(t_1) v(t_2) \rangle_\xi = v_0^2 e^{-\gamma(t_1+t_2)} + \int_0^{t_1} \int_0^{t_2} e^{-\gamma(t_1+t_2-t'_1-t'_2)} q \delta(t'_1 - t'_2) dt'_1 dt'_2$$



$$\int_0^{t_1} \int_0^{t_2} e^{-\gamma(t_1+t_2-t'_1-t'_2)} q \delta(t'_1 - t'_2) dt'_1 dt'_2 = \int_0^{\min(t_1, t_2)} q e^{-\gamma(t_1+t_2-2t'_1)} dt'_1 = \frac{q}{2\gamma} (e^{-\gamma|t_1-t_2|} - e^{-\gamma(t_1+t_2)})$$

$$\langle v(t_1) v(t_2) \rangle_\xi = \left(v_0^2 - \frac{q}{2\gamma} \right) e^{-\gamma(t_1+t_2)} + \frac{q}{2\gamma} e^{-\gamma|t_1-t_2|} \xrightarrow[\gamma t_2 \gg 1]{\gamma t_1 \gg 1} \langle v(t_1) v(t_2) \rangle_\xi \rightarrow \frac{q}{2\gamma} e^{-\gamma|t_1-t_2|}$$

- Matome, kad pakankamai dideliems laikams koreliatorius nepriklauso nuo pradinio greičio v_0 („pamiršta“ pradinę sąlygą) ir priklauso tik nuo laikų skirtumo $t_1 - t_2$, t.y. po tam tikro pereinamo proceso nusistovi **stacionarus** atsitiktinis Brauno dalelės judėjimas.
- Šis rezultatas galioja bet kuriam pradiniam Brauno dalelės greičiui v_0 . Tačiau, jeigu tarsime, kad pradinio laiko momentu Brauno dalelės yra termodinaminėje pusiausvyroje su skysčiu, tai tuomet vidurkindami koreliatorių pagal pradinius greičius v_0 turime gauti atsakymą priklausančią tik nuo laikų skirtumo.

- Šį „temperatūrinį“ vidurkinimą pagal pradinius greičius žymėsime raide T .
Termodinaminėje pusiausvyroje Brauno dalelės vidutinė energija turi būti $kT/2$:

$$\frac{m\langle v_0^2 \rangle_T}{2} = \frac{kT}{2} \quad \longrightarrow \quad \langle v_0^2 \rangle_T = \frac{kT}{m} \quad (\text{vidutinis kvadratinis šiluminis greitis})$$

Suvidurkintas pagal pradinius greičius koreliatorius turi priklausyti tik nuo laikų skirtumo:

$$\left\langle \langle v(t_1)v(t_2) \rangle_\xi \right\rangle_T = \left\langle \left(v_0^2 - \frac{q}{2\gamma} \right) e^{-\gamma(t_1+t_2)} + \frac{q}{2\gamma} e^{-\gamma|t_1-t_2|} \right\rangle_T \quad \longrightarrow \quad \boxed{\left\langle \langle v(t_1)v(t_2) \rangle_\xi \right\rangle_T = \frac{q}{2\gamma} e^{-\gamma|t_1-t_2|}}$$

Dėl to turime reikalauti, kad

$$\left(\langle v_0^2 \rangle_T - \frac{q}{2\gamma} \right) = 0 \quad \longrightarrow \quad \boxed{q = \frac{2\gamma kT}{m}} \quad \text{Gavome Lanževeno šaltinio intensyvumo išraišką!}$$

- Pastaroji išraiška vadinama **fluktuaciniu-disipaciniu sąryšiu**. Jis suriša fluktuacinio (Lanževeno) šaltinio intensyvumą su temperatūra T ir disipaciniu parametru γ . Šis sąryšis papildo Einšteino sąryšį (pastarasis riša difuzijos koeficientą D su T ir γ).
- Irašę į koreliatorių $t_1=t_2=t$, matome kad vidutinis kvadratinis greitis nepriklauso nuo laiko ir lygus vidutiniam kvadratiniam šiluminiui greičiui:

$$\boxed{\left\langle \langle v^2(t) \rangle_\xi \right\rangle_T = \frac{q}{2\gamma} = \frac{kT}{m}}$$

- Galutinai, termodinaminėje pusiausvyroje greičių koreliatorių galima užrašyti taip:

$$K_{v,v}(t, t+\tau) \equiv \left\langle \left\langle v(t)v(t+\tau) \right\rangle_{\xi} \right\rangle_T = \frac{kT}{m} e^{-\gamma|\tau|} = K_{v,v}(\tau) = K_{v,v}(-\tau)$$

Pastaroji lygybė $K_{v,v}(\tau) = K_{v,v}(-\tau)$ reiškia, kad **koreliacija į praeitį ir ateitį sutampa**. Ši savybė galioja bet kuriems **stacionariems** atsitiktiniams procesams.

- Formaliai koreliatorius $K_{v,v}(\tau) = \frac{kT}{m} e^{-\gamma|\tau|}$ tenkina tokią diferencialinę lygtį ir pradinę sąlygą

$$\frac{dK_{v,v}(\tau)}{d\tau} = -\gamma K_{v,v}(\tau)$$

$$K_{v,v}(0) = \langle v^2(t) \rangle = \frac{kT}{m}$$

Matome, kad **pusiausvyroje greičių koreliatorius tenkina tą pačią lygtį kaip ir vidutinis greitis**, o pradinė sąlyga atitinka vidutinį kvadratinį šiluminį greitį, kurio vertė nustatoma pagal žinomus pusiausvyrinės statistinės fizikos principus.

- Šis rezultatas yra atskiras atvejis labai bendros **Onsagerio teorijos**, kuri nagrinėja mažus fizikinių dydžių nuokrypius nuo termodinaminės pusiausvyros. Mažų nuokrypių relaksacija į pusiausvyrinę būseną aprašoma tiesinėmis lygtimis, o šiluminės fluktuacijos imituojamos atsitiktine jėga. Tuomet, turint lygtis fizikinių dydžių vidurkiams, nesunkiai išvedamos lygtys tų dydžių koreliacinėms funkcijoms. Pastarosios aprašo vidutinių dydžių šiluminės fluktuacijas.

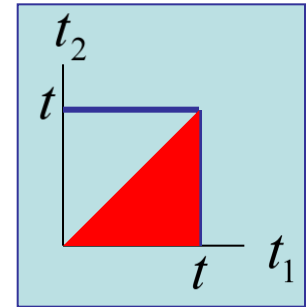
Dabar iš antros Lanževeno lygties $\dot{x} = v$ nustatysime vidutinį kvadratinį nuokrypį.

$$\langle (x(t) - x_0)^2 \rangle_\xi = \left\langle \left[\int_0^t v(t_1) dt_1 \right]^2 \right\rangle_\xi = \left\langle \left[\int_0^t v(t_1) dt_1 \int_0^t v(t_2) dt_2 \right] \right\rangle_\xi = \int_0^t \int_0^t \langle v(t_1) v(t_2) \rangle_\xi dt_1 dt_2$$

Prisiminkime, kad

$$\langle v(t_1) v(t_2) \rangle_\xi = \left(v_0^2 - \frac{q}{2\gamma} \right) e^{-\gamma(t_1+t_2)} + \frac{q}{2\gamma} e^{-\gamma|t_1-t_2|}$$

Tuomet



$$\int_0^t \int_0^t e^{-\gamma(t_1+t_2)} dt_1 dt_2 = \left(\frac{1-e^{-\gamma t}}{\gamma} \right)^2 \quad \text{ir} \quad \int_0^t \int_0^t e^{-\gamma|t_1-t_2|} dt_1 dt_2 = 2 \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} e^{-\gamma(t_1-t_2)} dt_2 = \frac{2}{\gamma} t - \frac{2}{\gamma^2} (1-e^{-\gamma t})$$

Galutinai turime

$$\langle (x(t) - x_0)^2 \rangle_\xi = \left(v_0^2 - \frac{q}{2\gamma} \right) \frac{(1-e^{-\gamma t})^2}{\gamma^2} + \frac{q}{\gamma^2} t - \frac{q}{\gamma^3} (1-e^{-\gamma t}) \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \frac{q}{\gamma^2} t$$

Taigi dideliems laikams gaunamas senas rezultatas – vidutinis kvadratinis nuokrypis didėja proporcingai laikui:

$$\langle (x(t) - x_0)^2 \rangle = 2Dt$$

$$D = \frac{q}{2\gamma^2} = \frac{kT}{m\gamma}$$

Čia Einšteino sąryšis gautas iš kitokių prielaidų nei anksčiau!

Trimatis uždavinys

- Iki šiol mes nagrinėjome vienmatį Brauno dalelės judėjimo uždavinį. Gautus rezultatus nesunku apibendrinti trimačiam uždaviniui. Trimačio uždavinio atveju Lanževeno lygtys atrodo taip:

$$\begin{aligned}\dot{v}_i &= -\gamma v_i + \xi_i(t) \\ \dot{x}_i &= v_i\end{aligned}$$

$$\langle \xi_i(t) \rangle_{\xi} = 0$$

$$\langle \xi_i(t) \xi_j(t') \rangle_{\xi} = q \delta_{i,j} \delta(t-t')$$

Čia indeksai i, j atitinka x, y ir z trimatės erdvės kryptis. Kronekeris $\delta_{i,j}$ reiškia, kad Lanževeno jėgos x, y ir z komponentės yra nekoreliuotos.

- Kadangi atskiros Lanževeno jėgos komponentės nekoreliuotos, uždavinys suskyla į tris nepriklausomus uždavinius, ir greičių komponentėms išlieka seni rezultatai.

$$\left\langle \left\langle v_i^2(t) \right\rangle_{\xi} \right\rangle_T = \frac{q}{2\gamma} = \frac{kT}{m} \quad \longrightarrow \quad \left\langle \left\langle \vec{v}^2(t) \right\rangle_{\xi} \right\rangle_T = \left\langle \left\langle \sum_{i=1}^3 v_i^2(t) \right\rangle_{\xi} \right\rangle_T = 3 \frac{q}{2\gamma} = 3 \frac{kT}{m}$$

Tuomet vidutiniam nuokrypiui trimatėje erdvėje gauname:

$$\left\langle (\vec{x}(t) - \vec{x}_0)^2 \right\rangle = \sum_{i=1}^3 \left\langle (x_i(t) - x_{i0})^2 \right\rangle = 3 \frac{q}{\gamma^2} t = \frac{6kT}{m\gamma} t$$

- Atliktuose tyrimuose mes apsiribojome dvilaike greičio koreliacine funkcija

$$\langle v(t_1)v(t_2) \rangle$$

Jos įvertinimui mums pakako žinoti Lanževeno jėgos dvilaikę koreliacinę funkciją

$$\langle \xi(t_1)\xi(t_2) \rangle$$

Jeigu mes norėtume nustatyti aukštesnės eilės greičio koreliacines funkcijas, tarkime trilaikę, keturlaikę, ir t.t.

$$\langle v(t_1)v(t_2)v(t_3) \rangle, \langle v(t_1)v(t_2)v(t_3)v(t_4) \rangle, \dots$$

mums prireiktų informacijos apie daugelaikes Lanževeno jėgos koreliacines funkcijas

$$\langle \xi(t_1)\xi(t_2)\xi(t_3) \rangle, \langle \xi(t_1)\xi(t_2)\xi(t_3)\xi(t_4) \rangle, \dots$$

- Norint nustatyti visų eilių greičio koreliacines funkcijas (kas yra ekvivalentu daugiamatės pasiskirstymo funkcijos nustatymui) reikia pilnai užduoti Lanževeno jėgos daugiamatę tikimybės tankio funkciją. Paprastai Lanževeno jėga modeliuojama **daugiamačiu Gauso skirstinio (Gausiniu procesu)**. Tai mes aptarsime vėliau, kai išvedinėsime Fokerio-Planko lygtį.

Spektrinis tankis ir Vinerio-Khintčeno teorema

- Labai svarbus yra spektrinis stochastinių procesų tyrimo metodas. Čia stochastinis kintamasis vaizduojamas harmoninių funkcijų superpozicija.
- Tarkime, kad turime **stacionarų atsitiktinį procesą** Z_t ir tam tikrame laiko intervale $-T/2 < t < T/2$ matuojame jo realizacijas $z(t)$. Tuomet tas realizacijas galima išskleisti Furjė eilute:

$$z(t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} a_n e^{i\omega_n t} \quad \omega_n = \frac{2\pi n}{T} \quad a_n = \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{T/2} z(t) e^{-i\omega_n t} dt$$

Kadangi $z(t)$ funkcija yra realioji, tai: $a_{-n} = a_n^*$

Koeficientai a_n yra atsitiktiniai dydžiai, nes procesas Z_t yra atsitiktinis.

- Suvidurkiname Furjė koeficientų išraiškas pagal statistinio ansamblio realizacijas:

$$\langle a_n \rangle = \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{T/2} \langle z(t) \rangle e^{-i\omega_n t} dt = 0 \quad \text{(Stacionaraus proceso kintamojo vidurkis nepriklauso nuo laiko } \langle z(t) \rangle = \text{const} \text{ . Čia tariame, kad tas vidurkis lygus nuliui)}$$

Matome, kad Furjė koeficientų vidurkiai pagal ansamblį lygus nuliui.

- Vidutinė signalo galia intervale $-T/2 < t < T/2$ yra

$$\frac{1}{T} \int_{-T/2}^{T/2} z^2(t) dt = \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{T/2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} a_n \sum_{k=-\infty}^{\infty} a_k^* e^{-i(\omega_n - \omega_k)t} dt = \sum_{n=-\infty}^{\infty} a_n \sum_{k=-\infty}^{\infty} a_k^* \delta_{n,k} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} |a_n|^2$$

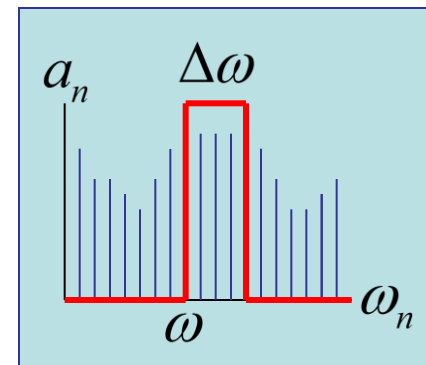
Jos vidurkis pagal ansamblį yra:

$$\frac{1}{T} \int_{-T/2}^{T/2} \langle z^2(t) \rangle dt = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \langle |a_n|^2 \rangle$$

- Eksperimentuose paprastai naudojami juostiniai dažnio filtrai, kurie praleidžia tik tam tikrus dažnius pakliuvusius į mažą intervalą $\Delta\omega$ ties fiksuotu dažniu ω .

$$\text{Išfiltruoto signalo galia} = \sum_{\omega - \frac{2\pi}{T} < \omega_n < \omega + \Delta\omega} \langle |a_n|^2 \rangle \equiv S(\omega) \Delta\omega$$

Čia sumuojama pagal visus dažnius pakliuvusius į filtro juostą. Dydis $S(\omega)$ vadinamas atsitiktinio signalo **spektriniu tankiu** – tai yra išfiltruoto signalo galia normuota į dažnio intervalą.



- Jeigu T yra pakankamai didelis, tai $\Delta\omega$ galima pasirinkti mažu ir filtro juostoje vis dar bus daug harmonikų, nes atstumas tarp harmonikų $2\pi/T$ mažėja didinant T . Harmonikų skaičius intervale $\Delta\omega$ yra $\Delta\omega/(2\pi/T)$, todėl

$$\sum_{\omega < \frac{2\pi n}{T} < \omega + \Delta\omega} \langle |a_n|^2 \rangle \approx \frac{\Delta\omega}{2\pi/T} \langle |a_n|^2 \rangle \longrightarrow S(\omega) \approx \frac{T}{2\pi} \langle |a_n|^2 \rangle = \frac{T}{2\pi} \left\langle \left| \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{T/2} z(t) e^{-i\omega_n t} dt \right|^2 \right\rangle$$

Taigi atsitiktinio signalo spektrinio tankio apibrėžimas yra toks:

$$S(\omega) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi T} \left\langle \left| \int_{-T/2}^{T/2} z(t) e^{-i\omega t} dt \right|^2 \right\rangle$$

- Pasirodo, kad spektrinį tankį galima išreikšti per koreliatoriaus Furjė transformaciją. Šį sąryšį nustato **Vinerio – Khintčeno teorema**, kuri teigia, kad:

$$S(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} K(\tau) e^{-i\omega\tau} d\tau$$

$$K(\tau) = \langle z(t) z(t + \tau) \rangle$$

$$K(\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} S(\omega) e^{i\omega\tau} d\omega$$

Jeigu koreliatorius yra žinomas tai atlikus jo Furjė transformaciją galima nustatyti spektrinį tankį, ir atvirkščiai, iš žinomo spektrinio tankio galima surasti koreliatorių. Toliau įrodysime šį sąryšį.

Vinerio – Khintčeno sąryšis įrodomas taip:

$$S(\omega) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi T} \left\langle \int_{-T/2}^{T/2} dt_1 z(t_1) \int_{-T/2}^{T/2} dt_2 z(t_2) e^{-i\omega(t_1 - t_2)} \right\rangle$$

$$\langle z(t_1) z(t_2) \rangle \equiv K(t_1 - t_2)$$

$$= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi T} \left\{ \int_{-T}^0 d\tau e^{-i\omega\tau} K(\tau) \int_{-T/2}^{\tau+T/2} dt + \int_0^T d\tau e^{-i\omega\tau} K(\tau) \int_{\tau-T/2}^{T/2} dt \right\}$$

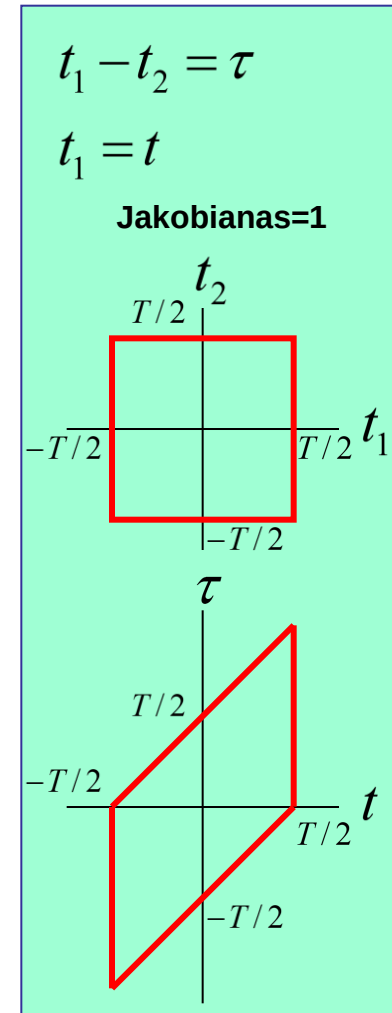
$$= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi T} \left\{ \int_{-T}^0 d\tau e^{-i\omega\tau} K(\tau)(T + \tau) + \int_0^T d\tau e^{-i\omega\tau} K(\tau)(T - \tau) \right\}$$

$$= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi T} \int_{-T}^T d\tau e^{-i\omega\tau} K(\tau)(T - |\tau|)$$

$$= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi} \int_{-T}^T d\tau e^{-i\omega\tau} K(\tau) \left(1 - \frac{|\tau|}{T} \right) = \boxed{\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} K(\tau) e^{-i\omega(\tau)} d\tau}$$

Taigi įrodėme **Vinerio – Khintčeno sąryšį!**

- Toliau spektrinio tankio skaičiavimo techniką pademonstruosime Brauno dalelės uždaviniui. Apskaičiuosime Brauno dalelės greičio ir Lanževeno šaltinio spektrinius tankius.



Lanževeno šaltinio koreliatorius ir spektrinis tankis:

$$K_{\xi,\xi}(\tau) = \langle \xi(t)\xi(t+\tau) \rangle = q\delta(\tau) \longrightarrow S_{\xi,\xi}(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} K_{\xi,\xi}(\tau) e^{-i\omega\tau} d\tau = \frac{q}{2\pi} = \frac{\gamma kT}{\pi m}$$

 $K_{\xi,\xi}(\tau)$
 q
 τ

Matome, kad Lanževeno šaltinio galia vienodai pasiskirsto pagal visus dažnius, dėl to šis atsitiktinis procesas vadinamas **baltu triukšmu**.

 $S_{\xi,\xi}(\omega)$
 $q/2\pi$
 ω

Brauno dalelės greičio koreliatorius ir spektrinis tankis:

$$K_{v,v}(\tau) = \langle v(t)v(t+\tau) \rangle = \frac{kT}{m} e^{-\gamma|\tau|} \longrightarrow S_{v,v}(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} K_{v,v}(\tau) e^{-i\omega\tau} d\tau = \frac{kT}{\pi m} \frac{\gamma}{\gamma^2 + \omega^2}$$

 $K_{v,v}(\tau)$
 $\frac{kT}{m}$
 $1/\gamma$
 τ

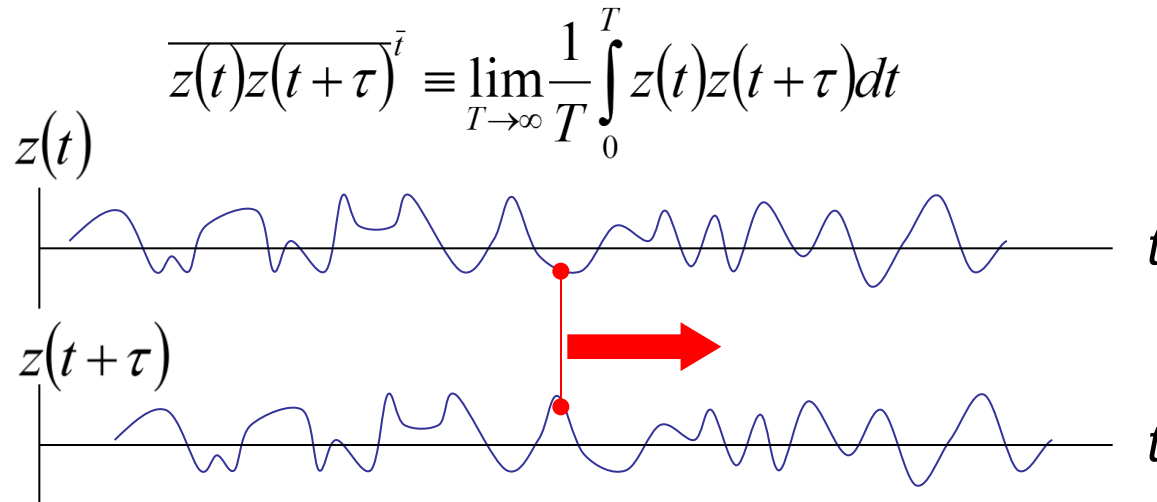
Brauno dalelės galios spektrinis tankinis aprašomas **Lorenco kreive**.

 $S_{v,v}(\omega)$
 $\frac{kT}{\pi m \gamma}$
 γ
 ω

$$\left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\gamma|\tau|} e^{-i\omega\tau} d\tau = \int_{-\infty}^0 e^{\gamma\tau} e^{-i\omega\tau} d\tau + \int_0^{\infty} e^{-\gamma\tau} e^{-i\omega\tau} d\tau = \frac{1}{\gamma - i\omega} + \frac{1}{\gamma + i\omega} = \frac{2\gamma}{\gamma^2 + \omega^2} \right)$$

Ergodiškumas

- Svarbu pabrėžti, kad koreliatorius ir spektrinis tankis yra **eksperimentiškai matuojami dydžiai**. Koreliatorių galima apskaičiuoti iš vienos pakankamai ilgos realizacijos, vidurkinant signalų sandaugą duotu momentu t ir prastuntu laike momentu $t + \tau$:



- Toks vidurkinimas pagal laiką bendruoju atveju nesutampa su vidurkinimu pagal ansamblį. Procesai, kuriems šie du vidurkiai sutampa vadinami **ergodiniais procesais**. **Paprastai stacionarūs procesai yra ergodinai** ir jiems galioja lygybė:

$$K(\tau) = \overline{z(t)z(t+\tau)}^i = \langle z(t)z(t+\tau) \rangle$$

Todėl stacionariems stochastiniams procesams koreliacinės funkcijos santykinai paprastai apskaičiuojamos iš eksperimentinių realizacijų.

- Įvertinkime sąlygas, kurioms esant, stacionarus procesas yra ergodinis, t.y. sąlygas, kurioms esant, vidurkis pagal laiką sutampa su vidurkiu pagal ansamblį.

Tarkime Z_t yra stacionarus stochastinis procesas. Mes matuojame realizaciją $z(t)$ intervale $-T/2 < t < T/2$ ir vidurkiname pagal laiką šiame intervale

$$\bar{z}_T \equiv \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{T/2} z(t) dt$$

Palyginkime šį vidurkį su vidurkiu pagal ansamblį

$$\langle z(t) \rangle = \langle z \rangle$$

Vidurkis pagal ansamblį nepriklauso nuo laiko, nes procesas yra stacionarus.

Klausymas: $\lim_{T \rightarrow \infty} \bar{z}_T \stackrel{?}{=} \langle z \rangle$

$$\varepsilon_T = \langle (\bar{z}_T - \langle z \rangle)^2 \rangle \stackrel{?}{\rightarrow} 0$$

Akivaizdu, kad $\langle \bar{z}_T \rangle = \langle z \rangle$

Todėl

$$\varepsilon_T = \langle \bar{z}_T^2 \rangle - 2\langle \bar{z}_T \rangle \langle z \rangle + \langle z \rangle^2 = \langle \bar{z}_T^2 \rangle - \langle z \rangle^2$$

$$\langle \bar{z}_T^2 \rangle \equiv \frac{1}{T^2} \int_{-T/2}^{T/2} \int_{-T/2}^{T/2} dt_1 dt_2 \langle z(t_1) z(t_2) \rangle$$

$$\langle z(t_1) z(t_2) \rangle = K(t_2 - t_1) + \langle z \rangle^2$$

Čia K yra koreliacinė funkcija – ji priklauso tik nuo laikų skirtumo

$$K(t_2 - t_1) = \langle (z(t_1) - \langle z \rangle)(z(t_2) - \langle z \rangle) \rangle$$

Taigi

$$\varepsilon_T = \frac{1}{T^2} \int_{-T/2}^{T/2} \int_{-T/2}^{T/2} dt_1 dt_2 K(t_1 - t_2)$$

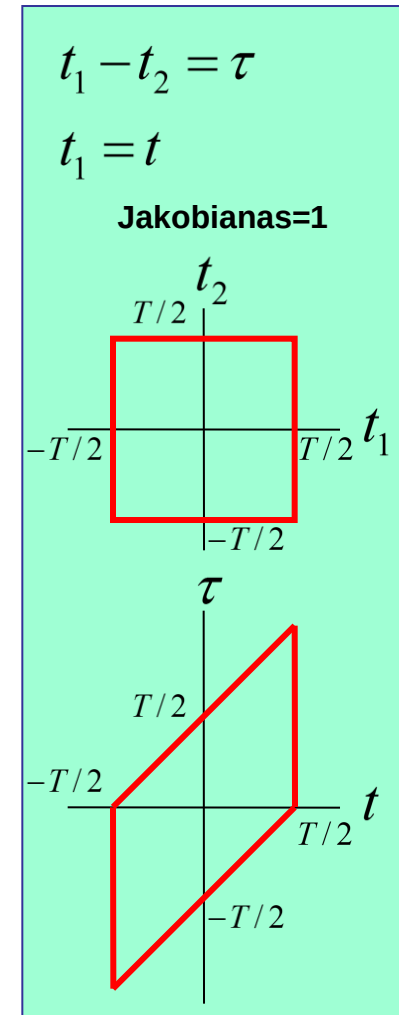
- Pastarasis integralas skaičiuojamas panašiai, kaip Vinerio –Khintčeno teoremoje.

$$\begin{aligned}
 \varepsilon_T &= \frac{1}{T^2} \int_{-T/2}^{T/2} \int_{-T/2}^{T/2} dt_1 dt_2 K(t_1 - t_2) \\
 &= \frac{1}{T^2} \left\{ \int_{-T}^0 d\tau K(\tau) \int_{-T/2}^{\tau+T/2} dt + \int_0^T d\tau K(\tau) \int_{\tau-T/2}^{T/2} dt \right\} \\
 &= \frac{1}{T^2} \left\{ \int_{-T}^0 d\tau K(\tau)(T + \tau) + \int_0^T d\tau K(\tau)(T - \tau) \right\} \\
 &= \frac{1}{T^2} \int_{-T}^T d\tau K(\tau)(T - |\tau|) = \frac{1}{T} \int_{-T}^T d\tau K(\tau) \left(1 - \frac{|\tau|}{T} \right)
 \end{aligned}$$

- Jeigu integralas $\int_{-\infty}^{\infty} d\tau K(\tau)$ konverguoja (taip yra, kai koreliatorius pakankamai greitai mažėja didinant τ), tai $\lim_{T \rightarrow \infty} \varepsilon_T = 0$

Tuomet sistema yra ergodinė, nes $\lim_{T \rightarrow \infty} \bar{z}_T = \langle z \rangle$

- Paprastai koreliatoriai eksponentiškai priklauso nuo τ : $K(\tau) \propto e^{-|\tau|/\tau_c}$
 τ_c – charakteringas koreliacijos laikas. Tokios sistemos yra garantuotai ergodinės.



Lanževeno lygties sprendimas Furjė transformacijos metodu

• Apibrėžę spektrinį tankį, Lanževeno lygtį galime išspręsti Furjė transformacijos metodu. Tačiau pradžioje mums reikalingas tam tikras matematinis pasiruošimas. Mums reiks išmokti skaičiuoti atsitiktinio kintamojo Furjė komponentių sandaugos vidurkį.

• Tegul $z(t)$ yra **stacionarus** atsitiktinio proceso kintamasis (tariame, kad $\langle z(t) \rangle = 0$).

Suraskime Furjė integralą

$$z_{\omega} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} z(t) e^{-i\omega t} dt$$

ir apskaičiuokime tokį dydį:

$$\langle z_{\omega}^* z_{\omega'} \rangle = \frac{1}{4\pi^2} \left\langle \int_{-\infty}^{\infty} z(t) e^{i\omega t} dt \int_{-\infty}^{\infty} z(t') e^{-i\omega' t'} dt' \right\rangle \quad \boxed{(t' = t + \tau)} = \frac{1}{4\pi^2} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i(\omega - \omega')t} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \langle z(t) z(t + \tau) \rangle e^{-i\omega\tau}$$

Stacionariam procesui koreliatorius priklauso tik nuo laikų skirtumo, ir kadangi

$$\langle z(t) z(t + \tau) \rangle \equiv K(\tau) \quad \int_{-\infty}^{\infty} d\tau K(\tau) e^{-i\omega\tau} = 2\pi S(\omega) \quad \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i(\omega - \omega')t} = 2\pi \delta(\omega - \omega')$$

tai $\boxed{\langle z_{\omega}^* z_{\omega'} \rangle = S(\omega) \delta(\omega - \omega')}$ analogiškai galima įrodyti, kad $\boxed{\langle z_{\omega} z_{\omega'}^* \rangle = S(\omega) \delta(\omega + \omega')}$

Šios lygybės iš esmės reiškia, kad stacionaraus proceso Furjė komponentės z_{ω}^* ir $z_{\omega'}$ statistiškai nepriklausomos. Šios lygybės labai naudingos sprendžiant stochastines diferencialines lygtis esant stacionariems procesams.

- Panaudojant aukščiau nustatytas lygybes, nesunku išspręsti Brauno dalelės Lanževeno lygtį

$$\dot{v} = -\gamma v + \xi(t)$$

$$\langle \xi(t) \rangle = 0$$

$$\langle \xi(t) \xi(t') \rangle = q \delta(t - t')$$

- Išreiškime greitį ir atsitiktinę jėgą Furjė integralais:

$$v(t) = \int_{-\infty}^{\infty} v_{\omega} e^{i\omega t} d\omega$$

$$\xi(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \xi_{\omega} e^{i\omega t} d\omega$$

- Atitinkamos atvirkštinės transformacijos:

$$v_{\omega} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} v(t) e^{-i\omega t} dt$$

$$\xi_{\omega} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \xi(t) e^{-i\omega t} dt$$

- Įrašę tai į Lanževeno lygtį, gauname:

$$(i\omega + \gamma) v_{\omega} = \xi_{\omega}$$



$$v_{\omega} = \frac{1}{(i\omega + \gamma)} \xi_{\omega}$$

- Dabar apskaičiuojame greičio Furjė komponentių sandaugos vidurkį.

Iš vienos pusės, kaip bet kuriam stacionariam procesui: $\langle v_{\omega}^* v_{\omega'} \rangle = S_{v,v}(\omega) \delta(\omega - \omega')$

Iš kitos pusės: $\langle v_{\omega}^* v_{\omega'} \rangle = \frac{1}{(-i\omega + \gamma)} \frac{1}{i\omega + \gamma} \langle \xi_{\omega}^* \xi_{\omega'} \rangle = \frac{1}{\omega^2 + \gamma^2} S_{\xi,\xi}(\omega) \delta(\omega - \omega')$

- Sugretinę dvi paskutines lygybes, gauname ryšį tarp Lanžaveno šaltinio ir Brauno dalelės spektrinio tankio

$$S_{v,v}(\omega) = \frac{1}{\omega^2 + \gamma^2} S_{\xi,\xi}(\omega)$$

- Lanžaveno šaltinio spektrinį tankį jau skaičiavome (tai baltas triukšmas)

$$S_{\xi,\xi}(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} K_{\xi,\xi}(\tau) e^{-i\omega\tau} d\tau = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} q \delta(\tau) e^{-i\omega\tau} d\tau = \frac{q}{2\pi} = \frac{\gamma kT}{\pi m}$$

- Tuomet Brauno dalelės greičio spektrinis tankis yra

$$S_{v,v}(\omega) = \frac{\gamma kT}{\pi m} \frac{1}{\omega^2 + \gamma^2}$$

ir greičio koreliacinė funkcija

$$K_{v,v}(\tau) = \langle v(t)v(t+\tau) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} S_{v,v}(\omega) e^{i\omega\tau} d\omega = \frac{\gamma kT}{\pi m} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{i\omega\tau}}{\omega^2 + \gamma^2} d\omega = \frac{kT}{\gamma m} e^{-\gamma|\tau|}$$

Taigi Furjė transformacijos metodu nesunkiai gauname visus senus rezultatus.

Gausinis procesas ir Fokerio-Planko lygtis (I)

- Spręsdami Lanževeno lygtį mes apsiribojome dvilaukės Brauno dalelės koreliacinės funkcijos nustatymu. Dėl to mums pakako ribotos informacijos apie Lanževeno jėgos statistines savybes. Mes postulavome tik jos vidurkį ir dvilaukę koreliacinę funkciją.
- Šio skyriaus tikslas yra nustatyti Brauno dalelės tikimybės tankio funkciją $P(x,v,t)$. $P(x,v,t)dx dv$ yra tikimybė, kad momentu t Brauno dalelės koordinatė ir greitis yra atitinkamai intervaluose $[x, x+dx]$ ir $[v, v+dv]$.
- Čia prireiks detalesnės informacijos apie Lanževeno jėgos statistines savybes. Paprastai Lanževeno jėga **aprašoma delta-koreliuotu Gausiniu procesu** (baltu triukšmu). Tuomet Brauno dalelės tikimybės tankio funkcija tenkina Fokerio-Planko lygtį. Čia mes tą lygtį išvesime.

Gausinis procesas

- Gausinis procesas yra Gauso skirstinio apibendrinimas stochastiniams procesams. Gausinis procesas yra universalus, panašiai kaip Gauso skirstinys. Jo universalumas išplaukia iš apibendrintos centrinės ribinės teoremos. Jeigu priklausantis nuo laiko atsitiktinis dydis $z(t)$ yra sudarytas iš nepriklausomų atsitiktinių dydžių $\Delta z_i(t)$ sumos

$$z(t) = \Delta z_1(t) + \Delta z_2(t) + \dots + \Delta z_n(t),$$

tai panašiai kaip centrinės ribinės teoremos atveju galima įrodyti, kad riboje $n \rightarrow \infty$, procesas $z(t)$ yra Gausinis. Panašiai kaip Gauso skirstinys pilnai užduodamas antruoju momentu, Gausinis procesas pilnai užduodamas dvilauke koreliacine funkcija.

Gausinis procesas ir Fokerio-Planko lygtis (II)

- Stochastinis procesas $z(t)$ vadinamas Gausiniu, jeigu n laiko momentais $t_1, t_2, \dots, t_n$ stebimų verčių $z_1, z_2, \dots, z_n$ daugiamatė tikimybės tankio funkcija yra n -dimensinis Gausas:

$$W_n(z_1, t_1; z_2, t_2; \dots; z_n, t_n) = B \exp \left[-\frac{1}{2} \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^n a_{ij} (z_j - \langle z_j \rangle) (z_i - \langle z_i \rangle) \right]$$

$\langle z_j \rangle \equiv \langle z(t_j) \rangle$ – kintamojo $z(t)$ vidurkis momentu t_j

B – normavimo konstanta. Ji nustatoma iš sąlygos $\int_{-\infty}^{\infty} dz_1 \cdots \int_{-\infty}^{\infty} dz_n W_n(z_1, t_1; \dots; z_n, t_n) = 1$

$(a_{ij}) \equiv A$ – reali simetrinė ($a_{ij} = a_{ji}$) teigiamai apibrėžta (visos tikrinės vertės teigiamos) matrica

- Toliau įrodysime, kad atvirkštinės matricos A elementai yra proceso $z(t)$ dvilaikės koreliacinės funkcijos:

$$(A^{-1})_{ij} = \langle (z_i - \langle z_i \rangle) (z_j - \langle z_j \rangle) \rangle = \langle [z(t_i) - \langle z(t_i) \rangle] [z(t_j) - \langle z(t_j) \rangle] \rangle \equiv K(t_i, t_j)$$

- Kad tai įrodytume mums reiks pasinaudoti charakteristine funkcija. Charakteristinę funkciją mes buvome įvedę anksčiau vienmačiam skirstiniui. Charakteristinės funkcijos apibrėžimas daugiamačiam skirstiniui nesunkiai apibendrinamas:

$$f(k_1, \dots, k_n) = \left\langle \exp \left(i \sum_{j=1}^n k_j z_j \right) \right\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dz_1 \cdots \int_{-\infty}^{\infty} dz_n W_n(z_1, t_1; \dots; z_n, t_n) \exp \left(i \sum_{j=1}^n k_j z_j \right)$$

Atkreipkime dėmesį į tai, kad iš W_n normavimo išplaukia lygybė:

$$f(0, \dots, 0) = 1$$

Tolimesniam užrašų sutrumpinimui įvesime vektorinius žymėjimus

$$\vec{z} = \begin{pmatrix} z_1 \\ \vdots \\ z_n \end{pmatrix} \quad \vec{k} = \begin{pmatrix} k_1 \\ \vdots \\ k_n \end{pmatrix} \quad \vec{z}^T = (z_1 \cdots z_n) \quad \vec{y} = \vec{z} - \langle \vec{z} \rangle$$

$$\vec{k}^T = (k_1 \cdots k_n) \quad (d\vec{z} = d\vec{y})$$

Tuomet Gausinį skirstinį ir jo charakteristinę funkciją galima užrašyti taip:

$$W_n(z_1, t_1; \dots; z_n, t_n) = B \exp \left(-\frac{1}{2} \vec{y}^T A \vec{y} \right)$$

$$f(\vec{k}) = \left\langle \exp(i \vec{k}^T \vec{z}) \right\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dy_1 \cdots \int_{-\infty}^{\infty} dy_n B \exp \left(-\frac{1}{2} \vec{y}^T A \vec{y} \right) \exp[i \vec{k}^T (\vec{y} + \langle \vec{z} \rangle)]$$

Gausinis procesas ir Fokerio-Planko lygtis (IV)

- Pastarajame integrale pakeisime integravimo kintamuosius: $\vec{y} = \vec{u} + iA^{-1}\vec{k}$ ($d\vec{y} = d\vec{u}$)

$$\begin{aligned} f(\vec{k}) &= \int_{-\infty}^{\infty} du_1 \cdots \int_{-\infty}^{\infty} du_n B \exp\left(-\frac{1}{2}(\vec{u} + iA^{-1}\vec{k})^T A(\vec{u} + iA^{-1}\vec{k})\right) \exp[i\vec{k}^T(\vec{u} + iA^{-1}\vec{k} + \langle\vec{z}\rangle)] \\ &= \exp(i\vec{k}^T \langle\vec{z}\rangle - \vec{k}^T A^{-1}\vec{k}) B \int_{-\infty}^{\infty} du_1 \cdots \int_{-\infty}^{\infty} du_n \exp\left(-\frac{1}{2}(\vec{u}^T + i\vec{k}^T (A^{-1})^T) A(\vec{u} + iA^{-1}\vec{k}) + i\vec{k}^T \vec{u}\right) \end{aligned}$$

Apskaičiuojame išraišką eksponentės rodiklyje po integralu

$$-\frac{1}{2}(\vec{u}^T + i\vec{k}^T (A^{-1})^T) A(\vec{u} + iA^{-1}\vec{k}) + i\vec{k}^T \vec{u} = -\frac{1}{2}(\vec{u}^T A\vec{u} - \vec{k}^T A^{-1}\vec{k})$$

Čia panaudojome lygybes $(A^{-1})^T = A^{-1}$ (teisinga simetrinėms matricoms) ir $\vec{u}^T \vec{k} = \vec{k}^T \vec{u}$

Tuomet
$$f(\vec{k}) = \exp\left(i\vec{k}^T \langle\vec{z}\rangle - \frac{1}{2}\vec{k}^T A^{-1}\vec{k}\right) B \int_{-\infty}^{\infty} du_1 \cdots \int_{-\infty}^{\infty} du_n \exp\left(-\frac{1}{2}\vec{u}^T A\vec{u}\right)$$

Prisiminkime, kad $f(\vec{0}) = 1$, todėl konst. B tenkina:
$$B \int_{-\infty}^{\infty} du_1 \cdots \int_{-\infty}^{\infty} du_n \exp\left(-\frac{1}{2}\vec{u}^T A\vec{u}\right) = 1$$

Galutinai gauname:

$$f(\vec{k}) = \exp\left(i\vec{k}^T \langle\vec{z}\rangle - \frac{1}{2}\vec{k}^T A^{-1}\vec{k}\right)$$

– Gausinio proceso
charakteristinė funkcija

Gausinis procesas ir Fokerio-Planko lygtis (V)

- Žinodami charakteristinę funkciją galime apskaičiuoti daugiamačio Gausinio skirstinio momentus ir komuliantus. **Daugiamačio skirstinio momentų** apibrėžimas yra toks:

$$\langle z_1^{r_1} \dots z_n^{r_n} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dz_1 \dots \int_{-\infty}^{\infty} dz_n W_n(z_1, t_1; \dots z_n, t_n) z_1^{r_1} \dots z_n^{r_n}$$

Šiuos momentus galima nustatyti skleidžiant charakteristinę funkciją Teiloro eilute

$$f(\vec{k}) = \left\langle \exp \left(i \sum_{j=1}^n k_j z_j \right) \right\rangle = \sum_{r_1=0}^{\infty} \dots \sum_{r_n=0}^{\infty} \frac{(ik_1)^{r_1} \dots (ik_n)^{r_n}}{r_1! \dots r_n!} \langle z_1^{r_1} \dots z_n^{r_n} \rangle$$

Skleisdami Teiloro eilute charakteristinės funkcijos logaritmą gauname daugiamačio skirstinio **komuliantus** $C(z_1^{r_1} \dots z_n^{r_n})$ (pagal apibrėžimą, komuliantai yra šio skleidinio koeficientai)

$$\ln[f(\vec{k})] = \sum_{r_1=0}^{\infty} \dots \sum_{r_n=0}^{\infty} \frac{(ik_1)^{r_1} \dots (ik_n)^{r_n}}{r_1! \dots r_n!} C(z_1^{r_1} \dots z_n^{r_n}) \quad (\text{Šioje sumoje nėra nario } r_1 = r_2 = \dots = r_n = 0)$$

Ryšys tarp komuliantų ir momentų nustatomas iš lygybės:

$$f(\vec{k}) = \sum_{r_1=0}^{\infty} \dots \sum_{r_n=0}^{\infty} \frac{(ik_1)^{r_1} \dots (ik_n)^{r_n}}{r_1! \dots r_n!} \langle z_1^{r_1} \dots z_n^{r_n} \rangle = \exp \left[\sum_{r_1=0}^{\infty} \dots \sum_{r_n=0}^{\infty} \frac{(ik_1)^{r_1} \dots (ik_n)^{r_n}}{r_1! \dots r_n!} C(z_1^{r_1} \dots z_n^{r_n}) \right]$$

- Parodysime, kaip tas sąryšis nustatomas žemos eilės momentams ir komuliantams

$$\begin{aligned}
 f(\vec{k}) &= 1 + (ik_1)\langle z_1 \rangle + (ik_2)\langle z_2 \rangle + \frac{(ik_1)^2}{2}\langle z_1^2 \rangle + \frac{(ik_2)^2}{2}\langle z_2^2 \rangle + (ik_1)(ik_2)\langle z_1 z_2 \rangle + \dots \\
 &= \exp \left[(ik_1)C(z_1) + (ik_2)C(z_2) + \frac{(ik_1)^2}{2}C(z_1^2) + \frac{(ik_2)^2}{2}C(z_2^2) + (ik_1)(ik_2)C(z_1 z_2) + \dots \right] \\
 &= 1 + (ik_1)C(z_1) + (ik_2)C(z_2) + \frac{(ik_1)^2}{2}C(z_1^2) + \frac{(ik_2)^2}{2}C(z_2^2) + (ik_1)(ik_2)C(z_1 z_2) + \dots \\
 &\quad + \frac{1}{2} \left[(ik_1)^2 C(z_1)C(z_1) + (ik_2)^2 C(z_2)C(z_2) + 2(ik_1)(ik_2)C(z_1)C(z_2) + \dots \right] + \dots
 \end{aligned}$$

Sulyginę narius prie įvairių k laipsnių gauname ieškomus sąryšius, pavyzdžiui

$$(ik_1): \quad \langle z_1 \rangle = C(z_1) \qquad (ik_1)^2: \quad \langle z_1^2 \rangle = C(z_1^2) + C(z_1)C(z_1) = C(z_1^2) + \langle z_1 \rangle^2$$

$$(ik_1)(ik_2): \quad \langle z_1 z_2 \rangle = C(z_1 z_2) + C(z_1)C(z_2) = C(z_1 z_2) + \langle z_1 \rangle \langle z_2 \rangle \Rightarrow C(z_1 z_2) = \langle z_1 z_2 \rangle - \langle z_1 \rangle \langle z_2 \rangle$$

Išlaikant skleidimo narius iki trečio laipsnio galima gauti trečios eilės momento išraišką:

$$\langle z_1 z_2 z_3 \rangle = C(z_1 z_2 z_3) + \langle z_1 \rangle C(z_2 z_3) + \langle z_2 \rangle C(z_1 z_3) + \langle z_3 \rangle C(z_1 z_2) + \langle z_1 \rangle \langle z_2 \rangle \langle z_3 \rangle$$

Gausinis procesas ir Fokerio-Planko lygtis (VII)

- Po šio trumpo ekskurso į bendrą daugiamačių skirstinių momentų ir komuliantų teoriją grįžkime prie Gausinio proceso. Prisiminkime, kad šio proceso charakteristinė funkcija yra

$$f(\vec{k}) = \exp\left(i\vec{k}^T \langle \vec{z} \rangle - \frac{1}{2} \vec{k}^T A^{-1} \vec{k}\right) = \exp\left[i \sum_{j=1}^n k_j \langle z_j \rangle - \frac{1}{2} \sum_{j=1}^n \sum_{m=1}^n (A^{-1})_{mj} k_j k_m\right]$$

- Kadangi charakteristinės funkcijos logaritme

$$\ln[f(\vec{k})] = i \sum_{j=1}^n k_j \langle z_j \rangle - \frac{1}{2} \sum_{j=1}^n \sum_{m=1}^n (A^{-1})_{mj} k_j k_m$$

yra tik pirmos ir antros eilės nariai pagal k , tai reiškia, kad daugiamačio Gausinio skirstinio tik pirmos ir antros eilės komuliantai nelygus nuliui, o visi aukštesnių eilių komuliantai yrauliai. Iš komuliantų apibrėžimo išplaukia, kad $(A^{-1})_{mj} = C(z_m z_j)$

- Kita vertus, iš momentų ir komuliantų sąryšio turime:

$$\begin{aligned} (A^{-1})_{mj} &= C(z_m z_j) = \langle z_m z_j \rangle - \langle z_m \rangle \langle z_j \rangle \\ &= \langle (z_m - \langle z_m \rangle)(z_j - \langle z_j \rangle) \rangle = \langle [z(t_m) - \langle z(t_m) \rangle][z(t_j) - \langle z(t_j) \rangle] \rangle \equiv K(t_m, t_j) \end{aligned}$$

Taigi įrodėme, kad **atvirkštinės matricos** A **elementai yra proceso** $z(t)$ **koreliacinės funkcijos**. Matome, kad **Gausinis procesas pilnai apibrėžiamas vidurkiu** $\langle z(t_j) \rangle$ **ir dvilaike koreliacine funkcija** $K(t_m, t_j)$.

Šie parametrai vienareikšmiškai definuoja Gausinio proceso charakteristinę funkciją:

$$f(\vec{k}) = \exp \left[i \sum_{j=1}^n k_j \langle z(t_j) \rangle - \frac{1}{2} \sum_{j=1}^n \sum_{m=1}^n K(t_m, t_j) k_j k_m \right]$$

Toliau nagrinėsime **stacionarų** Gausinį procesą, tuomet

$$\langle z(t_j) \rangle = \text{const}$$

$$K(t_m, t_j) = K(t_j - t_m)$$

Be to **tarsime, kad Gausinio proceso vidurkis yra lygus nuliui:**

$$\langle z(t) \rangle = 0$$

Šiuo atveju koreliacinė funkcija $K(t_j - t_m) = \langle z(t_m) z(t_j) \rangle$ ir charakteristinės funkcijos išraiška supaprastėja

$$f(\vec{k}) = \exp \left[-\frac{1}{2} \sum_{j=1}^n \sum_{m=1}^n K(t_j - t_m) k_j k_m \right] = \exp \left[-\frac{1}{2} \sum_{j=1}^n \sum_{m=1}^n \langle z(t_m) z(t_j) \rangle k_j k_m \right]$$

Matome, kad esant šioms prielaidoms dvilaikė koreliacinė funkcija (priklausanti nuo laikų skirtumo) pilnai charakterizuoja Gausinį procesą. Tai reiškia, kad **daugialaikės koreliacinės funkcijos turi būti išreiškiamos dvilaikėmis.**

Galima įrodyti tokią formulę

$$\langle z(t_1) \cdots z(t_n) \rangle = \begin{cases} 0, & \text{kai } n \text{ nelyginis} \\ \sum_{\text{visos poros}} \prod \langle z(t_m) z(t_j) \rangle, & \text{kai } n \text{ lyginis} \end{cases}$$

Pavyzdys: Norėdami pailustruoti šios formulės taikymą apskaičiuosime trilaikę ir keturlaikę koreliacines funkcijas.

Sprendimas:

$$\langle z(t_1) z(t_2) z(t_3) \rangle = 0, \text{ nes } n \text{ nelyginis.}$$

$$\langle z(t_1) z(t_2) z(t_3) z(t_4) \rangle = \langle z(t_1) z(t_2) \rangle \langle z(t_3) z(t_4) \rangle + \langle z(t_1) z(t_3) \rangle \langle z(t_2) z(t_4) \rangle + \langle z(t_1) z(t_4) \rangle \langle z(t_2) z(t_3) \rangle$$

Ši formulė gaunama iš lygybės

$$f(\vec{k}) = \exp \left[-\frac{1}{2} \sum_{j=1}^n \sum_{m=1}^n \langle z(t_m) z(t_j) \rangle k_j k_m \right] = \sum_{r_1=0}^{\infty} \cdots \sum_{r_n=0}^{\infty} \frac{(ik_1)^{r_1} \cdots (ik_n)^{r_n}}{r_1! \cdots r_n!} \langle z_1^{r_1} \cdots z_n^{r_n} \rangle$$

skleidžiant eksponentę Teiloro eilute ir lyginant koeficientus prie vienodų k laipsnių.

Gausinis procesas ir Fokerio-Planko lygtis (X)

- Dar aptarsime vieną svarbų klausimą, kuris mums bus reikalingas išvedinėjant Fokerio-Planko lygtį. Tai klausimas, kiek narių yra išraiškoje, kuri riša $2n$ -laikę koreliacinę funkciją su dvilaikių koreliacinių funkcijų sandaugomis.

$$\langle z(t_1)z(t_2) \cdots z(t_{2n}) \rangle = \underbrace{\langle z(t_1)z(t_2) \rangle \langle z(t_3)z(t_4) \rangle \cdots \langle z(t_{2n-1})z(t_{2n}) \rangle}_{\text{Kiek narių?}} + \cdots$$

Pastarajame pavyzdyje matėme, kad keturlaikės ($n=2$) koreliacinės funkcijos išraiškoje yra 3 nariai. Bendras atsakymas į šį klausimą yra toks:

$$\text{Narių skaičius } 2n \text{ laikės koreliacinės funkcijos skleidinyje} = \frac{(2n)!}{n! 2^n}$$

- Šis rezultatas gaunamas taip. Mums reikia suskaičiuoti kiek yra skirtingų porų iš $2n$ laiko taškų. Pirmą porą galima pasirinkti $C_{2n}^2 = \frac{(2n)(2n-1)}{2}$ būdais. Po to, kai pirmą porą pasirinkta, antrą porą galima pasirinkti $C_{2n-2}^2 = \frac{(2n-2)(2n-3)}{2}$ būdais, ir t.t. Bendras skirtingų porų skaičius yra

$$\prod_{i=0}^{n-1} \frac{(2n-2i)(2n-2i-1)}{2} = \frac{(2n)(2n-1)}{2} \frac{(2n-2)(2n-3)}{2} \cdots \frac{(2)(1)}{2} = \frac{(2n)!}{2^n}$$

Gaminant sandaugas iš n porų gausime $n!$ sutampančių sandaugų, nes sandauga nesikeičia perstatant jos elementus.

$$\text{Skirtingų sandaugų skaičius iš } n \text{ porų} = \frac{(2n)!}{n! 2^n}$$

Fokerio-Planko lygtis

- Išsiaiškinę Gausinio proceso savybes išvesime lygtį, kurią tenkina Brauno dalelės tikimybės tankio funkcija. Mes vėl startuosime nuo Lanževeno lygčių.

$$\begin{aligned}\dot{v} &= -\gamma v + f(x) + \xi(t) \\ \dot{x} &= v\end{aligned}$$

$$\langle \xi(t) \rangle_{\xi} = 0$$

$$\langle \xi(t) \xi(t') \rangle_{\xi} = q \delta(t - t')$$

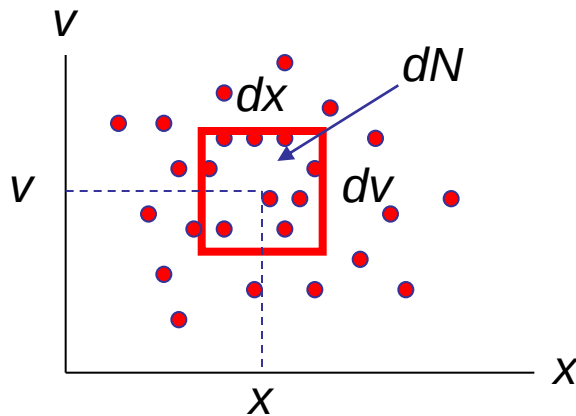
$$\xi(t) \text{ – Gausinis procesas}$$

- Iki šiol spręsdami Lanževeno lygtis mes domėjomės tik žemos eilės koreliacinėmis funkcijomis ir mums pakako tik dviejų pirmų postulatų apie Lanževeno jėgą. Dabar mūsų tikslas yra nustatyti Brauno dalelės tikimybės tankio funkciją. Dėl to reikalingas papildomas postulatų apie Lanževeno šaltinį, kuris detalai nusakytų atsitiktinio proceso savybes. Čia postuluoju, kad Lanževeno jėga aprašoma Gausiniu procesu. Turint omenyje dar du pirmus postulatus, toks procesas vadinamas **baltu (arba delta koreliuotu) Gausiniu triukšmu su nuliniu vidurkiu**.

- Čia mes nagrinėjame bendresnį nei anksčiau Brauno dalelės judėjimo uždavinį. Mes tariame, kad Brauno dalelė juda potenciniame lauke $V(x)$, t.y. ją veikia ne tik atsitiktinė Lanževeno jėga, bet dar ir išorinio lauko jėga $F(x) = -\partial V(x) / \partial x$. Kad būtų paprastesnės išraiškos, Lanževeno lygtyse tą jėgą mes normavome į masę $F(x) / m = f(x)$.

- Mes parodysime, kad esant aukščiau išvardintiems postulatams, Brauno dalelės tikimybės tankio funkcija tenkina antrosios eilės (difuzijos tipo) diferencialinę lygtį, kuri **vadinama Fokerio-Planko lygtimi**.
- Fokerio-Planko lygtį išvesime **dviem etapais**. Pradžioje mes užrašysime Lanževeno lygtis kitokiu pavidalu. Mes nagrinėsime vienodų sistemų ansamblio judėjimą (x, v) plokštumoje. Pirmame etape tarsime, kad atsitiktinės jėgos realizacija $\xi(t)$ visose ansamblio nariuose yra ta pati. Ansamblio nariai skiriasi tik pradinėmis Brauno dalelės koordinatėmis ir greičio (x ir v) reikšmėmis. Mes apibrėšime (x, v) plokštumoje ansamblio tankį $\rho(x, v, t)$ ir užrašysime tam tankiui **tolydumo lygtį**.
- **Antrame etape** tolydumo lygtį **suvidurkinsime pagal atsitiktinės jėgos realizacijas** ir suvidurkintam tankiui $\langle \rho(x, v, t) \rangle = P(x, v, t)$ gausime Fokerio-Planko lygtį. Suvidurkintas tankis $P(x, v, t)$ kaip tik atitinka Brauno dalelės tikimybės tankio funkciją, t.y. $P(x, v, t) dx dv$ yra tikimybė, kad momentu t Brauno dalelės koordinatė ir greitis bus atitinkamai intervaluose $[x, x+dx]$ ir $[v, v+dv]$.
- Fokerio-Planko lygties išvedimas reikalauja nemažai algebrinių veiksmų. Tačiau reikia pažymėti, kad **šis išvedimas yra centrinis šiuolaikinės Brauno judėjimo teorijos momentas**. Jis svarbus ne tik Brauno judėjimo teorijai, bet ir bendresnei stochastinių procesų bei stochastinių diferencialinių lygčių teorijai.

- **Pirmas etapas (tolydumo lygtis).** Tarkime, kad mes turime N vienodų sistemų ansamblį. Kiekvienos sistemos būseną charakterizuoja dviem skaičiais (x_i, v_i) , $i=1, \dots, N$, kuriuos vaizduosime taškais **fazinėje** (x, v) **plokštumoje**.



Kiekvienas taškas juda fazinėje plokštumoje pagal Lanževano lygtis (tariame, kad visas sistemas veikia ta pati Lanževeno jėga $\xi(t)$)

$$\dot{v} = -\gamma v + f(x) + \xi(t)$$

$$\dot{x} = v$$

$\rho(x, v, t)$ – ansamblio tankis taške (x, v) momentu t

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dv \rho(x, v, t) = 1$$

Įveskime vektorinius žymėjimus: $\vec{z} \equiv (x, v)$ $\dot{\vec{z}} = (\dot{x}, \dot{v}) = (v, -\gamma v + f(x) + \xi(t))$

Kadangi faziniai taškai savaime neatsiranda ir neišnyksta tai jų skaičius išskirtame fazinės erdvės tūreyje gali kisti tik dėl atėjimo ir išėjimo pro tūrelio sienelės ir todėl tankis tenkina **tolydumo lygtį**

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\vec{z}, t) = -\nabla_{\vec{z}} \cdot (\dot{\vec{z}} \rho(\vec{z}, t))$$

- Grįžtant nuo vektorių prie komponentių, tolydumo lygtį galima užrašyti taip

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(x, v, t) = -\frac{\partial}{\partial x} \{v \rho(x, v, t)\} - \frac{\partial}{\partial v} \{(-\gamma v + f(x) + \xi(t)) \rho(x, v, t)\}$$

Ši lygtis yra ekvivalenti Lanževeno lygtims. Čia tik nagrinėjama dinamika ne vienos sistemos, o sistemų ansamblio, tariant, kad atskiri ansamblio nariai turi skirtingas pradines sąlygas.

- Tolydumo lygtį galima išvesti daugeliu skirtingų būdų. Standartinis būdas yra apskaičiuoti srautus pro išskirto fazinėje erdvėje tūrelio sienelės ir surišti juos su fazinių taškų skaičiaus pokyčiu tame tūrelyje. Čia mes pateiksime nelabai tradicišką, formalų matematinį tolydumo lygties išvedimą, tinkantį bet kurios dimensijos dinaminei sistemai.
- Tarkime, kad atskirų ansamblio narių dinamika aprašoma diferencialinėmis lygtimis

$$\dot{\vec{z}}(t) = \Phi(\vec{z}, t)$$

(mūsų atveju tai Lanževeno lygtys). Pažymėkime jų sprendinį, atitinkantį pradinę sąlygą $\vec{z}(0) = \vec{z}_0$:

$$\vec{z}(t) = \vec{Z}(\vec{z}_0, t)$$

Tegul pradiniu laiko momentu fazinių taškų tankis yra

$$\rho(\vec{z}, 0) = \rho_0(\vec{z})$$

Tuomet, panaudojant Dirako delta funkciją, taškų tankį momentu t galima užrašyti taip:

$$\rho(\vec{z}, t) = \int d\vec{z}_0 \delta(\vec{z} - \vec{Z}(\vec{z}_0, t)) \rho_0(\vec{z}_0)$$

Diferencijuojame šią lygybę pagal laiką:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho(\vec{z}, t) &= \frac{\partial}{\partial t} \int d\vec{z}_0 \delta(\vec{z} - \vec{Z}(\vec{z}_0, t)) \rho_0(\vec{z}_0) \\ &= \int d\vec{z}_0 \left(-\frac{\partial \vec{Z}}{\partial t} \right) \nabla_{\vec{z}} \delta(\vec{z} - \vec{Z}(\vec{z}_0, t)) \rho_0(\vec{z}_0) \\ &= -\int d\vec{z}_0 \vec{\Phi}(\vec{Z}, t) \nabla_{\vec{z}} \delta(\vec{z} - \vec{Z}(\vec{z}_0, t)) \rho_0(\vec{z}_0) \\ &= -\nabla_{\vec{z}} \int d\vec{z}_0 \Phi(\vec{Z}, t) \delta(\vec{z} - \vec{Z}(\vec{z}_0, t)) \rho_0(\vec{z}_0) \\ &= -\nabla_{\vec{z}} \left\{ \Phi(\vec{z}, t) \int d\vec{z}_0 \delta(\vec{z} - \vec{Z}(\vec{z}_0, t)) \rho_0(\vec{z}_0) \right\} \\ &= -\nabla_{\vec{z}} \left\{ \Phi(\vec{z}, t) \rho(\vec{z}, t) \right\} = -\nabla_{\vec{z}} \left\{ \dot{\vec{z}} \rho(\vec{z}, t) \right\} \end{aligned}$$

Taigi ***išvedėme tolydumo lygtį***. Ji yra ekvivalenti sistemos dinaminėms lygtims ir teisinga bet kurios dimensijos dinaminiai sistemai. Tolydumo lygtis aprašo vienodų sistemų ansamblio dinamiką, kai atskirų ansamblio narių pradinės sąlygos yra skirtingos.

- **Antras etapas (vidurkinimas pagal atsitiktinę jėgą).** Antras Fokero-Planko lygties išvedimo etapas yra ilgesnis ir sudėtingesnis. Šio etapo tikslas yra gauti Brauno dalelės tikimybės tankio funkcijos lygtį. Brauno dalelės tikimybės tankio funkciją $P(x, v, t)$ gausime, suvidurkinę funkciją $\rho(x, v, t)$ pagal atsitiktinės jėgos realizacijas

$$P(x, v, t) = \langle \rho(x, v, t) \rangle_{\xi}$$

Lygtį dėl $P(x, v, t)$ gausime iš tolydumo lygties, vidurkindami ją pagal atsitiktinę jėgą. Čia mums prireiks postulatų apie atsitiktinės jėgos statistines savybes. Pradžioje užrašysime tolydumo lygtį patogesne forma

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho(x, v, t) &= -\frac{\partial}{\partial x} \{v \rho(x, v, t)\} - \frac{\partial}{\partial v} \{(-\gamma v + f(x) + \xi(t)) \rho(x, v, t)\} \\ &= -\hat{L}_0 \rho(x, v, t) - \hat{L}_1 \rho(x, v, t) \end{aligned}$$

Čia mes įvedėme du tokius diferencialinius operatorius:

$$\hat{L}_0 = v \frac{\partial}{\partial x} - \gamma - \gamma v \frac{\partial}{\partial v} + f(x) \frac{\partial}{\partial v}$$

$$\hat{L}_1 = \xi(t) \frac{\partial}{\partial v}$$

Pirmasis operatorius yra grynai deterministinis, o į antrą įeina atsitiktinė jėga $\xi(t)$, kuri pagal prielaidą yra baltas (delta koreliuotas) Gausinis triukšmas.

- Apibrėžkime pagalbinę tankio funkciją $\sigma(t)$, kuri siejasi su tankiu $\rho(t)$ tokia lygybe

$$\rho(t) = e^{-\hat{L}_0 t} \sigma(t)$$

Čia, kad būtų paprasčiau, mes nerašome funkcijų argumentuose x ir v kintamųjų, o išskiriam tik priklausomybę nuo t . Gaukime lygtį pagalbinei funkcijai $\sigma(t)$.

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} [e^{-\hat{L}_0 t} \sigma(t)] &= -\hat{L}_0 [e^{-\hat{L}_0 t} \sigma(t)] - \hat{L}_1 [e^{-\hat{L}_0 t} \sigma(t)] \\ -\hat{L}_0 [e^{-\hat{L}_0 t} \sigma(t)] + e^{-\hat{L}_0 t} \frac{\partial}{\partial t} \sigma(t) &= -\hat{L}_0 [e^{-\hat{L}_0 t} \sigma(t)] - \hat{L}_1 [e^{-\hat{L}_0 t} \sigma(t)] \\ e^{\hat{L}_0 t} \mid \quad e^{-\hat{L}_0 t} \frac{\partial}{\partial t} \sigma(t) &= -\hat{L}_1 e^{-\hat{L}_0 t} \sigma(t) \quad \longrightarrow \quad \frac{\partial}{\partial t} \sigma(t) = -e^{\hat{L}_0 t} \hat{L}_1 e^{-\hat{L}_0 t} \sigma(t) \end{aligned}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \sigma(t) = -\hat{V}(t) \sigma(t)$$

$$\hat{V}(t) \equiv e^{\hat{L}_0 t} \hat{L}_1 e^{-\hat{L}_0 t} \propto \xi(t)$$

Pastarosios lygties sprendinį formaliai galima užrašyti taip:

$$\sigma(t) = \exp \left[- \int_0^t dt' \hat{V}(t') \right] \sigma(0)$$

- Šiame atsakyme eksponentę išskleidžiame Teiloro eilute ir suvidurkiname šią lygtį pagal atsitiktinę jėgą.

$$\sigma(t) = \left[\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \left(\int_0^t dt' \hat{V}(t') \right)^n \right] \sigma(0) \quad \longrightarrow \quad \langle \sigma(t) \rangle_{\xi} = \left[\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \overbrace{\left\langle \left(\int_0^t dt' \hat{V}(t') \right)^n \right\rangle_{\xi}}^{\hat{Q}_n} \right] \sigma(0)$$

Prisiminkime, kad $\hat{V}(t) \propto \xi(t)$. Čia $\xi(t)$ yra baltas (delta koreliuotas) Gausinis triukšmas su nuliniu vidurkiu. Apskaičiuokime išraišką:

$$\hat{Q}_n \equiv \left\langle \left(\int_0^t dt' \hat{V}(t') \right)^n \right\rangle_{\xi} = \int_0^t dt_1 \cdots \int_0^t dt_n \langle \hat{V}(t_1) \cdots \hat{V}(t_n) \rangle_{\xi}$$

Gausinio proceso daugialaikė koreliacinė funkcija lygi nuliui, jeigu n nelyginis. Jeigu $n=2m$ lyginis, tai daugialaikę koreliacinę funkciją galima išreikšti suma sudaryta iš dvilaikių koreliacinių funkcijų sandaugų

$$\langle \hat{V}(t_1) \hat{V}(t_2) \cdots \hat{V}(t_{2m}) \rangle_{\xi} = \underbrace{\langle \hat{V}(t_1) \hat{V}(t_2) \rangle_{\xi} \langle \hat{V}(t_3) \hat{V}(t_4) \rangle_{\xi} \cdots \langle \hat{V}(t_{2m-1}) \hat{V}(t_{2m}) \rangle_{\xi}}_{\text{Viso } \frac{(2m)!}{m! 2^m} \text{ narių}} + \cdots$$

- Daugiamatis integralas nuo pastarosios išraiškos lygus sumai $\frac{(2m)!}{m! 2^m}$ sutampančių integralų.

$$\begin{aligned}\hat{Q}_{2m} &= \int_0^t dt_1 \cdots \int_0^t dt_{2m} \langle \hat{V}(t_1) \cdots \hat{V}(t_{2m}) \rangle_{\xi} = \frac{(2m)!}{m! 2^m} \int_0^t dt_1 \cdots \int_0^t dt_{2m} \langle \hat{V}(t_1) \hat{V}(t_2) \rangle_{\xi} \cdots \langle \hat{V}(t_{2m-1}) \hat{V}(t_{2m}) \rangle_{\xi} \\ &= \frac{(2m)!}{m! 2^m} \left(\int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \langle \hat{V}(t_1) \hat{V}(t_2) \rangle_{\xi} \right)^m\end{aligned}$$

Taigi dydžiui Q_{2m} gauname tokią išraišką

$$\hat{Q}_{2m} \equiv \left\langle \left(\int_0^t dt' \hat{V}(t') \right)^{2m} \right\rangle_{\xi} = \frac{(2m)!}{m! 2^m} \left(\int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \langle \hat{V}(t_1) \hat{V}(t_2) \rangle_{\xi} \right)^m$$

ir dabar galime apskaičiuoti pagalbinės tankio funkcijos vidurkį

$$\begin{aligned}\langle \sigma(t) \rangle_{\xi} &= \left[\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \hat{Q}_n \right] \sigma(0) = \left[\sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{(2m)!} \hat{Q}_{2m} \right] \sigma(0) = \\ &= \left[\sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} \left(\frac{1}{2} \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \langle \hat{V}(t_1) \hat{V}(t_2) \rangle_{\xi} \right)^m \right] \sigma(0)\end{aligned}$$

Pastaroji suma yra eksponentės Teiloro eilutė, todėl

$$\langle \sigma(t) \rangle_{\xi} = \exp \left[\frac{1}{2} \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \langle \hat{V}(t_1) \hat{V}(t_2) \rangle_{\xi} \right] \sigma(0) \quad \left(\hat{V}(t) \equiv e^{\hat{L}_0 t} \xi(t) \frac{\partial}{\partial v} e^{-\hat{L}_0 t} \right)$$

Dabar apskaičiuosime integralą eksponentės argumente

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \langle \hat{V}(t_1) \hat{V}(t_2) \rangle_{\xi} &= \frac{1}{2} \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \langle \xi(t_1) \xi(t_2) \rangle_{\xi} e^{\hat{L}_0 t_1} \frac{\partial}{\partial v} e^{\hat{L}_0 (t_2 - t_1)} \frac{\partial}{\partial v} e^{-\hat{L}_0 t_2} \\ &= \frac{q}{2} \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \delta(t_1 - t_2) e^{\hat{L}_0 t_1} \frac{\partial}{\partial v} e^{\hat{L}_0 (t_2 - t_1)} \frac{\partial}{\partial v} e^{-\hat{L}_0 t_2} \\ &= \frac{q}{2} \int_0^t dt_1 e^{\hat{L}_0 t_1} \frac{\partial^2}{\partial v^2} e^{-\hat{L}_0 t_1} \end{aligned}$$

Todėl pagalbinės tankio funkcijos vidurkis yra

$$\langle \sigma(t) \rangle_{\xi} = \exp \left[\frac{q}{2} \int_0^t dt_1 e^{\hat{L}_0 t_1} \frac{\partial^2}{\partial v^2} e^{-\hat{L}_0 t_1} \right] \sigma(0)$$

Diferencijuodami šią išraišką gauname, kad $\langle \sigma(t) \rangle_\xi$ tenkina tokią diferencialinę lygtį

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle \sigma(t) \rangle_\xi = \frac{q}{2} e^{\hat{L}_0 t} \frac{\partial^2}{\partial v^2} e^{-\hat{L}_0 t} \langle \sigma(t) \rangle_\xi$$

Dabar jau galime gauti lygtį ir suvidurkintam tankiui $\langle \rho(t) \rangle_\xi$

$$\langle \rho(t) \rangle_\xi = e^{-\hat{L}_0 t} \langle \sigma(t) \rangle_\xi$$

Diferencijuojame šią lygybę pagal laiką ir panaudojame viršutinę lygtį dėl $\langle \sigma(t) \rangle_\xi$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \langle \rho(t) \rangle_\xi &= -\hat{L}_0 e^{-\hat{L}_0 t} \langle \sigma(t) \rangle_\xi + e^{-\hat{L}_0 t} \frac{\partial}{\partial t} \langle \sigma(t) \rangle_\xi \\ &= -\hat{L}_0 \langle \rho(t) \rangle_\xi + e^{-\hat{L}_0 t} \frac{q}{2} e^{\hat{L}_0 t} \frac{\partial^2}{\partial v^2} e^{-\hat{L}_0 t} \langle \sigma(t) \rangle_\xi \\ &= -\hat{L}_0 \langle \rho(t) \rangle_\xi + \frac{q}{2} \frac{\partial^2}{\partial v^2} \langle \rho(t) \rangle_\xi \end{aligned}$$

Prisiminę, kad $\hat{L}_0 = v \frac{\partial}{\partial x} - \gamma - \gamma v \frac{\partial}{\partial v} + f(x) \frac{\partial}{\partial v}$ ir $\langle \rho(t) \rangle_\xi = P(x, v, t)$

galutinai gauname Lygtį Brauno dalelės tikimybės tankio funkcijai $P=P(x,v,t)$

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -v \frac{\partial P}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial v} [(\gamma v - f(x))P] + \frac{q}{2} \frac{\partial^2 P}{\partial v^2} \quad \left(\frac{q}{2} = \frac{\gamma kT}{m} = \gamma^2 D \right)$$

Tai yra **Fokerio-Planko lygtis**. $P(x,v,t)dx dv$ yra tikimybė kad momentu t Brauno dalelės koordinatė ir greitis bus atitinkamai intervaluose $[x, x+dx]$ ir $[v, v+dv]$.

- Svarbu pažymėti, kad tikimybei P galioja tvermės dėsnis, nes Fokerio-Planko lygtį galima užrašyti, kaip **tolydumo lygtį**.

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -\nabla_{\vec{r}} \vec{J}$$

Čia $\nabla_{\vec{r}} = (\partial/\partial x, \partial/\partial v)$ yra gradiento operatorius (x, v) fazinėje plokštumoje. Tikimybės srautas šioje plokštumoje yra

$$\vec{J} = (J_x, J_v) = \left(vP, \gamma vP - f(x)P + \frac{q}{2} \frac{\partial P}{\partial v} \right)$$

- Bendruoju atveju Fokerio-Planko lygtis yra gana sudėtinga ir ją nepaprasta išspręsti. Toliau panagrinėsime du atskirus atvejus, kai tikimybės tankio funkcija priklauso tik nuo vieno $(x, v,)$ fazinės plokštumos kintamojo, t.y., kai $P=P(x,t)$ ir kai $P=P(v,t)$

Didelės trinties riba

- Pradžioje panagrinėsime didelės trinties ribą, kai galima nepaisyti Brauno dalelės greičio nusistovėjimo proceso. Kai γ labai didelis, pirmoje Lanževeno lygtyje galima atmesti narį $\dot{v}$ ir užrašyti ją taip

$$\dot{v} = -\gamma v + f(x) + \xi(t) \quad \longrightarrow \quad 0 = -\gamma v + f(x) + \xi(t) \quad \longrightarrow \quad v = \frac{1}{\gamma} [f(x) + \xi(t)]$$

Šis artėjimas atitinka begalo greitą greičio nusistovėjimo procesą. Tuomet Lanževeno lygtys įgyja tokį pavidalą

$$\dot{x} = v = \frac{1}{\gamma} [f(x) + \xi(t)]$$

$$\langle \xi(t) \rangle_{\xi} = 0$$

$$\langle \xi(t) \xi(t') \rangle_{\xi} = q \delta(t - t')$$

$$\xi(t) \text{ – Gausinis procesas}$$

- Su šiomis lygtimis reikia pakartoti tai, ką darėme bendresniu atveju ir gauti atitinkamą Fokerio-Planko lygtį didelės trinties riboje. Pirmiausiai pažymėkime, kad dabar Brauno dalelės judėjimas aprašomas pirmos eilės diferencialinę lygtimi. Todėl dabar tolydumo lygtis priklausys tik nuo vieno dinaminio kintamojo x

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(x, t) = -\frac{\partial}{\partial x} (v \rho(x, t)) \equiv -\hat{L}_0 \rho(x, t) - \hat{L}_1 \rho(x, t)$$

$$\hat{L}_0 = \frac{1}{\gamma} \left(\frac{\partial f(x)}{\partial x} \right) + \frac{f(x)}{\gamma} \frac{\partial}{\partial x}$$

$$\hat{L}_1 = \frac{\xi(t)}{\gamma} \frac{\partial}{\partial x}$$

Kaip ir anksčiau, įvedame pagalbinę tankio funkciją $\sigma(t)$

$$\rho(t) = e^{-\hat{L}_0 t} \sigma(t)$$

Šios funkcijos vidurkiui, kaip ir anksčiau, teisinga tokia išraiška

$$\langle \sigma(t) \rangle_\xi = \exp \left[\frac{1}{2} \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \langle \hat{V}(t_1) \hat{V}(t_2) \rangle_\xi \right] \sigma(0) \quad \left(\hat{V}(t) \equiv e^{\hat{L}_0 t} \hat{L}_1 e^{-\hat{L}_0 t} = \frac{\xi(t)}{\gamma} e^{\hat{L}_0 t} \frac{\partial}{\partial x} e^{-\hat{L}_0 t} \right)$$

Apskaičiuojame integralą eksponentės argumente

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \langle \hat{V}(t_1) \hat{V}(t_2) \rangle_\xi &= \frac{1}{2\gamma^2} \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \langle \xi(t_1) \xi(t_2) \rangle_\xi e^{\hat{L}_0 t_1} \frac{\partial}{\partial x} e^{\hat{L}_0(t_2-t_1)} \frac{\partial}{\partial x} e^{-\hat{L}_0 t_2} \\ &= \frac{q}{2\gamma^2} \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \delta(t_1 - t_2) e^{\hat{L}_0 t_1} \frac{\partial}{\partial x} e^{\hat{L}_0(t_2-t_1)} \frac{\partial}{\partial x} e^{-\hat{L}_0 t_2} \\ &= \frac{q}{2\gamma^2} \int_0^t dt_1 e^{\hat{L}_0 t_1} \frac{\partial^2}{\partial x^2} e^{-\hat{L}_0 t_1} \end{aligned}$$

Pagalbinės tankio funkcijos vidurkis:

$$\langle \sigma(t) \rangle_\xi = \exp \left[\frac{q}{2\gamma^2} \int_0^t dt_1 e^{\hat{L}_0 t_1} \frac{\partial^2}{\partial x^2} e^{-\hat{L}_0 t_1} \right] \sigma(0)$$

Diferencijuodami šią išraišką gauname, kad $\langle \sigma(t) \rangle_\xi$ tenkina tokią diferencialinę lygtį

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle \sigma(t) \rangle_\xi = \frac{q}{2\gamma^2} e^{\hat{L}_0 t} \frac{\partial^2}{\partial x^2} e^{-\hat{L}_0 t} \langle \sigma(t) \rangle_\xi$$

Dabar galime gauti lygtį suvidurkintam tankiui $\langle \rho(t) \rangle_\xi$

$$\langle \rho(t) \rangle_\xi = e^{-\hat{L}_0 t} \langle \sigma(t) \rangle_\xi$$

Diferencijuojame šią lygybę pagal laiką ir panaudojame viršutinę lygtį dėl $\langle \sigma(t) \rangle_\xi$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \langle \rho(t) \rangle_\xi &= -\hat{L}_0 e^{-\hat{L}_0 t} \langle \sigma(t) \rangle_\xi + e^{-\hat{L}_0 t} \frac{\partial}{\partial t} \langle \sigma(t) \rangle_\xi \\ &= -\hat{L}_0 \langle \rho(t) \rangle_\xi + e^{-\hat{L}_0 t} \frac{q}{2\gamma^2} e^{\hat{L}_0 t} \frac{\partial^2}{\partial x^2} e^{-\hat{L}_0 t} \langle \sigma(t) \rangle_\xi \\ &= -\hat{L}_0 \langle \rho(t) \rangle_\xi + \frac{q}{2\gamma^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \langle \rho(t) \rangle_\xi \end{aligned}$$

Prisiminę, kad $\hat{L}_0 = \frac{1}{\gamma} \left(\frac{\partial f(x)}{\partial x} \right) + \frac{f(x)}{\gamma} \frac{\partial}{\partial x}$ ir $\langle \rho(t) \rangle_\xi = P(x, t)$

Gausinis procesas ir Fokerio-Planko lygtis (XXVI)

galutinai gauname Lygtį Brauno dalelės tikimybės tankio funkcijai $P=P(x,t)$

$$\boxed{\frac{\partial P}{\partial t} = -\frac{1}{\gamma} \frac{\partial}{\partial x} [f(x)P] + \frac{q}{2\gamma^2} \frac{\partial^2 P}{\partial x^2}} \quad \left(\frac{q}{2} = \frac{\gamma kT}{m} = \gamma^2 D \right)$$

Tai yra **Fokerio-Planlo lygtis didelės trinties riboje, arba Einšteino-Smoluchovskio lygtis**. $P(x,t)dx$ yra tikimybė kad momentu t Brauno dalelės koordinatė bus intervale $[x, x+dx]$.

- Čia, kaip ir anksčiau tikimybei P galioja tvermės dėsnis, nes Einšteino-Smoluchovskio lygtį galima užrašyti, kaip **tolydumo lygtį**.

$$\boxed{\frac{\partial P}{\partial t} = -\frac{\partial J}{\partial x}}$$

$$\boxed{J = \frac{1}{\gamma} f(x)P - D \frac{\partial P}{\partial x}}$$

- Laisvai Brauno dalelei ($f(x)=0$) Einšteino-Smoluchovskio lygtis virsta paprasta difuzijos lygtimi.

$$\frac{\partial P}{\partial t} = D \frac{\partial^2 P}{\partial x^2}$$

Jos sprendinys, esant pradinei sąlygai $P(x,0) = \delta(x)$, yra Gauso skirstinys

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

Šis sprendinys aprašo erdvinę Brauno dalelės difuziją. Nors pradiniu laiko momentu dalelė yra koordinatijų pradžioje, su laiku jos tikimybės tankio funkcija artėja prie homogeninio pasiskirstymo. Kai γ didelis, charakteringas laikas, per kurį tikimybės tankis tampa erdviškai homogeniškas, yra ilgas, nes proporcingas γ

$$\tau_x = \frac{L^2}{D} = \frac{\gamma m L^2}{kT} \propto \gamma \quad (L - \text{charakteringas sistemos ilgis})$$

Tai reiškia, kad didelės trinties riboje erdvinės fliuktuacijos relaksuoja lėtai.

- Tačiau Einšteino-Smoluchovskio lygtis neaprašo Brauno dalelių greičio relaksacijos procesų, nes išvedinėjant ją buvo tariama, kad tas procesas yra begalo greitas. Dėl to Einšteino-Smoluchovskio lygtis yra neteisinga trumpiems laikams, kai t yra mažesnis už charakteringą greičio relaksacijos laiką

$$t < \tau_v = \frac{1}{\gamma}$$

Norint įsitikinti tuo, kad Einšteino-Smoluchovskio lygtis yra nekorektiška trumpiems laikams reikia panagrinėti jos sprendinius, kai $t \rightarrow 0$.

Iš Einšteino-Smoluchovskio lygties sprendinio išplaukia, kad vidutinis kvadratinis nuokrypis didėja proporcingai t :

$$\sigma^2(t) = \langle x^2(t) \rangle = 2Dt$$

Iš čia gauname, kad standartinio nuokrypio kitimo greitis diverguoja mažiems t :

$$\sigma(t) = \sqrt{2Dt} \quad \Rightarrow \quad \frac{d}{dt} \sigma(t) \propto t^{-\frac{1}{2}} \rightarrow \infty \quad t \rightarrow 0$$

Tai reiškia, kad **dalelės judėjimas yra netolydus**. Tai yra pasekmė to, kad Einšteino-Smoluchovskio lygtyje neatsižvelgta į greičio relaksacijos procesą.

- Toliau kaip tik panagrinėsime, kaip relaksuoja prie pusiausvyros Brauno dalelės greičio fluktuacijos. Mes jau žinome, kad vidutinio greičio charakteringas relaksacijos laikas

$$\tau_v = \frac{1}{\gamma}$$

t.y. didelės trinties riboje vidutinio greičio relaksacija yra trumpalaikė. Nagrinėdami greičio fluktuacijos dinamiką, mes nepaisysime erdvinės tikimybės funkcijos priklausomybės ir išvesime lygtį tikimybės tankiui $P(v,t)$. Čia $P(v,t)dv$ yra tikimybė, kad momentu t Brauno dalelės greitis yra intervale $[v, v+dv]$. Mes pamatysime, kad ši funkcija labai greitai (kai γ didelis) artėja prie Maksvelo skirstinio.

Trumpalaikė greičio relaksacija

- Laisvos ($f(x)=0$) Brauno dalelės greičio dinamika aprašoma tokiomis Lanževeno lygtimis

$$\begin{aligned} \dot{v} &= -\gamma v + \xi(t) \\ \langle \xi(t) \rangle_{\xi} &= 0 \\ \langle \xi(t) \xi(t') \rangle_{\xi} &= q \delta(t - t') \\ \xi(t) &\text{ – Gausinis procesas} \end{aligned}$$

- Su šiomis lygtimis galima vėl pakartoti visas operacijas, kurias atlikome išvedinėdami bendrą Fokerio-Planko lygtį arba Einšteino-Smoluchovskio lygtį, ir gauti lygtį tikimybės tankiui $P(v, t)$. Tačiau lygtį dėl $P(v, t)$ galima gauti ir kitaip. Kadangi

$$P(v, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dx P(x, v, t)$$

tai lygtį dėl $P(v, t)$ galime išvesti iš bendros Fokerio-Planko lygties (tariame, kad $f(x)=0$)

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \left| \frac{\partial P}{\partial t} = -v \frac{\partial P}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial v} (\gamma v P) + \frac{q}{2} \frac{\partial^2 P}{\partial v^2} \right|$$

Suintegruojame šią lygtį pagal x ir pasinaudojame tuo, kad $P(x, v, t) \Big|_{x=\pm\infty} = 0$.

Gausinis procesas ir Fokerio-Planko lygtis (XXX)

Taip gauname Fokerio-Planko lygtį tikimybės tankio funkcijai $P(v,t)$

$$(*) \quad \boxed{\frac{\partial P}{\partial t} = \gamma \frac{\partial}{\partial v} (vP) + \frac{q}{2} \frac{\partial^2 P}{\partial v^2}} \quad \left(\frac{q}{2} = \frac{\gamma kT}{m} \right)$$

Priminsiu, kad $P(v,t)dv$ yra tikimybė, kad momentu t Brauno dalelės greitis yra intervale $[v, v+dv]$.

- Išspręsimė šią lygtį su pradine sąlyga $P(v,0) = \delta(v-v_0)$, kuri reiškia, kad pradiniu laiko momentu $t=0$ Brauno dalelės greitis yra v_0 .

Pradžioje surasime stacionarų šios lygties sprendinį

$$\frac{\partial P}{\partial t} = 0 \quad \Rightarrow \quad \gamma \frac{\partial}{\partial v} (vP) + \frac{q}{2} \frac{\partial^2 P}{\partial v^2} = 0 \quad \Rightarrow \quad vP + \frac{kT}{m} \frac{\partial P}{\partial v} = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial P}{P} = -\frac{m}{kT} v dv$$

$$(**) \quad \boxed{P_{st}(v) = \frac{1}{\sqrt{2\pi kT/m}} \exp\left(-\frac{mv^2}{2kT}\right)}$$

Taigi matome, kad **stacionarus Fokerio-Planko lygties sprendinys yra pusiausvyrinis Maksvelo skirstinys**. Toliau parodysime, kad nestacionarus lygties (*) sprendinys asimptotiškai artėja prie pusiausvyrinio Maksvelo skirstinio.

- Pastebėsime, kad **Maksvelo skirstinys yra Gauso skirstinys**, t.y. ta pati matematinė išraiška vadinama dviem skirtingais vardais: fizikai dažniau vartoja Maksvelo vardą, o matematikai – Gauso. Užrašykime stacionarų sprendinį (*), kaip paprastai bendruoju pavidalu užrašomas Gauso skirstinys

$$P_{st}(v) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_{st}} \exp\left(-\frac{(v - \langle v \rangle_{st})^2}{2\sigma_{st}^2}\right) \quad \langle v \rangle_{st} = 0, \quad \sigma_{st}^2 = \left\langle (v - \langle v \rangle_{st})^2 \right\rangle_{st} = \frac{kT}{m}$$

- Nestacionarų Fokerio-Planko lygties (*) sprendinį ieškosime Gauso skirstinio pavidalo, kurio parametrai priklauso nuo laiko

$$(***) \quad P(v, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma(t)} \exp\left(-\frac{(v - \langle v(t) \rangle)^2}{2\sigma^2(t)}\right) \quad \sigma^2(t) = \left\langle (v(t) - \langle v(t) \rangle)^2 \right\rangle$$

Parametrų priklausomybę nuo laiko nustatysime iš Lanževeno lygties

$$\dot{v} = -\gamma v + \xi(t) \quad \longrightarrow \quad v(t) = v_0 e^{-\gamma t} + e^{-\gamma t} \int_0^t dt' e^{\gamma t'} \xi(t') \quad \longrightarrow \quad \langle v(t) \rangle = v_0 e^{-\gamma t}$$

$$\sigma^2(t) = \left\langle (v(t) - v_0 e^{-\gamma t})^2 \right\rangle = \left\langle \left(e^{-\gamma t} \int_0^t dt' e^{\gamma t'} \xi(t') \right)^2 \right\rangle = e^{-2\gamma t} \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 e^{\gamma(t_1+t_2)} \langle \xi(t_1) \xi(t_2) \rangle$$

$$\begin{aligned}\sigma^2(t) &= e^{-2\gamma t} \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 e^{\gamma(t_1+t_2)} q \delta(t_1 - t_2) = q e^{-2\gamma t} \int_0^t dt_1 e^{2\gamma t_1} = \frac{q}{2\gamma} e^{-2\gamma t} (e^{2\gamma t} - 1) \\ &= \frac{q}{2\gamma} (1 - e^{-2\gamma t}) = \frac{kT}{m} (1 - e^{-2\gamma t})\end{aligned}$$

- Įrašome gautas išraiškas $\langle v(t) \rangle$ ir $\sigma(t)$ į ieškomą sprendinį (***) ir gauname

$$P(v, t) = \sqrt{\frac{m}{2\pi kT(1 - e^{-2\gamma t})}} \exp\left(-\frac{m(v - v_0 e^{-\gamma t})^2}{2kT(1 - e^{-2\gamma t})}\right)$$

Nesunku tiesiogiai patikrinti, kad šis sprendinys tenkina Fokerio-Planko lygtį (*). Jis taip pat tenkina ir pradinę sąlygą, nes $\lim_{t \rightarrow 0} P(v, t) \rightarrow \delta(v - v_0)$.

- Kai $t \rightarrow \infty$ šis sprendinys asimptotiškai artėja prie stacionaraus sprendinio (**)

$$P(v, t) \xrightarrow{t \rightarrow \infty} P_{st}(v) = \frac{1}{\sqrt{2\pi kT/m}} \exp\left(-\frac{mv^2}{2kT}\right)$$

t.y. prie pusiausvyrinio Maksvelo skirstinio. Kai γ didelis, Brauno dalelės „maksvelizacijos“ laikas yra labai trumpas $\tau_v = 1/\gamma$, tuo tarpu erdvinių fluktuacijų relaksacijos laikas – labai ilgas $\tau_x \propto \gamma$. Dideliems laikams $t \gg \tau_v$ Einšteino-Smoluchovskio lygties taikymas yra pateisinamas, tačiau ji netesinga trumpiems laikams, kol nenusistovėjo Maksvelo pasiskirstymas pagal greitį.

Markovo grandinės, pagrindinė kinetinė lygtis (I)

- Šiame skyriuje plačiau panagrinėsime **Markovo procesus**. Mes pradėsime nuo paprasčiausio Markovo proceso – **Markovo grandinės**. Markovo grandinėmis aprašomi procesai, **kuriuose stochastinis kintamasis yra diskretinis ir perėjimai tarp įvairių diskretinio kintamojo verčių vyksta diskretniais laiko momentais**, panašiai, kaip atsitiktinio klaidžiojimo uždavinyje. Panaudojus Markovo grandinių teoriją pademonstruosime elegantišką klaidžiojimo uždavinių sprendimo būdą.

Markovo grandinių dinamika pilnai nusakoma **perėjimo matrica**, kuri bendruoju atveju yra nesimetrinė. Mes pamatysime, kad Markovo grandinės lygtis galima išspręsti skleidžiant tikimybės funkciją tikriniais perėjimo matricos vektoriais (**spektrinės dekompozicijos metodas**).

- Kai laiko intervalai tarp įvykių yra maži mes išvesime vadinamąją **pagrindinę kinetinę lygtį (master equation)**. Tai diferencialinė laiko atžvilgiu lygtis, nes diskretinis laikas Markovo grandinėje pakeičiamas tolydžiuoju. Kai perėjimo greičiai tenkina **detalų balansą**, stacionarus kinetinės lygties sprendinys nesunkiai surandamas iteracijų metodu. Detalaus balanso principą tenkina daugelis sistemų, kai jos yra arti termodinaminės pusiausvyros. Mes panagrinėsime kai kuriuos **atsiradimo ir išnykimo (birth-death) procesus** aprašomus pagrindinę kinetinę lygtimi. Pateiksime pavyzdžių iš idealių dujų kinetikos, populiacijų dinamikos ir cheminių reakcijų kinetikos. Pademonstruosime kinetinės lygties sprendimo būdą taikant **generuojančios funkcijos ir charakteristikų metodą**.

Markovo grandinės

- Markovo grandinė (arba **diskretinis Markovo procesas**) yra paprasčiausias Markovo proceso pavyzdys. Šiame procese laikas t ir stochastinis kintamasis Y yra **diskretiniai dydžiai**.

$\{y(n)\}$ – stochastinio kintamojo Y realizacijos, $n=1,2,\dots,M$

$t=s\tau$ – laiko momentai, kuriais sistema pereina iš vienos būsenos į kitą, $s=1,2,\dots,\infty$

$W(n,s)$ – tikimybė, kad Y vertė momentu s yra $y(n)$

$P(n_1, s_1 | n_2, s_2)$ – tikimybė, kad Y vertė momentu s_2 yra $y(n_2)$, jeigu momentu s_1 ji buvo $y(n_1)$ (tai yra perėjimo arba sąlyginė tikimybė)

- Šios dvi tikimybės pilnai aprašo Markovo grandinę. Jos tenkina panašias lygtis, kaip Markovo procese su tolydiniu Y kintamuoju, kurias mes užrašėme, kai nagrinėjome empirinę Brauno judėjimo teoriją. Čia tik integralus reikia pakeisti sumomis.

$$(*) \quad W(n, s+1) = \sum_{m=1}^M W(m, s) P(m, s | n, s+1)$$

$$(**) \quad P(n_0, s_0 | n, s+1) = \sum_{m=1}^M P(n_0, s_0 | m, s) P(m, s | n, s+1)$$

Čapmano-Kolmogorovo
(suderinamumo) lygtis

Spektrinės savybės

- Tiriant Markovo grandinės patogu apibrėžti **perėjimo (arba sąlyginių tikimybių) matricą**:

$$Q_{m,n}(s) \equiv P(m, s | n, s+1)$$

Bendruoju atveju ši matrica yra **nesimetrinė**

- Toliau nagrinėsime nepriklausomos nuo laiko perėjimo matricos atvejį

$$Q_{m,n} = P(m, 0 | n, 1) = P(m, s | n, s+1)$$

- Tuomet įrašius į Čapmano-Kolmogorovo lygtį $n_0=m$ ir $s=s_0+1$ gauname

$$P(m, s_0 | n, s_0 + 2) = \sum_{m'=1}^M P(m, s_0 | m', s_0 + 1) P(m', s_0 + 1 | n, s_0 + 2) = \sum_{m'=1}^M Q_{m,m'} Q_{m',n} = (Q^2)_{m,n}$$

Analogiškai įrašius $s=s_0+2$ gauname

$$P(m, s_0 | n, s_0 + 3) = \sum_{m'=1}^M P(m, s_0 | m', s_0 + 2) P(m', s_0 + 2 | n, s_0 + 3) = \sum_{m'=1}^M (Q^2)_{m,m'} Q_{m',n} = (Q^3)_{m,n}$$

- Taip tęsiant iteracijas surandame Čapmano-Kolmogorovo lygties sprendinį

$$P(m, s_0 | n, s) = (Q^{s-s_0})_{m,n}$$

Markovo grandinės, pagrindinė kinetinė lygtis (IV)

- Žinant tikimybės $W(m,0)$ pradiniu laiko momentu $s=0$ galima apskaičiuoti tikimybės bet kuriuo laiko momentu s . Čia patogiu taikyti Dirako žymėjimus. Apibrėšime **tikimybės vektorių**, kaip vektorių eilutę

$$\langle W(s) | \equiv (W(1,s) \ W(2,s) \ \dots W(M,s))$$

Tuomet lygtį (*)

$$W(n,s) = \sum_{m=1}^M W(m,s-1)P(m,s-1|n,s) = \sum_{m=1}^M W(m,s-1)Q_{m,n}$$

galima užrašyti matriciniu pavidalu

$$\boxed{\langle W(s) | = \langle W(s-1) | Q} \quad (***)$$

Šios lygties sprendinys randamas iteracijų metodu

$$\langle W(s) | = \langle W(s-1) | Q = \langle W(s-2) | Q Q = \dots = \langle W(0) | Q^s$$

t.y.,

$$\boxed{\langle W(s) | = \langle W(0) | Q^s} \quad (****).$$

Čia $\langle W(0) |$ - **pradinė tikimybės vektoriaus vertė**.

Mūsų tikslas išreikšti $\langle W(s) |$ perėjimo matricos Q tikrinėmis vertėmis ir vektoriais.

Markovo grandinės, pagrindinė kinetinė lygtis (V)

- Matrica Q bendroju atveju yra **nesimetrinė** kvadratinė $M \times M$ matrica. Jos **tikrinės vertės** bendroju atveju **kompleksinės**. Reikia spręsti du tikrinius uždavinius – **kairiesiems vektoriams** eilutėms ir **dešiniems vektoriams** stulpeliams:

$$\langle \chi_i | \equiv (\chi_i(1) \ \chi_i(2) \ \cdots \ \chi_i(M)) \qquad | \psi_j \rangle \equiv \begin{pmatrix} \psi_j(1) \\ \vdots \\ \psi_j(M) \end{pmatrix}$$
$$\boxed{\langle \chi_i | \lambda_i = \langle \chi_i | Q} \quad | \psi_j \rangle \qquad \langle \chi_i | \quad \boxed{\lambda_j | \psi_j \rangle = Q | \psi_j \rangle}$$

Tikrinių verčių lygtis abiem uždaviniams yra ta pati:

$$\boxed{\det(Q - I\lambda) = 0}$$

Todėl abu uždaviniai turi tą patį tikrinių verčių rinkinį.

- Nesunku įsitikinti, kad kairieji ir dešinieji tikriniai vektoriai yra **ortogonalūs**. Dėl to kairę lygtį padauginame iš dešinės iš $| \psi_j \rangle$, o dešinę iš kairės iš $\langle \chi_i |$ ir atimame vieną lygtį iš kitos:

$$(\lambda_i - \lambda_j) \langle \chi_i | \psi_j \rangle = \langle \chi_i | Q | \psi_j \rangle - \langle \chi_i | Q | \psi_j \rangle = 0$$

Jeigu $\lambda_i \neq \lambda_j$ tai $\langle \chi_i | \psi_j \rangle = 0$. Tikrinius vektorius galima normuoti, tuomet

$$\boxed{\langle \chi_i | \psi_j \rangle = \delta_{i,j}}$$

Markovo grandinės, pagrindinė kinetinė lygtis (VI)

- Kokios tikrinių verčių λ_j savybės? Pirmiausiai galima įrodyti nelygybę $|\lambda_j| \leq 1$:

$$\lambda_j |\psi_j\rangle = Q |\psi_j\rangle \quad \rightarrow \quad \lambda_j \psi_j(n) = \sum_{m=1}^M Q_{n,m} \psi_j(m) \quad \rightarrow \quad |\lambda_j \psi_j(n)| = \left| \sum_{m=1}^M Q_{n,m} \psi_j(m) \right|$$

$$\rightarrow \quad |\lambda_j| |\psi_j(n)| \leq \sum_{m=1}^M Q_{n,m} |\psi_j(m)| \quad \left(\text{Čia panaudojome nelygybę } \left| \sum_{j=1}^M z_j \right| \leq \sum_{j=1}^M |z_j|, \text{ kuri} \right. \\ \left. \text{galioja bet kuriems kompleksiniams skaičiams } z_j \right)$$

$|\psi_j(m)| \leq |\psi_j(m_0)|$ – čia indeksas m_0 atitinka maksimalią $|\psi_j(m)|$ vertę taip, kad ši nelygybė galioja visiems m . Tuomet

$$\sum_{m=1}^N Q_{n,m} |\psi_j(m)| \leq |\psi_j(m_0)| \sum_{m=1}^N Q_{n,m} = |\psi_j(m_0)| \quad \text{čia} \quad \sum_{m=1}^N Q_{n,m} = 1 \quad \left(\text{iš būsenos } n \text{ sistema būtinai} \right. \\ \left. \text{perina į kurią nors būseną } m \text{ arba lieka būsenoj } n \right)$$

Į pradinę nelygybę įrašome $n=m_0$ ir gauname $|\lambda_j| |\psi_j(m_0)| \leq |\psi_j(m_0)|$ arba

$$|\lambda_j| \leq 1$$

Taigi **visos perėjimo matricos tikrinės vertės pagal modulį ne didesnės už vienetą.**

Markovo grandinės, pagrindinė kinetinė lygtis (VII)

- Dabar įrodysime, kad **yra tikrinė vertė lygi vienetui**, $\lambda_i = 1$. Nesunku įsitikinti, kad dešinysis tikrinis vektorius su visom komponentėm lygiom vienetui $\psi_i(n)=1, n=1, \dots, M$ atitinka tikrinę vertę $\lambda_i = 1$, nes

$$\lambda_i \psi_i(n) = \sum_{m=1}^M Q_{n,m} \psi_i(m) \quad \rightarrow \quad 1 \times 1 = \sum_{m=1}^M Q_{n,m} \times 1 = 1 \quad \text{(iš būsenos } n \text{ sistema būtinai perina į kurią nors būseną } m \text{ arba lieka būsenoj } n)$$

Atitinkamas kairysis vektorius turi tenkinti lygtį

$$\chi_i(n) = \sum_{m=1}^M \chi_i(m) Q_{n,m} \quad \text{arba} \quad \langle \chi_i | = \langle \chi_i | Q$$

Pastebėsime, kad ši lygtis aprašo **stacionarų tikimybės vektorių**, t.y. vektorių, kuris nekinta laike $\langle W_{ST}(s) | = \langle W_{ST}(s-1) | = \langle const(s) |$ ir pagal apibrėžimą tenkina lygybę

$$\langle W_{ST} | = \langle W_{ST} | Q$$

Taigi, **kairysis tikrinis vektorius atitinkantis vienetinę tikrinę vertę sutampa su stacionariuoju tikimybės vektoriumi**

$$\langle \chi_i | \equiv \langle W_{ST} | = \langle const(s) | \quad \text{arba} \quad \chi_i(n) = W_{ST}(n) = const(s)$$

- Dabar grįšime prie tikimybės vektoriaus dinaminės lygties (****) :

$$\langle W(s) | = \langle W(0) | Q^s \quad (****).$$

Išskleisime tikimybės vektorių tikriniais kairiaisiais vektoriais:

$$\langle W(s) | = \sum_{j=1}^M \langle \chi_j | \alpha_j(s) \quad (*****).$$

Iš čia :

$$\langle W(0) | = \sum_{j=1}^M \langle \chi_j | \alpha_j(0) \quad | \psi_m \rangle \quad \xrightarrow{\text{padauginame lygtį iš dešinės iš } | \psi_m \rangle} \quad \alpha_m(0) = \langle W(0) | \psi_m \rangle$$

Įrašome $\langle W(s) |$ ir $\langle W(0) |$ skleidinius į lygtį (****):

$$\sum_{j=1}^M \langle \chi_j | \alpha_j(s) = \sum_{j=1}^M \langle \chi_j | \alpha_j(0) Q^s = \sum_{j=1}^M \langle \chi_j | \lambda_j^s \alpha_j(0)$$

$$\xrightarrow{\quad} \alpha_j(s) = \lambda_j^s \alpha_j(0) = \lambda_j^s \langle W(0) | \psi_j \rangle$$

Jrašę šią išraišką į lygtį (****) galutinai gauname

$$\langle W(s) | = \sum_{j=1}^M \langle \chi_j | \lambda_j^s \langle W(0) | \psi_j \rangle \quad (*****).$$

Ši formulė išreiškia tikimybės vektorių $\langle W(s) |$ momentu s per pradinę vertę $\langle W(0) |$ bei tikrinius perėjimo matricos vektorius ir tikrines vertes.

- Detali tikimybės vektoriaus dinamika priklauso nuo perėjimo tikimybės matricos Q struktūros. Kai perėjimo matrica yra **reguliari** (Q yra reguliari matrica, jeigu ji neturi nulinių elementų) tai **tikimybės vektorius** $\langle W(s) |$ **asimptotiškai artėja prie stacionarios vertės** $\langle W_{ST} |$, kai $s \rightarrow \infty$.

- Pastarasis teiginys plaukia iš formulės (*****). Iš tikrųjų, mes žinome, kad visos tikrinės vertės, išskyrus vieną, pagal modulį mažesnės už 1 ir viena tikrinė vertė lygi vienetui. Tegul tai būna pirma vertė, t.y., $\lambda_1 = 1$, o kitos tikrinės vertės tenkina nelygybę $|\lambda_j| < 1, j = 2, \dots, M$. Tuomet, kai $s \rightarrow \infty$ visi nariai gęsta, išskyrus pirmą:

$$\langle W(s) | \xrightarrow{s \rightarrow \infty} \langle \chi_1 | \lambda_1^s \langle W(0) | \psi_1 \rangle = \langle \chi_1 | = \langle W_{ST} |$$

Čia pasinaudojome tuo, kad $\psi_1(n) = 1$ visiems n , todėl:

$$\langle W(0) | \psi_1 \rangle = \sum_{n=1}^M W(n,0) \psi_1(n) = \sum_{n=1}^M W(n,0) = 1$$

- Šio skyriaus pabaigoje išreikšime dar tikriniais vektoriais perėjimo matricą Q^s . Lygtį (*****) galima formaliai užrašyti taip:

$$\langle W(s) | = \sum_{j=1}^M \langle W(0) | \lambda_j^s | \psi_j \rangle \langle \chi_j |$$

Tuomet sulyginus šią lygtį su (****), t.y. su $\langle W(s) | = \langle W(0) | Q^s$ gauname

$$Q^s = \sum_{j=1}^M \lambda_j^s | \psi_j \rangle \langle \chi_j |$$

Dabar galime išreikšti tikriniais vektoriais perėjimo tikimybę

$$P(m, s_0 | n, s) = (Q^{s-s_0})_{m,n} = \sum_{j=1}^M \lambda_j^{s-s_0} \langle m | \psi_j \rangle \langle \chi_j | n \rangle = \sum_{j=1}^M \lambda_j^{s-s_0} \psi_j(m) \chi_j(n)$$

Čia panaudojome Dirako žymėjimus $\langle m |$ ir $| n \rangle$ atsitiktinio kintamojo realizacijoms žymėti, bei $\langle m | \psi_j \rangle \equiv \psi_j(m)$ ir $\langle \chi_j | n \rangle \equiv \chi_j(n)$

- Galima nesunkiai parodyti, kad perėjimo tikimybė taip pat asimptotiškai artėja prie stacionarios vertės:

$$\lim_{s \rightarrow \infty} P(m, s_0 | n, s) = W_{ST}(n)$$

Atsitiktinis klaidžiojimas

- Čia dar kartą panagrinėsime atsitiktinio klaidžiojimo uždavinį. Markovo grandinių teorijos rėmuose jis sprendžiasi labai elegantiškai.
- Nagrinėsime atsitiktinį klaidžiojimą vienmatėje begalinėje gardelėje. Tarsime kad gardelės konstanta yra Δ , o charakteringas dalelės perėjimo laikas tarp įvairių gardelės mazgų yra τ .

$W(n\Delta, s\tau)$ – tikimybė surasti dalelę taške $x = n\Delta$ po s žingsnių.

$P(m\Delta, s\tau | n\Delta, (s+1)\tau)$ – tikimybė, kad per laiką τ dalelė iš taško $x = m\Delta$ pereis į tašką $x = n\Delta$.

Markovo grandinės dinamika aprašoma lygtimi

$$W(n\Delta, (s+1)\tau) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} W(m\Delta, s\tau) P(m\Delta, s\tau | n\Delta, (s+1)\tau)$$

Tarsime, kad dalelė vienoda tikimybė gali pajudėti vienu žingsniu į kairę ir į dešinę (bendruoju atveju šis formalizmas leidžia nagrinėti ir sudėtingesnius variantus), tuomet:

$$P(m\Delta, s\tau | n\Delta, (s+1)\tau) = \frac{1}{2} \delta_{n,m+1} + \frac{1}{2} \delta_{n,m-1}$$

Markovo grandinės, pagrindinė kinetinė lygtis (XII)

Tuomet tikimybės dinamika užrašoma tokia lygtimi

$$W(n\Delta, (s+1)\tau) = \frac{1}{2} W((n+1)\Delta, s\tau) + \frac{1}{2} W((n-1)\Delta, s\tau)$$

- Riboje mažų Δ ir τ ši lygtis virsta diferencialine. Kad tuo įsitikintume, atimame iš abiejų pusių $W(n\Delta, s\tau)$ ir padaliname iš τ :

$$\frac{W(n\Delta, (s+1)\tau) - W(n\Delta, s\tau)}{\tau} = \frac{\Delta^2}{2\tau} \left[\frac{W(n\Delta + \Delta, s\tau) + W(n\Delta - \Delta, s\tau) - 2W(n\Delta, s\tau)}{\Delta^2} \right]$$

Prisiminkime, kad $x = n\Delta$, $t = s\tau$. Riboje $\Delta \rightarrow 0$, $\tau \rightarrow 0$ tarant, kad $D \equiv \frac{\Delta^2}{2\tau} = \text{const}$ gauname difuzijos lygtį:

$$\frac{\partial W(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 W(x, t)}{\partial x^2}$$

Tarkime, kad pradinė sąlyga yra:

$$W(x, 0) = \delta(x)$$

- Nors mes jau žinome šios lygties sprendinį, dar kartą išspręsimė šią lygtį Furjė transformacijos metodu:

$$W(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \tilde{W}(k, t) e^{-ikx} \rightarrow \frac{\partial \tilde{W}(k, t)}{\partial t} = -Dk^2 \tilde{W}(k, t), \tilde{W}(k, 0) = 1 \rightarrow \tilde{W}(k, t) = e^{-Dk^2 t}$$

$$W(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{-Dk^2 t} e^{-ikx} = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}} \quad (\text{Gauso skirstinys})$$

Pagrindinė kinetinė lygtis (master equation)

- Fizikoje ir kituose moksluose dažnai tenka nagrinėti procesus, kuriuose laiko **intervalai tarp įvykių kinta tolygiai** ir atsitiktinai, o stochastinio kintamojo Y **realizacijos yra diskretinės**, $Y=Y_n$. Tokiu atveju tikimybės tankio funkcijos $W(n,t)$ laiko evoliuciją galima aprašyti diferencialinę lygtimi. Čia panagrinėsime atvejį, kai elementarūs įvykiai arba **perėjimai pasireiškia per labai trumpus laiko intervalus** ir **kiekvieno įvykio metu tikimybės tankio funkcija kinta nežymiai**. Tokiems procesams aprašyti taikoma vadinamoji **pagrindinė kinetinė lygtis (master equation)**.

Pagrindinės kinetinės lygties išvedimas

- Mes startuojame nuo pirmosios Markovo grandinės lygties (*), tačiau tariame, kad laikas yra tolydusis kintamasis ir užrašome ją tokiu pavidalu:

$$W(n, t + \Delta t) = \sum_{m=1}^M W(m, t) P(m, t | n, t + \Delta t) \quad (*)$$

- Mažiems Δt iš šios lygties galima tokiu būdu sukonstruoti diferencialinę lygtį:

$$\frac{\partial W(n, t)}{\partial t} \equiv \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left(\frac{W(n, t + \Delta t) - W(n, t)}{\Delta t} \right) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \sum_{m=1}^M W(m, t) [P(m, t | n, t + \Delta t) - \delta_{m,n}]$$

Markovo grandinės, pagrindinė kinetinė lygtis (XIV)

- Mažų Δt riboje, perėjimo tikimybę skleidžiame Teiloro eilute

$$P(m, t | n, t + \Delta t) = \delta_{m,n} \left[1 - \Delta t \sum_{l \neq m}^M p_{m,l}(t) \right] + (1 - \delta_{m,n}) p_{m,n}(t) \Delta t + \dots$$

Čia pats bendriausias skleidimo pavidalas, kuris tenkina perėjimo tikimybės normavimo sąlygą:

$$\sum_{n=1}^M P(m, t | n, t + \Delta t) = 1$$

Šioje lygtyje $p_{m,n}$ yra **perėjimo tikimybės greitis**, tiksliau

$m \neq n$:	$p_{m,n}(t) \Delta t$	– perėjimo tikimybė iš būsenos m į būseną n laiko intervale $t \rightarrow t + \Delta t$
$m = n$:	$\left[1 - \Delta t \sum_{\substack{l=1 \\ (l \neq m)}}^M p_{m,l}(t) \right]$	– tikimybė kad laiko intervale $t \rightarrow t + \Delta t$ nebus jokio perėjimo

Tuomet Markovo grandinės lygtį (*) galima užrašyti taip:

$$\frac{\partial W(n, t)}{\partial t} = \sum_{m \neq n}^M [W(m, t) p_{m,n}(t) - W(n, t) p_{n,m}(t)] \quad \text{– pagrindinė kinetinė lygtis (master equation)}$$

Perėjimai iš visų būsenų į būseną n

Perėjimai iš būsenos n į visas kitas būsenas

Stacionarus sprendinys ir detalusis balansas

- Stacionarus pagrindinės kinetinės lygties sprendinys surandamas iš sąlygos:

$$\frac{\partial}{\partial t} W(n, t) = 0 \quad \longrightarrow \quad \sum_{m \neq n}^M [W_{ST}(m) p_{m,n} - W_{ST}(n) p_{n,m}] = 0$$

Labai dažnai fizikiniuose uždaviniuose galioje **detalaus balanso principas**, kai perėjimo tikimybės tenkina sąlygą:

$$W_{ST}(m) p_{m,n} - W_{ST}(n) p_{n,m} = 0$$

Detalusis balansas visada galioje sistemoms esančioms termodinaminėje pusiausvyroje. Detalaus balanso principas taip pat dažnai būna tenkinamas ir nepusiausvyrinėms sistemoms.

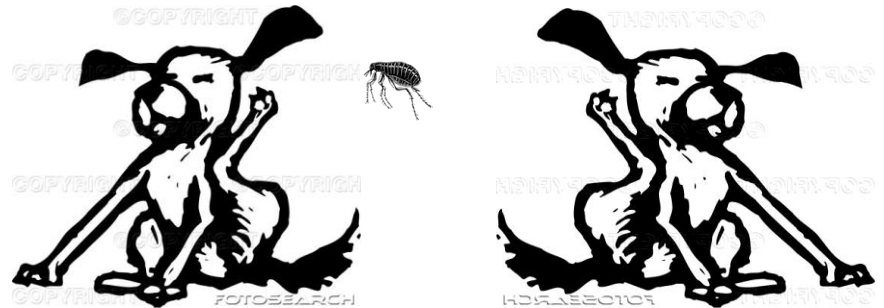
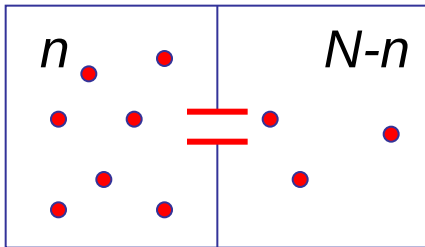
Kai galioja detalusis balansas tai stacionarus sprendinys surandamas paprastomis iteracijomis:

$$W_{ST}(2) = W_{ST}(1) p_{1,2} / p_{2,1}, \quad W_{ST}(3) = W_{ST}(2) p_{2,3} / p_{3,2}, \dots$$

Nestacionarus uždavinys šiuo atveju irgi sąlyginai paprastas, nes susiveda į kinetinę lygtį su simetrine perėjimo matrica.

Pavyzdys: artėjimas prie pusiausvyros dviejų indų modelyje

- Pagrindinė kinetinė lygtis labai dažnai naudojama aprašant chemines reakcijas, populiacijų dinamiką ir kitus atsitiktinius **atsiradimo ir išnykimo (birth-death) procesus**. Pradžioje pademonstruosime jos taikymą molekulių fizikai.
- Tarkime, kad turime indą, pertvara sudalintą į dvi lygias dalis. Pertvaroje yra plona skylutė pro kurią gali praeiti tik viena molekulė. Pradžioje molekulių skaičiai vienoje ir kitoje indo pusėje yra skirtingi. Dėl molekulių atsitiktinio judėjimo per pertvarą molekulių skaičiai turi susilyginti. Mūsų tikslas aprašyti šį **artėjimą prie pusiausvyros** pagrindine kinetine lygtimi.



- Vienas iš galimų šio procesų modelių galėtų būti toks: **kiekviename laiko žingsnyje atsitiktinai pasirenkama molekulė ir permetama į kitą indo pusę**. Tuomet tikimybė, kad molekulė bus pasirinkta duotoje indo pusėje bus proporcinga molekulių skaičiui toje pusėje. Toks procesas turi vesti prie molekulių skaičiaus susilyginimo (**animacija**).
- Šį uždavinį pirmą kartą nagrinėjo Paulis ir Tatjana Erenfestai. Kad būtų linksmesnė šio uždavinio analizė jie pasiūlė kitokią jo interpretaciją – su blusomis ir šunimis. Kai šalia yra du šunys – blusuotas ir neblusuotas – tai blusos šokinėja nuo vieno šuns prie kito ir ilginiui abu tampa vienodai blusuoti.

Markovo grandinės, pagrindinė kinetinė lygtis (XVII)

- Užrašysime šiam procesui pagrindinę kinetinę lygtį. Dėl to apibrėšime tokius dydžius:

n – kairiojo šuns blusų skaičius (molekulių skaičius kairioje indo pusėje)

$N-n$ – dešiniojo šuns blusų skaičius (molekulių skaičius dešinėje indo pusėje)

$W(n,t)$ – tikimybė, kad momentu t kairysis šou turi n blusų

$\nu\Delta t$ – tikimybė, kad per laiką Δt viena konkreti blusa pakeis šeimininką

$p_{n+1,n}\Delta t = (n+1)\nu\Delta t$ – tikimybė, kad per laiką Δt bet kuri viena kairiojo šuns blusa peršoks į dešinį šunį taip kad kairiojo šuns blusų skaičius pasikeis iš $n+1$ į n .

$p_{n-1,n}\Delta t = (N-n+1)\nu\Delta t$ – tikimybė, kad per laiką Δt bet kuri viena dešiniojo šuns blusa peršoks į kairįjį šunį taip kad kairiojo šuns blusų skaičius pasikeis iš $n-1$ į n .

$1 - [p_{n,n-1} + p_{n,n+1}]\Delta t$ – tikimybė, kad per laiką Δt kairiojo šuns blusų skaičius nepakis, t.y. išliks lygus n .
 $= 1 - [n\nu + (N-n)\nu]\Delta t$
 $= 1 - N\nu\Delta t$

Laiko intervalą Δt pasirenkame pakankamai mažą taip kad per jį įvyksta ne daugiau, kaip vienos blusos šuolis !

Markovo grandinės, pagrindinė kinetinė lygtis (XVIII)

- Dabar šiam procesui galime užrašyti Markovo grandinės lygtį:

$$\begin{aligned} W(n, t + \Delta t) &= [1 - (p_{n,n-1} + p_{n,n+1})\Delta t] W(n, t) + W(n-1, t) p_{n-1,n} \Delta t + W(n+1, t) p_{n+1,n} \Delta t \\ &= (1 - N\nu\Delta t) W(n, t) + W(n-1, t)(N - n + 1)\nu\Delta t + W(n+1, t)(n+1)\nu\Delta t \end{aligned}$$

Mažų $\Delta t \rightarrow 0$ riboje ši lygtis virsta pagrindinę kinetinę lygtimi:

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{W(n, t + \Delta t) - W(n, t)}{\Delta t} = -N\nu W(n, t) + W(n-1, t)(N - n + 1)\nu + W(n+1, t)(n+1)\nu$$

$$\frac{\partial}{\partial t} W(n, t) = \nu [W(n-1, t)(N - n + 1) + W(n+1, t)(n+1) - NW(n, t)]$$

– **pagrindinė kinetinė lygtis**

- Nesunku tiesiogiai patikrinti, kad šios lygties **stacionarus (pusiausvyrinis) sprendinys** yra binominis skirstinys, kurio $p=q=1/2$:

$$W(n-1, t)(N - n + 1) + W(n+1, t)(n+1) - NW(n, t) = 0 \rightarrow$$

$$W_{ST}(n) = \frac{1}{2^N} \frac{N!}{n!(N-n)!}$$

Markovo grandinės, pagrindinė kinetinė lygtis (XIX)

Stacionarų sprendinį galima buvo išsamprotauti iš kombinatorikos. Iš tikrųjų,

$$\text{Prob}(\text{kairiojoje pusėje } n \text{ molekulių}) = \left(\frac{1}{2}\right)^n \left(\frac{1}{2}\right)^{N-n} \frac{N!}{n!(N-n)!} = \frac{1}{2^N} \frac{N!}{n!(N-n)!}$$

Iš pirmos šio kurso dalies, kurioje buvo dėstoma tikimybių teorija mes žinome, kad binominio skirstinio pirmieji du momentai tokie:

$$\langle n \rangle = \sum_{n=0}^N n W_{ST}(n) = pN = \frac{N}{2}; \quad \langle n^2 \rangle = \sum_{n=0}^N n^2 W_{ST}(n) = (Np)^2 + Npq = \frac{N^2 + N}{4}$$

Iš čia vidutinis kvadratinis nuokrypis, standartinis nuokrypis ir santykinis nuokrypis:

$$\langle n^2 \rangle - \langle n \rangle^2 = \frac{N}{4}, \quad \sigma_N = \frac{\sqrt{N}}{2}, \quad \frac{\sigma_N}{\langle n \rangle} = \sqrt{\left\langle \left(\frac{n}{N/2} - 1 \right)^2 \right\rangle} = \frac{1}{\sqrt{N}}$$

Taigi matome, kad pusiausvyroje kairėje pusėje yra vidutiniškai pusė visų molekulių ir didinant molekulių skaičių santykinis nuokrypis nuo šio rezultato mažėja kaip $1/\sqrt{N}$.

Dideliems N binominį skirstinį galima aproksimuoti Gausu ir stacionarų sprendinį galima užrašyti taip:

$$W_{ST}(n) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi N}} \exp\left(-\frac{2(n - N/2)^2}{N}\right)$$

Artėjimas prie pusiausvyros

Dabar panagrinėsime, kaip sistema artėja prie stacionaraus (pusiausvyrinio) sprendinio. Mes mėginsime surasti dinamines lytis pirmiems dviems momentams. Dėl to padauginsime kinetinę lygtį iš n ir susumuosime pagal visus n .

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} n \left| \frac{\partial}{\partial t} W(n, t) = \nu [W(n-1, t)(N-n+1) + W(n+1, t)(n+1) - NW(n, t)] \right|$$

Tuomet:

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} W(n, t) n = \langle n \rangle$$

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} W(n-1, t)(N-n+1)n = \sum_{n=-\infty}^{\infty} W(n, t)(N-n)(n+1) = N\langle n \rangle + N - \langle n^2 \rangle - \langle n \rangle$$

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} W(n+1, t)(n+1)n = \sum_{n=-\infty}^{\infty} W(n, t)n(n-1) = \langle n^2 \rangle - \langle n \rangle$$

Čia sumuojame nuo minus begalybės iki plus begalybės, kadangi žinome, kad $W(n, t) = 0$, kai $n < 0$ ir $n > N$. Įrašę šias išraiškas į kinetinę lygtį pirmam momentui gauname:

$$\boxed{\frac{d\langle n \rangle}{dt} = -2\nu \left(\langle n \rangle - \frac{N}{2} \right)} \quad \longrightarrow \quad \langle n(t) \rangle = \frac{N}{2} + \left[\langle n(0) \rangle - \frac{N}{2} \right] e^{-2\nu t}$$

Matome, kad vidutinis molekulių skaičius kairėje indo pusėje eksponentiškai artėja prie pusiausvyrinės vertės, $\langle n(t) \rangle \rightarrow \langle n_{ST} \rangle \equiv N/2$, kai $t \rightarrow \infty$.

Markovo grandinės, pagrindinė kinetinė lygtis (XXI)

Analogiškai surandama dinaminė lygtis antram momentui. Dėl to kinetinę lygtį reikia padauginti iš n^2 ir susumuoti pagal visus n . Atlikę panašius veiksmus, kaip ir aukščiau, gauname

$$\frac{d\langle n^2 \rangle}{dt} = -4\nu \left(\langle n^2 \rangle - \frac{N\langle n \rangle}{2} - \frac{N}{4} \right)$$

Įrašome į šią lygtį jau surastą sprendinį $\langle n(t) \rangle$ ir išsprendžiame ją:

$$\langle n^2(t) \rangle = \frac{N^2 + N}{4} + \left[\langle n(0) \rangle - \frac{N}{2} \right] N e^{-2\nu t} + \left[\langle n^2(0) \rangle - \frac{N^2 + N}{4} - \left(\langle n(0) \rangle - \frac{N}{2} \right) N \right] e^{-4\nu t}$$

Matome, kad antrasis momentas taip pat artėja prie pusiausvyrinės vertės, kai $t \rightarrow \infty$

$$\langle n^2(t) \rangle \rightarrow \langle n_{ST}^2 \rangle \equiv (N^2 + N)/4$$

Nesunku nustatyti, kaip kinta laike vidutinis kvadratinis nuokrypis

$$\sigma^2(t) = \langle n^2(t) \rangle - \langle n(t) \rangle^2 = \frac{N}{4} + \left(\sigma^2(0) - \frac{N}{4} \right) e^{-4\nu t}$$

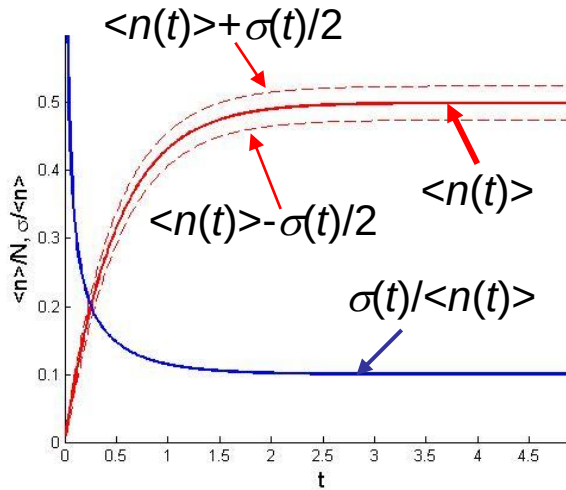
Jis artėja prie pusiausvyrinės vertės $\sigma^2(t) \rightarrow \sigma_{ST}^2 \equiv N/4$ **dvigubai didesniu greičiu**, nei vidurkis $\langle n(t) \rangle$. Vidurkio artėjimo prie pusiausvyros charakteringasis laikas yra $\tau_{\langle n \rangle} = 1/2\nu$, o vidutinio kvadratinio nuokrypio – $\tau_{\sigma} = 1/4\nu$

Markovo grandinės, pagrindinė kinetinė lygtis (XXII)

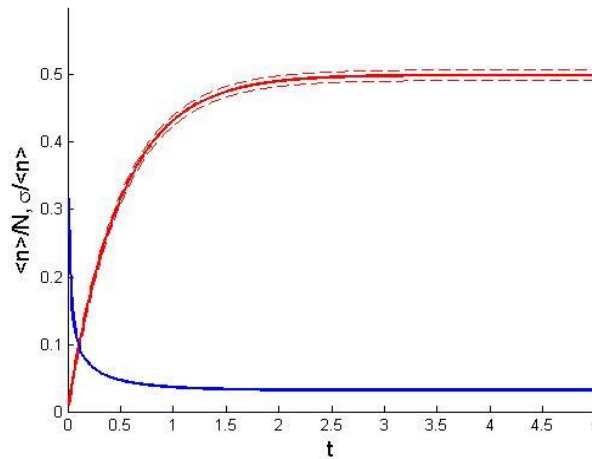
- Žinodami $\sigma(t)$ ir $\langle n(t) \rangle$ nesunkiai apskaičiuojame santykinio nuokrypio dinamiką:

$$\frac{\sigma(t)}{\langle n(t) \rangle} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sqrt{\left| 1 + \left(\frac{\sigma^2(0)}{\sigma_{ST}^2} - 1 \right) e^{-4\nu t} \right|} \left/ \left[1 + \left(\frac{\langle n(0) \rangle}{\langle n_{ST} \rangle} - 1 \right) e^{-2\nu t} \right] \right.$$

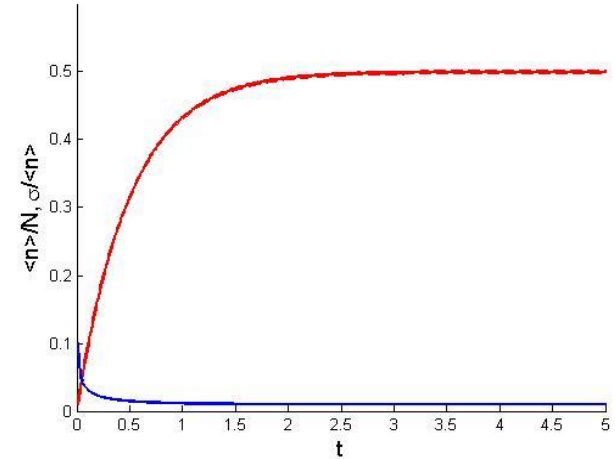
Pavaizduosime $\langle n(t) \rangle$, $\langle n(t) \rangle + \sigma(t)/2$, $\langle n(t) \rangle - \sigma(t)/2$ ir $\sigma(t)/\langle n(t) \rangle$ kitimo dinamiką skirtingiems N , kai $\langle n(0) \rangle = 0$, $\sigma(0) = 0$ ir $\nu = 1$:



$N=100$



$N=1000$



$N=10000$

- Santykinis nuokrypis $\sigma(t)/\langle n(t) \rangle$ yra didelis tik pradžioje, kai kairioje indo pusėje yra mažai dalelių. Kai $N \rightarrow \infty$, santykinis nuokrypis yra mažas (proporcingas $N^{-1/2}$) beveik visiems t , išskyrus labai trumpą pradinį pereinamąjį procesą. Tai reiškia, kad **didelių skaičių dėsnis galioje ne tik pusiausvyroje, bet yra teisingas ir aprašant artėjimą prie pusiausvyros. Šis faktas leidžia relaksacijos į pusiausvyrą procesą aprašyti makroskopine teorija (nepusiausvyrine termodinamika).**

Markovo grandinės, pagrindinė kinetinė lygtis (XXIII)

- Šiame modelyje geras makroskopinis parametras yra vidutinis dalelių skaičius kairioje indo pusėje. Jis tenkina paprastą dinaminę lygtį:

$$\frac{d\langle n \rangle}{dt} = -2\nu \left(\langle n \rangle - \frac{N}{2} \right)$$

Kai pilnas dalelių skaičius N didelis, ji gana tiksliai aprašo dalelių kitimo dinamiką, nes tikras dalelių skaičius $n(t)$ beveik tiksliai lygus vidurkiui $\langle n(t) \rangle$. Santykinis nuokrypis $\langle \sigma(t) \rangle / \langle n(t) \rangle$ nuo vidurkio $\langle n(t) \rangle$ yra atvirkščiai proporcingas šakniai iš dalelių skaičiaus N .

- Šią makroskopinę lygtį galima nesunkiai gauti iš „pirštinių“ samprotavimų. Vidutinis dalelių skaičius kairiojoje indo dalyje kinta dėl dviejų srautų. Dalelių srautas iš kairės pusės į dešinę yra $\nu \langle n \rangle$ ir iš dešinės į kairę $\nu (N - \langle n \rangle)$. Lygtis aprašanti šių srautų balansą yra

$$\frac{d\langle n \rangle}{dt} = -\nu \langle n \rangle + \nu (N - \langle n \rangle) = -2\nu \left(\langle n \rangle - \frac{N}{2} \right)$$

Kinetinės lygties transformacija į Fokero-Planko lygtį didelių N riboje

- Nagrinėdami stacionarų (pusiausvyrinį) kinetinės lygties sprendinį, mes matėme, kad jis artėja prie Gausinio skirstinio didelio dalelių skaičiaus riboje. Dabar pažiūrėsime, kaip transformuojasi pati kinetinė lygtis riboje $N \rightarrow \infty$.

Tiriant šią ribą patogiu pakeisti kintamąjį

$$W(n, t) = W\left(\frac{N}{2} + x\sqrt{N}, t\right) \equiv \tilde{W}(x, t), \quad n = \frac{N}{2} + x\sqrt{N}, \quad x = \frac{n - N/2}{\sqrt{N}}$$

Šiame keitinyje x yra dalelių skaičiaus nuokrypis nuo pusiausvyrinės vertės normuotas į $N^{1/2}$. Tuomet kinetinė lygtis įgauna tokį pavidalą

$$\frac{\partial}{\partial t} \tilde{W}(x, t) = \nu \left[\tilde{W}\left(x - \frac{1}{\sqrt{N}}, t\right) \left(\frac{N}{2} - x\sqrt{N} + 1\right) + \tilde{W}\left(x + \frac{1}{\sqrt{N}}, t\right) \left(\frac{N}{2} + x\sqrt{N} + 1\right) - N\tilde{W}(x, t) \right]$$

Tariant, kad $N \gg 1$, skleidžiame tikimybes Teiloro eilute iki antros eilės narių

$$\tilde{W}\left(x - \frac{1}{\sqrt{N}}, t\right) = \tilde{W}(x, t) - \frac{1}{\sqrt{N}} \frac{\partial \tilde{W}(x, t)}{\partial x} + \frac{1}{2N} \frac{\partial^2 \tilde{W}(x, t)}{\partial x^2} + \dots$$

$$\tilde{W}\left(x + \frac{1}{\sqrt{N}}, t\right) = \tilde{W}(x, t) + \frac{1}{\sqrt{N}} \frac{\partial \tilde{W}(x, t)}{\partial x} + \frac{1}{2N} \frac{\partial^2 \tilde{W}(x, t)}{\partial x^2} + \dots$$

Markovo grandinės, pagrindinė kinetinė lygtis (XXV)

Išrašę šias išraiškas į kinetinę lygtį gauname Fokero-Planko lygtį

$$\boxed{\frac{\partial \tilde{W}}{\partial t} = \nu \frac{\partial}{\partial x} \left[2x\tilde{W} + \frac{1}{2} \frac{\partial \tilde{W}}{\partial x} \right]} \quad \left(x = \frac{n - N/2}{\sqrt{N}} \right)$$

- Aprašytas čia metodas, kuriuo kinetinę lygtį pakeitėme Fokero-Planko lygtimi, vadinamas **Kramerso-Moialo skleidimu (Kramers-Moyal expansion)**. Toks skleidimas dažnai sutinkamas įvairiuose fizikinės kinetikos uždaviniuose.
- Nesunku surasti stacionarų Fokero-Planko lygties sprendinį

$$2x\tilde{W} + \frac{1}{2} \frac{d\tilde{W}}{dx} = 0 \quad \longrightarrow \quad W_{ST}(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \exp(-2x^2)$$

Gautasis Gausinis skirstinys tiksliai sutampa su anksčiau nustatytu stacionariu pagrindinės kinetinės lygties sprendiniu didelių N riboje!

- Nestacionarų šios lygties sprendinį taip pat nesunku surasti, jeigu pastebėti, kad ši lygtis pagal formą sutampa su Brauno dalelės Fokero-Planko lygtimi, kurią gavome nagrinėdami trumpalaikę greičio relaksaciją. Tad čia jos sprendinį galime nusirašyti:

$$\boxed{\tilde{W}(x, t) = \sqrt{\frac{2}{\pi(1 - e^{-4\nu t})}} \exp\left(-\frac{2(x - x_0 e^{-2\nu t})^2}{(1 - e^{-4\nu t})}\right)}$$

kai pradinė sąlyga:

$$\tilde{W}(x, 0) = \delta(x - x_0)$$

Pavyzdys: populiacijų kinetika

- Pagrindinė kinetinė lygtis dažnai naudojama populiacijų dinamikai aprašyti. Pademonstruosime jos taikymą šio mokslo srityje konkrečiu uždaviniu. Nagrinėsime bakterijų kinetiką. Pažymėkime:

$W(n,t)$ – tikimybė, kad momentu t populiacijoje yra n bakterijų

$d\Delta t$ – tikimybė, kad per laiką Δt viena konkreti bakterija žus.

$b\Delta t$ – tikimybė, kad per laiką Δt viena konkreti bakterija pasidaugins.

$p_{n-1,n}\Delta t = (n-1)b\Delta t$ – tikimybė, kad per laiką Δt populiacija iš $n-1$ bakterijos pagausės viena bakterija.

$p_{n+1,n}\Delta t = (n+1)d\Delta t$ – tikimybė, kad per laiką Δt populiacijoje iš $n+1$ bakterijos žus viena bakterija.

$n(b+d)\Delta t$ – tikimybė, kad per laiką Δt populiacijoje iš n bakterijų žus arba atsiras viena bakterija.

Tuomet:

$$\frac{\partial}{\partial t} W(n,t) = W(n-1,t)(n-1)b + W(n+1,t)(n+1)d - W(n,t)n(b+d)$$

– **pagrindinė kinetinė lygtis**

Šią kinetinę lygtį galima tirti panašiai, kaip praeitame pavyzdyje. Ją galima dauginti iš n , n^2 , sumuoti pagal n ir nustatyti diferencialines lygtis pirmam ir antram momentui.

Markovo grandinės, pagrindinė kinetinė lygtis (XXVII)

- Tačiau čia mes pademonstruosime kitą tyrimo būdą. Mes parodysime kad galima išspręsti pačią kinetinę lygtį, t.y. nustatyti visos $W(n,t)$ funkcijos laikinę priklausomybę, o ne atskirų jos momentų.
- Nestacionarus kinetinės lygties sprendinys ieškomas **generuojančios funkcijos** metodu. Generuojanti funkcija apibrėžiama taip:

$$F(z,t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} z^n W(n,t)$$

(Nuo kintamojo n pereinama prie kintamojo z . Tai analogiška Furjė transformacijai.)

Čia suma imama nuo $-\infty$, nes ties $n = 0$ tikimybė turi natūralią kraštinę sąlygą, $W(t,n) = 0$, kai $n < 0$. Žinant generuojančią funkciją galima nesunkiai surasti įvairius momentus. Jie išreiškiami šios funkcijos išvestinėmis pagal z taške $z = 1$. Pateiksime pirmų dviejų momentų išraiškas:

$$\langle n(t) \rangle = \left(\frac{\partial F(z,t)}{\partial z} \right)_{z=1} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} n W(n,t)$$

$$\langle n^2(t) \rangle = \left(\frac{\partial^2 F(z,t)}{\partial z^2} \right)_{z=1} + \langle n(t) \rangle = \sum_{n=-\infty}^{\infty} (n^2 - n) W(n,t) + \langle n(t) \rangle$$

Markovo grandinės, pagrindinė kinetinė lygtis (XXVIII)

- Generuojančios funkcijos lygtis nustatoma padauginus kinetinę lygtį iš z^n ir susumavus pagal visus n :

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} z^n \left| \frac{\partial}{\partial t} W(n, t) = W(n-1, t)(n-1)b + W(n+1, t)(n+1)d - W(n, t)n(b+d) \right.$$

Tuomet:

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} z^n W(n-1, t)(n-1) = z^2 \frac{\partial}{\partial z} \sum_{n=-\infty}^{\infty} z^{n-1} W(n-1, t) = z^2 \frac{\partial F(z, t)}{\partial z}$$

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} z^n W(n+1, t)(n+1) = \frac{\partial}{\partial z} \sum_{n=-\infty}^{\infty} z^{n+1} W(n+1, t) = \frac{\partial F(z, t)}{\partial z}$$

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} z^n W(n, t)n = z \frac{\partial}{\partial z} \sum_{n=-\infty}^{\infty} z^n W(n, t) = z \frac{\partial}{\partial z} F(z, t)$$

Tokiu būdu generuojančiai funkcijai gauname diferencialinę lygtį dalinėmis išvestinėmis

$$\boxed{\frac{\partial F}{\partial t} = (z-1)(bz-d) \frac{\partial F}{\partial z}}$$

- Generuojančios funkcijos lygtys sprendžiamos **charakteristikų metodu**. Pademonstruosime šį metodą gautai lygčiai

$$\frac{\partial F}{\partial t} - (z-1)(bz-d)\frac{\partial F}{\partial z} = 0$$

Metodo idėja paremta **lygties charakteristikų** nustatymu. Charakteristikos, pagal apibrėžimą, yra (z,t) plokštumos kreivės, kuriose funkcija $F(z,t)$ yra pastovi. Jos tenkina tokią sąlygą:

$$\frac{dz}{(z-1)(bz-d)} = -dt \Rightarrow \ln\left(\frac{z-1}{z-d/b}\right) + (b-d)t = \ln C \Rightarrow \frac{b(z-1)}{bz-d} e^{(b-d)t} = C$$

Nesunku įsitikinti, kad **bet kuri funkcija**

$$F(z,t) = F\left(\frac{b(z-1)}{bz-d} e^{(b-d)t}\right)$$

yra generuojančios lygties sprendinys, t.y. tenkina viršutinę šios skaidrės lygtį. Iš šio sprendinio matome, kad funkcijos $F(z,t)$ kintamieji z ir t yra susieti tam tikra sudėtinga priklausomybe, tačiau pati funkcija F lieka nežinoma.

Markovo grandinės, pagrindinė kinetinė lygtis (XXX)

- Pačios **funkcijos $F(z,t)$ pavidalas nustatomas iš pradinės sąlygos**. Tarkime, kad pradiniu laiko momentu $t=0$ populiacijoje yra tiksliai m bakterijų. Tuomet

$$W(n,0) = \delta_{n,m} \longrightarrow F(z,0) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} z^n \delta_{m,n} = z^m \longrightarrow F\left(\frac{b(z-1)}{bz-d}\right) = z^m$$

Pažymėkime $u = \frac{b(z-1)}{bz-d}$. Tuomet $z = \frac{du-b}{b(u-1)}$ ir $F(u) = \left(\frac{du-b}{b(u-1)}\right)^m$

Generuojančios lygties sprendinys, tenkinantis duotą pradinę, sąlygą yra

$$F(z,t) = F\left(\frac{b(z-1)}{bz-d} e^{(b-d)t}\right) = \left(\frac{d \frac{b(z-1)}{bz-d} e^{(b-d)t} - b}{b\left(\frac{b(z-1)}{bz-d} e^{(b-d)t} - 1\right)}\right)^m$$

$$F(z,t) = \left(\frac{d(z-1)e^{(b-d)t} - bz + d}{b(z-1)e^{(b-d)t} - bz + d}\right)^m$$

Tai yra **tikslus** generuojančios lygties sprendinys !!!

- Generuojanti funkcija turi visą informaciją apie tikimybes $W(n,t)$. Tikimybės $W(n,t)$ nustatomos skleidžiant generuojančią funkciją Teiloro eilute. Jos tiesiog yra Teiloro eilutės koeficientai:

$$F(z,t) = \sum_{n=0}^{\infty} z^n W(n,t) = \sum_{n=0}^{\infty} z^n \frac{1}{n!} \left(\frac{\partial^n F}{\partial z^n} \right)_{z=0} \rightarrow \boxed{W(n,t) = \frac{1}{n!} \left(\frac{\partial^n F(z,t)}{\partial z^n} \right)_{z=0}}$$

Pavyzdžiui,

$$W(0,t) = F(0,t) = \left(\frac{d(1 - e^{(b-d)t})}{d - be^{(b-d)t}} \right)^m$$

Tikimybė, kad populiacijoje nėra nė vienos bakterijos, t.y., kad per laiką t populiacija išmirs (animacija).

- Mes jau žinome, kad iš generuojančios funkcijos nesunku nustatyti ir momentus. Vidutinė vertė ir vidutinis kvadratinis nuokrypis yra tokie:

$$\langle n(t) \rangle = \left(\frac{\partial F}{\partial z} \right)_{z=1} = me^{(b-d)t}$$

$$\sigma^2(t) = \langle n^2(t) \rangle - \langle n(t) \rangle^2 = \left(\frac{\partial^2 F}{\partial z^2} \right)_{z=1} + \langle n(t) \rangle - \langle n(t) \rangle^2 = m \left(\frac{b+d}{d-b} \right) e^{(b-d)t} (1 - e^{(b-d)t})$$

Iš šių rezultatų matome, kad jeigu gimimo greitis yra didesnis negu žuvimo, $b > d$, tai bakterijos eksponentiškai gausėja, o jei mažesnis, $b < d$ – tai eksponentiškai nyksta.

Markovo grandinės, pagrindinė kinetinė lygtis (XXXII)

- Čia, kaip ir praeitame pavyzdyje, santykinis nuokrypis yra atvirkščiai proporcingas šakniai iš bakterijų skaičiaus.

$$\frac{\sigma(t)}{\langle n(t) \rangle} = \frac{1}{\sqrt{m}} \sqrt{\left| \left(\frac{b+d}{b-d} \right) \left(1 - e^{-(b-d)t} \right) \right|}$$

Todėl, kai bakterijų skaičius yra didelis, vietoje mikroskopinės kinetinės lygties galima patikimai taikyti **makroskopinę lygtį vidutiniam bakterijų skaičiui**

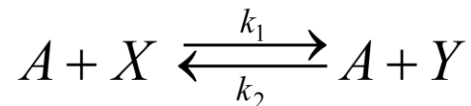
$$\frac{d\langle n \rangle}{dt} = b\langle n \rangle - d\langle n \rangle$$

Ši lygtis aprašo vidutinio bakterijų skaičiaus balansą. Pirmas narys aprašo bakterijų prieaugį dėl dauginimosi, o antras – mažėjimą dėl žuvimo. Jos sprendinys sutampa su anksčiau gautu rezultatu, panaudojus kinetinės lygties sprendinį.

$$\langle n(t) \rangle = m e^{(b-d)t}$$

Pavyzdys: cheminių reakcijų kinetika

- Pagrindinė kinetinė lygtis plačiai taikoma cheminių reakcijų kinetikai aprašyti. Panagrinėkime tokią cheminę reakciją:



- Tarkime, kad A molekulių kiekis n_A palaikomas pastoviu, o X ir Y molekulių skaičiai n_X ir n_Y yra kintami, tačiau jų suma yra pastovi

$$n_X + n_Y = N = \text{const} \Rightarrow n_X \equiv n, n_Y = N - n$$

$k_1 \Delta t$ – tikimybė, kad per laiką Δt įvyks reakcija, kai X susidurs su A ir virs Y

$k_2 \Delta t$ – tikimybė, kad per laiką Δt įvyks reakcija, kai Y susidurs su A ir virs X

$W(n, t)$ – tikimybė, kad momentu t sistemoje yra n X -molekulių.

$p_{n-1, n} \Delta t = (N - n + 1) n_A k_2 \Delta t$ – tikimybė, kad per laiką Δt populiacijoje iš $n-1$ X -molekulių įvyks reakcija, kurios metu viena Y molekulė virs X

$p_{n+1, n} \Delta t = (n + 1) n_A k_1 \Delta t$ – tikimybė, kad per laiką Δt populiacijoje iš n X -molekulių įvyks reakcija, kurios metu viena X molekulė virs Y

$n n_A k_1 \Delta t + (N - n) n_A k_2 \Delta t$ – tikimybė, kad per laiką Δt populiacijoje iš n X -molekulių įvyks tiesioginė arba atvirkštinė reakcija, kurios metu viena X molekulė virs Y arba viena Y molekulė virs X .

Markovo grandinės, pagrindinė kinetinė lygtis (XXXIV)

- Susumavę atėjimo ir išėjimo procesus gauname tokią pagrindinę kinetinę lygtį:

$$\frac{\partial}{\partial t} W(n,t) = n_A [W(n-1,t)(N-n+1)k_2 + W(n+1,t)(n+1)k_1 - W(n,t)(nk_1 + (N-n)k_2)]$$

Panašiai kaip praeitame pavyzdyje šią lygtį galima išspręsti generuojančios funkcijos ir charakteristikų metodu. Čia to sprendimo nepateiksime.

- Makroskopinę lygtį vidutiniam X -molekulių skaičiui galima gauti padauginus kinetinę lygtį iš n ir susumavus pagal visus n , arba tiesiog išsamprotauti iš cheminės reakcijos formulės:

$$\frac{d\langle n \rangle}{dt} = -k_1 n_A \langle n \rangle + k_2 n_A (N - \langle n \rangle)$$

arba

$$\frac{d\langle n \rangle}{dt} = n_A [k_2 N - (k_1 + k_2) \langle n \rangle]$$