

СТОХАСТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ В ЕСТЕСТВЕННЫХ НАУКАХ

Книга известного новозеландского физика сочетает в себе свойства учебника и монографии и может служить справочником по вопросам теории стохастических процессов. Дано последовательное рассмотрение марковских процессов, выводятся стохастические дифференциальные уравнения, рассматриваются различные формы уравнения Фоккера — Планка, постановка граничных задач и методы их решения, управляющие уравнения процессов со скачками и их аппроксимации с помощью уравнения Фоккера — Планка, вопросы бистабильности и метастабильности, квантовомеханические марковские процессы в применении к квантовой оптике и квантовой электронике, а также основные понятия теории вероятностей и случайных процессов.

Для научных работников, аспирантов и студентов старших курсов.

Оглавление

Предисловие редактора перевода	5
Предисловие редактора серии «Синергетика»	8
Предисловие к 2-му изданию	9
Предисловие к 1-му изданию	10
Список обозначений	15
1. ВВЕДЕНИЕ	19
1.1. Предыстория вопроса	19
1.2. Некоторые примеры	20
1.2.1. Броуновское движение	20
1.2.2. Уравнение Ланжевена	25
1.3. Процессы рождения — гибели	28
1.4. Шум в радиоэлектронных устройствах	31
1.4.1. Дробовой шум	32
1.4.2. Автокорреляционные функции и спектральные плотности	37
1.4.3. Фурье-анализ случайных функций: стационарные системы	39
1.4.4. Тепловой шум и теорема Найквиста	40
2. ПОНЯТИЯ ТЕОРИИ ВЕРОЯТНОСТЕЙ	45
2.1. События и множества событий	45
2.2. Вероятности	46
2.2.1. Вероятностные аксиомы	47
2.2.2. Смысл $P(A)$	47
2.2.3. Смысл аксиом	48
2.2.4. Случайные переменные	49
2.3. Совместные и условные вероятности. Независимость	50
2.3.1. Совместные вероятности	50
2.3.2. Условные вероятности	51
2.3.3. Соотношения между совместными вероятностями различных порядков	52
2.3.4. Независимость	53

2.4. Средние значения и плотности вероятности	54
2.4.1. Определение плотности вероятности через средние значения произвольных функций	55
2.4.2. Множества нулевой вероятности	55
2.5. Средние	56
2.5.1. Моменты и корреляции	57
2.5.2. Закон больших чисел	57
2.6. Характеристическая функция	59
2.7. Производящая функция кумулянтов: корреляционные функции и кумулянты	60
2.7.1. Пример: кумулянт 4-го порядка $\langle\langle X_1 X_2 X_3 X_4 \rangle\rangle$	62
2.7.2. Значимость кумулянтов	63
2.8. Гауссовское и пуассоновское распределение вероятностей	64
2.8.1. Гауссовское распределение	64
2.8.2. Центральная предельная теорема	65
2.8.3. Пуассоновское распределение	66
2.9. Пределы последовательностей случайных переменных	67
2.9.1. Предел почти наверное	68
2.9.2. Предел в среднеквадратичном	68
2.9.3. Стохастический предел, или предел по вероятности	68
2.9.4. Предел по распределению	69
2.9.5. Взаимосвязь различных пределов	69
3. МАРКОВСКИЕ ПРОЦЕССЫ	70
3.1. Стохастические процессы	70
3.2. Марковский процесс	71
3.2.1. Согласованность. Уравнение Чепмена — Колмогорова	72
3.2.2. Дискретное пространство состояний	73
3.2.3. Более общие меры	73
3.3. Понятие непрерывности для стохастических процессов	73
3.3.1. Математическое определение непрерывного марковского процесса	75
3.4. Дифференциальное уравнение Чепмена — Колмогорова	76
3.4.1. Вывод дифференциального уравнения Чепмена — Колмогорова	78
3.4.2. Статус дифференциального уравнения Чепмена — Колмогорова	81
3.5. Интерпретация условий и результатов	82
3.5.1. Скачкообразные процессы. Управляющее уравнение	82
3.5.2. Диффузионные процессы. Уравнение Фоккера — Планка	83
3.5.3. Детерминированные процессы. Уравнения Лиувилля	84
3.5.4. Процессы общего вида	86
3.6. Уравнения, описывающие изменение вероятностей при изменении начального времени. Обратные уравнения	87
3.7. Стационарные и однородные марковские процессы	88
3.7.1. Эргодические свойства стационарного процесса	89
3.7.2. Однородные процессы	92

3.7.3. Приближение к стационарному процессу	93
3.7.4. Автокорреляционная функция марковских процессов	98
3.8. Примеры марковских процессов	101
3.8.1. Винеровский процесс	101
3.8.2. Одномерные случайные блуждания	105
3.8.3. Пуассоновский процесс	109
3.8.4. Процесс Орнштейна — Уленбека	111
3.8.5. Случайный телеграфный процесс	115
4. РАСЧЕТЫ МЕТОДОМ ИТО	117
И СТОХАСТИЧЕСКИЕ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ	
4.1. Обоснования	117
4.2. Стохастическое интегрирование	120
4.2.1. Определение стохастического интеграла	120
4.2.2. Пример $\int W(t')dW(t')$	122
4.2.3. Интеграл Стратоновича	124
4.2.4. Неупреждающие функции	124
4.2.5. Доказательство того, что $dW(t)^2 = dt$ и $dW(t)^{2+N} = 0$	125
4.2.6. Свойства стохастического интеграла Ито	127
4.3. Стохастические дифференциальные уравнения (СДУ)	132
4.3.1. Стохастическое дифференциальное уравнение Ито. Определение	132
4.3.2. Марковское свойство решения стохастического дифференциального уравнения Ито	135
4.3.3. Замена переменных. Формула Ито	135
4.3.4. Связь между уравнением Фоккера — Планка и стохастическим дифференциальным уравнением	136
4.3.5. Системы с несколькими переменными	137
4.3.6. Стохастическое дифференциальное уравнение Стратоновича	139
4.3.7. Зависимость решений от начальных условий и параметров	142
4.4. Примеры и решения	144
4.4.1. Коэффициенты, не зависящие от x	144
4.4.2. Мультипликативный линейный белый шум	145
4.4.3. Комплексный осциллятор с шумящей частотой	146
4.4.4. Процесс Орнштейна — Уленбека	148
4.4.5. Переход от декартовых координат к полярным	149
4.4.6. Процесс Орнштейна — Уленбека для случая многих переменных	151
4.4.7. Общее линейное уравнение для одной переменной	155
4.4.8. Линейные уравнения для многих переменных	157
4.4.9. Процесс Орнштейна — Уленбека, зависящий от времени	158
5. УРАВНЕНИЕ ФОККЕРА — ПЛАНКА	160
5.1. Общие замечания	160
5.2. Уравнение Фоккера — Планка в одномерном случае	161
5.2.1. Граничные условия	162

5.2.2. Стационарные решения однородных уравнений Фоккера — Планка	168
5.2.3. Примеры стационарных решений	170
5.2.4. Граничные условия для обратного уравнения Фоккера — Планка	173
5.2.5. Методы собственных функций (однородные процессы)	174
5.2.6. Примеры	177
5.2.7. Время достижения границы для случая однородных процессов	181
5.2.8. Вероятность достижения того или иного конца интервала	187
5.3. Уравнения Фоккера — Планка в многомерном случае	189
5.3.1. Замена переменных	190
5.3.2. Граничные условия	192
5.3.3. Стационарные решения: потенциальные условия	193
5.3.4. Детальный баланс	194
5.3.5. Следствия детального баланса	197
5.3.6. Примеры детального баланса в уравнениях Фоккера — Планка	203
5.3.7. Методы собственных функций для случая многих переменных. Однородные процессы	214
5.4. Время первого достижения границы области (однородные процессы)	219
5.4.1. Решения задач, связанных с достижением границ	221
5.4.2. Распределение точек выхода	224
6. ПРИБЛИЖЕННЫЕ МЕТОДЫ ДЛЯ ДИФФУЗИОННЫХ ПРОЦЕССОВ	227
6.1. Теории возмущений, основанные на малости шума	227
6.2. Разложения по малому шуму для стохастических дифференциальных уравнений	230
6.2.1. Пределы применимости разложения	233
6.2.2. Стационарные решения (однородные процессы)	234
6.2.3. Среднее значение, дисперсия и временная корреляционная функция	235
6.2.4. Сложности теории возмущений для малого шума	236
6.3. Разложение по малому шуму для уравнения Фоккера — Планка	239
6.3.1. Уравнения для моментов и автокорреляционных функций	241
6.3.2. Пример	244
6.3.3. Асимптотический метод для стационарного распределения	246
6.4. Адиабатическое исключение быстрых переменных	247
6.4.1. Абстрактная формулировка на языке операторов и проекций	250
6.4.2. Решение с использованием преобразования Лапласа	253
6.4.3. Поведение на малых временных масштабах	256
6.4.4. Граничные условия	258
6.4.5. Систематический анализ в рамках теории возмущений	260
6.5. Белый шум как предельный случай коррелированного процесса	264
6.5.1. Общность результата	269
6.5.2. Более общие флуктуационные уравнения	270
6.5.3. Системы, неоднородные во времени	271
6.5.4. Учет зависимости L_1 от времени	272
6.6. Адиабатическое исключение быстрых переменных: общий случай	273

6.6.1. Пример: исключение короткоживущих промежуточных продуктов химической реакции	273
6.6.2. Адиабатическое исключение в модели Хакена	278
6.6.3. Адиабатическое исключение быстрых переменных: нелинейный случай	283
6.6.4. Пример с произвольной нелинейной связью	288
7. УПРАВЛЯЮЩИЕ УРАВНЕНИЯ И СКАЧКООБРАЗНЫЕ ПРОЦЕССЫ	291
7.1. Управляющие уравнения рождения — гибели: одномерный случай	292
7.1.1. Стационарные решения	293
7.1.2. Пример: химическая реакция $X \leftrightarrow A$	295
7.1.3. Химическая бистабильная система	298
7.2. Приближенное представление управляющих уравнений уравнениями Фоккера — Планка	303
7.2.1. Приближение диффузионного процесса скачкообразным процессом	303
7.2.2. Разложение Крамерса — Мойала	307
7.2.3. Разложение ван Кампена по обратному размеру системы [7.2]	308
7.2.4. Теорема Курца	313
7.2.5. Критические флуктуации	314
7.3. Граничные условия для процессов рождения — гибели	316
7.4. Среднее время достижения границы	318
7.4.1. Вероятность поглощения	320
7.4.2. Сравнение с уравнением Фоккера — Планка	320
7.5. Многомерные системы рождения — гибели	321
7.5.1. Стационарные решения при наличии детального баланса	323
7.5.2. Стационарные решения в отсутствие детального баланса (решение Кирхгофа)	325
7.5.3. Разложение по обратному размеру системы и аналогичные разложения	326
7.6. Некоторые примеры	327
7.6.1. $X + A \leftrightarrow 2X$	327
7.6.2. $X \xrightleftharpoons[k]{\gamma} Y \xrightleftharpoons[\gamma]{k} A$	327
7.6.3. Система хищник — жертва	328
7.6.4. Уравнения для производящих функций	333
7.7. Представление Пуассона [7.10]	338
7.7.1. Разновидности представлений Пуассона	343
7.7.2. Действительные представления Пуассона	343
7.7.3. Комплексные представления Пуассона	343
7.7.4. Положительное представление Пуассона	347
7.7.5. Временные корреляционные функции	351
7.7.6. Тримолекулярные реакции	358
7.7.7. Шум третьего порядка	363

8. ПРОСТРАНСТВЕННО-РАСПРЕДЕЛЕННЫЕ СИСТЕМЫ	368
8.1. Общие замечания	368
8.1.1. Функциональные уравнения Фоккера — Планка	371
8.2. Описание при помощи многомерного управляющего уравнения	373
8.2.1. Диффузия	373
8.2.2. Управляющее уравнение диффузии в континуальной форме	374
8.2.3. Совместное рассмотрение химических реакций и диффузии	380
8.2.4. Метод представления Пуассона	381
8.3. Пространственные и временные корреляционные структуры	382
8.3.1. Реакция $X \xrightleftharpoons[k_2]{k_1} Y$	382
8.3.2. Реакция $B + X \xrightleftharpoons[k_3]{k_1} C$, $A + X \xrightarrow[k_2]{} 2X$	387
8.3.3. Нелинейная модель с фазовым переходом второго рода	393
8.4. Связь между локальным и глобальным описаниями	398
8.4.1. Явное адиабатическое исключение неоднородных мод	398
8.5. Управляющее уравнение в фазовом пространстве	401
8.5.1. Независимое движение молекул и соответствующий ему поток вероятности	402
8.5.2. Поток как процесс рождения — гибели	403
8.5.3. Введение столкновений. Управляющее уравнение Больцмана	406
8.5.4. Совместное рассмотрение потока и столкновений	410
9. БИСТАБИЛЬНОСТЬ, МЕТАСТАБИЛЬНОСТЬ И ПРОБЛЕМЫ ПЕРЕХОДА ИЗ ОДНОЙ ФАЗЫ В ДРУГУЮ	414
9.1. Диффузия в случае потенциала с двумя ямами (одна переменная)	415
9.1.1. Поведение системы в случае $D=0$	415
9.1.2. Поведение системы при очень малых значениях D	416
9.1.3. Время достижения границы	417
9.1.4. Расщепленная вероятность	418
9.1.5. Распад неустойчивого состояния	420
9.2. Установление равновесия заселенностей каждой потенциальной ямы	421
9.2.1. Метод Крамерса	422
9.2.2. Пример: обратимая денатурация химотрипсिनогена	426
9.2.3. Бистабильность, описываемая управляющим уравнением для процессов рождения — гибели (случай одной переменной)	429
9.3. Бистабильность в системах со многими переменными	431
9.3.1. Распределение точек достижения границы	432
9.3.2. Асимптотический анализ среднего времени достижения границы	437
9.3.3. Метод Крамерса для случая нескольких измерений	439
9.3.4. Пример. Броуновское движение в потенциале с двумя ямами	441
10. КВАНТОВОМЕХАНИЧЕСКИЕ МАРКОВСКИЕ ПРОЦЕССЫ	449
10.1. Квантовомеханическая теория гармонического осциллятора	450

10.1.1. Взаимодействие с внешним полем	451
10.1.2. Свойства когерентных состояний	452
10.2. Матрица плотности и распределения вероятностей	457
10.2.1. Уравнение Неймана	459
10.2.2. P -представление Глаубера — Сударшана	460
10.2.3. Операторное соответствие	461
10.2.4. Применение к возмущенному гармоническому осциллятору	462
10.2.5. Квантовая характеристическая функция	464
10.3. Квантовые марковские процессы	465
10.3.1. Термостат	466
10.3.2. Корреляция гладких функций от операторов термостата	467
10.3.3. Квантовое управляющее уравнение для системы, взаимодействующей с термостатом	468
10.4. Примеры и приложения квантовых марковских процессов	473
10.4.1. Гармонический осциллятор	473
10.4.2. Действие возмущения на атом с двумя энергетическими уровнями	478
10.5. Временные корреляционные, функции квантовых марковских процессов	482
10.5.1. Квантовая теорема регрессии	484
10.5.2. Применение к гармоническому осциллятору в P -представлении	485
10.5.3. Временные корреляторы для двухуровневого атома	488
10.6. Обобщенные P -представления	489
10.6.1. Определение обобщенного P -представления	491
10.6.2. Теоремы существования	492
10.6.3. Связь с представлением Пуассона	495
10.6.4. Операторные тождества	495
10.7. Применение обобщенных P -представлений к уравнениям эволюции во времени	497
10.7.1. Комплексное P -представление	498
10.7.2. Положительное P -представление	498
10.7.3. Пример	500
Литература	503
Литература с комментариями	508
Предметный указатель	512

Предметный указатель

Автокорреляционная матрица стационарная 99	— — при учете детального баланса 196
Автокорреляционная функция 37, 91	Аддитивные инварианты 407
— — выраженная через собственные функции 176	Адиабатическое исключение быстрых переменных 247
— — для марковского процесса 98—100	— — в квантовом случае 468
	— — неоднородных мод в системах с

- реакциями и диффузией 398—401
- Аксиомы теории вероятностей 47
- Аррениуса* формула 187
- Баргмана* состояния, определение 454
- Беккера—Хаусдорфа* формула 465
- Бернулти* испытания 71
- распределение 107
- Бистабильная система, интерпретация с помощью трех состояний 424
- — установление квазиравновесия 421
- — химическая 298—303
- Бистабильность 414
- в системах со многими переменными 431
- Больцмана* управляющее уравнение 368, 406—410
- — — получение уравнения *Больцмана* 408
- — — разложение по обратному размеру системы 407, 411
- Броуновская частица 25
- Броуновское движение 20
- — в потенциале с двумя ямами 441—448
- — и адиабатическое исключение 247
- — непрерывность реализаций 76
- — поправки к уравнению *Смолуховского* 260—264
- — уравнение *Крамерса* 203
- Ван Кампена* разложение по обратному размеру системы 308
- Вектор сносов, определение 83
- Вероятность 46
- априорная 48
- выхода частицы за границу в потенциале с двумя ямами 425
- перехода 30
- поток, определение 162
- расщепленная в потенциале с двумя ямами 418
- совместная 50
- условная 51
- Вигнера* представление 490
- Винера—Хинчина* теорема 39
- Винеровский процесс 101—105
- — автокорреляционная функция 105
- — как предел случайных блужданий 108
- — недифференцируемость реализаций 103
- — независимость приращений 104
- — нерегулярность реализаций 103
- — собственные функции 177
- Вольтерры—Лотки* система см. Система хищник—жертва 29
- Время достижения границ, перехода через границу 186
- корреляций 43, 91
- релаксации, зависимость от заселенности пика 425—426
- Вязкость 25
- Гармонический осциллятор без затухания при внешнем воздействии 450
- — квантовая теория 450
- — определение 450
- — при внешнем воздействии в *P*-представлении 462
- — при воздействии флуктуирующего поля 477
- — с затуханием при воздействии поля 476, 477
- Гаусса* распределение 64—66
- Гипотеза масштабной инвариантности для аппроксимации управляющего уравнения 303
- Граничные условия для процессов рождения—гибели 316—318
- — для уравнения *Крамерса* 258,

- — — — *Смолуховского* 259, 260
- — — — для УФП в местах разрыва непрерывности 165
- — — — в случае многих переменных 192
- — — — на бесконечности 167
- — — — отражающие 164
- — — — поглощающие 164
- — — — для УФП обратного 173
- — — — — отражающие 174
- — — — — поглощающие 173, 174
- Двухуровневый атом, временные корреляции 489
- — при наличии внешнего воздействия 478—482
- Детальный баланс 194
- — для управляющего уравнения рождения—гибели 293—295
- — определение 194
- — при диффузии 374
- — условия для 198, 199
- Детерминированный процесс 84
- Дисперсия 30
- Диффузия в поле силы тяжести 170
- коэффициент 22
- определение потока 369
- при неоднородности и анизотропии 375
- уравнение 23
- флуктуационное дифференциальное уравнение в частных производных 378
- Достижение границ и переход через границу 114
- Зависящие от времени пуассоновские решения некоторого класса управляющих уравнений 298
- Закон больших чисел 57
- Инвариантность относительно обращения времени 197
- Ито* стохастический интеграл, определение 122
- — — свойства 127—131
- формула, вывод 135
- Когерентные состояния, определение 452
- — пуассоновское распределение для числа квантов 456
- Когерентные состояния, разложение оператора 455
- — разложение произвольного состояния 454
- — свойства 452—457
- Комбинаторная кинетика, определение 321
- Коммутационные соотношения 449
- Корреляции гладких функций от операторов термостата 467
- поведение при неустойчивости 392
- пространственно-временные 386
- пространственные 382—397
- Корреляционная длина 389
- Корреляционная функция временная *см.* Автокорреляционная функция
- Корреляционные функции *временные*
- для двухуровневого атома 488, 489
- — — для квантовых марковских процессов 482—489
- — — и квантовый гармонический осциллятор 485—488
- — — и *P*-представление 485
- — — определение 61
- — — термостата 467
- Корреляция 57
- Крамерса* метод для задач о достижении границ 422—426
- — для многомерного случая 439—441
- уравнение 203
- Крамерса—Мойала* разложение в случае управляющего уравнения *Больцмана* 407, 411
- — — — — рождения—гибели

— — и разложение по обратному
размеру системы 309

— — определение 307

Критическое замедление 316

Кумулянт 60—64

— факториальный 67

Кумулянтная производящая функция
61

— — — факториальная 67

Курца теорема 313

— — и разложение по обратному
размеру системы 313

Лагерра полиномы 181

Ланжевена уравнение 25, 34, 117—
120

Лапласа преобразование и
адиабатическое исключение 253

Линдберга условие 65, 75

Лиувилля операторы, определение
469

— уравнение 84

— — квантовое 460

Маркова процесс 70—116

— — автокорреляции 98—100

— — квантовый 449

— — — вывод 465—473

— — непрерывный, определение 75

— — однородный 92

— — — определение 88, 89

— — определение 71

— — стационарный 449

— условие (постулат) 24, 30, 71

Матрица диффузионная, определение
83

— корреляционная 57

— плотности 457—459

— — свойства 458, 459

— спектральная при наличии
детального баланса 197

Метастабильность 414

Микроскопическая обратимость 207

Многовременные средние в

квантовом случае 472

Множества нулевой вероятности 55

Множество событий 45, 46

Момент 57

Найквиста формула 40—44

Независимость 27, 53

Неймана уравнение 459

Нелинейный поглотитель 497

Непрерывность стохастических
процессов 73—75

Неупреждающая функция,
определение 124

Неустойчивое состояние, распад 420

Обратное управляющее уравнение и
время достижения границ 318

Онсагера соотношения 208—214

Оператор проектирования,
соответствующий
адиабатическому исключению
250, 251

— рождения 450

— уничтожения 450

Орнштейна—Уленбека процесс,
временная корреляционная
матрица для стационарного
состояния 154

— — — — — функция 111

— — — время выхода из области R
220

— — — в случае разложения по
малому шуму для СДУ 230

— — — зависящий от времени 158

— — — и квантовый
гармонический осциллятор 475

— — — и соотношения *Онсагера* 210

— — — СДУ 148, 149

— — — — со многими
переменными 151 — 155

— — — собственные функции 179

— — — спектральная матрица 154

— — — стационарная дисперсия 153

— — — — — в случае двух
переменных 154

- — — стационарное распределение 170
- Осциллятор с флуктуирующей частотой 146
- Паули* матрицы, определение 478
- Плотность распределения вероятностей 54
- Подчинение тихое 280
- шумное 281
- Потенциал с двумя ямами 185
- — — диффузия 415—421
- Потенциальный барьер, переход 184—187
- Почти навверное 55
- Предел в среднеквадратичном 68
- — — при определении стохастического интеграла 122
- по вероятности 68
- по распределению 69
- последовательности случайных переменных 67
- почти навверное 68
- Представление взаимодействия 472
- — и двухуровневый атом при внешнем воздействии 479
- P*-представление *Гнаубера*—*Сударшана* 460—462, 491
- — операторные соответствия 460
- комплексное, определение 491
- — операторные тождества 496
- обобщенное -489—502
- — и уравнения эволюции 497—502
- — определение 491
- положительное, определение 492
- — операторные тождества 496
- теорема существования 492—496
- Q*-представление 490
- R*-представление 490
- Принцип подчинения 250
- Проблемы расходимости для нелинейных систем с реакциями и диффузией 396
- Производящая функция 33
- — для уравнения рождения—гибели 333, 334
- — для распределения *Пуассона* 66
- — моментов 59
- Пуассона* представление 292, 338—367
- — в системе с реакциями и диффузией 381, 382
- — действительное, определение 343
- — и временные корреляционные функции 351—358
- Пуассона* представление и мономолекулярные реакции 340
- — и управляющее уравнение Больцмана 409, 413
- — комплексное, определение 343
- — положительное, определение 347—351
- — связь с обобщенным *P*-представлением 495
- распределение 33, 66, 67
- — релаксация в системе с реакциями и диффузией 384—386
- Размер системы 291
- Рассеяние лазерного излучения 27
- Реализация непрерывная 24, 73—75
- Свойства эргодичности и стационарные процессы 89
- СДУ см. Стохастическое дифференциальное уравнение
- Сепаратриса 436, 448
- алгебра 46
- Система хищник—жертва 28
- — — химическое УФП 268—273
- с реакциями и диффузией 368
- — — — фазовый переход второго рода 393
- — — — флуктуационные дифференциальные уравнения

в частных производных 480
Системы рождения—гибели, случай
многих переменных 321
Случайная величина 49
— — гауссова 64
Случайные блуждания 105—109
— — приближенное описание
уравнением *Фоккера—Планка*
304
— величины, независимые 53
— — — и характеристическая
функция 59
— — — и центральная предельная
теорема 65
Случайный процесс диффузионный
83
— — — аппроксимация
скачкообразным процессом
303—307
— — *Коши* 76
— — определение 70
— — *Пуассона* 33, 109—111
— — рэлеевский 190, 194
— — — собственные функции 180
— — рождения—гибели 28
— — — для потока 403—406
— — сепарабельный 70
— — скачкообразный 82
— — стационарный, приближение
93—98
— — телеграфный 115—116
— — — и двухуровневый атом при
наличии внешнего воздействия
481, 482
— — третьего порядка 236
Смолуховского уравнение 249, 250
— — для диффузии в потенциале с
двумя ямами 422
— — и задача о переходе через
потенциальный барьер 445
— — определение 249, 256
— — поправки 260—264
— — уточненное 263

— — — и задача о достижении
границ 445
Собственные функции для УФП,
вариационный принцип 218
— — и автокорреляционная матрица
218
— — и время достижения границ 222
— — и матричная спектральная
плотность 218
— — и условная вероятность 176,
218
Событие 45
Спектральная плотность 37
— — равномерная 41
Среднее значение 54, 56
Среднеквадратичное отклонение 57
Статистическая механика 25
Стационарность 40
Стационарные системы 39
Столкновения и потоки 410—413
— управляющее уравнение
Больцмана 406—410
Стохастический интеграл,
определение 98
Стохастическое дифференциальное
уравнение 25, 26, 35, 36, 117
— — — в частных производных 371
— — — зависимость решений от
начальных условий 143
— — — — от параметров 143
— — — и положительное
представление Пуассона 349—
351
— — — линейное 155—157
— — — — для одной переменной
155
— — — — со многими переменными
157
— — — определение и свойства
132—144
— — — при стремлении цветного
шума к белому 264—273
— — — разложение по малому шуму

- 230—239
- — — связь с УФП 136
- — — *Стратоновича* 139
- — — — как предел стремления
недельтакоррелированного
воздействия к
дельтакоррелированному 264—
273
- — — — определение и связь с
СДУ *Ито* 139—141
- Стратоновича* стохастический
интеграл 124
- Теорема регрессии 99
- — квантовая 484, 485
- Термостат, определение 466
- Тримолекулярная реакция как предел
бимолекулярной реакции 358—
363
- Управляющее уравнение 82, 291
- — аппроксимация уравнением
Фоккера—Планка 303
- — в случае многих переменных
321
- — — — — для системы с
диффузией 373, 374
- — — — — разложение
Крамерса—Мойала 326
- — в фазовом пространстве 401
- — диффузии, непрерывная форма
374—379
- — — разложение по обратному
размеру системы 375
- — квантовое, вывод 468—473
- — — определение 472
- — — для гармонического
осциллятора 473—477
- — описывающее реакции и
диффузию 480
- — — — — разложение по
обратному размеру системы 380
- — разложение по обратному
размеру системы 308—316
- — рождения—гибели 30, 34
- — — — для квантового
гармонического осциллятора
473
- — — — для одной переменной
292
- — — — и бистабильность 429—
431
- — — — разложение по обратному
размеру системы 326
- — случай одной переменной,
стационарное решение 293—
295
- — среднее время достижения
границ 318—321
- — стационарные решения без
учета детального баланса 325
- Усреднение по ансамблю 39
- УФП см *Фоккера—Планка*
уравнение
- Феноменологическая сила 210
- Феноменологический поток 210
- Флуктуации критические 314
- — и разложение по обратному
размеру системы 314
- Флуктуации локальные и глобальные
389
- Флуктуационно-диссипационная
теорема, применение 211
- Фоккера—Планка* уравнение 160
- — — в комплексном P -
представлении 498
- — — — — условие
потенциальности 500—502
- — — в положительном P -
представлении 498—500
- — — в P -представлении 476, 496
- — — вариационный принцип для
собственных функций 217
- — — граница входная 166
- — — — естественная 166
- — — разложение по малому
шуму 239
- — — с одной переменной

- — — — — потенциальное решение 168, 169
- — — — — собственные функции 174—181
- — — — — среднее время достижения границ 183
- — — со многими переменными, собственные функции 214
- — — — — стационарные решения 193, 194
- — — — — условие потенциальности 193
- — — стационарное распределение, асимптотический метод 246
- — — химическое 326
- Хакена* модель 278
- Хаос 19
- Характеристическая функция 59
- — гауссова распределения 64
- — и моменты 59
- — квантовая 464, 465
- Химическая реакция
 - $A + 2X \leftrightarrow 3X$, $A \leftrightarrow X$ 365
 - — управляющее уравнение 298, 299
 - в представлении *Пуассона* 358, 359
 - $A + X \leftrightarrow 2X + D$, $B + X \leftrightarrow C$, решение управляющего уравнения 334—336
 - $A + X \leftrightarrow 2X$, $B + X \leftrightarrow C$, комплексное представление *Пуассона* 344—346
 - — положительное представление *Пуассона* 350
 - — пространственно-распределенная 393—397
 - — решение в представлении *Пуассона* 340—343
 - $A + Y \leftrightarrow X + Y$, $Y \leftrightarrow 2X$, исключение промежуточного
- соединения 359—363
- $B + X \leftrightarrow C$, $A + X \leftrightarrow 2X$, пространственно-распределенная 38 —393
- $B \rightarrow X$, $2X \rightarrow A$ и положительное представление *Пуассона* 350, 351
- — комплексное представление *Пуассона* 346, 347
- $B \leftrightarrow X$, $A + X \rightarrow 2X$, аналогия с гармоническим осциллятором 474
- $X + A \leftrightarrow 2X$, УФП 171
- — химическое 327—333
- $X \leftrightarrow A$ и разложение по обратному размеру системы 310
- управляющее уравнение 295
- $X \leftrightarrow Y$, как система с реакциями и диффузией 382—386
- $X \leftrightarrow Y \leftrightarrow A$ 273
- химическое УФП 327—333
- $X_1 \leftrightarrow 2X_2$, уравнение реакции с диффузией 381
- $X_1 \leftrightarrow X_2$, решение управляющего уравнения 337, 338
- в системе хищник—жертва, УФП 328—333
- исключение короткоживущих промежуточных продуктов 273
- мономолекулярная 340
- нелокальная 397
- связь между локальным и глобальным описанием 398—402
- Химические реакции, теория переходного состояния 424
- Химическое уравнение реакции с диффузией 370
- Химотрипсиноген, обратимая денатурация 426
- Центральная предельная теорема 65
- Чепмена—Колмогорова* уравнение

24, 72, 73

— — — дифференциальное 76—82

— — — — обратное 87

Шредингера уравнение 451

Шум 31

— белый 40—44, 117—120

— — как предел цветного шума 264

— дробовой 32

— тепловой 40—44

— третьего порядка 359

— — — определение 363, 364

Эйнштейна уравнение и

двухуровневый атом 481

Эргодичность 39

Эрмита полиномы 179

— — при адиабатическом

исключении 255

Предисловие редактора перевода

Предлагаемое руководство по статистическим методам имеет ряд особенностей, которыми оно выгодно отличается от других руководств. Здесь в первую очередь следует назвать систематичность и широту охваченного материала. В книгу вошло много важных и интересных вопросов — от стохастических интегральных и дифференциальных уравнений до бистабильности и квантовых марковских процессов. Она содержит целый спектр результатов, представляющих интерес для широкого круга читателей — физиков, химиков, биологов. Большое место в этой книге занимает как теория диффузионных процессов, описываемых уравнением Фоккера — Планка, так и теория скачкообразных процессов, описываемых управляющим уравнением. Много внимания уделено приближенным методам, в частности тем методам, которые позволяют свести различные уравнения, описывающие, например, скачкообразные процессы или квантовые марковские процессы, к уравнению Фоккера — Планка.

В широте охваченного материала можно убедиться, уже читая гл. 1. В ней на равных рассматриваются тепловые и дробовые шумы, теория которых важна для радиотехники, и процессы рождения — гибели, играющие большую роль в биологии и химии.

Основным главам книги предпослано изложение математических основ теории, а именно понятий теории вероятностей (гл. 2). Это удачное изложение. Здесь подробнее, чем во многих прикладных руководствах излагаются многие представления и результаты теории вероятностей. Так, например, дается определение σ -алгебры, вводится пространство Ω элементарных событий, рассматриваются различные определения сходимости случайных величин и соотношения между ними.

Особенностью предлагаемой книги является также то, что в ней кроме уравнений Фоккера — Планка всесторонне освещаются стохастические интегралы и уравнения и рассматривается много их применений. Методы расчета, основанные на использовании стохастических уравнений, часто позволяют получить окончательные результаты

быстрее, чем при помощи уравнения Фоккера — Планка. Поэтому включение данного материала весьма полезно.

Автор книги является горячим сторонником стохастических интегралов и уравнений Ито в противовес S -интегралам и уравнениям. При сравнении различных интерпретаций стохастических интегралов и уравнений для диффузионных процессов нужно иметь в виду следующее. По правилам Ито при замене переменных нужно учитывать не только первые, но и вторые производные, в результате формулы преобразований становятся намного длиннее. В случае S -выражений можно пользоваться обычными правилами, которые пригодны для гладких функций, так что вторые производные не нужно принимать во внимание. Зато усреднение стохастических S -выражений производится несколько сложнее. Так, для получения вектора сносов, входящего в уравнение Фоккера — Планка, нужно пользоваться формулой (4.3.43а). Если рассматривается процесс с производной, имеющей конечную дисперсию, который служит аппроксимацией точного диффузионного процесса, то уравнение для первого процесса совпадает с S -формой стохастического уравнения для второго. Это удобно. В остальном же каждая форма стохастического интеграла имеет свои преимущества и выбор той или иной формы определяется личным вкусом.

В предлагаемом руководстве прекрасно изложен ряд систематических приближенных методов расчета, среди них метод малого шума, метод адиабатического исключения, метод разложения по обратному размеру системы. При этом их применение проиллюстрировано многими примерами. Этот материал весьма полезен с точки зрения практических приложений.

Коснемся также весьма нетрадиционного материала, помещенного в книге. Это в первую очередь пуассоновское представление, о котором идет речь в гл. 7, 8. Это представление является оригинальным, так как оно предложено самим автором книги совместно с С. Чатурведи. Пуассоновское представление полезно потому, что оно позволяет перевести управляющее уравнение для бимолекулярных реакций в уравнение Фоккера — Планка, записанное для других переменных. По этому поводу хочется только сказать, что в случае пуассоновского представления нужно быть очень осторожным при вычислении многовременных моментов и распределений. Дело в том, что переменная пуассоновского представления как функция от времени не является марковским процессом при марковском исходном процессе.

Весьма нетрадиционно также помещение главы, посвященной квантовым марковским процессам (гл. 10) в подобную книгу, где остальной материал не квантовый. Здесь очень кратко изложены понятия и

факты квантовой теории. Конечно, это изложение весьма неполно. Так, не рассматриваются операторы координат и импульсов, не упоминается теория представлений. Можно думать, однако, что такое краткое введение в квантовую теорию весьма полезно. Читатель сможет более полно ознакомиться с теорией по другим руководствам. Из всего многообразия методов квантовой теории автор выбирает один — метод, основанный на когерентных состояниях и P -представлении, и этот метод позволяет ему многого достичь.

В гл. 10 применение метода адиабатического исключения приводит к квантовому управляющему уравнению, которое, по определению, описывает квантовый марковский процесс. Затем рассматриваются частные случаи этого процесса, а также доказывается квантовая теорема регрессии. Следует отметить, что квантовые марковские процессы, рассмотренные в гл. 10, специфичны и их нельзя использовать для описания равновесных процессов, которые являются прямым квантовым обобщением неквантовых равновесных марковских процессов, протекающих при определенной температуре.

Перевод выполнили Ал. А. Коломенский (предисловия, гл. 1—3), А. С. Доброславский (гл. 4—7) и А. В. Толстолятенко (гл. 8—10). Некоторые замеченные опечатки и неточности при переводе исправлены.

В заключение хочется выразить надежду, что предлагаемая книга будет полезна широкому кругу специалистов.

Р. Л. Стратонович

Предисловие редактора серии «Синергетика»

Прежде шпрингеровская серия по синергетике включала, как правило, труды конференций по этой новой междисциплинарной области исследований, что диктовалось ее быстрым развитием. Однако по мере того как синергетика «взрослеет», все более желательно представить относящиеся к ней экспериментальные и теоретические результаты с единых позиций и дать студентам и научным работникам руководства по практическим применениям.

Приступая к изданию серии, мы подчеркивали, что формирование пространственных, временных или функциональных структур в сложных системах можно рассматривать адекватно только при должном учете стохастических процессов. Имея это в виду, я изложил основы теории стохастических процессов в моей книге «Синергетика. Введение», с которой началась данная серия. Однако научным работникам и студентам, желающим более глубоко ознакомиться с теорией таких процессов, без сомнения, необходимо руководство, гораздо более исчерпывающее. Этот пробел восполнился книгой профессора Криспина Гардинера. Она закладывает основы для последующих томов серии, в немалой степени использующих методы и понятия теории стохастических процессов. В число этих томов входят книги «Индукцированные шумом переходы» В. Хорстхемке, Р. Лефевра, «Кинетическая теория электромагнитных процессов» Ю. Л. Климонтовича и «Концепции и модели количественной социологии» В. Вейдлица и Г. Хаага.

Хотя синергетика дает нам весьма общие концепции, она ни в коей мере не является «искусством для искусства». Напротив, явления, которые она изучает, имеют большое значение для ряда самоорганизующихся систем, таких, как биологические системы и системы, используемые при конструировании приборов, скажем, в электронике. Поэтому мне особенно приятно, что данная книга написана ученым, который сам использует и развивает методы теории случайных процессов, например в квантовой оптике и при исследовании химических реакций. Книга профессора К. Гардинера будет полезна не только студентам и ученым, работающим в области синергетики, но также гораздо более широкой аудитории, интересующейся теорией случайных процессов и ее важными приложениями к разнообразным проблемам.

Предисловие к 2-му изданию

В этом издании исправлены замеченные опечатки и внесены некоторые более существенные изменения. В частности, я переписал заново разд. 4.2.3 и 4.3.6, используя более корректное определение стохастического интеграла Стратоновича, и прояснил прежде запутанное изложение материала о границах в разд. 5.2.1д. Я также переписал разд. 6.3.3 и 6.4.5в с учетом последних достижений в этих областях, несколько расширил библиографию и добавил ссылки на новую литературу.

Пасадена, Калифорния
Март, 1985

К.В. Гардинер

Предисловие к 1-му изданию

В этой книге я стремился сравнительно простым языком и в причинно-следственно связанной форме изложить все те формулы и методы, которые рассеяны в научной литературе по стохастическим методам и используются в течение последних 80 лет. Могло бы показаться, что это не нужно, поскольку есть ряд книг с названиями «Стохастические процессы» или близкими этому. Однако внимательное их прочтение скоро показывает, что цель написания этих книг не совпадает с моей. Есть книги, чисто теоретические и сильно математизированные, есть книги, относящиеся к электротехнике и теорий связи, есть книги для биологов. Многие из них очень хороши, но ни одна из них не охватывает те приложения, которые в последнее время так часто появляются в статистической физике, физической химии, квантовой оптике, электронике и во многих других областях теоретических исследований, образующих часть предмета исследования синергетики, которой посвящена данная серия, включающая и эту книгу.

Основной новый момент в подходе этой книги состоит в том внимании, которое уделено методам аппроксимации проблем или их переформулировке для последующей аппроксимации. Я полностью сознаю, что многие исследователи не найдут здесь используемых ими методов. Мой критерий отбора состоял в том, *систематична* ли данная аппроксимация. Многие приближения основаны на необоснованных или неконтролируемых предположениях и оправдываются апостериори. Такие приближения не могут быть предметом систематизирующей книги, по крайней мере до тех пор пока они не будут точно сформулированы и область их применимости не будет проконтролирована. В некоторых случаях я смог изложить ряд аппроксимаций на систематической основе (и они вошли в книгу), в других случаях мне это не удалось. Часть вопросов была исключена по соображениям места и времени. Возможно также, что некоторые вопросы я просто упустил из виду.

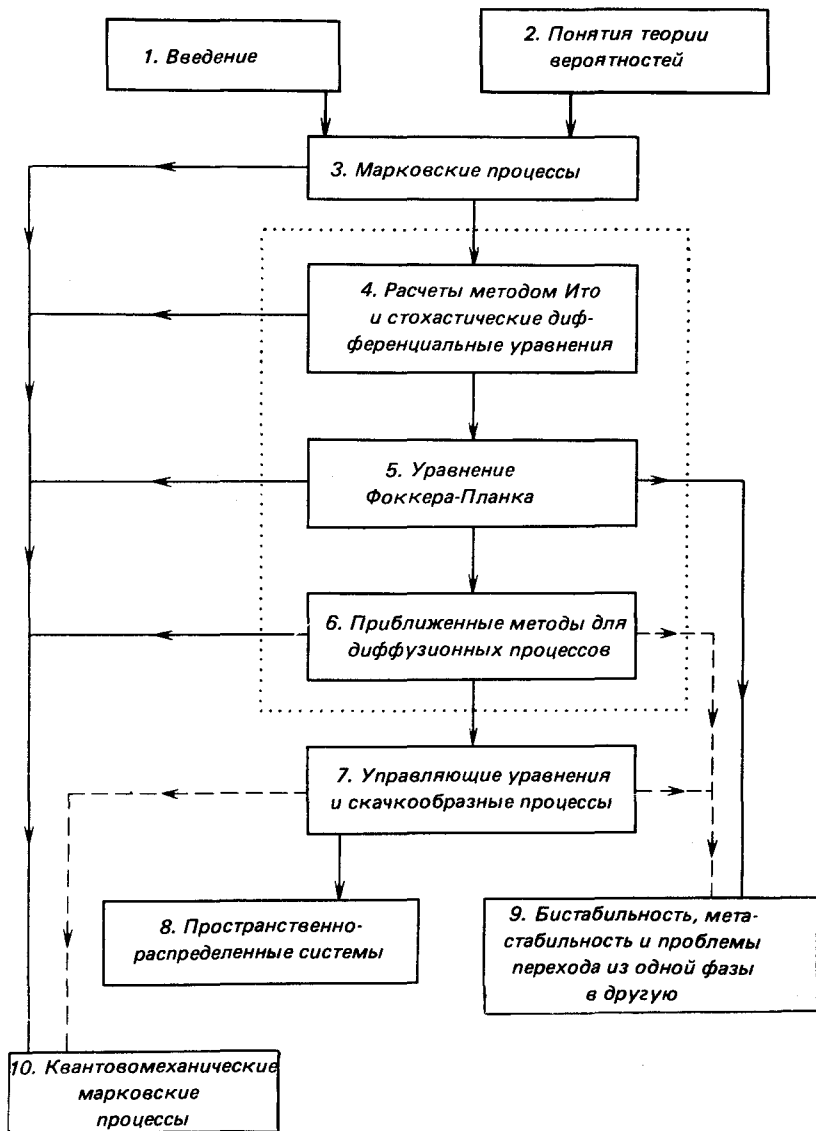
Несколько слов о предполагаемой подготовке. Читатель должен хорошо владеть практикой расчетов, включая контурное интегрирование, матричную алгебру, дифференциальные уравнения, как обыкновенные, так и в частных производных, на уровне, предполагаемом по-

сле окончания института по специальностям прикладная математика, физика, или теоретическая химия. Эта книга — не запись специального курса лекций, хотя она и включает раздел, который был использован в курсе по физике для аспирантов в университете Вайкато. Этот раздел содержит материал, который, как я предполагаю, хорошо знаком любому аспиранту, специализирующемуся по квантовой оптике и теории стохастических процессов. В книге есть, таким образом, определенный уклон в сторону моих личных интересов, что является привилегией автора.

Я ожидаю, что читать книгу будут в основном теоретики (физики и химики), и исходя из этого, выбрал общий стандарт изложения. Эта книга не является строгой в математическом смысле, но она содержит такие результаты, которые, я уверен, доказываются строго, и эти доказательства могут быть развиты из приводимых здесь примеров.

Построение книги показано на представленной схеме. Некоторых читателей может удивить, что изложив общие свойства марковских процессов, в дальнейшем рассмотрении я использую концепцию стохастических дифференциальных уравнений, которая хотя и привлекательна, но сложна. Я поступил так, поскольку из своего опыта знаю, что методы стохастических дифференциальных уравнений просты для того, кто уже освоил технику Ито. Последние я ввожу в гл. 4 весьма доступным образом, не встречавшимся мне ни в одной предыдущей книге. Это правда, что стохастические дифференциальные уравнения не содержат ничего, что не содержалось бы в уравнении Фоккера — Планка, но стохастические дифференциальные уравнения настолько удобнее в обращении, что лишь ревностный пурист пытался бы избежать этого подхода. С другой стороны, только пуристы из противоположного лагеря стали бы пытаться развивать теорию без уравнения Фоккера — Планка. В гл. 5 оно вводится как дополнительный и иногда эквивалентный метод исследования тех же проблем. Гл. 6 завершает то, что можно было бы считать «сердцевиной» книги, изложением двух основных подходов при аппроксимации: разложения по малому шуму и адиабатического исключения.

Остальная часть книги строится вокруг этой сердцевины, так как очень многие методы рассмотрения скачкообразных процессов в гл. 7, а также пространственно-распределительных систем (которые сами лучше всего описывать как скачкообразные процессы) обусловлены сведением системы к аппроксимирующему диффузионному процессу. Таким образом, хотя *логически* понятие скачкообразного процесса гораздо проще, чем понятие диффузионного процесса, с точки зрения аналитики и методов расчета верно обратное.



Гл. 9 включена вследствие практического значения бистабильности и, как указано на схеме, она почти независима от всего, кроме первых пяти глав. Опять-таки, я включил только систематические методы, поскольку в этой области имеется множество частных методов.

Гл. 10 требует некоторых знаний по квантовой механике. Я надеюсь, что она интересна математикам, изучающим стохастические процессы, поскольку в этой области еще много предстоит сделать. Это направление имеет большое практическое значение. Оно естественным образом вводит новые представления в теорию стохастических процессов, в частности, весьма привлекательное понятие стохастических процессов на комплексной плоскости; применение этого понятия оказывается единственным путем приведения квантовых процессов к обычным стохастическим. На отмеченном выше направлении имеется большое поле деятельности, но я с разочарованием заметил, что математики не проявляют интереса к квантовым марковским процессам. Например, мне не известно ни одного рассмотрения проблем достижения и пересечения границы в квантовых марковских системах.

Следует также упомянуть о том, что не вошло в книгу. Я ограничиваюсь только марковскими процессами или системами, которые могут быть включены в рамки марковских процессов. Это значит, что совсем не вошли работы по нелинейным марковским стохастическим дифференциальным уравнениям, о чем я сожалею. Однако, эта область довольно хорошо освещена ван Кампеном и достаточно полно отражена в его книге по стохастическим процессам.

Были исключены также и другие вопросы, поскольку я вижу, что они еще не готовы для окончательной формулировки. Например, теория адиабатического исключения пространственно-распределенных систем, теория гидродинамики с учетом флуктуаций, методы ренормализационной группы для стохастических дифференциальных уравнений и связанные с ними критические явления. По всем этим вопросам имеется обширная литература и скоро потребуются их обоснованное, в разумной степени математизированное изложение.

Кроме того, для простоты я, как правило, давал один вариант формулировки рассмотренных методов. Так, существуют несколько различных способов формулировки результатов метода адиабатического исключения, хотя в тексте использованы только некоторые из них. Моя формулировка квантовых марковских процессов и P -представлений только одна из многих. Для того чтобы дать обзор всем формулировкам, потребовалась бы огромная и трудно читаемая книга. Однако, где уместно, я дал специальные ссылки, и дополнительный материал можно найти в общем списке литературы.

Благодарности

Я горячо признателен проф. Герману Хакену за приглашение написать эту книгу для шпрингеровской серии по синергетике и за помощь в устройстве моего годичного профессорского отпуска в Штутгарте, где я выполнил большую часть первоначального исследования данной темы и начал писать книгу.

Практическая реализация книги была бы невозможна без участия Кристины Коутс, чья способность уверенно печатать, несмотря на неразборчивость моего почерка и исправления, никогда не перестанет вызывать мое восхищение. Существенная помощь Мойры Стейн-Росс в проверке формул и согласованности текста явилась услугой, значительность которой может быть оценена только автором.

С тех пор как я впервые заинтересовался стохастическими явлениями, я немало получил от общения со многими людьми. Особенно я хочу поблагодарить Л. Арнольда, Р. Грэхема, С. Гроссмана, Ф. Хааке, П. Хознберга, В. Хорстхемке, Н. Г. ван Кампена, Р. Ландауэра, Р. Лефевра, М. Малек-Мансура, Г. Николиса, А. Нитцана, П. Ортолеву, Дж. Росса, Ф. Шлэгля и У. Титулаэра.

Моим коллегам и студентам в университете Вайкато принадлежит значительная доля заслуг в выполнении представленной в книге работы. Я хочу выразить признательность Дану Уолсу (он первый ввел меня в круг обсуждаемых в книге проблем и с ним мы сотрудничали в течение многих лет), Говарду Кармайклу, Петеру Друммонду, Кену Макнейлу, Герарду Милбурну, Мойре Стейн-Росс и в особой степени Сабхашу Чатурведи, знания которого в данной области были особенно ценны для меня.

Я посвящаю эту книгу моей жене Хезер и моим детям Симону и Аманде, которые проявляли необычайное терпение к тому, что я столько времени отдал осуществлению этого замысла.

Отрывок из статьи А. Эйнштейна, который приведен в разд. 1.2.1 перепечатан с разрешения Еврейского университета (Иерусалим), который владеет авторскими правами.

Диаграмма, приведенная на рис. 1.3,б, воспроизведена с разрешения издательского отдела Принстонского университета.

Список обозначений

Латинские буквы

a^+, a	Операторы рождения и уничтожения
ac-lim	Предел почти наверное
$A(z, t)$	Вектор сноса
$A_a[J(\alpha)]$	Вектор сноса уравнения Фоккера — Планка в представлении Пуассона
$\hat{A}_a(\eta)$	Вектор сноса в представлении Пуассона
$\underline{B}(z, t)$	Диффузионная матрица
$B_{ab}[J(\alpha)]$	Диффузионная матрица уравнения Фоккера — Планка в представлении Пуассона
$\hat{B}_{ab}(\eta)$	Диффузионная матрица в представлении Пуассона без множителя $\varepsilon^2 = V^{-1}$
d_{ij}	Вероятность диффузионного скачка
$d\tilde{W}(q, t)$	Преобразование Фурье локального винеровского процесса
$dW(r, t)$	Локальный винеровский процесс, зависящий от пространственных переменных
$\underline{D}(r)$	Недиагональный тензор диффузии, зависящий от пространственных переменных
$D\{X\}$	Дисперсия величины X
\mathcal{D}	Область интегрирования в представлениях Пуассона
$(\mathcal{D} \eta)(r, t)$	Нелокальная диффузия
$\text{erf}(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^x dt e^{-t^2}$	Функция ошибок
$f(\alpha, t)$	Квазивероятность представления Пуассона
$f(\alpha, t \alpha', t')$	Условная квазивероятность представления Пуассона

$G(s, t)$	Производящая функция
$G(\tau)$	Автокорреляционная функция
H	Оператор Гамильтона
$H_n(x)$	Полином Эрмита
$j(r, t)$	Диффузионный поток
$J(x)$	Поток вероятности в скачкообразном процессе
$J(z, t)$	Поток вероятности
$J_A(\alpha)$	Поток вероятности в представлении Пуассона
$\hat{J}_A[\eta]$	Поток вероятности в представлении Пуассона
k_A^\pm	Скорость химической реакции в управляющем уравнении
$L_n(x)$	Полином Лагерра
ms-lim	Предел в среднеквадратичном
M^A	Параметр конечного состояния в управляющем уравнении химической реакции
\mathcal{N}	Нормировочная постоянная
N^A	Параметр начального состояния в управляющем уравнении химической реакции
$p(x_1, t_1; x_2, t_2; x_3, t_3; \dots)$	Совместная плотность распределения вероятностей
$p(x_1, t_1 x_2, t_2)$	Условная плотность распределения вероятностей
$P(A B)$	Условная вероятность
P	Проекционный оператор в методе адиабатического исключения
$P(x, t x', t')$	Условная вероятность в скачкообразном процессе
$P(\alpha, \alpha^*)$	P -функция Глаубера — Сударшана
$P(\alpha, \beta)$	Обобщенная P -функция
$P_\lambda(x)$	Собственные функции прямого оператора Фоккера — Планка

q	Переменная в преобразовании Фурье
$Q_\lambda(x)$	Собственные функции обратного оператора Фоккера — Планка
$r^A = M^A - N^A$	
$R(\alpha^*, \beta)$	R -функции Глаубера
st-lim	Предел по вероятности
$S(\omega)$	Спектральная плотность
S^+, S^-, S_z	Матрицы Паули
$t^+(x), t^-(x)$	Вероятность перехода в единицу времени для скачков
$t_A^\pm(x)$	Вероятность перехода в единицу времени в управляющих уравнениях для химических реакций
$T(x)$	Среднее время достижения границы
V, Ω	Объем системы
$W(t)$	Винеровский процесс
$W(t)$	Многомерный винеровский процесс
$W(x z, t)$	Вероятность скачка
$x[V, t] = \int_V d^3r \rho(r, t)$	Число молекул в объеме V
Греческие буквы	
$\alpha, \alpha, \alpha(t), \alpha(t)$	Переменная в представлении Пуассона
$\underline{\alpha} = (\alpha, \beta)$	
$\alpha_n(x)$	Условный момент для величины скачка в единицу времени
Γ_i	Оператор термостата
$\delta(x)$	Дельта-функция Дирака
$\delta(m, n) \equiv \delta_{m, n}$	Символ Кронекера
$\frac{\delta F(\rho)}{\delta \rho(r)}$	Функциональная производная
η	Концентрационная переменная в представлении Пуассона
κ_A^\pm	Скорость химической реакции, выраженная через концентрации

$\Lambda(\alpha, \beta) = \alpha\rangle\langle\beta^* / \langle\beta^* \alpha\rangle$	Мера, используемая в представлениях Пуассона
$\mu(\alpha)$	Флуктуирующая сила
$\xi(t)$	Вероятность выхода через точку a
$\pi_a(x)$	Матрица плотности (или оператор плотности)
ρ	Матрица плотности для канонического ансамбля
$\rho(T)$	Концентрация
$\rho(r, t)$	Среднеквадратичное отклонение величины X
$\sigma[X]$	Время корреляции
τ_c	Производящая функция кумулянтов
$\Phi(s)$	Производящая функция моментов
$\phi(s)$	Квантовая характеристическая функция
$\chi(\lambda, \lambda^*), \chi(\lambda)$	Параметр размера системы
Ω, V	

Математические символы

$[A, B] = AB - BA$	Коммутатор операторов A, B
$\langle X_i, X_j \rangle \equiv \langle X_i X_j \rangle - \langle X_i \rangle \langle X_j \rangle$	Корреляционная матрица X_i и X_j
$\langle R \rangle$	Среднее значение величины R
$\langle X^r \rangle_f$	Факториальный момент величины X
$\langle \alpha(t) [\alpha', s] \rangle$	Среднее значение переменной $\alpha(t)$ при начальном условии $\alpha(s) = \alpha'$
$\langle \langle X^r \rangle \rangle_f$	Факториальный кумулянт величины X
$\langle \langle X_1^{m_1} X_2^{m_2} \dots X_n^{m_n} \rangle \rangle$	Кумулянты переменных X_1, X_2, \dots, X_n
$ n\rangle$	Состояние, нумеруемое целым числом
$ \alpha\rangle$	Когерентное состояние
$ \alpha\rangle$	Состояние Баргмана
$\int_{t_0}^t G(t') dW(t')$	Стохастический интеграл Ито
$S \int_{t_0}^t G(t') dW(t')$	Стохастический интеграл Стратоновича
$\tilde{f}(s) = \int_0^\infty e^{-st} f(t) dt$	Преобразование Лапласа от функции $f(t)$

Введение

1.1. ПРЕДЫСТОРИЯ ВОПРОСА

Можно сказать, что вплоть до конца XIX в. теоретики изучали дифференциальные уравнения и моделирование явлений природы их детерминированными решениями. В то время бытовало представление, что, зная все начальные данные, можно с определенностью предсказывать будущее.

Теперь мы знаем, что это не так по крайней мере по двум причинам. Во-первых, рождение квантовой механики в первой четверти XX в. дало начало новой физике, а значит, и новым теоретическим основам всех наук, которые содержат чисто статистический элемент. Во-вторых, уже позднее возникла концепция хаоса, которая показала, что даже довольно простые системы дифференциальных уравнений обладают поразительным свойством демонстрировать существенно непредсказуемое поведение. Разумеется, можно предсказать будущее такой системы, если известны точные начальные условия, однако любая неточность в их задании так быстро возрастает, что практически никакой предсказуемости нет. Конечно, само существование хаоса не столь удивительно, поскольку это лучше согласуется с нашим повседневным опытом, чем полная предсказуемость. Удивительно другое —

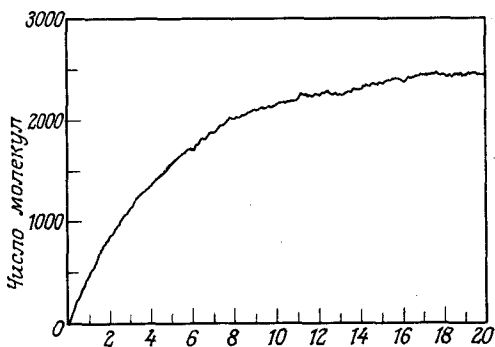


Рис. 1.1. Зависимость выхода реакции изомеризации $X \rightleftharpoons A$ от времени, полученная стохастическим моделированием.

сколько времени потребовалось, чтобы сделать шаг к описанию и пониманию этого явления.

В этой главе мы не будем специально останавливаться на хаосе и квантовой механике. Я хочу дать краткое полуисторического характера описание того, как возникла теория флуктуационных явлений и каковы ее основные положения. Уже сама полезность моделей, способных давать предсказания, показывает, что жизнь не полностью случайна. Однако у предсказуемости существует предел, и основная часть этой книги посвящена как раз моделям ограниченной предсказуемости. При тщательных научных измерениях обычно получают данные, похожие на те, которые представлены на рис. 1.1 (здесь это рост числа молекул вещества X , образовавшихся при химической реакции вида $X \rightleftharpoons A$). Налицо четко детерминированное поведение, и оно воспроизводимо в отличие от сопутствующих невоспроизводимых флуктуаций.

1.2. НЕКОТОРЫЕ ПРИМЕРЫ

1.2.1. БРОУНОВСКОЕ ДВИЖЕНИЕ

Взвешенные в воде мельчайшие пыльцевые зерна находятся в очень оживленном и беспорядочном движении. Это явление систематически исследовал Роберт Броун в 1827 г., и в его честь оно получило название *броуновского движения*. Броун был ботаником, к тому же очень известным, и конечно проверил, не есть ли это движение какое-то проявление жизни. Показав, что оно присутствует в суспензии любых мельчайших частиц (полученных из стекла, минералов и даже из осколка сфинкса), он исключил какое-либо специфически органическое его происхождение. Иллюстрацией броуновского движения служит рис. 1.2.

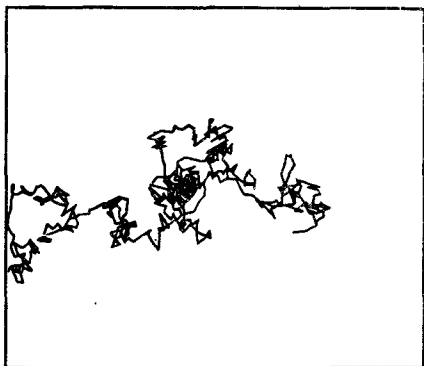


Рис. 1.2. Движение броуновской частицы.

Броуновское движение долго оставалось загадкой: удовлетворительное объяснение отсутствовало вплоть до 1905 г., когда Эйнштейн [1.2] опубликовал свое объяснение под довольно скромным названием "Über die von der molekular-kinetischen Theorie der Wärme geforderte Bewegung von in ruhenden Flüssigkeiten suspendierten Teilchen" (О движении взвешенных в покоящейся жидкости частиц, требуемом молекулярно-кинетической теорией теплоты). Такое же объяснение независимо предложил Смолуховский [1.3], который внес значительный вклад в дальнейшее развитие теории броуновского движения и ее экспериментальную проверку.

В решении проблемы броуновского движения, предложенном Эйнштейном, основные моменты следующие:

1) движение броуновской частицы вызывается крайне частыми ударами со стороны непрестанно движущихся молекул окружающей жидкости;

2) движение этих молекул столь нерегулярно, что их воздействие на взвешенные частицы можно описать только вероятностным образом в предположении очень частых, статистически независимых ударов.

Наличие таких флуктуаций означает, что интересующее нас явление требует объяснения в рамках статистического подхода. В своих знаменитых газовых теориях Максвелл и Больцман уже использовали статистику, но для описания возможных состояний и вероятности их достижения, а не временной эволюции системы. Статистическое описание в этом аспекте первым рассмотрел Рэлей [1.1], но так сложилось, что его работа не имела продолжения. Практически именно объяснение броуновского движения, данное Эйнштейном, нужно считать началом стохастического моделирования природных явлений.

Рассуждения Эйнштейна очень ясные и четкие. Они содержат все основные положения, которые составляют предмет данной книги. Вместо того чтобы пересказывать классическую работу, я просто приведу обширную выдержку из статьи Эйнштейна:

«Следует с определенностью предположить, что каждая отдельная частица совершает движение независимо от движений всех других частиц; движения одной и той же частицы в разные временные интервалы также следует считать независимыми процессами до тех пор, пока эти временные интервалы не слишком малы.

Введем в рассмотрение временной интервал τ , очень малый по сравнению с временными интервалами наблюдения, но тем не менее настолько большой, чтобы движения, совершаемые частицей в два последующих временных интервала τ , можно было считать независимыми.

Предположим теперь, что всего в жидкости взвешено n частиц. За время τ X -координата данной частицы возрастает на величину Δ , причем для каждой частицы Δ имеет свое (положительное или отрицательное) значение. Будет иметь место определенный закон частоты повторяемости значения Δ ; число dn частиц, у которых величина смещения лежит в интервале от Δ до $\Delta + d\Delta$, можно выразить уравнением следующего вида:

$$dn = n\phi(\Delta)d\Delta, \quad (1.2.1)$$

где

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi(\Delta)d\Delta = 1, \quad (1.2.2)$$

а ϕ отлично от нуля только для очень малых значений Δ и удовлетворяет условию

$$\phi(\Delta) = \phi(-\Delta). \quad (1.2.3)$$

Исследуем теперь, как коэффициент диффузии зависит от ϕ . Снова ограничимся случаем, когда число частиц ν в единице объема зависит только от x и t .

Пусть $\nu = f(x, t)$ есть число частиц в единице объема. Найдем распределение частиц в момент $t + \tau$, исходя из распределения в момент t . Пользуясь определением функции $\phi(\Delta)$, легко найти число тех частиц, которые в момент $t + \tau$ находятся между двумя плоскостями, перпендикулярными оси x и проходящими через точки x и $x + dx$. Получаем

$$f(x, t + \tau)dx = dx \int_{-\infty}^{\infty} f(x + \Delta, t)\phi(\Delta)d\Delta. \quad (1.2.4)$$

Но поскольку τ очень мало, мы можем положить

$$f(x, t + \tau) = f(x, t) + \tau \frac{\partial f}{\partial t}. \quad (1.2.5)$$

Далее, $f(x + \Delta, t)$ разлагаем по степеням Δ :

$$f(x + \Delta, t) = f(x, t) + \Delta \frac{\partial f(x, t)}{\partial x} + \frac{\Delta^2}{2!} \frac{\partial^2 f(x, t)}{\partial x^2} + \dots \quad (1.2.6)$$

Эти разложения можно использовать под знаком интеграла, так как только малые значения Δ дают вклад в уравнение. Имеем

$$f + \frac{\partial f}{\partial t} \tau = f \int_{-\infty}^{\infty} \phi(\Delta) d\Delta + \frac{\partial f}{\partial x} \int_{-\infty}^{\infty} \Delta \phi(\Delta) d\Delta + \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\Delta^2}{2} \phi(\Delta) d\Delta. \quad (1.2.7)$$

Вследствие того что $\phi(x) = \phi(-x)$, второй, четвертый и последующие члены четных номеров в правой части равны нулю. В последовательности из первого, третьего, пятого и других нечетных номеров каждый последующий член существенно меньше предыдущего. Из приведенного соотношения, принимая во внимание, что

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi(\Delta) d\Delta = 1, \quad (1.2.8)$$

полагая

$$\frac{1}{\tau} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\Delta^2}{2} \phi(\Delta) d\Delta = D \quad (1.2.9)$$

и удерживая в правой части только первый и третий члены, находим

$$\frac{\partial f}{\partial t} = D \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \dots \quad (1.2.10)$$

Это не что иное, как известное¹⁾ дифференциальное уравнение диффузии, и видно, что D — коэффициент диффузии...

Рассмотренная задача, соответствующая задаче о диффузии из одной точки (в пренебрежении взаимодействием между диффундирующими частицами), теперь математически полностью определена: ее решение есть

$$f(x, t) = \frac{n}{\sqrt{4\pi D}} \frac{e^{-x^2/4Dt}}{\sqrt{t}} \dots \quad (1.2.11)$$

Теперь с помощью полученной формулы рассчитаем перемещение λ_x в направлении оси X , совершаемое частицей в среднем, — точнее, квадратный корень из среднего квадрата смещения в направлении оси X ;

¹⁾ Уравнение (1.2.10) для числа $f(x)$ частиц в единице объема было известно до работы Эйнштейна, так как оно следует из формулы $G = -D\partial f/\partial x$, определяющей диффузионный поток, и из уравнения непрерывности $\partial f/\partial t + \partial G/\partial x = 0$, т. е. уравнения, выражающего закон сохранения числа частиц. Важный результат данной работы Эйнштейна в том, что он впервые выразил коэффициент диффузии (флуктуационную характеристику) через коэффициент трения (диссипационную характеристику). — *Прим. ред.*

получаем:

$$\lambda_x = \sqrt{\bar{x}^2} = \sqrt{2Dt}. \quad (1.2.12)$$

Приведенное рассмотрение Эйнштейна фактически основывается на предположении, что время дискретно, т.е. соударения происходят только в моменты $0, \tau, 2\tau, 3\tau \dots$, поэтому результирующее уравнение (1.2.10) для функции распределения $f(x, t)$, а также его решение (1.2.11) следует рассматривать как приближения, в которых τ предполагается настолько малым, что время t можно считать почти непрерывным. Тем не менее описание Эйнштейна содержит очень многое из тех подходов, которые впоследствии развивались в сторону общности и строгости и в данной книге занимают центральное место. Например:

1) *Уравнение Чепмена — Колмогорова* до известной степени подобно уравнению Эйнштейна (1.2.4). Оно гласит, что вероятность нахождения частицы в точке x в момент $t + \tau$ дается суммой вероятностей всех возможных смещений Δ из положения $x + \Delta$, умноженной на вероятность нахождения в точке $x + \Delta$ в момент t ¹⁾. Это предположение основано на независимости скачка Δ от какой-либо предыстории движения: необходимо знать начальное положение частицы только в момент t , а не в какие-либо предшествующие моменты. Это и есть *постулат Маркова*, и уравнение Чепмена — Колмогорова, частную форму которого представляет уравнение (1.2.4), является основным динамическим уравнением всех марковских процессов. Последние будут детально рассмотрены в гл. 3.

(2) *Уравнение Фоккера — Планка (УФП)*. Диффузионное уравнение (1.2.10) — это частный случай УФП, которое описывает широкий класс очень интересных стохастических процессов, обладающих непрерывными реализациями. В рассматривавшейся ситуации это означает, что положение пылевых зерен, если считать, что оно подчиняется

¹⁾ В предыдущем рассуждении следовало бы поменять $x + \Delta$ на $x - \Delta$, а уравнение (1.2.4), справедливое в том случае, когда $f(x, t) = f(x(t))$ — неслучайная функция от случайного процесса, не имеющая характера плотности, поменять на уравнение

$$f(x, t + \tau) = \int f(x - \Delta, t) \phi(\Delta) d\Delta, \quad (1)$$

справедливое, когда $f(x, t)$ — плотность вероятностей величины x . Из (1) получаем, вместо (1.2.6, 7), знакпеременный ряд, как это и должно быть в разложении Крамера — Мойала (7.2.25). Уравнение же (1.2.4) является сопряженным к (1) соответствующим транспонированному оператору. Однако из-за предположения о нулевом сносе $\tau^{-1} \int \Delta \phi(\Delta) d\Delta$ знак перед Δ не сказывается на окончательном результате (1.2.10). — *Прим. ред.*

вероятностному закону, определяемому решением диффузионного уравнения (1.2.10), можно записать в виде *непрерывной* случайной функции $x(t)$ от времени (время t считается не дискретным, как у Эйнштейна, а непрерывным). Это побуждает рассмотреть возможность описывать динамику системы каким-либо прямым вероятностным способом; при этом мы имели бы *случайное*, или *стохастическое*, *дифференциальное уравнение* для указанной функции $x(t)$. Начало этому направлению положил Ланжевен, предложивший свое известное уравнение, которое теперь носит его имя. Подробно эти вопросы будут рассматриваться в гл. 4.

(3) *Разложение Крамерса — Мойала* и аналогичные ему по существу совпадают с разложением, использованным Эйнштейном при переходе от (1.2.4) (уравнения Чепмена — Колмогорова) к диффузионному уравнению (1.2.10). Использование приближения такого типа, когда процесс с не обязательно непрерывным изменением переменных заменяется на процесс с непрерывным изменением, служило предметом дискуссии в последнее десятилетие. Удобство и условия применимости такого приближения будут обсуждаться в гл. 7.

1.2.2. УРАВНЕНИЕ ЛАНЖЕВЕНА

Спустя некоторое время после оригинальной работы Эйнштейна Ланжевен [1.4] предложил новый метод, совершенно отличный от эйнштейновского и, как он утверждал, бесконечно более простой. Его рассуждения были таковы.

Из статистической механики известно, что средняя кинетическая энергия броуновской частицы в равновесии должна составлять величину

$$\langle \frac{1}{2}mv^2 \rangle = \frac{1}{2}kT \quad (1.2.13)$$

(T — абсолютная температура, k — постоянная Больцмана). Отметим, что и Эйнштейн и Смолуховский использовали этот факт. На частицу массы m будут действовать две силы:

1) сила торможения за счет вязкого трения, которая при допущении, что применим результат макроскопической гидродинамики, равна $-6\pi\eta a dx/dt$, где η — вязкость, a — диаметр частицы, предполагаемой сферической;

2) *флуктуационная сила* X , обусловленная постоянными толчками со стороны молекул жидкости. Она с равной вероятностью может быть положительна и отрицательна — вот и все, что об этой силе известно. Таким образом, уравнение движения для положения частицы

дается законом Ньютона

$$m \frac{d^2x}{dt^2} = -6\pi\eta a \frac{dx}{dt} + X; \quad (1.2.14)$$

умножив обе части уравнения на x , можно представить его в виде

$$\frac{m}{2} \frac{d^2}{dt^2} (x^2) - mv^2 = -3\pi\eta a \frac{d(x^2)}{dt} + Xx, \quad (1.2.15)$$

где $v = dx/dt$. Теперь усредняем по большому числу различных частиц и используем (1.2.13); в результате получаем уравнение для $\langle x^2 \rangle$:

$$\frac{m}{2} \frac{d^2 \langle x^2 \rangle}{dt^2} + 3\pi\eta a \frac{d \langle x^2 \rangle}{dt} = kT, \quad (1.2.16)$$

где член $\langle xX \rangle$ считается равным нулю из-за нерегулярности, как пишет Ланжевен, величины X . Тогда находим общее решение

$$\frac{d \langle x^2 \rangle}{dt} = kT/(3\pi\eta a) + C \exp(-6\pi\eta at/m), \quad (1.2.17)$$

где C — произвольная постоянная. По оценке Ланжевена при $t \rightarrow \infty$ экспоненциальный член стремится к нулю с временной постоянной порядка 10^{-8} с, что для любого реального наблюдения тех лет было практически мгновенно. Следовательно, для практических целей этим членом можно пренебречь и, проинтегрировав еще раз, получить

$$\langle x^2 \rangle - \langle x_0^2 \rangle = [kT/(3\pi\eta a)]t. \quad (1.2.18)$$

Эта формула соответствует формуле (1.2.12), выведенной Эйнштейном, если ввести обозначение

$$D = kT/(6\pi\eta a), \quad (1.2.19)$$

Уравнение Ланжевена было первым примером *стохастического дифференциального уравнения* — диффузионного уравнения со случайным членом X , поэтому его решение есть в некотором смысле случайная функция. Каждое решение уравнения Ланжевена представляет собой отдельную случайную траекторию, и, используя только достаточно простые характеристики случайной силы X , можно получить измеримые результаты.

Возникает следующий вопрос. Эйнштейн четко потребовал, чтобы (на достаточно больших временных масштабах) изменение величины Δ совершенно не зависело от предшествующих значений Δ . Ланжевен не упоминал это положение, но оно присутствует неявно, когда $\langle xX \rangle$

полагается равным нулю. Условие, что величина X крайне нерегулярна и что x и X независимы между собой (это не упоминается, но подразумевается Ланжевеном), т. е. флуктуации величины x как функции времени не связаны с флуктуациями величины X (так чтобы они происходили в одну сторону и среднее произведение этих величин было отлично от нуля), — эти условия действительно эквивалентны предположению Эйнштейна о независимости. Метод уравнений Ланжевена, очевидно, гораздо более прямой, по крайней мере на первый взгляд, и дает весьма естественную возможность обобщить динамическое уравнение до вероятностного. Однако адекватной математической базы для подхода Ланжевена не существовало, пока 40 лет спустя Ито не сформулировал свою концепцию стохастических дифференциальных уравнений. В его формулировке точное требование независимости x и X привело к исчислению стохастических дифференциалов, которое теперь носит имя Ито.

Как предмет изучения физики, броуновское движение было в центре внимания в первые два десятилетия нашего века, когда прежде всего Смолуховский, а также многие другие ученые широким фронтом вели теоретические и экспериментальные исследования, показавшие полное согласие с первоначальной формулировкой вопроса, предложенной самим Смолуховским и Эйнштейном [1.5]. Позднее, с развитием лазерной спектроскопии, броуновское движение стало гораздо более доступным для количественных измерений: пучком когерентного лазерного излучения освещают малый объем жидкости, содержащий броуновские частицы, и изучают флуктуации интенсивности рассеянного света, которые прямо связаны с движением броуновских частиц. Так можно наблюдать броуновское движение гораздо более мелких частиц, чем традиционная пыльца, и получать полезные данные о размерах вирусов и макромолекул. Изучение более концентрированных суспензий, когда возникает взаимодействие между частицами, позволяет ставить интересные и довольно сложные задачи, относящиеся к суспензиям и коллоидным растворам макромолекул [1.6].

Общая теория флуктуаций, описываемая приведенными выше уравнениями, широко развивалась применительно к разнообразным ситуациям. Преимущества непрерывного описания оказались значительны, поскольку для него требуется знать лишь немногие параметры, главным образом коэффициенты при производных в (1.2.7):

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Delta \phi(\Delta) d\Delta, \quad \text{and} \quad \int_{-\infty}^{\infty} \Delta^2 \phi(\Delta) d\Delta. \quad (1.2.20)$$

Трудно найти проблему, которую нельзя было бы (по крайней мере с какой-то степенью приближения) представить в указанном виде. Для

простого качественного анализа вопросов обычно вполне достаточно рассмотреть в пространстве с нужным числом измерений подходящее уравнение Фоккера — Планка, допустив в нем возможность зависимости обоих коэффициентов (1.2.20) от x .

1.3. ПРОЦЕССЫ РОЖДЕНИЯ — ГИБЕЛИ

Широкий круг явлений можно моделировать специальным классом процессов, называемых процессами рождения — гибели. Название, очевидно, происходит из рассмотрения популяций людей или животных, в которых отдельные индивидуумы рождаются и умирают. Наиболее известна модель системы хищник — жертва, состоящей из животных двух видов, причем одни из них охотятся за другими, которые обеспечены неистощимыми пищевыми ресурсами. Введя обозначения X — жертва, Y — хищник, A — пища жертв, запишем возможные процессы:

$$X + A \rightarrow 2X \quad (1.3.1a)$$

$$X + Y \rightarrow 2Y \quad (1.3.1b)$$

$$Y \rightarrow B. \quad (1.3.1в)$$

Они имеют следующую наивную, но привлекательную интерпретацию. Первое соотношение означает, что жертва, которая съедает единицу пищи, немедленно репродуцируется. Второе соотношение описывает поглощение хищником жертвы (единственная рассматриваемая возможность гибели жертв) и мгновенное репродуцирование хищника. Последнее соотношение символизирует естественную смерть хищника. Легко найти модельные дифференциальные уравнения для x и y , представляющих численности особей X и Y . Так, например, на основе первой формулы можно принять, что скорость рождения особей X пропорциональна произведению x и количества пищи; на основе второй, что скорость увеличения численности особей Y и равная ей скорость поглощения жертв X пропорциональны xy , а из последнего соотношения можно заключить, что скорость гибели особей Y просто пропорциональна y . Таким образом, мы могли бы написать следующие уравнения:

$$\frac{dx}{dt} = k_1 ax - k_2 xy \quad (1.3.2a)$$

$$\frac{dy}{dt} = k_2 xy - k_3 y. \quad (1.3.2б)$$

Методы решения этих уравнений предложили Лотка [1.7] и Вольтерра [1.8]. Решения имеют весьма интересные осциллирующие зависимости, показанные на рис. 1.3,а. Качественно эти осцилляции легко понять. Когда хищников немного, популяция жертв быстро растет. Изобилие жертв приводит к быстрому размножению хищников, а значит, и к одновременному сокращению популяции жертв. При истреблении

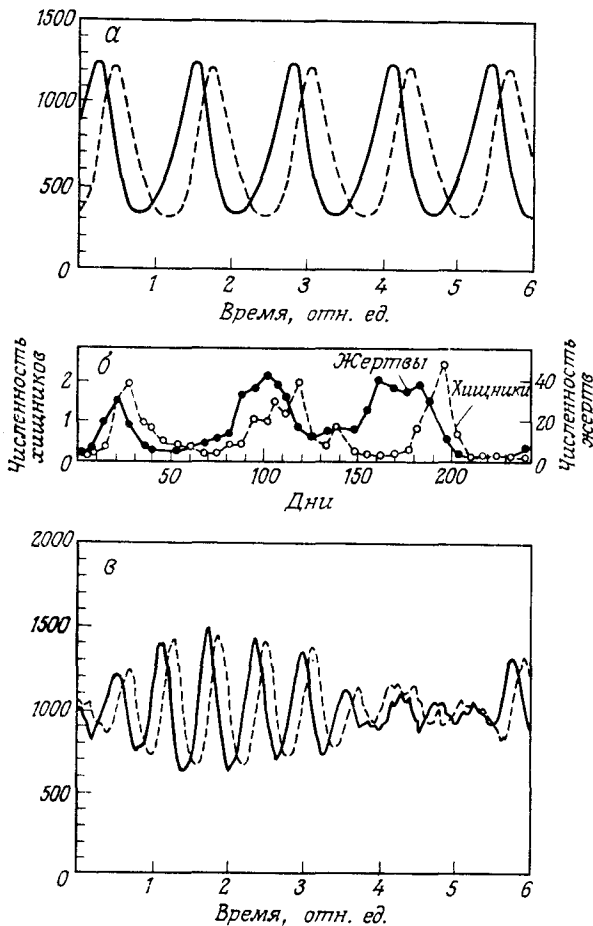


Рис. 1.3. Поведение во времени систем хищник — жертва: а — графики решений детерминистических уравнений (1.3.2) (x — сплошная линия, y — штриховая); б — данные для реальной системы хищник — жертва. Здесь хищником является клещ (*Eotetranychus sexmaculatus* — пунктирная линия), а жертвой служит клещ другого вида (*Typhlodromus occidentalis*), питающийся апельсинами. Данные из [1.16, 17]; в — модельные зависимости согласно стохастическим уравнениям (1.3.3).

большого числа жертв, когда их становится недостаточно для поддержания популяции хищников, хищники вымирают, и ситуация возвращается к исходной. Циклы повторяются неограниченно долго, и они в самом деле, по крайней мере качественно, отражают свойства многих реальных систем хищник — жертва. Пример приведен на рис. 1.3.б.

Конечно, реальные системы не следуют точно решениям дифференциальных уравнений, а флуктуируют около них. Следует учесть эти флуктуации, и проще всего сделать это с помощью *управляющего уравнения для процессов рождения — гибели*. Мы задаем распределение вероятности $P(x, y, t)$ для числа особей в заданный момент и ищем вероятностный закон для изменений (1.3.2). При этом предполагаем, что для бесконечно малого временного интервала Δt имеют место следующие формулы для *вероятностей переходов*:

$$\text{Prob}(x \rightarrow x+1; y \rightarrow y) = k_1 ax \Delta t \quad (1.3.3a)$$

$$\text{Prob}(x \rightarrow x-1; y \rightarrow y+1) = k_2 xy \Delta t \quad (1.3.3б)$$

$$\text{Prob}(x \rightarrow x; y \rightarrow y-1) = k_3 y \Delta t \quad (1.3.3в)$$

$$\text{Prob}(x \rightarrow x; y \rightarrow y) = 1 - (k_1 ax + k_2 xy + k_3 y) \Delta t. \quad (1.3.3г)$$

Следовательно, мы просто заменяем, скажем, обычные уравнения для скоростей на вероятностные уравнения. Затем мы используем прием, который приводит к такому же уравнению, какое использовали Эйнштейн и другие, т. е. к уравнению Чепмена — Колмогорова, а именно записываем вероятность в момент $t + \Delta t$ как сумму членов, каждый из которых представляет вероятность предыдущего состояния, умноженную на вероятность перехода в состояние (x, y) . Таким образом, мы находим

$$\begin{aligned} \frac{P(x, y, t + \Delta t) - P(x, y, t)}{\Delta t} = & k_1 a(x-1)P(x-1, y, t) + k_2(x+1)(y-1) \\ & \times P(x+1, y-1, t) + k_3(y+1)P(x, y+1, t) - (k_1 ax + k_2 xy + k_3 y) \\ & \times P(x, y, t) \end{aligned} \quad (1.3.4)$$

и, полагая $\Delta t \rightarrow 0$, получаем $\partial P(x, y, t)/\partial t$. При написании вероятностных законов (1.3.3) мы предполагаем, что вероятность каждого из происходящих событий определяется просто заданием x и y . Это опять постулат Маркова, который упоминался в разд. 1.2.1. Если для броуновского движения имеются весьма убедительные аргументы в пользу предположения о марковости, то в данном случае такое предположение вовсе не очевидно. Общее представление о наследственности, т. е. о том, что поведение потомства соотносится с поведением родителей, явно противоречит этому предположению. Однако как

учесть наследственность — это другой вопрос, и здесь отнюдь не существует единого рецепта.

Предположение о марковости в данных условиях выполняется до тех пор, пока различные особи одного вида можно считать идентичными. Но оно не выполняется, коль скоро существенны имеющиеся на самом деле наследственно передаваемые различия.

Модель указанного типа имеет широкое применение. В самом деле, она годится для любой системы, в которой рассматривается число экземпляров данного вида, например в случае систем молекул различных химических соединений, электронов, фотонов и аналогичных физических частиц, а не только для биологических систем. Конкретный выбор вероятностей переходов делается на различных основаниях и зависит от степени знания деталей рассматриваемых процессов рождения — гибели. Простые мультипликативные законы, аналогичные (1.3.3), игнорируют почти все детали рассматриваемых процессов. В отдельных физических процессах можно вывести вероятности переходов детальнее и с большей точностью.

Уравнение (1.3.4) не имеет простого решения, но от уравнения ланжевеновского типа, в которое флуктуационный член просто добавляется, его и ему подобные уравнения отличает одно основное свойство. Решения уравнения (1.3.4) определяют как крупномасштабные детерминированные изменения, так и флуктуации, которые, как правило, по порядку величины определяются квадратным корнем из *числа* рассматриваемых объектов. Нетрудно смоделировать временное развитие процесса подобно тому, что представлено на рис. 1.3,в. В самом деле, рисунок показывает, что модель правильно воспроизводит общие свойства процесса, но очевидно, что она настолько упрощена, что и нельзя ожидать точного согласия с экспериментом. Следовательно, в противоположность ситуации с броуновским движением здесь мы имеем дело не столько с теорией явления, сколько с определенным классом математических моделей, которые достаточно просты и приближенно действуют в достаточно широком диапазоне. В гл. 7 мы увидим, что может быть развита теория, оперирующая с большим разнообразием моделей этого класса, и что, кроме того, в действительности есть тесная связь между такого рода теорией и теорией стохастических дифференциальных уравнений.

1.4. ШУМ В РАДИОЭЛЕКТРОННЫХ УСТРОЙСТВАХ

На раннем этапе развития радио, когда передаваемые мощности были низкими и использовались примитивные приемники, для каждого слушателя было очевидно присутствие большого числа нерегулярных

электрических сигналов. Эти сигналы возникали либо в атмосфере, либо в приемнике, либо в радиопередатчике и получили общее название «шумы», поскольку именно так они воспринимались по радио. Мы остановимся на так называемых дробовом и джонсоновском, или тепловом, шумах.

1.4.1. ДРОВОВОЙ ШУМ

В радиолампах (и в твердотельных устройствах) электрический ток нестационарен: он создается отдельными электронами, которые на каком-то участке пути ускоряются и, достигая анода в разное время, передают ему свой заряд. Электрический ток, возникающий при таком процессе, можно представить в виде

$$I(t) = \sum_{t_k} F(t - t_k), \quad (1.4.1)$$

где $F(t - t_k)$ есть вклад электрона, попадающего на анод в момент t_k . Таким образом, предполагается, что все электроны дают электрические импульсы одинаковой формы, но с разной (каждый со своей) временной задержкой, как показано на рис. 1.4.

Статистический аспект возникает сразу же, стоит только задаться вопросом, какого рода предположения нужно сделать относительно времен t_k . Простейший выбор заключается в том, что каждый электрон поступает на анод независимо от предыдущих. Это означает, что времена t_k случайно распределены в рассматриваемом временном интервале, скажем от $-\infty$ до $+\infty$, причем задано среднее число попаданий в единицу времени.

Теория такого шума развивалась в 1920 — 1930-х гг. и была обобщена и в основном завершена Райсом [1.9]. Впервые попытку ее построения предпринял в 1918 г. Шоттки [1.10].

Дальше будет показано, что есть тесная связь между дробовым шумом и процессами рождения — гибели, описываемыми соответствующими управляющими уравнениями. Действительно, если считать

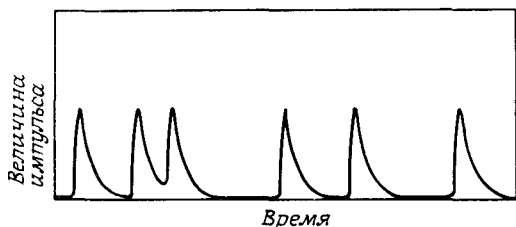


Рис. 1.4. Дробовой шум: идентичные электрические импульсы, приходящие случайно по времени.

число электронов n , которые прибывают до момента t , статистической величиной, описываемой вероятностью $P(n, t)$, то предположение о независимости прибытия электронов, очевидно, есть предположение о марковости этого процесса. Предположим, что вероятность прибытия электрона во временном интервале между t и $t + \Delta t$ полностью независима от t и n , а может зависеть только от Δt . Выбирая соответствующую константу λ , можно записать вероятность скачка

$$\text{Prob}(n \rightarrow n + 1, \text{ за время } \Delta t) = \lambda \Delta t, \quad (1.4.2)$$

так что

$$P(n, t + \Delta t) = P(n, t)(1 - \lambda \Delta t) + P(n - 1, t)\lambda \Delta t. \quad (1.4.3)$$

Взяв предел при $\Delta t \rightarrow 0$, получаем уравнение

$$\frac{\partial P(n, t)}{\partial t} = \lambda [P(n-1, t) - P(n, t)], \quad (1.4.4)$$

описывающее в чистом виде процесс рождения. Полагая

$$G(s, t) = \sum s^n P(n, t) \quad (1.4.5)$$

(здесь $G(s, t)$ — так называемая производящая функция для $P(n, t)$; использующий ее специальный метод решения уравнения (1.4.4) довольно широко применяется), находим

$$\frac{\partial G(s, t)}{\partial t} = \lambda (s - 1)G(s, t), \quad (1.4.6)$$

так что

$$G(s, t) = \exp [\lambda (s - 1)t] G(s, 0). \quad (1.4.7)$$

Требование, что в момент $t = 0$ никакие электроны еще не успели попасть на анод, означает, что вероятность $P(0, 0)$ равна 1, а $P(n, 0) = 0$ для всех $n \geq 1$, так что $G(s, 0) = 1$. Разлагая решение (1.4.7) в ряд по степеням s , получаем распределение

$$P(n, t) = \exp(-\lambda t) (\lambda t)^n / n!, \quad (1.4.8)$$

известное как *распределение Пуассона* (разд. 2.8.3). Введем случайную переменную $N(t)$, которую следует рассматривать как число электронов, которые поступили к моменту t . В таком случае

$$P(n, t) = \text{Prob} \{N(t) = n\}; \quad (1.4.9)$$

$N(t)$ можно назвать *переменной пуассоновского процесса*. Тогда ясно, что величина $\mu(t)$, формально определяемая как

$$\mu(t) = dN(t)/dt, \quad (1.4.10)$$

равна нулю всюду, за исключением тех моментов, когда $N(t)$ увеличивается на 1, т. е. эта функция есть сумма дельта-функций Дирака

$$\mu(t) = \sum_k \delta(t - t_k), \quad (1.4.11)$$

где t_k — время прихода отдельных электронов. Для тока можем написать

$$I(t) = \int_{-\infty}^{\infty} dt' F(t - t') \mu(t'). \quad (1.4.12)$$

Довольно естественные ограничения на функцию $F(t - t')$ состоят в том, что она равна нулю при $t < t'$ и при $t \rightarrow \infty$. Первое условие означает просто, что ток от электрона отсутствует до момента его прибытия, второе — что вызванный электроном импульс в конце концов затухает. Далее, воспользуемся для простоты весьма часто встречающейся формой

$$\begin{aligned} F(t) &= q e^{-\alpha t} & (t > 0) \\ &= 0 & (t < 0). \end{aligned} \quad (1.4.13)$$

Тогда (1.4.12) перепишем в виде

$$I(t) = \int_{-\infty}^t dt' q e^{-\alpha(t-t')} \frac{dN(t')}{dt'}. \quad (1.4.14)$$

Можно вывести простое дифференциальное уравнение для $I(t)$. Продифференцировав $I(t)$ по времени, получим

$$\frac{dI(t)}{dt} = \left[q e^{-\alpha(t-t')} \frac{dN(t')}{dt'} \right]_{t'=t} + \int_{-\infty}^t dt' (-\alpha q) e^{-\alpha(t-t')} \frac{dN(t')}{dt'}, \quad (1.4.15)$$

откуда следует

$$\frac{dI(t)}{dt} = -\alpha I(t) + q\mu(t). \quad (1.4.16)$$

Это стохастическое дифференциальное уравнение того же вида, что и уравнение Ланжевена, в котором, однако, флуктуационная сила дается

членом $q\mu(t)$, где $\mu(t)$ есть производная процесса Пуассона, определяемая соотношением (1.4.11). Однако среднее значение $\mu(t)$ не равно нулю. В самом деле, из (1.4.10) имеем

$$\langle \mu(t)dt \rangle = \langle dN(t) \rangle = \lambda dt \quad (1.4.17)$$

$$\langle [dN(t) - \lambda dt]^2 \rangle = \lambda dt, \quad (1.4.18)$$

поскольку для любой величины, распределенной по закону Пуассона, в том числе и для dN , дисперсия равна среднему. Определяя затем флуктуацию как разность между $dN(t)$ и средним значением, записываем

$$d\eta(t) = dN(t) - \lambda dt, \quad (1.4.19)$$

так что стохастическое дифференциальное уравнение (1.4.16) принимает вид

$$dI(t) = [\lambda q - \alpha I(t)] dt + q d\eta(t). \quad (1.4.20)$$

Возникает вопрос, как решать такое уравнение? В данном случае, когда решение известно, это вопрос чисто теоретический, но хотелось бы располагать общим методом. Если мы попробуем следовать методу, использованному Ланжевенем, то придем к бессмыслице. Например, используя обычное исчисление и предполагая $\langle I(t)d\eta(t) \rangle = 0$, можно вывести выражения

$$\frac{d\langle I(t) \rangle}{dt} = \lambda q - \alpha \langle I(t) \rangle \quad (1.4.21)$$

$$\frac{1}{2} \frac{d\langle I^2(t) \rangle}{dt} = \lambda q \langle I(t) \rangle - \alpha \langle I^2(t) \rangle. \quad (1.4.22)$$

Беря их в пределе $t \rightarrow \infty$, при котором средние значения естественно считать постоянными, находим

$$\langle I(\infty) \rangle = \lambda q / \alpha \quad (1.4.23)$$

$$\langle I^2(\infty) \rangle = (\lambda q / \alpha)^2. \quad (1.4.24)$$

Первый из этих ответов понятен — он просто выражает средний ток в системе, однако второй подразумевает, что среднеквадратичный ток равен квадрату среднего тока, т. е. что ток при $t \rightarrow \infty$ не флуктуирует! Это весьма странно, и решение этого вопроса, приводимое ниже,

покажет, что стохастические дифференциальные уравнения гораздо «коварнее», чем мы их здесь до сих пор представляли.

Во-первых, использованная в (1.4.17 — 20) запись через дифференциалы была выбрана умышленно. При выводе (1.4.22) использовалось обычное исчисление, т. е. записывалось

$$d(I^2) \equiv (I + dI)^2 - I^2 = 2IdI + (dI)^2, \quad (1.4.25)$$

а затем вклад $(dI)^2$ опускался, как член второго порядка по dI . Посмотрим теперь внимательно на (1.4.18). Эта формула эквивалентна соотношению

$$\langle d\eta(t)^2 \rangle = \lambda dt, \quad (1.4.26)$$

так что величина второго порядка по $d\eta$ оказывается на самом деле величиной первого порядка по dt . Причину этого нетрудно обнаружить. Действительно,

$$d\eta(t) = dN(t) - \lambda dt. \quad (1.4.27)$$

Однако зависимость $N(t)$ есть ступенчатая функция, имеющая разрывы, а значит, недифференцируемая в моменты прибытия отдельных электронов. В обычном понимании все произведенные в этих расчетах манипуляции недопустимы. Им можно придать смысл следующим образом. Вычислим $\langle d(I^2) \rangle$, используя (1.4.20, 25, 26):

$$\begin{aligned} \langle d(I^2) \rangle &= 2\langle I\{[\lambda q - \alpha I]dt + q d\eta(t)\} \rangle \\ &+ \langle \{[\lambda q - \alpha I]dt + q d\eta(t)\}^2 \rangle. \end{aligned} \quad (1.4.28)$$

Снова предполагаем, что $\langle I(t)d\eta(t) \rangle = 0$, и после усреднения с учетом соотношения $\langle d\eta(t)^2 \rangle = \lambda dt$ оставляем члены первого порядка по dt . Получаем

$$\frac{1}{2} d\langle I^2 \rangle = \left[\lambda q \langle I \rangle - \alpha \langle I^2 \rangle + \frac{q^2 \lambda}{2} \right] dt \quad (1.4.29)$$

и это дает

$$\langle I^2(\infty) \rangle - \langle I(\infty) \rangle^2 = \frac{q^2 \lambda}{2\alpha}. \quad (1.4.30)$$

Таким образом, при данном подходе при $t \rightarrow \infty$ флуктуации существуют. Член в (1.4.29), дополнительный по сравнению с (1.4.22), возник именно благодаря статистическим свойствам, неявно присутствовавшим в случайной разрывной функции $N(t)$.

Итак, мы провели несколько более глубокое рассмотрение уравнения ланжевеновского типа, трактовка которого с этой точки зрения выглядит достаточно простой. В ланжевеновском методе флуктуационная сила X точно не определена, но из дальнейшего изложения станет ясно, что вопросы, подобные только что рассмотренным, очень часто встречаются при изучении темы данной книги. Вывод состоит в том, что случайные функции нельзя дифференцировать по обычным правилам — следует разработать специальные методы и важно дать точное определение, что понимать в этом случае под дифференцированием. Возникающие здесь проблемы и их решения будут рассмотрены в гл. 4, в которой рассмотрены случаи гауссовских флуктуаций.

1.4.2. АВТОКОРРЕЛЯЦИОННЫЕ ФУНКЦИИ И СПЕКТРАЛЬНЫЕ ПЛОТНОСТИ

Число различных измерений, которые можно провести во флуктуирующих системах, таких, скажем, как электрические цепи, в действительности ограничено. До сих пор мы рассматривали функции распределения, которые для любого момента указывают распределение вероятностей значений случайной величины. Если рассматривается измеримая величина $x(t)$, флуктуирующая со временем, то на практике иногда удается найти распределение значений x , хотя более типична одновременная доступность измерению среднего значения $\bar{x}(t)$ и дисперсии $D\{x(t)\}$.

Среднее и дисперсия очень мало говорят о внутреннем механизме происходящего. Представляла бы интерес величина, являющаяся мерой влияния значения x в момент t на значение в момент $t + \tau$. Такой величиной служит *автокорреляционная функция*, которая, по видимому, впервые была введена Тейлором [1.11] как

$$G(\tau) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T dt x(t)x(t + \tau). \quad (1.4.31)$$

Это есть среднее по некоторому временному интервалу T (который затем устремляется к бесконечности) произведения значений x , взятых в два различных момента.

В наше время имеются специально созданные приборы — автокорреляторы, которые собирают данные и непосредственно конструируют автокорреляционную функцию различных требуемых процессов, начиная от рассеяния лазерного излучения и кончая счетом числа бактерий. Можно также составлять программы нахождения автокорреляционных функций для быстрой обработки в компьютерах, подключенных к эксперименту в реальном масштабе времени. Более того, для

сильно быстродействующих систем есть специальные автокорреляторы, которые дают аппроксимацию к автокорреляционной функции, рассчитывая автокорреляционную функцию переменной $c(t)$ такой, что

$$\begin{aligned} c(t) &= 0 & x(t) < l \\ &= 1 & x(t) > l. \end{aligned} \quad (1.4.32)$$

Более традиционный подход состоит в расчете спектральной плотности величины $x(t)$, которая находится в два этапа. Сначала определяется спектр

$$y(\omega) = \int_0^T dt e^{-i\omega t} x(t), \quad (1.4.33)$$

а затем спектральная плотность определяется соотношением

$$S(\omega) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi T} |y(\omega)|^2. \quad (1.4.34)$$

Спектральная и автокорреляционная функции тесно связаны. После несложного преобразования находим

$$S(\omega) = \lim_{T \rightarrow \infty} \left[\frac{1}{\pi} \int_0^T \cos(\omega\tau) d\tau \frac{1}{T} \int_0^{T-\tau} x(t)x(t+\tau) dt \right] \quad (1.4.35)$$

и, беря предел $T \rightarrow \infty$ (при соответствующих предположениях, обеспечивающих возможность перестановки порядка операций), получаем

$$S(\omega) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \cos(\omega\tau) G(\tau) d\tau. \quad (1.4.36)$$

Этот фундаментальный результат устанавливает связь между преобразованием Фурье автокорреляционной функции и спектральной плотностью. Его можно записать в несколько ином виде, если заметить, что

$$G(-\tau) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_{-\tau}^{T-\tau} dt x(t+\tau)x(t) = G(\tau). \quad (1.4.37)$$

Тогда получаем

$$S(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega\tau} G(\tau) d\tau \quad (1.4.38)$$

и для соответствующего обратного преобразования

$$G(\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega\tau} S(\omega) d\omega. \quad (1.4.39)$$

Это соотношение известно¹⁾ как *теорема Винера — Хинчина* [1.12, 13] и широко используется.

Полученный результат означает, что можно либо прямо измерять автокорреляционную функцию сигнала, а спектральную плотность находить с помощью преобразования Фурье, либо поступать наоборот, поскольку в обоих случаях при использовании быстрого преобразования Фурье и компьютера процедура достаточно проста.

1.4.3. ФУРЬЕ-АНАЛИЗ СЛУЧАЙНЫХ ФУНКЦИЙ: СТАЦИОНАРНЫЕ СИСТЕМЫ

До сих пор автокорреляционная функция определялась как функция сигнала, усредненная по времени, но можно рассмотреть также *усреднение по ансамблю*, при котором одно и то же измерение повторяется много раз и результаты усредняются, что обозначается скобками $\langle \rangle$. Далее будет показано, что для очень многих систем среднее по времени равно среднему по ансамблю. Такие системы называются *эргодическими* (разд. 3.7.1).

Так, если имеется флуктуирующая величина $x(t)$, то соотношение для среднего

$$\langle x(t)x(t + \tau) \rangle = G(\tau) \quad (1.4.40)$$

будет следствием предположения об эргодичности.

Весьма естественно написать преобразование Фурье для случайной величины $x(t)$:

$$x(t) = \int d\omega c(\omega) e^{i\omega t}. \quad (1.4.41)$$

а значит,

$$c(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int dt x(t) e^{-i\omega t}. \quad (1.4.42)$$

¹⁾ Точнее эта теорема формулируется так: для того, чтобы функция $G(\tau)$ представляла собой корреляционную функцию некоторого непрерывного стационарного процесса, необходимо и достаточно, чтобы ее можно было представить в виде (1.4.39), где $S(\omega)$ — неотрицательная функция, имеющая, возможно, особенности типа дельта-функции. — *Прим. ред.*

Вследствие действительности величины $x(t)$ имеем¹⁾

$$c(\omega) = c^*(-\omega). \quad (1.4.43)$$

Если система эргодична, то величина $\langle x(t) \rangle$ должна быть константой, поскольку, очевидно, временное среднее постоянно. В таком случае процесс *стационарен*. Под этим понимается, что все зависящие от времени средние — функции только разностей времен, т. е., например, средние от функций $x(t_1)$, $x(t_2)$, ..., $x(t_n)$ равны средним от $x(t_1 + \Delta)$, $x(t_2 + \Delta)$, ..., $x(t_n + \Delta)$.

Для удобства дальше предполагается, что $\langle x \rangle = 0$. Следовательно,

$$\langle c(\omega) \rangle = \frac{1}{2\pi} \int dt \langle x \rangle e^{-i\omega t} = 0 \quad (1.4.44)$$

$$\begin{aligned} \langle c(\omega)c^*(\omega') \rangle &= \frac{1}{(2\pi)^2} \iint dt dt' e^{-i\omega t + i\omega' t'} \langle x(t)x(t') \rangle \\ &= \frac{1}{(2\pi)} \delta(\omega - \omega') \int d\tau e^{i\omega\tau} G(\tau) \\ &= \delta(\omega - \omega') S(\omega). \end{aligned} \quad (1.4.45)$$

Мы получили, что стационарность сама по себе влечет нескоррелированность $c(\omega)$ и $c^*(\omega')$ при $\omega \neq \omega'$, поскольку $\delta(\omega - \omega')$ возникает как следствие зависимости $\langle x(t)x(t') \rangle$ только от разности времен $t - t'$.

1.4.4. ТЕПЛОВОЙ ШУМ И ТЕОРЕМА НАЙКВИСТА

В 1928 г. вышли две короткие и изящные статьи. В одной из них Джонсон [1.14] экспериментально показал, что электрическое сопротивление само генерирует флуктуации электрического напряжения, в другой Найквист [1.15] дал теоретический вывод этого эффекта в полном соответствии с экспериментом Джонсона. Руководящий принцип был высказан еще Шоттки [1.10] и совпадает с тем, который исполь-

¹⁾ Интеграл в правой части (1.4.42), вообще говоря, не является сходящимся, равно как и интеграл

$$(2\pi)^{-1} \int e^{i\omega t} d\omega = \delta(t),$$

дающий спектральное представление дельта-функции. Поэтому $c(\omega)$ и $\delta(t)$ следует понимать как обобщенные функции. Получаемое из (1.4.45) равенство $\langle |c(\omega)|^2 \rangle = \delta(0)S(0) = \infty$ свидетельствует о том, что указанный интеграл не равен всегда всегда конечной величине. Обычные (конечные) величины и функции мы получим только после некоторой интегральной операции, произведенной над $c(\omega)$ и $\delta(t)$. — *Прим. ред.*

зовали Эйнштейн и Ланжевен. Это принцип теплового равновесия. Если сопротивление R создает флуктуации электрического напряжения, то они в свою очередь вызывают ток, который обуславливает выделение тепла на сопротивлении. Это тепло должно точно соответствовать энергии, взятой из флуктуаций. Детальная разработка этого принципа не является предметом данного раздела, но мы увидим, что такого рода выводы общеприняты в физике и химии стохастических процессов. При этом законы статистической механики, основа которых не связана по существу с стохастичностью, привлекаются, чтобы дополнить законы стохастических процессов. Установленный экспериментальный результат заключался в следующем. Пусть имеется электрическое сопротивление R при абсолютной температуре T . Предположим, что с помощью подходящего фильтра мы измерили $E(\omega)$ — напряжение на сопротивление, соответствующее интервалу угловых частот $(\omega, \omega + d\omega)$. Тогда, если обозначить через k постоянную Больцмана, имеем

$$\langle E^2(\omega) \rangle = \pi^{-1} R k T d\omega. \quad (1.4.46)$$

Теперь это соотношение называется *теоремой Найквиста*¹⁾. Джонсон заметил: «Это явление служит одной из причин того, что называется в ламповых усилителях «шумом электронных ламп». В самом деле, часто оно существенно доминирует в шуме хорошего усилителя».

Тепловой шум просто описывается с помощью математического аппарата, представленного в разд. 1.4.3. Если среднее шумовое напряжение на сопротивлении равно нулю и система находится в устойчивом состоянии, то это напряжение можно трактовать как стационарный процесс. Величина теплового шума фактически представляет собой предел типа (1.4.34) и количественно может быть полностью описана утверждением, что спектральная плотность $S(\omega)$ дается формулой

$$S(\omega) = \pi^{-1} R k T. \quad (1.4.47)$$

Это означает, что спектральная плотность имеет вид плато, т. е. не зависит от ω . В случае света различные частоты соответствуют разным цветам. Если мы воспринимаем свет как белый, то, как установ-

¹⁾ Более обще, теорема, или формула, Найквиста

$$S(\omega) = \pi^{-1} k T \operatorname{Re} Z(i\omega)$$

определяет спектральную плотность флуктуационной э.д.с. $\mathcal{E}(t)$, возникающей в двухполюснике, который имеет импеданс $Z(i\omega)$ и находится в тепловом равновесии при температуре T . — *Прим. ред.*

лено, свет всех цветов представлен в нем практически в равных пропорциях. Таким образом, оптический спектр белого света платообразен, по крайней мере в видимом диапазоне. По аналогии с этим термин *белый шум* применяется по отношению к шумовому напряжению (или к любой другой флуктуирующей величине), спектр которой имеет вид плато.

В действительности белый шум не может существовать. Чтобы убедиться в этом, достаточно заметить, что средняя мощность, диссипируемая на сопротивлении в частотном диапазоне (ω_1, ω_2) , дается формулой

$$\int_{\omega_1}^{\omega_2} d\omega S(\omega)/R = \pi^{-1}kT(\omega_2 - \omega_1). \quad (1.4.48)$$

так что полная диссипируемая на всех частотах мощность бесконечна! Найквист осознал это и отметил, что на самом деле возникли бы квантовые поправки, с учетом которых при комнатной температуре спектр оставался бы постоянным только до частот порядка $7 \cdot 10^{13}$ Гц, которые на практике радиоприемником не регистрируются. Реально диссипируемая на сопротивлении мощность составила бы ничтожную величину порядка 10^{-10} Вт! Кроме того, в действительности существуют другие лимитирующие факторы, такие, например, как индуктивность системы, которые ограничат спектр еще более низкими частотами.

Из определения спектра через автокорреляционную функцию, данного в разд. 1.4.2, имеем

$$\langle E(t + \tau)E(t) \rangle = G(\tau) \quad (1.4.49)$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega\tau} 2R kT \quad (1.4.50)$$

$$= 2R kT \delta(\tau), \quad (1.4.51)$$

Это означает, что как бы ни была мала разность времен $\tau \neq 0$, $E(t + \tau)$ и $E(t)$ не коррелируют. Такой результат, конечно, является прямым следствием постоянства спектра. Типичная модель $S(\omega)$, имеющая почти платообразный вид, есть

$$S(\omega) = \pi^{-1}RkT/(\omega^2\tau_c^2 + 1). \quad (1.4.52)$$

Если $\omega \ll \tau_c^{-1}$, то это почти константа. Преобразование Фурье, которое в этом случае может быть вычислено явно, дает

$$\langle E(t + \tau)E(t) \rangle = (RkT/\tau_c) \exp(-\tau/\tau_c). \quad (1.4.53)$$

Видим, что автокорреляционная функция исчезает только при $\tau \gg \tau_c$, причем время τ_c называется *временем корреляции* флуктуаций напряжения (см. рис. 1.5). Следовательно, представление корреляционной функции как δ -функции — это идеализация, справедливая только при достаточно крупномасштабной временной шкале.

Отметим, что приведенные рассуждения очень напоминают предположение Эйнштейна, касающееся броуновского движения, а также свойства флуктуационных сил, введенных Ланжевеном. Белый шум как идеализация будет играть немалую роль в этой книге. Однако, точно так же, как было показано, что флуктуационный член, возникающий в стохастическом дифференциальном уравнении, не является обычным дифференциалом, дальше мы убедимся, что и с дифференциальными уравнениями, включающими в качестве возмущающего воздействия белый шум, нужно обращаться с большой осторожностью. Подобные уравнения естественным образом возникают в произвольной флуктуирующей системе, и с помощью *правил Стратоновича* можно устроить так, чтобы были применимы обычные правила вычислений, которые пригодны для гладких функций. Имеется и другая возможность: отказаться от обычных расчетов и использовать *технику Ито*, имеющую не слишком большие отличия (так, она весьма напоминает расчеты, произведенные для дробового шума). Все эти вопросы более полно будут обсуждаться в гл. 4.

Выше уже отмечалось, что белый шум не существует как реальный физический процесс, и в реальных ситуациях свойственные ему сингулярности не возникают. Однако он играет фундаментальную роль как

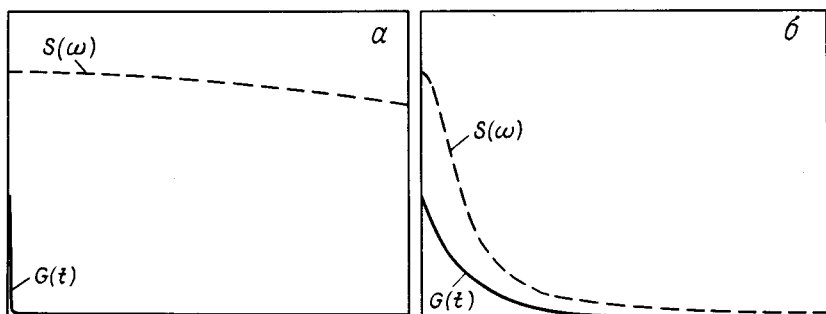


Рис. 1.5. Корреляционная функция (сплошная линия) и соответствующая спектральная плотность (штриховая линия) для малого времени корреляции, соответствующего почти постоянной спектральной плотности (а) и большого времени корреляции, отвечающего быстро убывающей спектральной плотности (б).

в математическом, так и в физическом отношениях, поскольку представляет собой идеализацию очень многих происходящих на самом деле процессов. Несколько необычные правила, которые мы сформулируем для расчетов, оперирующих с белым шумом, не так уж трудны в обращении и значительно легче, чем любой метод, оперирующий только с реальными шумами. Более того, даже в тех ситуациях, когда белый шум непосредственно не дает хорошей аппроксимации, часто процессы могут быть сведены к белому шуму косвенно. В этом отношении белый шум представляет собой тот пункт, исходя из которого можно построить разнообразные стохастические описания, и поэтому он играет фундаментальную роль для предмета данной книги.

Понятия теории вероятностей

В предыдущей главе мы использовали вероятностные представления без каких-либо определений. Для того чтобы более точно сформулировать теоретические положения, необходимо прежде всего точно определить основные понятия. Итак, цель этой главы — дать основные понятия теории вероятностей и представить ряд важных результатов. Здесь не приводится полное изложение математической теории вероятностей, поскольку читатель может найти это в обычных учебниках математики, таких, например, как книги Феллера [2.1], Папулиса [2.2] и Гнеденко [2.5].

2.1. СОБЫТИЯ И МНОЖЕСТВА СОБЫТИЙ

Нам нужны самые общие обозначения, для того чтобы иметь возможность описывать вероятностным образом различные случаи, с которыми приходится иметь дело. Например, может потребоваться рассмотреть случай, когда в некоторой области пространства находится $6,4 \cdot 10^{14}$ молекул, или случай, когда броуновская частица расположена в некоторой точке пространства x , или, возможно, случай пребывания 10 мышей и 3 сов в заданном районе леса.

Все эти случаи представляют собой конкретные реализации *событий*. Абстрактно говоря, событие есть просто элемент определенного пространства, который в наиболее распространенных на практике случаях может характеризоваться вектором с целочисленными компонентами

$$\mathbf{n} = (n_1, n_2, n_3 \dots) \quad (2.1.1)$$

или вектором, составленным из действительных чисел,

$$\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3 \dots). \quad (2.1.2)$$

Размерность этого вектора может быть произвольной.

Удобно принять язык теории множеств, ввести понятие *множеств*

ва событий и использовать запись

$$\omega \in A \quad (2.1.3)$$

для обозначения того, что событие ω принадлежит множеству событий A . Например, можно рассмотреть множество событий A (25) в некоторой экологической популяции, состоящей из не более чем 25 животных. Ясно, что событие $\bar{\omega}$, заключающееся в том, что в наличии есть 3 мыши и тигр, а других животных нет, удовлетворяет соотношению

$$\bar{\omega} \in A(25). \quad (2.1.4)$$

А вот более интересный пример. Допустим, что определен ансамбль событий $A(r, \Delta V)$, при которых молекула находится в элементе объема ΔV с центром в точке r . В этом случае практическое значение использования терминов теории множеств становится особенно наглядным. Действительно, можно определить, расположена ли молекула в окрестности ΔV точки r , но определить, находится ли данная частица точно в точке r , невозможно. Таким образом, если определено событие $\omega(y)$, состоящее в том, что молекула находится в точке y , то имеет смысл спросить, выполняется ли соотношение

$$\omega(y) \in A(r, \Delta V), \quad (2.1.5)$$

и приписать множеству $A(r, \Delta V)$ определенную вероятность, которую следует интерпретировать как вероятность выполнения условия (2.1.5).

2.2. ВЕРОЯТНОСТИ

Большинство людей обладает интуитивным представлением о вероятности, основанным на их собственном опыте. Однако точная формулировка интуитивных представлений сопряжена с трудностями, поэтому обычно используется абстрактный аксиоматический подход к построению теории вероятностей, в котором мера вероятности $P(A)$ приписывается каждому множеству A в пространстве событий, включая

$$\text{множество всех событий: } \Omega, \quad (2.2.1)$$

$$\text{пустое множество: } \phi. \quad (2.2.2)$$

Чтобы можно было определить вероятность, рассматриваемые множества событий должны образовывать систему (известную математикам как σ -алгебра), замкнутую по отношению к двум операциям теории множеств — объединению (\cup) и пересечению (\cap).

2.2.1. ВЕРОЯТНОСТНЫЕ АКСИОМЫ

Вероятность $P(A)$ множества событий A вводится как функция от A , удовлетворяющая следующим *вероятностным аксиомам*:

$$1) P(A) \geq 0 \text{ для всех } A; \quad (2.2.3)$$

$$2) P(\Omega) = 1; \quad (2.2.4)$$

3) если A_i ($i = 1, 2, 3, \dots$) — конечная или счетная последовательность *непересекающихся множеств*, т. е. таких множеств, что

$$A_i \cap A_j = \emptyset \quad \text{для всех } i \neq j, \quad (2.2.5)$$

то

$$P\left(\bigcup_i A_i\right) = \sum_i P(A_i). \quad (2.2.6)$$

Это все необходимые аксиомы. Как следствия получаются следующие соотношения:

4) если \bar{A} — дополнение A , т.е. множество всех событий, которые не входят в A , то

$$P(\bar{A}) = 1 - P(A), \quad (2.2.7)$$

$$5) \text{ (v) } P(\emptyset) = 0. \quad (2.2.8)$$

2.2.2. СМЫСЛ $P(A)$

Без интуитивных соображений невозможно соотнести теорию вероятностей с реальностью. Вероятность $P(A)$, определенная приведенными выше аксиомами, совпадает с интуитивным понятием вероятности того, что *произвольное* событие ω , т. е. событие ω , *выбранное наугад*, удовлетворяет условию $\omega \in A$. Сформулируем это более подробно. Если событие берется из полного множества Ω *наугад* N раз, то относительная частота события, удовлетворяющего условию $\omega \in A$, стремится к $P(A)$ по мере того, как число проведенных испытаний N стремится к бесконечности. Можно считать, что N выборок произведено последовательно одна за другой (*независимые* подбрасывания одной игральной кости) или одновременно (N игральных костей бросают «независимо» в один и тот же момент). Все определения такого рода следует отнести к интуитивным, поскольку в них используются неопределимые понятия, такие, как «случайно», «наугад», «независимо». Отказавшись от того, что мы здесь называем интуитивными соображениями, и аксиоматизировав вероятность, Колмогоров [2.3] тем

самым расчистил путь для развития строгой математической теории вероятностей. Однако остались проблемы, обусловленные, с одной стороны, желанием понимания на интуитивном уровне, а с другой — возникающим при этом замкнутым кругом в определении понятий. Аксиоматическую вероятность проще всего трактовать как некий формальный метод обращения с вероятностями в соответствии с аксиомами. Но для того чтобы применить этот подход, нужно указать пространство, на котором определяется вероятность, и приписать его множествам вероятностную меру P . Это так называемая *априорная вероятность*, т. е. вероятность, которая просто приписывается. Прикладные науки изобилуют примерами такого рода априорных вероятностей. Так, в равновесной статистической механике одинаковым объемам фазового пространства приписываются равные вероятности. В объяснении Эйнштейна броуновского движения вводится плотность вероятности $\phi(\Delta)$, описывающая вероятности «скачка» Δ из точки x в момент t .

Задачи применения теории вероятностей состоят в следующем: 1) выбрать некоторое множество событий, приписать им *правдоподобные* вероятности i , учитывая структуру вероятностного пространства, получить результаты; 2) с помощью устройства, построенного для измерения величин в соответствии с этими априорными вероятностями, получить экспериментальные результаты.

Отметим, что структура вероятностного пространства весьма существенна, особенно в том случае, когда пространство событий осложнено включением понятия времени. Такое расширение делает эффективное вероятностное пространство бесконечномерным, поскольку теперь события можно определять следующим образом: «частица была в точках x_n в моменты времени t_n , $n = 0, 1, 2, \dots, \infty$ ».

2.2.3. СМЫСЛ АКСИОМ

Всякое интуитивное представление о вероятности предполагает вероятность положительной и вероятность множества, включающего любые события, равной 1 независимо от того, что подразумевается под словом «любое». Таким образом, аксиомы 1 и 2 понятны. Труднее понять аксиому 3. Предположим, что имеются всего два множества A и B и $A \cap B = \phi$, т. е. нет событий, принадлежащих как A , так и B . Поэтому вероятность того, что $\omega \in A \cup B$, равна вероятности того, что $\omega \in A$ или $\omega \in B$. По интуитивным представлениям эта вероятность равна сумме вероятностей, т. е.

$$P(A \cup B) \equiv P\{(\omega \in A) \text{ или } (\omega \in B)\} = P(A) + P(B). \quad (2.2.9)$$

Заметим, что это отнюдь не доказательство, а просто пояснение.

Обобщение на случай любого конечного числа непересекающихся множеств очевидно, однако возможность обобщения на случай только *счетного* числа множеств требует некоторых разъяснений. Расширение на случай бесконечного числа множеств должно производиться при определенных ограничениях. Дело в том, что имеются множества, помеченные непрерывным индексом, например когда x — положение в пространстве. Вероятность того, что молекула находится в множестве, состоящем из единственного элемента x , равна нулю. Вероятность же находиться ей в области R конечного объема не равна нулю. Область R представляет собой объединение множеств типа $\{x\}$, но не *счетного* числа множеств. Поэтому аксиома 3 в этом случае неприменима, и вероятность нахождения в области R не равна сумме вероятностей¹⁾ попадания в одно из множеств $\{x\}$.

2.2.4. СЛУЧАЙНЫЕ ПЕРЕМЕННЫЕ

Понятие случайной переменной весьма удобно и играет центральную роль в этой книге. Допустим, что имеется абстрактное вероятностное пространство событий, обозначаемых через x . Тогда можно ввести случайную переменную $F(x)$ — функцию x , которая принимает определенные значения для каждого x . В частности, представляет интерес тождественная функция, обозначаемая через $X(x)$, которая задается равенством

$$X(x) = x. \quad (2.2.10)$$

Отметим, что в этой книге прописные буквы, как правило, обозначают случайные переменные, а строчные — значения этих функций, когда их необходимо различать.

Часто бывает, что имеется некоторое совершенно другое, фоновое, вероятностное пространство Ω со значениями ω и говорится о некоторой функции $X(\omega)$, причем в дальнейшем явное упоминание ω опускается. Такая ситуация может возникнуть по двум причинам:

- 1) события задаются только значениями величины x , т. е. мы отождествляем x и ω ;
- 2) неявные события ω слишком сложно описать или иногда даже узнать.

¹⁾ Если формулу (2.2.6) считать применимой в случае континуального числа событий, то в результате суммирования получим неопределенность типа $0 \cdot \infty$, поскольку вероятность точки равна нулю, а число их бесконечно. Условие счетности в аксиоме 3 нужно, чтобы избежать данной неопределенности. — *Прим. ред.*

Например, в случае молекулы, находящейся в жидкости, нам следовало бы интерпретировать ω как величину, способную задать положение, импульсы и ориентацию всех молекул в данном объеме жидкости; однако записать это слишком трудно, а часто в этом и нет необходимости.

Большое преимущество введения понятия случайной переменной заключается в простоте обращения с функциями случайных переменных, например X^2 , $\sin(a \cdot X)$ и т. д., а также в простоте вычисления их распределений и средних. Далее, вводя стохастические дифференциальные уравнения, можно также рассматривать изменения случайных переменных во времени аналогично тому, как это делается при классическом описании детерминированных систем посредством дифференциальных уравнений.

2.3. СОВМЕСТНЫЕ И УСЛОВНЫЕ ВЕРОЯТНОСТИ. НЕЗАВИСИМОСТЬ

2.3.1. СОВМЕСТНЫЕ ВЕРОЯТНОСТИ

Как мы объяснили в разд. 2.2.3, случай взаимоисключающих событий связан с представлением о непересекающихся множествах. Рассмотрим теперь вероятность $P(A \cap B)$, где пересечение $A \cap B$ — непустое множество. Событие ω , удовлетворяющее условию $\omega \in A$, будет принадлежать пересечению $\omega \in A \cap B$ только тогда, когда выполнено также условие $\omega \in B$. Таким образом,

$$P(A \cap B) = P\{(\omega \in A) \text{ и } (\omega \in B)\}, \quad (2.3.1)$$

причем $P(A \cap B)$ называется *совместной вероятностью* того, что событие ω содержится в обоих классах событий, или, что эквивалентно, того, что реализуются сразу два события: $\omega \in A$ и $\omega \in B$. Совместная вероятность естественно возникает в контексте данной книги двумя путями:

1) *Когда событие описывается вектором*: например имеется m мышей и n тигров. Вероятность этого события есть совместная вероятность события ($\{m$ мышей и произвольное количество тигров) и ($\{n$ тигров и произвольное количество мышей}). В этом смысле в векторном случае всегда подразумеваются совместные вероятности.

(2) *Когда рассматриваются несколько моментов времени*: например, какова вероятность того, что ($\{$ в момент t_1 есть m_1 тигров и n_1 мышей) и ($\{$ в момент t_2 есть m_2 тигров и n_2 мышей)? При рассмотрении такой вероятности мы составили одно *совместное событие* из событий, от-

носящихся как к моменту t_1 , так и к моменту t_2 . По существу различий между двумя указанными случаями нет, за исключением той существенной роли, которую время играет в динамике развертывания событий.

2.3.2. УСЛОВНЫЕ ВЕРОЯТНОСТИ

Мы можем фиксировать условия осуществления событий, представляющих интерес, и рассматривать только те случаи, когда эти условия выполняются, например рассматривать вероятность наличия 21 буйвола, если известно, что имеются 100 львов. Что это значит? Ясно, что нас интересует только указанная часть событий из множества $B = \{\text{все случаи, когда имеется ровно 100 львов}\}$. Это означает, что нужно определить условную вероятность, соответствующую подмножеству событий, которые содержатся в B . Определим условную вероятность соотношением

$$P(A|B) = P(A \cap B)/P(B), \quad (2.3.2)$$

отвечающим интуитивному представлению, что условная вероятность событий $\omega \in A$ при условии $\omega \in B$ находится делением вероятности совместного события на вероятность того, что $\omega \in B$.

Можно написать аналогичное соотношение, поменяв местами A и B , т. е. имеем

$$P(A \cap B) = P(A|B)P(B) = P(B|A)P(A). \quad (2.3.3)$$

Таким образом, нет теоретического различия между, например, вероятностью $P\{\text{21 буйвол}\}$ при условии (имеется 100 львов) и обратной ситуацией. Однако, когда рассматриваются два момента времени, различие имеется. Например, естественно рассмотреть вероятность нахождения частицы в положении x_1 в момент t_1 при условии, что в *предыдущий* момент t_2 она находилась в положении x_2 . Такая вероятность, как будет видно дальше, играет в книге важную роль. Обратная формулировка звучит несколько странно, а именно: вероятность того, что частица в момент t_1 занимает положение x_1 при условии, что в более поздний момент времени t_2 она будет находиться в положении x_2 . Такая формулировка сродни ясновидению, и трудно предположить, чтобы кто-то в реальной ситуации захотел рассматривать такую величину, хотя в принципе она вполне аналогична «естественной» условной вероятности, для которой выполнение условия предшествует событиям¹⁾.

¹⁾ Обе указанные условные вероятности становятся равноправными и «естественными», если имеются многократные записи процесса, которые можно «прокручивать» в любую сторону. — *Прим. ред.*

«Естественное» определение уже встречалось в этой книге: например, введенная Эйнштейном величина $\phi(\Delta)d\Delta$ (разд. 1.2.1) есть вероятность того, что частица, находящаяся в положении x в момент t , будет находиться в интервале $[x + \Delta, x + \Delta + d\Delta]$ в момент $t + \tau$; подобным же образом это определение возникало и в других примерах. Наша интуиция по аналогии с тем, что было высказано Эйнштейном (см. приведенный выше отрывок из его статьи), говорит, что этот вид условной вероятности прямо связан с временным развитием вероятностной системы.

2.3.3. СООТНОШЕНИЯ МЕЖДУ СОВМЕСТНЫМИ ВЕРОЯТНОСТЯМИ РАЗЛИЧНЫХ ПОРЯДКОВ

Предположим, что имеется набор множеств B_i , таких, что

$$B_i \cap B_j = \emptyset \quad (2.3.4)$$

$$\bigcup_i B_i = \Omega, \quad (2.3.5)$$

т.е. эти множества разбивают пространство Ω на непересекающиеся подмножества. Тогда

$$\bigcup_i (A \cap B_i) = A \cap (\bigcup_i B_i) = A \cap \Omega = A, \quad (2.3.6)$$

Используя теперь вероятностную аксиому 3, видим, что $A \cap B_i$ удовлетворяет условиям, налагавшимся там на A_i ; поэтому

$$\sum_i P(A \cap B_i) = P[\bigcup_i (A \cap B_i)] \quad (2.3.7)$$

$$= P(A) \quad (2.3.8)$$

и, следовательно,

$$\sum_i P(A|B_i)P(B_i) = P(A), \quad (2.3.9)$$

Таким образом, суммирование по всем взаимно исключающим возможностям B исключает эту переменную.

Итак, в общем случае

$$\sum_i P(A_i \cap B_j \cap C_k \dots) = P(B_j \cap C_k \dots). \quad (2.3.10)$$

Результат (2.3.9) имеет важные следствия для развития теории стохастических процессов, которая существенно основывается на понятии совместной вероятности.

2.3.4. НЕЗАВИСИМОСТЬ

Необходимо дать определение независимых событий исходя из понятия вероятностей. Два множества событий A и B называются независимыми, если условие принадлежности данного события множеству B не оказывает никакого влияния на вероятность принадлежности этого события множеству A . Таким образом, условная вероятность $P(A|B)$ не должна зависеть от B , и, следовательно,

$$P(A \cap B) = P(A)P(B), \quad (2.3.11)$$

В случае нескольких событий требуется некоторое уточнение. События $\omega \in A_i$ ($i = 1, 2, \dots, n$) считаются независимыми, если для любого подмножества (i_1, i_2, \dots, i_k) множества $(1, 2, \dots, n)$

$$P(A_{i_1} \cap A_{i_2} \dots A_{i_k}) = P(A_{i_1})P(A_{i_2}) \dots P(A_{i_k}). \quad (2.3.12)$$

Важно потребовать факторизацию вероятности для всех возможных комбинаций i_1, i_2, \dots, i_k , как указано в (2.3.12). Например, в случае трех множеств A_i вполне возможно выполнение требования

$$P(A_i \cap A_j) = P(A_i)P(A_j) \quad (2.3.13)$$

для всех различных i и j , а также (рис. 2.1) требования

$$A_1 \cap A_2 = A_2 \cap A_3 = A_3 \cap A_1.$$

При этом имеем

$$\begin{aligned} P(A_1 \cap A_2 \cap A_3) &= P(A_2 \cap A_3 \cap A_1) = P(A_2 \cap A_3) = P(A_2)P(A_3) \\ &\neq P(A_1)P(A_2)P(A_3). \end{aligned} \quad (2.3.14)$$

Видно, что принадлежность $\omega \in A_2$ и $\omega \in A_3$ в данном случае с необходимостью влечет за собой принадлежность $\omega \in A_1$. В этом смысле события, очевидно, не независимы.

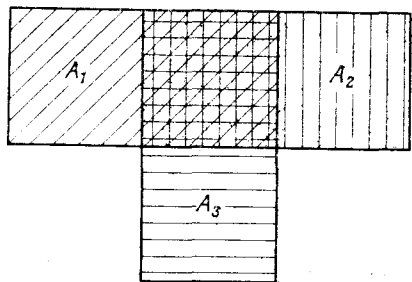


Рис. 2.1. Статистическая независимость в парах (но не в тройках) множеств. Все три множества типа $A_j \cap A_i$ находятся посередине. С помощью подходящего выбора вероятностей можно получить $P(A_i \cap A_j) = P(A_i)P(A_j)$.

Случайные переменные X_1, X_2, X_3, \dots будут называться независимыми, если для всех множеств вида $A_i = (\text{множество } x, \text{ удовлетворяющих условию } a_i \leq x \leq b_i)$ события $X_1 \in A_1, X_2 \in A_2, X_3 \in A_3, \dots$ независимы. Это означает, что все значения данной переменной X_i предполагаются независимыми от значений, принимаемых другими переменными X_j .

2.4. СРЕДНИЕ ЗНАЧЕНИЯ И ПЛОТНОСТЬ ВЕРОЯТНОСТИ

Среднее значение случайной переменной $R(\omega)$, для которой число возможных реализаций счетно, дается выражением

$$\langle R \rangle = \sum_{\omega} P(\omega)R(\omega), \quad (2.4.1)$$

где $P(\omega)$ означает вероятность множества, содержащего единственное событие ω . В случае непрерывной случайной величины аксиомы вероятности позволяют определить функцию плотности вероятности $p(\omega)$, такую, что если $A(\omega_0, d\omega_0)$ представляет собой множество

$$(\omega_0 \leq \omega < \omega_0 + d\omega_0), \quad (2.4.2)$$

то

$$p(\omega_0)d\omega_0 = P[A(\omega_0, d\omega_0)] \quad (2.4.3)$$

$$\equiv p(\omega_0, d\omega_0). \quad (2.4.4)$$

Последнее обозначение часто используется математиками. Прекрасное пояснение приведенным формулам дано в книге Феллера [2.1]. В случае непрерывной случайной величины имеем

$$\langle R \rangle = \int_{\omega \in \Omega} d\omega R(\omega)p(\omega). \quad (2.4.5)$$

Как отмечено в разд. 2.2.4, символ R сам можно использовать для обозначения события, поэтому запишем так:

$$\langle R \rangle = \int dR Rp(R), \quad (2.4.6)$$

что мы часто и будем делать. Очевидно, что $p(R)$ как функция R и $p(\omega)$ как функция ω — разные функции, точнее

$$p(R_0)dR_0 = P[R_0 < R < R_0 + dR_0]. \quad (2.4.7)$$

2.4.1. ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПЛОТНОСТИ ВЕРОЯТНОСТИ ЧЕРЕЗ СРЕДНИЕ ЗНАЧЕНИЯ ПРОИЗВОЛЬНЫХ ФУНКЦИЙ

Допустим, что для любой функции $f(R)$ известно среднее

$$\langle f(R) \rangle = \int dR f(R) p(R), \quad (2.4.8)$$

тогда известна $p(R)$. Доказательство получим, выбрав

$$f(R) = 1 \quad \text{при} \quad R_0 \leq R < R_0 + dR_0 \\ = 0 \quad \text{в противном случае.}$$

Поскольку иногда легче оперировать со средним произвольной функции, чем с плотностью вероятности, то указанный факт при случае будет использоваться в книге.

2.4.2. МНОЖЕСТВА НУЛЕВОЙ ВЕРОЯТНОСТИ

Если существует плотность $p(R)$, то вероятность того, что R лежит в интервале $(R_0, R_0 + dR)$, стремится к нулю вместе с уменьшением dR . Следовательно, вероятность того, что R в *точности* принимает значение R_0 , равна нулю. Аналогично и для любого другого значения.

Таким образом, существуют множества $S(R_i)$, каждое из которых содержит только одну точку R_i и имеет нулевую вероятность. Из третьей аксиомы вероятности следует, что любое счетное объединение таких множеств, т. е. любое множество, содержащее только счетное число точек (например, все рациональные числа), имеет нулевую вероятность. В общей формулировке все равенства теории вероятностей, записанные для случайных событий или величин, в лучшем случае верны только «почти наверное», т. е. они могут не выполняться на множестве нулевой вероятности. Наоборот, если говорят, например,

$$X = Y \quad (\text{с вероятностью } 1), \quad (2.4.9)$$

то это отнюдь не то же самое, что сказать

$$X(R) = Y(R) \quad \text{для всех } R. \quad (2.4.10)$$

Конечно, если теория имеет отношение к действительности, то события, обладающие нулевой вероятностью, не происходят.

В частности, отметим, что результат предыдущего раздела, если его проанализировать внимательно, означает только, что мы знаем $p(R)$ с вероятностью 1 при условии, что $\langle f(R) \rangle$ известно для всех $f(R)$.

2.5. СРЕДНИЕ

Вопрос о том, что именно измерять в вероятностной системе, нетривиален. Практически могут измеряться отдельные значения случайной переменной (число животных определенного вида в заданном районе в данный момент времени; электрический ток, проходящий через некоторый элемент цепи в каждом из большого числа повторений этой цепи, образующих статистический ансамбль, и т. д.) или же, при другом способе измерения, измерительная процедура может автоматически конструировать какое-либо среднее. Например, чтобы измерить электрический ток, измеряется перенесенный электрический заряд и делится на прошедшее время. Это дает значение среднего числа электронов, перенесенных в единицу времени. Важно отметить, что существенная особенность второго способа измерения состоит в том, что обычно доступно измерению только ограниченное число средних значений, так, например, более высокие моменты измерить нельзя.

В противоположность этому, когда измеряются отдельные события (как, например, при подсчете числа животных), можно составить средние наблюдаемых величин очевидным способом:

$$\bar{X}_N = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N X(n). \quad (2.5.1)$$

Числа $X(n)$ представляют собой конкретные наблюдаемые значения величины X . Следует ожидать, что, по мере того как число N стремится к бесконечности, величина \bar{X}_N приближается к среднему $\langle X \rangle$; более того,

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N f[X(n)] = \lim_{N \rightarrow \infty} \overline{f(X)}_N = \langle f(X) \rangle, \quad (2.5.2)$$

и указанная процедура, если ее выполнить для всех функций f , определяет плотность вероятности $p(x)$ величины X . Справедливость такой процедуры зависит от степени независимости последовательных измерений и обсуждается в разд. 2.5.2.

В том же случае, когда с помощью измерительной процедуры непосредственно определяются сами средние, как правило, нельзя измерить $X(n)$, и поэтому в общем случае определить $\overline{f(X)}_N$ нельзя. Можно определить только $f(\bar{X}_N)$ — совсем другую величину (за исключением того случая, когда функция f линейна). Часто встречаются ситуации, при которых измеряемые величины связаны (с помощью некоторой теории) со средними значениями определенных функций. Однако надеяться измерить, например, среднее значение произвольной функции от числа прошедших в проводнике электронов — совершенно

безнадежное дело, поскольку не подсчитываются конкретные числа электронов, прошедших за различное время. Среднее же значение измерить можно, можно измерить даже среднеквадратичное число электронов, хотя доступные измерительные методы и не являются прямыми.

2.5.1. МОМЕНТЫ И КОРРЕЛЯЦИИ

Представляют интерес *моменты* $\langle X^n \rangle$, поскольку часто именно их легко рассчитать. Плотности вероятностей всегда должны стремиться к нулю при $x \rightarrow \pm \infty$, и легко понять, что высокие моменты говорят только о свойствах плотностей при больших значениях X . На практике наиболее важными величинами являются первые и вторые моменты. Для переменной X *дисперсия* определяется выражением

$$D\{X\} \equiv \{\sigma[X]\}^2 \equiv \langle [X - \langle X \rangle]^2 \rangle, \quad (2.5.3)$$

и, как хорошо известно, дисперсия $D\{X\}$ или квадратный корень из этой величины, называемый *среднеквадратичным отклонением* $\sigma[X]$, служат мерами степени отклонения величины X от среднего значения $\langle X \rangle$.

Для случая нескольких переменных определим *корреляционную матрицу*

$$\langle X_i, X_j \rangle \equiv \langle (X_i - \langle X_i \rangle)(X_j - \langle X_j \rangle) \rangle \equiv \langle X_i X_j \rangle - \langle X_i \rangle \langle X_j \rangle. \quad (2.5.4)$$

Очевидно, что

$$\langle X_i, X_i \rangle = D\{X_i\}. \quad (2.5.5)$$

Если переменные попарно независимы, то корреляционная матрица диагональна.

2.5.2. ЗАКОН БОЛЬШИХ ЧИСЕЛ

В качестве применения предыдущих понятий исследуем следующую модель измерения. Предположим, что при N -кратном измерении одной и той же случайной величины получается набор значений $X(n)$ ($n = 1, 2, \dots, N$). Поскольку все они — результаты последовательных измерений одной и той же величины, можно считать, что для различных n величины $X(n)$ имеют одинаковые распределения вероятности; при этом, однако, не предполагается, что $X(n)$ не зависят друг от друга. Тем не менее если корреляционная матрица $\langle X(n), X(n) \rangle$ убывает

достаточно быстро при $|n - m| \rightarrow \infty$, то, вводя среднее арифметическое

$$\bar{X}_N = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N X(n), \quad (2.5.6)$$

можно показать, что

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \bar{X}_N = \langle X \rangle. \quad (2.5.7)$$

Ясно, что

$$\langle \bar{X}_N \rangle = \langle X \rangle. \quad (2.5.8)$$

Рассчитаем теперь дисперсию величины \bar{X}_N и докажем, что при определенных условиях она стремится к нулю при $N \rightarrow \infty$. Имеем

$$\langle \bar{X}_N \bar{X}_N \rangle - \langle \bar{X}_N \rangle^2 = \frac{1}{N^2} \sum_{n,m=1}^N \langle X_n, X_m \rangle. \quad (2.5.9)$$

Если $\langle X_n, X_m \rangle$ спадает достаточно быстро при $|n - m| \rightarrow \infty$, то получим

$$\lim_{N \rightarrow \infty} D \{ \bar{X}_N \} = 0 \quad (2.5.10)$$

так что $\lim_{N \rightarrow \infty} \bar{X}_N$ представляет собой детерминированную величину, равную $\langle X \rangle$. Эта величина является пределом в среднеквадратичном (см. ниже).

Для $\langle X_n, X_m \rangle$ могут быть выбраны две аппроксимации:

$$\text{а) } \langle X_n, X_m \rangle \sim K \lambda^{|m-n|} \quad (\lambda < 1) \quad (2.5.11)$$

в этом случае имеем

$$D \{ \bar{X}_N \} = \frac{2K}{N^2} \left(\frac{\lambda^{N+2} - N(\lambda - 1) - \lambda}{(\lambda - 1)^2} \right) - \frac{K}{N} \rightarrow 0; \quad (2.5.12)$$

$$\text{б) } \langle X_n, X_m \rangle \sim |n - m|^{-1} \quad (n \neq m) \quad (2.5.13)$$

при этом приближенно находим

$$D \{ \bar{X}_N \} \sim \frac{2}{N} \log N - \frac{1}{N} \rightarrow 0. \quad (2.5.14)$$

В обоих случаях $D \{ \bar{X}_N \} \rightarrow 0$. Скорость сходимости при этом существенно различна. Интерпретируя n и m как моменты времени, для ко-

торых были проведены измерения, можно видеть, что допустимо даже весьма медленное убывание функции корреляции. Закон больших чисел может быть сформулирован многими способами, которые удачно суммированы Папулисом [2.2]. Еще более точный результат дает центральная предельная теорема, которая устанавливает вид предельной функции распределения величины $\bar{X}_N - \langle X \rangle$ (см. разд. 2.8.2).

2.6. ХАРАКТЕРИСТИЧЕСКАЯ ФУНКЦИЯ

Возможна ситуация, когда переменные независимы, но не попарно. Для рассмотрения таких, а также других случаев вводится характеристическая функция.

Если s — вектор с компонентами (s_1, s_2, \dots, s_n) , а X — вектор случайных переменных (X_1, X_2, \dots, X_n) , то характеристическая функция (или, иначе, производящая функция моментов) определяется так:

$$\phi(s) = \langle \exp(is \cdot X) \rangle = \int dx p(x) \exp(is \cdot x). \tag{2.6.1}$$

Характеристическая функция обладает следующими свойствами [2.1, гл. XV]:

- 1) $\phi(0) = 1$;
- 2) $|\phi(s)| \leq 1$;
- 3) $\phi(s)$ — равномерно непрерывная функция своих аргументов для всех конечных действительных значений s [2.5];
- 4) если моменты $\langle \prod_i X_i^{m_i} \rangle$ существуют, то

$$\langle \prod_i X_i^{m_i} \rangle = \left[\prod_i \left(-i \frac{\partial}{\partial s_i} \right)^{m_i} \phi(s) \right]_{s=0}. \tag{2.6.2}$$

5) последовательность плотностей вероятности сходится к предельной плотности вероятности тогда и только тогда, когда соответствующие характеристические функции сходятся к характеристической функции предельной плотности вероятности;

6) формула обратного преобразования Фурье

$$p(x) = (2\pi)^{-n} \int ds \phi(s) \exp(-ix \cdot s). \tag{2.6.3}$$

В соответствии с этой формулой $\phi(s)$ определяет $p(x)$. Значит, характеристическая функция действительно *характеризует* плотность вероятности;

7) соотношения для независимых случайных переменных: из определения независимых случайных переменных в разд. 2.3.4 следует, что

переменные X_1, X_2, \dots независимы тогда и только тогда, когда

$$p(x_1, x_2, \dots, x_n) = p_1(x_1)p_2(x_2) \dots p_n(x_n); \quad (2.6.4)$$

в этом случае

$$\phi(s_1, s_2, \dots, s_n) = \phi_1(s_1)\phi_2(s_2) \dots \phi_n(s_n); \quad (2.6.5)$$

8) сумма независимых случайных переменных: если X_1, X_2, \dots — независимые случайные переменные и если

$$Y = \sum_{i=1}^n X_i, \quad (2.6.6)$$

а характеристическая функция для Y есть

$$\phi_y(s) = \langle \exp(isY) \rangle, \quad (2.6.7)$$

тогда

$$\phi_y(s) = \prod_{i=1}^n \phi_i(s). \quad (2.6.8)$$

Характеристическая функция играет в этой книге важную роль, связанную со свойством сходимости 5. Это свойство позволяет рассматривать сходимость характеристической функции; при этом доказательство часто оказывается легче, чем при анализе сходимости самого распределения вероятности. Более того, то, что характеристическая функция в самом деле определяет распределение (формула (2.6.3)), означает, что разные характеристические функции возникают благодаря разным исходным распределениям. Кроме того, непосредственное получение моментов, согласно (2.6.2), прямо связывает определение характеристической функции с нахождением измеряемых величин.

2.7. ПРОИЗВОДЯЩАЯ ФУНКЦИЯ КУМУЛЯНТОВ: КОРРЕЛЯЦИОННЫЕ ФУНКЦИИ И КУМУЛЯНТЫ

Следующее важное свойство характеристической функции проявляется при рассмотрении ее логарифма:

$$\Phi(s) = \log \phi(s), \quad (2.7.1)$$

который называется *производящей функцией кумулянтов*. Предположим, что существуют все моменты, так что $\phi(s)$, а значит, и $\Phi(s)$ разлагаются в степенной ряд, который записывается в виде

$$\Phi(s) = \sum_{r=1}^{\infty} \frac{i^r}{r!} \sum_{\{m\}} \frac{r!}{m_1! \dots m_n!} \langle X_1^{m_1} X_2^{m_2} \dots X_n^{m_n} \rangle s_1^{m_1} s_2^{m_2} \dots s_n^{m_n} \delta(r, \sum_{i=1}^n m_i), \quad (2.7.2)$$

где величины $\langle\langle X_1^{m_1} X_2^{m_2} \dots X_n^{m_n} \rangle\rangle$ называются *кумулянтами* переменных X . Из этого обозначения не следует, что кумулянты представляют собой функции от данного произведения различных степеней компонент X , оно просто указывает моменты наивысшей кратности, которые фигурируют в представлении кумулянтов через моменты. Стратонович [2.4] использует также термин *корреляционные функции*, однако этот термин мы зарезервировали для обозначения кумулянтов в случае многих переменных X_i ¹⁾. Действительно, если все X независимы, то свойство факторизации (2.6.8) означает, что производящая функция кумулянтов $\Phi(s)$ есть сумма n членов, каждый из которых представляет собой функцию только одной переменной s_i , и, следовательно, все коэффициенты при смешанных произведениях переменных (т. е., согласно нашей терминологии, *корреляционные функции*) равны нулю. Верно и обратное утверждение. Таким образом, величина корреляционной функции служит мерой степени взаимосвязанности переменных.

Кумулянты и корреляционные функции можно выразить через моменты, если разложить характеристическую функцию в степенной ряд:

$$\phi(s) = \sum_{r=1}^{\infty} \frac{i^r}{r!} \sum_{\{m_i\}} \langle X_1^{m_1} X_2^{m_2} \dots X_n^{m_n} \rangle \frac{r!}{m_1! m_2! \dots m_n!} \delta(r, \sum_{i=1}^n m_i) s_1^{m_1} s_2^{m_2} \dots s_n^{m_n}, \quad (2.7.3)$$

далее разложить в степенной ряд также логарифм этой величины и сравнить этот ряд с (2.7.2). Для $\Phi(s)$ не существует какой-либо *простой* общей формулы, выражающей кумулянты через моменты, но для нескольких кумулянтов низших порядков можно привести явные выражения

$$\langle\langle X_i \rangle\rangle = \langle X_i \rangle \quad (2.7.4)$$

$$\langle\langle X_i X_j \rangle\rangle = \langle X_i X_j \rangle - \langle X_i \rangle \langle X_j \rangle \quad (2.7.5)$$

$$\begin{aligned} \langle\langle X_i X_j X_k \rangle\rangle = & \langle X_i X_j X_k \rangle - \langle X_i X_j \rangle \langle X_k \rangle - \langle X_i \rangle \langle X_j X_k \rangle \\ & - \langle X_i X_k \rangle \langle X_j \rangle + \langle X_i \rangle \langle X_j \rangle \langle X_k \rangle, \end{aligned} \quad (2.7.6)$$

причем все эти формулы действуют и тогда, когда какие-то из чисел i, j, k, l совпадают. Явная общая формула может быть получена следующим образом. Предположим, что требуется найти кумулянт

¹⁾ Термин «корреляционная функция» удобно применять в том случае, когда одна или несколько случайных величин зависят от параметра, например, времени, т. е. когда имеется случайный процесс (или процессы). Тогда этот термин подчеркивает зависимость кумулянта от значений параметра. — *Прим. ред.*

$\langle\langle X_1 X_2 X_3 \dots X_n \rangle\rangle$. Процедура заключается в следующем:

- 1) нужно написать последовательность из n точек ... ;
- 2) разбить эту последовательность на $p + 1$ подмножеств, расставив угловые скобки:

$\langle \dots \rangle \langle \dots \rangle \langle \dots \rangle \dots \langle \dots \rangle$;

- 3) вставить вместо точек символы $X_1 \dots X_n$ таким образом, чтобы были выписаны все *различные* выражения, причем что понимается под словом «различные», поясняет следующий пример:

$$\langle X_1 \rangle \langle X_2 X_3 \rangle = \langle X_1 \rangle \langle X_3 X_2 \rangle \neq \langle X_3 \rangle \langle X_1 X_2 \rangle ;$$

- 4) взять сумму всех указанных выражений, соответствующих данному p , и обозначить эту сумму $C_p(X_1, X_2, \dots, X_n)$;

$$5) \langle\langle X_1 X_2 \dots X_n \rangle\rangle = \sum_{p=0}^{n-1} (-1)^p p! C_p(X_1, X_2, \dots, X_n). \quad (2.7.7)$$

Вывод этой формулы дал Меерон [2.6]. Специальную процедуру ее получения предложил ван Кампен [2.7];

- б) *кумулянты с повторяющимися элементами*: например, для определения $\langle\langle X_1^2 X_3 X_2 \rangle\rangle$ нетрудно найти выражение для $\langle\langle X_1 X_2 X_3 X_4 \rangle\rangle$ и положить в нем $X_4 = X_1$.

2.7.1. ПРИМЕР: КУМУЛЯНТ 4-ГО ПОРЯДКА $\langle\langle X_1 X_2 X_3 X_4 \rangle\rangle$

а) $p = 0$,

единственный член есть $\langle X_1 X_2 X_3 X_4 \rangle \equiv C_0(X_1 X_2 X_3 X_4)$.

б) $p = 1$

разбиение $\langle \cdot \rangle \langle \dots \rangle$ дает вклад

$$\{\langle X_1 \rangle \langle X_2 X_3 X_4 \rangle + \langle X_2 \rangle \langle X_3 X_4 X_1 \rangle + \langle X_3 \rangle \langle X_4 X_1 X_2 \rangle + \langle X_4 \rangle \langle X_1 X_2 X_3 \rangle\} \equiv D_1,$$

разбиение $\langle \dots \rangle \langle \dots \rangle$ дает вклад

$$\langle X_1 X_2 \rangle \langle X_3 X_4 \rangle + \langle X_1 X_3 \rangle \langle X_2 X_4 \rangle + \langle X_1 X_4 \rangle \langle X_2 X_3 \rangle \equiv D_2.$$

Итак,

$$D_1 + D_2 = C_1(X_1 X_2 X_3 X_4).$$

в) $p = 2$, разбиение $\langle \cdot \rangle \langle \cdot \rangle \langle \cdot \rangle$ дает вклад

$$\begin{aligned} & \langle X_1 \rangle \langle X_2 \rangle \langle X_3 X_4 \rangle + \langle X_1 \rangle \langle X_3 \rangle \langle X_2 X_4 \rangle + \langle X_1 \rangle \langle X_4 \rangle \langle X_2 X_3 \rangle \\ & + \langle X_2 \rangle \langle X_3 \rangle \langle X_1 X_4 \rangle + \langle X_2 \rangle \langle X_4 \rangle \langle X_1 X_3 \rangle + \langle X_3 \rangle \langle X_4 \rangle \langle X_1 X_2 \rangle \\ & = C_2(X_1 X_2 X_3 X_4). \end{aligned}$$

г) $p = 3$, разбиение $\langle \cdot \rangle \langle \cdot \rangle \langle \cdot \rangle \langle \cdot \rangle$ дает вклад

$$\langle X_1 \rangle \langle X_2 \rangle \langle X_3 \rangle \langle X_4 \rangle = C_3(X_1 X_2 X_3 X_4).$$

Следовательно,

$$\langle\langle X_1 X_2 X_3 X_4 \rangle\rangle = C_0 - C_1 + 2C_2 - 6C_3. \quad (2.7.8)$$

2.7.2. ЗНАЧИМОСТЬ КУМУЛЯНТОВ

Из (2.7.4, 5) видно, что первые два кумулянта — это средние $\langle X_i \rangle$ и корреляционная матрица $\langle X_i, X_j \rangle$. Значимость кумулянтов более высокого порядка убывает с увеличением порядка, но не так, как у моментов. Например, нельзя все *моменты* порядка более высокого, чем заданный, положить равными нулю, поскольку $\langle X^{2n} \rangle \geq \langle X^n \rangle^2$, и, следовательно, все моменты несут информацию о моментах более низкого порядка. Для кумулянтов же вполне допустимо положить

$$\langle\langle X \rangle\rangle = a$$

$$\langle\langle X^2 \rangle\rangle = \sigma^2$$

$$\langle\langle X^n \rangle\rangle = 0 \quad (n > 2),$$

и, используя формулу обратного преобразования для характеристической функции, нетрудно получить

$$p(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp[-(x-a)^2/2\sigma^2], \quad (2.7.9)$$

т. е. гауссово распределение вероятности. Затруднительно добавить, однако, что-либо к высказанному суждению. Действительно, теорема Марцинкевича [2.8, 9] устанавливает, что производящая функция кумулянтов не может быть полиномом степени, большей чем 2, т. е. либо все кумулянты, кроме первых двух, равны нулю, либо имеется бесконечное число отличных от нуля кумулянтов. Важность кумулянтов связана прежде всего с тем, что при их помощи определяются корреляционные функции различных переменных, а это в дальнейшем позволит применять важные аппроксимационные методы.

2.8. ГАУССОВСКОЕ И ПУАССОНОВСКОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ВЕРОЯТНОСТЕЙ

2.8.1. ГАУССОВСКОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ

Гауссовское, или нормальное, распределение играет очень большую роль. Ниже приведены основные касающиеся его факты.

Если X — вектор, составленный из n гауссовских случайных переменных, то соответствующее распределение плотности вероятности может быть записано в виде

$$p(\mathbf{x}) = [(2\pi)^n \det(\sigma)]^{-1/2} \exp[-\frac{1}{2}(\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}})^T \sigma^{-1}(\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}})], \quad (2.8.1)$$

так что

$$\langle X \rangle = \int d\mathbf{x} \mathbf{x} p(\mathbf{x}) = \bar{\mathbf{x}}, \quad (2.8.2)$$

$$\langle XX^T \rangle = \int d\mathbf{x} \mathbf{x} \mathbf{x}^T p(\mathbf{x}) = \bar{\mathbf{x}} \bar{\mathbf{x}}^T + \sigma. \quad (2.8.3)$$

При этом характеристическая функция дается выражением

$$\phi(\mathbf{s}) = \langle \exp(i\mathbf{s}^T X) \rangle = \exp(i\mathbf{s}^T \bar{\mathbf{x}} - \frac{1}{2} \mathbf{s}^T \sigma \mathbf{s}). \quad (2.8.4)$$

Особенно простой вид этой характеристической функции связан с тем, что все кумулянты порядка, большего чем 2, равны нулю, а значит, все моменты порядка, большего двух, выражаются через моменты первого и второго порядков. Соотношение (2.8.3) означает, что σ — корреляционная матрица в соответствии с разд. 2.5.1, т. е. матрица, элементы которой равны корреляционным функциям второго порядка. При этом, конечно, матрица σ симметрична.

Точное соотношение между высшими моментами и ковариационной матрицей σ может быть непосредственно выписано, если использовать связь между моментами и характеристической функцией (разд. 2.6, свойство 4). Формула проста только при $\bar{\mathbf{x}} = 0$, когда нечетные моменты равны нулю, а четные моменты удовлетворяют соотношению

$$\langle X_i X_j X_k \dots \rangle = \frac{(2N)!}{N! 2^N} \{ \sigma_{ij} \sigma_{kl} \sigma_{mn} \dots \}_{\text{sym}},$$

где индекс “sym” означает симметризованную форму произведений, составленных из σ ; $2N$ — порядок момента. Например,

$$\langle X_1 X_2 X_3 X_4 \rangle = \frac{4!}{4.2!} \left\{ \frac{1}{3} [\sigma_{12} \sigma_{34} + \sigma_{41} \sigma_{23} + \sigma_{13} \sigma_{24}] \right\} = \sigma_{12} \sigma_{34} + \sigma_{41} \sigma_{23} + \sigma_{13} \sigma_{24} \quad (2.8.5)$$

$$\langle X_1^4 \rangle = \frac{4!}{4.2!} \{ \sigma_{11}^2 \} = 3\sigma_{11}^2. \quad (2.8.6)$$

2.8.2. ЦЕНТРАЛЬНАЯ ПРЕДЕЛЬНАЯ ТЕОРЕМА

Гауссовское распределение играет особую роль благодаря целому ряду причин. На практике многие переменные действительно хорошо аппроксимируются гауссовскими распределениями. Почему это так — устанавливает *центральная предельная теорема*, которая, если ее сформулировать коротко, утверждает, что случайная переменная, представляющая собой сумму большого числа независимых составляющих с произвольными распределениями, является гауссовской. Точнее, пусть $X_1, X_2, X_3, \dots, X_n$ — независимые случайные переменные, такие, что

$$\langle X_i \rangle = 0, \quad D \{X_i\} = b_i^2, \tag{2.8.7}$$

и пусть $p_i(x_i)$ — функции распределения величин X_i .

Введем обозначения

$$S_n = \sum_{i=1}^n X_i \tag{2.8.8}$$

$$\sigma_n^2 = D \{S_n\} = \sum_{i=1}^n b_i^2. \tag{2.8.9}$$

Потребуем далее выполнения *условия Линдберга*

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \left[\frac{1}{\sigma_n^2} \sum_{i=1}^n \int_{|x| > t\sigma_n} dx x^2 p_i(x) \right] = 0 \tag{2.8.10}$$

для каждого фиксированного $t > 0$. При удовлетворении перечисленных условий распределение нормированных сумм S_n/σ_n с ростом n стремится к гауссовскому распределению с нулевым средним и единичной вариацией.

Доказательство этой теоремы можно найти в [2.1]. Прокомментируем, однако, исходные предположения. Отметим, во-первых, что была потребована независимость составляющих X_i . В этом условии нет абсолютной необходимости: например, можно выбрать

$$X_i = \sum_{r=1}^{i+j} Y_r, \tag{2.8.11}$$

где Y_j уже независимы. Поскольку сумма величин X может быть записана в виде суммы величин Y с некоторыми конечными коэффициентами, теорема также действует.

Грубо говоря, выполнение центральной предельной теоремы можно ожидать, если корреляция между X_i и X_j стремится к нулю при $|i - j| \rightarrow \infty$ достаточно быстро. Условие Линдберга (2.8.10) не имеет наглядной интерпретации, можно только отметить, что это наи-

более слабое ограничение, обеспечивающее соблюдение требования, чтобы вероятности больших значений $|X_i|$ были достаточно малы. Например, если все b_i бесконечно велики или больше, чем некоторая постоянная C , то, очевидно, последовательность σ_n^2 расходится при $n \rightarrow \infty$. Сумма интегралов в (2.8.10) — это сумма вкладов в дисперсии значений $|X_i| > t\sigma_n$; при этом ясно, что при $n \rightarrow \infty$ каждый такой вклад стремится к нулю. Условие Линдеберга требует, чтобы сумма всех вкладов нарастала медленнее σ_n^2 . В действительности это весьма слабое ограничение, которое удовлетворяется, например, если $|X_i| < C$ или если $p_i(x)$ стремится к нулю при $x \rightarrow \pm\infty$ достаточно быстро. Исключением служит распределение

$$p_i(x) = a_i[\pi(x^2 + a_i^2)]^{-1}, \quad (2.8.12)$$

которое называется распределением *Коши*, или *лоренцианом*. Дисперсия этого распределения бесконечно велика, и в самом деле, сумма всех X_i имеет распределение такого же вида, как (2.8.12), где a_i заменено на $\sum_{i=1}^n a_i$. Очевидно, в этом случае условие Линдеберга не выполняется. Условие, аналогичное рассмотренному и также называемое условием Линдеберга, будет фигурировать в разд. 3.3.1, где обсуждается замена дискретного процесса на процесс с непрерывными приращениями.

2.8.3. ПУАССОНОВСКОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ

Распределение Пуассона занимает центральное место в изучении случайных величин, принимающих целые положительные значения. Если X — соответствующая переменная, то распределение Пуассона определяется формулой

$$P(X = x) \equiv P(x) = e^{-\alpha} \alpha^x / x!. \quad (2.8.13)$$

Ясно, что *факториальные моменты*, определяемые как

$$\langle X^r \rangle_f = \langle x(x-1) \dots (x-r+1) \rangle, \quad (2.8.14)$$

даются формулой

$$\langle X^r \rangle_f = \alpha^r. \quad (2.8.15)$$

Для переменных, принимающих целые неотрицательные значения, естественно ввести *производящую функцию*

$$G(s) = \sum_{x=0}^{\infty} s^x P(x) = \langle s^x \rangle, \quad (2.8.16)$$

которая связана с характеристической функцией соотношением

$$G(s) = \phi(-i \log s). \quad (2.8.17)$$

Производящая функция обладает следующим полезным свойством:

$$\langle X^r \rangle_f = \left[\left(\frac{\partial}{\partial s} \right)^r G(s) \right]_{s=1}. \quad (2.8.18)$$

Для распределения Пуассона имеем

$$G(s) = \sum_{x=0}^{\infty} \frac{e^{-\alpha} (s\alpha)^x}{x!} = \exp[\alpha(s-1)]. \quad (2.8.19)$$

Можно определить также факториальную производящую функцию $g(s)$ кумулянтов

$$g(s) = \log G(s) \quad (2.8.20)$$

и факториальные кумулянты $\langle\langle X^r \rangle\rangle_f$ соотношением

$$g(s) = \sum_{x=1}^{\infty} \langle\langle X^r \rangle\rangle_f \frac{(s-1)^r}{r!}.$$

Нетрудно видеть, что для распределения Пуассона все факториальные кумулянты, кроме первого, равны нулю.

Распределение Пуассона естественным образом возникает в самых разнообразных ситуациях; так, оно уже встречалось в разд. 1.4.1 как решение простого управляющего уравнения. Существенная роль, которую играет распределение Пуассона в изучении целочисленных случайных переменных, во многом аналогична той роли, которую играет гауссовское распределение при изучении переменных с непрерывной областью изменения. Однако единственным простым обобщением распределения Пуассона на случай многих переменных служит обычное произведение нескольких таких распределений вида

$$P(x_1, x_2, x_3, \dots) = \prod_{i=1}^n \frac{e^{-\alpha_i} (\alpha_i)^{x_i}}{x_i!}. \quad (2.8.21)$$

Понятия коррелированного многомерного пуассоновского распределения, являющегося аналогом понятия многомерного гауссовского распределения, не существует.

2.9. ПРЕДЕЛЫ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЕЙ СЛУЧАЙНЫХ ПЕРЕМЕННЫХ

Значительная доля работы в расчетах связана с нахождением *аппроксимаций* случайных переменных, при этом естественным образом возникает понятие *предела последовательности случайных переменных*. Однако нет единого способа определения такого предела.

В самом деле, допустим, что имеется вероятностное пространство Ω и последовательность случайных переменных X_n , которые определе-

ны на Ω . Тогда под пределом последовательности

$$X = \lim_{n \rightarrow \infty} X_n \quad (2.9.1)$$

понимается такая случайная переменная X , к которой X_n приближается в определенном смысле. Если рассматривается вероятностное пространство Ω с элементами ω и плотностью вероятности $p(\omega)$, то имеются различные возможности. Так, можно выбрать следующие определения.

2.9.1. ПРЕДЕЛ ПОЧТИ НАВЕРНОЕ

Последовательность X_n сходится к X *почти наверное*, если для всех ω , кроме множества нулевой вероятности, имеет место сходимост

$$\lim_{n \rightarrow \infty} X_n(\omega) = X(\omega). \quad (2.9.2)$$

Таким образом, реализации X_n приближаются к X , и мы записываем в этом случае

$$\text{ac-lim}_{n \rightarrow \infty} X_n = X. \quad (2.9.3)$$

2.9.2. ПРЕДЕЛ В СРЕДНЕКВАДРАТИЧНОМ

Другая возможность состоит в рассмотрении $X_n(\omega)$ как функции ω и нахождении среднеквадратичного отклонения $X_n(\omega)$ от X . При этом говорится, что X_n сходится к X *среднеквадратично*, если

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int d\omega p(\omega) [X_n(\omega) - X(\omega)]^2 \equiv \lim_{n \rightarrow \infty} \langle (X_n - X)^2 \rangle = 0. \quad (2.9.4)$$

Этот вид предела хорошо известен в теории гильбертовых пространств и обозначается

$$\text{ms-lim}_{n \rightarrow \infty} X_n = X. \quad (2.9.5)$$

2.9.3. СТОХАСТИЧЕСКИЙ ПРЕДЕЛ, ИЛИ ПРЕДЕЛ ПО ВЕРОЯТНОСТИ

Мы можем рассматривать также приближение $X_n(\omega)$ к X в том смысле, что вероятность отклонения от X стремится к нулю. В точной формулировке это значит, что если для любого $\varepsilon > 0$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P(|X_n - X| > \varepsilon) = 0, \quad (2.9.6)$$

то мы имеем *предел по вероятности* последовательности X_n .

Заметим, что рассматриваемая вероятность отклонения может быть записана также в ином виде. Пусть $\chi_\varepsilon(z)$ — следующая функция:

$$\begin{aligned} \chi_\varepsilon(z) &= 1 && |z| > \varepsilon \\ &= 0 && |z| \leq \varepsilon. \end{aligned} \quad (2.9.7)$$

Тогда

$$P(|X_n - X| > \varepsilon) = \int d\omega p(\omega) \chi_\varepsilon(|X_n - X|). \quad (2.9.8)$$

В этом случае пишем

$$\text{st-lim}_{n \rightarrow \infty} X_n = X. \quad (2.9.9)$$

2.9.4. ПРЕДЕЛ ПО РАСПРЕДЕЛЕНИЮ

Еще более слабая форма сходимости возникает, если для некоторой непрерывной ограниченной функции $f(x)$ выполняется равенство

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \langle f(X_n) \rangle = \langle f(X) \rangle. \quad (2.9.10)$$

В этом случае говорят, что имеет место сходимость к пределу *по распределению*. В частности, используя в качестве $f(x)$ функцию $\exp(ixs)$, видим, что выписанное соотношение означает сходимость последовательности характеристических функций и, следовательно, сходимость плотности вероятности переменных X_n к плотности вероятности переменной X .

2.9.5. ВЗАИМОСВЯЗЬ РАЗЛИЧНЫХ ПРЕДЕЛОВ

Можно показать, что выполняются следующие соотношения:

сходимость почти наверное \Rightarrow сходимость в среднеквадратичном;
сходимость в среднеквадратичном \Rightarrow сходимость по вероятности;
сходимость по вероятности \Rightarrow сходимость по распределению.

Все рассмотренные виды пределов находят применение в различных приложениях.

Марковские процессы

3.1. СТОХАСТИЧЕСКИЕ ПРОЦЕССЫ

Все примеры, приведенные в гл. 1, математически описываются как стохастические процессы, под которыми понимаются в широком смысле системы, ведущие себя во времени вероятностным образом, или, точнее, системы, в которых имеется определенная зависящая от времени случайная переменная $X(t)$. Можно измерить значения x_1, x_2, x_3, \dots и др. переменной $X(t)$ в моменты времени t_1, t_2, t_3, \dots и предположить, что существует набор совместных плотностей вероятностей

$$p(\mathbf{x}_1, t_1; \mathbf{x}_2, t_2; \mathbf{x}_3, t_3; \dots), \quad (3.1.1)$$

который полностью описывает систему.

Через совместные плотности вероятностей можно определить условные плотности вероятностей

$$\begin{aligned} p(\mathbf{x}_1, t_1; \mathbf{x}_2, t_2; \dots | \mathbf{y}_1, \tau_1; \mathbf{y}_2, \tau_2; \dots) \\ = p(\mathbf{x}_1, t_1; \mathbf{x}_2, t_2; \dots; \mathbf{y}_1, \tau_1; \mathbf{y}_2, \tau_2; \dots) / p(\mathbf{y}_1, \tau_1; \mathbf{y}_2, \tau_2; \dots). \end{aligned} \quad (3.1.2)$$

Эти определения справедливы независимо от порядка следования моментов времени, хотя обычно требуется рассмотреть только последовательность времен, нарастающую справа налево, т. е.

$$t_1 \geq t_2 \geq t_3 \geq \dots \geq \tau_1 \geq \tau_2 \geq \dots. \quad (3.1.3)$$

Изучение эволюционного уравнения системы приводит к необходимости рассматривать условные вероятности как предсказания будущих значений переменной $X(t)$ (т.е. x_1, x_2, \dots в моменты t_1, t_2, \dots) при условии, что известны значения в прошлом (значения y_1, y_2, \dots в моменты τ_1, τ_2, \dots).

Понятие обычного стохастического процесса в общем случае весьма широко. Для того чтобы определить процесс, по меньшей мере нужно знать все совместные вероятности вида (3.1.1). Причем если такого знания оказывается достаточно для определения процесса, то его называют *сепарабельным стохастическим процессом*. Все рассматриваемые в этой книге процессы предполагаются сепарабельными.

Наиболее простой вид стохастического процесса — это процесс с полностью независимыми значениями, для которого

$$p(\mathbf{x}_1, t_1; \mathbf{x}_2, t_2; \mathbf{x}_3, t_3; \dots) = \prod_i p(\mathbf{x}_i, t_i); \quad (3.1.4)$$

здесь время предполагается дискретным. Это равенство означает, что значение переменной X в момент t вовсе не зависит от ее значений в предшествующие либо последующие моменты времени. Еще более специальный случай имеет место, когда $p(\mathbf{x}_i, t_i)$ не зависят от t_i , так что для всех моментов времени закон распределения вероятности один и тот же. Это случай испытаний Бернулли, когда вероятностный процесс воспроизводится в последовательные моменты времени.

Следующим понятием в ряду наиболее простых служит понятие *марковского процесса*. В нем для определения будущего достаточно знать настоящее.

3.2. МАРКОВСКИЙ ПРОЦЕСС

Условия Маркова формулируются на языке условных вероятностей. Для случая, когда моменты времени упорядочены, как указано в (3.1.3), потребуем, чтобы условная вероятность полностью определялась знанием состояния системы в самый последний момент времени, т. е.

$$\begin{aligned} p(\mathbf{x}_1, t_1; \mathbf{x}_2, t_2; \dots | \mathbf{y}_1, \tau_1; \mathbf{y}_2, \tau_2; \dots) \\ = p(\mathbf{x}_1, t_1; \mathbf{x}_2, t_2; \dots | \mathbf{y}_1, \tau_1). \end{aligned} \quad (3.2.1)$$

Это условие служит просто более точной формулировкой предположений, высказанных Эйнштейном, Смолуховским и другими авторами. Уже само по себе оно очень сильное. Так, это условие означает, что все можно определить через простую условную вероятность $p(\mathbf{x}_1, t_1 | \mathbf{y}_1, \tau_1)$. Например, используя определение условной плотности вероятности $p(\mathbf{x}_1, t_1; \mathbf{x}_2, t_2 | \mathbf{y}_1, \tau_1) = p(\mathbf{x}_1, t_1 | \mathbf{x}_2, t_2; \mathbf{y}_1, \tau_1)p(\mathbf{x}_2, t_2 | \mathbf{y}_1, \tau_1)$ и постулат Маркова (3.2.1), находим

$$p(\mathbf{x}_1, t_1; \mathbf{x}_2, t_2 | \mathbf{y}_1, \tau_1) = p(\mathbf{x}_1, t_1 | \mathbf{x}_2, t_2)p(\mathbf{x}_2, t_2 | \mathbf{y}_1, \tau_1). \quad (3.2.2)$$

Нетрудно видеть, что и произвольная совместная вероятность может быть выражена в следующем простом виде:

$$\begin{aligned} p(\mathbf{x}_1, t_1; \mathbf{x}_2, t_2; \mathbf{x}_3, t_3; \dots; \mathbf{x}_n, t_n) \\ = p(\mathbf{x}_1, t_1 | \mathbf{x}_2, t_2)p(\mathbf{x}_2, t_2 | \mathbf{x}_3, t_3)p(\mathbf{x}_3, t_3 | \mathbf{x}_4, t_4) \dots \\ \dots p(\mathbf{x}_{n-1}, t_{n-1} | \mathbf{x}_n, t_n)p(\mathbf{x}_n, t_n), \end{aligned} \quad (3.2.3)$$

если только

$$t_1 \geq t_2 \geq t_3 \geq \dots \geq t_{n-1} \geq t_n. \quad (3.2.4)$$

3.2.1. СОГЛАСОВАННОСТЬ. УРАВНЕНИЕ ЧЕПМЕНА — КОЛМОГОРОВА

В разд. 2.3.3 установлено, что суммирование в совместной вероятности по всем взаимоисключающим событиям, относящимся к одной случайной переменной, исключает эту переменную, т. е.

$$\sum_B P(A \cap B \cap C \dots) = P(A \cap C \dots), \quad (3.2.5)$$

Применяя это правило к стохастическим процессам, получаем два кажущиеся на первый взгляд похожими равенства. Первое из них

$$\begin{aligned} p(\mathbf{x}_1, t_1) &= \int d\mathbf{x}_2 p(\mathbf{x}_1, t_1; \mathbf{x}_2, t_2) \\ &= \int d\mathbf{x}_2 p(\mathbf{x}_1, t_1 | \mathbf{x}_2, t_2) p(\mathbf{x}_2, t_2). \end{aligned} \quad (3.2.6)$$

Это равенство в равной мере справедливо для всех стохастических процессов и стоит первым в иерархии аналогичных равенств для условных вероятностей. Следующим в этом ряду нужно записать второе из упомянутых выше равенств:

$$\begin{aligned} p(\mathbf{x}_1, t_1 | \mathbf{x}_3, t_3) &= \int d\mathbf{x}_2 p(\mathbf{x}_1, t_1; \mathbf{x}_2, t_2 | \mathbf{x}_3, t_3) \\ &= \int d\mathbf{x}_2 p(\mathbf{x}_1, t_1 | \mathbf{x}_2, t_2; \mathbf{x}_3, t_3) p(\mathbf{x}_2, t_2 | \mathbf{x}_3, t_3). \end{aligned} \quad (3.2.7)$$

Данное равенство также всегда применимо. Используем теперь условия Маркова. Если $t_1 \geq t_2 \geq t_3$, то можно опустить зависимость от t_3 в условной вероятности, содержащей два условия. Это дает уравнение

$$p(\mathbf{x}_1, t_1 | \mathbf{x}_3, t_3) = \int d\mathbf{x}_2 p(\mathbf{x}_1, t_1 | \mathbf{x}_2, t_2) p(\mathbf{x}_2, t_2 | \mathbf{x}_3, t_3), \quad (3.2.8)$$

которое называют уравнением *Чепмена — Колмогорова*¹⁾.

В чем состоит существенное различие между (3.2.8) и (3.2.6)? Очевидный ответ состоит в том, что равенство (3.2.6) написано для безусловных вероятностей, тогда как (3.2.7) — для условных вероятностей. Уравнение (3.2.8) — это довольно сложное нелинейное функциональное уравнение, связывающее все условные вероятности $p(\mathbf{x}_i, t_i | \mathbf{x}_j, t_j)$ друг с другом. Соотношение же (3.2.6) просто выражает единовременную вероятность для момента t_1 , последующего по отношению к t_2 , через условную вероятность $p(\mathbf{x}_1, t_1 | \mathbf{x}_2, t_2)$.

¹⁾ Впервые уравнение такого типа было получено М. Смолуховским [3.7*, 8*] см. русский перевод в [1.18*, с. 212, 320]). Поэтому данное уравнение было бы лучше называть уравнением Смолуховского — Чепмена — Колмогорова. — *Прим. ред.*

Уравнение Чепмена — Колмогорова имеет много решений. Легче всего понять это, выводя дифференциальную форму уравнения, что и делается в разд. 3.4.1 при определенных довольно слабых ограничениях.

3.2.2. ДИСКРЕТНОЕ ПРОСТРАНСТВО СОСТОЯНИЙ

В том случае, когда имеется дискретная переменная, будем использовать символ $N = (N_1, N_2, N_3, \dots)$, где N_i — случайные величины, принимающие целые значения. Очевидно, что можно произвести замену

$$\int dx \leftrightarrow \sum_n. \quad (3.2.9)$$

Тогда уравнение Чепмена — Колмогорова для процесса рассматриваемого типа запишется в виде

$$P(\mathbf{n}_1, t_1 | \mathbf{n}_3, t_3) = \sum_{\mathbf{n}_2} P(\mathbf{n}_1, t_1 | \mathbf{n}_2, t_2) P(\mathbf{n}_2, t_2 | \mathbf{n}_3, t_3); \quad (3.2.10)$$

здесь стоит произведение матриц, которые могут быть и бесконечномерными.

3.2.3. БОЛЕЕ ОБЩИЕ МЕРЫ

Для более общей формулировки в (3.2.8) можно было бы использовать меру $d\mu(x)$ вместо dx ; при этом имеется широкая возможность выбора. Например, когда $\mu(x)$ — ступенчатая функция со скачками при целочисленных значениях x , охватывается случай пространства дискретных состояний. Большинство математических исследований выполняется в наиболее общем виде. Для приложений такая общность может привести к потере ясности, поэтому, где это возможно, будем отдавать предпочтение более специальным обозначениям.

3.3. ПОНЯТИЕ НЕПРЕРЫВНОСТИ ДЛЯ СТОХАСТИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

Есть два совершенно разных вопроса: имеет ли случайная переменная $X(t)$ непрерывный диапазон возможных значений и непрерывна ли траектория $X(t)$ как функция t . Например, в случае газа, состоящего из молекул со скоростями $V(t)$, ясно, что все возможные значения $V(t)$ реализуемы, так что диапазон изменения $V(t)$ непрерывен. Однако часто рассматривается модель твердых сфер, в которой считается, что столкновения происходят мгновенно. В такой модели скорость до соударения v_i в момент соударения мгновенно изменяется до другой вели-

чины v_f , так что кривая $V(t)$ разрывна. Тем не менее следует ожидать, что положение $X(t)$ молекулы газа в такой модели будет непрерывной функцией времени.

Теперь возникает главный вопрос. Существуют ли в действительности *марковские* процессы с *непрерывными траекториями*? Выделим здесь комбинацию понятий *марковские* и *непрерывные*. Почти наверняка справедливо утверждение, что в классической ситуации (т. е. не квантовомеханической) все переменные с непрерывным диапазоном изменения обладают непрерывными траекториями. Даже упомянутый газ из жестких сфер представляет собой идеализацию, а в действительности в соответствии с уравнениями механики следует допустить, что действующий потенциал приводит к непрерывному отклонению молекулы в процессе столкновения. Если наблюдение производится на достаточно мелкомасштабной временной шкале, то, кроме того, возможно также, что процесс не будет марковским. В этом случае, для того чтобы предсказать будущее системы даже вероятностным образом, почти наверняка потребуются знание непосредственно предшествовавшей истории всей системы. Эта трудность действительно возникает при всех попытках вывести марковские вероятностные уравнения исходя из механики. Получаемые при таком выводе уравнения в действительности довольно редко оказываются марковскими — чаще имеется некоторое характерное время запоминания, в течение которого важна предыстория [3.1].

Все это означает, что в действительности такого объекта, как марковский процесс, не существует. Скорее следует говорить о существовании систем с такими малыми временами запоминания, что на временных масштабах, на которых производится наблюдение, поведение этих систем хорошо аппроксимируется марковским процессом. Но в таком случае вопрос о том, непрерывны ли траектории, в действительности не имеет значения. Траектории аппроксимирующего марковского процесса, конечно, не обязательно должны быть непрерывны. Так, даже если столкновения молекул не описываются достаточно точно моделью твердых сфер, то все равно в течение времени столкновения произойдет изменение скорости на конечную величину, и это проявится в аппроксимирующем марковском процессе как дискретный скачок. На крупномасштабной временной шкале даже положение может меняться скачком, давая картину, аналогичную той, которая получилась в модели Эйнштейна броуновского движения.

В качестве примера можно указать химические реакции. Время, необходимое на совершение единичного акта реакции, которое приблизительно того же порядка, что и время столкновения молекул, дает еще одну минимальную постоянную времени. В течение этого проме-

жутка существуют состояния, которые не могут быть описаны только числами молекул различных типов. Поэтому само описание состояния как набора молекул различных типов требует, чтобы наблюдение велось на достаточно крупномасштабной временной шкале.

Однако марковские процессы с непрерывными траекториями существуют в математическом смысле и полезны для описания реальных процессов. Упомянутая выше модель газа служит полезным примером. Положение молекулы в самом деле допустимо моделировать функцией, меняющейся прерывистым образом, дискретными скачками. По сравнению с проходимыми расстояниями эти скачки пренебрежимо малы, и хорошим приближением траектории служит непрерывная кривая. Далее, скорость молекул может меняться на величину порядка самой скорости. Средняя скорость молекулы газа порядка 1000 м/с, и в течение столкновения вполне вероятно изменение ее знака. Скорости просто не достигают (со сколько-нибудь существенной вероятностью) значений, для которых их изменения могут считаться малыми. Следовательно, нет особого смысла в непрерывном по траектории описании скоростей молекул в газе.

3.3.1. МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ НЕПРЕРЫВНОГО МАРКОВСКОГО ПРОЦЕССА

Для *марковского процесса* можно показать [3.2], что с вероятностью единица реализация $x(t)$ есть непрерывная функция от t , если для любого $\varepsilon > 0$ имеет место предел

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int_{|x-z|>\varepsilon} dx p(x, t + \Delta t | z, t) = 0 \quad (3.3.1)$$

равномерно по z , t и Δt . Это означает, что вероятность того, что положение x отличается от z на конечную величину, стремится к нулю *быстрее* чем Δt при $\Delta t \rightarrow 0$. (Уравнение (3.3.1) иногда называют условием Линдберга.)

Примеры

1. Решение Эйнштейна (1.2.11) для введенной им функции $f(x, t)$ (или, точнее, $f(x, t)/n$) в действительности есть условная вероятность $p(x, t | 0, 0)$. Следуя его методу, мы нашли бы

$$p(x, t + \Delta t | z, t) = (4\pi D\Delta t)^{-1/2} \exp[-(x - z)^2/4D\Delta t]. \quad (3.3.2)$$

и легко проверить, что условие (3.3.1) в этом случае удовлетворяется.

Таким образом, броуновское движение в трактовке Эйнштейна обладает непрерывными реализациями.

2. Процесс Коши. Пусть

$$p(x, t + \Delta t | z, t) = \frac{\Delta t}{\pi} / [(x - z)^2 + \Delta t^2]. \quad (3.3.3)$$

Тогда эта функция не удовлетворяет условию (3.3.1) и реализации разрывны.

Однако в обоих случаях, как это необходимо для непротиворечивости,

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} p(x, t + \Delta t | z, t) = \delta(x - z), \quad (3.3.4)$$

и нетрудно показать, что в обоих случаях удовлетворяется уравнение Чепмена — Колмогорова.

Различие между двумя указанными процессами иллюстрирует рис. 3.1, на котором приведены типичные реализации процессов. Это различие очевидно. Заметим, однако, что даже кривая, изображающая броуновское движение, крайне нерегулярна, хотя и непрерывна. На самом деле она не дифференцируема ни в одной точке. Кривая процесса Коши, как и должно быть, беспорядочно разрывна.

3.4. ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОЕ УРАВНЕНИЕ ЧЕПМЕНА — КОЛМОГОРОВА

При соответствующих предположениях уравнение Чепмена — Колмогорова может быть сведено к дифференциальному уравнению. Допускаемые при этом предположения тесно связаны со свойствами непрерывности рассматриваемого процесса. Сама форма условия непрерывности (3.3.1) приводит к необходимости разделить условия дифферен-

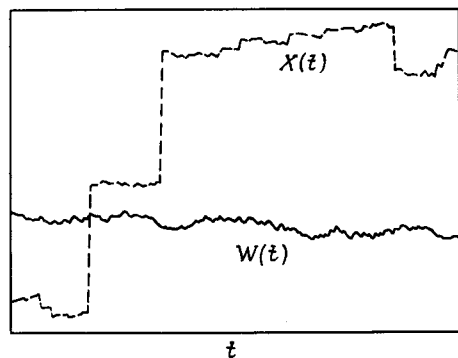


Рис. 3.1. Типичные реализации процесса Коши $X(t)$ (штриховая линия) и броуновского движения $W(t)$ (сплошная линия).

цируемости так, чтобы одни из них соответствовали непрерывному движению изображающей точки, а другие — разрывному движению.

Требуем выполнения следующих условий:

для всех $\varepsilon > 0$ должна иметь место сходимость

$$1) \lim_{\Delta t \rightarrow 0} p(\mathbf{x}, t + \Delta t | \mathbf{z}, t) / \Delta t = W(\mathbf{x} | \mathbf{z}, t) \quad (3.4.1)$$

равномерно по \mathbf{x} , \mathbf{z} и t для $|\mathbf{x} - \mathbf{z}| \geq \varepsilon$ и предел не должен зависеть от ε ;

$$2) \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int_{|\mathbf{x} - \mathbf{z}| < \varepsilon} d\mathbf{x} (x_i - z_i) p(\mathbf{x}, t + \Delta t | \mathbf{z}, t) = A_i(\mathbf{z}, t) + O(\varepsilon); \quad (3.4.2)$$

$$3) \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int_{|\mathbf{x} - \mathbf{z}| < \varepsilon} d\mathbf{x} (x_i - z_i)(x_j - z_j) p(\mathbf{x}, t + \Delta t | \mathbf{z}, t) = B_{ij}(\mathbf{z}, t) + O(\varepsilon); \quad (3.4.3)$$

причем в двух последних условиях предполагается равномерная сходимость по \mathbf{z} , ε и t .

Отметим, что все коэффициенты вида (3.4.2, 3) более высокого порядка должны равняться нулю. В качестве примера рассмотрим величину третьего порядка, определяемую формулой

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int_{|\mathbf{x} - \mathbf{z}| < \varepsilon} d\mathbf{x} (x_i - z_i)(x_j - z_j)(x_k - z_k) p(\mathbf{x}, t + \Delta t | \mathbf{z}, t) \equiv C_{ijk}(\mathbf{z}, t) + O(\varepsilon). \quad (3.4.4)$$

Поскольку C_{ijk} симметрична по i, j, k , можно ввести

$$\sum_{i,j,k} \alpha_i \alpha_j \alpha_k C_{ijk}(\mathbf{z}, t) \equiv \bar{C}(\boldsymbol{\alpha}, \mathbf{z}, t), \quad (3.4.5)$$

так что

$$C_{ijk}(\mathbf{z}, t) = \frac{1}{3!} \frac{\partial^3}{\partial \alpha_i \partial \alpha_j \partial \alpha_k} \bar{C}(\boldsymbol{\alpha}, \mathbf{z}, t). \quad (3.4.6)$$

Тогда

$$\begin{aligned} |\bar{C}(\boldsymbol{\alpha}, \mathbf{z}, t)| &\leq \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int_{|\mathbf{x} - \mathbf{z}| < \varepsilon} |\boldsymbol{\alpha} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{z})| [\boldsymbol{\alpha} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{z})]^2 p(\mathbf{x}, t + \Delta t | \mathbf{z}, t) dx \\ &\quad + O(\varepsilon) \\ &\leq |\boldsymbol{\alpha}| \varepsilon \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \int [\boldsymbol{\alpha} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{z})]^2 p(\mathbf{x}, t + \Delta t | \mathbf{z}, t) dx + O(\varepsilon) \\ &= \varepsilon |\boldsymbol{\alpha}| [\alpha_i \alpha_j B_{ij}(\mathbf{z}, t) + O(\varepsilon)] + O(\varepsilon) \\ &= O(\varepsilon), \end{aligned} \quad (3.4.7)$$

а значит, \tilde{C} равна нулю. Аналогично можно показать, что все соответствующие величины более высоких порядков также обращаются в нуль.

Согласно условию непрерывности (3.3.1), процесс имеет непрерывные траектории, только если $W(x|z, t) = 0$ для всех $x \neq z$. Значит, эта функция должна некоторым образом описывать разрывное движение, в то время как величины A_i и B_{ij} должны быть связаны с непрерывным движением.

3.4.1. ВЫВОД ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОГО УРАВНЕНИЯ ЧЕПМЕНА — КОЛМОГОВОРА

Рассмотрим временную эволюцию математического ожидания (или, иначе, среднего значения), функции $f(z)$, которая предполагается дважды непрерывно дифференцируемой. Имеем

$$\begin{aligned} \partial_t \int dx f(x)p(x, t|y, t') \\ = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \{ \int dx f(x)[p(x, t + \Delta t|y, t') - p(x, t|y, t')] \} / \Delta t \end{aligned} \quad (3.4.8)$$

$$\begin{aligned} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \{ \int dx \int dz f(x)p(x, t + \Delta t|z, t)p(z, t|y, t') \\ - \int dz f(z)p(z, t|y, t') \} / \Delta t, \end{aligned} \quad (3.4.9)$$

где в (3.4.8) в члене с положительным знаком использовано уравнение Чепмена — Колмогорова для перехода к соответствующему члену в (3.4.9).

Теперь разобьем интегрирование по x на две области: $|x - z| \geq \varepsilon$ и $|x - z| < \varepsilon$. Когда $|x - z| < \varepsilon$ вследствие сделанного предположения о том, что $f(z)$ дважды непрерывно дифференцируема, можем записать

$$\begin{aligned} f(x) = f(z) + \sum_i \frac{\partial f(z)}{\partial z_i} (x_i - z_i) + \sum_{i,j} \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f(z)}{\partial z_i \partial z_j} (x_i - z_i)(x_j - z_j) \\ + |x - z|^2 R(x, z), \end{aligned} \quad (3.4.10)$$

где (опять же в силу существования двух непрерывных производных) имеем

$$|R(x, z)| \rightarrow 0 \text{ при } |x - z| \rightarrow 0. \quad (3.4.11)$$

Подставляем теперь (3.4.10) в (3.4.9); находим

$$(3.4.9) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \left\{ \iint_{|x-z|<\varepsilon} dx dz \left[\sum_i (x_i - z_i) \frac{\partial f}{\partial z_i} + \sum_{i,j} \frac{1}{2} (x_i - z_i)(x_j - z_j) \frac{\partial^2 f}{\partial z_i \partial z_j} \right] \right\}$$

$$\begin{aligned}
& \times p(\mathbf{x}, t + \Delta t | \mathbf{z}, t) p(\mathbf{z}, t | \mathbf{y}, t') \\
& + \iint_{|\mathbf{x}-\mathbf{z}| < \varepsilon} d\mathbf{x} d\mathbf{z} |\mathbf{x} - \mathbf{z}|^2 R(\mathbf{x}, \mathbf{z}) p(\mathbf{x}, t + \Delta t | \mathbf{z}, t) p(\mathbf{z}, t | \mathbf{y}, t') \\
& + \iint_{|\mathbf{x}-\mathbf{z}| \geq \varepsilon} d\mathbf{x} d\mathbf{z} f(\mathbf{x}) p(\mathbf{x}, t + \Delta t | \mathbf{z}, t) p(\mathbf{z}, t | \mathbf{y}, t') \\
& + \iint_{|\mathbf{x}-\mathbf{z}| < \varepsilon} d\mathbf{x} d\mathbf{z} f(\mathbf{z}) p(\mathbf{x}, t + \Delta t | \mathbf{z}, t) p(\mathbf{z}, t | \mathbf{y}, t') \\
& - \iint d\mathbf{x} d\mathbf{z} f(\mathbf{z}) p(\mathbf{x}, t + \Delta t | \mathbf{z}, t) p(\mathbf{z}, t | \mathbf{y}, t') \}. \tag{3.4.12}
\end{aligned}$$

[Отметим, что поскольку $p(\mathbf{x}, t + \Delta t | \mathbf{z}, t)$ есть вероятность, то интегрирование по \mathbf{x} в последнем члене дает 1 и получается просто последний член соотношения (3.4.9).]

Рассмотрим теперь приведенное выражение построчно.

Строки 1, 2: в силу предположения о равномерной сходимости переходим к пределу под знаком интеграла и (используя условия 2 и 3 разд. 3.4) получаем

$$\int d\mathbf{z} \left[\sum_i A_i(\mathbf{z}) \frac{\partial f}{\partial z_i} + \frac{1}{2} \sum_{i,j} B_{ij}(\mathbf{z}) \frac{\partial^2 f}{\partial z_i \partial z_j} \right] p(\mathbf{z}, t | \mathbf{y}, t') + O(\varepsilon). \tag{3.4.13}$$

Строка 3: это остаточный член, исчезающий при $\varepsilon \rightarrow 0$; действительно,

$$\begin{aligned}
& \left| \frac{1}{\Delta t} \int_{|\mathbf{x}-\mathbf{z}| < \varepsilon} d\mathbf{x} |\mathbf{x} - \mathbf{z}|^2 R(\mathbf{x}, \mathbf{z}) p(\mathbf{x}, t + \Delta t | \mathbf{z}, t) \right| \\
& \leq \left[\frac{1}{\Delta t} \int_{|\mathbf{x}-\mathbf{z}| < \varepsilon} d\mathbf{x} |\mathbf{x} - \mathbf{z}|^2 p(\mathbf{x}, t + \Delta t | \mathbf{z}, t) \right] \text{Max}_{|\mathbf{x}-\mathbf{z}| < \varepsilon} |R(\mathbf{x}, \mathbf{z})| \\
& \rightarrow \left[\sum_i B_{ii}(\mathbf{z}, t) + O(\varepsilon) \right] \{ \text{Max}_{|\mathbf{x}-\mathbf{z}| < \varepsilon} |R(\mathbf{x}, \mathbf{z})| \}. \tag{3.4.14}
\end{aligned}$$

Вследствие (3.4.11) сомножитель в фигурных скобках обращается в нуль при $\varepsilon \rightarrow 0$.

Строки 4 — 6: все эти члены можно объединить и получить

$$\iint_{|\mathbf{x}-\mathbf{z}| \geq \varepsilon} d\mathbf{x} d\mathbf{z} f(\mathbf{z}) [W(\mathbf{z} | \mathbf{x}, t) p(\mathbf{x}, t | \mathbf{y}, t') - W(\mathbf{x} | \mathbf{z}, t) p(\mathbf{z}, t | \mathbf{y}, t')]. \tag{3.4.15}$$

Все выражение в правой части в (3.4.12) не зависит от ε . Поэтому, переходя к пределу $\varepsilon \rightarrow 0$, находим

$$\begin{aligned}
\partial_t \int d\mathbf{z} f(\mathbf{z}) p(\mathbf{z}, t | \mathbf{y}, t') & = \int d\mathbf{z} \left[\sum_i A_i(\mathbf{z}, t) \frac{\partial f(\mathbf{z})}{\partial z_i} + \frac{1}{2} \sum_{i,j} B_{ij}(\mathbf{z}) \frac{\partial^2 f(\mathbf{z})}{\partial z_i \partial z_j} \right] p(\mathbf{z}, t | \mathbf{y}, t') \\
& + \int d\mathbf{z} f(\mathbf{z}) \{ f d\mathbf{x} [W(\mathbf{x} | \mathbf{z}, t) p(\mathbf{x}, t | \mathbf{y}, t') - W(\mathbf{x} | \mathbf{z}, t) p(\mathbf{z}, t | \mathbf{y}, t')] \}. \tag{3.4.16}
\end{aligned}$$

Нужно отметить, что здесь использовано определение

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{|x-z| > \varepsilon} dx F(x, z) \equiv \int dx F(x, z) \quad (3.4.17)$$

главного значения интеграла от функции $F(x, z)$. Для того чтобы формула (3.4.16) имела смысл, этот интеграл должен существовать. Уравнение (3.4.1) определяет $W(x|z, t)$ только для $x \neq z$, поэтому остается возможность, что эта величина бесконечна при $x = z$. Это в самом деле имеет место для процесса Коши, обсуждавшегося в разд. 3.3.1, для которого

$$W(x|z, t) = 1/[\pi(x - z)^2]. \quad (3.4.18)$$

Однако, если функция $p(x, t|y, t')$ непрерывна и дифференцируема, то интеграл в смысле главного значения существует. В дальнейшем этот интеграл не будет записываться явно как интеграл в смысле главного значения, поскольку сингулярные случаи, где такая запись необходима, встречаются довольно редко.

Наконец, совершаем последний этап преобразований, интегрируя по частям, и находим

$$\begin{aligned} \int dz f(z) \partial_t p(z, t|y, t') &= \int dz f(z) \left\{ - \sum_i \frac{\partial}{\partial z_i} A_i(z, t) p(z, t|y, t') \right. \\ &+ \sum_{i,j} \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial z_i \partial z_j} B_{ij}(z, t) p(z, t|y, t') \\ &+ \left. \int dx [W(z|x, t) p(x, t|y, t') - W(x|z, t) p(z, t|y, t')] \right\} \\ &+ \text{интегралы по поверхности.} \end{aligned} \quad (3.4.19)$$

В приведенных формулах не уточнялись пределы интегрирования. Допустим теперь, что процесс происходит в области R с поверхностью S . Тогда ясно, что

$$p(x, t|z, t') = 0, \quad (3.4.20)$$

если x или z не принадлежит R . Очевидно также, что по определению

$$W(x|z, t) = 0, \quad (3.4.21)$$

если x или z не принадлежит R . Отметим также, что определение (3.4.2, 3) функций $A_i(z, t)$ и $B_{ij}(z, t)$ допускает их разрывность, поскольку условная вероятность $p(x, t + \Delta t|z, t')$ вполне может менять-

ся скачком при пересечении переменной z границы области R . Это отражает тот факт, что переходы внутрь R извне не разрешены.

При интегрировании по частям приходится дифференцировать как A_i , так и B_{ij} , и по изложенным выше причинам нельзя считать, что это возможно на границе области. Чтобы обойти эту трудность, выберем произвольную функцию $f(z)$, такую, чтобы она была отлична от нуля только в некоторой произвольной области R' , целиком содержащейся в R . Тогда можно заключить, что для всех z , лежащих *внутри* R , справедливо уравнение

$$\begin{aligned} \partial_t p(\mathbf{z}, t | \mathbf{y}, t') = & - \sum_i \frac{\partial}{\partial z_i} [A_i(\mathbf{z}, t) p(\mathbf{z}, t | \mathbf{y}, t')] \\ & + \sum_{i,j} \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial z_i \partial z_j} [B_{ij}(\mathbf{z}, t) p(\mathbf{z}, t | \mathbf{y}, t')] \\ & + \int d\mathbf{x} [W(\mathbf{z} | \mathbf{x}, t) p(\mathbf{x}, t | \mathbf{y}, t') - W(\mathbf{x} | \mathbf{z}, t) p(\mathbf{z}, t | \mathbf{y}, t')]. \end{aligned} \quad (3.4.22)$$

При этом интегралы по поверхности не возникают, поскольку они при выбранных условиях обращаются в нуль.

У этого уравнения в литературе нет единого названия. Поскольку это просто дифференциальная форма уравнения Чепмена — Колмогорова, предлагаем называть его *дифференциальным уравнением Чепмена — Колмогорова*¹⁾.

3.4.2. СТАТУС ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОГО УРАВНЕНИЯ ЧЕПМЕНА — КОЛМОГОРОВА

Из приведенного остается неясным, в какой мере решения дифференциального уравнения Чепмена — Колмогорова являются решениями самого уравнения Чепмена — Колмогорова и в каких случаях решения существуют. Справедливо, однако, утверждение, что набор условных вероятностей, удовлетворяющих уравнению Чепмена — Колмогорова, порождает марковский процесс в том смысле, что найденные при его помощи совместные вероятности удовлетворяют всем аксиомам теории вероятностей.

¹⁾ Уравнение (3.4.22), линейное относительно p (хотя и довольно общее) получено при определенных предположениях и не охватывает ряда частных случаев, например случай (3.3.3). Его вряд ли стоит называть тем же именем (уравнение Чепмена — Колмогорова), что и нелинейное функциональное уравнение (3.2.8). Правильнее было бы его называть объединенным уравнением Фоккера — Планка и Колмогорова — Феллера. — *Прим. ред.*

Можно показать [3.3], что если заданы $A(x, t)$, $B(x, t)$ (причем последняя матрица должна быть неотрицательно определенной), а также $W(x|y, t)$ (которая должна быть неотрицательна), то при определенных условиях существует неотрицательное решение дифференциального уравнения Чепмена — Колмогорова, причем это решение удовлетворяет также уравнению Чепмена — Колмогорова. Условия, которые должны быть выполнены, — это начальные условия

$$p(z, t|y, t) = \delta(y - z),$$

вытекающие из определения плотности условной вероятности, а также некоторые граничные условия. Эти последние весьма сложно указать для уравнения общего вида, однако в случае уравнения Фоккера — Планка (разд. 3.5.2) они приведены в гл. 5.

3.5. ИНТЕРПРЕТАЦИЯ УСЛОВИЙ И РЕЗУЛЬТАТОВ

Теперь видно, что каждое из условий 1 — 3 разд. 3.4 порождает в выведенном уравнении определенные члены, интерпретация которых достаточно проста. Здесь можно обнаружить наличие трех процессов: скачков, сноса и диффузии.

3.5.1. СКАЧКООБРАЗНЫЕ ПРОЦЕССЫ. УПРАВЛЯЮЩЕЕ УРАВНЕНИЕ

Рассмотрим случай, когда

$$A_i(z, t) = B_{ij}(z, t) = 0, \quad (3.5.1)$$

чему соответствует *управляющее уравнение*¹⁾

$$\partial_t p(z, t|y, t') = \int dx [W(z|x, t)p(x, t|y, t') - W(x|z, t)p(z, t|y, t')]. \quad (3.5.2)$$

Решение с учетом членов первого порядка по Δt ищется следующим образом. Замечаем, что

$$p(z, t|y, t) = \delta(y - z). \quad (3.5.3)$$

Тогда

$$p(z, t + \Delta t|y, t) = \delta(y - z)[1 - \int dx W(x|y, t)\Delta t] + W(z|y, t)\Delta t. \quad (3.5.4)$$

¹⁾ Это уравнение называется уравнением Колмогорова — Феллера (см. [2.5]). При этом в однокомпонентном случае $W(z|x, t) = p(t, x)\partial P(t, x, z)/\partial z$, $\partial P(t, x, z)/\partial z = W(z|x, t)/dz' W(z'|x, t)$. Видим, что функции $p(t, x)$, $P(t, x, z)$, определенные в [2.5], и функция $W(z|x, t) > 0$ легко выражаются друг через друга. — Прим. ред.

Видим, что для любого Δt имеется конечная вероятность нахождения частицы в начальном положении y , которая дается коэффициентом при $\delta(y - z)$ в (3.5.4). Распределение частиц, уходящих из точки y , определяется (при соответствующей нормировке) функцией $W(z|y, t)$. Таким образом, типичная траектория $X(t)$ будет состоять из отрезков прямых $X(t) = \text{const}$, чередующихся с разрывными скачками, распределение которых дается функцией $W(z|y, t)$. По этой причине данный процесс называется скачкообразным процессом. Траектории имеют разрывы в дискретном множестве точек.

В том случае, когда пространство состояний состоит только из целых чисел, управляющее уравнение принимает вид

$$\partial_t P(n, t | n', t') = \sum_m [W(n|m, t)P(m, t | n', t') - W(m|n, t)P(n, t | n', t')]. \quad (3.5.5)$$

Здесь не возникает вопроса о возможности скачкообразных изменений, поскольку разрешены только дискретные значения переменной состояния $N(t)$. Важно, однако, отдавать себе отчет, что чисто скачкообразный процесс может происходить, даже если переменная $X(t)$ принимает значения из непрерывного множества.

3.5.2. ДИФФУЗИОННЫЕ ПРОЦЕССЫ. УРАВНЕНИЕ ФОККЕРА — ПЛАНКА

Если функцию $W(z|x, t)$ положить равной нулю, то дифференциальное уравнение Чепмена — Колмогорова сводится к *уравнению Фоккера — Планка*:

$$\begin{aligned} \frac{\partial p(z, t | y, t')}{\partial t} = & - \sum_i \frac{\partial}{\partial z_i} [A_i(z, t)p(z, t | y, t')] \\ & + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{\partial^2}{\partial z_i \partial z_j} [B_{ij}(z, t)p(z, t | y, t')], \end{aligned} \quad (3.5.6)$$

и соответствующий процесс известен в математике как *диффузионный процесс*. Вектор $A(z, t)$ называется вектором сносов, а матрица $B(z, t) = \|B_{ij}(z, t)\|$ — диффузионной матрицей. Эта матрица является неотрицательно определенной и симметричной, что следует из ее определения (3.4.3). Из определения (3.4.1) функции $W(x|z, t)$ легко видеть, что условие 3.3.1 непрерывности траекторий удовлетворено, если величина $W(x|z, t)$ равна нулю. Следовательно, уравнение Фоккера — Планка описывает процесс, для которого функции $X(t)$ непрерывны. На самом деле можно дать гораздо более полное эвристическое описание процесса. Рассмотрим вероятность $p(z, t + \Delta t | y, t)$ при условии, что

$$p(z, t | y, t) = \delta(z - y). \quad (3.5.7)$$

Для малых Δt решение Фоккера — Планка будет еще иметь резко выраженный пик, и, следовательно, производные от $A_i(z, t)$ и $B_{ij}(z, t)$ будут пренебрежимы по сравнению с производными от p . Таким образом, задача сводится к решению приближенного уравнения

$$\frac{\partial p(\mathbf{z}, t | \mathbf{y}, t')}{\partial t} = - \sum_i A_i(\mathbf{y}, t) \frac{\partial p(\mathbf{z}, t | \mathbf{y}, t')}{\partial z_i} + \sum_{i,j} \frac{1}{2} B_{ij}(\mathbf{y}, t) \frac{\partial^2 p(\mathbf{z}, t | \mathbf{y}, t')}{\partial z_i \partial z_j}, \quad (3.5.8)$$

где для малых $t - t'$ мы пренебрегли также зависимостью в A_i и B_{ij} от t . При начальных условиях (3.5.7) нетрудно найти

$$p(\mathbf{z}, t + \Delta t | \mathbf{y}, t) = (2\pi)^{-N/2} \{\det[\mathbf{B}(\mathbf{y}, t)]\}^{1/2} [\Delta t]^{-1/2} \times \exp \left\{ - \frac{1}{2} \frac{[\mathbf{z} - \mathbf{y} - \mathbf{A}(\mathbf{y}, t)\Delta t]^T [\mathbf{B}(\mathbf{y}, t)]^{-1} [\mathbf{z} - \mathbf{y} - \mathbf{A}(\mathbf{y}, t)\Delta t]}{\Delta t} \right\}. \quad (3.5.9)$$

Это не что иное, как гауссовское распределение с корреляционной матрицей $\mathbf{B}(\mathbf{y}, t)\Delta t$ и средним значением $\mathbf{y} + \mathbf{A}(\mathbf{y}, t)\Delta t$. Мы получили, что движение системы происходит с регулярным сносом со скоростью $\mathbf{A}(\mathbf{y}, t)$, на который накладываются гауссовские флуктуации с корреляционной матрицей $\mathbf{B}(\mathbf{y}, t)\Delta t$, т.е. можно написать

$$\mathbf{y}(t + \Delta t) = \mathbf{y}(t) + \mathbf{A}(\mathbf{y}(t), t)\Delta t + \boldsymbol{\eta}(t)\Delta t^{1/2}, \quad (3.5.10)$$

$$\text{где } \langle \boldsymbol{\eta}(t) \rangle = 0, \text{ и} \quad (3.5.11)$$

$$\langle \boldsymbol{\eta}(t)\boldsymbol{\eta}(t)^T \rangle = \mathbf{B}(\mathbf{y}, t). \quad (3.5.12)$$

Легко видеть, что описанная картина дает

1) траектории, которые всюду непрерывны, поскольку очевидно, что при $\Delta t \rightarrow 0$ $\mathbf{y}(t + \Delta t) \rightarrow \mathbf{y}(t)$;

2) траектории, не дифференцируемые ни в одной точке, вследствие члена с $(\Delta t)^{1/2}$, имеющегося в (3.5.10).

Дальше, в гл. 4, мы увидим, что эвристическая картина, отвечающая уравнению (3.5.10), может быть сделана гораздо более точной и приводит к концепции *стохастического дифференциального уравнения*.

3.5.3. ДЕТЕРМИНИРОВАННЫЕ ПРОЦЕССЫ. УРАВНЕНИЕ ЛИУВИЛЛЯ

Может оказаться, что в дифференциальном уравнении Чепмена — Колмогорова (3.4.22) только первый член ненулевой, тогда мы приходим к частной форме — *уравнению Лиувилля*:

$$\frac{\partial p(\mathbf{z}, t | \mathbf{y}, t')}{\partial t} = - \sum_i \frac{\partial}{\partial z_i} [A_i(\mathbf{z}, t)p(\mathbf{z}, t | \mathbf{y}, t')]. \quad (3.5.13)$$

Уравнение такого типа рассматривается в классической механике¹⁾.

Уравнение (3.5.13) описывает полностью детерминированное движение, т. е. если $\mathbf{x}(\mathbf{y}, t)$ есть решение обыкновенного дифференциального уравнения

$$\frac{d\mathbf{x}(t)}{dt} = A[\mathbf{x}(t), t] \quad (3.5.14)$$

при начальном условии

$$\mathbf{x}(\mathbf{y}, t') = \mathbf{y}, \quad (3.5.15)$$

то решением уравнения (3.5.13) с начальным условием

$$p(\mathbf{z}, t' | \mathbf{y}, t') = \delta(\mathbf{z} - \mathbf{y}) \quad (3.5.16)$$

будет

$$p(\mathbf{z}, t | \mathbf{y}, t') = \delta[\mathbf{z} - \mathbf{x}(\mathbf{y}, t)]. \quad (3.5.17)$$

Доказательство высказанного утверждения проще всего получить прямой подстановкой. Поскольку

$$-\sum_i \frac{\partial}{\partial z_i} \{A_i(\mathbf{z}, t) \delta[\mathbf{z} - \mathbf{x}(\mathbf{y}, t)]\} \quad (3.5.18)$$

$$= -\sum_i \frac{\partial}{\partial z_i} \{A_i[\mathbf{x}(\mathbf{y}, t), t] \delta[\mathbf{z} - \mathbf{x}(\mathbf{y}, t)]\} \quad (3.5.19)$$

$$= -\sum_i \left\{ A_i[\mathbf{x}(\mathbf{y}, t), t] \frac{\partial}{\partial z_i} \delta[\mathbf{z} - \mathbf{x}(\mathbf{y}, t)] \right\} \quad (3.5.20)$$

и, кроме того,

$$\frac{\partial}{\partial t} \delta[\mathbf{z} - \mathbf{x}(\mathbf{y}, t)] = -\sum_i \frac{\partial}{\partial z_i} \delta[\mathbf{z} - \mathbf{x}(\mathbf{y}, t)] \frac{dx_i(\mathbf{y}, t)}{dt} \quad (3.5.21)$$

в силу (3.5.14) видим, что выражения (3.5.20, 21) совпадают. Итак, если частица находится в заданном начальном положении \mathbf{y} в момент t' , то и дальше она остается на траектории, проходящей через эту точку и получаемой решением обыкновенного дифференциального уравнения (3.5.14).

¹⁾ В случае уравнения Лиувилля классической механики \mathbf{z} представляет собой набор координат и импульсов механической системы, а вектор сносов $A_i(\mathbf{z}, t)$ определяется уравнениями Гамильтона $\partial q_\alpha / \partial t = \partial H / \partial p_\alpha$, $\partial p_\alpha / \partial t = -\partial H / \partial q_\alpha$, где $H(q, p)$ — функция Гамильтона. При этом в отличие от общего случая (3.5.13) указанный вектор обязан удовлетворять дополнительному условию $\sum_i \partial A_i / \partial z_i = 0$ (теорема Лиувилля), которое

означает, что фазовый объем при движении сохраняется. — Прим. ред.

Следовательно, детерминированное движение, определяемое дифференциальным уравнением первого порядка вида (3.5.14), служит тривиальным случаем марковского процесса. Решение (3.5.17) есть, конечно, только частный случай процессов, аппроксимируемых уравнением типа (3.5.13), в которых член, приводящий к гауссовскому распределению, отсутствует.

3.5.4. ПРОЦЕССЫ ОБЩЕГО ВИДА

В общем случае ни одна из величин $A(z, t)$, $B(z, t)$ и $W(x|z, t)$ не обязана обращаться в нуль. При этом получается процесс с траекториями, аналогичными показанным на рис. 3.2. Типичная траектория — кусочно-непрерывная линия, состоящая из частей, соответствующих диффузионному процессу с отличным от нуля сносом, на который накладываются флуктуации.

Возможен также случай, когда коэффициент $A(z, t)$ не равен нулю, а матрица $B(z, t)$ равна нулю. Тогда, как показано на рис. 3.3, траектории состоят из кусков гладких кривых решений уравнения (3.5.14) с наложенными на них разрывами. Это очень напоминает картину, которую можно ожидать в разреженном газе, где свободно движущиеся частицы при столкновениях испытывают мгновенное изменение импульса (но не позиции, как в рассмотренном случае).

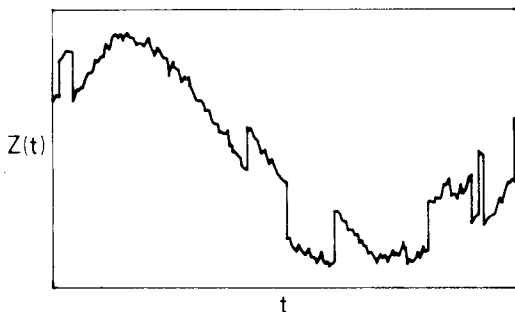


Рис. 3.2. Типичная реализация марковского процесса общего вида, в котором присутствуют снос, диффузия и скачки.

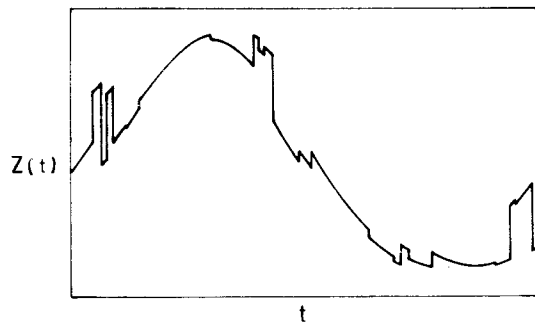


Рис. 3.3. Типичная реализация марковского процесса при наличии только сноса и скачков.

3.6. УРАВНЕНИЯ, ОПИСЫВАЮЩИЕ ИЗМЕНЕНИЕ ВЕРОЯТНОСТЕЙ ПРИ ИЗМЕНЕНИИ НАЧАЛЬНОГО ВРЕМЕНИ. ОБРАТНЫЕ УРАВНЕНИЯ

Можно гораздо проще, чем в разд. 3.4, вывести уравнения, дающие временную эволюцию функции $p(x, t | y, t')$ по отношению к начальным переменным y, t' .

Рассмотрим

$$\lim_{\Delta t' \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t'} [p(x, t | y, t' + \Delta t') - p(x, t | y, t')] \quad (3.6.1)$$

$$= \lim_{\Delta t' \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t'} \int dz p(z, t' + \Delta t' | y, t') [p(x, t | y, t' + \Delta t') - p(x, t | z, t' + \Delta t')], \quad (3.6.2)$$

где при записи второго члена в (3.6.2) использовано уравнение Чепмена — Колмогорова, а при записи первого учтен тот факт, что интегрирование дает $1 \cdot p(x, t | y, t' + \Delta t')$.

Теперь необходимые предположения состоят в постулировании существования всех используемых производных, а также в требовании непрерывности и ограниченности функции $p(x, t | y, t')$ по x, t, t' для некоторой области $t - t' > \delta > 0$. Тогда можно записать

$$(3.6.1) = \lim_{\Delta t' \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t'} \int dz p(z, t' + \Delta t' | y, t') [p(x, t | y, t') - p(x, t | z, t')]. \quad (3.6.3)$$

Применяя метод, аналогичный использованному в разд. 3.4.1, выводим окончательное уравнение

$$\frac{\partial p(x, t | y, t')}{\partial t'} = - \sum_i A_i(y, t') \frac{\partial p(x, t | y, t')}{\partial y_i} - \frac{1}{2} \sum_{ij} B_{ij}(y, t') \frac{\partial^2 p(x, t | y, t')}{\partial y_i \partial y_j} + \int dz W(z | y, t') [p(x, t | y, t') - p(x, t | z, t')], \quad (3.6.4)$$

которое будем называть обратным дифференциальным уравнением Чепмена — Колмогорова. В математическом отношении оно проще, чем соответствующее прямое уравнение (3.4.22). Подходящим начальным условием для обоих уравнений служит равенство

$$p(x, t | y, t) = \delta(x - y) \text{ для всех } t, \quad (3.6.5)$$

представляющее собой очевидный факт, что если в момент t частица находится в положении y , то плотность вероятности найти ее в тот же момент в точке x равна $\delta(x - y)$.

Прямое и обратное уравнения эквивалентны друг другу. Так, решения прямого уравнения, подчиненные начальному условию (3.6.5) (или (3.5.3)) и любым подходящим граничным условиям, дают, как отмечено в разд. 3.4.2, решения Чепмена — Колмогорова. Но эти последние, как только что показано, удовлетворяют обратному уравнению. (Различные граничные условия для уравнения Фоккера — Планка сопоставляются в разд. 5.2.4, 1.) Основное различие между прямым и обратным уравнениями заключается в том, какой набор переменных считается фиксированным. В случае прямого уравнения фиксируются (y, t') и решения существуют при $t \geq t'$, так что (3.6.5) — *начальное условие* для прямого уравнения. Для обратного уравнения решение существует при $t' \leq t$, так что, поскольку обратное уравнение описывает эволюцию системы по t' , в этом случае (3.6.5) правильнее называть *конечным условием*.

В силу их эквивалентности как прямое, так и обратное уравнения могут быть полезны. Прямое уравнение позволяет более непосредственно получить значения измеряемых величин как функции прошедшего времени t и чаще используется в приложениях. Обратное уравнение большей частью применяется для нахождения *среднего времени достижения границы* или *времени выхода за границу*: ищется вероятность того, что в заданное время частица покинет заданную область.

3.7. СТАЦИОНАРНЫЕ И ОДНОРОДНЫЕ МАРКОВСКИЕ ПРОЦЕССЫ

В разд. 1.4.3 встречалось понятие стационарного процесса, который описывает стохастическое движение системы, находящейся в устойчивом состоянии и имеющей вероятностные характеристики, не зависящие от того, когда они измеряются. Стационарность можно определять, требуя выполнения разных по силе условий. Однако мы закрепим термин «стационарный процесс» за строгим определением, согласно которому стохастический процесс $X(t)$ называется стационарным, если процессы $X(t)$ и $X(t + \varepsilon)$ обладают одинаковой статистикой для любого ε . Это эквивалентно утверждению, что все совместные вероятности инвариантны относительно сдвига во времени, т. е.

$$p(\mathbf{x}_1, t_1; \mathbf{x}_2, t_2; \mathbf{x}_3, t_3; \dots; \mathbf{x}_n, t_n) \\ = p(\mathbf{x}_1, t_1 + \varepsilon; \mathbf{x}_2, t_2 + \varepsilon; \mathbf{x}_3, t_3 + \varepsilon; \dots; \mathbf{x}_n, t_n + \varepsilon), \quad (3.7.1)$$

и, следовательно, все они — функции только разностей времен $t_i - t_j$. В частности, единовременная плотность вероятности вообще не зависит от времени и может быть записана просто как

$$p_s(\mathbf{x}), \quad (3.7.2)$$

а двухвременная совместная вероятность может быть записана

$$p_s(\mathbf{x}_1, t_1 - t_2; \mathbf{x}_2, 0). \quad (3.7.3)$$

Наконец, условная вероятность может быть записана в виде

$$p_s(\mathbf{x}_1, t_1 - t_2 | \mathbf{x}_2, 0). \quad (3.7.4)$$

Для *марковского процесса*, поскольку все совместные вероятности могут быть представлены как произведения двухвременных условных вероятностей и одновременной вероятности, необходимым и достаточным условием стационарности служит возможность записать эти одно- и двухвременные вероятности в форме (3.7.1 — 3).

3.7.1. ЭРГОДИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СТАЦИОНАРНОГО ПРОЦЕССА

Если задан стационарный процесс, разумно ожидать, что среднее значение некоторой измеряемой функции от x можно получить, взяв значения величины x в последовательные моменты времени и усреднив по времени функцию от этих значений. По существу это основано на предположении, что закон больших чисел (как пояснено в разд. 2.5.2) применим к переменным, определяемым последовательными измерениями стохастического процесса.

Введем переменную $X(T)$ следующим образом:

$$\bar{X}(T) = \frac{1}{2T} \int_{-T}^T dt x(t), \quad (3.7.5)$$

где $x(t)$ — стационарный процесс, и рассмотрим предел $T \rightarrow \infty$. Такая процедура дает возможный вариант измерения среднего от x путем усреднения по всем временам. Очевидно, что

$$\langle \bar{X}(T) \rangle = \langle x \rangle_s, \quad (3.7.6)$$

где индекс s отмечает, что среднее относится к стационарному процессу.

Рассчитаем теперь дисперсию переменной $\bar{X}(T)$. Имеем

$$\langle \bar{X}(T)^2 \rangle = \frac{1}{4T^2} \int_{-T}^T \int_{-T}^T dt_1 dt_2 \langle x(t_1)x(t_2) \rangle. \quad (3.7.7)$$

Если процесс стационарный, то

$$\langle x(t_1)x(t_2) \rangle \equiv R(t_1 - t_2) + \langle x \rangle^2, \quad (3.7.8a)$$

где R — двухвременная корреляционная функция. Следовательно,

$$\langle \bar{X}(T)^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = \frac{1}{4T^2} \int_{-2T}^{2T} dt R(\tau)(2T - |\tau|); \quad (3.7.8b)$$

последнее выражение получено с помощью замены переменных

$$\begin{aligned}\tau &= t_1 - t_2 \\ t &= t_1\end{aligned}\tag{3.7.9}$$

и интегрирования по t .

Левая часть равенства (3.7.8) представляет собой дисперсию величины $\bar{X}(T)$, и можно показать, что при определенных условиях она стремится к нулю при $T \rightarrow \infty$. Для этого нужно потребовать, чтобы

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_{-2T}^{2T} d\tau \left(1 - \frac{|\tau|}{2T}\right) R(\tau) = 0.\tag{3.7.10}$$

Это требование не очень прозрачно. Однако ясно, что достаточным для обращения этого предела в нуль служит условие

$$\int_0^{\infty} d\tau |R(\tau)| < \infty,\tag{3.7.11}$$

т. е. просто требуется, чтобы корреляционная функция $\langle x(t_1)x(t_2) \rangle$ стремилась к нулю при $|t_1 - t_2| \rightarrow \infty$ достаточно быстро¹⁾. В случаях, представляющих интерес, часто оказывается, что $R(\tau)$ имеет такое асимптотическое поведение

$$R(\tau) \sim \operatorname{Re}\{A \exp(-\tau/\tau_c)\},\tag{3.7.12}$$

¹⁾ Из (3.7.10) легко вывести более слабое достаточное условие сходимости:

$$\lim_{T \rightarrow \infty} T^{-1} \int_0^T |R(\tau)| d\tau = 0\tag{a)}$$

Из него можно получить, что в случае ограниченности функции $|R(\tau)|$ достаточным является следующее простое условие $\lim_{\tau \rightarrow \infty} R(\tau) = 0$. В самом деле, из последнего ра-

венства следует, что при любом $\varepsilon > 0$ существует такое T_0 , что $|R(\tau)| < \varepsilon$ при $\tau \geq T_0$.

Поэтому при $T > T_0$ имеем

$$\int_0^T |R(\tau)| d\tau = \int_0^{T_0} |R(\tau)| d\tau + K,$$

где $|K| \leq \varepsilon(T - T_0)$, а также, при фиксированном T_0 ,

$$\lim_{T \rightarrow \infty} T^{-1} \int_0^T |R(\tau)| d\tau \leq \varepsilon.$$

Поскольку величина ε может быть взята сколь угодно малой, отсюда получаем, что указанный предел равен нулю. Следовательно, достаточное условие сходимости (а) выполнено. Сходимость $R(\tau) \rightarrow 0$ при $\tau \rightarrow \infty$ является признаком перемешивающегося процесса. Известно, что перемешивающиеся процессы являются эргодическими. — *Прим. ред.*

где τ_c — параметр (возможно, комплексный), называемый *временем корреляции*. При этом критерий (3.7.11) выполнен и дисперсия переменной $\bar{X}(t)$ стремится к нулю, так что, используя (3.7.6) и (2.9.4), можем записать

$$\text{ms-lim}_{T \rightarrow \infty} \bar{X}(T) = \langle x \rangle_s. \quad (3.7.13)$$

Это означает, что процедура усреднения (3.7.5) правомерна. Нетрудно распространить данный результат на случай усреднения по бесконечному набору измерений в дискретные моменты времени $t_n = t_0 + n\Delta t$.

Можно сформулировать и другие утверждения, связанные с эргодичностью, при этом величинами, представляющими наибольший интерес, служат автокорреляционная функция и функция распределения. Как уже отмечалось в разд. 1.4.2, наиболее естественный путь измерения автокорреляционной функции основан на определении

$$G(\tau, T) = \frac{1}{T} \int_0^T dt x(t)x(t + \tau). \quad (3.7.14)$$

Проводя рассмотрение, аналогичное изложенному выше, нетрудно показать, что

$$\text{ms-lim}_{T \rightarrow \infty} G(\tau, T) = \langle x(t)x(t + \tau) \rangle_s, \quad (3.7.15)$$

если выполнено следующее условие. Определим $\rho(\tau, \lambda)$ равенством

$$\langle x(t + \lambda + \tau)x(t + \lambda)x(t + \tau)x(t) \rangle_s = \rho(\tau, \lambda) + \langle x(t + \tau)x(t) \rangle_s^2. \quad (3.7.16)$$

Потребуем, чтобы

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2T} \int_{-2T}^{2T} \left(1 - \frac{|\lambda|}{2T}\right) \rho(\tau, \lambda) d\lambda = 0. \quad (3.7.17)$$

Это условие означает, что для достаточно больших λ четырехвременное среднее (3.7.16) факторизуется, т. е. превращается в произведение двухвременных средних, и что остаточный член $\rho(\tau, \lambda)$ должен достаточно быстро убывать при $\lambda \rightarrow \infty$. Вполне достаточно экспоненциального спада, подобного приведенному в (3.7.12), которое обычно и имеет место. Аналогичным образом находим, что спектр, определяемый, согласно разд. 1.4, преобразованием Фурье

$$S(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega\tau} G(\tau) d\tau, \quad (3.7.18)$$

дается также предельным переходом

$$S(\omega) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi T} \left| \int_0^T dt e^{-i\omega t} x(t) \right|^2. \quad (3.7.19)$$

Наконец, рассмотрим вопрос об измерении функции распределения. Практический метод состоит в многократном определении того, попадает ли $x(t)$ в некоторый интервал (x_1, x_2) или нет. Это дает измерение величины

$\int_{x_1}^{x_2} dx p_s(x)$. По существу, такая процедура дает среднее по времени функции $\chi(x)$, определяемой равенствами

$$\begin{aligned} \chi(x) &= 1 & x_1 < x < x_2 \\ &= 0 & x \leq x_1 \text{ или } x \geq x_2. \end{aligned} \quad (3.7.20)$$

Применяя к данной случайной величине процедуру, использованную для проверки эргодичности $\langle x \rangle$, находим, что распределение эргодично, если

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2T} \int_{-2T}^{2T} dt \left(1 - \frac{|\tau|}{2T} \right) \int_{x_1}^{x_2} dx' p_s(x') \left\{ \int_{x_1}^{x_2} dx [p(x, \tau | x', 0) - p_s(x)] \right\} = 0. \quad (3.7.21)$$

Очевидным достаточным условием для этого служит требование

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} p(x, \tau | x', 0) = p_s(x), \quad (3.7.22)$$

причем сходимость к этому пределу должна быть достаточно быстрой. Как уже отмечалось при рассмотрении среднего $\langle x \rangle$, вполне достаточно экспоненциальной сходимости, часто встречающейся на практике. Последнего условия в случае марковского процесса достаточно также для эргодичности среднего и автокорреляционной функции, поскольку все средние могут быть выражены через условные вероятности, и достаточно быстрая сходимость к пределу в (3.7.22), как нетрудно убедиться, гарантирует выполнение обоих условий (3.7.17) и (3.7.10). Будем дальше называть марковский процесс просто «*эргодическим*», если указанное довольно сильное условие выполнено.

3.7.2. ОДНОРОДНЫЕ ПРОЦЕССЫ

Если условие (3.7.22) для стационарного марковского процесса выполнено, то, очевидно, в нашем распоряжении имеется способ, как из стационарного марковского процесса сконструировать нестационарный процесс, пределом которого при больших временах служит данный

стационарный процесс. Действительно, определим процесс для времен
 $t, t' > t_0$ (3.7.23)

равенствами

$$p(\mathbf{x}, t) = p_s(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}_0, t_0) \quad (3.7.24)$$

$$p(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}', t') = p_s(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}', t'). \quad (3.7.25)$$

Все другие совместные вероятности для марковского процесса получаются из последних обычным способом. Очевидно, если (3.7.22) выполнено, то при $t \rightarrow \infty$ или при $t_0 \rightarrow -\infty$ находим

$$p(\mathbf{x}, t) \rightarrow p_s(\mathbf{x}).$$

Все другие вероятности при этом также становятся стационарными, поскольку условная вероятность стационарна. Описанный процесс, обладающий свойством указанного предельного перехода, называется *однородным* процессом.

Его физическая интерпретация вполне очевидна. У нас имеется стохастическая система с переменной x , причем внешним воздействием устанавливается значение x_0 в момент t_0 . Затем с течением времени она эволюционирует обратно к стационарному состоянию. Именно так и возникают в действительности многие стационарные системы.

Стационарное распределение $p_s(x)$ является решением стационарного дифференциального уравнения Чепмена — Колмогорова, которое принимает вид

$$0 = -\sum_i \frac{\partial}{\partial z_i} [A_i(\mathbf{z})p(\mathbf{z}, t | \mathbf{y}, t')] + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{\partial^2}{\partial z_i \partial z_j} [B_{ij}(\mathbf{z})p(\mathbf{z}, t | \mathbf{y}, t')] + \int d\mathbf{x} [W(\mathbf{z} | \mathbf{x})p(\mathbf{x}, t | \mathbf{y}, t') - W(\mathbf{x} | \mathbf{z})p(\mathbf{z}, t | \mathbf{y}, t')] \quad (3.7.26)$$

Факт однородности процесса проявляется в том, что величины A , B и W , определяемые формулами (3.4.1 — 3), не зависят от t . Это служит альтернативным определением однородного процесса.

3.7.3. ПРИБЛИЖЕНИЕ К СТАЦИОНАРНОМУ ПРОЦЕССУ

Существует также проблема сходимости. Предположим, что A , B и W не зависят от времени, а $p_s(\mathbf{z})$ удовлетворяет уравнению (3.7.26). Спрашивается: при каких условиях решение дифференциального уравнения Чепмена — Колмогорова действительно будет приближаться к стационарному решению $p_s(\mathbf{z})$?

На этот вопрос, по всей видимости, нет полного ответа. Однако достаточно хорошее представление о ситуации можно получить следующим образом. Определим функционал Ляпунова K , зависящий от каких-либо двух решений p_1 и p_2 дифференциального уравнения Чепмена — Колмогорова:

$$K = \int dx p_1(\mathbf{x}, t) \log [p_1(\mathbf{x}, t)/p_2(\mathbf{x}, t)], \quad (3.7.27)$$

и предположим пока, что p_1 и p_2 нигде не обращаются в нуль. Покажем теперь, что функционал K всегда положителен, а производная dK/dt всегда отрицательна.

Сначала, замечая, что обе функции $p_2(\mathbf{x}, t)$ и $p_1(\mathbf{x}, t)$ нормированы на единицу, записываем K в виде

$$K[p_1, p_2, t] = \int dx p_1(\mathbf{x}, t) \{ \log [p_1(\mathbf{x}, t)/p_2(\mathbf{x}, t)] + p_2(\mathbf{x}, t)/p_1(\mathbf{x}, t) - 1 \}. \quad (3.7.28)$$

Затем, используя неравенство

$$-\log z + z - 1 \geq 0, \quad (3.7.29)$$

справедливое для всех $z > 0$, убеждаемся, что $K \geq 0$. Теперь покажем, что $dK/dt \leq 0$. Сокращенно можем записать

$$\frac{dK}{dt} = \int dx \left\{ \frac{\partial p_1}{\partial t} [\log p_1 + 1 - \log p_2] - \frac{\partial p_2}{\partial t} [p_1/p_2] \right\}. \quad (3.7.30)$$

Рассчитаем теперь последовательно вклады в dK/dt , которые связаны с членами в уравнении Чепмена — Колмогорова, обусловленными соответственно сносом, диффузией и скачками. Учет члена со сносом в (3.6.4) дает

$$\left(\frac{dK}{dt} \right)_{\text{снос}} = \sum_i \int dx \left\{ - [\log (p_1/p_2) + 1] \frac{\partial}{\partial x_i} (A_i p_1) + (p_1/p_2) \frac{\partial}{\partial x_i} (A_i p_2) \right\}, \quad (3.7.31)$$

что можно преобразовать к виду

$$\left(\frac{dK}{dt} \right)_{\text{снос}} = \sum_i \int dx \frac{\partial}{\partial x_i} [-A_i p_1 \log (p_1/p_2)]. \quad (3.7.32)$$

Подобным же образом можно выписать члены, обусловленные диффузией:

$$\begin{aligned} \left(\frac{dK}{dt}\right)_{\text{дифф}} = & -\frac{1}{2} \sum_{i,j} \int d\mathbf{x} \left\{ [\log(p_1/p_2) + 1] \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} (B_{ij} p_1) \right. \\ & \left. - (p_1/p_2) \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} (B_{ij} p_2) \right\}, \end{aligned} \quad (3.7.33)$$

и после некоторых преобразований будем иметь

$$\begin{aligned} \left(\frac{dK}{dt}\right)_{\text{дифф}} = & -\frac{1}{2} \sum_{i,j} \int d\mathbf{x} p_1 B_{ij} \left\{ \frac{\partial}{\partial x_i} [\log(p_1/p_2)] \right\} \left\{ \frac{\partial}{\partial x_j} [\log(p_1/p_2)] \right\} \\ & + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \int d\mathbf{x} \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \left[p_1 B_{ij} \log(p_1/p_2) \right]. \end{aligned} \quad (3.7.34)$$

Наконец, аналогично рассчитываем и вклад скачков:

$$\begin{aligned} \left(\frac{dK}{dt}\right)_{\text{скачок}} = & \int d\mathbf{x} d\mathbf{x}' \left\{ [W(\mathbf{x}|\mathbf{x}') p_1(\mathbf{x}', t) - W(\mathbf{x}'|\mathbf{x}) p_1(\mathbf{x}, t)] \right. \\ & \times \{ \log[p_1(\mathbf{x}, t)/p_2(\mathbf{x}, t)] + 1 \} \\ & \left. - [W(\mathbf{x}|\mathbf{x}') p_2(\mathbf{x}', t) - W(\mathbf{x}'|\mathbf{x}) p_2(\mathbf{x}, t)] p_1(\mathbf{x}, t)/p_2(\mathbf{x}, t) \right\}. \end{aligned} \quad (3.7.35)$$

Это выражение преобразуется к виду

$$\left(\frac{dK}{dt}\right)_{\text{скачок}} = \int d\mathbf{x} d\mathbf{x}' W(\mathbf{x}|\mathbf{x}') \{ p_2(\mathbf{x}', t) [\phi' \log[\phi'/\phi] - \phi + \phi'] \}, \quad (3.7.36)$$

где

$$\phi = p_1(\mathbf{x}, t)/p_2(\mathbf{x}, t), \quad (3.7.37)$$

а функция ϕ' — та же функция ϕ , но с заменой \mathbf{x} на \mathbf{x}' .

Рассмотрим теперь простейший случай. Предположим, что существует стационарное решение $p_s(\mathbf{x})$, которое отлично от нуля всюду, за исключением бесконечности, где эта функция и ее первая производная обращаются в нуль. Тогда мы можем выбрать $p_2(\mathbf{x}, t) = p_s(\mathbf{x})$. Выражение (3.7.32) и второй член в (3.7.34) могут быть представлены в виде интегралов по поверхности, которые исчезают на бесконечности. Поэтому

$$\left(\frac{dK}{dt}\right)_{\text{снос}} = 0 \quad (3.7.38a)$$

$$\left(\frac{dK}{dt}\right)_{\text{лиффт}} \leq 0 \quad (3.7.38б)$$

$$\left(\frac{dK}{dt}\right)_{\text{скачок}} \leq 0, \quad (3.7.38в)$$

причем последнее неравенство вытекает из (3.7.36) и неравенства (3.7.29), если в нем положить $z = \phi/\phi'$.

Теперь рассмотрим, в каких случаях в соотношениях (3.7.38) достигаются равенства. Анализ выражения (3.7.36) показывает, что оно обращается в нуль тогда и только тогда, когда $\phi = \phi'$ почти для всех x и x' , таких, что $W(x|x') \neq 0$. Таким образом, если $W(x|x')$ вообще не обращается в нуль, т. е. если переходы могут происходить в *обоих направлениях* между любыми двумя состояниями, то обращение в нуль выражения в квадратных скобках в (3.7.36) приводит к равенству $\phi = \phi'$, т. е. к независимости $\phi(x)$ от x :

$$p_1(x, t)/p_s(x) = \text{const}. \quad (3.7.39)$$

При этом константа здесь должна равняться единице, поскольку обе плотности $p_1(x, t)$ и $p_s(x)$ нормированы.

Вклад, обусловленный диффузией, будет строго отрицателен, если матрица B_{ij} является положительно определенной почти всюду. Следовательно, при довольно сильных условиях, а именно если

$$\begin{aligned} p_s(x) &\neq 0 && \text{с вероятностью } 1, \\ W(x|x') &\neq 0 && \text{с вероятностью } 1, \\ B_{ij}(x) &&& \text{положительно определенная с вероятностью } 1, \end{aligned} \quad (3.7.40)$$

нами установлено, что произвольное решение дифференциального уравнения Чепмена — Колмогорова приближается к стационарному решению $p_s(x)$ при $t \rightarrow \infty$.

Этот результат теряет силу для двух основных типов систем.

а) Несвязанное пространство состояний

Результат проще понять, когда A_i и B_{ij} равны нулю, т. е. в системе возможны только скачки. Предположим, что пространство подразделяется на такие две области R_1 и R_2 , что переходы из R_1 в R_2 и обратно запрещены; следовательно, $W(x|x') = 0$, если x и x' не принадле-

жат оба либо R_1 , либо R_2 . Тогда равенство $dK/dt = 0$ возможно, если

$$\begin{aligned} p_1(\mathbf{x}, t) &= \lambda_1 p_s(\mathbf{x}) & \mathbf{x} \in R_1 \\ &= \lambda_2 p_s(\mathbf{x}) & \mathbf{x} \in R_2, \end{aligned} \quad (3.7.41)$$

а значит, нет единого стационарного распределения. Две рассматриваемые области не связаны между собой, и в каждой происходит свой стохастический процесс, которому соответствует свое стационарное состояние. Эти процессы не изменяют относительную вероятность пребывания в R_1 или в R_2 .

Описанный результат сохраняет силу и в общем случае, если только A_i и B_{ij} равны нулю на границе областей R_1 и R_2 .

б) $p_s(\mathbf{x})$ исчезает в некоторой области

Если

$$\begin{aligned} p_s(\mathbf{x}) &= 0 & \mathbf{x} \in R_1 \\ &\neq 0 & \mathbf{x} \in R_2 \end{aligned} \quad (3.7.42)$$

и снова A_i и B_{ij} равны нулю, то (поскольку $p_s(\mathbf{x})$ удовлетворяет стационарному уравнению (3.7.26)) получаем

$$W(\mathbf{x}|\mathbf{y}) = 0 \quad \mathbf{x} \in R_1, \mathbf{y} \in R_2. \quad (3.7.43)$$

Другими словами, никакие переходы из области R_2 , где стационарное распределение больше нуля, в область R_1 , где стационарное распределение нулевое, невозможны. Более того, очевидно, обратное тоже верно, т. е. из (3.7.43) вытекает (3.7.42).

Возьмем символы y, y' и т. д. для обозначения точек пространства R_1 и x, x' — для точек R_2 ; вместо $p(y)$ будем использовать обозначение $r(y)$. Тогда уравнения эволюции можем записать так:

$$\frac{\partial p(\mathbf{x})}{\partial t} = \int d\mathbf{x}' [W(\mathbf{x}|\mathbf{x}')p(\mathbf{x}') - W(\mathbf{x}'|\mathbf{x})p(\mathbf{x})] + \int d\mathbf{y}' W(\mathbf{x}|\mathbf{y}')r(\mathbf{y}') \quad (3.7.44a)$$

$$\frac{\partial r(\mathbf{y})}{\partial t} = \int d\mathbf{y}' [W(\mathbf{y}|\mathbf{y}')r(\mathbf{y}') - W(\mathbf{y}'|\mathbf{y})r(\mathbf{y})] - r(\mathbf{y}) \int d\mathbf{x}' W(\mathbf{x}'|\mathbf{y}). \quad (3.7.44b)$$

Если для удобства обозначить

$$\mu(\mathbf{y}) = \int d\mathbf{x}' W(\mathbf{x}'|\mathbf{y}), \quad (3.7.45)$$

то решение уравнения (3.7.44) можно записать, как

$$r(y, t) = \exp[-\mu(y)t]q(y, t), \quad (3.7.46)$$

где $q(y, t)$ — решение управляющего уравнения только для области R_1 , а именно следующего уравнения:

$$\frac{\partial q(y)}{\partial t} = \int dy' [\bar{W}(y|y')q(y') - W(y'|y)q(y)]; \quad (3.7.47)$$

здесь $\bar{W}(y|y') = \exp[\mu(y)t]W(y|y')\exp[-\mu(y')t]$. При этом происходит приближение к равновесию. Прежде всего, поскольку $\mu(y) > 0$, то $r(y, t) \rightarrow 0$ при $t \rightarrow \infty$. Следовательно, неоднородный член в (3.7.44а) исчезает при больших временах, так что остается обычное управляющее уравнение, к которому приложима аргументация пункта «а». Не удивительно поэтому, что решение имеет вид (3.7.42).

3.7.4. АВТОКОРРЕЛЯЦИОННАЯ ФУНКЦИЯ МАРКОВСКИХ ПРОЦЕССОВ

Для любого марковского процесса можно написать весьма изящную формулу для автокорреляционной функции. Введем определение условного среднего:

$$\langle X(t) | [x_0, t_0] \rangle = \int dx x p(x, t | x_0, t_0). \quad (3.7.48)$$

Тогда автокорреляционную матрицу можно записать так:

$$\langle X(t)X(t_0)^T \rangle = \int dx dx_0 xx_0^T p(x, t; x_0, t_0) \quad (3.7.49)$$

$$= \int dx_0 \langle X(t) | [x_0, t_0] \rangle x_0^T p(x_0, t_0). \quad (3.7.50)$$

Мы видим, что (3.7.48) определяет среднее от $X(t)$ при условии, что X принимает значение x_0 в момент t_0 , а (3.7.50) утверждает, что автокорреляционная матрица получается путем усреднения (для момента t_0) этого условного среднего (умноженного на x_0^T). Такой результат следует непосредственно из определений и справедлив для любого стохастического процесса.

В случае марковского процесса имеется, однако, единственная условная вероятность, определяющая весь процесс. Таким образом, для марковского процесса можно утверждать, что $\langle X(t) | [x_0, t_0] \rangle$ — это единственная нужная величина. Поскольку знание x_0 в момент t_0 полностью определяет дальнейшее развитие процесса, наиболее заметная польза от данного свойства проявляется при расчете стационарной автокорреляционной функции. Для того чтобы это продемонстрировать,

рассмотрим немарковский стационарный процесс с совместными вероятностями

$$p_s(\mathbf{x}_1, t_1; \mathbf{x}_2, t_2; \dots \mathbf{x}_n, t_n), \quad (3.7.51)$$

которые зависят, разумеется, только от разностей времен. Образует теперь соответствующий нестационарный процесс, отбирая только те реализации, которые проходят через точку $\mathbf{x} = \mathbf{a}$ в момент $t = 0$. Итак, определяем

$$p_a(\mathbf{x}_1, t_1; \mathbf{x}_2, t_2; \dots \mathbf{x}_n, t_n) = p_s(\mathbf{x}_1, t_1, \mathbf{x}_2, t_2; \dots \mathbf{x}_n, t_n | \mathbf{a}, 0). \quad (3.7.52)$$

Далее замечаем, что для этого процесса

$$\langle X(t) | [\mathbf{x}_0, t_0] \rangle_a = \int d\mathbf{x} \mathbf{x} p_s(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}_0, t_0; \mathbf{a}, 0). \quad (3.7.53)$$

Здесь зависимость от \mathbf{a} отмечена индексом \mathbf{a} при скобке усреднения. Если исходный стационарный процесс обладает соответствующим свойством эргодичности, то

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} p_s(\mathbf{x}, t + \tau | \mathbf{x}_0, t_0 + \tau; \mathbf{a}, 0) = p_s(\mathbf{x}, t - t_0 | \mathbf{x}_0, 0), \quad (3.7.54)$$

так что мы будем иметь стационарное условное среднее от x

$$\langle X(t) | [\mathbf{x}_0, t_0] \rangle_s = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \langle X(t + \tau) | [\mathbf{x}_0, t_0 + \tau] \rangle_a \quad (3.7.55)$$

и стационарную автокорреляционную матрицу, даваемую равенством

$$\langle X(t) X(t_0)^T \rangle_s = \int d\mathbf{x}_0 \mathbf{x}_0^T \langle X(t) | [\mathbf{x}_0, t_0] \rangle_s p_s(\mathbf{x}_0) \quad (3.7.56)$$

$$= \lim_{\tau \rightarrow \infty} \langle X(t + \tau) X(t_0 + \tau)^T \rangle_a$$

$$= \lim_{\tau \rightarrow \infty} \int d\mathbf{x}_0 \mathbf{x}_0^T \langle X(t + \tau) | [\mathbf{x}_0, t_0 + \tau] \rangle_a p_a(\mathbf{x}_0, t_0 + \tau). \quad (3.7.57)$$

Однако, когда процесс марковский, необходимость в этой громоздкой процедуре с предельными переходами отпадает, поскольку

$$\begin{aligned} \text{Условия Маркова} \implies \langle X(t) | [\mathbf{x}_0, t_0] \rangle_s &= \langle X(t) | [\mathbf{x}_0, t_0] \rangle_a \\ &= \langle X(t) | [\mathbf{x}_0, t_0] \rangle_s. \end{aligned} \quad (3.7.58)$$

Уравнение (3.7.50) представляет собой *теорему регрессии* в применении к марковскому процессу и служит базисом для более сильной теоремы регрессии, справедливой в случае *линейных систем*. Под последними подразумеваются системы, для которых средние подчиняются

линейным уравнениям движения, т. е.

$$d\langle X(t) | [x_0, t_0] \rangle / dt = -A \langle X(t) | [x_0, t_0] \rangle. \quad (3.7.59)$$

Эти уравнения часто справедливы для систем, представляющих практический интерес, либо как точные уравнения, либо как аппроксимационные. Начальные условия для уравнений (3.7.59), очевидно, таковы:

$$\langle X(t_0) | [x_0, t_0] \rangle = x_0. \quad (3.7.60)$$

Тогда из (3.7.50, 59) следует уравнение

$$\frac{d}{dt} \langle X(t) X(t_0)^T \rangle = -A \langle X(t) X(t_0)^T \rangle \quad (3.7.61)$$

с начальным значением $\langle X(t_0) X(t_0)^T \rangle$. Временная корреляционная функция

$$\langle X(t) X(t_0)^T \rangle - \langle X(t) \rangle \langle X(t_0)^T \rangle = \langle X(t), X(t_0)^T \rangle \quad (3.7.62)$$

подчиняется, как легко видеть, такому же уравнению с начальным значением, равным корреляционной матрице, соответствующей моменту t_0 . В стационарной системе приходим к результату, что если $G(t)$ — стационарная корреляционная функция и σ — единовременная стационарная корреляционная матрица, то

$$dG(t)/dt = -A G(t) \quad (3.7.63)$$

и

$$G(0) = \sigma, \quad (3.7.64)$$

откуда имеем

$$G(t) = \exp[-At] \sigma. \quad (3.7.65)$$

А это — теорема регрессии в ее простейшей форме. Подчеркнем опять, что она справедлива для *марковских процессов* со средними, которые подчиняются линейным эволюционным уравнениям, подобным уравнениям (3.7.59).

Для немарковских процессов такой простой расчет корреляционной функции невозможен. В этом случае приходится выполнять громоздкую процедуру вычислений, о которой дает представление формула (3.7.57).

3.8. ПРИМЕРЫ МАРКОВСКИХ ПРОЦЕССОВ

В этом разделе представлены для последующих ссылок некоторые основные решения для различных случаев дифференциального уравнения Чепмена — Колмогорова. Эти решения найдут широкое применение в последующем изложении.

3.8.1. ВИНЕРОВСКИЙ ПРОЦЕСС

Процесс назван так в честь Винера, который всесторонне его исследовал. Этот процесс представляет собой решение уравнения Фоккера — Планка, обсуждавшегося в разд. 3.5.2, в котором присутствует только одна переменная $W(t)$, коэффициент сноса равен нулю, а коэффициент диффузии равен единице. Таким образом, уравнение Фоккера — Планка имеет в этом случае вид

$$\frac{\partial}{\partial t} p(w, t | w_0, t_0) = \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial w^2} p(w, t | w_0, t_0). \quad (3.8.1)$$

Принимая во внимание начальное условие

$$p(w, t_0 | w_0, t_0) = \delta(w - w_0), \quad (3.8.2)$$

решаем (3.8.1) с помощью характеристической функции

$$\phi(s, t) = \int dw p(w, t | w_0, t_0) \exp(isw), \quad (3.8.3)$$

которая удовлетворяет уравнению

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -\frac{1}{2} s^2 \phi, \quad (3.8.4)$$

откуда имеем

$$\phi(s, t) = \exp\left[-\frac{1}{2} s^2(t - t_0)\right] \phi(s, t_0). \quad (3.8.5)$$

Из (3.8.2) следует начальное условие

$$\phi(s, t_0) = \exp(isw_0),$$

поэтому

$$\phi(s, t) = \exp\left[isw_0 - \frac{1}{2} s^2(t - t_0)\right]. \quad (3.8.6)$$

Выполняя обратное преобразование Фурье, получаем решение уравнения (3.8.1):

$$p(w, t | w_0, t_0) = [2\pi(t - t_0)]^{-1/2} \exp\left[-(w - w_0)^2/2(t - t_0)\right]. \quad (3.8.7)$$

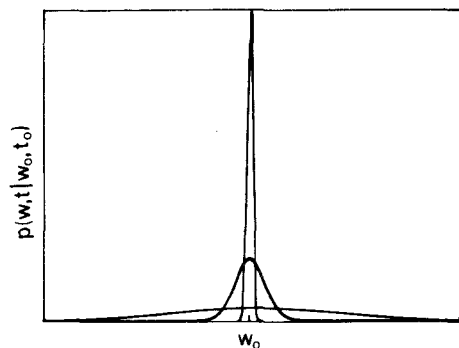


Рис. 3.4. Винеровский процесс: расплывание первоначально острого распределения $p(w, t | w_0, t_0)$ с течением времени $t - t_0$.

Это гауссовское распределение с параметрами

$$\langle W(t) \rangle = w_0 \quad (3.8.8)$$

$$\langle [W(t) - w_0]^2 \rangle = t - t_0, \quad (3.8.9)$$

так что первоначально острый пик распределения расплывается со временем, как изображено на рис. 3.4.

Винеровский процесс многих переменных определяется так:

$$W(t) = [W_1(t), W_2(t), \dots, W_n(t)] \quad (3.8.10)$$

и подчиняется многомерному уравнению Фоккера — Планка

$$\frac{\partial}{\partial t} p(\mathbf{w}, t | \mathbf{w}_0, t_0) = \frac{1}{2} \sum_i \frac{\partial^2}{\partial w_i^2} p(\mathbf{w}, t | \mathbf{w}_0, t_0), \quad (3.8.11)$$

решением которого служит

$$p(\mathbf{w}, t | \mathbf{w}_0, t_0) = [2\pi(t - t_0)]^{-n/2} \exp[-(\mathbf{w} - \mathbf{w}_0)^2 / 2(t - t_0)], \quad (3.8.12)$$

т. е. многомерное гауссовское распределение с

$$\langle W(t) \rangle = \mathbf{w}_0 \quad (3.8.13)$$

и

$$\langle [W_i(t) - w_{0i}] [W_j(t) - w_{0j}] \rangle = (t - t_0) \delta_{ij}. \quad (3.8.14)$$

Винеровский процесс с одной переменной часто называют просто броуновским движением, поскольку соответствующее ему уравнение (3.8.1) в точности то же самое, что и дифференциальное уравнение

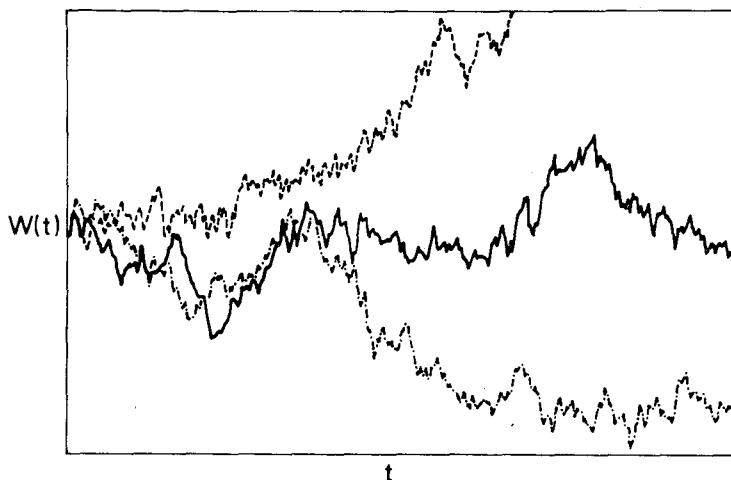


Рис. 3.5. Три полученные моделированием типичные реализации траектории винеровского процесса, демонстрирующие их разительную неповторяемость.

диффузии, которому, как показал Эйнштейн, подчиняется броуновское движение (что отмечалось в разд. 1.2). Однако эта терминология не является общепринятой.

В отношении винеровского процесса отметим следующее.

а) Нерегулярность траекторий

Хотя среднее значение переменной $W(t)$ равно нулю, среднеквадратичное значение неограниченно возрастает при $t \rightarrow \infty$. Это значит, что реализации траекторий $W(t)$ удивительно переменчивы. На рис. 3.5 приведено несколько типичных реализаций, имеющих общую начальную точку, чтобы наглядно проиллюстрировать чрезвычайную невоспроизводимость траекторий.

б) Недифференцируемость траекторий

Винеровский процесс — это диффузионный процесс, а значит, траектории $W(t)$ непрерывны. Однако они *недифференцируемы*. Рассмотрим вероятность события

$$\{ |[W(t+h) - W(t)]/h| > k \}. \quad (3.8.15)$$

В соответствии с найденной условной вероятностью (3.8.7) эта вероятность равна

$$2 \int_{kh}^{\infty} dw (2\pi h)^{-1/2} \exp(-w^2/2h) \quad (3.8.16)$$

и в пределе $h \rightarrow 0$ обращается в единицу. Это значит, что неважно, какое значение k выбрать, — все равно $|[W(t+h) - W(t)]/h|$ будет почти наверное больше этого значения, т. е. производная в любой точке почти наверняка бесконечна. Это находится в согласии с интуитивными представлениями, изложенными в разд. 3.4.2, и наглядно иллюстрируется модельными траекториями на рис. 3.5. Отмеченное свойство связано, конечно, с хорошо известным экспериментальным фактом, что броуновские частицы движутся крайне нерегулярно. Однако очевидно и то, что это идеализация. В самом деле, поскольку $W(t)$ описывает положение броуновской частицы, ее скорость почти наверное бесконечна (что невозможно физически). Более реалистичной моделью броуновского движения служит процесс Орнштейна — Уленбека (разд. 3.8:4).

в) Независимость приращений

Винеровский процесс играет ведущую роль при изучении диффузионных процессов, и с помощью стохастических дифференциальных уравнений любой диффузионный процесс можно выразить через винеровский процесс.

Особое значение имеет статистическая независимость приращений переменной $W(t)$. Точнее, поскольку винеровский процесс марковский, совместная плотность вероятности может быть записана в виде

$$p(w_n, t_n; w_{n-1}, t_{n-1}; w_{n-2}, t_{n-2}; \dots; w_0, t_0) = \prod_{i=0}^{n-1} p(w_{i+1}, t_{i+1} | w_i, t_i) p(w_0, t_0), \quad (3.8.17)$$

и, используя явный вид (3.8.7) условных вероятностей, получаем

$$p(w_n, t_n; w_{n-1}, t_{n-1}; w_{n-2}, t_{n-2}; \dots; w_0, t_0) = \prod_{i=0}^{n-1} \{ [2\pi(t_{i+1} - t_i)]^{-1/2} \exp[-(w_{i+1} - w_i)^2 / 2(t_{i+1} - t_i)] \} p(w_0, t_0). \quad (3.8.18)$$

Если ввести переменные

$$\Delta W_i \equiv W(t_i) - W(t_{i-1}) \quad (3.8.19)$$

$$\Delta t_i \equiv t_i - t_{i-1}, \quad (3.8.20)$$

то совместная плотность вероятности для них будет иметь вид

$$p(\Delta w_n; \Delta w_{n-1}; \Delta w_{n-2}; \dots \Delta w_1; w_0) = \prod_{i=1}^n \{(2\pi\Delta t_i)^{-1/2} \exp(-\Delta w_i^2/2\Delta t_i)\} p(w_0, t_0). \quad (3.8.21)$$

Отсюда из определения статистической независимости (разд. 2.3.4) получаем, что переменные ΔW_i не зависят друг от друга и от величины $W(t_0)$.

Свойство независимости приращений ΔW_i очень существенно для определения стохастического интегрирования, которое дается в разд. 4.2.

г) Автокорреляционные функции

Большой интерес представляет автокорреляционная функция, уже обсуждавшаяся в разд. 1.4.2 и 3.7.4. Ее формальное определение таково:

$$\langle W(t)W(s) | [w_0, t_0] \rangle = \int dw_1 dw_2 w_1 w_2 p(w_1, t; w_2, s | w_0, t_0), \quad (3.8.22)$$

т. е. она представляет собой среднее от произведения $W(t)$ и $W(s)$ при условии, что начальное значение $W(t_0) = w_0$. Предполагая $t > s$, имеем

$$\langle W(t)W(s) | [w_0, t_0] \rangle = \langle [W(t) - W(s)]W(s) \rangle + \langle [W(s)]^2 \rangle. \quad (3.8.23)$$

Используя свойство независимости приращений, видим, что первое среднее равно нулю, второе дается формулой (3.8.9), так что в общем случае имеет место формула

$$\langle W(t)W(s) | [w_0, t_0] \rangle = \min(t - t_0, s - t_0) + w_0^2, \quad (3.8.24)$$

которая справедлива как при $t > s$, так и при $t < s$.

3.8.2. ОДНОМЕРНЫЕ СЛУЧАЙНЫЕ БЛУЖДЕНИЯ

Эта широко известная задача стала уже классической. Предположим, что человек шагает наугад по прямой влево и вправо с одинаковой вероятностью. Длина шага равна l , так что его положение определяется величиной nl , где n — некоторое целое число. Требуется узнать, какова вероятность того, что человек достигнет по прошествии определенного времени заданной точки, находящейся на расстоянии nl от исходной.

Задача может быть поставлена двумя способами. Первый, более традиционный, состоит в том, что шаги допускается делать в моменты $N\tau$ (N — целое), причем в эти моменты пешеход *обязан* шагнуть влево или вправо с равной вероятностью. Второй способ заключается в том, что пешеходу разрешается делать шаги влево и вправо в разные моменты, причем вероятность шага в единицу времени равна a . Это означает, что пешеход может находиться в каждой точке различные промежутки времени. Второй случай описывается управляющим уравнением.

Чтобы рассмотреть задачу при помощи управляющего уравнения, предположим, что вероятность перехода в единицу времени задается равенствами

$$W(n+1|n, t) = W(n-1|n, t) = d \quad (3.8.25)$$

и $W(n|m, t) = 0$ при других значениях m . Тогда, согласно разд. 3.5.1, вероятность пребывания человека в позиции nl при условии, что он стартует в точке $n'l$, удовлетворяет управляющему уравнению

$$\begin{aligned} \partial_t P(n, t|n', t') = & d[P(n+1, t|n', t') + P(n-1, t|n', t') \\ & - 2P(n, t|n', t')]. \end{aligned} \quad (3.8.26)$$

В более классической постановке задачи о случайных блужданиях не предполагается, что человек совершает перемещения влево и вправо согласно управляющему уравнению, но считается, что он перескакивает влево или вправо с равной вероятностью в моменты $N\tau$, так что время является дискретной переменной. В этом случае имеем

$$\begin{aligned} P(n, (N+1)\tau|n', N'\tau) = & \frac{1}{2}[P(n+1, N\tau|n', N'\tau) \\ & + P(n-1, N\tau|n', N'\tau)]. \end{aligned} \quad (3.8.27)$$

Если τ мало, то можно рассматривать (3.8.26, 27) как аппроксимирующие друг друга уравнения, записав

$$P(n, (N+1)\tau|n', N'\tau) \simeq P(n, N\tau|n', N'\tau) + \tau \partial_t P(n, t|n', t'), \quad (3.8.28)$$

где $t = N\tau$, $t' = N'\tau$ и $d = (1/2)\tau^{-1}$. Следовательно, вероятность перехода в единицу времени в модели, использующей управляющее уравнение, соответствует половине величины, обратной времени ожидания τ в модели с дискретным временем.

В обеих схемах решение легко находится путем введения характеристической функции

$$G(s, t) = \langle e^{ins} \rangle = \sum_n P(n, t|n', t') e^{ins}. \quad (3.8.29)$$

Тогда из управляющего уравнения (3.8.26) получаем

$$\partial_t G(s, t) = d(e^{is} + e^{-is} - 2)G(s, t), \quad (3.8.30)$$

а уравнение с дискретным временем дает

$$G(s, (N+1)\tau) = \frac{1}{2}(e^{is} + e^{-is})G(s, N\tau). \quad (3.8.31)$$

Предполагая, что человек стартует в точке $n' = 0$ в момент $t' = 0$, находим в обоих случаях

$$G(s, 0) = 1, \quad (3.8.32)$$

так что решение уравнения (3.8.30) будет иметь вид

$$G_1(s, t) = \exp[(e^{is} + e^{-is} - 2)td], \quad (3.8.33)$$

а решение уравнения (3.8.31) таково:

$$G_2(s, N\tau) = [\frac{1}{2}(e^{is} + e^{-is})]^N. \quad (3.8.34)$$

Последнее выражение можно записать в виде

$$G_2(s, t) = \left[1 + \frac{td}{N}(e^{is} + e^{-is} - 2)\right]^N, \quad (3.8.35)$$

если положить $N/2 = td$.

Используя обычное представление экспоненты через предел

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \left(1 + \frac{a}{N}\right)^N = e^a, \quad (3.8.36)$$

видим, что если s достаточно мало: $s \sim 1/N$, то имеем

$$\lim_{N \rightarrow \infty} G_2(s, t) = G_1(s, t). \quad (3.8.37)$$

Путем разложения функций $G_1(s, N\tau)$ и $G_2(s, t)$ в ряд по степеням $\exp(is)$ можно получить соответствующие распределения вероятностей:

$$P_1(n, t | 0, 0) = e^{-2td} I_n(4td) \quad (3.8.38)$$

$$P_2(n, N\tau | 0, 0) = \left(\frac{1}{2}\right)^N N! \left[\left(\frac{N-n}{2}\right)! \left(\frac{N+n}{2}\right)! \right]^{-1}. \quad (3.8.39)$$

Распределение с дискретным временем известно как распределение Бернулли, оно дает вероятность n -кратного выпадания одной сторо-

ны монеты при N подбрасываниях, если выпадания для обеих сторон равновероятны.

Переход к случаю непрерывного пространства блужданий тоже представляет интерес. Если полное перемещение обозначить

$$x = nl, \quad (3.8.40)$$

то нетрудно найти его характеристическую функцию

$$\phi_1(s, t) = \langle e^{isx} \rangle = G_1(ls, t) = \exp[(e^{ils} + e^{-ils} - 2)td]. \quad (3.8.41)$$

В пределе исчезающе малых шагов, $l \rightarrow 0$, отсюда находим

$$\phi_1(s, t) \rightarrow \exp(-s^2tD), \quad (3.8.42)$$

$$\text{где } D = \lim_{l \rightarrow 0} (l^2d). \quad (3.8.43)$$

Эта функция есть характеристическая функция гауссовского распределения (разд. 2.8.1), которое имеет вид

$$p(x, t|0, 0) = (4\pi Dt)^{-1/2} \exp(-x^2/4Dt). \quad (3.8.44)$$

Мы получили распределение винеровского процесса (разд. 3.8.1), или броуновского движения, согласно сказанному в разд. 1.2. Таким образом, винеровский процесс можно рассматривать как предельный процесс для случайных блужданий с непрерывным временем и бесконечно малыми шагами.

Предел

$$l \rightarrow 0, d \rightarrow 0 \quad \text{при фиксированном} \quad D = \lim_{l \rightarrow 0} (l^2/\tau) \quad (3.8.45)$$

случайных блужданий с дискретным временем дает тот же результат. Нетрудно видеть, что выражение, обозначаемое величиной D , представляет собой среднеквадратичное перемещение, совершаемое в единицу времени.

Можно также более прямым образом убедиться, что разложение правой части уравнения (3.8.26), записанной как функции x , до членов второго порядка по l дает

$$\partial_t p(x, t|0, 0) = (l^2d)\partial_x^2 p(x, t|0, 0). \quad (3.8.46)$$

Итак, три указанных выше процесса тесно связаны между собой как бы на двух уровнях, а именно: при рассмотренных предельных условиях стохастические уравнения приближаются друг к другу, и при тех

же самых условиях решения этих уравнений также приближаются. Эти предельные переходы в точности те же, что использовал Эйнштейн. Действительно, сравнение с разд. 1.2 показывает, что хотя Эйнштейн моделировал броуновское движение случайным блужданием с дискретным временем, но тем не менее, разлагая уравнение, описывающее временную эволюцию функции распределения, он вывел модель винеровского процесса.

Результаты, полученные предельными переходами в этом разделе, представляют собой лишь несколько более строгий вариант вывода Эйнштейна. Имеются обобщения этих результатов на менее специальные ситуации, и замечательное утверждение состоит в том, что почти любой скачкообразный процесс имеет в качестве некоторого предела определенный диффузионный процесс. Однако точные предельные переходы не всегда так просты; например, есть пределы, при которых скачкообразный процесс становится детерминированным, и соответствующие случаи описываются скорее уравнениями Лиувилля (разд. 3.5.3), нежели общим уравнением Фоккера — Планка. Эти результаты представлены в разд. 7.2.

3.8.3. ПУАССОНОВСКИЙ ПРОЦЕСС

Пуассоновский процесс рассматривался в разд. 1.4.1. Если электроны прибывают на анод или покупатели приходят в магазин с вероятностью в единицу времени d , то такой процесс подчиняется управляющему уравнению, в котором

$$W(n+1|n, t) = d, \quad (3.8.47)$$

а при других значениях

$$W(n|m, t) = 0. \quad (3.8.48)$$

Это управляющее уравнение имеет вид

$$\partial_t P(n, t|n', t') = d[P(n-1, t|n', t') - P(n, t|n', t')]. \quad (3.8.49)$$

Сравнение с (3.8.26) показывает, что оно представляет собой «одно-сторонние» случайные блуждания, в которых пешеход шагает только вправо с вероятностью в единицу времени, равной d .

Уравнение для характеристической функции аналогично уравнению (3.8.30):

$$\partial_t G(s, t) = d[\exp(is) - 1]G(s, t) \quad (3.8.50)$$

и имеет решение

$$G(s, t) = \exp \{td[\exp(is) - 1]\} \quad (3.8.51)$$

при начальном условии, которое состоит в отсутствии посетителей или электронов в начальный момент $t = 0$. Указанное решение приводит к распределению Пуассона

$$P(n, t | 0, 0) = \exp(-td)(td)^n/n! \quad (3.8.52)$$

со средним

$$\langle N(t) \rangle = td. \quad (3.8.53)$$

В отличие от случайных блужданий теперь имеется единственный предел при $l \rightarrow 0$, причем величина

$$ld \equiv v \quad (3.8.54)$$

предполагается фиксированной. Предельный переход дает характеристическую функцию

$$\lim_{l \rightarrow 0} \{\exp[td(e^{is} - 1)]\} = \exp(itvs), \quad (3.8.55)$$

которая дает плотность вероятности

$$p(x, t | 0, 0) = \delta(x - vt). \quad (3.8.56)$$

Нетрудно также видеть, что в этом пределе из управляющего уравнения (3.8.49) получается уравнение Лиувилля, решение которого и должно быть тем детерминированным движением, которое мы получили.

Можно провести и несколько более точный анализ. Раскладывая в ряд функцию, стоящую в экспоненте в (3.8.51), с учетом членов второго порядка по s , получаем

$$\phi(s, t) = G(ls, t) \simeq \exp[t(ivs - s^2D/2)], \quad (3.8.57)$$

где так же, как и в предыдущем разделе,

$$D = l^2d.$$

Тем самым получена характеристическая функция гауссовского распределения с дисперсией Dt и средним vt . Следовательно,

$$p(x, t | 0, 0) \simeq (2\pi Dt)^{-1/2} \exp[-(x - vt)^2/2Dt]. \quad (3.8.58)$$

Очевидно также, что данное распределение есть также решение уравнения

$$\partial_t p(x, t|0, 0) = -v \partial_x p(x, t|0, 0) + \frac{1}{2} D \partial_x^2 p(x, t|0, 0), \quad (3.8.59)$$

которое можно получить разложением управляющего уравнения (3.8.49) до членов порядка l^2 включительно, т. е.

$$\begin{aligned} P(n-1, t|0, 0) &= d p(x-l, t|0, 0) \\ &\simeq d p(x, t|0, 0) - ld \partial_x p(x, t|0, 0) + \frac{1}{2} l^2 d \partial_x^2 p(x, t|0, 0). \end{aligned} \quad (3.8.60)$$

Эту процедуру можно назвать *аппроксимацией* или *разложением*: но она не есть предельный переход. Предел при $l \rightarrow 0$ дает уравнение Ливилля с чисто детерминированным решением (3.8.56). Фактически предельный переход при $l \rightarrow 0$ с фиксированной величиной v соответствует значению $D = 0$. Такого же рода аппроксимацией, как и только что упомянутая, служит специальный случай разложения ван Кампена по параметру размера системы, который подробно рассматривается в разд. 7.2.3.

3.8.4. ПРОЦЕСС ОРНШТЕЙНА — УЛЕНБЕКА

Все предшествовавшие примеры случайных процессов не обладают стационарным распределением, т. е. плотность вероятности в любой точке стремится к нулю при $t \rightarrow \infty$, и тем самым с вероятностью единица данный процесс уходит на бесконечность.

Если добавить в уравнение, описывающее винеровский процесс, член, учитывающий линейный снос, то получится уравнение Фоккера — Планка следующего вида:

$$\partial_t p = \partial_x(kxp) + \frac{1}{2} D \partial_x^2 p, \quad (3.8.61)$$

где под p мы понимаем $p(x, t|x_0, 0)$. Данное уравнение описывает процесс Орнштейна — Уленбека [3.5]. Уравнение для характеристической функции

$$\phi(s) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{isx} p(x, t|x_0, 0) dx \quad (3.8.62)$$

имеет вид

$$\partial_t \phi + ks \partial_s \phi = -\frac{1}{2} D s^2 \phi. \quad (3.8.63)$$

Для решения последнего уравнения можно использовать метод характеристик. Именно, если

$$u(s, t, \phi) = a \quad v(s, t, \phi) = b \quad (3.8.64)$$

(a и b — произвольные постоянные) представляют собой два интеграла вспомогательных уравнений

$$\frac{dt}{1} = \frac{ds}{ks} = -\frac{d\phi}{\frac{1}{2}Ds^2\phi}, \quad (3.8.65)$$

то общее решение уравнения (3.8.63) дается равенством

$$f(u, v) = 0.$$

Частные интегралы нетрудно найти, интегрируя уравнения, включающие соответственно dt и ds или ds и $d\phi$. Они имеют вид

$$u(s, t, \phi) = s \exp(-kt) \quad \text{и} \quad (3.8.66)$$

$$v(s, t, \phi) = \phi \exp(Ds^2/4k). \quad (3.8.67)$$

Очевидно, что общее решение можно записать в виде $v = g(u)$, где $g(u)$ — произвольная функция u . Итак, общее решение таково:

$$\phi(s, t) = \exp(-Ds^2/4k)g[s \exp(-kt)]. \quad (3.8.68)$$

Граничное условие

$$p(x, 0 | x_0, 0) = \delta(x - x_0) \quad (3.8.69)$$

приводит к требованию

$$\phi(s, 0) = \exp(ix_0s), \quad (3.8.70)$$

которое дает

$$g(s) = \exp(Ds^2/4k + ix_0s).$$

Следовательно,

$$\phi(s, t) = \exp\left[\frac{-Ds^2}{4k}(1 - e^{-2kt}) + isx_0e^{-kt}\right], \quad (3.8.71)$$

что, согласно разд. 2.8.1, соответствует гауссовскому распределению с

$$\langle X(t) \rangle = x_0 \exp(-kt) \quad (3.8.72)$$

$$D\{X(t)\} = \frac{D}{2k} [1 - \exp(-2kt)]. \quad (3.8.73)$$

При $t \rightarrow \infty$ среднее и дисперсия стремятся соответственно к предельным значениям 0 и $D/2k$, определяющим предельное стационарное решение. Это решение может быть также непосредственно получено, если положить $\partial_t p = 0$. При этом p удовлетворяет стационарному уравнению Фоккера — Планка

$$\partial_x \left[kxp + \frac{1}{2} D \partial_x p \right] = 0. \quad (3.8.74)$$

Интегрируя его один раз, находим

$$\left[kxp + \frac{1}{2} D \partial_x p \right]_{-\infty}^x = 0. \quad (3.8.75)$$

Из условия нормировки вытекает требование, чтобы вероятность p и ее производная стремились к нулю при $x \rightarrow -\infty$. Отсюда имеем

$$\frac{1}{p} \partial_x p = -\frac{2kx}{D}, \quad (3.8.76)$$

так что

$$p_s(x) = (\pi D/k)^{-1/2} \exp(-kx^2/D). \quad (3.8.77)$$

Это гауссовское распределение с нулевым средним и дисперсией $D/2k$, что согласуется с приведенным выше решением, зависящим от времени.

Ясно, что для системы с одной переменной стационарное решение всегда может быть получено указанным методом интегрирования, если только это решение существует. Если стационарного решения не существует, то данный метод дает решение, которое нельзя нормировать.

Временные корреляционные функции для процесса Орнштейна — Уленбека. Временная корреляционная функция аналогична функции, упомянутой в связи с винеровским процессом. Она может быть рассчитана и является легко измеримой величиной для большинства стохастических процессов. Однако отсутствует какой-либо другой простой путь ее расчета, не связанный непосредственно с определением

$$\langle X(t)X(s) | [x_0, t_0] \rangle = \iint dx_1 dx_2 x_1 x_2 p(x_1, t; x_2, s | x_0, t_0), \quad (3.8.78)$$

откуда, используя марковость процесса, находим

$$(3.8.78) = \iint dx_1 dx_2 x_1 x_2 p(x_1, t | x_2, s) p(x_2, s | x_0, t_0) \quad (3.8.79)$$

в предположении, что

$$t \geq s \geq t_0. \quad (3.8.80)$$

Корреляционная функция с определенным начальным условием обычно не представляет такого интереса, как *стационарная корреляционная функция*, которая получается при приближении системы к стационарному распределению. Как указано в разд. 3.7.2, переход к ней можно осуществить, относя начальное условие к весьма удаленному прошлому. Полагая $t_0 \rightarrow -\infty$, находим

$$\lim_{t_0 \rightarrow -\infty} p(x_2, s | x_0, t_0) = p_s(x_2) = (\pi D/k)^{-1/2} \exp(-kx_2^2/D). \quad (3.8.81)$$

Подставляя в (3.8.79) распределение (3.8.81) и условное распределение, соответствующее равенствам (3.8.72, 73), и интегрируя при учете того, что стационарное среднее равно нулю, получаем

$$\langle X(t)X(s) \rangle_s = \langle X(t), X(s) \rangle_s = \frac{D}{2k} \exp(-k|t-s|). \quad (3.8.82)$$

Этот результат демонстрирует общее свойство стационарных процессов: корреляционные функции зависят только от разностей времен. Общим результатом [3.6] является также тот факт, что описанный в данном разделе процесс — единственный гауссов марковский процесс для одной действительной переменной.

Отметим, что результаты этого подраздела очень просто выводятся методом стохастических дифференциальных уравнений, который будет развит в гл. 4.

Процесс Орнштейна — Уленбека — это простой и представимый явно процесс, имеющий стационарное решение. Стационарный процесс Орнштейна — Уленбека часто используется как модель реального шумового сигнала, для которого значения $X(t)$ и $X(s)$ заметно коррелированы при

$$|t-s| \sim 1/k \equiv \tau. \quad (3.8.83)$$

Для произвольного процесса $X(s)$ время корреляции τ может быть определено равенством

$$\tau = \int_0^{\infty} dt | \langle X(t), X(0) \rangle_s | / D\{X\}_s, \quad (3.8.84)$$

которое справедливо при любом виде корреляционной функции.

3.8.5. СЛУЧАЙНЫЙ ТЕЛЕГРАФНЫЙ ПРОЦЕСС

Рассмотрим сигнал $X(t)$, который принимает любое из двух значений a или b и переключается с одного значения на другое с определенными вероятностями в единицу времени. Таким образом, имеем управляющее уравнение

$$\left. \begin{aligned} \partial_t P(a, t | x, t_0) &= -\lambda P(a, t | x, t_0) + \mu P(b, t | x, t_0) \\ \partial_t P(b, t | x, t_0) &= \lambda P(a, t | x, t_0) - \mu P(b, t | x, t_0) \end{aligned} \right\}. \quad (3.8.85)$$

Его решение легко найти, если заметить, что

$$P(a, t | x, t_0) + P(b, t | x, t_0) = 1$$

и учесть тот факт, что для комбинации $\lambda P(a, t | x, t_0) - \mu P(b, t | x, t_0)$ получается простое уравнение, решением которого при начальном условии

$$P(x', t_0 | x, t_0) = \delta_{x, x'} \quad (3.8.86)$$

служит

$$\lambda P(a, t | x, t_0) - \mu P(b, t | x, t_0) = \exp[-(\lambda + \mu)(t - t_0)](\lambda \delta_{a, x} - \mu \delta_{b, x}). \quad (3.8.87)$$

В итоге имеем

$$\left. \begin{aligned} P(a, t | x, t_0) &= \frac{\mu}{\lambda + \mu} + \exp[-(\lambda + \mu)(t - t_0)] \left(\frac{\lambda}{\lambda + \mu} \delta_{a, x} - \frac{\mu}{\lambda + \mu} \delta_{b, x} \right) \\ P(b, t | x, t_0) &= \frac{\lambda}{\lambda + \mu} - \exp[-(\lambda + \mu)(t - t_0)] \left(\frac{\lambda}{\lambda + \mu} \delta_{a, x} - \frac{\mu}{\lambda + \mu} \delta_{b, x} \right) \end{aligned} \right\}. \quad (3.8.88)$$

Нетрудно видеть, что данному процессу соответствует следующее стационарное решение, получаемое переходом $t_0 \rightarrow -\infty$:

$$\left. \begin{aligned} P_s(a) &= \frac{\mu}{\lambda + \mu} \\ P_s(b) &= \frac{\lambda}{\lambda + \mu} \end{aligned} \right\}, \quad (3.8.89)$$

которое, конечно, можно сразу получить из управляющего уравнения.

При помощи (3.8.88) нетрудно вычислить среднее значение и дисперсию. Для среднего имеем

$$\begin{aligned} \langle X(t) | [x_0, t_0] \rangle &= \sum x P(x, t | x_0, t_0) \\ &= \frac{a\mu + b\lambda}{\mu + \lambda} + \exp[-(\lambda + \mu)(t - t_0)] \left(x_0 - \frac{a\mu + b\lambda}{\mu + \lambda} \right), \end{aligned} \quad (3.8.90)$$

так что

$$\langle X \rangle_s = \frac{a\mu + b\lambda}{\mu + \lambda}. \quad (3.8.91)$$

Можно рассчитать и нестационарную дисперсию, но при этом получается слишком громоздкое выражение. Поэтому приведем только стационарную дисперсию

$$D\{X\}_s = \frac{(a-b)^2\mu\lambda}{(\lambda + \mu)^2}. \quad (3.8.92)$$

Чтобы рассчитать стационарную корреляционную функцию (предполагая $t \geq s$), запишем

$$\langle X(t)X(s) \rangle_s = \sum_{x'x''} x x' P(x, t | x', s) P_s(x') \quad (3.8.93)$$

$$= \sum_{x'} x' \langle X(t) | [x', s] \rangle P_s(x'). \quad (3.8.94)$$

Используя теперь (3.8.90 — 92), получаем

$$\langle X(t)X(s) \rangle_s = \langle X \rangle_s^2 + \exp[-(\lambda + \mu)(t - s)](\langle X^2 \rangle_s - \langle X \rangle_s^2) \quad (3.8.95)$$

$$= \left(\frac{a\mu + b\lambda}{\mu + \lambda} \right)^2 + \exp[-(\lambda + \mu)(t - s)] \frac{(a-b)^2\mu\lambda}{(\lambda + \mu)^2}. \quad (3.8.96)$$

Следовательно,

$$\langle X(t), X(s) \rangle_s = \langle X(t)X(s) \rangle_s - \langle X \rangle_s^2 = \exp[-(\lambda + \mu)|t - s|] \frac{(a-b)^2\mu\lambda}{(\lambda + \mu)^2}. \quad (3.8.97)$$

Отметим, что полученная временная корреляционная функция имеет в точности такой же вид, что и аналогичная функция для процесса Орнштейна — Уленбека. Корреляционные функции более высоких порядков, конечно, будут другими, но вследствие простоты рассмотренного телеграфного процесса с двумя состояниями и простоты его корреляционной функции он широко применяется при построении различных моделей.

Расчеты методом Ито и стохастические дифференциальные уравнения

4.1. ОБОСНОВАНИЯ

В разд. 1.2.2 мы впервые встретились с прообразом того, что теперь называется уравнением Ланжевена, которое можно в общих чертах определить как обыкновенное дифференциальное уравнение, в которое входит быстро и беспорядочно флуктуирующая функция времени (член $X(t)$ в первоначальном уравнении Ланжевена). Сама простота, с которой Ланжевен пришел к результатам Эйнштейна, может служить достаточным основанием для того, чтобы попытаться дать уравнению Ланжевена более или менее строгое обоснование.

Наиболее часто встречающееся нестрогое уравнение Ланжевена может быть записано в виде

$$\frac{dx}{dt} = a(x, t) + b(x, t)\xi(t), \quad (4.1.1)$$

где x — интересующая нас переменная; $a(x, t)$ и $b(x, t)$ — некоторые известные функции, а $\xi(t)$ — быстро флуктуирующий случайный член. С математической точки зрения понятие «быстро и беспорядочно изменяющейся функции» означает, что при $t \neq t'$ значения $\xi(t)$ и $\xi(t')$ статистически независимы. Будем считать, что $\langle \xi(t) \rangle = 0$, поскольку любое ненулевое среднее значение может быть учтено при определении функции $a(x, t)$, и потребуем, таким образом, чтобы

$$\langle \xi(t)\xi(t') \rangle = \delta(t - t'). \quad (4.1.2)$$

Тем самым удовлетворяется требование отсутствия корреляции в различные моменты времени, но, как довольно неприятное следствие, дисперсия $\xi(t)$ оказывается бесконечно большой. На практике, конечно, никакая величина не может обладать бесконечно большой дисперсией, однако понятие *белого шума* как *идеализация* реального флуктуирующего сигнала имеет определенный смысл, как уже упоминалось в разд. 1.4.2 в связи с тепловыми шумами в электрических цепях. Мы уже сталкивались с двумя объектами, которые могут рассматриваться как генераторы с ненулевым временем корреляции: процессом Орнштейна — Уленбека и случайным телеграфным сигналом. Для

обоих этих источников корреляционная функция второго порядка может (с точностью до постоянного множителя) быть представлена в виде

$$\langle X(t), X(t') \rangle = \frac{\gamma}{2} e^{-\gamma|t-t'|}. \quad (4.1.3)$$

Основная разница между этими двумя источниками состоит в том, что реализации процесса Орнштейна — Уленбека непрерывны, а телеграфного сигнала нет. Если (4.1.1) рассматривать как реальное дифференциальное уравнение, в котором $\xi(t)$ представляет собой не дельта-коррелированный шум, а шум с конечным временем корреляции, то в качестве $\xi(t)$ нужно выбрать непрерывную функцию, иначе dx/dt не будет непрерывна. Пределом корреляционной функции (4.1.3) при $\gamma \rightarrow 0$ является, очевидно, дельта-функция Дирака, поскольку

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\gamma}{2} e^{-\gamma|t-t'|} dt' = 1, \quad (4.1.4)$$

и для $t \neq t'$

$$\lim_{\gamma \rightarrow \infty} \frac{\gamma}{2} e^{-\gamma|t-t'|} = 0. \quad (4.1.5)$$

Это означает, что возможную модель $\xi(t)$ можно было бы получить путем некоторого предельного перехода, например $\gamma \rightarrow \infty$ в процессе Орнштейна — Уленбека. В обозначениях разд. 3.8.4 это соответствует переходу к пределу

$$k \rightarrow \infty, \quad (4.1.6)$$

причем $D = k^2$. Этот предел попросту не существует. Переход к любому подобному пределу возможен только после вычисления измеримых величин; в принципе такая процедура осуществима, но слишком громоздка, чтобы использовать ее для практических расчетов.

Необходим иной подход. Коль скоро мы пишем дифференциальное уравнение (4.1.1), мы предполагаем его интегрируемость, и поэтому должны ожидать, что интеграл

$$u(t) = \int_0^t dt' \zeta(t') \quad (4.1.7)$$

существует.

Потребуем теперь, чтобы $u(t)$ обладала естественной для интеграла непрерывностью. Это означает, что $u(t)$ является марковским про-

цессом, поскольку мы можем записать следующее:

$$u(t') = \int_0^t ds \xi(s) + \int_t^{t'} ds \xi(s) \quad (4.1.8)$$

$$= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left[\int_0^{t-\varepsilon} ds \xi(s) \right] + \int_t^{t'} ds \xi(s), \quad (4.1.9)$$

и для всякого $\varepsilon > 0$, $\xi(s)$ в первом интеграле не зависят от $\xi(s)$ во втором интеграле. Отсюда в силу непрерывности $u(t)$ и $u(t') - u(t)$ статистически независимы и, более того, $u(t') - u(t)$ не зависит от $u(t'')$ для всех $t'' < t$. Это означает, что $u(t')$ полностью определяется (в вероятностном смысле) известным значением $u(t)$, но не зависит от каких-либо предыдущих значений. Следовательно, $u(t)$ является марковским процессом.

Поскольку реализации процесса $u(t)$ непрерывны, функция $u(t)$ должна описываться уравнением Фоккера — Планка. Коэффициенты сноса и диффузии для этого процесса могут быть вычислены по формулам разд. 3.5.2. Можно записать следующее:

$$\langle u(t + \Delta t) - u_0 | [u_0, t] \rangle = \left\langle \int_t^{t+\Delta t} \xi(s) ds \right\rangle = 0 \quad (4.1.10)$$

$$\langle [u(t + \Delta t) - u_0]^2 | [u_0, t] \rangle = \int_t^{t+\Delta t} ds \int_t^{t+\Delta t} ds' \langle \xi(s) \xi(s') \rangle \quad (4.1.11)$$

$$= \int_t^{t+\Delta t} ds \int_t^{t+\Delta t} ds' \delta(s - s') = \Delta t, \quad (4.1.12)$$

так что коэффициенты сноса и диффузии суть

$$A(u_0, t) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\langle u(t + \Delta t) - u_0 | [u_0, t] \rangle}{\Delta t} = 0 \quad (4.1.13)$$

$$B(u_0, t) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\langle [u(t + \Delta t) - u_0]^2 | [u_0, t] \rangle}{\Delta t} = 1. \quad (4.1.14)$$

Таким образом, уравнение Фоккера — Планка является уравнением винеровского процесса, и мы можем записать

$$\int_0^t \xi(t') dt' = u(t) = W(t). \quad (4.1.15)$$

Мы приходим к парадоксальному результату: интеграл от $\xi(t)$ равен функции $W(t)$, которая не может быть продифференцирована,

как показано в разд. 3.8.1. Это означает, что с математической точки зрения уравнение Ланжевена (4.1.1) не существует. Однако соответствующее *интегральное уравнение*

$$x(t) - x(0) = \int_0^t a[x(s), s] ds + \int_0^t b[x(s), s] \xi(s) ds \quad (4.1.16)$$

допускает строгое истолкование.

Произведем замену, которая следует непосредственно из интерпретации интеграла от $\xi(t)$ как винеровского процесса $W(t)$:

$$dW(t) \equiv W(t + dt) - W(t) = \xi(t) dt, \quad (4.1.17)$$

и запишем второй интеграл в виде

$$\int_0^t b[x(s), s] dW(s). \quad (4.1.18)$$

Это своего рода стохастический интеграл Стилтеса от реализации $W(t)$. Такой интеграл может быть определен (см. разд. 4.2).

Прежде чем перейти к этому, отметим, что требование непрерывности $u(t)$, хотя и вполне естественное, может быть ослаблено, чтобы дать возможность описывать скачкообразные процессы стохастическими дифференциальными уравнениями. Об этом уже упоминалось в разд. 1.4.1 в связи с обсуждением дробового шума. Однако мы не считаем целесообразным заниматься здесь этим вопросом и отсылаем читателя к соответствующей литературе [4.1].

Обычно *полагают*, что $\xi(t)$ гауссовская и удовлетворяет также условиям (4.1.2). Для приведенных выше рассуждений это не требуется: гауссовская природа функции $\xi(t)$ следует из *предположения* о непрерывности $u(t)$. Строго говоря, выбор того или другого предположения — дело вкуса. Однако предположение о непрерывности $u(t)$ кажется нам более естественным, чем постулирование гауссовской природы $\xi(t)$, поскольку последнее может быть в принципе сопряжено с необходимостью вычислять моменты произвольно высоких порядков.

4.2. СТОХАСТИЧЕСКОЕ ИНТЕГРИРОВАНИЕ

4.2.1. ОПРЕДЕЛЕНИЕ СТОХАСТИЧЕСКОГО ИНТЕГРАЛА

Пусть $G(t)$ есть произвольная функция времени, а $W(t)$ — винеровский процесс. Будем определять стохастический интеграл

$\int_{t_0}^t G(t') dW(t')$ как интеграл Римана — Стилтеса. Разобьем ин-

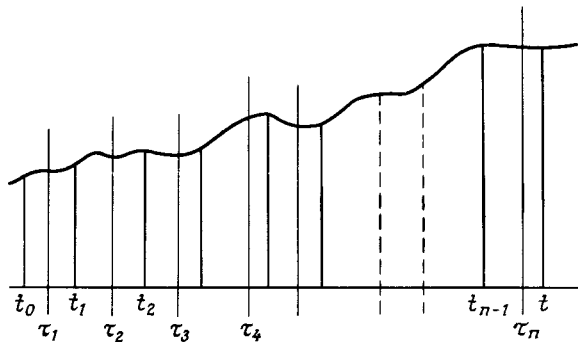


Рис. 4.1. Разбиение временного интервала, использованное в определении стохастического интегрирования.

тервал $[t_0, t]$ на n подынтервалов с помощью точек разбиения (рис. 4.1)

$$t_0 \leq t_1 \leq t_2 \leq \dots \leq t_{n-1} \leq t \tag{4.2.1}$$

и выберем промежуточные точки τ_i на каждом подынтервале

$$t_{i-1} \leq \tau_i \leq t_i. \tag{4.2.2}$$

Стохастический интеграл $\int_{t_0}^t G(t') dW(t')$ определяется как предел частичных сумм

$$S_n = \sum_{i=1}^n G(\tau_i)[W(t_i) - W(t_{i-1})]. \tag{4.2.3}$$

Интуитивно ясно, что, вообще говоря, интеграл, определенный как предел S_n , будет зависеть от конкретного выбора промежуточных точек τ_i , поскольку, если выбрать $G(\tau_i) = W(\tau_i)$, то

$$\langle S_n \rangle = \left\langle \sum_{i=1}^n W(\tau_i)[W(t_i) - W(t_{i-1})] \right\rangle \tag{4.2.4}$$

$$= \sum_{i=1}^n [\min(\tau_i, t_i) - \min(\tau_i, t_{i-1})] \tag{4.2.5}$$

$$= \sum_{i=1}^n (\tau_i - t_{i-1}). \tag{4.2.6}$$

Если, к примеру, мы выберем для всех i

$$\tau_i = \alpha t_i + (1 - \alpha)t_{i-1} \quad (0 < \alpha < 1), \tag{4.2.7}$$

то

$$\langle S_n \rangle = \sum_{i=1}^n (t_i - t_{i-1}) \alpha = (t - t_0) \alpha. \quad (4.2.8)$$

Таким образом, среднее значение интеграла, в зависимости от выбора промежуточных точек может быть любым — от нуля до $(t - t_0)$.

Будем поэтому выбирать промежуточные точки так, чтобы $\alpha = 0$, иначе говоря,

$$\tau_i = t_{i-1}, \quad (4.2.9)$$

и определим *стохастический интеграл Ито* от функции $G(t)$ как

$$\int_{t_0}^t G(t') dW(t') = \text{ms-lim}_{n \rightarrow \infty} \left\{ \sum_{i=1}^n G(t_{i-1}) [W(t_i) - W(t_{i-1})] \right\}. \quad (4.2.10)$$

Под ms-lim мы понимаем среднеквадратичный предел, как он определен в разд. 2.9.2.

4.2.2. ПРИМЕР $\int_{t_0}^t W(t') dW(t')$

Возможно точное вычисление. Запишем (вместо $W(t_i)$ будем писать W_i):

$$S_n = \sum_{i=1}^n W_{i-1} (W_i - W_{i-1}) \equiv \sum_{i=1}^n W_{i-1} \Delta W_i \quad (4.2.12)$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n [(W_{i-1} + \Delta W_i)^2 - (W_{i-1})^2 - (\Delta W_i)^2] \quad (4.2.13)$$

$$= \frac{1}{2} [W(t)^2 - W(t_0)^2] - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n (\Delta W_i)^2.$$

Можно вычислить среднеквадратичный предел последнего члена. Заметим, что

$$\langle \sum (\Delta W_i)^2 \rangle = \sum_i \langle (W_i - W_{i-1})^2 \rangle = \sum_i (t_i - t_{i-1}) = t - t_0. \quad (4.2.14)$$

Вследствие этого

$$\begin{aligned} \langle [\sum_i (W_i - W_{i-1})^2 - (t - t_0)]^2 \rangle &= \langle \sum_i (W_i - W_{i-1})^4 + 2 \sum_{i>j} (W_i - W_{i-1})^2 (W_j - W_{j-1})^2 \\ &\quad - 2(t - t_0) \sum_i (W_i - W_{i-1})^2 + (t - t_0)^2 \rangle. \end{aligned} \quad (4.2.15)$$

Заметим, что $W_i - W_{i-1}$ есть гауссова переменная и не зависит от $W_j - W_{j-1}$, что позволяет нам произвести разложение на множители. Таким образом,

$$\langle (W_i - W_{i-1})^2 (W_j - W_{j-1})^2 \rangle = (t_i - t_{i-1})(t_j - t_{j-1}), \quad (4.2.16)$$

а также (с учетом (2.8.6))

$$\langle (W_i - W_{i-1})^4 \rangle = 3 \langle (W_i - W_{i-1})^2 \rangle^2 = 3(t_i - t_{i-1})^2. \quad (4.2.17)$$

Из (4.2.16, 17) имеем

$$\begin{aligned} \langle [\sum_i (W_i - W_{i-1}) - (t - t_0)]^2 \rangle &= 2 \sum_i (t_i - t_{i-1})^2 \\ &+ \sum_{i,j} [(t_i - t_{i-1}) - (t - t_0)] [(t_j - t_{j-1}) - (t - t_0)] \\ &= 2 \sum_i (t_i - t_{i-1})^2 \\ &\rightarrow 0, \text{ когда } n \rightarrow \infty. \end{aligned} \quad (4.2.18)$$

Таким образом,

$$\text{ms-lim}_{n \rightarrow \infty} \sum_i (W_i - W_{i-1})^2 = t - t_0 \quad (4.2.19)$$

по определению среднеквадратичного предела, и

$$\int_{t_0}^t W(t') dW(t') = \frac{1}{2} [W(t)^2 - W(t_0)^2 - (t - t_0)]. \quad (4.2.20)$$

Замечания

$$1) \langle \int_{t_0}^t W(t) dW(t) \rangle = \frac{1}{2} [\langle W(t)^2 \rangle - \langle W(t_0)^2 \rangle - (t - t_0)] = 0. \quad (4.2.21)$$

Это также следует по определению, поскольку в каждый член входит произведение $\langle W_{i-1} \Delta W_i \rangle$, которое обращается в нуль, так как ΔW_i статистически не зависит от W_{i-1} , как показано в разд. 3.8.1.

2) Полученный интеграл отличается от обычного интеграла Римана — Стильтьеса, в котором отсутствовал бы член $(t - t_0)$. Причина здесь в том, что $|W(t + \Delta t) - W(t)|$ почти всегда имеет порядок $\sqrt{\Delta t}$, так что в отличие от обычного интегрирования члены второго порядка по $\Delta W(t)$ не исчезают при переходе к пределу.

4.2.3. ИНТЕГРАЛ СТРАТОНОВИЧА

Другое определение стохастического интеграла, в котором отсутствует аномальный член $(t - t_0)$, принадлежит Стратоновичу [4.2]. Полностью этот интеграл мы определим в разд. 4.3.6. Для рассмотренных ранее случаев определение данного интеграла сводится к интерпретации подынтегральной функции $W(t)$ как полусуммы $\frac{1}{2} [W(t_i) + W(t_{i+1})]$. Имеем, как нетрудно проверить,

$$S \int_{t_0}^t W(t') dW(t') = \text{ms-lim}_{n \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^n \frac{W(t_i) + W(t_{i-1})}{2} [W(t_i) - W(t_{i-1})] \quad (4.2.22)$$

$$= \frac{1}{2} [W(t)^2 - W(t_0)^2]. \quad (4.2.23)$$

Однако между интегралом Ито и интегралом Стратоновича (который мы будем обозначать буквой S перед знаком интеграла, как в (4.2.23)), не существует единого соответствия. Другими словами, мы не можем определить связь между этими двумя интегралами для произвольных функций $G(t)$. (Если же $G(t)$ относится к диффузионному процессу, определяемому стохастическим дифференциальным уравнением, то можно указать формулу, связывающую эти интегралы; см. разд. 4.3.6.)

4.2.4. НЕУПРЕЖДАЮЩИЕ ФУНКЦИИ

Сложности математической записи могут затруднить понимание смысла неупреждающей функции; в действительности же ничего сложного здесь нет. Мы рассматриваем ситуацию, в которой все функции могут быть представлены как функции или функционалы некоторого винеровского процесса $W(t)$ через посредство стохастического дифференциального (или интегрального) уравнения вида

$$x(t) - x(t_0) = \int_{t_0}^t a[x(t'), t'] dt' + \int_{t_0}^t b[x(t'), t'] dW(t'). \quad (4.2.24)$$

Функция $G(t)$ называется *неупреждающей функцией* t , если для всех s и t , таких, что $t < s$, $G(t)$ статистически независима от $W(s) - W(t)$. Это означает, что $G(t)$ не зависит от поведения винеровского процесса для всех будущих значений t . Очевидно, это довольно естественное требование к имеющей физический смысл функции, которая может быть решением уравнения, подобного (4.2.24), для которого нам интуитивно ясно, что $x(t)$ включает $W(t')$ только при $t' \leq t$.

Конкретными неупреждающими функциями являются, например,

1) $W(t)$

2) $\int_{t_0}^t dt' F[W(t')]$

3) $\int_{t_0}^t dW(t') F[W(t')]$

4) $\int_{t_0}^t dt' G(t')$

5) $\int_{t_0}^t dW(t') G(t')$

}, когда $G(t)$ сама есть неупреждающая функция.

Результаты 3 и 5 основаны на том факте, что стохастический интеграл Ито, определяемый (4.2.10), является пределом последовательности, в которую входят только $G(t')$ для $t' < t$, и $W(t')$ для $t' \leq t$.

Конкретные причины, по которым мы вводим в рассмотрение неупреждающие функции, состоят в следующем:

1) могут быть получены многие результаты, справедливые только для этих функций;

2) эти функции естественно встречаются в таких ситуациях, как изучение дифференциальных уравнений, включающих время, когда ожидается существование своего рода *причинности* в том смысле, что неизвестное будущее не может повлиять на настоящее;

3) эти функции необходимы для определения стохастических дифференциальных уравнений.

4.2.5. ДОКАЗАТЕЛЬСТВО ТОГО, ЧТО $dW(t)^2 = dt$ и $dW(t)^{2+N} = 0$

Приведенные в заголовке раздела формулы являются ключом к использованию исчисления Ито в качестве практического метода. В таком виде, однако, они не вполне точны; в действительности, имеется в виду следующее:

$$\begin{aligned} \int_{t_0}^t [dW(t')]^{2+N} G(t') &\equiv \text{ms-lim}_{n \rightarrow \infty} \sum_i G_{i-1} \Delta W_i^{2+N} \\ &= \int_{t_0}^t dt' G(t') \quad \text{при } N = 0 \\ &= 0 \quad \text{при } N > 0 \end{aligned} \tag{4.2.25}$$

для произвольной *неупреждающей функции* $G(t)$.

Доказательство не представляет затруднений. Для $N = 0$ определим

$$I = \lim_{n \rightarrow \infty} \langle [\sum_i G_{i-1} (\Delta W_i^2 - \Delta t_i)]^2 \rangle \quad (4.2.26)$$

$$= \lim_{n \rightarrow \infty} \left\{ \langle \sum_i \underbrace{(G_{i-1})^2}_{\text{сумма}} \underbrace{(\Delta W_i^2 - \Delta t_i)^2}_{\text{сумма}} + \sum_{i > j} \underbrace{2G_{i-1}G_{j-1}}_{\text{сумма}} \underbrace{(\Delta W_j^2 - \Delta t_j)}_{\text{сумма}} \underbrace{(\Delta W_i^2 - \Delta t_i)}_{\text{сумма}} \rangle \right\}. \quad (4.2.27)$$

Горизонтальными фигурными скобками охвачены сомножители, которые статистически независимы друг от друга в силу свойств винеровского процесса и в силу того, что G_i суть значения неупреждающей функции, не зависящие от всех ΔW_j для $j > i$.

Пользуясь этой независимостью, мы можем разложить средние значения на множители, а используя также

$$1) \langle \Delta W_i^2 \rangle = \Delta t_i$$

$$2) \langle (\Delta W_i^2 - \Delta t_i)^2 \rangle = 2\Delta t_i^2 \quad (\text{в силу гауссовской природы}),$$

находим

$$I = 2 \lim_{n \rightarrow \infty} \left[\sum_i \Delta t_i^2 \langle (G_{i-1})^2 \rangle \right]. \quad (4.2.28)$$

При достаточно слабых предположениях относительно $G(t)$ (например, полагая ее ограниченной) это означает, что

$$\text{ms-lim}_{n \rightarrow \infty} \left(\sum_i G_{i-1} \Delta W_i^2 - \sum_i G_{i-1} \Delta t_i \right) = 0, \quad (4.2.29)$$

а поскольку

$$\text{ms-lim}_{n \rightarrow \infty} \sum_i G_{i-1} \Delta t_i = \int_{t_0}^t dt' G(t'), \quad (4.2.30)$$

получаем

$$\boxed{\int_{t_0}^t [dW(t')]^2 G(t') = \int_{t_0}^t dt' G(t').}$$

ЗАМЕЧАНИЯ

1) Доказательство, что $\int_{t_0}^t G(t) [dW(t)]^{2+N}$ для $N > 0$ проводится

аналогично с использованием явных выражений для высших моментов гауссовского распределения (разд. 2.8.1).

2) $dW(t)$ встречается только в интегралах, так что, если ограничиваться лишь рассмотрением неупреждающих функций, можно просто записать

$$dW(t)^2 \equiv dt \tag{4.2.31}$$

$$dW(t)^{2+N} \equiv 0 \quad (N > 0). \tag{4.2.32}$$

3) Эти результаты справедливы только для интеграла Ито, поскольку мы воспользовались независимостью ΔW_i от G_{i-1} . Для интеграла Стратоновича

$$\Delta W_i = W(t_i) - W(t_{i-1}) \tag{4.2.33}$$

$$G_{i-1} = G[\frac{1}{2}(t_i + t_{i-1})], \tag{4.2.34}$$

и хотя $G(t)$ — неупреждающая функция, это еще не гарантирует, что ΔW_i и G_{i-1} , определенные таким образом, независимы.

4) Аналогичным способом можно доказать, что

$$\int_0^t G(t') dt' dW(t') \equiv \text{ms-lim}_{n \rightarrow \infty} \sum G_{i-1} \Delta W_i \Delta t_i = 0, \tag{4.2.35}$$

равно как и для более высоких порядков. Попросту охарактеризовать эти результаты можно, сказав, что $dW(t)$ имеет порядок малости $(\Delta t)^{1/2}$ и что при вычислении дифференциалов бесконечно малые порядка выше Δt отбрасываются.

4.2.6. СВОЙСТВА СТОХАСТИЧЕСКОГО ИНТЕГРАЛА ИТО

а) *Существование*

Можно показать, что стохастический интеграл Ито $\int_0^t G(t') dW(t')$ существует всегда, когда функция $G(t')$ является *непрерывной* и *неупреждающей* на замкнутом интервале $[t_0, t]$ [4.3].

б) *Интегрирование многочленов*

Мы можем формально воспользоваться результатом разд. 4.2.5:

$$d[W(t)]^n = [W(t) + dW(t)]^n - W(t)^n = \sum_{r=1}^n \binom{n}{r} W(t)^{n-r} dW(t)^r,$$

и, учитывая то, что $dW(t)^r \rightarrow 0$ для всех $r > 2$

$$= nW(t)^{n-1}dW(t) + \frac{n(n-1)}{2}W(t)^{n-2}dt, \quad (4.2.36)$$

получим

$$\int_{t_0}^t W(t')^n dW(t') = \frac{1}{n+1} [W(t)^{n+1} - W(t_0)^{n+1}] - \frac{n}{2} \int_{t_0}^t W(t)^{n-1} dt. \quad (4.2.37)$$

в) Два вида интегралов

Заметим, что для каждой $G(t)$ существуют два вида интегралов:

$$\int_{t_0}^t G(t') dt' \quad \text{и} \quad \int_{t_0}^t G(t') dW(t'),$$

каждый из которых входит в последнюю формулу. Вообще говоря, между этими интегралами не существует связи.

г) Общие правила дифференцирования

Записывая дифференциалы (как в п. «б»), следует сохранять члены до второго порядка по $dW(t)$. Это значит, например, что

$$\begin{aligned} d\{\exp [W(t)]\} &= \exp [W(t) + dW(t)] - \exp [W(t)] \\ &= \exp [W(t)][dW(t) + \frac{1}{2}dW(t)^2] \\ &= \exp [W(t)][dW(t) + \frac{1}{2}dt] \end{aligned} \quad (4.2.38)$$

или, в более общем виде,

$$\begin{aligned} df[W(t), t] &= \frac{\partial f}{\partial t} dt + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial t^2} (dt)^2 + \frac{\partial f}{\partial W} dW(t) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial W^2} [dW(t)]^2 \\ &\quad + \frac{\partial^2 f}{\partial W \partial t} dt dW(t) + \dots \end{aligned}$$

Пользуясь тем, что

$$(dt)^2 \rightarrow 0$$

$$dt dW(t) \rightarrow 0$$

$$[dW(t)]^2 = dt$$

и все члены высших порядков обращаются в нуль, получаем

$$df[W(t), t] = \left(\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial W^2} \right) dt + \frac{\partial f}{\partial W} dW(t). \quad (4.2.39)$$

д) *Формула средних значений*

Для неупреждающей функции $G(t)$

$$\left\langle \int_{t_0}^t G(t') dW(t') \right\rangle = 0. \quad (4.2.40)$$

Поскольку $G(t)$ — неупреждающая функция, в определении стохастического интеграла

$$\left\langle \sum_i G_{i-1} \Delta W_i \right\rangle = \sum_i \langle G_{i-1} \rangle \langle \Delta W_i \rangle = 0, \quad (4.2.41)$$

а из разд. 2.9.5 мы знаем, что порядок операций ms-lim и $\langle \quad \rangle$ может быть изменен. Отсюда, переходя в (4.2.41) к пределу, получаем искомый результат.

Полученный результат *не справедлив* для интеграла Стратоновича, поскольку здесь значение G_{i-1} выбирается в середине подынтервала и может быть скоррелировано с ΔW_i .

е) *Формула, определяющая корреляцию*

Если $G(t)$ и $H(t)$ — произвольные непрерывные неупреждающие функции, то

$$\left\langle \int_{t_0}^t G(t') dW(t') \int_{t_0}^t H(t') dW(t') \right\rangle = \int_{t_0}^t dt \langle G(t') H(t') \rangle. \quad (4.2.42)$$

Доказательство. Заметим, что

$$\begin{aligned} \left\langle \sum_i G_{i-1} \Delta W_i \sum_j H_{j-1} \Delta W_j \right\rangle &= \left\langle \sum_i G_{i-1} H_{i-1} (\Delta W_i)^2 \right\rangle \\ &+ \left\langle \sum_{i>j} (G_{i-1} H_{j-1} + G_{j-1} H_{i-1}) \Delta W_j \Delta W_i \right\rangle. \end{aligned} \quad (4.2.43)$$

Во втором члене в правой части ΔW_i не зависит от всех остальных членов, поскольку $j < i$, а G и H неупреждающие. Поэтому мы можем вынести множитель $\langle \Delta W_i \rangle = 0$, из чего следует, что весь второй

член обращается в нуль. Пользуясь тем, что

$$\langle \Delta W_i^2 \rangle = \Delta t_i, \quad (4.2.44)$$

и меняя местами операции усреднения и перехода к пределу, получаем искомый результат.

С формальной точки зрения это эквивалентно утверждению, что ланжевенновские источники $\xi(t)$ дельта-коррелированы и некоррелированы с $F(t)$ и $G(t)$. Действительно, сделав замену

$$dW(t) \rightarrow \xi(t)dt, \quad (4.2.45)$$

мы видим, что если $F(t)$ и $G(t)$ — неупреждающие функции, $\xi(t)$ не зависит от них и

$$\begin{aligned} \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^t ds' \langle G(t')H(s')\xi(t')\xi(s') \rangle &= \int_{t_0}^t \int_{t_0}^t dt' ds' \langle G(t')H(s') \rangle \langle \xi(t')\xi(s') \rangle \\ &= \int_{t_0}^t dt' \langle G(t')H(t') \rangle; \end{aligned} \quad (4.2.46)$$

отсюда следует, что

$$\langle \xi(t)\xi(s) \rangle = \delta(t - s).$$

Здесь, однако, возникает важный вопрос, касающийся определения. Когда в подынтегральное выражение входит дельта-функция, при исследовании стохастических дифференциальных уравнений нередко оказывается, что аргумент дельта-функции равен либо верхнему, либо нижнему пределу интегрирования. Иначе говоря, нам встречаются интегралы вида

$$I_1 = \int_{t_1}^{t_2} dt f(t)\delta(t - t_1) \quad (4.2.47)$$

или

$$I_2 = \int_{t_1}^{t_2} dt f(t)\delta(t - t_2), \quad (4.2.48)$$

и относительно значения таких интегралов могут быть сделаны различные допущения. Мы покажем, что в данном контексте нам следует всегда интерпретировать эти интегралы как

$$I_1 = f(t_1) \quad (4.2.49)$$

$$I_2 = 0, \quad (4.2.50)$$

т. е. считать, что весь вес дельта-функции приходится на нижний предел интеграла и полностью пренебрегается у верхнего предела. Для того чтобы доказать это, заметим, что

$$\left\langle \int_{t_0}^t G(t') dW(t') \left[\int_{t_0}^{t'} H(s') dW(s') \right] \right\rangle = 0. \quad (4.2.51)$$

Это следует из того, что функция, определяемая интегралом в квадратных скобках, в силу замечания 5 разд. 4.2.4 является неупреждающей, и поэтому все подынтегральное выражение (полученное умножением указанного интеграла на также неупреждающую функцию $G(t')$) представляет собой неупреждающую функцию. Поэтому среднее значение, как указано в разд. 4.2.6д, обращается в нуль.

Теперь, используя понятие ланжевенковского источника, мы можем переписать (4.2.51) в виде

$$\int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} ds' \langle G(t') H(s') \rangle \delta(t' - s') = 0, \quad (4.2.52)$$

что соответствует неучету веса дельта-функции у верхнего предела интегрирования. Весь вес дельта-функции должен учитываться у нижнего предела.

Это свойство является прямым следствием определения интеграла Ито в виде (4.2.10), где приращение «направлено в будущее», т. е.

$$dW(t) = W(t + dt) - W(t). \quad (4.2.53)$$

В случае интеграла Стратоновича мы получаем совершенно иную формулу, доказать которую вовсе не так просто, как для интеграла Ито, но для которой дело сводится к выбору

$$\left. \begin{aligned} I_1 &= \frac{1}{2} f(t_1) \\ I_2 &= \frac{1}{2} f(t_2). \end{aligned} \right\} \quad (\text{Стратонович}) \quad (4.2.54)$$

Это означает, что в обоих случаях учитывается половина веса дельта-функции, аргумент которой совпадает с пределом интегрирования. Хотя эта формула интуитивно более естественна, чем соответствующая формула для интеграла Ито, пользоваться ею сложнее, особенно в теории возмущений стохастических дифференциальных уравнений, где метод Ито позволяет избавляться от большого количества членов.

4.3. СТОХАСТИЧЕСКИЕ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ (СДУ)

В разд. 4.1 мы пришли к выводу, что наиболее удовлетворительной интерпретацией уравнения Ланжевена

$$\frac{dx}{dt} = a(x, t) + b(x, t)\xi(t) \quad (4.3.1)$$

является стохастическое интегральное уравнение

$$x(t) - x(0) = \int_0^t dt' a[x(t'), t'] + \int_0^t dW(t') b[x(t'), t']. \quad (4.3.2)$$

К сожалению, рассуждения, проведенные в разд. 4.1, не дают возможности сделать вывод о том, какой именно интеграл (Ито или Стратоновича) следует выбрать. С математической точки зрения интеграл Ито удовлетворительнее, однако он не всегда оказывается наиболее естественным в физическом смысле. Интегралом Стратоновича удобно описывать ситуации, когда под $\xi(t)$ понимают реальный шум (не белый шум) с конечным временем корреляции, которое после вычисления измеримых величин устремляют к нулю. Кроме того, метод Стратоновича позволяет пользоваться обычными приемами математического анализа, что невозможно при использовании метода Ито.

С математической точки зрения выбор предпрещается тем, что с использованием интеграла Стратоновича в недиффузионном случае почти невозможно проводить какие-либо математические доказательства. Поэтому мы определим СДУ в смысле Ито, покажем их эквивалентность СДУ Стратоновича и будем использовать те и другие в зависимости от конкретной задачи. Связь между СДУ с белым шумом и СДУ с реальным шумом будет разобрана в разд. 6.5.

4.3.1. СТОХАСТИЧЕСКОЕ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОЕ УРАВНЕНИЕ ИТО. ОПРЕДЕЛЕНИЕ

Стохастическая величина $x(t)$ подчиняется СДУ Ито, записанному в виде

$$dx(t) = a[x(t), t]dt + b[x(t), t]dW(t), \quad (4.3.3)$$

если для всех t и t_0

$$x(t) = x(t_0) + \int_{t_0}^t dt' a[x(t'), t'] + \int_{t_0}^t dW(t') b[x(t'), t']. \quad (4.3.4)$$

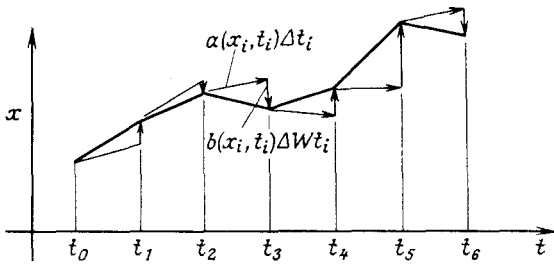


Рис. 4.2. Иллюстрация метода Коши — Эйлера для построения приближенного решения стохастического дифференциального уравнения

$$dx(t) = a[x(t), t]dt + b[x(t), t]dW(t).$$

Прежде чем рассматривать условия, которым должны удовлетворять коэффициенты в (4.3.4), следовало бы выяснить, что следует понимать под решением такого уравнения и что означает единственность решения в данном контексте. С этой целью мы можем рассмотреть «дискретный вариант СДУ», для чего выберем последовательность точек t_i (как показано на рис. 4.2)

$$t_0 < t_1 < t_2 < \dots < t_{n-1} < t_n = t \tag{4.3.5}$$

и запишем уравнение в виде

$$x_{i+1} = x_i + a(x_i, t_i)\Delta t_i + b(x_i, t_i)\Delta W_i. \tag{4.3.6}$$

Здесь

$$\left. \begin{aligned} x_i &= x(t_i) \\ \Delta t_i &= t_{i+1} - t_i \\ \Delta W_i &= W(t_{i+1}) - W(t_i). \end{aligned} \right\} \tag{4.3.7}$$

Из (4.3.6) видно, что процесс приближенного решения уравнения состоит в том, чтобы вычислять x_{i+1} , зная x_i , путем прибавления детерминированного члена

$$a(x_i, t_i)\Delta t_i \tag{4.3.8}$$

и стохастического члена

$$b(x_i, t_i)\Delta W_i. \tag{4.3.9}$$

Стохастический член содержит элемент ΔW_i , который является приращением винеровского процесса, но статистически независим от x_i , если, во-первых, значение x_0 само не зависит от всех $W(t) - W(t_0)$

$t > t_0$ (таким образом, если начальные условия полагаются случайными, они должны быть неупреждающими) и, во-вторых, функция $a(x, t)$ есть неупреждающая функция t для любого фиксированного x .

Осуществляя итерацию на основе (4.3.6), мы видим, что x_j всегда не зависит от ΔW_j для $j \geq i$.

Затем, устремляя шаг разбиения к нулю, строят формальное решение. Единственность решения означает, что для данной реализации $\tilde{W}(t)$ случайного винеровского процесса $W(t)$ получаемое частное решение уравнения единственно. Мы говорим, что решение существует, если с вероятностью, равной единице, существует решение для произвольно взятой реализации $\tilde{W}(t)$ винеровского процесса $W(t)$.

Описанный метод построения решения называется методом Коши — Эйлера; он может быть использован для моделирования.

Обычно, однако, существование и единственность доказываются иным путем, хотя можно в принципе продемонстрировать эти свойства и так. Здесь мы не будем доказывать теоремы существования и единственности: читатель может найти доказательства в [4.3]. Условия существования и единственности решения на интервале $[t_0, T]$ суть следующие:

1) условие Липшица: существует K , такое, что

$$|a(x, t) - a(y, t)| + |b(x, t) - b(y, t)| \leq K|x - y| \quad (4.3.10)$$

для всех x, y и t в интервале $[t_0, T]$;

2) условие роста: существует K , такое, что для всех t на интервале $[t_0, T]$

$$|a(x, t)|^2 + |b(x, t)|^2 \leq K^2(1 + |x|^2). \quad (4.3.11)$$

При этих условиях существует единственное неупреждающее решение $x(t)$ на интервале $[t_0, T]$.

На практике почти всякое стохастическое дифференциальное уравнение удовлетворяет условию Липшица, поскольку оно, по сути, является условием гладкости. Условие роста, однако, нередко не выполняется. Это не означает, что решения не существует, это означает скорее, что решение может уйти в бесконечность. Другими словами, значение x может обратиться в бесконечность за конечное время (на практике — за конечное случайное время). Это явление встречается и в обыкновенных дифференциальных уравнениях. Например, уравнение

$$\frac{dx}{dt} = \frac{1}{2} a x^3 \quad (4.3.12)$$

имеет общее решение с начальным условием $x = x_0$ при $t = 0$:

$$x(t) = (-at + 1/x_0^2)^{-1/2}. \quad (4.3.13)$$

Если a положительно, то решение обращается в бесконечность при $x_0 = (at)^{-1/2}$; если же a отрицательно, то решение не уходит в бесконечность. Если условие Липшица не удовлетворяется, то решение не обязательно обратится в бесконечность. Для того чтобы с уверенностью утверждать это, необходимо пользоваться более тонкими критериями устойчивости [4.3].

4.3.2. МАРКОВСКОЕ СВОЙСТВО РЕШЕНИЯ СТОХАСТИЧЕСКОГО ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОГО УРАВНЕНИЯ ИТО

Покажем теперь, что решение стохастического дифференциального уравнения (4.3.4) $x(t)$ есть марковский процесс. Интуитивно это очевидно, поскольку при данном начальном условии $x(t_0)$ дальнейшее движение во времени однозначно (в стохастическом смысле) определено; иначе говоря, $x(t)$ при $t > t_0$ определяется только

- 1) конкретной реализацией процесса $W(t)$ при $t > t_0$;
- 2) значением $x(t_0)$.

Поскольку $x(t)$ есть неупреждающая функция времени, $W(t)$ при $t > t_0$ не зависит от $x(t)$ при $t < t_0$. Таким образом, ход $x(t)$ при $t > t_0$ не зависит от $x(t)$ при $t < t_0$, если $x(t_0)$ известно. Это означает, что $x(t)$ есть марковский процесс. Строгое доказательство приводится в [4.3].

4.3.3. ЗАМЕНА ПЕРЕМЕННЫХ. ФОРМУЛА ИТО

Рассмотрим произвольную функцию $x(t): f[x, (t)]$. Какому стохастическому дифференциальному уравнению она подчиняется? Воспользуемся результатами разд. 4.2.5 и разложим $df[x(t)]$ в ряд с учетом второго порядка по $dW(t)$:

$$\begin{aligned} df[x(t)] &= f[x(t) + dx(t)] - f[x(t)] \\ &= f'[x(t)]dx(t) + \frac{1}{2}f''[x(t)]dx(t)^2 + \dots \\ &= f'[x(t)]\{a[x(t), t]dt + b[x(t), t]dW(t)\} \\ &\quad + \frac{1}{2}f''[x(t)]b[x(t), t]^2[dW(t)]^2 + \dots \end{aligned}$$

Все остальные члены здесь отброшены, поскольку они имеют порядок выше второго. Воспользуемся теперь тем, что $[dW(t)]^2 = dt$, и получим

$$\boxed{df[x(t)] = \{a[x(t), t]f'[x(t)] + \frac{1}{2}b[x(t), t]^2f''[x(t)]\} dt + b[x(t), t]f'[x(t)]dW(t).} \quad (4.3.14)$$

Этот результат известен под названием *формулы Ито*. Как видно, замена переменных производится не по обычным правилам анализа, если только $f[x(t)]$ не является просто линейной функцией $x(t)$.

Функции многих переменных. На практике формула Ито в случае многих переменных становится очень сложной. Простейший путь состоит в том, чтобы применить распространенный на случай многих переменных результат, согласно которому $dW(t)$ есть бесконечно малая величина порядка $(dt)^{1/2}$. Аналогично тому как это было сделано в разд. 4.2.5, мы можем показать, что для n -мерного винеровского процесса $W(t)$

$$dW_i(t)dW_j(t) = \delta_{ij}dt \quad (4.3.15a)$$

$$[dW_i(t)]^{N+2} = 0 \quad (N > 0) \quad (4.3.15б)$$

$$dW_i(t)dt = 0 \quad (4.3.15в)$$

$$dt^{1+N} = 0 \quad (N > 0), \quad (4.3.15г)$$

откуда следует, что $dW_i(t)$ есть бесконечно малая величина порядка $(dt)^{1/2}$. Заметим, однако, что (4.3.15а) является следствием независимости $dW_i(t)$ и $dW_j(t)$. Для того чтобы распространить формулу Ито на функции n -мерного вектора $x(t)$, удовлетворяющего стохастическому дифференциальному уравнению

$$dx = A(x, t)dt + B(x, t)dW(t), \quad (4.3.16)$$

мы просто следуем этой процедуре и приходим к следующему результату:

$$df(x) = \left\{ \sum_i A_i(x, t) \partial_i f(x) + \frac{1}{2} \sum_{i,j} [B(x, t) B^T(x, t)]_{ij} \partial_i \partial_j f(x) \right\} dt + \sum_{i,j} B_{ij}(x, t) \partial_i f(x) dW_j(t). \quad (4.3.17)$$

4.3.4. СВЯЗЬ МЕЖДУ УРАВНЕНИЕМ ФОККЕРА — ПЛАНКА И СТОХАСТИЧЕСКИМ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫМ УРАВНЕНИЕМ

Рассмотрим теперь временной ход произвольной функции $f[x(t)]$. Пользуясь формулой Ито, получим

$$\begin{aligned} \langle df[x(t)] \rangle / dt &= \left\langle \frac{df[x(t)]}{dt} \right\rangle = \frac{d}{dt} \langle f[x(t)] \rangle \\ &= \langle a[x(t), t] \partial_x f + \frac{1}{2} b[x(t), t]^2 \partial_x^2 f \rangle. \end{aligned} \quad (4.3.18)$$

Однако $x(t)$ имеет плотность условной вероятности $p(x, t|x_0, t_0)$ и

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle f[x(t)] \rangle &= \int dx f(x) \partial_t p(x, t|x_0, t_0) \\ &= \int dx [a(x, t) \partial_x f + \frac{1}{2} b(x, t)^2 \partial_x^2 f] p(x, t|x_0, t_0). \end{aligned} \quad (4.3.19)$$

Это выражение имеет вид, аналогичный (3.4.16). При тех же условиях, что и в разд. 3.4.1, мы интегрируем по частям и отбрасываем «поверхностные» члены, получая в результате

$$\int dx f(x) \partial_t p = \int dx f(x) \{ -\partial_x [a(x, t)p] + \frac{1}{2} \partial_x^2 [b(x, t)^2 p] \}.$$

Отсюда, поскольку $f(t)$ — произвольная функция,

$$\partial_t p(x, t|x_0, t_0) = -\partial_x^2 [a(x, t)p(x, t|x_0, t_0)] + \frac{1}{2} \partial_x^2 [b(x, t)^2 p(x, t|x_0, t_0)].$$

(4.3.20)

Мы получили полную аналогию процессу диффузии, характеризуемому коэффициентом сноса $a(x, t)$ и коэффициентом диффузии $b(x, t)^2$.

Полученные результаты полностью сходны с результатами разд. 3.5.3, где было показано, что процесс диффузии может быть локально аппроксимирован уравнением, напоминающим стохастическое дифференциальное уравнение Ито.

4.3.5. СИСТЕМЫ С НЕСКОЛЬКИМИ ПЕРЕМЕННЫМИ

Вообще говоря, системы стохастических дифференциальных уравнений n переменных могут быть записаны в виде

$$dx = A(x, t)dt + \underline{B}(x, t)dW(t), \quad (4.3.21)$$

где $dW(t)$ — винеровский процесс, описываемый n переменными, согласно определению разд. 3.8.1. Распространяя рассуждения, проведенные в разд. 4.3.4, на случай многих переменных, можно показать, что уравнение Фоккера — Планка для плотности условной вероятности $p(x, t|x_0, t_0) \equiv p$ имеет вид

$$\partial_t p = -\sum_i \partial_i [A_i(x, t)p] + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \partial_i \partial_j \{ [\underline{B}(x, t) \underline{B}^T(x, t)]_{ij} p \}. \quad (4.3.22)$$

Заметим, что для всех матриц B , для которых BB^T одинаково, получается одно и то же уравнение Фоккера — Планка. Это значит, что, заменив B на BS , где S — ортогональная матрица ($SS^T = I$), мы получим то же самое уравнение Фоккера — Планка. Отметим, что S

может зависеть от $x(t)$. Это можно показать более наглядно. Пусть S есть ортогональная матрица с произвольной *неупреждающей* зависимостью от t . Определим

$$dV(t) = \underline{S}(t)dW(t). \quad (4.3.23)$$

Вектор $dV(t)$ является линейной комбинацией гауссовских переменных $dW(t)$ с коэффициентами $S(t)$, которые не зависят от $dW(t)$, поскольку $S(t)$ неупреждающая. Таким образом, для всякого фиксированного значения $S(t)$, $dV(t)$ являются гауссовскими, а их корреляционная матрица есть

$$\begin{aligned} \langle dV_i(t)dV_j(t) \rangle &= \sum_{l,m} S_{il}(t)S_{jm}(t)\langle dW_l(t)dW_m(t) \rangle \\ &= \sum_l S_{il}(t)S_{jl}(t)dt = \delta_{ij}dt, \end{aligned} \quad (4.3.24)$$

поскольку $S(t)$ ортогональна. Следовательно, все моменты не зависят от $S(t)$ и являются теми же самыми, что и моменты $dW(t)$. Поэтому $dV(t)$ гауссовская и имеет ту же корреляционную матрицу, что и $dW(t)$. Наконец, средние значения в различные моменты времени могут быть представлены в виде произведения; например, при $t > t'$ в

$$\sum_{i,k} \langle [dW_i(t)S_{ij}(t)]^m [dW_k(t')S_{ki}(t')]^n \rangle \quad (4.3.25)$$

мы можем вынести средние значения различных степеней $dW_i(t)$, поскольку $dW_i(t)$ не зависит от всех прочих членов. Оценивая их, мы находим, что благодаря ортогональности $S(t)$ усреднение по $dW_i(t)$ даст просто

$$\sum_k \langle [dW_j(t)]^m \rangle \langle [dW_k(t')S_{ki}(t')]^n \rangle, \quad (4.3.26)$$

откуда аналогично получаем $\langle [dW_j(t)]^m [dW_i(t')]^n \rangle$. Следовательно, $dV(t)$ также являются приращениями винеровского процесса. Ортогональное преобразование просто перемешивает различные реализации процесса, не меняя его стохастический характер.

Отсюда следует, что вместо (4.3.21) мы можем записать

$$dx = A(x, t)dt + \underline{B}(x, t)\underline{S}^T(t)\underline{S}(t)dW(t) \quad (4.3.27)$$

$$= A(x, t)dt + \underline{B}(x, t)\underline{S}^T(t)dV(t), \quad (4.3.28)$$

а поскольку $V(t)$ представляет собой просто винеровский процесс, это уравнение эквивалентно равенству

$$dx = A(x, t)dt + \underline{B}(x, t)\underline{S}^T(t)dW(t), \quad (4.3.29)$$

которому соответствует в точности то же самое уравнение Фоккера — Планка (4.3.22).

Некоторые примеры, в которых этот результат играет важную роль, будут рассмотрены в разд. 4.4.6.

4.3.6. СТОХАСТИЧЕСКОЕ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОЕ УРАВНЕНИЕ СТРАТОНОВИЧА

Стратонович [4.2] определил стохастический интеграл от выражения, являющегося функцией $x(t)$ и t , как

$$S \int_{t_0}^t G[x(t'), t'] dW(t') = \text{ms-lim}_{n \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^n G \left\{ \frac{x(t_i) + x(t_{i-1})}{2}, t_{i-1} \right\} [W(t_i) - W(t_{i-1})]. \quad (4.3.30)$$

Отметим, что усредняется только зависимость от $x(t)$. Если $G(z, t)$ дифференцируема по t , интеграл не зависит от конкретного выбора значения t на интервале $[t_{i-1}, t_i]$.

Стохастическое дифференциальное уравнение можно записать с использованием интеграла Стратоновича:

$$x(t) = x(t_0) + \int_{t_0}^t dt' \alpha[x(t'), t'] + S \int_{t_0}^t dW(t') \beta[x(t'), t'], \quad (4.3.31)$$

Мы покажем, что оно эквивалентно соответствующему СДУ Ито.

Пусть $x(t)$ является решением уравнения

$$dx(t) = a[x(t), t]dt + b[x(t), t]dW(t) \quad (4.3.32)$$

Полагая, что в обоих случаях $x(t)$ есть одна и та же функция, вычислим коэффициенты α и β . Вначале установим связь между

$$S \int_{t_0}^t dW(t') \beta[x(t'), t'] \text{ и } \int_{t_0}^t dW(t') b[x(t'), t']. \text{ Имеем}$$

$$S \int_{t_0}^t dW(t') \beta[x(t'), t'] \simeq \sum_i \beta \left[\frac{x(t_i) + x(t_{i-1})}{2}, t_{i-1} \right] [W(t_i) - W(t_{i-1})]. \quad (4.3.33)$$

В (4.3.33) запишем

$$x(t_i) = x(t_{i-1}) + dx(t_{i-1})$$

и воспользуемся СДУ Ито (4.3.32), чтобы записать

$$dx(t_i) = a[x(t_{i-1}), t_{i-1}](t_i - t_{i-1}) + b[x(t_{i-1}), t_{i-1}][W(t_i) - W(t_{i-1})]. \quad (4.3.34)$$

Тогда, применяя формулу Ито, получим

$$\begin{aligned} \beta \left[\frac{x(t_i) + x(t_{i-1})}{2}, t_{i-1} \right] &= \beta[x(t_{i-1}) + \frac{1}{2} dx(t_{i-1}), t_{i-1}] = \beta(t_{i-1}) + \\ &+ \frac{1}{2} a(t_{i-1}) \partial_x \beta(t_{i-1})(t_i - t_{i-1}) + \frac{1}{8} b^2(t_{i-1}) \partial_x^2 \beta(t_{i-1}) [W(t_i) - W(t_{i-1})]^2 + \\ &+ \frac{1}{2} b(t_{i-1}) \partial_x \beta(t_{i-1}) [W(t_i) - W(t_{i-1})] \end{aligned} \quad (4.3.35)$$

(для краткости везде, где это возможно, мы пишем $\beta(t_i)$ вместо $\beta[x(t_i), t_i]$ и т. п.). Подставляя все эти выражения в исходное уравнение (4.3.32), отбрасывая, как обычно, dt^2 и $dt dW$ и полагая $dW^2 = dt$, получаем

$$S \int = \sum_i \beta(t_{i-1}) \{W(t_i) - W(t_{i-1})\} + \frac{1}{2} \sum_i b(t_{i-1}) \partial_x \beta(t_{i-1}) (t_i - t_{i-1}). \quad (4.3.36)$$

Следовательно,

$$S \int_{t_0}^t \beta[x(t'), t'] dW(t') = \int_{t_0}^t \beta[x(t'), t'] dW(t') + \frac{1}{2} \int_{t_0}^t b[x(t'), t'] \partial_x \beta[x(t'), t'] dt'. \quad (4.3.37)$$

Эта формула устанавливает связь между интегралом Ито и интегралом Стратоновича от функции $\beta[x(t'), t']$, где $x(t')$ есть решение СДУ Ито (4.3.31). Она не дает связи между интегралами Ито и Стратоновича от произвольных случайных функций.

Если теперь выбрать

$$\begin{aligned} \alpha(x, t) &= a(x, t) - \frac{1}{2} b(x, t) \partial_x b(x, t) \\ \beta(x, t) &= b(x, t), \end{aligned} \quad (4.3.38)$$

то мы увидим, что

$$\text{СДУ Ито} \quad dx = a dt + b dW(t) \quad (4.3.39a)$$

$$\begin{aligned} \text{соответствует СДУ} \\ \text{Стратоновича} \quad dx = [a - \frac{1}{2} b \partial_x b] dt + b dW(t) \end{aligned} \quad (4.3.39b)$$

$$\begin{aligned} \text{или, наоборот, СДУ} \quad dx = \alpha dt + \beta dW(t) \\ \text{Стратоновича} \end{aligned} \quad (4.3.40a)$$

$$\text{соответствует СДУ Ито} \quad dx = [\alpha + \frac{1}{2} \beta \partial_x \beta] dt + \beta dW(t). \quad (4.3.40b)$$

Замечания

1) Пользуясь формулой Ито (4.3.14), мы можем показать, что правило замены переменных в СДУ Стратоновича в точности такое же, как и в обычном анализе. Возьмем СДУ Стратоновича (4.3.40а) и преобразуем его в СДУ Ито (4.3.40б). Перейдем к новой переменной $y = f(x)$, которой соответствует обратная функция $x = g(y)$.

По определению

$$\bar{\alpha}(y) = \alpha[g(y)]$$

$$\bar{\beta}(y) = \beta[g(y)].$$

Пользуясь формулой Ито и замечая, что $df/dx = (dg/dy)^{-1}$, получаем СДУ Ито

$$dy = \left[\bar{\alpha} \left(\frac{dg}{dy} \right)^{-1} + \frac{1}{2} \bar{\beta} \partial_y \bar{\beta} \left(\frac{dg}{dy} \right)^{-2} - \frac{1}{2} \frac{d^2g}{dy^2} \left(\frac{dg}{dy} \right)^{-3} \bar{\beta}^2 \right] dt + \left(\frac{dg}{dy} \right)^{-1} \bar{\beta} dW.$$

Возвращаясь теперь к уравнению Стратоновича по формуле (4.3.39), получаем

$$dy = (\bar{\alpha} dt + \bar{\beta} dW) \left(\frac{dg}{dy} \right)^{-1},$$

или

$$df[x(t)] = \{ \alpha[x(t), t] dt + \beta[x(t), t] dW(t) \} f'[x(t)] \tag{4.3.41}$$

в полном соответствии с правилом замены переменных в обычном анализе.

2) *Случай многих переменных.* Если уравнение Ито для случая многих переменных имеет вид

$$dx = A(x, t)dt + \underline{B}(x, t)dW(t), \tag{4.3.42}$$

то соответствующее ему уравнение Стратоновича может быть получено путем замены

$$A_i^s = A_i - \frac{1}{2} \sum_{j,k} B_{kj} \partial_k B_{ij} \tag{4.3.43a}$$

$$B_{ij}^s = B_{ij}. \tag{4.3.43б}$$

3) *Уравнение Фоккера — Планка*, соответствующее СДУ Стратоновича

$$(S) dx = A^s(x, t)dt + \underline{B}^s(x, t)dW(t), \tag{4.3.44}$$

с использованием (4.3.43) и известной связи между СДУ Ито и уравнением Фоккера — Планка (разд. 4.3.5) может быть представлено в

виде

$$\partial_i p = -\sum_i \partial_i \{A_i^s p\} + \frac{1}{2} \sum_{i,j,k} \partial_i \{B_{ik}^s \partial_j [B_{jk}^s p]\}. \quad (4.3.45)$$

(4.3.45) часто называют уравнением Фоккера — Планка в форме Стратоновича. В отличие от двух вариантов СДУ два уравнения Фоккера — Планка, хотя и имеют различный вид, подчиняются, естественно, правилам обычного анализа. Позднее мы увидим, что уравнение Фоккера — Планка в форме Стратоновича в ряде ситуаций появляется весьма естественным образом (разд. 6.6).

4) *Сравнение интегралов Ито и Стратоновича.* Интеграл Стратоновича, определенный согласно (4.3.30), представляет собой весьма специальный объект, поскольку, в его определении используется функция двух переменных $G(z, t)$. Более «естественное» определение посредством $G(x \left[\frac{1}{2}(t_i + t_{i-1}) \right], \frac{1}{2}(t_i + t_{i-1}))$ не было приведено Стратоновичем в его оригинальной работе, хотя в литературе (включая и 1-е издание этой книги) можно встретить определения интеграла Стратоновича с помощью этого выражения. По-видимому, сходимость такого интеграла не может быть доказана (см. [4.6]). На практике строгое определение интеграла Стратоновича «из первых принципов» не представляет большого интереса, в то время как возможность осуществлять замену переменных по правилам обычного анализа имеет огромную важность. Последнее обеспечивается не столько самим определением, сколько соотношениями (4.3.37, 43) между двумя типами интеграла. Можно попросту определить интеграл Стратоновича формулой (4.3.37), потребовав, чтобы функция удовлетворяла СДУ (4.3.31). С точки зрения математики это вполне приемлемо и сильно упрощает дело.

4.3.7. ЗАВИСИМОСТЬ РЕШЕНИЙ ОТ НАЧАЛЬНЫХ УСЛОВИЙ И ПАРАМЕТРОВ

Точно так же, как и в случае детерминистических дифференциальных уравнений, решение стохастического дифференциального уравнения, в которое входят функции, непрерывным образом зависящие от некоторых параметров, также будет, как правило, непрерывным образом за-

висеть от этих параметров. Аналогично решение непрерывным образом зависит от начальных условий. Попробуем сформулировать это более точно. Рассмотрим уравнение для одной переменной

$$\left. \begin{aligned} dx &= a(\lambda, x, t)dt + b(\lambda, x, t)dW(t) \\ \text{с начальным условием} \\ x(t_0) &= c(\lambda) \end{aligned} \right\}, \tag{4.3.49}$$

где λ — параметр. Пусть $x(\lambda, t)$ есть решение (4.3.49). Пусть

- 1) $\text{st-lim}_{\lambda \rightarrow \lambda_0} c(\lambda) = c(\lambda_0)$;
- 2) $\lim_{\lambda \rightarrow \lambda_0} \{ \sup_{t \in [t_0, T]} \sup_{|x| \leq N} [|a(\lambda, x, t) - a(\lambda_0, x, t)| + |b(\lambda, x, t) - b(\lambda_0, x, t)|] \} = 0$;
- 3) существует K , не зависящее от λ , такое, что

$$|a(\lambda, x, t)|^2 + |b(\lambda, x, t)|^2 \leq K^2(1 + |x|^2).$$

Тогда

$$\text{st-lim}_{\lambda \rightarrow \lambda_0} \{ \sup_{t \in [t_0, T]} |x(\lambda, t) - x(\lambda_0, t)| \} = 0. \tag{4.3.50}$$

Доказательство можно найти в [4.1].

Замечания

1) Напомним, что по определению предела по вероятности предельный переход (4.3.50) означает, что при $\lambda \rightarrow \lambda_0$ вероятность того, что максимальное отклонение на любом конечном интервале $[t_0, T]$ между $x(\lambda, t)$ и $x(\lambda_0, t)$ больше некоторой положительной величины, стремится к нулю.

2) Зависимость от начальных условий достигается за счет того, что a и b полагаются не зависящими от λ .

3) Полученный результат будет очень полезен для обоснования разложений в теории возмущений.

4) Условие 2 записано в наиболее естественном виде для случая, когда функции $a(x, t)$ и $b(x, t)$ сами не являются стохастическими. Часто,

однако, $a(x, t)$ и $b(x, t)$ представляют собой стохастические (неупреждающие) функции. В этом случае условие 2 должно быть сформулировано в вероятностном смысле. Для этого достаточно заменить $\lim_{\lambda \rightarrow \lambda_0}$ на $\text{st-lim}_{\lambda \rightarrow \lambda_0}$.

4.4. ПРИМЕРЫ И РЕШЕНИЯ

4.4.1. КОЭФФИЦИЕНТЫ, НЕ ЗАВИСЯЩИЕ ОТ x

Простое уравнение

$$dx = a(t)dt + b(t)dW(t), \quad (4.4.1)$$

где $a(t)$ и $b(t)$ суть неслучайные функции времени, решается простым интегрированием

$$x(t) = x_0 + \int_{t_0}^t a(t)dt + \int_{t_0}^t b(t)dW(t). \quad (4.4.2)$$

Здесь x_0 может быть либо неслучайным начальным условием, либо случайным, но не зависящим от $W(t) - W(t_0)$ при $t > t_0$; в противном случае $x(t)$ не будет неупреждающей.

В таком виде функция $x(t)$ гауссовская при условии, что x_0 либо неслучайное, либо само по себе гауссовское, поскольку

$$\int_{t_0}^t b(t)dW(t)$$

есть просто линейная комбинация бесконечно малых гауссовских переменных. Далее,

$$\langle x(t) \rangle = \langle x_0 \rangle + \int_{t_0}^t a(t)dt$$

(поскольку среднее значение интеграла Ито обращается в нуль) и

$$\begin{aligned} \langle [x(t) - \langle x(t) \rangle][x(s) - \langle x(s) \rangle] \rangle &\equiv \langle x(t), x(s) \rangle \\ &= \left\langle \int_{t_0}^t b(t')dW(t') \int_{t_0}^s b(s')dW(s') \right\rangle = \int_{t_0}^{\min(t, s)} [b(t')]^2 dt'. \end{aligned}$$

Здесь мы воспользовались результатом (4.2.42), в котором, однако,

$$G(t') = \begin{cases} b(t') & t' < t \\ 0 & t' \geq t \end{cases}$$

$$H(t') = \begin{cases} b(t') & t' < s \\ 0 & t' \geq s \end{cases}$$

Таким образом, процесс полностью определен.

4.4.2. МУЛЬТИПЛИКАТИВНЫЙ ЛИНЕЙНЫЙ БЕЛЫЙ ШУМ

Уравнение

$$dx = cx dW(t) \tag{4.4.3}$$

называется мультипликативным белым шумом, поскольку оно линейно по x , но «шумовой член» $dW(t)$ входит в него в качестве сомножителя. Точное решение этого уравнения может быть получено с помощью формулы Ито. Введем новую переменную

$$y = \log x \tag{4.4.4}$$

и получим

$$\begin{aligned} dy &= \frac{1}{x} dx - \frac{1}{2x^2} (dx)^2 \\ &= c dW(t) - \frac{1}{2}c^2 dt. \end{aligned} \tag{4.4.5}$$

Это уравнение можно непосредственно проинтегрировать:

$$y(t) = y(t_0) + c[W(t) - W(t_0)] - \frac{1}{2}c^2(t - t_0), \tag{4.4.6}$$

откуда

$$x(t) = x(t_0) \exp \{c[W(t) - W(t_0)] - \frac{1}{2}c^2(t - t_0)\}. \tag{4.4.7}$$

Среднее значение можно рассчитать с помощью известной формулы для любой гауссовской переменной z с нулевым средним значением:

$$\langle \exp z \rangle = \exp (\langle z^2 \rangle / 2) \quad , \quad \text{так что} \tag{4.4.8}$$

$$\begin{aligned} \langle x(t) \rangle &= \langle x(t_0) \rangle \exp [\frac{1}{2}c^2(t - t_0) - \frac{1}{2}c^2(t - t_0)] \\ &= \langle x(t_0) \rangle. \end{aligned} \tag{4.4.9}$$

Этот результат также с очевидностью следует из определения, поскольку

$$\langle dx \rangle = \langle cx dW(t) \rangle = 0, \text{ так что}$$

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = 0.$$

Мы можем также вычислить автокорреляционную функцию

$$\begin{aligned} \langle x(t)x(s) \rangle &= \langle x(t_0)^2 \rangle \langle \exp \{ c[W(t) + W(s) - 2W(t_0)] - \frac{1}{2}c^2(t + s - 2t_0) \} \rangle \\ &= \langle x(t_0)^2 \rangle \exp \{ \frac{1}{2}c^2[\langle [W(t) + W(s) - 2W(t_0)]^2 \rangle - (t + s - 2t_0)] \} \\ &= \langle x(t_0)^2 \rangle \exp \{ \frac{1}{2}c^2[t + s - 2t_0 + 2\min(t, s) - (t + s - 2t_0)] \} \\ &= \langle x(t_0)^2 \rangle \exp [c^2 \min(t - t_0, s - t_0)]. \end{aligned} \quad (4.4.10)$$

Интерпретация Стратоновича. Можно получить решение этого уравнения и в том случае, если интерпретировать его в смысле Стратоновича; в этом случае можно использовать обычные методы анализа. Тогда вместо (4.4.5) мы получим

$$dy = c dW(t),$$

откуда

$$x(t) = x(t_0) \exp \{ c[W(t) - W(t_0)] \}. \quad (4.4.11)$$

В таком случае

$$\langle x(t) \rangle = \langle x(t_0) \rangle \exp [\frac{1}{2}c^2(t - t_0)] \quad (4.4.12)$$

$$\langle x(t)x(s) \rangle = \langle x(t_0)^2 \rangle \exp \{ \frac{1}{2}c^2[t + s - 2t_0 + 2\min(t - t_0, s - t_0)] \}. \quad (4.4.13)$$

Отчетливо видна разница между двумя полученными результатами.

4.4.3. КОМПЛЕКСНЫЙ ОСЦИЛЛЯТОР С ШУМЯЩЕЙ ЧАСТОТОЙ

Этот пример представляет собой упрощенный вариант модели, предложенной Кубо [4.4], и является некоторым обобщением предыдущего примера на случай комплексной переменной. Рассмотрим уравнение

$$\frac{dz}{dt} = i[\omega + \sqrt{2\gamma} \xi(t)]z, \quad (4.4.14)$$

которое формально описывает простую модель осциллятора со средней частотой ω , возмущаемой шумовым членом $\xi(t)$.

С физической точки зрения этот процесс удобнее всего моделировать уравнением Стратоновича

$$(S) \quad dz = i[\omega dt + \sqrt{2\gamma} dW(t)]z, \quad (4.4.15)$$

эквивалентным уравнению Ито (см. разд. 4.3.6)

$$dz = [(i\omega - \gamma)dt + i\sqrt{2\gamma} dW(t)]z. \quad (4.4.16)$$

Беря среднее значение, мы сразу же получаем

$$\frac{d\langle z \rangle}{dt} = (i\omega - \gamma)\langle z \rangle \quad (4.4.17)$$

с *затухающим* осциллирующим решением

$$\langle z(t) \rangle = \exp[(i\omega - \gamma)t]\langle z(0) \rangle. \quad (4.4.18)$$

В разд. 6.6 мы подробно покажем, почему модель Стратоновича здесь более удобна. Достаточно, по-видимому, обратить внимание на тот факт, что на практике $\xi(t)$ будет более гладкой функцией, чем белый шум, и поэтому, как и в случае модели Стратоновича, обычные методы анализа будут применимы.

В данном случае корреляционная функция, полученная из решения исходного уравнения Стратоновича, имеет вид

$$\langle z(t)z(s) \rangle = \langle z(0)^2 \rangle \exp[(i\omega - \gamma)(t + s) - 2\gamma \min(t, s)]. \quad (4.4.19)$$

В пределе $t, s \rightarrow \infty$, где $t + \tau = s$,

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \langle z(t + \tau)z(t) \rangle = 0. \quad (4.4.20)$$

Физический интерес, однако, представляет комплексная корреляционная функция

$$\begin{aligned} \langle z(t)z^*(s) \rangle &= \langle |z(0)|^2 \rangle \langle \exp\{i\omega(t - s) + i\sqrt{2\gamma}[W(t) - W(s)]\} \rangle \\ &= \langle |z(0)|^2 \rangle \exp\{i\omega(t - s) - \gamma[t + s - 2\min(t, s)]\} \\ &= \langle |z(0)|^2 \rangle \exp[i\omega(t - s) - \gamma|t - s|]. \end{aligned} \quad (4.4.21)$$

Таким образом, в комплексную корреляционную функцию входит член, описывающий затухание, полностью обусловленный шумом. Этот эффект можно рассматривать как расфазировку, обусловленную наличием шума, из-за которой при большой разнице во времени $z(t)$ и $z^*(t)$ становятся не зависящими друг от друга.

Эта модель комплексного осциллятора не позволяет, как показал ван Кампен [4.5], описывать реальный осциллятор. Однако она вполне пригодна для того, чтобы качественно представить себе поведение осцилляторов с шумящей частотой.

4.4.4. ПРОЦЕСС ОРНШТЕЙНА — УЛЕНБЕКА

На основании уравнения Фоккера — Планка для процесса Орнштейна — Уленбека (разд. 3.8.4) мы можем сразу же записать СДУ, воспользовавшись результатом разд. 4.3.4:

$$dx = -kx dt + \sqrt{D} dW(t), \quad (4.4.22)$$

и решить его непосредственно. Заменяя

$$y = x e^{kt}, \quad (4.4.23)$$

получаем

$$\begin{aligned} dy &= (dx)d(e^{kt}) + (dx)e^{kt} + xd(e^{kt}) \\ &= [-kx dt + \sqrt{D} dW(t)]k e^{kt} dt \\ &\quad + [-kx dt + \sqrt{D} dW(t)]e^{kt} + kx e^{kt} dt. \end{aligned} \quad (4.4.24)$$

Первое произведение обращается в нуль, поскольку в него входят только dt^2 и $dW(t)dt$ (можно показать, что так будет всегда, когда мы умножаем x на детерминированную функцию времени). Тогда

$$dy = \sqrt{D} e^{kt} dW(t). \quad (4.4.25)$$

Интегрируя и возвращаясь к переменной x , получаем

$$x(t) = x(0)e^{-kt} + \sqrt{D} \int_0^t e^{-k(t-t')} dW(t'). \quad (4.4.26)$$

Если начальное условие представляет собой нормально распределенную или детерминированную функцию, то $x(t)$ является, очевидно, гауссовской, среднее значение и дисперсия которой даются выражениями

$$\langle x(t) \rangle = \langle x(0) \rangle e^{-kt} \quad (4.4.27)$$

$$D \{x(t)\} = \langle \{ [x(0) - \langle x(0) \rangle] e^{-kt} + \sqrt{D} \int_0^t e^{-k(t-t')} dW(t') \}^2 \rangle. \quad (4.4.28)$$

Считая начальное условие неупреждающим, т. е. не зависящим от $dW(t)$ для $t > 0$, мы можем записать, используя результат разд. 4.2.6е,

$$\begin{aligned} D\{x(t)\} &= D\{x(0)\} e^{-2kt} + D \int_0^t e^{-2k(t-t')} dt' \\ &= \{\text{var}\{x(0)\} - D/2k\} e^{-2kt} + D/2k. \end{aligned} \quad (4.4.29)$$

Эти равенства совпадают с теми, что были получены в разд. 3.8.4 путем непосредственного решения уравнения Фоккера — Планка и, кроме того, они обобщены на случай неупреждающего случайного начального условия. В дополнение к тому факту, что решение представляет собой гауссовскую переменную, мы также получили верную условную вероятность.

Временную корреляционную функцию также можно вычислить непосредственно; она имеет вид

$$\begin{aligned} \langle x(t), x(s) \rangle &= D\{x(0)\} e^{-k(t+s)} + D \left\langle \int_0^t e^{-k(t-t')} dW(t') \int_0^s e^{-k(s-s')} dW(s') \right\rangle \\ &= D\{x(0)\} e^{-k(t+s)} + D \int_0^{\min(t,s)} e^{-k(t+s-2t')} dt' \\ &= \left[D\{x(0)\} - \frac{D}{2k} \right] e^{-k(t+s)} + \frac{D}{2k} e^{-k|t-s|}. \end{aligned} \quad (4.4.30)$$

Заметим, что если $k > 0$, то при $t, s \rightarrow \infty$ при конечной разности $|t - s|$ корреляционная функция становится стационарной и принимает вид, приведенный в разд. 3.8.4.

Действительно, если за начальный момент принять не 0, а $-\infty$, то решение (4.4.26) принимает вид

$$x(t) = \sqrt{D} \int_{-\infty}^t e^{-k(t-t')} dW(t'), \quad (4.4.31)$$

где корреляционная функция и среднее значение, очевидно, принимают свои стационарные значения. Поскольку процесс гауссовский, он стационарен.

4.4.5. ПЕРЕХОД ОТ ДЕКАРТОВЫХ КООРДИНАТ К ПОЛЯРНЫМ

Для описания оптического поля нередко используется модель, представляющая собой пару процессов Орнштейна — Уленбека, один из которых представляет действительную, а другой — мнимую компо-

ненту электрического поля:

$$\begin{aligned} dE_1(t) &= -\gamma E_1(t) dt + \varepsilon dW_1(t) \\ dE_2(t) &= -\gamma E_2(t) dt + \varepsilon dW_2(t). \end{aligned} \quad (4.4.32)$$

Нас интересует переход к полярным координатам. Положим

$$\begin{aligned} E_1(t) &= a(t) \cos \phi(t) \\ E_2(t) &= a(t) \sin \phi(t) \end{aligned} \quad (4.4.33)$$

и для простоты определим также

$$\mu(t) = \log a(t), \quad (4.4.34)$$

так что

$$\mu(t) + i\phi(t) = \log [E_1(t) + iE_2(t)]. \quad (4.4.35)$$

Пользуясь методом Ито, получаем

$$\begin{aligned} d(\mu + i\phi) &= \frac{d(E_1 + iE_2)}{E_1 + iE_2} - \frac{1}{2} \frac{[d(E_1 + iE_2)]^2}{(E_1 + iE_2)^2} \\ &= -\frac{\gamma(E_1 + iE_2)}{E_1 + iE_2} dt + \frac{\varepsilon[dW_1(t) + i dW_2(t)]}{(E_1 + iE_2)} \\ &\quad - \frac{1}{2} \frac{\varepsilon^2[dW_1(t) + i dW_2(t)]^2}{(E_1 + iE_2)^2} \end{aligned} \quad (4.4.36)$$

Поскольку $dW_1(t)dW_2(t) = 0$, $dW_1(t)^2 = dW_2(t)^2 = dt$, последний член обращается в нуль, и

$$d[\mu(t) + i\phi(t)] = -\gamma dt + \varepsilon \exp[-\mu(t) - i\phi(t)] \{dW_1(t) + i dW_2(t)\}. \quad (4.4.37)$$

Возьмем теперь действительную часть, подставим $a(t) = \exp[\mu(t)]$ и, пользуясь методом Ито, найдем

$$da(t) = \{-\gamma a(t) + \frac{1}{2} \varepsilon^2/a(t)\} dt + \varepsilon \{dW_1(t) \cos \phi(t) + dW_2(t) \sin \phi(t)\}. \quad (4.4.38)$$

Мнимая часть дает нам

$$d\phi(t) = [\varepsilon/a(t)] [-dW_1(t) \sin \phi(t) + dW_2(t) \cos \phi(t)]. \quad (4.4.39)$$

Определим теперь

$$\left. \begin{aligned} dW_a(t) &= dW_1(t) \cos \phi(t) + dW_2(t) \sin \phi(t) \\ dW_\phi(t) &= -dW_1(t) \sin \phi(t) + dW_2(t) \cos \phi(t). \end{aligned} \right\} \quad (4.4.40)$$

Заметим, что это — ортогональные преобразования того типа, о котором упоминалось в разд. 4.3.5, так что мы можем считать $dW_a(t)$ и $dW_\phi(t)$ приращениями независимых винеровских процессов $W_a(t)$ и $W_\phi(t)$.

Таким образом, стохастические дифференциальные уравнения для фазы и амплитуды имеют вид

$$d\phi(t) = [\varepsilon/a(t)]dW_\phi(t), \tag{4.4.41a}$$

$$da(t) = [-\gamma a(t) + \frac{1}{2}\varepsilon^2/a(t)]dt + \varepsilon dW_a(t). \tag{4.4.41b}$$

Замечание. Пользуясь правилами, изложенными в разд. 4.3.6(2), можно преобразовать как уравнение в декартовых координатах (4.4.32), так и уравнения в полярных координатах (4.4.41) к форме Стратоновича; при этом оказывается, что они имеют в точности тот же вид, что и уравнения Ито. Тем не менее прямое преобразование с использованием обычных методов анализа невозможно. Идя этим путем, мы получали бы те же результаты вплоть до (4.4.38), где недосчитались бы члена $\left[\frac{1}{2}\varepsilon^2/a(t)\right]dt$. В связи с этим пришлось бы ввести до-

полнительный член¹⁾, который обусловлен тем, что в формулировке Стратоновича приращения $dW_i(t)$ коррелированы с $\phi(t)$, и поэтому $dW_a(t)$ и $dW_\phi(t)$ не могут быть просто определены выражениями (4.4.40). Здесь мы ясно видим преимущество метода Ито, в котором сохраняется статистическая независимость $dW(t)$ и переменных, определяемых в момент времени t .

К сожалению, уравнения в полярных координатах, в отличие от уравнений в декартовых координатах, не позволяют получить явное решение. Однако их удобно использовать при описании процессов в лазерах: в уравнения лазера в (4.4.41б) входит только еще дополнительный член, пропорциональный $a(t)^2 dt$.

4.4.6. ПРОЦЕСС ОРНШТЕЙНА — УЛЕНБЕКА ДЛЯ СЛУЧАЯ МНОГИХ ПЕРЕМЕННЫХ

Этот процесс определяется СДУ:

$$dx(t) = -Ax(t)dt + B dW(t), \tag{4.4.42}$$

¹⁾ В S-варианте этот член появляется при усреднении S-уравнений

$$da = -\gamma a dt + \varepsilon[\cos\varphi \cdot dW_1 + \sin\varphi \cdot dW_2],$$

$$d\varphi = (\varepsilon/a)[-\sin\varphi \cdot dW_1 + \cos\varphi \cdot dW_2] \quad (A_1^S(a) = -\gamma a)$$

с применением формулы (4.3.43а). После выделения среднего в (4.4.40) dW_i и φ можно уже считать некоррелированными. В итоге также придем к (4.4.41). — *Прим. ред.*

(где A и B — постоянные матрицы), решение которого легко получить (ср. разд. 4.4.4):

$$\mathbf{x}(t) = \exp(-At)\mathbf{x}(0) + \int_0^t \exp[-A(t-t')]B dW(t'). \quad (4.4.43)$$

Среднее значение дается выражением

$$\langle \mathbf{x}(t) \rangle = \exp(-At)\langle \mathbf{x}(0) \rangle. \quad (4.4.44)$$

Корреляционная функция имеет вид

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x}(t), \mathbf{x}^T(s) \rangle &\equiv \langle [\mathbf{x}(t) - \langle \mathbf{x}(t) \rangle][\mathbf{x}(s) - \langle \mathbf{x}(s) \rangle]^T \rangle \\ &= \exp(-At)\langle \mathbf{x}(0), \mathbf{x}^T(0) \rangle \exp(-As) \\ &\quad + \int_0^{\min(t,s)} \exp[-A(t-t')]BB^T \exp[-A^T(s-t')]dt'. \end{aligned} \quad (4.4.45)$$

Для некоторых частных случаев интеграл может быть вычислен в явном виде¹⁾; в задачах с не слишком высокой размерностью можно непосредственно перемножить все матрицы под интегралом. Ниже мы положим $\langle \mathbf{x}(0), \mathbf{x}^T(0) \rangle = \mathbf{0}$, что соответствует детерминированному начальному условию, и рассмотрим несколько частных случаев.

а) Пусть $AA^T = A^T A$

Тогда найдется унитарная матрица S , такая, что

$$SS^+ = 1$$

$$SAS^+ = SA^T S^+ = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n). \quad (4.4.46)$$

¹⁾ Интеграл в (4.4.45) может быть вычислен в общем случае следующим образом. Для определенности положим $t > s$ и введем символ N упорядочения операторов, обозначающий, что A занимает крайнее левое положение, а A^T — крайнее правое. Тогда этот интеграл можно записать

$$J = N \int_0^s dt' \exp[-At - A^T s + (A + A^T)t'] BB^T.$$

Производя обычное интегрирование под знаком N , получаем

$$J = N \{ [\exp(-A(t-s)) - \exp(-At - A^T s)](A + A^T)^{-1} BB^T \}$$

или

$$J = \exp[-A(t-s)]\rho - \exp(-At)\rho \exp(-A^T s),$$

где $\rho = N[(A + A^T)^{-1} BB^T]$, т. е. $N[(A + A^T)^{-1} BB^T - \rho] = 0$ и

$$N[(A + A^T)^{-1} [BB^T - (A + A^T)\rho]] = 0.$$

Складывая последнее равенство, умноженное слева на A , с этим же равенством, умноженным справа на A^T , отсюда имеем $BB^T = N[(A + A^T)\rho] = A\rho + \rho A^T$. Поэтому в силу (4.4.51) ρ совпадает с σ . — *Прим. ред.*

Допустим для простоты, что $t \geq s$. Тогда

$$\langle \mathbf{x}(t), \mathbf{x}^T(s) \rangle = S^+ G(t, s) S,$$

где

$$[G(t, s)]_{ij} = \frac{(BB^T)_{ij}}{\lambda_i + \lambda_j} [\exp(-\lambda_i |t - s|) - \exp(-\lambda_i t - \lambda_j s)]. \quad (4.4.47)$$

б) Дисперсия в стационарном решении

Если A имеет только собственные значения с положительной действительной частью, то существует стационарное решение вида

$$\mathbf{x}_s(t) = \int_{-\infty}^t \exp[-A(t - t')] B dW(t'). \quad (4.4.48)$$

Разумеется,

$$\langle \mathbf{x}_s(t) \rangle = 0$$

и

$$\langle \mathbf{x}_s(t), \mathbf{x}_s^T(s) \rangle = \int_{-\infty}^{\min(t, s)} \exp[-A(t - t')] BB^T \exp[-A^T(s - t')] dt'. \quad (4.4.49)$$

Определим стационарную корреляционную матрицу σ как

$$\sigma = \langle \mathbf{x}_s(t), \mathbf{x}_s^T(t) \rangle. \quad (4.4.50)$$

Тогда для

$$\begin{aligned} A\sigma + \sigma A^T &= \int_{-\infty}^t A \exp[-A(t - t')] BB^T \exp[-A^T(t - t')] dt' \\ &\quad + \int_{-\infty}^t \exp[-A(t - t')] BB^T \exp[-A^T(t - t')] A^T dt' \\ &= \int_{-\infty}^t \frac{d}{dt'} \{ \exp[-A(t - t')] BB^T \exp[-A(t - t')] \} dt' \end{aligned}$$

эту величину можно оценить алгебраически. Вычисляя этот интеграл, мы видим, что нижний предел исчезает в силу сделанного предположения о собственных значениях A и остается только верхний предел. Таким образом, для стационарной корреляционной матрицы мы получаем алгебраическое выражение

$$\boxed{A\sigma + \sigma A^T = BB^T} \quad (4.4.51)$$

в) Стационарная дисперсия в двумерном случае

Заметим, что если A — матрица размерности 2×2 , то она удовлетворяет характеристическому уравнению

$$A^2 - (\text{Tr } A)A + (\text{Det } A) = 0, \quad (4.4.52)$$

а в силу (4.4.49) и вытекающего из (4.4.52) факта, что $\exp(-At)$ есть многочлен первой степени относительно A , мы можем записать

$$\sigma = \alpha BB^T + \beta(ABB^T + BB^T A^T) + \gamma ABB^T A^T.$$

Пользуясь (4.4.52), мы находим, что (4.4.51) удовлетворяется, если

$$\alpha + (\text{Tr } A)\beta - (\text{Det } A)\gamma = 0$$

$$2\beta(\text{Det } A) + 1 = 0$$

$$\beta + (\text{Tr } A)\gamma = 0,$$

откуда

$$\sigma = \frac{(\text{Det } A)BB^T + [A - (\text{Tr } A)I]BB^T[A - (\text{Tr } A)I]^T}{2(\text{Tr } A)(\text{Det } A)}. \quad (4.4.53)$$

г) Временная корреляционная матрица в стационарном случае

Из решения (4.4.49) мы видим, что при $t > s$

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x}_s(t), \mathbf{x}_s^T(s) \rangle &= \exp[-A(t-s)] \int_{-\infty}^s \exp[-A(s-t')] BB^T \exp[-A^T(s-t')] dt' \\ &= \exp[-A(t-s)] \sigma \quad t > s \end{aligned} \quad (4.4.54a)$$

и аналогично

$$= \sigma \exp[-A^T(s-t)] \quad t < s, \quad (4.4.54b)$$

что дает нам как раз такую зависимость от $s - t$, какой следует ожидать от стационарного решения. Определив затем

$$G_s(t-s) = \langle \mathbf{x}_s(t), \mathbf{x}_s^T(s) \rangle, \quad (4.4.55)$$

мы видим (учитывая $\sigma = \sigma^T$), что

$$G_s(t-s) = [G_s(s-t)]^T. \quad (4.4.56)$$

д) Спектральная матрица в стационарном случае

Спектральная матрица оказывается довольно простой. Аналогично разд. 1.4.2 определим

$$\begin{aligned}
 S(\omega) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega\tau} G_s(\tau) d\tau & (4.4.57) \\
 &= \frac{1}{2\pi} \left\{ \int_0^{\infty} \exp[-(i\omega + A)\tau] \sigma d\tau + \int_{-\infty}^0 \sigma \exp[(-i\omega + A^T)\tau] d\tau \right\} \\
 &= \frac{1}{2\pi} [(A + i\omega)^{-1} \sigma + \sigma(A^T - i\omega)^{-1}].
 \end{aligned}$$

Отсюда $(A + i\omega)S(\omega)(A^T - i\omega) = \frac{1}{2\pi} (\sigma A^T + A\sigma)$, и, пользуясь (4.4.51), получаем

$$S(\omega) = \frac{1}{2\pi} (A + i\omega)^{-1} B B^T (A^T - i\omega)^{-1}.$$

(4.4.58)

e) Теорема регрессии

Результат (4.4.54а) известен также как теорема регрессии, поскольку он устанавливает, что временной ход $G_s(\tau)$ для $\tau > 0$ подчиняется тому же закону, что и временной ход среднего значения (например, (4.4.44)). Это является следствием линейного марковского характера рассматриваемой задачи. Поскольку

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{d\tau} [G_s(\tau)] d\tau &= \frac{d}{d\tau} \langle \mathbf{x}_s(\tau), \mathbf{x}_s^T(0) \rangle d\tau \\
 &= \langle [-A \mathbf{x}_s(\tau) d\tau + B dW(\tau)], \mathbf{x}_s^T(0) \rangle & (4.4.59a)
 \end{aligned}$$

и поскольку $\tau > 0$, $dW(\tau)$ некоррелировано с $\mathbf{x}_s^T(0)$ и

$$\frac{d}{d\tau} [G_s(\tau)] = -A G_s(\tau).$$

(4.4.59б)

Таким образом, для вычисления $G_s(\tau)$ необходимо знать $G_s(0) = \sigma$ и уравнение временного хода среднего значения. Полученный результат аналогичен выводам разд. 3.7.4.

4.4.7. ОБЩЕЕ ЛИНЕЙНОЕ УРАВНЕНИЕ ДЛЯ ОДНОЙ ПЕРЕМЕННОЙ

a) Однородный случай

Рассмотрим сначала однородное уравнение

$$dx = [b(t)dt + g(t)dW(t)]x \tag{4.4.60}$$

и, пользуясь обычными правилами Ито, запишем

$$y = \log x, \quad (4.4.61)$$

так что

$$\begin{aligned} dy &= dx/x - \frac{1}{2}(dx)^2/x^2 \\ &= [b(t)dt + g(t)dW(t)] - \frac{1}{2}g(t)^2dt. \end{aligned} \quad (4.4.62)$$

Интегрируя и делая подстановку, обратную (4.4.61), получаем равенство

$$x(t) = x(0) \exp \left\{ \int_0^t [b(t') - \frac{1}{2}g(t')^2] dt' + \int_0^t g(t') dW(t') \right\} \quad (4.4.63)$$

$$\equiv x(0)\phi(t), \quad (4.4.64)$$

которое служит определением $\phi(t)$.

Заметим, что (с учетом (4.4.8))

$$\begin{aligned} \langle [x(t)]^n \rangle &= \langle [x(0)]^n \rangle \left\langle \exp \left\{ n \int_0^t [b(t') - \frac{1}{2}g(t')^2] dt' + n \int_0^t g(t') dW(t') \right\} \right\rangle \\ &= \langle [x(0)]^n \rangle \exp \left\{ n \int_0^t b(t') dt' + \frac{1}{2}n(n-1) \int_0^t g(t')^2 dt' \right\}. \end{aligned} \quad (4.4.65)$$

б) Неоднородный случай

Рассмотрим теперь

$$dx = [a(t) + b(t)x]dt + [f(t) + g(t)x]dW(t) \quad (4.4.66)$$

и запишем

$$z(t) = x(t)[\phi(t)]^{-1}, \quad (4.4.67)$$

где $\phi(t)$ соответствует определению (4.4.64) и является решением однородного уравнения (4.4.60). Далее,

$$dz = dx[\phi(t)]^{-1} + x d[\phi(t)]^{-1} + dx d[\phi(t)]^{-1}.$$

Учитывая, что $d[\phi(t)]^{-1} = -d\phi(t)[\phi(t)]^{-2} + [d\phi(t)]^2[\phi(t)]^{-3}$, и пользуясь правилами Ито, получаем уравнение

$$dz = \{[a(t) - f(t)g(t)]dt + f(t)dW(t)\} \phi(t)^{-1}, \quad (4.4.68)$$

которое можно сразу проинтегрировать. Окончательное решение имеет вид

$$x(t) = \phi(t) \left\{ x(0) + \int_0^t \phi(t')^{-1} \{ [a(t') - f(t')g(t')] dt' + f(t')dW(t') \} \right\}. \quad (4.4.69)$$

в) Моменты и автокорреляция

Уравнения для моментов удобнее получить из (4.4.66), нежели вычислять моменты и автокорреляцию непосредственно из решения (4.4.69). Из

$$\begin{aligned} d[x(t)^n] &= nx(t)^{n-1}dx(t) + \frac{n(n-1)}{2}x(t)^{n-2}[dx(t)]^2 \\ &= nx(t)^{n-1}dx(t) + \frac{n(n-1)}{2}x(t)^{n-2}[f(t) + g(t)x(t)]^2 dt \end{aligned} \quad (4.4.70)$$

следует

$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle x(t)^n \rangle &= \langle x(t)^n \rangle \left[nb(t) + \frac{n(n-1)}{2} g(t)^2 \right] \\ &\quad + \langle x(t)^{n-1} \rangle [na(t) + n(n-1)f(t)g(t)] \\ &\quad + \langle x(t)^{n-2} \rangle \left[\frac{n(n-1)}{2} f(t)^2 \right]. \end{aligned}$	(4.4.71)
---	----------

Эти уравнения образуют иерархическую последовательность, в которой в каждое уравнение входят решения двух предыдущих и которую можно последовательно проинтегрировать.

4.4.8. ЛИНЕЙНЫЕ УРАВНЕНИЯ ДЛЯ МНОГИХ ПЕРЕМЕННЫХ

а) Однородный случай

Уравнение имеет вид

$$dx(t) = [B(t)dt + \sum_i G_i(t)dW_i(t)]x(t), \quad (4.4.72)$$

где $B(t)$, $G_i(t)$ — матрицы. Вообще говоря, это уравнение не имеет решения в конечном виде, если только все матрицы $B(t)$, $G_i(t')$ не коммутируют друг с другом во все моменты времени:

$$\begin{aligned} G_i(t)G_j(t') &= G_j(t')G_i(t) \\ B(t)G_i(t') &= G_i(t')B(t) \\ B(t)B(t') &= B(t')B(t). \end{aligned} \quad (4.4.73)$$

В этом случае решение полностью аналогично решению для случая одной переменной

$$x(t) = \Phi(t)x(0)$$

где

$$\Phi(t) = \exp \left\{ \int_0^t [B(t) - \frac{1}{2} \sum_i G_i(t)^2] dt + \int_0^t \sum_i G_i(t) dW_i(t) \right\}. \quad (4.4.74)$$

б) Неоднородный случай

Неоднородное уравнение можно свести к однородному точно таким же способом, как это было сделано для одной переменной. Рассмотрим

$$dx(t) = [A(t) + B(t)x]dt + \sum_i [F_i(t) + G_i(t)x]dW_i(t) \quad (4.4.75)$$

и запишем

$$y(t) = \psi(t)^{-1}x(t), \quad (4.4.76)$$

где $\psi(t)$ — матричное решение однородного уравнения (4.4.72). Вначале нам необходимо найти $d[\psi^{-1}]$. Для всякой невырожденной матрицы M имеем $MM^{-1} = 1$, и разложение с точностью до членов второго порядка дает $Md[M^{-1}] + dM M^{-1} + dMd[M^{-1}] = 0$. Отсюда $d[M^{-1}] = -[M + dM]^{-1}dM M^{-1}$, и, разлагая снова до членов второго порядка, получим

$$d[M^{-1}] = -M^{-1}dM M^{-1} + M^{-1}dM M^{-1}dM M^{-1}. \quad (4.4.77)$$

Таким образом, поскольку $\psi(t)$ удовлетворяет однородному уравнению, можно записать

$$d[\psi(t)^{-1}] = \psi(t)^{-1} \left\{ [-B(t) + \sum_i G_i(t)^2]dt - \sum_i G_i(t)dW_i(t) \right\}.$$

Возьмем дифференциал

$$dy(t) = \psi(t)^{-1} \left\{ [A(t) - \sum_i G_i(t)F_i(t)]dt + \sum_i F_i(t)dW_i(t) \right\}.$$

Отсюда

$$x(t) = \psi(t) \left\{ x(0) + \int_0^t \psi(t')^{-1} \left\{ [A(t') - \sum_i G_i(t')F_i(t')]dt' + \sum_i F_i(t')dW_i(t') \right\} \right\}. \quad (4.4.78)$$

Практической пользы от этого решения не так много, поскольку вычисление средних значений и корреляционных функций сопряжено с большими трудностями, даже если известно решение однородного уравнения.

4.4.9. ПРОЦЕСС ОРНШТЕЙНА — УЛЕНБЕКА, ЗАВИСЯЩИЙ ОТ ВРЕМЕНИ

Это уравнение представляет собой разрешимый частный случай рассмотренного ранее общего линейного уравнения. Оно является обобщением процесса Орнштейна — Уленбека для нескольких переменных (разд. 4.4.6), учитывающим зависимость параметров от времени:

$$dx(t) = -A(t)x(t)dt + B(t)dW(t). \quad (4.4.79)$$

Очевидно, что это уравнение имеет такой же вид, что и (4.4.75), с учетом замены

$$A(t) \rightarrow 0$$

$$B(t) \rightarrow -A(t)$$

$$\sum_i F_i(t) dW_i(t) \rightarrow B(t) dW(t) \quad (4.4.80)$$

$$G_i(t) \rightarrow 0.$$

Соответствующее однородное уравнение представляет собой просто детерминистическое уравнение

$$dx(t) = -A(t)x(t) dt. \quad (4.4.81)$$

При условии, что $A(t)A(t') = A(t')A(t)$, это уравнение разрешимо: его решение имеет вид

$$x(t) = \psi(t)x(0),$$

где

$$\psi(t) = \exp\left[-\int_0^t A(t') dt'\right]. \quad (4.4.82)$$

Тогда с учетом (4.4.78)

$$x(t) = \exp\left[-\int_0^t A(t') dt'\right] x(0) + \int_0^t \left\{ \exp\left[-\int_0^t A(s) ds\right] B(t') dW(t') \right\}. \quad (4.4.83)$$

Это решение очень похоже на решение не зависящего от времени уравнения процесса Орнштейна — Уленбека, полученное в разд. 4.4.6. Отсюда имеем

$$\langle x(t) \rangle = \exp\left[-\int_0^t A(t') dt'\right] \langle x(0) \rangle \quad (4.4.84)$$

$$\begin{aligned} \langle x(t), x^T(t) \rangle &= \exp\left[-\int_0^t A(t') dt'\right] \langle x(0), x(0)^T \rangle \exp\left[-\int_0^t A^T(t') dt'\right] \\ &+ \int_0^t dt' \exp\left[-\int_0^t A(s) ds\right] B(t') B^T(t') \exp\left[-\int_0^t A^T(s) ds\right]. \end{aligned} \quad (4.4.85)$$

Зависящий от времени процесс Орнштейна — Уленбека весьма естественным образом возникает при разработке асимптотических методов описания малозаумящих систем.

Уравнение Фоккера — Планка

В этой довольно длинной главе теория непрерывных марковских процессов развивается с точки зрения соответствующего уравнения Фоккера—Планка, которое определяет временной ход плотности вероятности для данной системы. Глава распадается на две основные части, посвященные соответственно процессам, описываемым одной и несколькими переменными. Отдельное рассмотрение систем с одной переменной оправдывается тем фактом, что для них имеется большое количество точных результатов. Поэтому в разд. 5.2 мы будем рассматривать всевозможные аспекты систем с одной переменной; разд. 5.3 посвящен системам со многими переменными. В обоих случаях задача об установлении соответствующих граничных условий имеет решающее значение, и она рассматривается в общем виде в разд. 5.2.1. Соответствующее рассмотрение граничных условий для обратного уравнения Фоккера—Планка проводится в разд. 5.2.4. Кроме того, в разд. 5.2 представлены точные результаты, полученные для стационарных плотностей вероятности, свойства собственных функций и задачи, связанные с достижением границ, — в большинстве случаев для одной переменной удастся получить решение в явном виде.

В разд. 5.3 рассматриваются точные результаты для систем с несколькими переменными; как правило, в отличие от систем с одной переменной эти результаты не удастся представить в явном виде. Кроме того, рассматривается понятие *детального баланса*, который для систем с одной переменной почти тривиален, но в случае систем с несколькими переменными приводит к интересным выводам.

В заключение рассматриваются точные результаты для задач со многими переменными, связанных с достижением границ.

5.1. ОБЩИЕ ЗАМЕЧАНИЯ

С уравнением Фоккера — Планка мы уже встречались прежде: вначале в форме, полученной Эйнштейном для уравнения диффузии (разд. 1.2), затем как с частным случаем дифференциального уравнения

Чепмена—Колмогорова (разд. 3.5.2) и, наконец, в связи с рассмотрением стохастических дифференциальных уравнений (разд. 4.3.4). Используя уравнения Фоккера — Планка, часто удается быстрее прийти к желаемым результатам, чем с помощью соответствующих стохастических дифференциальных уравнений, но бывает и наоборот. Для того чтобы получить полное представление о природе диффузионных процессов, необходимо изучить оба подхода.

Возникновение названия уравнения Фоккера — Планка связано с работами Фоккера (1914) [5.1] и Планка (1917) [5.2]: Фоккер исследовал броуновское движение в поле излучения, а Планк на этой основе попытался построить полную теорию флуктуаций. Математики чаще называют это уравнение уравнением Колмогорова, который дал ему строгое теоретическое обоснование [5.3]. Иногда используется также термин «уравнение Смолуховского». Не вдаваясь в проблему приоритетов, мы будем называть его уравнением Фоккера — Планка; поскольку такое название наиболее распространено в тех кругах специалистов, которым адресована эта книга.

5.2. УРАВНЕНИЕ ФОККЕРА — ПЛАНКА В ОДНОМЕРНОМ СЛУЧАЕ

В одномерном случае уравнение Фоккера — Планка (УФП) принимает простой вид:

$$\frac{\partial f(x, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} [A(x, t)f(x, t)] + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} [B(x, t)f(x, t)]. \quad (5.2.1)$$

Как показано в разд. 3.4.5, УФП справедливо для условной плотности вероятности, т. е. выбора

$$f(x, t) = p(x, t | x_0, t_0) \quad (5.2.2)$$

при любом начальном значении x_0, t_0 и при начальном условии

$$p(x, t_0 | x_0, t_0) = \delta(x - x_0). \quad (5.2.3)$$

Однако, используя определение единовременной плотности вероятности

$$p(x, t) = \int dx_0 p(x, t; x_0, t_0) = \int dx_0 p(x, t | x_0, t_0) p(x_0, t_0), \quad (5.2.4)$$

можно показать, что УФП справедливо также для $p(x, t)$ с начальным условием

$$p(x, t)|_{t=t_0} = p(x, t_0), \quad (5.2.5)$$

которое обычно менее сингулярно, нежели (5.2.3).

Из разд. 4.3.4 следует, что стохастический процесс, описываемый условной вероятностью, удовлетворяющей УФП, эквивалентен СДУ Ито

$$dx(t) = A[x(t), t]dt + \sqrt{B[x(t), t]}dW(t)$$

и что эти два описания должны рассматриваться как взаимно дополняющие друг друга. Далее мы увидим, что теория возмущений, построенная на основе УФП, отличается от теории на основе СДУ, и что та и другая теории имеют свою сферу применения.

5.2.1. ГРАНИЧНЫЕ УСЛОВИЯ

Уравнение Фоккера — Планка является параболическим дифференциальным уравнением в частных производных второго порядка, и для его решения необходимо начальное условие типа (5.2.5) и граничные условия на концах интервала изменения x . Граничные условия могут иметь различный вид.

Удобнее не ограничиваться случаем одной переменной, а сразу вывести граничные условия в общем виде. Рассмотрим прямое уравнение

$$\partial_t p(\mathbf{z}, t) = - \sum_i \frac{\partial}{\partial z_i} A_i(\mathbf{z}, t)p(\mathbf{z}, t) + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{\partial^2}{\partial z_i \partial z_j} B_{ij}(\mathbf{z}, t)p(\mathbf{z}, t). \quad (5.2.6)$$

Заметим, что его можно переписать в виде

$$\frac{\partial p(\mathbf{z}, t)}{\partial t} + \sum_i \frac{\partial}{\partial z_i} J_i(\mathbf{z}, t) = 0, \quad (5.2.7)$$

где мы ввели *поток вероятности*

$$J_i(\mathbf{z}, t) = A_i(\mathbf{z}, t)p(\mathbf{z}, t) - \frac{1}{2} \sum_j \frac{\partial}{\partial z_j} B_{ij}(\mathbf{z}, t)p(\mathbf{z}, t). \quad (5.2.8)$$

Уравнение (5.2.7) имеет вид локального уравнения сохранения и может быть преобразовано к интегральной форме. Рассмотрим некоторую область R с границей S и определим

$$P(R, t) = \int_R d\mathbf{z} p(\mathbf{z}, t).$$

Тогда (5.2.7) эквивалентно

$$\frac{\partial P(R, t)}{\partial t} = - \int_S dS \mathbf{n} \cdot \mathbf{J}(\mathbf{z}, t), \quad (5.2.9)$$

где n — внешняя нормаль к S . Выражение (5.2.9) показывает, что уменьшение вероятности дается интегралом от J по поверхности, ограничивающей область R . Можно, впрочем, доказать, что поток J обладает и более общим свойством, а именно что его интеграл по любой поверхности S дает полный поток вероятности через эту поверхность.

Действительно, рассмотрим две смежные области R_1 и R_2 , разделенные поверхностью S_{12} . Пусть S_1 и S_2 — поверхности, которые вместе с S_{12} ограничивают соответственно области R_1 и R_2 (см. рис. 5.1).

Тогда полный поток вероятности можно вычислить с учетом того, что мы здесь имеем дело с процессом с непрерывными реализациями, так что за достаточно короткое время Δt вероятность перехода из R_2 в R_1 через поверхность S_{12} есть совместная вероятность нахождения в R_2 в момент t и в R_1 в момент $t + \Delta t$, равная

$$= \int_{R_1} dx \int_{R_2} dy p(\mathbf{x}, t + \Delta t; \mathbf{y}, t).$$

Полный поток вероятности из R_2 в R_1 получим, вычитая отсюда вероятность перехода в противоположном направлении и деля на Δt :

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int_{R_1} dx \int_{R_2} dy [p(\mathbf{x}, t + \Delta t; \mathbf{y}, t) - p(\mathbf{y}, t + \Delta t; \mathbf{x}, t)]. \quad (5.2.10)$$

Заметим, что

$$\int_{R_1} dx \int_{R_2} dy p(\mathbf{x}, t; \mathbf{y}, t) = 0,$$

поскольку это есть вероятность одновременного нахождения в R_1 и R_2 . Тогда можно записать

$$\begin{aligned} (5.2.10) &= \int_{R_1} dx \int_{R_2} dy [\partial_{t'} p(\mathbf{x}, t'; \mathbf{y}, t) - \partial_{t'} p(\mathbf{y}, t'; \mathbf{x}, t)]_{t'=t} \\ &= - \int_{R_1} dx \sum_i \frac{\partial}{\partial x_i} J_i(\mathbf{x}, t; R_2, t) + \int_{R_2} dy \sum_i \frac{\partial}{\partial y_i} J_i(\mathbf{y}, t; R_1, t) \end{aligned} \quad (5.2.11)$$

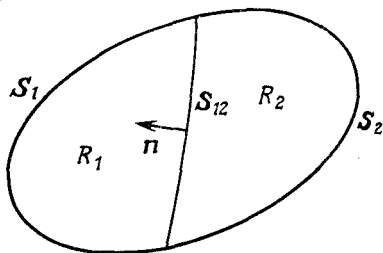


Рис. 5.1. Области, использованные для демонстрации того, что ток вероятности является потоком вероятности.

(здесь мы воспользовались уравнением Фоккера — Планка в виде (5.2.7), где $J_i(x, t; R_2, t)$ получено из

$$\leq p(x, t; R_2, t) = \int_{R_2} dy p(x, t; y, t)$$

таким же путем, как $J(z, t)$ из $p(z, t)$ в (5.2.8); $J_i(y, t; R_1, t)$ определяется аналогичным образом. Перейдем теперь к интегралам по поверхности. Интеграл по S_2 обращается в нуль, поскольку в него входит $p(x, t; R_2, t)$, в то время как x не находится ни в области R_2 , ни на ее границе (исключая случай множества нулевой размерности). Аналогично интеграл по S_1 обращается в нуль, и остаются лишь интегралы по поверхности S_{12} , поскольку здесь интегрирование проводится по участку границы R_1 и R_2 .

Таким образом, полный поток вероятности из R_2 в R_1 есть

$$\int_{S_{12}} dS \mathbf{n} \cdot \{J(x, t; R_1, t) + J(x, t; R_2, t)\},$$

и, поскольку x принадлежит объединению множеств R_1 и R_2 , полный поток вероятности за единицу времени из R_2 в R_1 равен

$$\equiv \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int_{R_1} dx \int_{R_2} dy [p(x, t + \Delta t; y, t) - p(y, t + \Delta t; x, t)] = \int_{S_{12}} dS \mathbf{n} \cdot J(x, t)$$

где единичная нормаль \mathbf{n} направлена из R_2 в R_1 . (5.2.12)

Рассмотрим теперь различные типы граничных условий.

а) Отражающая граница

Мы рассматриваем ситуацию, в которой частица не может покинуть область R , и, таким образом, поток вероятности через границу S области R равен нулю. Это эквивалентно условию

$$\mathbf{n} \cdot J(z, t) = 0 \text{ при } z \in S, \quad \mathbf{n} = \text{нормаль к } S \quad (5.2.13)$$

где $J(z, t)$ дается выражением (5.2.8), а \mathbf{n} — нормаль к S .

Поскольку частица не может пересечь поверхность S , она должна отражаться от нее, почему эта граница и называется *отражающей*.

б) Поглощающая граница

В этом случае мы предполагаем, что, как только частица попадает на поверхность S , она удаляется из системы, т. е. граница поглощает частицу. Соответственно вероятность нахождения на границе равна ну-

лю, т. е.

$$n \cdot J(z, t) = 0 \text{ при } z \in S. \quad (5.2.14)$$

в) Граничные условия на разрыве

Может случиться, что коэффициенты A_i и B_{ij} имеют разрыв на поверхности S , но через граничную поверхность S тем не менее происходит свободное движение частиц. Следовательно, как вероятность, так и нормальная компонента тока должны быть непрерывны на S ,

$$n \cdot J(z) |_{s_+} = n \cdot J(z) |_{s_-} \quad (5.2.15)$$

$$p(z) |_{s_+} = p(z) |_{s_-}, \quad (5.2.16)$$

где индексы S_+ , S_- обозначают пределы величин слева и справа от поверхности.

Согласно определению тока вероятности (5.2.8), производные $p(z)$ не обязательно непрерывны на S .

г) Периодические граничные условия

Предположим, что процесс происходит на интервале $[a, b]$, концы которого совпадают между собой (например, диффузия происходит на окружности). Тогда мы накладываем граничные условия, полученные из граничных условий для разрыва, т. е.

$$I: \lim_{x \rightarrow b^-} p(x, t) = \lim_{x \rightarrow a^+} p(x, t) \quad (5.2.17)$$

$$II: \lim_{x \rightarrow b^-} J(x, t) = \lim_{x \rightarrow a^+} J(x, t). \quad (5.2.18)$$

Чаще всего периодические граничные условия накладываются в том случае, когда функции $A(x, t)$ и $B(x, t)$ — периодические на одном и том же отрезке, так что

$$A(b, t) = A(a, t) \quad (5.2.19)$$

$$B(b, t) = B(a, t).$$

Это означает, что условия I и II попросту сводятся к требованию равенства значений $p(x, t)$ и ее производных в точках a и b .

д) Предписанные границы

Если коэффициент диффузии на границе обращается в нуль, то мы имеем дело с ситуацией, когда вид границы может быть указан автоматически. Пусть движение происходит только в области $x > a$. Если

условие Липшица выполняется для $A(x, t)$ и $\sqrt{B(x, t)}$ при $x = a$, (разд. 4.3.1), и $B(x, t)$ дифференцируема в $x = a$, то

$$\partial_x B(a, t) = 0. \quad (5.2.20)$$

Тогда СДУ имеет решения, и мы можем записать

$$dx(t) = A(x, t) dt + \sqrt{B(x, t)} dW(t) \quad (5.2.21)$$

В этом (довольно специальном) случае существенным оказывается знак $A(x, t)$, и мы, соответственно, рассматриваем три случая.

1) *Выходная граница.* Эта граница соответствует случаю

$$A(a, t) < 0 \quad (5.2.22)$$

так что частица, достигающая точки a , с определенностью уходит в область $x < a$. Поэтому такая граница и называется выходной.

2) *Входная граница.* В этом случае

$$A(a, t) > 0. \quad (5.2.23)$$

Теперь знак $A(x, t)$ таков, что частица, достигающая точки a , должна вернуться в область $x > a$. Таким образом, частица, помещенная справа от a , никогда не может покинуть область. С другой стороны, частица, помещенная вначале в точку $x = a$, непременно войдет в область $x > a$, отсюда и название этой границы.

3) *Естественная граница.* Предположим, наконец, что

$$A(a, t) = 0. \quad (5.2.24)$$

Частица, достигшая точки a , должна здесь и остаться. Можно показать, однако, что частице никогда не удастся попасть в эту точку. На границе этого типа частицы не поглощаются, и через эту границу частицу нельзя ввести в область.

Феллер [5.4] показал, что, вообще говоря, границу всегда можно отнести к одному из четырех типов: регулярные, входные, выходные и естественные. В своей классификации он пользовался следующими критериями. Определим

$$f(x) = \exp \left[-2 \int_{x_0}^x ds A(s)/B(s) \right] \quad (5.2.25)$$

$$g(x) = 2/[B(x)f(x)] \quad (5.2.26)$$

$$h_1(x) = f(x) \int_{x_0}^x g(s) ds \quad (5.2.27)$$

$$h_2(x) = g(x) \int_{x_0}^x f(s) ds, \quad (5.2.28)$$

где x_0 фиксировано и принадлежит (a, b) . Обозначим через

$$\mathcal{L}(x_1, x_2) \quad (5.2.29)$$

пространство всех функций интегрируемых на интервале (x_1, x_2) . Тогда граница в точке a является

-
1. регулярной, если $f(x) \in \mathcal{L}(a, x_0)$, и $g(x) \in \mathcal{L}(a, x_0)$
 2. выходной, если $g(x) \notin \mathcal{L}(a, x_0)$, и $h_1(x) \in \mathcal{L}(a, x_0)$
 3. входной, если $g(x) \in \mathcal{L}(a, x_0)$, и $h_2(x) \in \mathcal{L}(a, x_0)$
 4. естественной во всех остальных случаях.
-

Из результатов разд. 5.2.2 можно видеть, что для выходной границы не существует нормализованного стационарного решения УФП, и что среднее время достижения границы (5.2.161) конечно. Аналогично, для входной границы стационарное решение может существовать, но среднее время достижения границы бесконечно велико. В случае регулярной границы среднее время достижения границы конечно, но стационарное решение с отражающей границей в точке a существует. Естественные границы проанализировать труднее, и за подробностями мы отошлем читателя к [5.5].

е) Границы на бесконечности

Все вышеперечисленные типы границ могут иметь место на бесконечности, если только нам удастся одновременно обеспечить нормализацию вероятности, для чего (если $p(x)$ достаточно «удобная» функция) требуется, чтобы

$$\lim_{x \rightarrow \infty} p(x, t) = 0. \quad (5.2.30)$$

Если $\partial_x p(x, t)$ удовлетворяет разумным требованиям (т. е. не начинает бесконечно быстро осциллировать, когда $x \rightarrow \infty$), то

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \partial_x p(x, t) = 0, \quad (5.2.31)$$

так что для того, чтобы поток на бесконечности не обращался в нуль, необходимо обычно, чтобы либо $A(x, t)$, либо $B(x, t)$ обращались в бесконечность. В таких случаях удобнее всего переходить к новой переменной, которая конечна при $x = \infty$.

Когда границы расположены на $x = \pm \infty$ и допускается существование ненулевых потоков вероятности, то сохранение вероятности возможно в двух случаях:

$$\text{i) } J(\pm \infty, t) = 0 \quad (5.2.32)$$

$$\text{ii) } J(+\infty, t) = J(-\infty, t). \quad (5.2.33)$$

Здесь мы имеем дело с предельными случаями отражающих и периодических граничных условий соответственно.

5.2.2. СТАЦИОНАРНЫЕ РЕШЕНИЯ ОДНОРОДНЫХ УРАВНЕНИЙ ФОККЕРА — ПЛАНКА

Вспомним (разд. 3.7.2), что для однородного процесса коэффициенты сноса и диффузии не зависят от времени. В этом случае уравнение, которому удовлетворяет стационарное распределение, имеет вид

$$\frac{d}{dx}[A(x)p_s(x)] - \frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2}[B(x)p_s(x)] = 0 \quad (5.2.34)$$

или, с использованием определения потока (разд. 5.2.1),

$$\frac{dJ(x)}{dx} = 0; \quad (5.2.35)$$

его решением, очевидно, является

$$J(x) = \text{const.} \quad (5.2.36)$$

Допустим, процесс происходит на интервале (a, b) . Тогда

$$J(a) = J(x) = J(b) \equiv J \quad (5.2.37)$$

и если одна граница является отражающей, то и другая должна быть отражающей, и $J = 0$.

Если границы не являются отражающими, то они должны быть в силу (5.2.37) периодическими. В этом случае мы пользуемся граничными условиями, определенными в (5.2.17, 18).

a) Нулевой поток. Потенциальное решение

Полагая $J = 0$, перепишем (5.2.37) в виде

$$A(x)p_s(x) = \frac{1}{2} \frac{d}{dx}[B(x)p_s(x)] = 0; \quad (5.2.38)$$

его решением является

$$p_s(x) = \frac{\mathcal{N}}{B(x)} \exp\left[2 \int_a^x dx' A(x')/B(x')\right], \quad (5.2.39)$$

где \mathcal{N} — константа, получаемая из условия нормировки

$$\int_a^b dx p_s(x) = 1. \quad (5.2.40)$$

Подобное решение называется *потенциальным* — главным образом потому, что стационарное решение получается путем единственного интегрирования. Подробнее о смысле этого названия мы поговорим в разд. 5.3.3.

б) Периодическое граничное условие

В этом случае поток J не равен нулю, и (5.2.36) можно записать в виде

$$A(x)p_s(x) - \frac{1}{2} \frac{d}{dx} [B(x)p_s(x)] = J. \quad (5.2.41)$$

Значение J не является произвольным, а определяется нормировкой и периодическим граничным условием

$$p_s(a) = p_s(b) \quad (5.2.42)$$

$$J(a) = J(b). \quad (5.2.43)$$

Для удобства определим

$$\psi(x) = \exp\left[2 \int_a^x dx' A(x')/B(x')\right]. \quad (5.2.44)$$

Тогда (5.2.41) легко проинтегрировать и получить

$$p_s(x)B(x)/\psi(x) = p_s(a)B(a)/\psi(a) + J \int_a^x dx' / \psi(x'). \quad (5.2.45)$$

Наложив граничное условие (5.2.42), находим

$$J = [B(b)/\psi(b) - B(a)/\psi(a)] p_s(a) / \left[\int_a^b dx' / \psi(x') \right], \quad (5.2.46)$$

так что

$$p_s(x) = p_s(a) \left[\frac{\int_a^x \frac{dx'}{\psi(x')} \frac{B(b)}{\psi(b)} + \int_x^b \frac{dx'}{\psi(x')} \frac{B(a)}{\psi(a)}}{\frac{B(x)}{\psi(x)} \int_a^b \frac{dx'}{\psi(x')}} \right]. \quad (5.2.47)$$

в) Бесконечности и сингулярности

Если граница находится в бесконечности или в особой точке, то обсужденные выше возможности могут не осуществиться, например из-за расходимости. Полное перечисление всех возможных случаев представляло бы очень сложную задачу. Поэтому мы проиллюстрируем их на ряде примеров в следующем разделе.

5.2.3. ПРИМЕРЫ СТАЦИОНАРНЫХ РЕШЕНИЙ

а) Диффузия в поле силы тяжести

Сильно демпфированное движение броуновской частицы в постоянном гравитационном поле обычно описывают СДУ (разд. 6.4)

$$dx = -g dt + \sqrt{D} dW(t), \quad (5.2.48)$$

которому соответствует уравнение Фоккера — Планка

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}(gp) + \frac{1}{2} D \frac{\partial^2 p}{\partial x^2}. \quad (5.2.49)$$

На отрезке (a, b) с отражающими границами стационарное решение дается выражением (5.2.39)

$$p_s(x) = \mathcal{N} \exp[-2gx/D], \quad (5.2.50)$$

где все константы учтены в значении \mathcal{N} .

Очевидно, это решение нормализуемо на (a, b) , только если a конечно, хотя b может быть и бесконечно большим. Вся премудрость этого результата сводится к тому, что, диффундируя внутри кувшина с жидкостью, частицы будут опускаться вниз, и если кувшин бесконечно глубок, то это падение не прекратится никогда! Диффузия вверх, против направления силы тяжести, также возможна на любое расстояние с экспоненциально убывающей вероятностью.

Наложим теперь на (a, b) периодические граничные условия. Подстановка в (5.2.47) дает постоянное распределение

$$p_s(x) = p_s(a). \quad (5.2.51)$$

Это означает, что частицы будут свободно проходить от a к b и обратно.

б) Процесс Орнштейна — Уленбека

Воспользуемся обозначениями разд. 3.8.4, где уравнение Фоккера — Планка имело вид

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}(kxp) + \frac{1}{2} D \frac{\partial^2 p}{\partial x^2}. \quad (5.2.52)$$

Его стационарное решение на интервале (a, b) с отражающими границами дается выражением

$$p_s(x) = \mathcal{N} \exp(-kx^2/D). \quad (5.2.53)$$

Если $k > 0$, решение нормализуемо на $(-\infty, +\infty)$. Если $k < 0$, то оно имеет смысл только на конечном интервале.

Пусть

$$a = -b < 0. \quad (5.2.54)$$

Тогда для данного случая

$$\psi(x) = \exp\left[-\frac{k}{D}(x^2 - a^2)\right], \quad (5.2.55)$$

и, рассматривая периодическое граничное условие на этом интервале и замечая, что

$$\psi(a) = \psi(-a), \quad (5.2.56)$$

находим

$$\begin{aligned} p_s(x) &= p_s(a)\psi(x)/\psi(a) \\ &= p_s(a) \exp\left[-\frac{k}{D}(x^2 - a^2)\right], \end{aligned}$$

так что для симметричного случая мы получаем то же решение, что и для отражающих границ.

Устремляя $a \rightarrow \infty$, мы снова получим такое же решение. Этот результат справедлив и в том случае, если $a \rightarrow \infty$ независимо от $b \rightarrow -\infty$ при $k > 0$.

в) Модель химической реакции

Хотя обычно химические реакции наилучшим образом моделируются с помощью управляющего уравнения рождения — гибели (см. гл. 7), приближенные подходы нередко используют уравнение Фоккера — Планка. Представляет интерес реакция



поскольку ей соответствует выходная граница при $x = 0$ (где x есть число молекул вещества X). Очевидно, что когда вещества X нет, то молекулам A не с чем соединиться, так что вещество X не производится.

Соответствующее уравнение Фоккера — Планка выводится в разд. 7.6.1 и имеет вид

$$\partial_t p(x, t) = -\partial_x [(ax - x^2)p(x, t)] + \frac{1}{2} \partial_x^2 [(ax + x^2)p(x, t)]. \quad (5.2.58)$$

Установим отражающие границы в точках $x = \alpha$ и $x = \beta$. В этом случае стационарное решение имеет вид

$$p_s(x) = e^{-2x}(a + x)^{4a-1}x^{-1} \quad (5.2.59)$$

и не нормализуемо, если $\alpha = 0$. Наличие полюса в точке $x = 0$ является следствием поглощения в этой точке. Сравнивая с (5.2.28), мы видим, что

$$B(0, t) \equiv (ax + x^2)_{x=0} = 0$$

$$A(0, t) \equiv (ax - x^2)_{x=0} = 0 \quad (5.2.60)$$

$$\partial_x B(0, t) \equiv (a + 2x)_{x=0} > 0,$$

так что мы действительно имеем дело с выходной границей. Стационарное решение имеет смысл только для $\alpha > 0$, так как в противном случае оно не нормируется. Физический смысл отражающей границы вполне прост: как только молекула вещества X исчезает, в систему немедленно добавляется другая такая же. График $p_s(x)$ приводится на рис. 5.2. На практике время, которое должно пройти, пока все молекулы X исчезнут, оказывается чрезвычайно большим, так что стационарное решение (5.2.59) дает хорошее приближение истинного распределения, за исключением области вблизи $x = 0$.

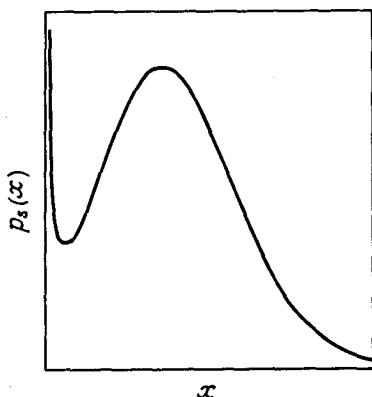


Рис. 5.2. Ненормализуемое стационарное решение $p_s(x)$ для реакции $X + A \rightleftharpoons 2X$.

5.2.4. ГРАНИЧНЫЕ УСЛОВИЯ ДЛЯ ОБРАТНОГО УРАВНЕНИЯ ФОККЕРА — ПЛАНКА

Пусть $p(x, t | x', t')$ удовлетворяет прямому уравнению Фоккера — Планка для данных x, t и x', t' и процесс ограничен областью R с границей S . Тогда, если s — время между t и t' , имеем

$$0 = \frac{\partial}{\partial s} p(x, t | x', t') = \frac{\partial}{\partial s} \int dy p(x, t | y, s) p(y, s | x', t') \quad (5.2.61)$$

(где мы воспользовались уравнением Чепмена — Колмогорова). Возьмем под интегралом производную $\partial/\partial s$ и используем прямое уравнение Фоккера — Планка во втором сомножителе и обратное уравнение в первом сомножителе. Для краткости обозначим

$$p(y, s) = p(y, s | x', t') \quad (5.2.62)$$

$$\bar{p}(y, s) = p(x, t | y, s).$$

Тогда

$$0 = \int_R dy \left[- \sum_i \frac{\partial}{\partial y_i} (A_i p) + \sum_{i,j} \frac{\partial^2}{\partial y_i \partial y_j} (B_{ij} p) \right] \bar{p} - \int_R dy \left[- \sum_i A_i \frac{\partial \bar{p}}{\partial y_i} - \sum_{i,j} B_{ij} \frac{\partial^2 \bar{p}}{\partial y_i \partial y_j} \right] p, \quad (5.2.63)$$

и после некоторых преобразований

$$= \int_R dy \sum_i \frac{\partial}{\partial y_i} \left\{ -A_i p \bar{p} + \frac{1}{2} \sum_j \left[\bar{p} \frac{\partial}{\partial y_j} (B_{ij} p) - p B_{ij} \frac{\partial \bar{p}}{\partial y_j} \right] \right\} \quad (5.2.64)$$

$$= \int_S \sum_i dS_i \left\{ \bar{p} \left[-A_i p + \frac{1}{2} \sum_j \frac{\partial}{\partial y_j} (B_{ij} p) \right] - \frac{1}{2} \int_S \sum_i dS_i p \left(\sum_j B_{ij} \frac{\partial \bar{p}}{\partial y_j} \right) \right\}. \quad (5.2.65)$$

Рассмотрим по отдельности некоторые возможные случаи.

а) Поглощающие границы

Требуется, чтобы на границе $p = 0$. Легко видеть, что требование $p(y, t) = 0$ на границе согласуется с (5.2.65): подставляя $p = 0$ в это уравнение, получаем

$$0 = \int_S \bar{p} \sum_{i,j} dS_i B_{ij} \frac{\partial p}{\partial y_j}. \quad (5.2.66)$$

Однако если граница поглощающая, то, очевидно,

$$p(\mathbf{x}, t | \mathbf{y}, s) = 0, \quad \text{при } \mathbf{y} \in \text{границе}, \quad (5.2.67)$$

а это равнозначно утверждению, что вероятность входа X в систему со стороны границы равна нулю.

б) Отражающие границы

В этом случае условие, накладываемое на прямое уравнение, приводит к обращению в (5.2.65) первого интеграла в нуль. Последний сомножитель обращается в нуль для произвольного p , только если

$$\sum_{i,j} n_i B_{ij}(\mathbf{y}) \frac{\partial}{\partial y_j} [p(\mathbf{x}, t | \mathbf{y}, s)] = 0. \quad (5.2.68)$$

В одномерном случае этому соответствует

$$\frac{\partial}{\partial y} p(\mathbf{x}, t | \mathbf{y}, s) = 0, \quad (5.2.69)$$

если B не равно нулю.

в) Границы других типов

Эти границы мы не будем рассматривать здесь. Подробности можно найти в [5.4].

5.2.5. МЕТОДЫ СОБСТВЕННЫХ ФУНКЦИЙ (ОДНОРОДНЫЕ ПРОЦЕССЫ)

Покажем, как в случае однородных процессов решения наиболее естественным образом выражаются с помощью собственных функций. Будем рассматривать отражающие и поглощающие границы.

а) Собственные функции для отражающих границ

Рассмотрим уравнение Фоккера — Планка для процесса на интервале (a, b) с отражающими границами. Пусть УФП имеет решение $p_s(x)$ и имеет вид

$$\partial_t p(x, t) = -\partial_x [A(x)p(x, t)] + \frac{1}{2} \partial_x^2 [B(x)p(x, t)]. \quad (5.2.70)$$

Определим функцию $q(x, t)$

$$p(x, t) = p_s(x)q(x, t) \quad (5.2.71)$$

и с помощью прямой подстановки убедимся, что $q(x, t)$ удовлетворяет обратному уравнению

$$\partial_t q(x, t) = A(x)\partial_x q(x, t) + \frac{1}{2} B(x)\partial_x^2 q(x, t). \quad (5.2.72)$$

Будем рассматривать решения вида

$$p(x, t) = P_\lambda(x)e^{-\lambda t} \quad (5.2.73)$$

$$q(x, t) = Q_\lambda(x)e^{-\lambda t}, \quad (5.2.74)$$

которые удовлетворяют уравнениям для собственных функций:

$$-\partial_x[A(x)P_\lambda(x)] + \frac{1}{2}\partial_x^2[B(x)P_\lambda(x)] = -\lambda P_\lambda(x) \quad (5.2.75)$$

$$A(x)\partial_x Q_{\lambda'}(x) + \frac{1}{2}B(x)\partial_x^2 Q_{\lambda'}(x) = -\lambda' Q_{\lambda'}(x). \quad (5.2.76)$$

Тогда можно показать путем непосредственного интегрирования, что

$$\begin{aligned} (\lambda' - \lambda) \int_a^b dx P_\lambda(x) Q_{\lambda'}(x) &= [Q_{\lambda'}(x) \{-A(x)P_\lambda(x) + \frac{1}{2}\partial_x[B(x)P_\lambda(x)]\} \\ &\quad - \frac{1}{2}B(x)P_\lambda(x)\partial_x Q_{\lambda'}(x)]_a^b. \end{aligned} \quad (5.2.77)$$

Применяя отражающее граничное условие к коэффициенту $Q_{\lambda'}(x)$, мы видим, что он обращается в нуль. Далее, пользуясь определением функции $q(x, t)$ через стационарное решение (5.2.71), нетрудно показать, что

$$\frac{1}{2}B(x)\partial_x Q_{\lambda'}(x) = -A(x)P_{\lambda'}(x) + \frac{1}{2}\partial_x[B(x)P_{\lambda'}(x)], \quad (5.2.78)$$

так что этот член также обращается в нуль. Таким образом, коэффициенты $Q_\lambda(x)$ и $P_\lambda(x)$ образуют биортогональную систему

$$\int_a^b dx P_\lambda(x) Q_{\lambda'}(x) = \delta_{\lambda\lambda'} \quad (5.2.79)$$

или же существуют две альтернативные ортогональные системы

$$\int_a^b dx p_s(x) Q_\lambda(x) Q_{\lambda'}(x) = \delta_{\lambda\lambda'} \quad (5.2.80)$$

$$\int_a^b dx [p_s(x)]^{-1} P_\lambda(x) P_{\lambda'}(x) = \delta_{\lambda\lambda'}. \quad (5.2.81)$$

Заметим, что подстановка $\lambda = \lambda' = 0$ дает нормировку стационарного решения $p_s(x)$, поскольку

$$P_0(x) = p_s(x) \quad (5.2.82)$$

$$Q_0(x) = 1. \quad (5.2.83)$$

Пользуясь этой ортогональностью, мы можем записать любое решение в собственных функциях. Так, если

$$p(x, t) = \sum_{\lambda} A_{\lambda} P_{\lambda}(x) e^{-\lambda t}, \quad (5.2.84)$$

то

$$\int_a^b dx Q_{\lambda}(x) p(x, 0) = A_{\lambda}. \quad (5.2.85)$$

Например, условная вероятность $p(x, t | x_0, 0)$ дается начальным условием

$$p(x, 0 | x_0, 0) = \delta(x - x_0), \quad (5.2.86)$$

так что

$$A_{\lambda} = \int_a^b dx Q_{\lambda}(x) \delta(x - x_0) = Q_{\lambda}(x_0), \quad (5.2.87)$$

откуда

$$p(x, t | x_0, 0) = \sum_{\lambda} P_{\lambda}(x) Q_{\lambda}(x_0) e^{-\lambda t}. \quad (5.2.88)$$

Автокорреляционную функцию можно записать в изящном виде

$$\langle x(t)x(0) \rangle = \int dx \int dx_0 x x_0 p(x, t | x_0, 0) p_s(x) \quad (5.2.89)$$

$$= \sum_{\lambda} [\int dx x P_{\lambda}(x)]^2 e^{-\lambda t}, \quad (5.2.90)$$

где мы воспользовались определением $Q_{\lambda}(x)$ (5.2.74).

б) Собственные функции для поглощающих границ

Этот случай очень сходен с предыдущим. Мы определяем P_{λ} и Q_{λ} так же, как это сделано выше, причем $p_s(x)$ по-прежнему является стационарным решением уравнения Фоккера — Планка с *отражающими* граничными условиями. При таком определении нам необходимо, чтобы

$$P_{\lambda}(a) = Q_{\lambda}(a) = P_{\lambda}(b) = Q_{\lambda}(b) = 0, \quad (5.2.91)$$

и доказательство ортогональности по-прежнему сохраняет силу. Далее, с использованием этого условия и уравнений (5.2.75, 76) вычисляются собственные функции; мы приходим к аналогичным результатам. Область значений λ , однако, не включает $\lambda = 0$, поэтому $p(x, t | x_0, 0) \rightarrow 0$, когда $t \rightarrow \infty$.

5.2.6. ПРИМЕРЫ

а) Винеровский процесс с поглощающими границами

Рассмотрим уравнение Фоккера — Планка

$$\partial_t p = \frac{1}{2} \partial_x^2 p \quad (5.2.92)$$

на интервале $(0, 1)$. Условие поглощения на границах требует, чтобы

$$p(0, t) = p(1, t) = 0, \quad (5.2.93)$$

а значит, собственными функциями являются $\sin(n\pi x)$; выполняем разложение в ряд Фурье по синусам

$$p(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} b_n(t) \sin(n\pi x) \quad (5.2.94)$$

и убеждаемся, что это разложение удовлетворяет (5.2.93). Начальное условие выбирается так, чтобы

$$p(x, 0) = \delta(x - x_0), \quad (5.2.95)$$

и тогда коэффициенты Фурье суть

$$b_n(0) = 2 \int_0^1 dx \delta(x - x_0) \sin(n\pi x) = 2 \sin(n\pi x_0). \quad (5.2.96)$$

Подставляя разложение (5.2.94) в (5.2.92), получаем

$$\dot{b}_n(t) = -\lambda_n b_n(t), \quad (5.2.97)$$

где

$$\lambda_n = n^2 \pi^2 / 2; \quad (5.2.98)$$

решение уравнения имеет вид

$$b_n(t) = b_n(0) \exp(-\lambda_n t). \quad (5.2.99)$$

Итак, мы получили решение (которое в силу начального условия (5.2.95) определяет условную вероятность $p(x, t | x_0, 0)$)

$$p(x, t | x_0, 0) = 2 \sum_{n=1}^{\infty} \exp(-\lambda_n t) \sin(n\pi x_0) \sin(n\pi x). \quad (5.2.100)$$

б) Винеровский процесс с отражающими границами

В этом случае граничное условие на интервале $(0, 1)$ сводится к

$$\partial_x p(0, t) = \partial_x p(1, t) = 0, \quad (5.2.101)$$

и собственными функциями теперь являются $\cos(n\pi x)$. Разлагая в ряд Фурье по косинусам

$$p(x, t) = \frac{1}{2} a_0 + \sum_{n=1}^{\infty} a_n(t) \cos(n\pi x) \quad (5.2.102)$$

с прежним начальным условием

$$p(x, 0) = \delta(x - x_0), \quad (5.2.103)$$

получаем

$$a_n(0) = 2 \int_0^1 dx \cos(n\pi x) \delta(x - x_0) = 2 \cos(n\pi x_0). \quad (5.2.104)$$

Аналогично предыдущему случаю находим

$$a_n(t) = a_n(0) \exp(-\lambda_n t), \quad (5.2.105)$$

где

$$\lambda_n = n^2 \pi^2 / 2 \quad (5.2.106)$$

так что

$$p(x, t | x_0, 0) = 1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \cos(n\pi x_0) \cos(n\pi x) \exp(-\lambda_n t). \quad (5.2.107)$$

При $t \rightarrow \infty$ процесс становится стационарным, со стационарным распределением

$$p_s(x) = \lim_{t \rightarrow \infty} p(x, t | x_0, 0) = 1. \quad (5.2.108)$$

Можно рассчитать стационарную автокорреляционную функцию:

$$\langle x(t)x(0) \rangle_s = \int_0^1 \int_0^1 dx dx_0 x x_0 p(x, t | x_0, 0) p_s(x). \quad (5.2.109)$$

Непосредственное интегрирование дает

$$\langle x(t)x(0) \rangle_s = \frac{1}{4} + \frac{8}{\pi^4} \sum_{n=0}^{\infty} \exp(-\lambda_{2n+1} t) (2n+1)^{-4}. \quad (5.2.110)$$

При $t \rightarrow \infty$ все экспоненты обращаются в нуль и

$$\langle x(t)x(0) \rangle_s \rightarrow \frac{1}{4} = [\langle x \rangle_s]^2. \quad (5.2.111)$$

При $t \rightarrow 0$, используя тождество из теории дзета-функций Римана

$$\langle x(t)x(0) \rangle_s \rightarrow \frac{1}{4} + \frac{8}{\pi^4} \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1)^{-4} = \frac{1}{3} = \langle x_s^2 \rangle, \quad (5.2.112)$$

получаем

$$\sum_{n=0}^{\infty} (2n+1)^{-4} = \frac{\pi^4}{96}. \quad (5.2.113)$$

в) Процесс Орнштейна — Уленбека

Как и в разд. 3.8.4, уравнение Фоккера — Планка имеет вид

$$\partial_t p(x, t) = \partial_x [kxp(x, t)] + \frac{1}{2} D \partial_x^2 p(x, t). \quad (5.2.114)$$

Уравнение для собственных функций имеет вид

$$d_x^2 Q_\lambda - \frac{2kx}{d} d_x Q_\lambda + \frac{2\lambda}{D} Q_\lambda = 0, \quad (5.2.115)$$

и после замены

$$y = x\sqrt{k/D} \quad (5.2.116)$$

$$d_y^2 Q_\lambda - 2y d_y Q_\lambda + (2\lambda/k) Q_\lambda = 0. \quad (5.2.117)$$

переходит в дифференциальное уравнение для *эрмитовых полиномов* [5.6]. Можно записать

$$Q_\lambda = (2^n n!)^{-1/2} H_n(x\sqrt{k/D}), \quad (5.2.118)$$

где

$$\lambda = nk; \quad (5.2.119)$$

эти решения нормируются так же, как в (5.2.79—81).

Стационарное решение, как и раньше, имеет вид

$$p_s(x) = (k/\pi D)^{1/2} \exp(-kx^2/D) \quad (5.2.120)$$

а общее решение может быть представлено в форме

$$p(x, t) = \sum_n \sqrt{[k/(2^n n! \pi D)]} \exp(-kx^2/D) H_n(x\sqrt{k/D}) e^{-nk t} A_n, \quad (5.2.121)$$

где

$$A_n = \int_{-\infty}^{\infty} dx p(x, 0) H_n(x\sqrt{k/D}) (2^n n!)^{-1/2}. \quad (5.2.122)$$

Этот результат можно также получить непосредственно из решения в явном виде для условной вероятности (разд. 3.8.4) с использованием

производящих функций для полиномов Эрмита. Временной масштаб релаксации к стационарному состоянию определяется собственными значениями

$$\lambda_n = nk. \quad (5.2.123)$$

Здесь k есть константа скорости детерминированной релаксации и определяет таким образом самое медленное время релаксации. Используя (5.2.90), можно непосредственно вычислить автокорреляционную функцию. Согласно результатам, полученным в [5.6],

$$H_1(y) = 2y, \quad (5.2.124)$$

так что из свойства ортогональности следует, что лишь при собственной функции, соответствующей $n = 1$, стоит отличный от нуля коэффициент. Мы вычисляем

$$\begin{aligned} \int x P_{\lambda_1}(x) dx &= \int_{-\infty}^{\infty} \sqrt{k/(2\pi D)} \exp(-kx^2/D) (2x\sqrt{k/D}) dx \\ &= \sqrt{D/2k}, \end{aligned} \quad (5.2.125)$$

и

$$\langle x(t)x(0) \rangle_s = \frac{D}{2k} e^{-kt}, \quad (5.2.126)$$

как мы уже нашли ранее (разд. 3.8.4, 4.4.4).

г) Рэлеевский процесс

Будем использовать модель амплитудных флуктуаций, развитую в разд. 4.4.5. Уравнение Фоккера — Планка имеет вид

$$\partial_t p(x, t) = \partial_x [(\gamma x - \mu/x)p(x, t)] + \mu \partial_x^2 p(x, t), \quad (5.2.127)$$

где

$$\mu = \varepsilon^2/2. \quad (5.2.128)$$

Нормированное стационарное решение на интервале $(0, \infty)$ имеет вид

$$p_s(x) = (\gamma x/\mu) \exp(-\gamma x^2/2\mu). \quad (5.2.129)$$

Уравнение для собственных функций можно записать в форме

$$d_x^2 Q_\lambda + (1/x - \gamma x/\mu) d_x Q_\lambda + (\lambda/\mu) Q_\lambda = 0. \quad (5.2.130)$$

Вводя

$$z = x^2 \gamma / 2\mu \quad (5.2.131)$$

получим уравнение

$$z d_z^2 Q_\lambda + (1 - z) d_z Q_\lambda + (\lambda/2\gamma) Q_\lambda = 0, \quad (5.2.132)$$

которое переходит в дифференциальное уравнение для *полиномов Лагерра* [5.6], если

$$\lambda = 2n\gamma. \quad (5.2.133)$$

Можно записать (в нормированной форме)

$$Q_\lambda(x) = L_n(\gamma x^2/2\mu). \quad (5.2.134)$$

Отсюда условная вероятность равна

$$p(x, t | x_0, 0) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\gamma x}{\mu} \exp\left(-\frac{\gamma x^2}{2\mu}\right) L_n\left(\frac{\gamma x_0^2}{2\mu}\right) L_n\left(\frac{\gamma x^2}{2\mu}\right) e^{-2n\gamma t}. \quad (5.2.135)$$

Функцию автокорреляции можно рассчитать так же, как в (5.2.90):

$$\langle x(t)x(0) \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \left[\int_0^{\infty} x dx \frac{\gamma x}{\mu} \exp\left(-\frac{\gamma x^2}{2\mu}\right) L_n\left(\frac{\gamma x^2}{2\mu}\right) \right]^2 \exp(-2n\gamma t). \quad (5.2.136)$$

Используя

$$\int_0^{\infty} dz z^\alpha e^{-z} L_n(z) = (-1)^n \Gamma(\alpha + 1) \binom{\alpha}{n}, \quad (5.2.137)$$

находим

$$\langle x(t)x(0) \rangle = \frac{2\mu}{\gamma} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\pi}{4} \binom{\frac{1}{2}}{n}^2 \exp(-2n\gamma t). \quad (5.2.138)$$

5.2.7. ВРЕМЯ ДОСТИЖЕНИЯ ГРАНИЦЫ ДЛЯ СЛУЧАЯ ОДНОРОДНЫХ ПРОЦЕССОВ

Нередко возникает следующая задача: как долго частица, положение которой описывается уравнением Фоккера — Планка, будет оставаться в заданном интервале значений x . Решение этой задачи можно получить с помощью обратного уравнения Фоккера — Планка, как показано в разд. 3.6.

а) Две поглощающие границы

Пусть в начальный момент $t = 0$ частица имеет координату x . Нас интересует, как долго она будет находиться на интервале (a, b) , который содержит x :

$$a \leq x \leq b. \quad (5.2.139)$$

Представим себе, что в точках a и b имеют место поглощающие границы, так что частица, попавшая в эти точки, удаляется из системы. Другими словами, если частица находится на интервале (a, b) , то она пока еще не выходила за его пределы.

При этих условиях вероятность того, что в момент t частица еще находится в интервале (a, b) , есть

$$\int_a^b dx' p(x', t | x, 0) \equiv G(x, t). \quad (5.2.140)$$

Обозначим через T момент времени, в который частица покидает интервал (a, b) . Тогда (5.2.140) можно переписать в виде

$$\text{Prob}(T \geq t) = \int_a^b dx' p(x', t | x, 0), \quad (5.2.141)$$

откуда следует, что $G(x, t)$ есть то же самое, что и $\text{Prob}(T \geq t)$. Поскольку система однородна по времени, мы можем записать

$$p(x', t | x, 0) = p(x', 0 | x, -t) \quad (5.2.142)$$

и представить обратное уравнение Фоккера — Планка в виде

$$\partial_t p(x', t | x, 0) = A(x) \partial_x p(x', t | x, 0) + \frac{1}{2} B(x) \partial_x^2 p(x', t | x, 0). \quad (5.2.143)$$

Таким образом, $G(x, t)$ удовлетворяет уравнению

$$\partial_t G(x, t) = A(x) \partial_x G(x, t) + \frac{1}{2} B(x) \partial_x^2 G(x, t). \quad (5.2.144)$$

Граничными условиями, очевидно, служат

$$p(x', 0 | x, 0) = \delta(x - x'),$$

откуда

$$\begin{aligned} G(x, 0) &= 1, \quad a \leq x \leq b \\ G(x, 0) &= 0, \quad x < a, \quad x > b. \end{aligned} \quad (5.2.145)$$

Если же $x = a$ или b , то частица немедленно поглощается, поэтому когда $x = a$ или b , т. е.

$$\begin{aligned} \text{Prob}(T \geq t) &= 0 \\ G(a, t) = G(b, t) &= 0. \end{aligned} \quad (5.2.146)$$

Поскольку $G(x, t)$ есть вероятность того, что $T \geq t$, среднее значение любой функции T есть

$$\langle f(T) \rangle = - \int_0^{\infty} f(t) dG(x, t). \quad (5.2.147)$$

Таким образом, среднее время достижения границы интервала

$$T(x) = \langle T \rangle \quad (5.2.148)$$

дается выражением

$$T(x) = - \int_0^{\infty} t \partial_t G(x, t) dt, \quad (5.2.149)$$

$$= \int_0^{\infty} G(x, t) dt \quad (5.2.150)$$

в результате интегрирования по частям.

Аналогично, определив

$$T_n(x) = \langle T^n \rangle, \quad (5.2.151)$$

находим

$$T_n(x) = \int_0^{\infty} t^{n-1} G(x, t) dt. \quad (5.2.152)$$

Можно получить несложное обыкновенное дифференциальное уравнение для $T(x)$, используя (5.2.150) и интегрируя (5.2.144) на интервале $(0, \infty)$. Замечая, что

$$\int_0^{\infty} \partial_t G(x, t) dt = G(x, \infty) - G(x, 0) = -1, \quad (5.2.153)$$

имеем

$$A(x)\partial_x T(x) + \frac{1}{2} B(x)\partial_x^2 T(x) = -1 \quad (5.2.154)$$

с граничным условием

$$T(a) = T(b) = 0. \quad (5.2.155)$$

Аналогично мы видим, что

$$-nT_{n-1}(x) = A(x)\partial_x T_n(x) + \frac{1}{2} B(x)\partial_x^2 T_n(x). \quad (5.2.156)$$

Это означает, что повторным интегрированием можно рассчитать все моменты для времени выхода за пределы интервала.

Решения уравнений. Уравнение (5.2.154) может быть непосредственно проинтегрировано. Решение, после некоторых преобразований, представляется в виде

$$\psi(x) = \exp \left\{ \int_a^x dx' [2A(x')/B(x')] \right\}. \quad (5.2.157)$$

Находим:

$$T(x) = \frac{2 \left[\left(\int_a^x \frac{dy}{\psi(y)} \right) \int_x^b \frac{dy'}{\psi(y')} \int_a^{y'} \frac{dz \psi(z)}{B(z)} - \left(\int_x^b \frac{dy}{\psi(y)} \right) \int_a^x \frac{dy'}{\psi(y')} \int_a^{y'} \frac{dz \psi(z)}{B(z)} \right]}{\int_a^b \frac{dy}{\psi(y)}}. \quad (5.2.158)$$

б) Одна поглощающая граница

Будем рассматривать движение по-прежнему на интервале (a, b) , считая теперь границу a отражающей. Тогда граничные условия принимают вид

$$\partial_x G(a, t) = 0 \quad (5.2.159a)$$

$$G(b, t) = 0, \quad (5.2.159б)$$

как вытекает из условий для обратного уравнения Фоккера — Планка, полученных в разд. 5.2.4. Решая (5.2.154) с соответствующим граничным условием, получаем

$$T(x) = 2 \int_x^b \frac{dy}{\psi(y)} \int_a^y \frac{\psi(z)}{B(z)} dz \quad \begin{array}{l} a \text{ отражающая} \\ b \text{ поглощающая} \\ a < b. \end{array} \quad (5.2.160)$$

Аналогично можно найти

$$T(x) = 2 \int_a^x \frac{dy}{\psi(y)} \int_y^b \frac{\psi(z)}{B(z)} dz \quad \begin{array}{l} a \text{ поглощающая} \\ b \text{ отражающая} \\ a < b. \end{array} \quad (5.2.161)$$

в) Практическое приложение: задача о переходе через потенциальный барьер

Пусть движение точки описывается уравнением Фоккера — Планка

$$\partial_t p(x, t) = \partial_x [U'(x)p(x, t)] + D \partial_x^2 p(x, t). \quad (5.2.162)$$

Потенциал имеет максимумы и минимумы, как показано на фиг. 5.3. Предположим, что движение происходит на бесконечном интервале, так что стационарное решение имеет вид

$$p_s(x) = \mathcal{N} \exp [-U(x)/D]. \quad (5.2.163)$$

Это распределение бимодально (рис. 5.3), так что относительно велика вероятность того, что частица находится справа или слева от b , но

не вблизи b . Чему равно среднее время выхода из левой потенциальной ямы? Другими словами, каково среднее время перехода из a в точку x , когда x находится в окрестности b ? Воспользуемся решением (5.2.160), заменяя

$$b \rightarrow x_0$$

$$a \rightarrow -\infty \quad (5.2.164)$$

$$x \rightarrow a,$$

так что

$$T(a \rightarrow x_0) = \frac{1}{D} \int_a^{x_0} dy \exp[U(y)/D] \int_{-\infty}^y \exp[-U(z)/D] dz. \quad (5.2.165)$$

Если центральный максимум функции $U(x)$ велик, а D мало, то $\exp[U(y)/D]$ имеет острый пик в точке $x = b$, в то время как значение $\exp[-U(z)/D]$ очень мало вблизи $z = b$. Поэтому $\int_{-\infty}^y \exp[-U(z)/D] dz$ оказывается очень медленно изменяющейся функцией y вблизи $y = b$.

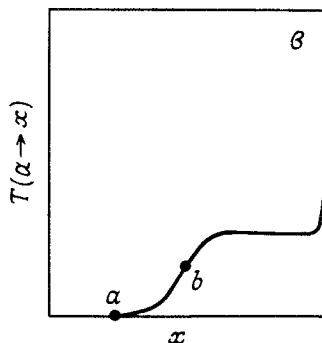
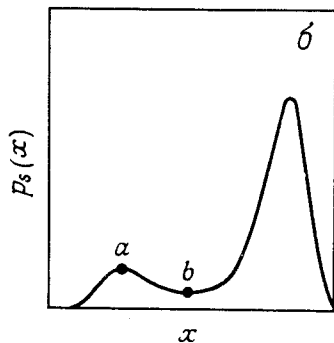
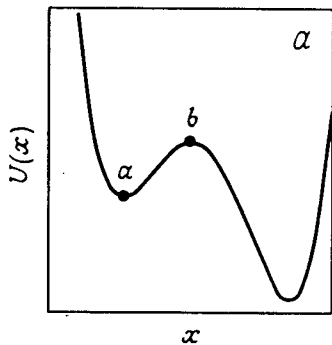


Рис. 5.3. a — потенциал $U(x)$ с двумя ямами; b — стационарное распределение $p_s(x)$; v — среднее время первого перехода частицы из a в x , $T(a \rightarrow x_0)$.

Значение этого интеграла будет приблизительно постоянным для таких y , при которых $\exp[U(y)/D]$ существенно отличается от нуля. Это позволяет нам принять во внутреннем интеграле $y = b$ и вынести полученный постоянный множитель из-под интеграла по y . Таким образом, для (5.2.165) мы получим приближенное выражение

$$T(a \rightarrow x_0) \simeq \left\{ \frac{1}{D} \int_{-\infty}^b dy \exp[-U(y)/D] \right\} \int_a^{x_0} dy \exp[U(y)/D]. \quad (5.2.166)$$

Заметим, что в силу определения $p_s(x)$ в (5.2.163) можно утверждать, что

$$\int_{-\infty}^b dy \exp[-U(z)/D] = n_a / \mathcal{N}. \quad (5.2.167)$$

Это означает, что n_a есть вероятность нахождения частицы слева от b в стационарной системе.

График зависимости $T(a \rightarrow x_0)$ от x_0 построен на рис. 5.3. Видно, что среднее время прихода в x_0 очень невелико, если x_0 находится в левой яме, и очень велико, если x_0 находится в правой яме. Это означает, что частица, переходя через барьер в правую потенциальную яму, затрачивает основную часть времени на само преодоление барьера. Есть все основания называть *временем выхода* то время, за которое частица, изначально находящаяся в точке a , попадает в точку вблизи c , поскольку это время мало зависит от истинного положения начальной и конечной точек. Это время мы можем оценить следующим образом. Пусть вблизи точки b справедливо равенство

$$U(x) \simeq U(b) - \frac{1}{2} \left(\frac{x-b}{\delta} \right)^2, \quad (5.2.168)$$

а вблизи точки a

$$U(x) \simeq U(a) + \frac{1}{2} \left(\frac{x-a}{\alpha} \right)^2. \quad (5.2.169)$$

Постоянный множитель в (5.2.166) можно оценить как

$$\int_{-\infty}^b dz \exp[-U(z)/D] \sim \int_{-\infty}^{\infty} dz \exp \left[-\frac{U(a)}{D} - \frac{(z-a)^2}{2D\alpha^2} \right] \quad (5.2.170)$$

$$\sim \alpha \sqrt{2\pi D} \exp[-U(a)/D], \quad (5.2.171)$$

а интеграл, считая, что x_0 находится много правее центральной точки b , можно привести к виду

$$\int_a^{x_0} dy \exp U(y)/D \sim \int_{-\infty}^{\infty} dy \exp \left[\frac{U(b)}{D} - \frac{(y-b)^2}{2D\delta^2} \right] \quad (5.2.172)$$

$$= \delta \sqrt{2\pi D} \exp [U(b)/D]. \quad (5.2.173)$$

Подставляя оба полученных выражения в (5.2.166), получаем

$$T(a \rightarrow x_0) \simeq 2\alpha\delta\pi \exp \{[U(b) - U(a)]/D\}. \quad (5.2.174)$$

Это — классическая формула Аррениуса в теории химических реакций. Для моделирования химической реакции используется координата x , причем $x = a$ соответствует веществу A , а $x = c$ соответствует веществу C . Моделью реакции служит вышеуказанный диффузионный процесс, в котором два различных химических вещества разделены потенциальным барьером в точке b . Для химической реакции из статистической механики следует, что

$$D = kT, \quad (5.2.175)$$

где k — постоянная Больцмана, а T — абсолютная температура. Мы видим, что зависимость от температуры определяется в основном экспоненциальным множителем, который часто записывают в виде

$$\exp (\Delta E/kT) \quad (5.2.176)$$

и который предсказывает весьма характерную зависимость от температуры. Интуитивно смысл этого множителя вполне ясен: он описывает вероятность того, что значение энергии превысит высоту потенциального барьера в системе, находящейся в тепловом равновесии. Молекулы, энергия которых достигнет этого значения, с некоторой конечной вероятностью вступят в реакцию.

Подобные задачи мы рассмотрим во всех подробностях в гл. 9.

5.2.8. ВЕРОЯТНОСТЬ ДОСТИЖЕНИЯ ТОГО ИЛИ ИНОГО КОНЦА ИНТЕРВАЛА

Какова вероятность того, что частица, находящаяся вначале в точке x на интервале (a, b) , покинет его через точку a , и чему равно среднее время выхода?

Полная вероятность того, что в момент t частица выйдет через точку a , дается интегралом потока вероятности в точке a по времени. Таким образом, мы определим эту вероятность как

$$g_a(x, t) = - \int_0^t dt' J(a, t' | x, 0) \quad (5.2.177)$$

$$= \int_0^t dt' \{ -A(a)p(a, t' | x, 0) + \frac{1}{2} \partial_a [B(a)p(a, t' | x, 0)] \} \quad (5.2.178)$$

(знак минус выбран потому, что поток должен быть направлен влево). Кроме того,

$$g_b(x, t) = \int_0^t dt' \{A(b)p(b, t'|x, 0) - \frac{1}{2}\partial_b[B(b)p(b, t'|x, 0)]\}. \quad (5.2.179)$$

Эти выражения описывают вероятности того, что частица в момент t покинет интервал соответственно в точке a или b . Вероятность того, что частица покинет интервал (скажем, в точке a) до момента t равна

$$\text{Prob}(T_a < t) = g_a(x, t)/g_a(x, \infty). \quad (5.2.180)$$

Найдем теперь уравнение для $g_a(x, t)$. Воспользуемся тем, что $p(a, t|x, 0)$ удовлетворяет обратному уравнению Фоккера — Планка. Тогда

$$\begin{aligned} A(x)\partial_x g_a(x, t) + \frac{1}{2}B(x)\partial_x^2 g_a(x, t) &= - \int_0^t dt' \partial_{t'} J(a, t'|x, 0) \\ &= - J(a, t|x, 0) \\ &= \partial_t g_a(x, t). \end{aligned} \quad (5.2.181)$$

Среднее время, через которое частица покинет интервал в точке a , равно

$$T(a, x) = \int_0^\infty t \partial_t \text{Prob}(T_a < t) dt = - \int_0^\infty g_a(x, t) dt / g_a(x, \infty). \quad (5.2.182)$$

Интегрируя (5.2.181) по времени, получим

$$A(x)\partial_x[\pi_a(x)T(a, x)] + \frac{1}{2}B(x)\partial_x^2[\pi_a(x)T(a, x)] = -\pi_a(x), \quad (5.2.183)$$

где по определению

$$\pi_a(x) = \text{вероятность выхода в точке } a = g_a(x, \infty). \quad (5.2.184)$$

Граничные условия для (5.2.183) сразу следуют из граничных условий для обратного уравнения Фоккера — Планка:

$$\pi_a(a)T(a, a) = \pi_a(b)T(a, b) = 0. \quad (5.2.185)$$

В первом из них, очевидно, $T(a, a) = 0$ (время, за которое частица из точки a попадет в точку a , равно нулю), а во втором $\pi_a(b) = 0$ (вероятность выхода через точку a для частицы, находящейся в точке b , равна нулю).

Устремляя в (5.2.181) $t \rightarrow \infty$, мы видим, что при этом частица уже не находится на интервале (a, b) . Следовательно, правая часть стре-

мится к нулю, и мы получаем

$$A(x)\partial_x\pi_a(x) + \frac{1}{2}B(x)\partial_x^2\pi_a(x) = 0, \quad (5.2.186)$$

с граничными условиями

$$\begin{aligned} \pi_a(a) &= 1 \\ \pi_a(b) &= 0. \end{aligned} \quad (5.2.187)$$

При этих граничных условиях, а также при условии

$$\pi_a(x) + \pi_b(x) = 1 \quad (5.2.188)$$

решение (5.2.186) есть

$$\pi_a(x) = \left[\int_x^b dy \psi(y) \right] / \int_a^b dy \psi(y) \quad (5.2.189)$$

$$\pi_b(x) = \left[\int_a^x dy \psi(y) \right] / \int_a^b dy \psi(y), \quad (5.2.190)$$

где $\psi(x)$ определена в (5.2.157).

Эти формулы находят применение в задаче о релаксации распределения, которое в начальный момент концентрируется около неустойчивой стационарной точки (разд. 9.1.4).

5.3. УРАВНЕНИЯ ФОККЕРА — ПЛАНКА В МНОГОМЕРНОМ СЛУЧАЕ

Уравнения Фоккера — Планка в случае многих переменных описывают гораздо более многообразные и сложные зависимости. В качестве границ выступают уже не просто конечные точки отрезка, а кривые и поверхности; кроме того, характер границы может изменяться от участка к участку. Стационарные решения даже для отражающих границ могут соответствовать ненулевым потокам вероятности, и методы собственных функций уже далеко не так просты.

Тем не менее между одномерным и многомерным случаями существуют полезные аналогии, вот почему в данном разделе сохранен порядок, которому мы следовали, рассматривая уравнения Фоккера — Планка для одной переменной.

5.3.1 ЗАМЕНА ПЕРЕМЕННЫХ

Пусть у нас имеется уравнение Фоккера — Планка в переменных x_i :

$$\partial_t p(\mathbf{x}, t) = - \sum_i \partial_i [A_i(\mathbf{x})p(\mathbf{x}, t)] + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \partial_i \partial_j [B_{ij}(\mathbf{x})p(\mathbf{x}, t)]. \quad (5.3.1)$$

Нам необходимо перейти к уравнению в переменных

$$y_i = f_i(\mathbf{x}), \quad (5.3.2)$$

где f_i — некоторые дифференцируемые независимые функции. Обозначим через $\tilde{p}(y, t)$ плотность вероятности для новой переменной, которая дается выражением

$$\tilde{p}(y, t) = p(\mathbf{x}, t) \left| \frac{\partial(x_1, x_2 \dots)}{\partial(y_1, y_2 \dots)} \right|. \quad (5.3.3)$$

Простейший путь перехода к новым переменным состоит в использовании формулы Ито для соответствующего СДУ

$$dx(t) = A(x)dt + \sqrt{B(x)} dW(t), \quad (5.3.4)$$

с тем чтобы из полученного стохастического дифференциального уравнения вывести уравнение Фоккера — Планка в новых переменных (см. разд. 4.3.4).

Результат оказывается довольно сложным. В ряде случаев прямое использование формулы (5.3.3) оказывается более предпочтительным. Громоздких вычислений удастся избежать лишь при всестороннем использовании свойств симметрии и различных упрощающих предположениях.

Пример: Переход от декартовых координат к полярным. В качестве примера рассмотрим переход к полярным координатам для рэлеевского процесса, который ранее рассматривался с использованием СДУ в разд. 4.4.5. Уравнение Фоккера — Планка в прямоугольных координатах имеет вид

$$\partial_t p(E_1, E_2, t) = \gamma \frac{\partial}{\partial E_1} E_1 p + \gamma \frac{\partial}{\partial E_2} E_2 p + \frac{1}{2} \varepsilon^2 \left(\frac{\partial^2 p}{\partial E_1^2} + \frac{\partial^2 p}{\partial E_2^2} \right); \quad (5.3.5)$$

мы же хотим записать его в координатах a и ϕ , которые связаны с прежними координатами соотношениями

$$E_1 = a \cos \phi \quad (5.3.6)$$

$$E_2 = a \sin \phi.$$

Якобиан равен

$$|J| = \frac{\partial(E_1, E_2)}{\partial(a, \phi)} = \begin{vmatrix} \cos \phi & -a \sin \phi \\ \sin \phi & a \cos \phi \end{vmatrix} \\ = a. \quad (5.3.7)$$

Пользуясь представлением лапласиана в полярных координатах, запишем

$$\frac{\partial^2}{\partial E_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial E_2^2} = \frac{1}{a^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{1}{a} \frac{\partial}{\partial a} \left(a \frac{\partial}{\partial a} \right), \quad (5.3.8)$$

а также преобразуем (5.3.6) к виду

$$\left. \begin{aligned} a &= \sqrt{E_1^2 + E_2^2} \\ \phi &= \tan^{-1}(E_2/E_1). \end{aligned} \right\} \quad (5.3.9)$$

Заметим, что

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial a}{\partial E_1} &= \frac{E_1}{\sqrt{E_1^2 + E_2^2}} = \cos \phi \\ \frac{\partial a}{\partial E_2} &= \sin \phi \end{aligned} \right\} \quad (5.3.10)$$

и

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial \phi}{\partial E_2} &= \frac{E}{E_1^2 + E_2^2} = \cos \phi / a \\ \frac{\partial \phi}{\partial E_1} &= -\sin \phi / a. \end{aligned} \right\} \quad (5.3.11)$$

Отсюда

$$\begin{aligned} &\frac{\partial}{\partial E_1} E_1 p + \frac{\partial}{\partial E_2} E_2 p \\ &= 2p + E_1 \left(\frac{\partial p}{\partial a} \frac{\partial a}{\partial E_1} + \frac{\partial p}{\partial \phi} \frac{\partial \phi}{\partial E_1} \right) + E_2 \left(\frac{\partial p}{\partial a} \frac{\partial a}{\partial E_2} + \frac{\partial p}{\partial \phi} \frac{\partial \phi}{\partial E_2} \right) \\ &= 2p + a \frac{\partial p}{\partial a} = \frac{1}{a} \frac{\partial}{\partial a} (a^2 p). \end{aligned} \quad (5.3.12)$$

Обозначим через $\bar{p}(a, \phi)$ функцию плотности распределения в полярных координатах. С использованием якобиана (5.3.7) можно записать

$$\bar{p}(a, \phi) = \left| \frac{\partial(E_1, E_2)}{\partial(a, \phi)} \right| p(E_1, E_2) = ap(E_1, E_2). \quad (5.3.13)$$

Теперь, объединяя (5.3.5, 8, 12, 13), получим

$$\frac{\partial \bar{p}}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial a} \left[\left(-\gamma a + \frac{\varepsilon^2}{2a} \right) \bar{p} \right] + \frac{\varepsilon^2}{2} \left(\frac{1}{a^2} \frac{\partial^2 \bar{p}}{\partial \phi^2} + \frac{\partial^2 \bar{p}}{\partial a^2} \right). \quad (5.3.14)$$

Это и есть уравнение Фоккера — Планка, соответствующее двум стохастическим дифференциальным уравнениям в разд. 4.4.5, полученным путем замены переменных по формуле Ито.

5.3.2. ГРАНИЧНЫЕ УСЛОВИЯ

В общих чертах мы уже коснулись граничных условий в разд. 5.2.1, где они рассматривались с точки зрения потока вероятности. Судя по всему, граничные условия для произвольного многомерного уравнения Фоккера — Планка еще не исследованы во всей их полноте. Поэтому в настоящей книге мы будем рассматривать по преимуществу *отражающую граничную поверхность* S , для которой

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{J} = 0 \quad S, \quad (5.3.15)$$

где \mathbf{n} — нормаль к поверхности, а

$$J_i(\mathbf{x}, t) = A_i(\mathbf{x}, t)p(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{2} \sum_j \frac{\partial}{\partial x_j} B_{ij}(\mathbf{x}, t)p(\mathbf{x}, t), \quad (5.3.16)$$

а также *поглощающую граничную поверхность*, где

$$p(\mathbf{x}, t) = 0 \quad \text{при } \mathbf{x} \in S. \quad (5.3.17)$$

На практике некоторые участки поверхности могут быть поглощающими, а другие — отражающими. Если A_i или B_{ij} имеют разрыв на поверхности S , то мы потребуем, чтобы

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{J}_1 = \mathbf{n} \cdot \mathbf{J}_2 \quad \text{на } S \quad (5.3.18)$$

$$p_1(\mathbf{x}) = p_2(\mathbf{x}) \quad \text{при } \mathbf{x} \in S.$$

Тангенциальная компонента тока может при этом не быть непрерывной.

Граничные условия для обратного уравнения уже были получены в разд. 5.2.4. Приведем их здесь для полноты:

$$\text{Поглощающая граница: } p(\mathbf{x}, t | \mathbf{y}, t') = 0 \quad \mathbf{y} \in \mathcal{S} \quad (5.3.19)$$

$$\text{Отражающая граница: } \sum_{i,j} n_i B_{ij}(\mathbf{y}) \frac{\partial}{\partial y_j} p(\mathbf{x}, t | \mathbf{y}, t') = 0 \quad \mathbf{y} \in \mathcal{S}. \quad (5.3.20)$$

5.3.3. СТАЦИОНАРНЫЕ РЕШЕНИЯ: ПОТЕНЦИАЛЬНЫЕ УСЛОВИЯ

Большой класс систем описывается уравнениями Фоккера — Планка, допускающими стационарное распределение, при котором поток вероятности обращается в нуль для всех \mathbf{x} из \mathcal{P} . В этом случае, преобразуя определение потока J (5.3.16), мы получим полностью эквивалентное уравнение

$$\frac{1}{2} \sum_j B_{ij}(\mathbf{x}) \frac{\partial p_s(\mathbf{x})}{\partial x_j} = p_s(\mathbf{x}) \left[A_i(\mathbf{x}) - \frac{1}{2} \sum_j \frac{\partial}{\partial x_j} B_{ij}(\mathbf{x}) \right]. \quad (5.3.21)$$

Если матрица $B_{ij}(\mathbf{x})$ имеет обратную для всех \mathbf{x} , мы можем переписать (5.3.21) в виде

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \log [p_s(\mathbf{x})] = \sum_k B_{ik}^{-1}(\mathbf{x}) \left[2A_k(\mathbf{x}) - \sum_j \frac{\partial}{\partial x_j} B_{kj}(\mathbf{x}) \right] \quad (5.3.22)$$

$$\equiv Z_i[A, B, \mathbf{x}]. \quad (5.3.23)$$

Это уравнение не может удовлетворяться для произвольных $B_{ij}(\mathbf{x})$ и $A_i(\mathbf{x})$, поскольку его левая часть представляет собой градиент. Следовательно, Z_i также должно быть градиентом, для чего необходимым и достаточным условием является равенство нулю его ротора, т. е.

$$\frac{\partial Z_i}{\partial x_j} = \frac{\partial Z_j}{\partial x_i}. \quad (5.3.24)$$

Если это условие выполнено, то стационарное решение можно получить простым интегрированием (5.3.22):

$$p_s(\mathbf{x}) = \exp \left\{ \int^{\mathbf{x}} d\mathbf{x}' \cdot \mathbf{Z}[A, B, \mathbf{x}'] \right\}. \quad (5.3.25)$$

Условие (5.3.24) называется *потенциальным* условием, поскольку величины Z_i определяются через производные от $\ln[p_s(\mathbf{x})]$, так что этот логарифм может рассматриваться как некоторый потенциал — $\phi(\mathbf{x})$, т. е.

$$p_s(\mathbf{x}) = \exp [-\phi(\mathbf{x})] \quad (5.3.26)$$

и

$$\phi(\mathbf{x}) = -\int dx' \cdot \mathbf{Z}[A, B, \mathbf{x}']. \quad (5.3.27)$$

Пример: рэлеевский процесс в полярных координатах. Из (5.3.14) находим

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} -\gamma a + \varepsilon^2/2a \\ 0 \end{bmatrix} \quad (5.3.28)$$

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} \varepsilon^2 & 0 \\ 0 & \varepsilon^2/a^2 \end{bmatrix}, \quad (5.3.29)$$

откуда

$$\sum_j \frac{\partial}{\partial x_j} B_{a,j} = \sum_j \frac{\partial}{\partial x_j} B_{\phi,j} = 0, \quad (5.3.30)$$

так что

$$\mathbf{Z} = 2 \mathbf{B}^{-1} \mathbf{A} = \begin{bmatrix} -2\gamma a/\varepsilon^2 + 1/a \\ 0 \end{bmatrix} \quad (5.3.31)$$

и, очевидно,

$$\frac{\partial Z_a}{\partial \phi} = \frac{\partial Z_\phi}{\partial a} = 0. \quad (5.3.32)$$

Тогда стационарное решение имеет вид

$$p_s(a, \phi) = \exp \left[\int^{(a, \phi)} (d\phi Z_\phi + da Z_a) \right] \quad (5.3.33)$$

$$= \mathcal{N} \exp \left(-\frac{\gamma a^2}{\varepsilon^2} + \log a \right) \quad (5.3.34)$$

$$= \mathcal{N} a \exp \left(-\frac{\gamma a^2}{\varepsilon^2} \right). \quad (5.3.35)$$

5.3.4. ДЕТАЛЬНЫЙ БАЛАНС

а) Определение детального баланса

Ситуация, когда стационарное решение некоторого уравнения Фоккера — Планка соответствует исчезновению потока вероятности, является частным случаем физического явления *детального баланса*. Марковский процесс удовлетворяет детальному балансу, если, грубо гово-

ря, в стационарном случае всякий возможный переход уравнивается соответствующим обратным переходом. Поскольку понятие детального баланса пришло из физики, разберем его более подробно на физическом примере. Рассмотрим газ частиц с координатами r и скоростями v . Под переходом будем понимать, что частица, имеющая в момент t координату и скорость (r, v) , приобретает к моменту $t + \tau$ координату и скорость (r', v') . Плотность вероятности этого перехода есть *совместная плотность вероятности* $p(r', v', t + \tau; r, v, t)$. Мы можем обозначить этот переход как

$$(r, v, t) \rightarrow (r', v', t + \tau). \quad (5.5.36)$$

Обратный переход не сводится просто к перемене местами штрихованных и нештрихованных величин: его следует записать в виде

$$(r', -v', t) \rightarrow (r, -v, t + \tau). \quad (5.3.37)$$

Обратный переход соответствует *обратному течению времени*, и поэтому требует перемены знаков скоростей: движение от r' к r происходит в направлении, обратном движению от r к r' .

Плотность вероятности для обратного перехода является, таким образом, совместной плотностью вероятности

$$p(r, -v, t + \tau; r', -v', t). \quad (5.3.38)$$

Принцип детального баланса требует, чтобы эти две плотности вероятности были равны между собой, когда система находится в стационарном состоянии. Следовательно, можно записать

$$p_s(r', v', \tau; r, v, 0) = p_s(r, -v, \tau; r', -v', 0). \quad (5.3.39)$$

Принцип детального баланса может при определенных условиях быть выведен из законов физики; см. [5.7] и разд. 5.3.6.

Для марковского процесса равенство (5.3.39) можно переписать в более подробном виде:

$$p(r', v', \tau | r, v, 0) p_s(r, v) = p(r, -v, \tau | r', -v', 0) p_s(r', -v'), \quad (5.3.40)$$

где условные вероятности теперь относятся к соответствующему однородному марковскому процессу (если бы процесс был не марковским, они относились бы только к стационарной системе).

В общем виде понятие детального баланса формулируется для произвольных величин x_i , которые при обращении времени изменяются по закону

$$x_i \rightarrow \varepsilon_i x_i \quad (5.3.41)$$

$$\varepsilon_i = \pm 1. \quad (5.3.42)$$

Если величина сохраняет знак, она называется четной, если меняет его на противоположный, — нечетной. В вышеприведенном примере координата является четной величиной, а скорость — нечетной.

Итак, понятие детального баланса может быть определено равенством

$$p_s(\mathbf{x}, t + \tau; \mathbf{x}', t) = p_s(\boldsymbol{\varepsilon}\mathbf{x}', t + \tau; \boldsymbol{\varepsilon}\mathbf{x}, t), \quad (5.3.43)$$

где под $\boldsymbol{\varepsilon}\mathbf{x}$ мы понимаем $(\varepsilon_1 x_1, \varepsilon_2 x_2, \dots)$.

Заметим, что при $\tau = 0$ (5.3.43) переходит в

$$\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')p_s(\mathbf{x}') = \delta(\boldsymbol{\varepsilon}\mathbf{x} - \boldsymbol{\varepsilon}\mathbf{x}')p_s(\boldsymbol{\varepsilon}\mathbf{x}). \quad (5.3.44)$$

Две дельта-функции равны между собой, так как может изменяться лишь знак аргумента, но не абсолютная величина. Таким образом, из определения принципа детального баланса (5.3.43) следует, что

$$p_s(\mathbf{x}) = p_s(\boldsymbol{\varepsilon}\mathbf{x}). \quad (5.3.45)$$

Переходя к условным вероятностям, получим

$$p(\mathbf{x}, \tau | \mathbf{x}', 0)p_s(\mathbf{x}') = p(\boldsymbol{\varepsilon}\mathbf{x}', \tau | \boldsymbol{\varepsilon}\mathbf{x}, 0)p_s(\mathbf{x}). \quad (5.3.46)$$

б) Общие следствия из детального баланса

Важным следствием из (5.3.45) является тот факт, что

$$\langle \mathbf{x} \rangle_s = \boldsymbol{\varepsilon} \langle \mathbf{x} \rangle_s \quad (5.3.47)$$

(и, следовательно, все нечетные переменные имеют нулевое среднее значение), а также для автокорреляционной функции

$$G(\tau) \equiv \langle \mathbf{x}(\tau)\mathbf{x}^T(0) \rangle_s$$

мы имеем

$$G(\tau) = \boldsymbol{\varepsilon} \langle \mathbf{x}(0)\mathbf{x}^T(\tau) \rangle_s \boldsymbol{\varepsilon},$$

откуда

$$G(\tau) = \boldsymbol{\varepsilon} G^T(\tau) \boldsymbol{\varepsilon}. \quad (5.3.48)$$

Полагая $\tau = 0$ и учитывая, что для корреляционной матрицы $\sigma = \sigma^T$, получаем

$$\sigma \boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon} \sigma. \quad (5.3.49)$$

Для матричной спектральной плотности

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

из (5.3.48) следует, что

$$S(\omega) = \varepsilon S^T(\omega) \varepsilon. \quad (5.3.50)$$

в) Обстоятельства, требующие расширения понятия детального баланса

Может случиться, что уравнение, описывающее марковский процесс, имеет несколько стационарных решений. В таком случае вместо (5.3.43) может выполняться более слабая формулировка понятия детального баланса, а именно

$$p_1^i(\mathbf{x}, t + \tau; \mathbf{x}', t) = p_2^i(\varepsilon \mathbf{x}', t + \tau; \varepsilon \mathbf{x}, t), \quad (5.3.51)$$

где индексы 1 и 2 соответствуют двум различным стационарным решениям. Подобная ситуация может возникнуть, если какая-либо величина является нечетной по отношению к обращению времени, но ее абсолютное значение не изменяется со временем. Этим свойством, например, обладает полный момент количества движения в центрифуге. Так же ведет себя постоянное магнитное поле.

В таких случаях условия детального баланса по большей части записывают в виде

$$p_s^{\lambda}(\mathbf{x}, t + \tau; \mathbf{x}', t) = p_s^{\lambda}(\varepsilon \mathbf{x}', t + \tau; \varepsilon \mathbf{x}, t), \quad (5.3.52)$$

где λ есть вектор, составленный из постоянных величин, который меняется на $\varepsilon \lambda$ при обращении времени. Согласно одной точке зрения, такая ситуация не отвечает условию детального баланса, поскольку в данном стационарном решении переходы *не* находятся в детальном балансе между собой. Вероятно, свойство (5.3.52) было бы правильнее называть *инвариантностью относительно обращения времени*.

Далее под детальным балансом мы будем понимать ситуацию, описываемую равенством (5.3.45), поскольку из (5.3.52) не вытекает сколько-нибудь важных следствий.

5.3.5. СЛЕДСТВИЯ ДЕТАЛЬНОГО БАЛАНСА

Условие детального баланса для уравнения Фоккера — Планка было сформулировано ван Кампенем [5.7] и независимо Ульхорном [5.8] и Грэхемом и Хакеном [5.9]. Мы сформулируем эти условия в несколько

более естественном и общем виде. Нам нужны необходимые и достаточные условия, накладываемые на коэффициенты сноса и диффузии и на вероятности скачков, при которых уравнение для однородного марковского процесса имеет стационарные решения, удовлетворяющие условию детального баланса. Покажем, что необходимые и достаточные условия даются выражениями

$$\begin{aligned}
 (1) \quad & W(\mathbf{x}|\mathbf{x}')p_s(\mathbf{x}') = W(\varepsilon\mathbf{x}'|\varepsilon\mathbf{x})p_s(\mathbf{x}) \\
 (2) \quad & \varepsilon_i A_i(\varepsilon\mathbf{x})p_s(\mathbf{x}) = -A_i(\mathbf{x})p_s(\mathbf{x}) + \sum_j \frac{\partial}{\partial x_j} [B_{ij}(\mathbf{x})p_s(\mathbf{x})] \\
 (3) \quad & \varepsilon_i \varepsilon_j B_{ij}(\varepsilon\mathbf{x}) = B_{ij}(\mathbf{x}).
 \end{aligned} \tag{5.3.53}$$

Для того чтобы конкретизировать эти условия для случая уравнений Фоккера — Планка, необходимо просто приравнять нулю вероятности скачков $W(\mathbf{x}|\mathbf{x}')$.

Необходимые условия. Проще сформулировать условия для дифференциального уравнения Чепмена — Колмогорова, чем ограничиваться уравнением Фоккера — Планка. В соответствии с определениями величин $W(\mathbf{x}|\mathbf{x}')$, $A_i(\mathbf{x})$ и $B_{ij}(\mathbf{x})$, данными в разд. 3.4 (поскольку мы имеем дело с однородным процессом, все эти величины, разумеется, не зависят от времени), тривиальный результат получается из (5.3.46) и заключается в том, что для детального баланса необходимо выполнение равенства

$$W(\mathbf{x}|\mathbf{x}')p_s(\mathbf{x}') = W(\varepsilon\mathbf{x}'|\varepsilon\mathbf{x})p_s(\mathbf{x}). \tag{5.3.54}$$

Рассмотрим теперь коэффициент сноса. Для простоты запишем

$$\mathbf{x}' = \mathbf{x} + \boldsymbol{\delta}. \tag{5.3.55}$$

Тогда из (5.3.46) следует

$$\begin{aligned}
 & \int_{|\boldsymbol{\delta}| < K} d\boldsymbol{\delta} \delta_i p(\varepsilon\mathbf{x} + \varepsilon\boldsymbol{\delta}, \Delta t | \varepsilon\mathbf{x}, 0)p_s(\mathbf{x}) \\
 & = \int_{|\boldsymbol{\delta}| < K} d\boldsymbol{\delta} \delta_i p(\mathbf{x}, \Delta t | \mathbf{x} + \boldsymbol{\delta}, 0)p_s(\mathbf{x} + \boldsymbol{\delta})
 \end{aligned} \tag{5.3.56}$$

(в пределах интегрирования мы пишем K вместо ε , чтобы не путать с ε_i). Разделим это выражение на Δt и перейдем к пределу $\Delta t \rightarrow 0$; левая часть дает нам

$$\varepsilon_i A_i(\varepsilon\mathbf{x})p_s(\mathbf{x}) + O(K). \tag{5.3.57}$$

Преобразуем правую часть :

$$p(\mathbf{x} + \boldsymbol{\delta} - \boldsymbol{\delta}, \Delta t | \mathbf{x} + \boldsymbol{\delta}, 0) p_s(\mathbf{x} + \boldsymbol{\delta}) = p(\mathbf{x} - \boldsymbol{\delta}, \Delta t | \mathbf{x}, 0) p_s(\mathbf{x}) \quad (5.3.58)$$

$$+ \sum_j \delta_j \frac{\partial}{\partial x_j} [p(\mathbf{x} - \boldsymbol{\delta}, \Delta t | \mathbf{x}, 0) p_s(\mathbf{x})] + O(\delta^2),$$

и, переходя к пределу, получаем

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int d\boldsymbol{\delta} \left\{ \delta_i p(\mathbf{x} - \boldsymbol{\delta}, \Delta t | \mathbf{x}, 0) p_s(\mathbf{x}) + \sum_j \delta_i \delta_j \frac{\partial}{\partial x_j} [p(\mathbf{x} - \boldsymbol{\delta}, \Delta t | \mathbf{x}, 0) p_s(\mathbf{x})] \right\} + O(K) = -A_i(\mathbf{x}) p_s(\mathbf{x}) + \sum_j \frac{\partial}{\partial x_j} [B_{ij}(\mathbf{x}) p_s(\mathbf{x})] + O(K). \quad (5.3.59)$$

Здесь мы воспользовались тем, что, как показано в разд. 3.4, члены, в которые δ входит в степени выше второй, имеют порядок K . Устремляя $K \rightarrow 0$, находим

$$\varepsilon_i A_i(\boldsymbol{\varepsilon} \mathbf{x}) p_s(\mathbf{x}) = -A_i(\mathbf{x}) p_s(\mathbf{x}) + \sum_j \frac{\partial}{\partial x_j} [B_{ij}(\mathbf{x}) p_s(\mathbf{x})]. \quad (5.3.60)$$

Условие для $B_{ij}(\mathbf{x})$ получается аналогичным образом, однако здесь уже нет члена, подобного второму слагаемому в правой части (5.3.60), так как главным членом является $O(\delta^2)$. Находим

$$\varepsilon_i \varepsilon_j B_{ij}(\boldsymbol{\varepsilon} \mathbf{x}) = B_{ij}(\mathbf{x}). \quad (5.3.61)$$

Третьим условием, разумеется, является требование, чтобы $p_s(\mathbf{x})$ была стационарным решением дифференциального уравнения Чепмена — Колмогорова. Это условие не тривиально, и, вообще говоря, не зависит от остальных.

Достаточные условия. Покажем теперь, что условия (5.3.53) являются достаточными. Пусть эти условия удовлетворены, $p_s(\mathbf{x})$ — стационарное решение дифференциального уравнения Чепмена — Колмогорова, а $p(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}', 0)$ — решение этого уравнения. Рассмотрим величину

$$\hat{p}(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}', 0) \equiv p(\boldsymbol{\varepsilon} \mathbf{x}', t | \boldsymbol{\varepsilon} \mathbf{x}, 0) p_s(\mathbf{x}) / p_s(\mathbf{x}'). \quad (5.3.62)$$

Очевидно,

$$\hat{p}(\mathbf{x}, 0 | \mathbf{x}', 0) = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = p(\mathbf{x}, 0 | \mathbf{x}', 0). \quad (5.3.63)$$

Подставим \hat{p} в дифференциальное уравнение Чепмена — Колмогорова и покажем, что, коль скоро $p(\mathbf{x}', t | \mathbf{x}, 0)$ подчиняется *обратному уравнению Чепмена — Колмогорова* относительно переменной \mathbf{x} , величина \hat{p} является решением *прямого дифференциального уравнения Чепмена — Колмогорова*.

Проведем вычисления в явном виде. Для краткости будем писать

$$\begin{aligned} \hat{p} & \text{ вместо } \hat{p}(x, t | x', 0) \\ p_s & \text{ вместо } p_s(x) \\ p'_s & \text{ вместо } p_s(x') \\ p(x) & \text{ вместо } p(x', t | x, 0). \end{aligned} \quad (5.3.64)$$

Рассмотрим по очереди один член за другим.

1) Вклад сноса:

$$\begin{aligned} -\sum_i \frac{\partial}{\partial x_i} (A_i \hat{p}) &= -\sum_i \frac{\partial}{\partial x_i} (A_i p(\epsilon x) p_s / p'_s) \\ &= -\sum_i \left\{ \frac{\partial}{\partial x_i} [A_i p_s] p(\epsilon x) + A_i p_s \frac{\partial}{\partial x_i} p(\epsilon x) \right\} / p'_s. \end{aligned} \quad (5.3.65)$$

2) Вклад диффузии:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} (B_{ij} \hat{p}) &= \frac{1}{2} \sum_{i,j} \left[\frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} (B_{ij} p_s) p(\epsilon x) \right. \\ & \left. + 2 \frac{\partial}{\partial x_i} (B_{ij} p_s) \frac{\partial}{\partial x_j} p(\epsilon x) + B_{ij} p_s \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} p(\epsilon x) \right] / p'_s. \end{aligned} \quad (5.3.66)$$

3) Вклад скачка:

$$\begin{aligned} \int dz [W(x|z) \hat{p}(z, t | x', 0) - W(z|x) \hat{p}(x, t | x', 0)] \\ = \int dz [W(x|z) p_s(z) p(\epsilon x', t | \epsilon z, 0) - W(z|x) p_s(x) p(\epsilon x', t | \epsilon x)] / p_s. \end{aligned} \quad (5.3.67)$$

Пользуясь тем, что $p_s(x)$ является решением стационарного дифференциального уравнения Чепмена — Колмогорова, запишем теперь

$$\begin{aligned} -\sum_i \left[\frac{\partial}{\partial x_i} (A_i p_s) + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} (B_{ij} p_s) \right] - \int dz W(z|x) p_s(x) \\ = -\int dz W(x|z) p_s(z), \end{aligned} \quad (5.3.68)$$

а с учетом условия детального баланса (5.3.53(I)) —

$$= -\int dz W(\epsilon z | \epsilon x) p_s(x). \quad (5.3.69)$$

Сделаем теперь замену

$$\begin{aligned} y &= \epsilon x \\ y' &= \epsilon x' \end{aligned} \quad (5.3.70)$$

и сложим все три вклада, учитывая (5.3.68, 69)

$$\begin{aligned}
 &= \left\{ -\sum_i \varepsilon_i A_i(\boldsymbol{\varepsilon}\mathbf{y}) p_s(\mathbf{y}) \left[\frac{\partial}{\partial y_i} p(\mathbf{y}) \right] + \sum_{i,j} \varepsilon_i \varepsilon_j \frac{\partial}{\partial y_j} [B_{ij}(\boldsymbol{\varepsilon}\mathbf{y}) p_s(\mathbf{y})] \left[\frac{\partial}{\partial y_i} p(\mathbf{y}) \right] \right. \\
 &\quad \left. + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \varepsilon_i \varepsilon_j B_{ij}(\boldsymbol{\varepsilon}\mathbf{y}) p_s(\mathbf{y}) \left[\frac{\partial^2}{\partial y_i \partial y_j} p(\mathbf{y}) \right] \right. \\
 &\quad \left. + \int d\mathbf{z} [W(\boldsymbol{\varepsilon}\mathbf{y}|\mathbf{z}) p_s(\mathbf{z}) p(\boldsymbol{\varepsilon}\mathbf{z}, t|\mathbf{y}', 0) - W(\boldsymbol{\varepsilon}\mathbf{y}|\mathbf{z}) p_s(\mathbf{z}) p(\mathbf{y}', t|\mathbf{y}, 0)] \right\} / p_s(\mathbf{y}').
 \end{aligned} \tag{5.3.71}$$

Подставим сюда условия детального баланса (5.3.53)

$$\begin{aligned}
 &= \left\{ \sum_i A_i(\mathbf{y}) \frac{\partial}{\partial y_i} p(\mathbf{y}', t|\mathbf{y}, 0) + \frac{1}{2} \sum_{i,j} B_{ij}(\mathbf{y}) \frac{\partial^2}{\partial y_i \partial y_j} p(\mathbf{y}', t|\mathbf{y}, 0) \right. \\
 &\quad \left. + \int d\mathbf{z} [W(\mathbf{z}|\mathbf{y}) p(\mathbf{z}, t|\mathbf{y}', 0) - W(\mathbf{z}|\mathbf{y}) p(\mathbf{y}', t|\mathbf{y}, 0)] \right\} p_s(\mathbf{y}) / p_s(\mathbf{y}').
 \end{aligned} \tag{5.3.72}$$

В члене в фигурных скобках мы теперь узнаем *обратный оператор Чепмена — Колмогорова* (см. разд. 3.6, (3.6.4)). В силу однородности процесса

$$p(\mathbf{y}', t|\mathbf{y}, 0) = p(\mathbf{y}, 0|\mathbf{y}, -t)$$

и, наконец,

$$(5.3.72) = \frac{\partial}{\partial t} [p(\mathbf{y}', t|\mathbf{y}, 0) p_s(\mathbf{y}) / p_s(\mathbf{y}')] = \frac{\partial}{\partial t} \hat{p}(\mathbf{x}, t|\mathbf{x}', 0). \tag{5.3.73}$$

Это означает, что $\hat{p}(\mathbf{x}, t|\mathbf{x}', 0)$, определенная в (5.3.62), удовлетворяет прямому дифференциальному уравнению Чепмена — Колмогорова. Поскольку начальные условия для $p(\mathbf{x}, t|\mathbf{x}', 0)$ и $\hat{p}(\mathbf{x}, t|\mathbf{x}', 0)$ при $t = 0$ одни и те же (5.3.63), и решения единственны, достаточность условий детального баланса (5.3.53) доказана.

Замечания

1) *Все переменные четные.* При этом условия существенно упрощаются, если $\varepsilon_i = +1$ для всех i :

$$W(\mathbf{x}|\mathbf{x}') p_s(\mathbf{x}') = W(\mathbf{x}'|\mathbf{x}) p_s(\mathbf{x}) \tag{5.3.74}$$

$$A_i(\mathbf{x}) p_s(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \sum_j \frac{\partial}{\partial x_j} [B_{ij}(\mathbf{x}) p_s(\mathbf{x})] \tag{5.3.75}$$

$$B_{ij}(\mathbf{x}) = B_{ij}(\mathbf{x}) \tag{5.3.76}$$

(последнее из этих условий тривиально). Условие (5.3.75) в точности совпадает с потенциальным условием (5.3.21), которое соответствует обращению в нуль потока вероятности в стационарном состоянии.

Условия (5.3.74, 75) вместе означают, что $p_s(\mathbf{x})$ удовлетворяет стационарному дифференциальному уравнению Чепмена — Колмогорова, что, вообще говоря, неверно для общих условий (5.3.53).

2) *Уравнения Фоккера — Планка*. Ван Кампен [5.7] и Грэм и Хакен [5.9] ввели понятие обратимого и необратимого сноса. Обратимый снос определяется равенством

$$D_i(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} [A_i(\mathbf{x}) + \varepsilon_i A_i(\varepsilon \mathbf{x})], \quad (5.3.77)$$

а необратимый — равенством

$$I_i(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} [A_i(\mathbf{x}) - \varepsilon_i A_i(\varepsilon \mathbf{x})]. \quad (5.3.78)$$

Пользуясь определением потенциала

$$p_s(\mathbf{x}) = \exp[-\phi(\mathbf{x})], \quad (5.3.79)$$

убеждаемся, что для уравнений Фоккера — Планка условия детально-го баланса могут быть записаны в виде

$$\varepsilon_i \varepsilon_j B_{ij}(\varepsilon \mathbf{x}) = B_{ij}(\mathbf{x}) \quad (5.3.80)$$

$$D_i(\mathbf{x}) - \frac{1}{2} \sum_j \frac{\partial}{\partial x_j} [B_{ij}(\mathbf{x})] = -\frac{1}{2} \sum_i B_{ij}(\mathbf{x}) \frac{\partial \phi(\mathbf{x})}{\partial x_j} \quad (5.3.81)$$

$$\sum_i \left[\frac{\partial}{\partial x_i} I_i(\mathbf{x}) - I_i(\mathbf{x}) \frac{\partial \phi(\mathbf{x})}{\partial x_i} \right] = 0, \quad (5.3.82)$$

где последнее равенство представляет собой просто стационарное уравнение Фоккера — Планка для $p_s(\mathbf{x})$, в которое подставлено выражение (5.3.53(1)). Как и в случае потенциальных условий, (5.3.81) дает уравнение для $\partial \phi / \partial x_j$, которое может быть удовлетворено лишь в случае выполнения определенных требований, накладываемых на $D_i(\mathbf{x})$ и $B_{ij}(\mathbf{x})$. Если матрица $B_{ij}(\mathbf{x})$ имеет обратную, то эти условия принимают вид

$$\frac{\partial \hat{Z}_i}{\partial x_j} = \frac{\partial \hat{Z}_j}{\partial x_i}, \quad (5.3.83)$$

где

$$\hat{Z}_i = \sum_k B_{ik}^{-1}(\mathbf{x}) \left[2D_k(\mathbf{x}) - \sum_j \frac{\partial}{\partial x_j} B_{kj}(\mathbf{x}) \right], \quad (5.3.84)$$

и тогда

$$p_s(\mathbf{x}) = \exp[-\phi(\mathbf{x})] = \exp\left(\int^{\mathbf{x}} d\mathbf{x}' \cdot \hat{Z}\right). \quad (5.3.85)$$

Таким образом, как и в случае нулевого потока вероятности, $p_s(\mathbf{x})$ можно определить непосредственным интегрированием.

3) *Связь между обратным и прямым операторами* дифференциальных уравнений Чепмена — Колмогорова устанавливается принципом детального баланса. Доказательство достаточности условий сводится к установлению справедливости следующего утверждения: если $f(\mathbf{x}, t)$ есть решение прямого дифференциального уравнения Чепмена — Колмогорова, то

$$\tilde{f}(\mathbf{x}, t) = f(\epsilon\mathbf{x}, -t)/p_s(\mathbf{x}) \quad (5.3.86)$$

является решением обратного дифференциального уравнения Чепмена — Колмогорова. Это соотношение будет использовано в разд. 5.3.7 для построения собственных функций.

5.3.6. ПРИМЕРЫ ДЕТАЛЬНОГО БАЛАНСА В УРАВНЕНИЯХ ФОККЕРА — ПЛАНКА

a) Уравнение Крамерса для броуновского движения [5.10].

Рассмотрим движение частицы в флуктуирующей среде. Пусть движение происходит в одном измерении и состояние частицы описывается координатой x и скоростью v . Дифференциальные уравнения имеют вид

$$\frac{dx}{dt} = v \quad (5.3.87)$$

и

$$m \frac{dv}{dt} = -V'(x) - \beta v + \sqrt{2\beta kT} \xi(t). \quad (5.3.88)$$

Это, по сути, уравнения Ланжевена (1.2.14), где для краткости мы пишем

$$\beta \eta a = \beta$$

и где $V(x)$ — потенциал, градиент которого $V'(x)$ создает силу, действующую на частицу. В предположении, что физическая флуктуирующая сила $\zeta(t)$ должна интерпретироваться как

$$\xi(t)dt = dW(t) \quad (5.3.89)$$

(см. разд. 4.1), получаем стохастические дифференциальные уравнения

$$dx = v dt \quad (5.3.90)$$

$$m dv = -[V'(x) + \beta v] dt + \sqrt{2\beta kT} dW(t), \quad (5.3.91)$$

которым соответствует уравнение Фоккера — Планка

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}(vp) + \frac{1}{m} \frac{\partial}{\partial v} \{[V'(x) + \beta v]p\} + \frac{\beta kT}{m^2} \frac{\partial^2 p}{\partial v^2}. \quad (5.3.92)$$

Это уравнение можно несколько упростить, введя масштабные переменные

$$y = x\sqrt{m/kT} \quad (5.3.93)$$

$$u = v\sqrt{m/kT} \quad (5.3.94)$$

$$U(y) = V(x)/kT \quad (5.3.95)$$

$$\gamma = \beta/m, \quad (5.3.96)$$

в которых УФП принимает вид

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial y}(up) + \frac{\partial}{\partial u} [U'(y)p] + \gamma \frac{\partial}{\partial u} \left(up + \frac{\partial p}{\partial u} \right). \quad (5.3.97)$$

Это выражение называется *уравнением Крамерса*.

Здесь координата y является четной переменной, а скорость u — нечетной (см. разд. 5.3.4). Коэффициенты сноса и диффузии могут быть записаны в виде

$$A(y, u) = \begin{bmatrix} u \\ -U'(y) - \gamma u \end{bmatrix}, \quad (5.3.98)$$

$$B(y, u) = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 2\gamma \end{bmatrix}; \quad (5.3.99)$$

кроме того,

$$\epsilon \begin{bmatrix} y \\ u \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y \\ -u \end{bmatrix}. \quad (5.3.100)$$

Проверим поочередно выполнение необходимых и достаточных условий детального баланса.

Условие (5.3.53(3)) удовлетворяется тривиально. Условие (5.3.53(2)) несколько вырождено, поскольку B не обратима. Это условие можно записать в виде

$$\epsilon A(y, -u)p_s(y, u) = -A(y, u)p_s(y, u) + \left[\begin{array}{c} 0 \\ 2\gamma \frac{\partial p_s}{\partial u} \end{array} \right] \quad (5.3.101)$$

или, более развернуто,

$$\left[\begin{array}{c} -u \\ U'(y) - \gamma u \end{array} \right] p_s = \left[\begin{array}{c} -u \\ U'(y) + \gamma u \end{array} \right] p_s + \left[\begin{array}{c} 0 \\ 2\gamma \frac{\partial p_s}{\partial u} \end{array} \right]. \quad (5.3.102)$$

Первая строка является тождеством; вторая же утверждает, что

$$-u p_s(y, u) = \frac{\partial p_s}{\partial u}, \quad (5.3.103)$$

т. е.

$$p_s(y, u) = \exp(-\frac{1}{2}u^2)f(y). \quad (5.3.104)$$

Это означает, что если $p_s(y, u)$ записывается в виде (5.3.104), то условия детального баланса удовлетворены. Остается проверить подстановкой, является ли (5.3.104) стационарным решением уравнения Крамера. Последняя скобка в правой части обращается в нуль, и мы имеем

$$0 = -u \frac{\partial f}{\partial y} - U'(y)uf. \quad (5.3.105)$$

Это означает, что

$$f(y) = \mathcal{N} \exp[-U(y)] \quad (5.3.106)$$

и

$$p_s(y, u) = \mathcal{N} \exp[-U(y) - \frac{1}{2}u^2]. \quad (5.3.107)$$

В исходных переменных (x, v)

$$p_s(x, v) = \mathcal{N} \exp\left[-\frac{V(x)}{kT} - \frac{mv^2}{2kT}\right], \quad (5.3.108)$$

и мы получаем хорошо известное в статистической физике распределение Больцмана. Заметим, что kT в знаменателе появилось благодаря тому, что в качестве коэффициента флуктуирующей силы в (5.3.88)

был выбран множитель $\sqrt{2\beta kT}$. Таким образом, мы добавили к макроскопическим уравнениям флуктуационный член, амплитуда которого определяется таким образом, чтобы в качестве решения получалось распределение Больцмана, соответствующее температуре T .

Мы, однако же, пришли к совершенно правильному виду функции распределения. Значит, наше предположение, что броуновское движение описывается марковским процессом вида (5.3.87, 88), оказалось вполне обоснованным.

б) Детерминированное движение

В этом случае как $B_{ij}(\mathbf{x})$, так и $W(\mathbf{x}|\mathbf{x}')$ равны нулю, так что условие детального баланса дается просто выражением

$$\varepsilon_i A_i(\varepsilon \mathbf{x}) = -A_i(\mathbf{x}). \quad (5.3.109)$$

Поскольку мы имеем дело теперь с уравнением Лиувилля (разд. 3.5.3), движение точки с координатой \mathbf{x} описывается обыкновенным дифференциальным уравнением

$$\frac{d}{dt} \mathbf{x}(t) = A[\mathbf{x}(t)]. \quad (5.3.110)$$

Пусть решением (5.3.110), проходящим через точку \mathbf{y} в момент $t = 0$, является

$$\mathbf{q}[t, \mathbf{y}], \quad (5.3.111)$$

которое должно тогда удовлетворять условию

$$\mathbf{q}[0, \mathbf{y}] = \mathbf{y}. \quad (5.3.112)$$

В силу (5.3.109), функция

$$\varepsilon \mathbf{q}(-t, \varepsilon \mathbf{y}) \quad (5.3.113)$$

также является решением (5.3.110), а коль скоро

$$\varepsilon \mathbf{q}(0, \varepsilon \mathbf{y}) = \varepsilon \mathbf{y} = \mathbf{y} \quad (5.3.114)$$

(т. е. начальные условия одинаковы), эти решения должны быть идентичны:

$$\varepsilon \mathbf{q}(-t, \varepsilon \mathbf{y}) = \mathbf{q}(t, \mathbf{y}). \quad (5.3.115)$$

Совместная вероятность в стационарном состоянии может быть записана в виде

$$\begin{aligned} p_s(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') &= \int d\mathbf{y} p_s(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t'; \mathbf{y}, 0) \\ &= \int d\mathbf{y} \delta[\mathbf{x} - \mathbf{q}(t, \mathbf{y})] \delta[\mathbf{x}' - \mathbf{q}(t', \mathbf{y})] p_s(\mathbf{y}), \end{aligned} \quad (5.3.116)$$

и

$$p_s(\epsilon x', -t'; \epsilon x, -t) = \int dy \delta[\epsilon x - q(-t, y)] \delta[\epsilon x' - q(-t', y)] p_s(y). \quad (5.3.117)$$

Перейдем от переменной y к ϵy и заметим, что $p_s(y) = p_s(\epsilon y)$, $d\epsilon y = dy$, так что

$$(5.3.117) = \int dy \delta[x - \epsilon q(-t, \epsilon y)] \delta[x' - \epsilon q(-t', \epsilon y)] p_s(y) \quad (5.3.118)$$

и, с учетом (5.3.115),

$$= \int dy \delta[x - q(t, y)] \delta[x' - q(t', y)] p_s(y) \quad (5.3.119)$$

$$= p_s(x, t; x', t'). \quad (5.3.120)$$

В силу стационарности, p_s зависит только от разности времен, поэтому условие детального баланса удовлетворено.

Надо сказать, что в этом доказательстве нет особой необходимости, так как проведенное ранее общее доказательство сохраняет силу и для детерминистической системы. Кроме того, всякую систему детерминистических дифференциальных уравнений первого порядка можно преобразовать в уравнение Лиувилля, так что это доказательство включено сюда только для полноты.

Важно, однако, обрисовать идею, стоящую за этим доказательством справедливости детального баланса. В физических системах, для которых, собственно, и важен детальный баланс, мы нередко сталкиваемся с немислимо большим числом переменных, скажем 10^{20} . Эти переменные (например, импульсы и координаты частиц в газе) как раз и входят в функцию распределения, которая подчиняется уравнению Лиувилля, так как они описываются детерминистическими уравнениями движения — например, законами Ньютона.

Можно непосредственно показать, что законы Ньютона для соответствующих взаимодействий согласуются с принципом *микроскопической обратимости*. Другими словами, они могут быть представлены в виде (5.3.110), где $A(x)$ удовлетворяет условию обратимости (5.3.109).

Наблюдаемые макроскопические величины в подобной системе (например, давление, температура, плотность частиц) являются функциями этих переменных и при соответствующем выборе переменных могут быть представлены первыми несколькими компонентами вектора x .

Иначе говоря, мы считаем, что вектор x можно представить в виде

$$x = (a, \hat{x}), \quad (5.3.121)$$

где a включает наблюдаемые макроскопические величины, а \hat{x} — все остальные. Тогда практически нас интересует распределение

$$\begin{aligned} \tilde{p}(\mathbf{a}_1, t_1; \mathbf{a}_2, t_2; \mathbf{a}_3, t_3; \dots) \\ = \iint \dots \int d\hat{x}_1, d\hat{x}_2 \dots p(\mathbf{x}_1, t_1; \mathbf{x}_2, t_2; \mathbf{x}_3, t_3; \dots). \end{aligned} \quad (5.3.122)$$

С точки зрения микроскопической обратимости из вышеприведенных рассуждений следует, что p , а стало быть, и \tilde{p} , подчиняются условиям детального баланса, но \tilde{p} , естественно, не подчиняется уравнению Лиувилля. Если же можно показать, что \tilde{p} в том или ином приближении подчиняется марковскому уравнению движения, то мы должны сохранить условие детального баланса, которое для \tilde{p} имеет тот же вид, что и для p . В этом смысле можно сказать, что условия детального баланса (5.3.43) вытекают из микроскопической обратимости законов движения.

в) Процесс Орнштейна — Уленбека: соотношения Онсагера для линейных систем

Большинство систем, удовлетворяющих условию детального баланса, можно приближенно описывать процессом Орнштейна — Уленбека. При этом предполагается, что

$$A_i(\mathbf{x}) = \sum_j A_{ij} x_j \quad (5.3.123)$$

$$B_{ij}(\mathbf{x}) = B_{ij}. \quad (5.3.124)$$

Условия детального баланса, однако, не тривиальны: они имеют вид

$$\sum_j (\varepsilon_i \varepsilon_j A_{ij} + A_{ij}) x_j = \sum_j B_{ij} \frac{\partial}{\partial x_j} \log p_s(\mathbf{x}) \quad (5.3.125)$$

и

$$\varepsilon_i \varepsilon_j B_{ij} = B_{ij}. \quad (5.3.126)$$

Качественный вид равенства (5.3.125) указывает на то, что функция $p_s(\mathbf{x})$ является гауссовым распределением, поскольку производная от ее логарифма линейна относительно x . К тому же, поскольку левая часть не содержит аддитивной константы, среднее значение, соответствующее этому распределению, должно быть равно нулю, так что

$$p_s(\mathbf{x}) = \mathcal{N} \exp\left(-\frac{1}{2} \mathbf{x}^T \boldsymbol{\sigma}^{-1} \mathbf{x}\right). \quad (5.3.127)$$

Теперь можно подставить (5.2.127) в стационарное уравнение Фоккера — Планка и после некоторых преобразований получить

$$-\sum_i A_{ii} - \frac{1}{2} \sum_{i,j} B_{ij} \sigma_{ij}^{-1} + \sum_{k,j} \left(\sum_i \sigma_{ki}^{-1} A_{ij} + \frac{1}{2} \sum_{i,l} \sigma_{ki}^{-1} B_{il} \sigma_{lj}^{-1} \right) x_k x_j = 0 \quad (5.3.128)$$

(здесь мы использовали симметричность матрицы σ). Квадратичный член обращается в нуль, если симметричная часть матрицы его коэффициентов равна нулю. Это условие можно записать в матричной форме:

$$\sigma^{-1} A + A^T \sigma^{-1} = -\sigma^{-1} B \sigma^{-1} \quad (5.3.129)$$

или

$$A \sigma + \sigma A^T = -B. \quad (5.3.130)$$

Если (5.3.129) удовлетворяется, то постоянный член также обращается в нуль. Равенство (5.3.130), очевидно, совпадает с равенством, выведенным с помощью СДУ в разд. 4.4.6 (уравнение (4.4.51)) с точностью до замены

$$A \rightarrow -A \quad (5.3.131)$$

$$B B^T \rightarrow B.$$

Теперь мы можем записать условия детального баланса в наиболее элегантной форме. Определим матрицу ε как

$$\varepsilon = \text{diag}(\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3, \dots); \quad (5.3.132)$$

очевидно,

$$\varepsilon^2 = 1. \quad (5.3.133)$$

Тогда в матричном виде условия (5.3.125, 126) записываются как

$$\varepsilon A \varepsilon + A = -B \sigma^{-1} \quad (5.3.134)$$

$$\varepsilon B \varepsilon = B. \quad (5.3.135)$$

Потенциальное условие (5.3.83) равнозначно утверждению о симметричности матрицы σ .

Как указано в разд. 5.3.4 (см. (5.3.49)), для детального баланса необходимо, чтобы

$$\varepsilon \sigma = \sigma \varepsilon. \quad (5.3.136)$$

С учетом всего этого возьмем (5.3.130)

$$A \sigma + \sigma A^T = -B$$

и из (5.3.134)

$$\varepsilon A \varepsilon \sigma + A \sigma = -B \quad (5.3.137)$$

получим

$$\varepsilon A \varepsilon \sigma = \sigma A^T. \quad (5.3.138)$$

Далее отсюда и из (5.3.136) будем иметь

$$\varepsilon(A\sigma) = (A\sigma)^T \varepsilon. \quad (5.3.139)$$

Это есть не что иное, как знаменитые соотношения Онсагера [5.11, 12]. В нашем выводе мы следовали в основном работе ван Кампена [5.6].

Интерпретировать эти соотношения будет проще, если ввести феноменологические силы, определив их как градиент потенциала $\phi = \ln[p_s(x)]$:

$$F(x) = -\nabla \phi(x) = \sigma^{-1} x \quad (5.3.140)$$

(в физике ϕ/kT есть энтропия системы). Благодаря линейности $A_i(x)$ (см. (5.3.123)) точные уравнения движения для $\langle x \rangle$ имеют вид

$$\frac{d}{dt} \langle x \rangle = A \langle x \rangle = A \sigma F(\langle x \rangle). \quad (5.3.141)$$

Таким образом, если потоки $(d/dt)\langle x \rangle$ линейно связаны с силами $F(\langle x \rangle)$ через матрицу L , определяемую как

$$L = A \sigma, \quad (5.3.142)$$

то из (5.3.139) следует

$$\varepsilon L \varepsilon = L^T, \quad (5.3.143)$$

или

$L_{ij} = L_{ji}, \quad \varepsilon_i \text{ и } \varepsilon_j \text{ имеют одинаковые знаки}$ $L_{ij} = -L_{ji}, \quad \varepsilon_i \text{ и } \varepsilon_j \text{ имеют разные знаки.}$	(5.3.144)
---	-----------

Заметим также, что из

$$\left. \begin{aligned} \varepsilon B \varepsilon &= B \\ \text{и} \\ \varepsilon \sigma \varepsilon &= \sigma \end{aligned} \right\} \quad (5.3.145)$$

следует, что B_{ij} и σ_{ij} обращаются в нуль, если ε_i и ε_j имеют различные знаки.

В частном случае, когда все ε_i имеют один и тот же знак, получаем

$$L = L^T, \quad (5.3.146)$$

и, принимая во внимание, что σ симметрична и положительно определена, а значит, имеет действительный квадратный корень, находим, что

$$\hat{A} \equiv \sigma^{-1/2} A \sigma^{1/2} \quad (5.3.147)$$

симметрична, так что A подобна симметричной матрице. Отсюда следует, что все собственные значения A являются действительными.

г) Частный случай соотношений Онсагера. Флуктуационно-диссипационная теорема

Соотношения Онсагера записываются для наблюдаемых макроскопических величин и поэтому легко поддаются проверке следствием детального баланса, который в свою очередь является следствием обратимости микроскопических уравнений движения, как указано в п. «б» настоящего раздела. Однако для проверки применимости соотношений Онсагера в конкретной ситуации необходимо знать единовременную корреляционную матрицу σ .

К счастью, в подобных случаях статистическая механика дает нам вид стационарного распределения, если только мы имеем дело с термодинамически равновесной ситуацией, когда принцип детального баланса неизменно выполняется. Основная идея здесь аналогична той, которой воспользовался Ланжевен (разд. 1.2.2). Проиллюстрируем это на примере вывода формулы Найквиста.

Рассмотрим электрическую цепь (рис. 5.4), в которой существуют флуктуации напряжения (как следствие того, что система находится не при нулевой температуре) и флуктуации заряда, которые возникают благодаря тому, что система подключена к нейтральному в целом резервуару заряда (например, к банке с ионным раствором). Уравнение для тока следует из закона сохранения электрического заряда q и

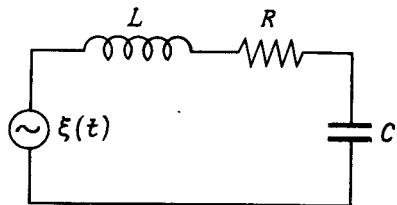


Рис. 5.4. Электрическая цепь, использованная для вывода формулы Найквиста.

закона Кирхгофа. Уравнение для заряда записывается в виде

$$\frac{dq}{dt} = i - \gamma q + \Delta i(t). \quad (5.3.148)$$

Здесь мы приравниваем скорость изменения заряда на конденсаторе току в цепи i минус утечка γq в резервуар плюс флуктуационный член $\Delta i(t)$, который возникает вследствие наличия резервуара; величина последнего будет сейчас рассчитана.

Применяя закон Кирхгофа, суммируем падения напряжения по всему контуру, включая возможные флуктуации напряжения $\Delta V(t)$:

$$\frac{di}{dt} = \frac{1}{L} \left[-\frac{q}{c} - iR + \Delta V(t) \right]. \quad (5.3.149)$$

Будем считать, что $\Delta i(t)$ и $\Delta V(t)$ представляют собой белый шум. В самом общем случае мы можем записать

$$\Delta i(t) = b_{11}\xi_1(t) + b_{12}\xi_2(t) \quad (5.3.150)$$

$$\frac{1}{L} \Delta V(t) = b_{21}\xi_1(t) + b_{22}\xi_2(t) \quad (5.3.151)$$

где $\xi_1(t)$ и $\xi_2(t)$ суть некоррелированные ланжевенские силы, т. е.

$$\xi_1(t)dt = dW_1(t) \quad (5.3.152)$$

$$\xi_2(t)dt = dW_2(t) \quad (5.3.153)$$

($W_1(t)$ и $W_2(t)$ — независимые винеровские процессы).

Таким образом, здесь

$$A = - \begin{bmatrix} \gamma & -1 \\ \frac{1}{LC} & \frac{R}{L} \end{bmatrix}. \quad (5.3.154)$$

Полная энергия системы такова:

$$E = \frac{L}{2} i^2 + \frac{1}{2C} q^2. \quad (5.3.155)$$

Из статистической механики мы знаем, что $p_s(q, i)$ определяется *распределением Больцмана* при температуре T , т. е.

$$\begin{aligned} p_s(q, i) &= \mathcal{N} \exp(-E/kT) \\ &= \mathcal{N} \exp\left(-\frac{Li^2}{2kT} - \frac{q^2}{2CkT}\right), \end{aligned} \quad (5.3.156)$$

где k — постоянная Больцмана; тогда корреляционной матрицей служит

$$\sigma = \begin{bmatrix} kTC & 0 \\ 0 & kT/L \end{bmatrix}. \quad (5.3.157)$$

Теперь проверим симметрию Онсагера:

$$A\sigma = - \begin{bmatrix} \gamma kTC & -kT/L \\ kT/L & RkT/L^2 \end{bmatrix}. \quad (5.3.158)$$

Для этой системы полный заряд q является четной переменной, а ток i — нечетной. Таким образом,

$$\varepsilon = \text{diag} (1, -1), \quad (5.3.159)$$

и очевидно, что единственным следствием указанной симметрии является равенство

$$(A\sigma)_{12} = - (A\sigma)_{21} \quad (5.3.160)$$

и в силу (5.3.158) оно справедливо.

Имеем также

$$B = - (A\sigma + \sigma A^T) = 2kT \begin{bmatrix} \gamma C & 0 \\ 0 & R/L^2 \end{bmatrix} \quad (5.3.161)$$

и поэтому

$$b_{12} = b_{21} = 0 \quad (5.3.162)$$

$$b_{11} = \sqrt{2kT\gamma C} \quad (5.3.163)$$

$$b_{22} = \sqrt{2kTR/L}.$$

Мы видим, что, как и следует из интуитивных физических соображений, $B_{12} = B_{21} = 0$; действительно, эти два источника флуктуаций, $\xi_1(t)$ и $\xi_2(t)$, обусловлены различными причинами и поэтому должны быть независимы друг от друга.

Полученные результаты составляют марковскую *флуктуационно-диссипационную теорему*. Величины b_{ij} , характеризующие интенсивность флуктуаций, определяются *диссипативными параметрами* γ и R . Результат (5.3.163) является не чем иным, как теоремой Найквиста, которую мы обсуждали в разд. 1.4.4. Флуктуационное напряжение в цепи дается выражением

$$\Delta V(t) = \sqrt{2kTR} \xi_1(t), \quad (5.3.164)$$

так что

$$\langle \Delta V(t + \tau) \Delta V(t) \rangle = 2kTR\delta(\tau). \quad (5.3.165)$$

Это и есть теорема Найквиста в форме (1.4.51).

Параметры γ и R называются диссипативными, поскольку ими обусловлены диссипации энергии. Для детерминистического случая (т. е. полагая шум равным нулю), получаем равенство

$$\frac{dE}{dt} = -i^2 R - \frac{\gamma q^2}{C}, \quad (5.3.166)$$

где диссипация присутствует в явном виде.

5.3.7. МЕТОДЫ СОБСТВЕННЫХ ФУНКЦИЙ ДЛЯ СЛУЧАЯ МНОГИХ ПЕРЕМЕННЫХ. ОДНОРОДНЫЕ ПРОЦЕССЫ

Будем продвигаться так же, как в разд. 5.2.5. Мы заранее предполагаем существование полного набора собственных функций $P_\lambda(\mathbf{x})$ для прямого и $Q_\lambda(\mathbf{x})$ для обратного уравнения Фоккера — Планка. Таким образом,

$$-\sum_i \partial_i [A_i(\mathbf{x}) P_\lambda(\mathbf{x})] + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \partial_i \partial_j [B_{ij}(\mathbf{x}) P_\lambda(\mathbf{x})] = -\lambda P_\lambda(\mathbf{x}) \quad (5.3.167)$$

$$\sum A_i(\mathbf{x}) \partial_i Q_{\lambda'}(\mathbf{x}) + \frac{1}{2} \sum B_{ij}(\mathbf{x}) \partial_i \partial_j Q_{\lambda'}(\mathbf{x}) = -\lambda' Q_{\lambda'}(\mathbf{x}). \quad (5.3.168)$$

Независимо от того, удовлетворяют ли $Q_\lambda(\mathbf{x})$ и $P_\lambda(\mathbf{x})$ поглощающим или отражающим граничным условиям, можно показать, вполне аналогично тому, как это было сделано в разд. 5.2.4, что

$$-(\lambda - \lambda') \int_R d\mathbf{x} P_\lambda(\mathbf{x}) Q_{\lambda'}(\mathbf{x}) = 0, \quad (5.3.169)$$

так что $P_\lambda(\mathbf{x})$ и $Q_{\lambda'}(\mathbf{x})$ образуют взаимноортогональную систему. Функциональная зависимость между P_λ и $Q_{\lambda'}$ существует, однако, лишь в том случае, когда выполнено условие детального баланса, причем $\varepsilon_i = 1$. Для дискретного спектра собственных значений λ мы полагаем

$$\int d\mathbf{x} P_\lambda(\mathbf{x}) Q_{\lambda'}(\mathbf{x}) = \delta_{\lambda\lambda'}. \quad (5.3.170)$$

Для непрерывного спектра, за исключением того случая, когда мы имеем дело с отражающими граничными условиями, символ Кронекера $\delta_{\lambda\lambda'}$ заменяем на $\delta(\lambda - \lambda')$; $\lambda = 0$ стационарно. Тогда нормировка

$p_s(\mathbf{x})$ дает

$$\int d\mathbf{x} P_0(\mathbf{x})Q_0(\mathbf{x}) = \int d\mathbf{x} P_0(\mathbf{x}) = 1, \quad (5.3.171)$$

и в спектре появляется дискретная точка с нулевым собственным значением.

Если условие детального баланса выполнено, то, как мы уже отмечали в разд. 5.3.5(3), $p(\varepsilon\mathbf{x}, -t)/p_s(\mathbf{x})$ есть решение обратного уравнения Фоккера — Планка, так что на основании единственности решения можно утверждать, что

$$Q_\lambda(\mathbf{x}) = \eta_\lambda P_\lambda(\varepsilon\mathbf{x})/p_s(\mathbf{x}). \quad (5.3.172)$$

Здесь $n_\lambda = \pm 1$ с точностью до знака, поскольку, если $\lambda = \lambda'$, (5.3.170) можно записать в виде

$$\int d\mathbf{x} \frac{P_\lambda(\mathbf{x})P_\lambda(\varepsilon\mathbf{x})}{P_s(\mathbf{x})} = \eta_\lambda. \quad (5.3.173)$$

Значение n_λ нельзя определить априорно, но при надлежащей нормировке оно будет равно плюс или минус единице. Если, к примеру, все $\varepsilon_i = -1$, а $P_\lambda(\mathbf{x})$ является нечетной функцией, то, очевидно, $n_\lambda = -1$.

1) *Все переменные четные: отрицательные собственные значения.* Если все $\varepsilon_i = 1$, можно записать

$$Q_\lambda(\mathbf{x}) = P_\lambda(\mathbf{x})/p_s(\mathbf{x}) \quad (5.3.174)$$

и значение n_λ можно всегда сделать равным единице.

Таким образом, разложения по собственным функциям будут во многом такими же, как и для случая одной переменной.

Полноту системы собственных функций необходимо всякий раз доказывать особо. Если все $\varepsilon_i = 1$, то можно показать, что оператор Фоккера — Планка является самосопряженным и отрицательно полуопределенным в некотором гильбертовом пространстве.

Для большей ясности запишем прямой оператор Фоккера — Планка в виде

$$\mathcal{L}(\mathbf{x}) = -\sum_i \partial_i A_i(\mathbf{x}) + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \partial_i \partial_j B_{ij}(\mathbf{x}), \quad (5.3.175)$$

а обратный — в виде

$$\mathcal{L}^*(\mathbf{x}) = \sum_i A_i(\mathbf{x}) \partial_i + 2 \sum_{i,j} B_{ij}(\mathbf{x}) \partial_i \partial_j. \quad (5.3.176)$$

Тогда тот факт, что, если все $\varepsilon_i = 1$, решение прямого УФП может быть преобразовано в решение обратного УФП путем деления на

$p_s(\mathbf{x})$, следует из того, что для всякой $f(\mathbf{x})$

$$\mathcal{L}(\mathbf{x})[f(\mathbf{x})p_s(\mathbf{x})] = p_s(\mathbf{x})\mathcal{L}^*(\mathbf{x})[f(\mathbf{x})]. \quad (5.3.177)$$

Определим гильбертово пространство функций $f(\mathbf{x})$, $g(\mathbf{x})$. . . через скалярное произведение

$$(f, g) = \int_R d\mathbf{x} \frac{f(\mathbf{x})g(\mathbf{x})}{p_s(\mathbf{x})}. \quad (5.3.178)$$

Тогда из (5.3.177) получим

$$(f, \mathcal{L}g) = \int_R d\mathbf{x} \frac{f(\mathbf{x})}{p_s(\mathbf{x})} \mathcal{L}(\mathbf{x}) \left[\frac{g(\mathbf{x})}{p_s(\mathbf{x})} p_s(\mathbf{x}) \right] \quad (5.3.179)$$

$$= \int_R d\mathbf{x} f(\mathbf{x}) \mathcal{L}^*(\mathbf{x}) \left[\frac{g(\mathbf{x})}{p_s(\mathbf{x})} \right], \quad (5.3.180)$$

и далее, интегрируя по частям и избавляясь от поверхностных членов путем использования отражающих или поглощающих граничных условий,

$$(5.3.179) = \int_R d\mathbf{x} \frac{g(\mathbf{x})}{p_s(\mathbf{x})} \mathcal{L}(\mathbf{x})[f(\mathbf{x})]. \quad (5.3.181)$$

Таким образом, в данном гильбертовом пространстве

$$(f, \mathcal{L}g) = (g, \mathcal{L}f). \quad (5.3.182)$$

Это условие уже гарантирует действительность собственных значений $\mathcal{L}(\mathbf{x})$. Чтобы доказать отрицательную полуопределенность, заметим, что в случае всех четных переменных (см. (5.3.75)),

$$A_i(\mathbf{x}) = \sum_j \partial_j [B_{ij}(\mathbf{x})p_s(\mathbf{x})] / 2p_s(\mathbf{x}), \quad (5.3.183)$$

так что для всякой $p(\mathbf{x})$

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(\mathbf{x})p(\mathbf{x}) &= \sum_{i,j} \partial_i \left\{ -\frac{\partial_j [B_{ij}(\mathbf{x})p_s(\mathbf{x})]p(\mathbf{x})}{2p_s(\mathbf{x})} + \frac{1}{2} \partial_j [B_{ij}(\mathbf{x})p(\mathbf{x})] \right\} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i,j} \partial_i \{ B_{ij}(\mathbf{x})p_s(\mathbf{x}) \partial_j [p(\mathbf{x})/p_s(\mathbf{x})] \}. \end{aligned} \quad (5.3.184)$$

Отсюда

$$(p, \mathcal{L}p) = \frac{1}{2} \int d\mathbf{x} p(\mathbf{x})/p_s(\mathbf{x}) \sum_{i,j} \partial_i \{ B_{ij}(\mathbf{x})p_s(\mathbf{x}) \partial_j [p(\mathbf{x})/p_s(\mathbf{x})] \}$$

и, интегрируя по частям (отбрасывая поверхностные члены),

$$(p, \mathcal{L}p) = - \int dx B_{ij}(x) p_s(x) \partial_i [p(x)/p_s(x)] \partial_j [p(x)/p_s(x)] \leq 0, \quad (5.3.185)$$

поскольку $B_{ij}(x)$ положительно полуопределена.

Итак, мы заключаем, что для всякой собственной функции $P_\lambda(x)$ значение λ действительно и

$$\lambda \geq 0 \quad (5.3.186)$$

(напомним, что собственным значением является $-\lambda$).

2) *Вариационный принцип.* С этим свойством связан вариационный принцип. Возьмем любую действительную функцию $f(x)$ и разложим ее по собственным функциям:

$$f(x) = \sum_\lambda \alpha_\lambda P_\lambda(x). \quad (5.3.187)$$

Далее, установим $(f, f) = \int dx f(x)^2 / p_s(x) = 1$. Тогда

$$-(f, \mathcal{L}f) = \sum_\lambda \lambda \alpha_\lambda^2 \quad (5.3.188)$$

$$(f, f) = \sum_\lambda \alpha_\lambda^2.$$

Очевидно, $-(f, \mathcal{L}f)$ будет иметь минимум в нуле, только если существует значение $\lambda = 0$, т. е.

$$\begin{aligned} \alpha_0 &\neq 0 \\ \alpha_\lambda &= 0 \text{ для } \lambda \neq 0. \end{aligned} \quad (5.3.189)$$

Выберем теперь $f(x)$, ортогональную $P_0(x)$, так что $\alpha_0 = 0$; мы видим, что минимум $(f, \mathcal{L}f)$ наблюдается, когда

$$\alpha_{\lambda_1} = 1 \quad (5.3.190)$$

$$\alpha_\alpha = 0 \text{ для всех остальных } \lambda,$$

где λ_1 есть следующее после наименьшего собственное значение. Это означает, что $P_{\lambda_1}(x)$ можно получить, минимизируя $-(p, \mathcal{L}p)$ (что можно выразить в виде (5.3.185)), при условии что

$$\begin{aligned} (p, p) &= 1 \\ (p, P_0) &= 0. \end{aligned} \quad (5.3.191)$$

Этот метод дает возможность численно определять значения собственных функций с использованием пробных решений и особенно полезен в бистабильных ситуациях. Он требует, однако, выполнения принципа детального равновесия.

3) *Условная вероятность*. Если требование полноты выполнено, условная вероятность может быть записана в виде

$$p(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}_0, 0) = \sum_{\lambda} P_{\lambda}(\mathbf{x}) Q_{\lambda}(\mathbf{x}_0) e^{-\lambda t}. \quad (5.3.192)$$

4) *Автокорреляционная матрица*. Если условие детального баланса выполняется, то для стационарной автокорреляционной матрицы [с использованием (5.3.172)] имеем

$$G(t) = \langle \mathbf{x}(t) \mathbf{x}^T(0) \rangle = \sum \eta_{\lambda} e^{-\lambda t} \left[\int_{\mathcal{R}} d\mathbf{x} \mathbf{x} P_{\lambda}(\mathbf{x}) \right] \left[\int_{\mathcal{R}} d\mathbf{x} \mathbf{x} P_{\lambda}(\mathbf{x}) \right]^T \mathbf{e}, \quad (5.3.193)$$

что с очевидностью удовлетворяет условию

$$G(t) = \mathbf{e} G^T(t) \mathbf{e}, \quad (5.3.194)$$

выведенному в разд. (5.3.46).

5) *Матрица спектральных плотностей*. Матрица спектральных плотностей имеет вид

$$\begin{aligned} S(\omega) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega t} G(t) dt \\ &= \frac{1}{2\pi} \left\{ \int_0^{\infty} e^{-i\omega t} G(t) dt + \int_0^{\infty} e^{i\omega t} G^T(t) dt \right\}. \end{aligned} \quad (5.3.195)$$

Если для удобства определить

$$U_{\lambda} = \int_{\mathcal{R}} d\mathbf{x} \mathbf{x} P_{\lambda}(\mathbf{x}), \quad (5.3.196)$$

то

$$S(\omega) = \frac{1}{2\pi} \sum_{\lambda} \left[\frac{\eta_{\lambda}}{\lambda + i\omega} U_{\lambda} U_{\lambda}^T \mathbf{e} + \frac{\eta_{\lambda}}{\lambda - i\omega} \mathbf{e} U_{\lambda} U_{\lambda}^T \right]. \quad (5.3.197)$$

Если какие-либо из значений λ комплексны, то в силу действительности $\mathcal{L}(\mathbf{x})$ мы находим, что собственному значению λ^* отвечает собственная функция $[P_{\lambda}(\mathbf{x})]^*$, а $\eta_{\lambda} = \eta_{\lambda}^*$ и $[U_{\lambda}]^* = U_{\lambda}$. Спектр в таком случае получается путем прибавления к (5.3.197) членов, комплексно-сопряженных тем, в которые входят комплексные собственные значения.

В случае когда $\varepsilon = 1$ и, следовательно, $\eta_\lambda = 1$, матрица спектральных плотностей принимает более простой вид:

$$S(\omega) = \frac{1}{\pi} \sum_{\lambda} \frac{\lambda U_{\lambda} U_{\lambda}^T}{\lambda^2 + \omega^2} \quad (5.3.198)$$

и, очевидно, является положительно определенной. Спектр для одной переменной q , полученной из x с помощью линейной комбинации типа

$$q = m \cdot x, \quad (5.3.199)$$

дается выражением

$$S_q(\omega) = m^T S(\omega) m = \frac{1}{\pi} \sum_{\lambda} \frac{\lambda (m \cdot U_{\lambda})^2}{\lambda^2 + \omega^2}, \quad (5.3.200)$$

которое является строго убывающей функцией ω .

В случае когда $\varepsilon \neq 1$, положительность спектра не очевидна, хотя из общих соображений (например, результата (3.7.19)), она должна бы следовать. Важное различие возникает вследствие того, что не все λ теперь должны быть действительными, и поэтому в знаменателе могут возникать выражения вида

$$1/[\lambda_R^2 + (\omega - \lambda_I)^2], \quad (5.3.201)$$

благодаря которым в спектре возможны пики вдали от $\omega = 0$.

5.4. ВРЕМЯ ПЕРВОГО ДОСТИЖЕНИЯ ГРАНИЦЫ ОБЛАСТИ (ОДНОРОДНЫЕ ПРОЦЕССЫ)

Здесь мы хотим рассмотреть многомерный аналог задачи о времени выхода за пределы интервала (разд. 5.2.7). Как и прежде, мы ограничиваемся однородными процессами.

Суть задачи состоит в том, чтобы рассчитать, в какой самый ранний момент времени частица, находящаяся внутри области R с границей S , покинет эту область.

Как и в одномерном случае, рассмотрим обратное уравнение Фоккера — Планка с поглощающей границей S :

$$p(x', t | x, 0) = 0 \quad (x \in S). \quad (5.4.1)$$

Вероятность того, что частица, находившаяся в начальный момент в точке x , находится к моменту t все еще внутри R , равна

$$G(x, t) = \int_R dx' p(x', t | x, 0), \quad (5.4.2)$$

и если обозначить через T момент, когда частица покидает R , то

$$\text{Prob}(T \geq t) = G(\mathbf{x}, t). \quad (5.4.3)$$

Поскольку процесс однородный, функция $G(\mathbf{x}, t)$ подчиняется обратному уравнению Фоккера — Планка

$$\partial_t G(\mathbf{x}, t) = \sum_i A_i(\mathbf{x}) \partial_i G(\mathbf{x}, t) + 2 \sum_{i,j} B_{ij}(\mathbf{x}) \partial_i \partial_j G(\mathbf{x}, t). \quad (5.4.4)$$

Начальные условия для (5.4.4) следуют из

$$\text{а) } p(\mathbf{x}', 0 | \mathbf{x}, 0) = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \quad (5.4.5)$$

так что

$$\begin{aligned} G(\mathbf{x}, 0) &= 1 & \mathbf{x} \in R \\ &= 0 & \text{вне } R; \end{aligned} \quad (5.4.6)$$

б) в силу (5.4.1)

$$G(\mathbf{x}, t) = 0 \quad \mathbf{x} \in S. \quad (5.4.7)$$

Как и в разд. 5.2.7, эти начальные условия означают, что среднее время выхода из области R для частицы, находящейся в точке \mathbf{x} , которое мы обозначим через $T(\mathbf{x})$, удовлетворяет уравнению

$$\sum_i A_i(\mathbf{x}) \partial_i T(\mathbf{x}) + 2 \sum_{i,j} B_{ij}(\mathbf{x}) \partial_i \partial_j T(\mathbf{x}) = -1 \quad (5.4.8)$$

с граничным условием

$$T(\mathbf{x}) = 0 \quad \mathbf{x} \in S, \quad (5.4.9)$$

а его моменты

$$T_n(\mathbf{x}) = \langle T^n \rangle = \int_0^\infty t^{n-1} G(\mathbf{x}, t) dt \quad (5.4.10)$$

удовлетворяют рекуррентному равенству

$$-n T_{n-1}(\mathbf{x}) = \sum_i A_i(\mathbf{x}) \partial_i T_n(\mathbf{x}) + \sum_{i,j} B_{ij}(\mathbf{x}) \partial_i \partial_j T_n(\mathbf{x}) \quad (5.4.11)$$

с граничными условиями

$$T_n(\mathbf{x}) = 0 \quad \mathbf{x} \in S. \quad (5.4.12)$$

Включение отражающих границ. Может случиться, что S , граница R , распадается на участки S_r и S_a , так что при встрече с S_r частица отражается, а при встрече с S_a поглощается. Тогда граничные условия для

$G(x, t)$, вытекающие из результатов разд. 5.2.4, имеют вид

$$\sum_{i,j} n_i B_{ij}(x) \partial_j G(x, t) = 0 \quad (x \in S_r) \quad (5.4.13)$$

$$G(x, t) = 0 \quad (x \in S_a) \quad (5.4.14)$$

и, следовательно,

$$\sum_{i,j} n_i B_{ij}(x) \partial_j T_n(x) = 0 \quad (x \in S_r) \quad (5.4.15)$$

$$T_n(x) = 0 \quad (x \in S_a). \quad (5.4.16)$$

5.4.1. РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ, СВЯЗАННЫХ С ДОСТИЖЕНИЕМ ГРАНИЦ

Основное дифференциальное уравнение в частных производных для среднего времени достижения границы легко решается лишь в одномерном случае, а также тогда, когда удастся воспользоваться симметрией задачи. Мощным инструментом оказываются асимптотические методы, о которых мы поговорим в гл. 9.

Здесь же мы лишь проиллюстрируем применение некоторых методов на примерах.

а) Процесс Орнштейна — Уленбека в двух измерениях при наличии вращательной симметрии

Пусть частица движется по закону

$$dx = -kx dt + \sqrt{D} dW_1(t) \quad (5.4.17)$$

$$dy = -ky dt + \sqrt{D} dW_2(t).$$

Нас интересует среднее время выхода из области

$$x^2 + y^2 \leq a^2 \quad (5.4.18)$$

для частицы с начальными координатами (x_0, y_0) .

Эта задача легко сводится к одномерному случаю для переменной

$$r = \sqrt{x^2 + y^2}, \quad (5.4.19)$$

в которой уравнения движения принимают вид (ср. разд. 4.4.5)

$$dr = (-kr + \frac{1}{2} D/r) dt + \sqrt{D} dW(t), \quad (5.4.20)$$

а интересующая нас область превращается в интервал $(0, a)$. Такую

задачу легко решить, используя (5.2.165) с заменами

$$\left. \begin{aligned} U(x) &\rightarrow \frac{1}{2}kr^2 - \frac{1}{2}D \log r \\ D &\rightarrow \frac{1}{2}D \\ x_0 &\rightarrow a \\ a &\rightarrow \sqrt{x_0^2 + y_0^2} \equiv r_0 \\ -\infty &\rightarrow 0. \end{aligned} \right\} \quad (5.4.21)$$

Таким образом,

$$= \frac{1}{D} \int_{r_0}^a y^{-1} \exp[ky^2/D] dy \int_0^y z \exp(-kz^2/D) dz. \quad (5.4.22)$$

Поставленная нами задача оказалась по своей сути одномерной. Это, впрочем, довольно редкий случай.

б) Использование собственных функций

Допустим, мы воспользовались собственными функциями $P_\lambda(x)$ и $Q_\lambda(x)$ и разложили среднее время выхода за пределы области в виде

$$T(x) = \sum t_\lambda Q_\lambda(x). \quad (5.4.23)$$

Мы считаем, что $P_\lambda(x)$ и $Q_\lambda(x)$ удовлетворяют граничным условиям для конкретной рассматриваемой задачи, так что $T(x)$ в виде (5.4.23) также удовлетворяет соответствующим граничным условиям.

Далее, разложим

$$-1 = \sum_\lambda I_\lambda Q_\lambda(x), \quad (5.4.24)$$

где

$$I_\lambda = - \int_R dx P_\lambda(x). \quad (5.4.25)$$

Подставляя (5.4.23) в (5.4.8), получаем

$$\lambda t_\lambda = - I_\lambda, \quad (5.4.26)$$

откуда

$$T(x) = \sum_\lambda \frac{1}{\lambda} Q_\lambda(x) \int_R dx P_\lambda(x). \quad (5.4.27)$$

Успех применения этого метода зависит от знания собственных значений, удовлетворяющих соответствующим граничным условиям на S и нормированных в R .

в) Асимптотический метод

Если наименьшее собственное значение λ_1 много меньше остальных, то приближенное значение суммы ряда может описываться первым членом разложения. Это означает, что собственная функция Q_1 аппроксимирует решение уравнения

$$\sum_i A_i(x) \partial_i f(x) + \frac{1}{2} \sum_{i,j} B_{ij}(x) \partial_i \partial_j f(x) = 0. \quad (5.4.28)$$

Следовательно,

$$Q_1(x) \sim K, \quad (5.4.29)$$

где K — константа. С учетом взаимной биортогональности P_λ и Q_λ мы можем записать

$$1 = \int dx P_1(x) Q_1(x) \sim K \int dx P_1(x), \quad (5.4.30)$$

так что

$$T(x) \sim 1/\lambda_1. \quad (5.4.31)$$

Приводимые здесь рассуждения не слишком строги. Более серьезное обоснование будет дано в гл. 9.

г) Метод собственных функций

Двумерное броуновское движение: частица движется на плоскости (x, y) внутри квадрата, углы которого имеют координаты $(0, 0)$, $(0, 1)$, $(1, 0)$, $(1, 1)$. Стороны квадрата представляют собой поглощающие границы; $T(x, y)$ описывается уравнением

$$\frac{D}{2} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) = -1. \quad (5.4.32)$$

Собственными функциями, удовлетворяющими граничному условию $T = 0$ на границах квадрата, являются

$$P_{n,m}(x, y) = \sin(n\pi x) \sin(m\pi y) \quad (5.4.33)$$

$$Q_{n,m}(x, y) = 4 \sin(n\pi x) \sin(m\pi y), \quad (5.4.34)$$

где n, m — целые положительные числа. Собственные значения определяются как

$$\lambda_{n,m} = \frac{\pi^2 D}{2} (n^2 + m^2), \quad (5.4.35)$$

а

$$\int_R dx dy P_{n,m}(x, y) = 0, \text{ когда } n \text{ или } m \text{ четное} \quad (5.4.36)$$

$$= \frac{4}{m\pi^2}, \text{ когда } n \text{ и } m \text{ нечетные.}$$

Отсюда

$$T(x, y) = \frac{1}{D} \sum_{\substack{n,m \\ \text{odd}}} \frac{32}{\pi^2 nm(m^2 + n^2)} \sin(n\pi x) \sin(m\pi y). \quad (5.4.37)$$

5.4.2 РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ТОЧЕК ВЫХОДА

Эта задача — многомерный аналог задачи, рассмотренной в разд. 5.2.8: какова вероятность выхода частицы через окрестность $dS(a)$ точки a границы S . Пусть вся граница является поглощающей (рис. 5.5).

Вероятность того, что частица выйдет на участке $dS(a)$ до момента t , равна

$$g(a, x, t) |dS(a)| = - \int_0^t dt' J(a, t' | x, 0) \cdot dS(a). \quad (5.4.38)$$

Рассуждения, аналогичные проведенным в разд. 5.2.8, показывают, что $g(a, x, t)$ подчиняется обратному уравнению Фоккера — Планка

$$\sum_i A_i(x) \partial_i g(a, x, t) + \frac{1}{2} \sum_{i,j} B_{ij}(x) \partial_i \partial_j g(a, x, t) = \partial_t g(a, x, t). \quad (5.4.39)$$

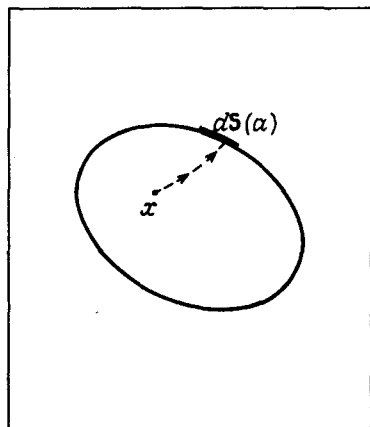


Рис. 5.5. Область и поверхность, рассматриваемые в разд. 5.4.2.

Граничные условия следуют по определению. В начальный момент

$$g(\mathbf{a}, \mathbf{x}, 0) = 0 \quad \text{при } \mathbf{x} \neq \mathbf{a}, \mathbf{x} \in R \quad (5.4.40)$$

и во все моменты времени

$$g(\mathbf{a}, \mathbf{x}, t) = 0 \quad \text{при } \mathbf{x} \neq \mathbf{a}, \mathbf{x} \in S. \quad (5.4.41)$$

Если $\mathbf{x} = \mathbf{a}$, то частица обязательно покинет область на участке $dS(\mathbf{a})$, поэтому

$$g(\mathbf{a}, \mathbf{a}, t) dS(\mathbf{a}) = 1 \quad \text{для всех } t, \quad (5.4.42)$$

или

$$g(\mathbf{a}, \mathbf{x}, t) = \delta_s(\mathbf{a} - \mathbf{x}) \quad \mathbf{x} \in S, \quad \text{для всех } t, \quad (5.4.43)$$

где $\delta_s(\mathbf{a} - \mathbf{x})$ есть поверхностная дельта-функция, такая, что

$$\int |dS(\mathbf{a})| \delta_s(\mathbf{a} - \mathbf{x}) = 1. \quad (5.4.44)$$

Окончательная вероятность выхода через $dS(\mathbf{a})$ равна

$$\pi(\mathbf{a}, \mathbf{x}) |dS(\mathbf{a})| = g(\mathbf{a}, \mathbf{x}, \infty) |dS(\mathbf{a})|, \quad (5.4.45)$$

а среднее время выхода за пределы области, при условии что частица выходит в точке \mathbf{a} , равно

$$T(\mathbf{a}, \mathbf{x}) = - \int_0^{\infty} dt g(\mathbf{a}, \mathbf{x}, t) / \pi(\mathbf{a}, \mathbf{x}). \quad (5.4.46)$$

Аналогично тому как это сделано в разд. 5.2.8, мы можем показать, что $T(\mathbf{a}, \mathbf{x})$ удовлетворяет уравнению

$$\sum_i A_i(\mathbf{x}) \partial_i [\pi(\mathbf{a}, \mathbf{x}) T(\mathbf{a}, \mathbf{x})] + \frac{1}{2} \sum_{i,j} B_{ij}(\mathbf{x}) \partial_i \partial_j [\pi(\mathbf{a}, \mathbf{x}) T(\mathbf{a}, \mathbf{x})] = -\pi(\mathbf{a}, \mathbf{x})$$

(5.4.47)

с граничными условиями

$$\pi(\mathbf{a}, \mathbf{x}) T(\mathbf{a}, \mathbf{x}) = 0, \quad \mathbf{x} \in S. \quad (5.4.48)$$

Затем, устремляя $t \rightarrow \infty$ в соответствующем уравнении Фоккера — Планка для $g(\mathbf{a}, \mathbf{x}, t)$, получаем уравнение для $\pi(\mathbf{a}, \mathbf{x})$:

$$\sum_i A_i(\mathbf{x}) \partial_i [\pi(\mathbf{a}, \mathbf{x})] + \frac{1}{2} \sum_{i,j} B_{ij}(\mathbf{x}) \partial_i \partial_j [\pi(\mathbf{a}, \mathbf{x})] = 0. \quad (5.4.49)$$

Граничным условием для (5.4.49) служит

$$\pi(\mathbf{a}, \mathbf{x}) = 0 \quad \mathbf{a} \neq \mathbf{x}, \quad \mathbf{x} \in S, \quad (5.4.50)$$

а также

$$\int |dS(\mathbf{a})| \pi(\mathbf{a}, \mathbf{x}) = 1. \quad (5.4.51)$$

Это же можно записать в виде

$$\pi(\mathbf{a}, \mathbf{x}) = \delta_s(\mathbf{a} - \mathbf{x}) \quad \mathbf{x} \in S, \quad (5.4.52)$$

где $\delta_s(\mathbf{a} - \mathbf{x})$ есть поверхностная дельта-функция для границы S .

Приближенные методы для диффузионных процессов

Методы, описанные в предыдущих двух главах, ориентировались на получение точных результатов, и это, естественно, ограничивало их практическую полезность. Основу большинства приложений составляют приближенные методы, в которых всегда изыскивается способ сведения задачи к разрешимому виду. Можно даже сказать, что все приложения так или иначе связаны с поиском подходящих приближений.

Особое значение имеют два приближенных метода. Первый из них — это метод разложения по малому шуму, при котором рассматриваются решения, линеаризованные по отношению к детерминистическому уравнению. Поскольку шум часто оказывается на практике малым, этот метод находит широкое применение. Уравнения здесь сводятся к последовательности процессов Орнштейна — Уленбека, зависящих от времени, по большей части рассматривается первое приближение.

Второй большой класс приближенных методов основан на адиабатическом приближении, в котором выделяются различные временные масштабы, и быстрые переменные полностью исключаются. Эти методы будут рассматриваться во второй части настоящей главы.

6.1. ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ, ОСНОВАННЫЕ НА МАЛОСТИ ШУМА

Во многих физических и химических задачах стохастичность в динамической системе возникает из-за тепловых флуктуаций, которые всегда весьма малы. Их существование удастся заметить лишь с помощью скрупулезных измерений. В этих случаях временная эволюция системы является, по сути, детерминированной, а флуктуации представляют собой лишь малые возмущения.

Рассмотрим для примера простой линейный случай, допускающий точное решение: процесс Орнштейна — Уленбека для одной переменной, описываемый стохастическим дифференциальным уравнением

$$dx = -kx dt + \varepsilon dW(t), \quad (6.1.1)$$

которому соответствует уравнение Фоккера — Планка

$$\partial_t p = \partial_x (kx p) + \frac{1}{2} \varepsilon^2 \partial_x^2 p. \quad (6.1.2)$$

Решения этих уравнений уже рассматривались в разд. 3.8.4 и 4.4.4. Здесь ε является малым параметром, который в детерминистическом пределе обращается в нуль. Для двух вышеприведенных уравнений, однако, предел $\varepsilon \rightarrow 0$ оказывается существенно различным.

Когда $\varepsilon \rightarrow 0$, стохастическое дифференциальное уравнение (6.1.1) перестает быть стохастическим, но сохраняет первый порядок относительно t , поэтому переход к пределу $\varepsilon \rightarrow 0$ не порождает сингулярности. Напротив, в пределе $\varepsilon \rightarrow 0$ уравнение (6.1.2) превращается из дифференциального уравнения второго порядка в уравнение первого порядка. Таким образом, при переходе к пределу возникает особенность, и всякая теория возмущений должна это учитывать.

Для уравнения (6.1.1) существует точное решение (см. (4.4.26))

$$x_\varepsilon(t) = c e^{-kt} + \varepsilon \int_0^t e^{-k(t-t')} dW(t'), \quad (6.1.3)$$

которое можно записать в виде

$$x_\varepsilon(t) = x_0(t) + \varepsilon x_1(t), \quad (6.1.4)$$

т. е. решение представимо в виде разложения по степеням малого параметра ε . Кроме того, член нулевого порядка $x_0(t)$ есть решение уравнения при $\varepsilon = 0$, т. е. уравнения

$$dx = -kx dt. \quad (6.1.5)$$

В случае с уравнением Фоккера — Планка (6.1.2) ситуация далеко не так проста. В предположении, что c является нестохастической переменной, точное решение является гауссовским распределением, среднее значение и дисперсия которого даются выражениями

$$\langle x(t) \rangle = \alpha(t) \equiv c e^{-kt} \quad (6.1.6)$$

$$D \{x(t)\} = \varepsilon^2 \beta(t) \equiv \varepsilon^2 (1 - e^{-2kt}) / 2k, \quad (6.1.7)$$

так что

$$p_\varepsilon(x, t | c, 0) = \frac{1}{\varepsilon} \frac{1}{\sqrt{2\pi\beta(t)}} \exp \left\{ -\frac{1}{\varepsilon^2} \frac{[x - \alpha(t)]^2}{2\beta(t)} \right\}. \quad (6.1.8)$$

В пределе $\varepsilon \rightarrow 0$ решение для условной вероятности имеет вид

$$p_\varepsilon(x, t | c, 0) \rightarrow \delta[x - \alpha(t)], \quad (6.1.9)$$

что в точности соответствует решению первого порядка для СДУ, которое представляет собой детерминированную кривую вдоль траектории $x(t) = c \exp(-kt)$. Однако p_ε не удастся разложить в простой степенной ряд относительно ε : для того чтобы осуществить разложение в степенной ряд, необходимо в каждый момент времени определить масштабную переменную

$$y = [x - \alpha(t)]/\varepsilon \quad (6.1.10)$$

и тогда плотность вероятности для y принимает вид

$$\bar{p}_\varepsilon(y, t | 0, 0) = p_\varepsilon(x, t | c, 0) \frac{dx}{dy} \quad (6.1.11)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi\beta(t)}} \exp\left[-\frac{y^2}{2\beta(t)}\right]. \quad (6.1.12)$$

Для масштабной переменной y плотность вероятности не имеет сингулярности, на самом деле мы избавляемся и от зависимости от ε .

Преобразование (6.1.10) можно переписать в виде

$$x = \alpha(t) + \varepsilon y \quad (6.1.13)$$

и истолковать следующим образом. Из (6.1.12) видно, что распределение y является нормальным с нулевым средним значением, а его дисперсия есть $\beta(t)$. Смысл выражения (6.1.13) сводится к тому, что отклонение x от детерминированной траектории $\alpha(t)$ имеет порядок ε при $\varepsilon \rightarrow 0$, а коэффициентом служит гауссовская случайная переменная y . Этот результат, по сути, эквивалентен выводу, к которому мы пришли с использованием метода СДУ.

Полученные результаты можно представить в следующем общем виде. Пусть система описывается СДУ

$$dx = a(x)dt + \varepsilon b(x) dW(t). \quad (6.1.14)$$

Тогда решение может быть записано в форме

$$x_\varepsilon(t) = x_0(t) + \varepsilon x_1(t) + \varepsilon^2 x_2(t) + \dots, \quad (6.1.15)$$

позволяющей искать последовательные приближения $x_n(t)$. В частности, $x_0(t)$ является решением детерминистического уравнения

$$dx = a(x)dt. \quad (6.1.16)$$

Наоборот, мы можем рассматривать уравнение Фоккера — Планка

$$\partial_t p = -\partial_x [a(x)p] + \frac{1}{2}\varepsilon^2 \partial_x^2 [b(x)^2 p]. \quad (6.1.17)$$

В таком случае, переходя к *масштабной переменной* и получая таким образом

$$y = [x - x_0(t)]/\varepsilon \quad (6.1.18)$$

$$\bar{p}_\varepsilon(y, t) = [p(x, t | c, 0)]/\varepsilon, \quad (6.1.19)$$

мы можем записать разложение по возмущениям

$$\bar{p}_\varepsilon(y, t) = \bar{p}_0(y, t) + \varepsilon \bar{p}_1(y, t) + \varepsilon^2 \bar{p}_2(y, t) + \dots \quad (6.1.20)$$

Здесь мы обнаружим, что $\bar{p}_0(y, t)$ является истинной плотностью вероятности (положительной и нормированной), в то время как члены высших порядков могут на каких-то участках принимать и отрицательные значения. Можно утверждать, следовательно, что теория возмущений для уравнения Фоккера — Планка не является вероятностной. В противоположность этому для стохастического дифференциального уравнения решение разлагается в ряд по случайным переменным $x_n(t)$, каждая из которых имеет собственное распределение вероятности, так что система является вероятностной на каждом уровне.

И наконец, самое заметное различие состоит в том, что первым членом разложения для СДУ оказывается $x_0(t)$, который является решением СДУ при $\varepsilon = 0$ в (6.1.1). Первый же член $\bar{p}_0(y, t)$ в (6.1.20) *не есть* решение (6.1.2) при $\varepsilon = 0$. В общем случае он представляет собой лишь предел УФП для $\bar{p}_\varepsilon(y, t)$, который получают, принимая $\varepsilon = 0$ в УФП для масштабной переменной y .

6.2. РАЗЛОЖЕНИЯ ПО МАЛОМУ ШУМУ ДЛЯ СТОХАСТИЧЕСКИХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ

Рассмотрим стохастическое дифференциальное уравнение вида

$$dx = a(x)dt + \varepsilon b(x)dW(t), \quad (6.2.1)$$

где ε — малый параметр. На этом этапе для упрощения вычислений мы не учитываем зависимость $a(x)$ и $b(x)$ от времени: как используемые приемы, так и результаты от этого не меняются. Предположим также, что решение (6.2.1) $x(t)$ может быть записано в виде

$$x(t) = x_0(t) + \varepsilon x_1(t) + \varepsilon^2 x_2(t) + \dots \quad (6.2.2)$$

Кроме того, допустим, что мы можем записать

$$a(x) = a(x_0 + \varepsilon x_1 + \varepsilon^2 x_2 + \dots) \quad (6.2.3)$$

$$= a_0(x_0) + \varepsilon a_1(x_0, x_1) + \varepsilon^2 a_2(x_0, x_1, x_2) + \dots \quad (6.2.4)$$

Конкретная функциональная зависимость в (6.2.4) имеет существенное значение, и ее нетрудно продемонстрировать, поскольку

$$\begin{aligned} a(x) &= a(x_0 + \sum_{m=1}^{\infty} \varepsilon^m x_m) \\ &= \sum_{p=0}^{\infty} \frac{1}{p!} \frac{d^p a(x_0)}{dx_0^p} \left(\sum_{m=1}^{\infty} \varepsilon^m x_m \right)^p. \end{aligned} \quad (6.2.5)$$

Формальное суммирование этого выражения представляет сложную задачу, однако можно без труда вычислить первые несколько степеней ε и получить

$$\begin{aligned} a_0(x_0) &= a(x_0) \\ a_1(x_0, x_1) &= x_1 \frac{da(x_0)}{dx_0} \\ a_2(x_0, x_1, x_2) &= x_2 \frac{da(x_0)}{dx_0} + \frac{1}{2} x_1^2 \frac{d^2 a(x_0)}{dx_0^2} \\ a_3(x_0, x_1, x_2, x_3) &= x_3 \frac{da(x_0)}{dx_0} + x_1 x_2 \frac{d^2 a(x_0)}{dx_0^2} + \frac{1}{6} x_1^3 \frac{d^3 a(x_0)}{dx_0^3}. \end{aligned} \quad (6.2.6)$$

Общий вид для всех членов в явной форме записать трудно, но можно заметить, что для $n \geq 1$

$$a_n(x_0, x_1, \dots, x_n) = x_n \frac{da(x_0)}{dx_0} + A_n(x_0, x_1, \dots, x_{n-1}), \quad (6.2.7)$$

где A_n не зависит от x . На самом деле, непосредственно из (6.2.5) можно увидеть, что коэффициент при ε^n может включать x_n лишь в том случае, если x_n попадает туда из члена $p = 1$; в остальном же ε^n образуется из членов с $m < n$, в которые x_n не входит.

Представление a_n в виде (6.2.7) имеет важное значение. Ясно, что если мы также потребуем, чтобы

$$b(x) = b_0(x_0) + \varepsilon b_1(x_0, x_1) + \varepsilon^2 b_2(x_0, x_1, x_2) + \dots, \quad (6.2.8)$$

то все рассуждения, проведенные для a_n , остаются в силе. Для разложения по возмущениям это, однако, не столь важно.

Подставим теперь разложения (6.2.2, 7, 8) в стохастическое дифференциальное уравнение (6.2.1) и приравняем коэффициенты при одинаковых степенях ε . В результате мы получим бесконечную систему стохастических дифференциальных уравнений. Для упрощения записи воспользуемся обозначением

$$k(x_0) = - \frac{da(x_0)}{dx_0}. \quad (6.2.9)$$

Получим

$$dx_0 = a(x_0)dt, \quad (6.2.10a)$$

$$dx_n = [-k(x_0)x_n + A_n(x_0, \dots, x_{n-1})]dt + b_{n-1}(x_0, \dots, x_{n-1})dW(t). \quad (6.2.10б)$$

Эти уравнения можно теперь решать последовательно. Уравнение (6.2.10a) является обыкновенным дифференциальным уравнением (возможно, нелинейным), на которое наложено некоторое начальное условие и решение которого предполагается известным. Можно, конечно, наложить независимые нетривиальные начальные условия на все x_n , но это неоправданно усложняет дело. Проще всего допустить, что

$$x_0(0) = x(0) \quad (6.2.11)$$

$$x_n(0) = 0 \quad n \geq 1,$$

принимая за начальный момент $t = 0$.

В предположении, что решением (6.2.9) является

$$x_0(t) = \alpha(t), \quad (6.2.12)$$

уравнение (6.2.10a) для $n = 1$ записывается в виде

$$dx_1 = -k[\alpha(t)]x_1dt + b[\alpha(t)]dW(t), \quad (6.2.13)$$

(здесь, как следует из (6.2.5), A_0 обращается в нуль, а $b_0 = b$).

Это уравнение, первое в теории возмущений, описывает зависящий от времени процесс Орнштейна — Уленбека. Его решение можно получить непосредственно, используя методы разд. 4.4.9, сведенные к случаю одной переменной. Решение получается путем умножения на интегрирующий множитель

$$\exp \left\{ \int_0^t dt' k[\alpha(t')] \right\}$$

и имеет вид

$$x_1(t) = \int_0^t b[\alpha(t')] \exp \left\{ - \int_{t'}^t k[\alpha(s)] ds \right\} dW(t'), \quad (6.2.14)$$

где уже учтено начальное условие $x_1(0) = 0$.

Во многих случаях это приближение вполне адекватно и сводится к линеаризации исходного уравнения относительно детерминированного решения. Члены высших порядков не так просты, поскольку (6.2.10б) имеет более сложный вид, однако подход, в сущности, остается прежним. Для того чтобы решить уравнение для $x_N(t)$, мы предполагаем известными все $x_n(t)$ для $n < N$, так что после подстановки этих ре-

шений A_n и b_{n-1} становятся известными случайными функциями времени. Тогда (6.2.10б) принимает вид

$$dx_N = \{-k[\alpha(t)]x_N + A_N(t)\} dt + b_{N-1}(t)dW(t), \quad (6.2.15)$$

и его решение находится либо непосредственно, либо, согласно сказанному в разд. 4.4.9, как

$$x_N(t) = \int_0^t [A_N(t')dt' + b_{N-1}(t')dW(t')] \exp\left\{-\int_0^t k[\alpha(s)]ds\right\}. \quad (6.2.16)$$

Формальная сторона дела на этом исчерпывается. Остается, однако, установить границы применимости метода и возможность его практического применения. Как и во всякой теории возмущений, с повышением порядка члены быстро выходят из-под контроля.

6.2.1 ПРЕДЕЛЫ ПРИМЕНИМОСТИ РАЗЛОЖЕНИЯ

В общем случае разложение не является сходящимся степенным рядом. Действительно, согласно (6.2.14), $x_1(t)$, будучи просто интегралом Ито с нестохастическими коэффициентами, есть гауссовская переменная и поэтому может с конечной вероятностью оказаться больше любого фиксированного значения. Следовательно, описанный метод даст сходящийся ряд лишь в том случае, когда все степенные ряды, входящие в (6.2.5), будут сходиться для всех значений аргументов, в том числе и сколь угодно больших.

Мы можем показать, что разложение является *асимптотическим*, используя результаты разд. 4.3.7 относительно зависимости от параметра.

Определим остаток через

$$y_n(\varepsilon, t) = [x(t) - \sum_{r=0}^n \varepsilon^r x_r(t)]/\varepsilon^{n+1}, \quad (6.2.17)$$

где $x_r(t)$ суть решения системы стохастических дифференциальных уравнений (6.2.10) с начальными условиями (6.2.11).

Выведем теперь уравнение для $y_n(t)$. Мы можем записать

$$a[x(t)] = a\left[\sum_{r=0}^n \varepsilon^r x_r(t) + y_n(\varepsilon, t)\varepsilon^{n+1}\right] \quad (6.2.18)$$

и определить функцию

$$\begin{aligned} \hat{a}_{n+1}[X_0, X_1, \dots, X, Y, \varepsilon] &= \varepsilon^{-n-1} \left\{ a\left[\sum_{r=0}^n \varepsilon^r X_r + \varepsilon^{n+1} Y\right] \right. \\ &\quad \left. - \sum_{r=0}^n \varepsilon^r a_r(X_0, X_1, \dots, X_r) \right\}. \end{aligned} \quad (6.2.19)$$

Потребуем, чтобы для всех фиксированных X_0, X_1, \dots, X_N, Y существовал предел

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \hat{a}_{n+1}[X_0, X_1, \dots, X_n, Y, \varepsilon]. \quad (6.2.20)$$

Аналогичным образом определим $\hat{b}_n[X_0, X_1, \dots, X_n, Y, \varepsilon]$ и наложим на эту функцию такое же условие.

Это условие не является вероятностным: оно лишь выражает определенные аналитические свойства функций $a(x)$ и $b(x)$; по сути, требуется, чтобы разложения (6.2.4, 8) были просто асимптотическими разложениями.

Теперь мы можем записать дифференциальное уравнение для $y_n(\varepsilon, t)$ в виде

$$dy_n = \hat{a}_{n+1}[x_0(t), x_1(t), \dots, x_n(t), y_n, \varepsilon] dt + \hat{b}_n[x_0(t), x_1(t), \dots, x_{n-1}(t), y_n, \varepsilon] dW(t). \quad (6.2.21)$$

Коэффициенты при dt и $dW(t)$ теперь являются случайными функциями, поскольку функции $x_r(t)$ случайны. Выполнение требования (6.2.20), однако, обеспечено почти наверняка, что гарантирует существование пределов по вероятности

$$\text{st-lim}_{\varepsilon \rightarrow 0} \hat{a}_{n+1}[x_0(t), x_1(t), \dots, x_n(t), y_n, \varepsilon] \equiv \tilde{a}_{n+1}(t, y_n) \quad (6.2.22)$$

и

$$\text{st-lim}_{\varepsilon \rightarrow 0} \hat{b}_n[x_0(t), x_1(t), \dots, x_{n-1}(t), y_n, \varepsilon] \equiv \tilde{b}_n(t, y_n). \quad (6.2.23)$$

Этого достаточно, чтобы удовлетворить требование разд. 4.3.7 о непрерывности решений СДУ (6.2.21) относительно параметра ε , если при этом удовлетворяются также соответствующие условия 2 и 3 разд. 4.3.7. Таким образом, $y_n(0, t)$ существует как решение СДУ:

$$dy_n(0, t) = \tilde{a}_{n+1}[t, y_n(0, t)] + \tilde{b}_n[t, y_n(0, t)]dW(t). \quad (6.2.24)$$

Согласно определению (6.2.17), это означает, что

$$x(t) - \sum_{r=0}^n \varepsilon^r x_r(t) \sim \varepsilon^{n+1}. \quad (6.2.25)$$

Отсюда следует, что разложение по степеням ε является асимптотическим разложением.

6.2.2. СТАЦИОНАРНЫЕ РЕШЕНИЯ (ОДНОРОДНЫЕ ПРОЦЕССЫ)

Стационарное решение получают, устремляя $t \rightarrow \infty$. Если процесс, как указано, однородный и эргодический, характер начального условия не играет роли. В таком случае выбирают $x_0(0)$ так, чтобы $a[x_0(0)] = 0$,

и решением (6.2.10а) является

$$x_0(t) = x_0(0) \equiv \alpha \quad (6.2.26)$$

(где мы пишем просто α вместо $\alpha(t)$).

В силу выбранного начального условия при $t = 0$ решение (6.2.14) уравнения первого порядка не является стационарным процессом. Следует либо устремлять $t \rightarrow \infty$, либо накладывать начальное условие не при $t = 0$, а при $t = -\infty$. Выбирая последнее, мы имеем

$$x_1^s(t) = \int_{-\infty}^t b(\alpha) \exp[-(t-t')k(\alpha)] dW(t'). \quad (6.2.27)$$

Аналогично

$$x_n^s(t) = \int_{-\infty}^t [A_n^s(t') dt' + b_{n-1}^s(t') dW(t')] \exp[-(t-t')k(\alpha)], \quad (6.2.28)$$

где под A_n^s и b_{n-1}^s мы понимаем значения A_n и b_{n-1} , получаемые при подстановке стационарных значений всех аргументов. Из (6.2.28) ясно, что по построению решение $x_n^s(t)$ стационарно. Очевидно, что интегралы в (6.2.27, 28) сходятся лишь при $k(\alpha) > 0$. Это означает, что только *устойчивое* стационарное решение детерминированного процесса порождает этим методом стационарное решение стохастического уравнения. Это вполне естественно: при наложении флуктуаций на неустойчивое состояние система выйдет из этого состояния.

6.2.3. СРЕДНЕЕ ЗНАЧЕНИЕ, ДИСПЕРСИЯ И ВРЕМЕННАЯ КОРРЕЛЯЦИОННАЯ ФУНКЦИЯ

Если разложение в ряд по ε в каком-то смысле справедливо, то полезно также знать разложения для среднего значения и дисперсии. Очевидно,

$$\langle x(t) \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \varepsilon^n \langle x_n(t) \rangle \quad (6.2.29)$$

$$D \{x(t)\} = \sum_{s=0}^{\infty} \varepsilon^s \sum_{m=0}^{\infty} \langle x_m(t) x_{n-m}(t) \rangle - \langle x_m(t) \rangle \langle x_{n-m}(t) \rangle. \quad (6.2.30)$$

Поскольку, однако, мы принимаем детерминированное начальное условие, и $x_0(t)$ поэтому детерминировано, все члены с $x_0(t)$ обращаются в нуль. В силу этого

$$D \{x(t)\} = \varepsilon^2 D \{x_1(t)\} + 2\varepsilon^3 \langle x_1(t), x_2(t) \rangle + \varepsilon^4 [2\langle x_1(t), x_3(t) \rangle + D \{x_2(t)\}] + \dots \quad (6.2.31)$$

и аналогично

$$\begin{aligned} \langle x(t), x(s) \rangle &= \varepsilon^2 \langle x_1(t), x_1(s) \rangle + \varepsilon^3 [\langle x_1(t), x_2(s) \rangle + \langle x_1(s), x_2(t) \rangle] \\ &+ \varepsilon^4 [\langle x_1(t), x_3(s) \rangle + \langle x_1(s), x_3(t) \rangle + \langle x_2(t), x_2(s) \rangle] \\ &+ \dots \end{aligned} \quad (6.2.32)$$

6.2.4. СЛОЖНОСТИ ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ ДЛЯ МАЛОГО ШУМА

а) Пример: процесс третьего порядка

Рассмотрим стохастическое дифференциальное уравнение

$$dx = -x^3 dt + \varepsilon dW(t). \quad (6.2.33)$$

Нетрудно видеть, что условия разложения (6.2.20) тривиально удовлетворяются для коэффициентов при dt и $dW(t)$, и для всякого конечного t асимптотическое разложение, члены которого $x_N(t)$ определяются выражением (6.2.16), имеет смысл. При $x = 0$, однако,

$$\left. \frac{d}{dx}(x^3) \right|_{x=0} = k(0) = 0, \quad (6.2.34)$$

а поскольку $x = 0$ есть стационарное решение детерминистического уравнения, разложения по возмущениям для стационарных решений едва ли будут сходиться, так как все экспоненциальные временные множители являются константами. Например, член первого порядка в стационарном разложении, согласно (6.2.27), имеет вид

$$x_1^s(t) = \int_{-\infty}^t dW(t') = W(t) - W(-\infty) \quad (6.2.35)$$

и расходится с вероятностью, равной единице, будучи гауссовской переменной с бесконечной дисперсией.

Проблема довольно очевидна. Вблизи $x = 0$ движение, описываемое уравнением (6.2.33), не может аппроксимироваться процессом Орнштейна — Уленбека. Например, стационарное распределение вероятности, которое является стационарным решением уравнения Фоккера — Планка

$$\partial_t p = \partial_x(x^3 p) + \frac{1}{2} \varepsilon^2 \partial_x^2 p, \quad (6.2.36)$$

имеет вид

$$p_s(x) = \mathcal{N} \exp(-x^4/2\varepsilon^2), \quad (6.2.37)$$

а соответствующие моменты даются выражениями

$$\begin{aligned} \langle x^n \rangle &= (2\varepsilon^2)^{n/4} \Gamma\left(\frac{n+1}{4}\right) / \Gamma\left(\frac{1}{4}\right) & (n \text{ четное}) \\ &= 0 & (n \text{ нечетное}). \end{aligned} \quad (6.2.38)$$

Член низшего порядка в разложении для дисперсии пропорционален ε в первой степени, а не в квадрате, как в (6.2.31).

В таком случае мы должны рассматривать процесс *третьего порядка*, описываемый (6.2.33) как принципиально новый процесс. Если мы введем новые масштабные переменные

$$\begin{aligned} x &= \sqrt{\varepsilon} y \\ t &= \tau/\varepsilon \end{aligned} \quad (6.2.39)$$

и используем равенство

$$dW(\tau/\varepsilon) = dW(\tau)/\sqrt{\varepsilon}, \quad (6.2.40)$$

то процесс третьего порядка можно привести к нецараметрическому виду

$$dy = -y^3 d\tau + dW(\tau). \quad (6.2.41)$$

Считая решение (6.2.41) известным, можно записать

$$x(t) = \sqrt{\varepsilon} y(\varepsilon t), \quad (6.2.42)$$

так что предел $\varepsilon \rightarrow 0$ достигается со скоростью $\sqrt{\varepsilon}$, а также и с более медленной временной зависимостью. Этот результат, полученный благодаря переходу к новому масштабу («скейлингу»), лежит в основе многих критических явлений.

Успешное применение теории возмущений в случае, когда $a(x)$ вблизи $x = 0$ пропорционально x^3 , должно, во-первых, включать переход к новым переменным типа (6.2.39), а во-вторых, основываться на теории возмущений, подобной описанной выше, но в которой в качестве нулевого приближения выступает процесс третьего порядка. Допустим, таким образом, что мы можем записать

$$a(x) = -x^3 c(x), \quad (6.2.43)$$

где $c(x)$ есть гладкая функция и $c(0) \neq 0$. Тогда, используя преобразования (6.2.39, 40), мы переписываем СДУ в виде

$$dy = -y^3 c(y\sqrt{\varepsilon}) d\tau + b(y\sqrt{\varepsilon}) dW(\tau). \quad (6.2.44)$$

Разлагая $y(t)$, $c(y\sqrt{\varepsilon})$, $b(y\sqrt{\varepsilon})$ в ряд по $\sqrt{\varepsilon}$, получаем результат теории возмущений. Если записать

$$y(t) = \sum_{n=0}^{\infty} \varepsilon^{n/2} y_n(t), \quad (6.2.45)$$

то для первых двух членов разложения получим

$$dy_0 = -y_0^3 c(0) d\tau + b(0) dW(\tau) \quad (6.2.46)$$

$$dy_1 = -y_1 \left[3y_0^2 c(0) + y_0^3 \frac{dc}{dx}(0) \right] d\tau + \left[\frac{db}{dx}(0) y_0 \right] dW(\tau). \quad (6.2.47)$$

Мы видим, что уравнение для y_1 представляет собой по существу уравнение, описывающее зависящий от времени процесс Орнштейна — Уленбека в случае стохастических коэффициентов. Таким образом, в принципе если вид процесса третьего порядка известен, то все остальное рассчитать нетрудно. На практике, однако, сведений о кубических процессах не так много, поэтому изложенные результаты теории возмущений имеют ограниченную полезность.

б) Процессы нечетного порядка

Если стохастическое дифференциальное уравнение имеет вид

$$dx = -x^\nu dt + \varepsilon dW(t), \quad (6.2.48)$$

то устойчивое детерминированное решение существует только для нечетных ν . В таком случае мы переходим к новым масштабным переменным

$$x = y \varepsilon^{2/(1+\nu)} \quad (6.2.49)$$

$$t = \tau \varepsilon^{2(1-\nu)/(1+\nu)} \quad (6.2.50)$$

и далее действуем так же, как и в случае процесса третьего порядка.

в) Бистабильные системы

Пусть система описывается уравнением

$$dx = (x - x^3) dt + \varepsilon dW(t), \quad (6.2.51)$$

которому соответствуют три детерминированных стационарных состояния: $x = 0, \pm 1$. Состояние при $x = 0$ неустойчиво и, как сразу следует из теории возмущений, не порождает стационарного стохастического процесса, поскольку экспоненты в интегралах разложения по возмущениям (6.2.27, 28) содержат возрастающие аргументы.

Решения $x_0(t)$ детерминистического дифференциального уравнения

$$dx/dt = x - x^3 \quad (6.2.52)$$

распадаются на три класса в зависимости от поведения при $t \rightarrow \infty$, а именно

$$1) x_0(t) < 0 \Rightarrow x_0(t) \rightarrow -1$$

$$2) x_0(0) = 0 \Rightarrow x_0(t) = 0 \quad \text{для всех } t$$

$$3) x_0(t) > 0 \Rightarrow x_0(t) \rightarrow 1.$$

Таким образом, в зависимости от начального условия мы получаем два различных асимптотических разложения, стационарные пределы которых описывают флуктуации около одного из двух устойчивых детерминированных состояний. Эти решения не содержат информации о возможном скачке с ветви $x = 1$ на ветвь $x = -1$ или наоборот — по крайней мере, в сколько-нибудь явном виде. В этом смысле асимптотическое разложение подводит нас, так как не дает общей картины поведения системы в стационарном состоянии. Как мы увидим в гл. 9, причина этого кроется в том, что асимптотическое поведение, характерное для скачков с одной ветви на другую, имеет обычно порядок $\exp(-1/\varepsilon^2)$ и стремится к нулю при $\varepsilon \rightarrow 0$ быстрее любой степени ε , так что его невозможно аппроксимировать степенным рядом.

6.3. РАЗЛОЖЕНИЕ ПО МАЛОМУ ШУМУ ДЛЯ УРАВНЕНИЯ ФОККЕРА — ПЛАНКА

Как уже упоминалось в разд. 6.1, разложение по малому шуму для уравнения Фоккера — Планка является сингулярным и требует введения масштабных переменных. Здесь мы обсудим эту задачу более подробно.

Рассмотрим уравнение Фоккера — Планка

$$\partial_t p = -\partial_x [A(x)p] + \frac{1}{2}\varepsilon^2 \partial_x^2 [B(x)p]. \quad (6.3.1)$$

Пусть решением детерминистического уравнения является $\alpha(t)$, так что

$$d_t \alpha(t) = A[\alpha(t)]. \quad (6.3.2)$$

Введем новые переменные (y, s)

$$y = [x - \alpha(t)]/\varepsilon \quad (6.3.3)$$

$$s = t, \quad (6.3.4)$$

а также

$$\hat{p}(y, s) = \varepsilon p(x, t). \quad (6.3.5)$$

Заметим, что

$$\partial_t \hat{p}(y, s) = \frac{\partial \hat{p}}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial t} + \frac{\partial \hat{p}}{\partial s} \frac{\partial s}{\partial t} = - \frac{-\alpha(t)}{\varepsilon} \frac{\partial \hat{p}}{\partial y} + \frac{\partial \hat{p}}{\partial s} \quad (6.3.6)$$

$$\partial_x \hat{p}(y, s) = \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial \hat{p}}{\partial y}, \quad (6.3.7)$$

так что, подставляя в (6.3.1) и учитывая уравнение движения для $\alpha(t)$ (6.3.2), получаем

$$\frac{\partial \hat{p}}{\partial s} = - \frac{\partial}{\partial y} \left\{ \frac{A[\alpha(s) + \varepsilon y] - A[\alpha(s)]}{\varepsilon} \hat{p} \right\} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial y^2} \{ B[\alpha(s) + \varepsilon y] \hat{p} \}. \quad (6.3.8)$$

Теперь мы можем осуществить разложение по степеням ε . Допустим, что разложение для A и B по степеням ε имеют вид

$$A[\alpha(s) + \varepsilon y] = \sum_{n=0}^{\infty} \tilde{A}_n(s) \varepsilon^n y^n \quad (6.3.9)$$

$$B[\alpha(s) + \varepsilon y] = \sum_{n=0}^{\infty} \tilde{B}_n(s) \varepsilon^n y^n \quad (6.3.10)$$

и разложим \hat{p} по степеням ε :

$$\hat{p} = \sum_{n=0}^{\infty} \hat{p}_n \varepsilon^n. \quad (6.3.11)$$

Подставляя эти разложения в УФП (6.3.8) и приравнивая коэффициенты, получаем

$$\frac{\partial \hat{p}_0}{\partial s} = - \tilde{A}_1(s) \frac{\partial}{\partial y} (y \hat{p}_0) + \frac{1}{2} B_0(s) \frac{\partial^2 \hat{p}_0}{\partial y^2} \quad (6.3.12)$$

$$\frac{\partial \hat{p}_r}{\partial s} = - \frac{\partial}{\partial y} [\tilde{A}_1(s) y \hat{p}_1 + \tilde{A}_2(s) y^2 \hat{p}_0] + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial y^2} [\tilde{B}_0(s) \hat{p}_1 + \tilde{B}_1(s) y \hat{p}_0] \quad (6.3.13)$$

и вообще

$$\frac{\partial \hat{p}_r}{\partial s} = - \frac{\partial}{\partial y} \left[\sum_{m=0}^r y^{r-m+1} \tilde{A}_{r-m+1}(s) \hat{p}_m \right] + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial y^2} \left[\sum_{r=0}^m y^{r-m} \tilde{B}_{r-m}(s) \hat{p}_m \right]. \quad (6.3.14)$$

Только уравнение для \hat{p}_0 есть уравнение Фоккера — Планка и, как говорилось в разд. 6.1, только \hat{p}_0 есть вероятность. Первое уравнение в иерархии, (6.3.12), является зависящим от времени процессом Орнштейна — Уленбека, который в точности соответствует первому уравнению в иерархии стохастических дифференциальных уравнений (6.2.13). Но на этом соответствие и исчерпывается.

Установление граничных условий для \hat{p}_r представляет технические трудности, поскольку переход от x к y зависит от времени, так что граница, неподвижная для переменной x , оказывается для y движущейся границей. Кроме того, граница при $x = a$ соответствует границе при

$$y = \frac{[a - \alpha(s)]}{\varepsilon}, \quad (6.3.15)$$

которая при $\varepsilon \rightarrow 0$ стремится к $\pm \infty$. Судя по всему, методы, позволяющие справиться с граничными условиями подобного рода, еще не разработаны, за исключением случая $a = \pm \infty$, когда граница для y тоже оказывается в бесконечности и поэтому неподвижна. Тогда граничные условия для y принимают такой же вид, как и для x .

В случае когда границы находятся в бесконечности, в результате преобразования (6.3.3) сингулярная задача о возмущениях (6.3.1) (в которой при $\varepsilon \rightarrow 0$ понижается порядок уравнения) превращается в нормальную задачу теории возмущений (6.3.8), где коэффициенты уравнения являются гладкими функциями ε и при $\varepsilon \rightarrow 0$ мы имеем дело с уравнением второго порядка. Применимость описанного разложения будет зависеть от вида коэффициентов.

6.3.1. УРАВНЕНИЯ ДЛЯ МОМЕНТОВ И АВТОКОРРЕЛЯЦИОННЫХ ФУНКЦИЙ

Хотя иерархия уравнений (6.3.14) не слишком удобна, она определяет довольно естественный способ вычисления моментов с помощью теории возмущений. Предположим, что границы находятся на $\pm \infty$, так что мы можем интегрировать по частям, отбрасывая поверхностные члены. Определим

$$\langle [y(t)]^n \rangle = \sum_{r=0}^{\infty} \varepsilon^r M_r^n(t). \quad (6.3.16)$$

Тогда, очевидно,

$$M_r^n(t) = \int dy \cdot y^n \hat{p}_r(y, t). \quad (6.3.17)$$

Далее, используя (6.3.12—14) и интегрируя по частям, легко получаем выражение

$$\frac{dM_r^n(t)}{dt} = \sum_{m=0}^r \left[n \tilde{A}_{r-m+1}(t) M_m^{n+r-m}(t) + \frac{n(n-1)}{2} \tilde{B}_{r-m}(t) M_m^{n+r-m-2}(t) \right], \quad (6.3.18)$$

которое описывает замкнутую цепочку уравнений, поскольку уравнение для $M_r^n(t)$ может быть решено, если известны все $M_m^p(t)$ для $m < r$ и $p < n + r$.

Выпишем первые несколько средних значений $M_r^1(t)$ и средних квадратов $M_r^2(t)$:

$$\frac{dM_0^1(t)}{dt} = \tilde{A}_1(t)M_0^1(t) \quad (6.3.19)$$

$$\frac{dM_1^1(t)}{dt} = \tilde{A}_1(t)M_1^1(t) + \tilde{A}_2(t)M_0^2(t) \quad (6.3.20)$$

$$\frac{dM_2^1(t)}{dt} = \tilde{A}_1(t)M_2^1(t) + \tilde{A}_2(t)M_1^2(t) + \tilde{A}_3(t)M_0^3(t) \quad (6.3.21)$$

$$\frac{dM_0^2(t)}{dt} = 2\tilde{A}_1(t)M_0^2(t) + \tilde{B}_0(t) \quad (6.3.22)$$

$$\frac{dM_1^2(t)}{dt} = 2\tilde{A}_1(t)M_1^2(t) + 2\tilde{A}_2(t)M_0^3(t) + \tilde{B}_1(t)M_0^1(t) \quad (6.3.23)$$

$$\frac{dM_0^3(t)}{dt} = 3\tilde{A}_1(t)M_0^3(t) + 3\tilde{B}_0(t)M_0^1(t). \quad (6.3.24)$$

При выведении двух последних равенств мы учитываем, что

$$M_r^0(t) = \int dy \hat{p}_r(y, t), \quad (6.3.25)$$

и, используя

$$\int dy \hat{p}(y, t) = 1 = \sum_r \varepsilon^r M_r^0(t), \quad (6.3.26)$$

находим, что

$$M_0^0(t) = 1 \quad (6.3.27)$$

$$M_r^0(t) = 0 \quad r \neq 1. \quad (6.3.28)$$

Уравнения представляют собой линейные обыкновенные дифференциальные уравнения, неоднородные члены в которых вычисляются из предшествующих уравнений цепочки.

a) Стационарные моменты

Стационарные моменты получают, устремляя $t \rightarrow \infty$ и принимая левую часть (6.3.18) равной нулю. (Все коэффициенты \tilde{A} , \tilde{B} и т. п. считаются не зависящими от времени.)

Из (6.3.19—22) находим

$$\begin{aligned}
 M_0^1(\infty) &= 0 \\
 M_0^2(\infty) &= -\frac{1}{2}\tilde{B}_0/\tilde{A}_1 \\
 M_0^3(\infty) &= 0 \\
 M_1^1(\infty) &= -\tilde{A}_2 M_0^2(\infty)/\tilde{A}_1 = \frac{1}{2}\tilde{A}_2\tilde{B}_0/(\tilde{A}_1)^2 \\
 M_1^2(\infty) &= -\tilde{A}_2 M_0^3(\infty)/\tilde{A}_1 = 0 \\
 M_2^1(\infty) &= -[\tilde{A}_2 M_1^2(\infty) + \tilde{A}_3 M_0^3(\infty)]/\tilde{A}_1 = 0.
 \end{aligned} \tag{6.3.29}$$

Таким образом, стационарное среднее значение и дисперсия имеют вид

$$\begin{aligned}
 \langle x \rangle_s &= \alpha + \varepsilon[M_0^1(\infty) + \varepsilon M_1^1(\infty) + \varepsilon^2 M_2^1(\infty)] \\
 &= \alpha + \frac{1}{2}\varepsilon^2 \tilde{A}_2 \tilde{B}_0 / (\tilde{A}_1)^2,
 \end{aligned} \tag{6.3.30}$$

$$\begin{aligned}
 D\{x\}_s &= \langle x^2 \rangle_s - \langle x \rangle_s^2 \\
 &= \langle (\alpha + \varepsilon y)^2 \rangle_s - \langle \alpha + \varepsilon y \rangle_s^2 = \varepsilon^2 D\{y\}_s \\
 &= -\frac{\varepsilon^2}{2} \tilde{B}_0 / \tilde{A}_1 \quad \text{с точностью до } \varepsilon^2.
 \end{aligned} \tag{6.3.31}$$

Ясно, что эту процедуру можно продолжить до произвольно высоких порядков. Разумеется, для системы с одной переменной стационарное распределение можно найти в явном виде и определить моменты непосредственным интегрированием. Однако в случае многих переменных это не всегда возможно, в то время как описанный метод, распространенный на случай многих переменных, всегда дает результаты

б) Стационарная автокорреляционная функция

В стационарном случае автокорреляционная функция для x связана с таковой для y простым соотношением

$$\langle x(t)x(0) \rangle_s = \alpha^2 + \varepsilon^2 \langle y(t)y(0) \rangle_s \tag{6.3.32}$$

и цепочка уравнений для $\langle y(t)y(0) \rangle$ выводится легко. Заметим, что

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt} \langle y(t)^n y(0) \rangle_s &= \left\langle \frac{A[\alpha + \varepsilon y(t)] - A(\alpha)}{\varepsilon} n y(t)^{n-1} \right. \\
 &\quad \left. + \frac{1}{2} n(n-1) B[\alpha + \varepsilon y(t)] y(t)^{n-2} \right\rangle y(0) \rangle_s.
 \end{aligned} \tag{6.3.33}$$

Это легко доказать, используя УФП (6.3.1) для $p(y, t | y_0, t_0)$ и интегрируя по частям или же применяя формулу Ито к соответствующему СДУ.

Пользуясь определением \tilde{A}_r, \tilde{B}_r (6.3.9, 10) и разлагая A и B в степенной ряд, получаем

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle y(t)^n y(0) \rangle_s = \sum_{q=0}^{\infty} \varepsilon^q \left[n \tilde{A}_{q+1} \langle y(t)^{q+n} y(0) \rangle_s \right. \\ \left. + \frac{n(n-1)}{2} \tilde{B}_q \langle y(t)^{q+n-2} y(0) \rangle_s \right]. \end{aligned} \quad (6.3.34)$$

Эти уравнения сами по себе образуют цепочку, которая легко разрешается в виде степенного ряда относительно ε . Наибольший интерес обычно представляет величина $\langle y(t) y(0) \rangle_s$, которая может быть вычислена до порядка ε^q , если известны $\langle y(t)^p y(0) \rangle_s$ для $p \leq q + 1$. Начальным условием является

$$\langle y(0)^n y(0) \rangle_s = \langle y^{n+1} \rangle_s, \quad (6.3.35)$$

а стационарные моменты могут быть получены из стационарного распределения или методом, изложенным выше.

6.3.2. ПРИМЕР

Рассмотрим уравнение Фоккера — Планка

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} [(x + x^3)p] + \frac{\varepsilon^2}{6} \frac{\partial^2 p}{\partial x^2}, \quad (6.3.36)$$

для которого имеем (в стационарном состоянии $\alpha(t) = 0$):

$$\begin{aligned} \tilde{A}_1 &= -1 \\ \tilde{A}_2 &= 0 \\ \tilde{A}_3 &= -1 \\ \tilde{A}_q &= 0 \quad (q > 3) \\ \tilde{B}_q &= \frac{1}{3} \delta_{q,0} \\ \alpha &= 0. \end{aligned} \quad (6.3.37)$$

Используя (6.3.30, 31), получаем

$$\begin{aligned} \langle x \rangle_s &= 0 \\ D\{x\}_s &= \varepsilon^2/6. \end{aligned} \quad (6.3.38)$$

Для удобства воспользуемся обозначениями

$$c_n(t) = \langle y^n(t) y(0) \rangle_s, \quad (6.3.39)$$

в которых уравнения для c_1 и c_3 принимают вид

$$\begin{bmatrix} \frac{dc_1}{dt} \\ \frac{dc_3}{dt} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 & -\varepsilon^2 \\ 1 & -3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_3 \end{bmatrix} \quad (6.3.40)$$

(уравнения для c_{2n} и c_{2n+1} распадаются, так как $B(x)$ константа, а $A(x)$ является нечетной функцией x).

Систему (6.3.40) проще решать в явном виде, чем с помощью теории возмущений. Собственные значения матрицы суть

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= -2 + \sqrt{1 - \varepsilon^2} \\ \lambda_2 &= -2 - \sqrt{1 - \varepsilon^2}, \end{aligned} \quad (6.3.41)$$

а соответствующие собственные векторы —

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_1 &= \begin{bmatrix} 1 + \sqrt{1 - \varepsilon^2} \\ 1 \end{bmatrix} \\ \mathbf{u}_2 &= \begin{bmatrix} 1 - \sqrt{1 - \varepsilon^2} \\ 1 \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (6.3.42)$$

Теперь решение для (6.3.40) можно записать в виде

$$\begin{bmatrix} c_1(t) \\ c_3(t) \end{bmatrix} = \alpha_1 e^{-\lambda_1 t} \mathbf{u}_1 + \alpha_2 e^{-\lambda_2 t} \mathbf{u}_2 \quad (t > 0) \quad (6.3.43)$$

с начальным условием

$$\begin{aligned} c_1(0) &= \langle y^2 \rangle_s \\ c_3(0) &= \langle y^4 \rangle_s. \end{aligned} \quad (6.3.44)$$

Величину $\langle y^4 \rangle_s$ можно рассчитать, продлив цепочку моментов (6.3.10) до M_0^4 ; находим

$$M_0^4 = -\frac{3}{2} \frac{\tilde{B}_0 M_0^2}{\tilde{A}_1} = \frac{1}{12}, \quad (6.3.45)$$

и тогда $\langle y^4 \rangle = 1/12$.

Таким образом, получаем уравнение

$$\begin{bmatrix} 1/6 \\ 1/12 \end{bmatrix} = \alpha_1 \mathbf{u}_1 + \alpha_2 \mathbf{u}_2, \quad (6.3.46)$$

решениями которого являются

$$\alpha_1 = \frac{1}{24} (1 + \sqrt{1 - \varepsilon^2}) / \sqrt{1 - \varepsilon^2} \quad (6.3.47)$$

$$\alpha_2 = \frac{1}{24} (-1 + \sqrt{1 - \varepsilon^2}) / \sqrt{1 - \varepsilon^2}.$$

Корреляционная функция с точностью до второго порядка по ε имеет вид

$$c_1(t) = \frac{1}{6} e^{-|\lambda_1|t} \quad (6.3.48)$$

(многие члены уничтожаются). Заметим, что собственные значения λ_1 и λ_2 зависят от ε^2 . Всякая попытка разрешить систему (6.3.40) с помощью теории возмущений потребует разложения $\exp(\lambda_1 t)$ и $\exp(\lambda_2 t)$ по степеням ε^2 и будет включать члены типа $t^N \exp(-2t)$, что не даст адекватного описания долговременного хода автокорреляционной функции.

Корреляционная функция для x имеет вид

$$\langle x(t)x(0) \rangle_s = \varepsilon^2 c_1(t), \quad (6.3.49)$$

а спектр дается выражением

$$S(\omega) = \varepsilon^2 \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i\omega t} c_1(t) / 2\pi \quad (6.3.50)$$

$$= \frac{\varepsilon^2}{12\pi} \frac{1}{\lambda_1^2 + \omega^2}. \quad (6.3.51)$$

6.3.3. АСИМПТОТИЧЕСКИЙ МЕТОД ДЛЯ СТАЦИОНАРНОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ

Для произвольного уравнения Фоккера — Планка

$$\partial_t p = - \sum_i \partial_i A_i(\mathbf{x}) p + \frac{1}{2} \varepsilon^2 \sum_{i,j} \partial_i \partial_j B_{ij}(\mathbf{x}) p, \quad (6.3.52)$$

можно построить асимптотическое разложение для стационарного решения, положив

$$p_s(\mathbf{x}) = \exp[-\phi(\mathbf{x})/\varepsilon^2]. \quad (6.3.53)$$

Используя это выражение, получаем

$$\left[\sum_i A_i(\mathbf{x}) \partial_i \phi + \frac{1}{2} \sum_{i,j} B_{ij}(\mathbf{x}) \partial_i \phi \partial_j \phi \right] + \varepsilon^2 \left[- \sum_i \partial_i A_i(\mathbf{x}) - \sum_{i,j} \partial_i B_{ij} \partial_j \phi - \frac{1}{2} B_{ij} \partial_i \partial_j \phi + \frac{1}{2} \varepsilon^2 \sum_{i,j} \partial_i \partial_j B_{ij}(\mathbf{x}) \right] = 0. \quad (6.3.54)$$

Первый член цепочки, имеющий нулевой порядок по ε , представляет собой уравнение Гамильтона — Якоби. Основной смысл результата состоит в том, что в принципе можно получить асимптотическое разложение для $\phi(x)$:

$$\phi(\mathbf{x}) = \sum_n \varepsilon^n \phi_n(\mathbf{x}), \tag{6.3.55}$$

где $\phi_0(\mathbf{x})$ удовлетворяет уравнению

$$\sum_i A_i(\mathbf{x}) \partial_i \phi_0 + \frac{1}{2} \sum_{i,j} B_{ij}(\mathbf{x}) \partial_i \phi_0 \partial_j \phi_0 = 0. \tag{6.3.56}$$

Грэхем и Тель [6.8, 9] недавно продемонстрировали возможность решения уравнения (6.3.56) в общем случае. Их основной результат состоит в том, что решения, будучи хотя и непрерывными, имеют в общем случае производные с бесконечным числом разрывов, за исключением некоторых частных случаев, тесно связанных с ситуацией, когда УФП удовлетворяет потенциальным условиям.

6.4. АДИАБАТИЧЕСКОЕ ИСКЛЮЧЕНИЕ БЫСТРЫХ ПЕРЕМЕННЫХ

Часто оказывается, что динамическая система описывается стохастическими уравнениями, включающими сильно различающиеся временные масштабы; в то же время поведение системы на малых временных масштабах не представляет интереса. Наиболее естественным примером этого является броуновское движение. Здесь обычно наблюдают положение броуновской частицы, однако фундаментальные уравнения включают также и ее импульс, который не относится к наблюдаемым величинам. Таким образом, уравнение Ланжевена (1.2.14) может быть переписано для координаты и скорости в виде

$$\frac{dx}{dt} = v \tag{6.4.1}$$

$$m \frac{dv}{dt} = -\beta v + \sqrt{2kT\beta} \zeta(t). \tag{6.4.2}$$

Если интерпретировать эти уравнения как стохастические дифференциальные уравнения Ито, то для их решения можно воспользоваться методом, уже изложенным в разд. 4.4.6. Проще, однако, проинтегрировать сначала уравнение (6.4.2) и получить решение

$$v(t) = v(0) \exp(-\beta t/m) + \frac{\sqrt{2kT\beta}}{m} \int_0^t \exp[-\beta(t-t')/m] \zeta(t') dt'. \tag{6.4.3}$$

Рассмотрим теперь ситуацию, когда коэффициент трения β не слишком мал, в то время как масса m мала. Тогда для t , таких, что

$$t \gg m/\beta \equiv \tau \quad (6.4.4)$$

экспонента в первом члене в правой части (6.4.3) пренебрежимо мала, и нижний предел интегрирования можно отодвинуть в $-\infty$, не внося существенной ошибки. Получим

$$v(t) \rightarrow \frac{\sqrt{2kT\beta}}{m} \int_{-\infty}^t \exp[-(t-t')/\tau] \xi(t') dt'. \quad (6.4.5)$$

Будем называть τ *временем релаксации*, поскольку эта величина определяет для (6.4.5) временной масштаб релаксации.

Определим

$$\eta(t, \tau) = \tau^{-1} \int_{-\infty}^t \exp[-(t-t')/\tau] dW(t'). \quad (6.4.6)$$

Согласно разд. 4.4.4, это стационарный процесс Орнштейна — Уленбека. Корреляционная функция имеет вид

$$\langle \eta(t, \tau) \eta(t', \tau) \rangle = \frac{1}{2\tau} \exp(-|t-t'|/\tau) \quad (6.4.7)$$

$$\xrightarrow{\tau \rightarrow 0} \delta(t-t'). \quad (6.4.8)$$

Мы видим, что предел $\tau \rightarrow 0$ соответствует пределу белого шума, когда корреляционная функция превращается в дельта-функцию.

Таким образом, (6.4.1) можно записать в виде

$$\frac{dx}{dt} = \sqrt{\frac{2kT}{\beta}} \eta(t, \tau), \quad (6.4.9)$$

что в пределе $\tau \rightarrow 0$ переходит в

$$\frac{dx}{dt} = \sqrt{\frac{2kT}{\beta}} \xi(t). \quad (6.4.10)$$

Иначе, и гораздо более наглядно, можно представить дело так: предел $m \rightarrow 0$ в (6.4.2) соответствует обращению левой части в нуль, так что

$$v(t) = \sqrt{\frac{2kT}{\beta}} \xi(t). \quad (6.4.11)$$

Приводимые рассуждения весьма остроумны, но отнюдь не строги и не дают никаких указаний на конкретный метод аппроксимаций, кото-

рый, по всей видимости, должен состоять в асимптотическом разложении по малому безразмерному параметру. Сверх того, судя по всему, нет способа осуществить подобное разложение непосредственно для стохастического дифференциального уравнения — насколько известно автору, никому пока что не удалось предложить такой метод.

Уравнением Фоккера — Планка, эквивалентным (6.4.1, 2) для функции распределения, является

$$\frac{\partial p}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial x} (vp) + \frac{\partial}{\partial v} \left(\frac{vp}{\tau} \right) + \frac{kT}{\tau^2 \beta} \frac{\partial^2 p}{\partial v^2}. \quad (6.4.12)$$

Определим функцию распределения для координаты $\hat{p}(x, t)$ как

$$\hat{p}(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dv p(x, v, t). \quad (6.4.13)$$

Тогда можно предположить, что УФП для $\hat{p}(x, t)$, соответствующее «приведенному» уравнению Ланжевена (6.4.10), имеет вид

$$\frac{\partial \hat{p}}{\partial t} = \frac{kT}{\beta} \frac{\partial^2 \hat{p}}{\partial x^2}. \quad (6.4.14)$$

Будем искать способ получения (6.4.14) из (6.4.12) с помощью теории возмущений, так, чтобы поправки высших порядков представлялись в виде степеней какого-либо малого параметра.

В более общем виде можно рассматривать броуновское движение в потенциальном поле, которое описывается уравнениями Ланжевена (см. разд. 5.3.6):

$$\frac{dx}{dt} = v \quad (6.4.15)$$

$$m \frac{dv}{dt} = - \beta v - V'(x) + \sqrt{2\beta kT} \xi(t).$$

В пределе для больших β второе уравнение очень быстро релаксирует к квазистационарному состоянию, в котором $dv/dt \rightarrow 0$. Соответственно мы принимаем, что для достаточно больших β

$$v = - \frac{1}{\beta} [V'(x) - \sqrt{2\beta kT} \xi(t)], \quad (6.4.16)$$

и, подставляя это в (6.4.15), получаем

$$\frac{dx}{dt} = -\beta^{-1} V'(x) + \sqrt{\frac{2kT}{\beta}} \xi(t), \quad (6.4.17)$$

чему соответствует УФП для $\hat{p}(x)$, известное под названием *уравне-*

ния Смолуховского:

$$\frac{\partial \hat{p}}{\partial t} = \beta^{-1} \left\{ \frac{\partial}{\partial x} \left[V'(x) \hat{p} + kT \frac{\partial \hat{p}}{\partial x} \right] \right\}. \quad (6.4.18)$$

В данном случае мы избавились от *быстрой* переменной v , предположив, что она очень быстро релаксирует к значению, определяемому выражением (6.4.16).

Этот прием является прообразом всех методов *адиабатического исключения*, легших в основу сформулированного Хакеном *принципа подчинения* [6.1]. Главное физическое допущение состоит здесь в следующем: при больших β (или малых временах релаксации) переменные, подчиняющиеся уравнениям, в которые входят большие β (например, v), релаксируют к значениям, получаемым в предположении, что медленная переменная (в данном случае x) является константой. Таким образом, быстрые переменные полностью *подчиняются* медленным переменным.

Как ни удивительно, задача о строгом выводе уравнения Смолуховского и получении поправок к нему была решена лишь недавно. Первая попытка была сделана Бринкманом [6.2], который лишь оценил поправки к (6.4.18) по порядку величины, но не привел все поправочные члены до низших порядков. Первое корректное решение принадлежит Стратоновичу (гл. 4, § 11.1 в [6.3]). Независимо от него корректные решения предложили также Вилемский [6.4] и Титулаэр [6.5].

В последующих разделах будет систематически изложена достаточно общая теория вывода уравнения Смолуховского и поправок к нему; затем мы перейдем к более общим задачам адиабатического исключения. При этом мы воспользуемся переработанными проективными операционными методами, которые давно и успешно применяются в статистической физике, квантовой оптике и смежных областях. Эти методы можно изложить непосредственно на языке временных масштабов, однако для нас удобнее воспользоваться аппаратом преобразований Лапласа, который, кстати, первоначально применил Вилемский. В изложении мы будем следовать за Папаниколау [6.6], который дал строгое обоснование использования этого метода для ряда задач. Приводимые нами примеры будут, однако, довольно формальными.

6.4.1 АБСТРАКТНАЯ ФОРМУЛИРОВКА НА ЯЗЫКЕ ОПЕРАТОРОВ И ПРОЕКЦИЙ

Рассмотрим перенормированное уравнение Фоккера — Планка (6.4.12), полученное аналогично (5.3.97) в разд. 5.3.6, которое мы можем записать в виде

$$\frac{\partial p}{\partial t} = (\gamma L_1 + L_2)p, \quad (6.4.19)$$

где L_1 и L_2 — дифференциальные операторы вида

$$L_1 = \frac{\partial}{\partial u} \left(u + \frac{\partial}{\partial u} \right) \quad (6.4.20)$$

$$L_2 = -\frac{\partial}{\partial y} u + U'(y) \frac{\partial}{\partial u}. \quad (6.4.21)$$

Нам необходимо получить уравнение для функции распределения величины y

$$\dot{p}(y, t) = \int du p(u, y, t), \quad (6.4.22)$$

которое было бы справедливо в пределе для больших γ .

Можно ожидать, что приближенное решение для (6.4.19) удастся получить, умножая $\hat{p}(y, t)$ на стационарное распределение для

$$\frac{\partial p}{\partial t} = L_1 p, \quad (6.4.23)$$

т. е. на

$$(2\pi)^{-1/2} \exp(-\frac{1}{2}u^2). \quad (6.4.24)$$

Мы считаем, что при больших γ распределение скоростей очень быстро переходит в тепловое; иначе говоря, мы можем в (6.4.19) пренебречь L_2 по сравнению с γL_1 , так что решением является функция от y , умноженная на решение (6.4.23), которое приближается к стационарному решению за время порядка γ^{-1} , которое очень мало. Формализуем наши рассуждения, введя *оператор проектирования* P как

$$(Pf)(u, y) = (2\pi)^{-1/2} \exp(-\frac{1}{2}u^2) \int du f(u, y), \quad (6.4.25)$$

где $f(u, y)$ — произвольная функция. Читатель может легко убедиться, что

$$P^2 = P. \quad (6.4.26)$$

Для векторного пространства всех функций u и y P есть оператор, который проектирует любой вектор на подпространство всех векторов, которые могут быть представлены в виде

$$g(u, y) = (2\pi)^{-1/2} \exp(-\frac{1}{2}u^2) \hat{g}(y), \quad (6.4.27)$$

где $\hat{g}(y)$ есть произвольная функция y . Однако все функции вида (6.4.27) есть решения уравнения

$$L_1 g = 0. \quad (6.4.28)$$

Другими словами, пространство, на которое P проектирует векторы, есть нуль-пространство L_1 . Заметим также, что в данном случае

$$P = \lim_{t \rightarrow \infty} [\exp(L_1 t)]. \quad (6.4.29)$$

Чтобы доказать это, разложим любую функцию u и y по собственным функциям $P_\lambda(u)$ из L_1 , как это было сделано в разд. 5.2.5:

$$f(u, y) = \sum_\lambda A_\lambda(y) P_\lambda(u), \quad (6.4.30)$$

где

$$A_\lambda(y) = \int du Q_\lambda(u) f(u, y). \quad (6.4.31)$$

Тогда

$$\lim_{t \rightarrow \infty} [\exp(L_1 t) f(u, y)] = \sum_\lambda A_\lambda(y) \lim_{t \rightarrow \infty} e^{-\lambda t} P_\lambda(u) \quad (6.4.32)$$

$$= P_0(u) \int du Q_0(u) f(u, y). \quad (6.4.33)$$

Учитывая, что для этого процесса (процесса Орнштейна — Уленбека)

$$P_0(u) = (2\pi)^{-1/2} \exp(-\frac{1}{2}u^2) \quad (6.4.34)$$

$$Q_0(u) = 1, \quad (6.4.35)$$

приходим к (6.4.29).

Для данного случая, как и для всех прочих ситуаций, мы также имеем основное равенство

$$PL_2P = 0. \quad (6.4.36)$$

Действительно, рассматривая $PL_2Pf(u, y)$, мы видим, что по определению $L_2Pf(u, y)$ пропорционально

$$u \exp(-\frac{1}{2}u^2) \propto P_1(u), \quad (6.4.37)$$

и

$$P P_1(u) = 0, \quad (6.4.38)$$

в чем можно убедиться прямой подстановкой или же заметив, что

$P_1(u)$ не принадлежит нуль-пространству L_1 . Определим

$$v = Pp \tag{6.4.39}$$

$$w = (1 - P)p, \tag{6.4.40}$$

так что

$$p = v + w,$$

и v принадлежит нуль-пространству L_1 , а w нет.

Теперь мы видим, что в силу (6.4.29)

$$PL_1 = L_1P = 0, \tag{6.4.41}$$

и из исходного уравнения получаем

$$\begin{aligned} \frac{\partial v}{\partial t} &= P(\gamma L_1 + L_2)p \\ &= P(\gamma L_1 + L_2)[Pp + (1 - P)p] \\ &= PL_2(1 - P)p, \end{aligned}$$

(где мы воспользовались (6.4.41) и (6.4.36)) и, далее

$$\boxed{\frac{\partial v}{\partial t} = PL_2w.} \tag{6.4.42}$$

Аналогично

$$\begin{aligned} \frac{\partial w}{\partial t} &= (1 - P)(\gamma L_1 + L_2)p = (1 - P)(\gamma L_1 + L_2)[Pp + (1 - P)p] \\ &= \gamma L_1(1 - P)p + (1 - P)L_2(1 - P)p + (1 - P)L_2Pp, \end{aligned} \tag{6.4.43}$$

и, учитывая, что $P L_2P = 0$, имеем

$$\boxed{\frac{\partial w}{\partial t} = \gamma L_1w + (1 - P)L_2w + L_2v.} \tag{6.4.44}$$

6.4.2. РЕШЕНИЕ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ ЛАПЛАСА

Для решения фундаментальных уравнений (6.4.42, 44) могут использоваться различные итерационные методы. Однако, поскольку эти уравнения линейны, очень удобным может оказаться решение путем применения преобразования Лапласа, которое легко поддается разложению с помощью теории возмущений.

Преобразование Лапласа для любой функции времени $f(t)$ определяется как

$$\tilde{f}(s) = \int_0^{\infty} e^{-st} f(t) dt, \quad (6.4.45)$$

и его можно без труда распространить на операторы и абстрактные векторы. С использованием

$$\int_0^{\infty} e^{-st} \frac{df}{dt} = s \tilde{f}(s) - f(0) \quad (6.4.46)$$

наши фундаментальные уравнения принимают вид

$$s \tilde{v}(s) = PL_2 \tilde{w}(s) + v(0), \quad (6.4.47)$$

$$s \tilde{w}(s) = [\gamma L_1 + (1 - P)L_2] \tilde{w}(s) + L_2 \tilde{v}(s) + w(0).$$

Эти уравнения представляют собой линейные операторные уравнения, формальное решение которых не представляет сложности. Для простоты допустим сначала, что

$$w(0) = 0, \quad (6.4.48)$$

Это означает, что начальное распределение предполагается в виде

$$p(u, y, 0) = (2\pi)^{-1/2} \exp(-\frac{1}{2}u^2) \hat{p}(y, 0); \quad (6.4.49)$$

иначе говоря, мы предполагаем начальное распределение скорости u максвелловским. Тогда формально мы имеем

$$\tilde{w}(s) = [s - \gamma L_1 - (1 - P)L_2]^{-1} L_2 \tilde{v}(s), \quad (6.4.50)$$

откуда

$$s \tilde{v}(s) = PL_2 [s - \gamma L_1 - (1 - P)L_2]^{-1} L_2 \tilde{v}(s) + v(0). \quad (6.4.51)$$

Таким образом, по крайней мере формально мы получили полное решение задачи. Для всякого *конечного* s мы можем перейти к пределу больших γ и найти

$$s \tilde{v}(s) \simeq -\gamma^{-1} PL_2 L_1^{-1} L_2 \tilde{v}(s) + v(0). \quad (6.4.52)$$

Заметим, что L_1^{-1} существует не всегда. Из (6.4.36) мы знаем, что

$$PL_2 \tilde{v}(s) = PL_2 P \hat{p}(s) = 0. \quad (6.4.53)$$

Следовательно, в $L_2 \tilde{v}(s)$ не входят компоненты из нуль-пространства L_1 , и поэтому $L^{-1} L_2 \tilde{v}(s)$ существует.

Посмотрим, как выглядит (6.4.52) в данном случае уравнение Крамера. Оно эквивалентно дифференциальному уравнению

$$\frac{\partial v}{\partial t} = -\gamma^{-1} P L_2 L_1^{-1} L_2 v. \quad (6.4.54)$$

Заметим теперь, что

$$L_2 v = \left[-\frac{\partial}{\partial y} u + U'(y) \frac{\partial}{\partial u} \right] P_0(u) \int du' p(u', y, t) \quad (6.4.55)$$

(где $P_0(u)$ определено (6.4.34)).

Для этой задачи удобно ввести собственные функции оператора процесса Орнштейна — Уленбека (разд. 5.2.6в), которые для данных параметров

$$\frac{1}{2} D = k = 1 \quad (6.4.56)$$

имеют вид

$$P_n(u) = (2\pi)^{-1/2} \exp(-\frac{1}{2}u^2) Q_n(u), \quad (6.4.57)$$

где

$$Q_n(u) = (2^n n!)^{-1/2} H_n(u/\sqrt{2}). \quad (6.4.58)$$

Используя

$$L_1 P_n(u) = -n P_n(u) \quad (6.4.59)$$

и рекуррентные формулы для полиномов Эрмита

$$x H_n(x) = \frac{1}{2} H_{n+1}(x) + n H_{n-1}(x) \quad (6.4.60)$$

$$\frac{d}{dx} [e^{-x^2} H_n(x)] = -e^{-x^2} H_{n+1}(x), \quad (6.4.61)$$

мы видим, что

$$L_2 v = - \left[U'(y) + \frac{\partial}{\partial y} \right] P_1(u) \hat{p}(y), \quad (6.4.62)$$

так что с учетом (6.4.59)

$$L_1^{-1} L_2 v = \left[U'(y) + \frac{\partial}{\partial y} \right] P_1(u) \hat{p}(y). \quad (6.4.63)$$

Применим оператор L_2 еще раз и снова используем соотношения (6.4.60, 61):

$$L_2 P_1(u) = - \left[\sqrt{2} P_2(u) + P_0(u) \right] \frac{\partial}{\partial y} - \sqrt{2} P_2(u) U'(y) \quad (6.4.64)$$

$$P L_2 L_1^{-1} L_2 v = - \frac{\partial}{\partial y} \left[U'(y) + \frac{\partial}{\partial y} \right] \hat{p}(y) P_0(u). \quad (6.4.65)$$

Уравнение движения (6.4.54) после избавления от множителя $P_0(u)$ принимает вид

$$\boxed{\frac{\partial \hat{p}}{\partial t} = \gamma^{-1} \frac{\partial}{\partial y} \left[U'(y) \hat{p} + \frac{\partial \hat{p}}{\partial y} \right]} \quad (6.4.66)$$

и представляет собой в точности уравнение Смолуховского, полученное примитивным методом исключения, описанным в разд. 6.4.

6.4.3. ПОВЕДЕНИЕ НА МАЛЫХ ВРЕМЕННЫХ МАСШТАБАХ

Следует иметь в виду, что при переходе к пределу $\gamma \rightarrow \infty$ в (6.4.52) подразумевается, что s конечно; иначе говоря,

$$\gamma \gg s. \quad (6.4.67)$$

Таким образом, решение методом преобразования Лапласа будет иметь силу лишь в случае, когда

$$s \ll \gamma. \quad (6.4.68)$$

Для оригинала Лапласа это означает, что

$$t \gg \gamma^{-1}. \quad (6.4.69)$$

Определим

$$s_1 = s \gamma^{-1}. \quad (6.4.70)$$

Тогда (6.4.51) принимает вид

$$\gamma s_1 \bar{v} = P L_2 [s_1 \gamma - L_1 \gamma - (1 - P) L_2]^{-1} L_2 \bar{v} + v(0). \quad (6.4.71)$$

В пределе $\gamma \rightarrow \infty$ получаем

$$\gamma s_1 \bar{v} \simeq \gamma^{-1} P L_2 (s_1 - L_1)^{-1} L_2 \bar{v} + v(0). \quad (6.4.72)$$

Учитывая, что $L\tilde{v}$ пропорционально $P_1(u)$ (см. (6.4.62)), получаем

$$\gamma s_1 \tilde{v} = \gamma^{-1}(s_1 + 1)^{-1} PL_2^2 \tilde{v} + v(0). \quad (6.4.73)$$

Возвращаясь к переменной s и преобразуя, находим

$$s\tilde{v} = \gamma^{-1} \left(\frac{s}{\gamma} + 1 \right)^{-1} PL_2^2 \tilde{v} + v(0), \quad (6.4.74)$$

что эквивалентно

$$\frac{\partial v}{\partial t} = \int_0^t dt' \exp[\gamma(t' - t)] PL_2^2 v(t') dt'. \quad (6.4.75)$$

С другой стороны, можно переписать (6.4.74) в виде

$$\frac{1}{\gamma} [s^2 \tilde{v} - sv(0)] + [s\tilde{v} - v(0)] = \gamma^{-1} PL_2^2 v, \quad (6.4.76)$$

что с учетом (6.4.46) и результатов разд. 6.4.2 эквивалентно уравнению для \hat{p}

$$\boxed{\frac{1}{\gamma} \frac{\partial^2 p}{\partial t^2} + \frac{\partial \hat{p}}{\partial t} = \gamma^{-1} \frac{\partial}{\partial y} \left[U'(y) \hat{p} + \frac{\partial \hat{p}}{\partial y} \right]}, \quad (6.4.77)$$

начальным условием для которого служит

$$\frac{\partial \hat{p}}{\partial t}(0) = 0,$$

поскольку

$$\int_0^{\infty} e^{-st} f''(t) dt = s^2 \tilde{f}(s) - s f(0) - f'(0)$$

и в первой скобке в (6.4.76) отсутствует постоянный член. Аналогично мы можем преобразовать (6.4.75) или проинтегрировать (6.4.77) и получить

$$\boxed{\frac{\partial \hat{p}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial y} \left[U'(y) + \frac{\partial}{\partial y} \right] \int_0^t dt' \exp[\gamma(t' - t)] \hat{p}(t')}. \quad (6.4.78)$$

Уравнения (6.4.77, 78) носят немарковский характер. Это отчетливо видно в (6.4.78), где предсказание значения $\hat{p}(t + \Delta t)$ требует знания $\hat{p}(t')$ для $0 \leq t' \leq t$. Однако ядро $\exp(\gamma(t' - t))$ существенно отлично

от нуля только для $|t' - t| \sim \gamma^{-1}$, и поэтому на значительно больших временных масштабах уравнение (6.4.78) аппроксимируется уравнением Смолуховского (6.4.66). Формально мы приходим к этому, проводя в (6.4.78) интегрирование по частям:

$$\int_0^t dt' \exp[\gamma(t' - t)] \dot{p}(t') = \frac{\dot{p}(t) - e^{-\gamma t} \dot{p}(0)}{\gamma} - \gamma^{-1} \int_0^t \exp[\gamma(t' - t)] \frac{\partial \dot{p}}{\partial t} dt'. \quad (6.4.79)$$

Отбрасывая последний член как имеющий порядок γ^{-2} , вместо уравнения Смолуховского мы получаем

$$\boxed{\frac{\partial \dot{p}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial y} \left[U'(y) + \frac{\partial}{\partial y} \right] \left[\dot{p}(t) - e^{-\gamma t} \dot{p}(0) \right]}. \quad (6.4.80)$$

Это уравнение до низшего порядка по γ эквивалентно (6.4.78) для всех времен, т. е. для малых ($\ll \gamma^{-1}$) и больших ($\gg \gamma^{-1}$) времен. Оно указывает характерное «время памяти», γ^{-1} , которое должно пройти, чтобы уравнение перешло в уравнение Смолуховского.

С точностью до этого порядка процесс, следовательно, можно считать марковским, но существуют и альтернативные выражения (6.4.77, 78), которые с точностью до этого же порядка не являются марковскими процессами. Ясно, что при более высоких порядках мы имеем дело с немарковскими процессами.

6.4.4. ГРАНИЧНЫЕ УСЛОВИЯ

Рассмотрим границу в точке $y = a$, когда положение частицы ограничено областью $y \leq a$. Поведение частицы при $u > 0$ и $u < 0$ различно.

Из стохастических дифференциальных уравнений

$$dy = u dt \quad (6.4.81)$$

$$du = -[U'(y) + \gamma u]dt + \sqrt{2\gamma} dW(t)$$

мы видим, что

при $u > 0$ $y = a$ является выходной границей,

при $u < 0$ $y = a$ является входной границей,

поскольку частица с $u > 0$ в точке $y = a$ должна перейти в область $y > a$ или поглотиться. Частицы, находящиеся слева от границы, при $u < 0$ не могут попасть в точку $y = a$. Тип границы $y = a$ можно определить следующим образом:

1) *Поглощающая граница*: при $u > 0$ частица поглощается, при $u < 0$ частиц нет —

$$\begin{aligned} \Rightarrow p(u, a, t) &= 0 \quad u > 0 \\ &= 0 \quad u < 0. \end{aligned} \quad (6.4.82)$$

Первое из этих условий является обычным условием для поглощающей границы, сформулированным в разд. 5.2.1. Второе же отражает тот факт, что всякая частица, помещенная с $u < 0$ в точку $y = a$, немедленно переходит в область $y < a$ и другие частицы не появляются.

Очевидно, поглощающее граничное условие подразумевает, что

$$\dot{p}(a, t) = 0, \quad (6.4.83)$$

т. е. обычное поглощающее граничное условие для уравнения Фоккера — Планка для одной переменной.

2) *Отражающая граница*: с физической точки зрения отражение в точке $y = a$ означает, что частица, достигшая точки $y = a$ со скоростью u , немедленно начинает двигаться с другой, противоположной по знаку скоростью. Если допустить, что

$$u \rightarrow -u,$$

то мы имеем дело с «периодическим граничным условием» (см. разд. 5.2.1 и 5.3.2). Это означает, что

$$p(u, a, t) = p(-u, a, t), \quad (6.4.84)$$

и что нормальная компонента тока, выходящего из (u, a) , равна нормальной составляющей тока, входящего в $(-u, a)$. Однако, поскольку для этого уравнения

$$J = \left\{ -up, [\gamma u + U'(y)] p + \gamma \frac{\partial p}{\partial u} \right\} \quad (6.4.85)$$

и нормальной компонентой является компонента, направленная по оси y , мы видим, что соотношения (6.4.84) и (6.4.85) эквивалентны.

Это граничное условие естественным образом ведет к граничному условию для уравнения Смолуховского.

Действительно, из (6.4.84) следует, что в разложение для $p(u, a, t)$ могут входить собственные функции $P_n(u)$ только четных порядков. Следовательно,

$$(1 - P)p(u, a, t) = w(u, a, t) \quad (6.4.86)$$

содержит только четные собственные функции, и то же самое относится к преобразованию Лапласа $\tilde{w}(u, a, s)$. Однако из (6.4.50) мы ви-

дим, что с точностью до низшего порядка по γ^{-1}

$$\tilde{w}(u, a, s) \simeq (-\gamma^{-1}L^{-1}L_2\tilde{v})(u, a, s), \quad (6.4.87)$$

и с учетом (6.4.63)

$$= -P_1(u)\gamma^{-1} \left[U'(y)\hat{p}(y) + \frac{\partial \hat{p}(y)}{\partial y} \right]_{y=a}. \quad (6.4.88)$$

Поскольку в это выражение входит как сомножитель *нечетная* собственная функция $P_1(u)$, оно обращается в нуль. Таким образом, мы получаем

$$\left[U'(y)\hat{p}(y) + \frac{\partial \hat{p}(y)}{\partial y} \right]_{y=a} = 0, \quad (6.4.89)$$

и это выражение является корректной формулировкой отражающего граничного условия для уравнения Смолуховского.

Аналогичным путем нетрудно показать, что такие же граничные условия могут быть получены для уравнений, выведенных в разд. 6.4.3.

6.4.5. СИСТЕМАТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ В РАМКАХ ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ

Вернемся теперь к (6.4.47), вновь приняв для простоты $w(0) = 0$. Тогда

$$\tilde{w}(s) = [s - \gamma L_1 - (1 - P)L_2]^{-1}L_2\tilde{v}(s) \quad (6.4.90)$$

и

$$s\tilde{v}(s) = PL_2[s - \gamma L_1 - (1 - P)L_2]^{-1}L_2\tilde{v}(s) + v(0). \quad (6.4.91)$$

Выражение $[\dots]^{-1}$ в (6.4.91) мы можем сразу разложить по степеням γ . Нужно, однако, определить порядок величины s в этом разложении. Из предшествующих разделов мы знаем, что существует возможность определить

$$s_1 = s\gamma^{-1}, \quad \tilde{v} \rightarrow \gamma^{-1}\tilde{v}, \quad (6.4.92)$$

что приводит к разложению, в котором явно будет представлено начальное поведение, т. е. поведение на временах порядка γ^{-1} .

Можно, наоборот, определить

$$s_2 = s\gamma, \quad \tilde{v} \rightarrow \gamma\tilde{v}, \quad (6.4.93)$$

и тогда мы получим разложение, в котором проявляется только долговременная зависимость.

После подстановки (6.4.93) выражение (6.4.91) принимает вид

$$s_2 \bar{v} = -PL_2[L_1 + (1 - P)L_2\gamma^{-1} - s_2\gamma^{-2}]^{-1}L_2\bar{v} + v(0), \quad (6.4.94)$$

и мы можем теперь записать

$$s_2 \bar{v} = -PL_2L_1^{-1}L_2\bar{v} + v(0) \quad (\gamma \rightarrow \infty), \quad (6.4.95)$$

в то время как без этой подстановки в пределе $\gamma \rightarrow \infty$ мы получим просто

$$s\bar{v} = v(0). \quad (6.4.96)$$

Это согласуется с (6.4.52), где мы на самом деле не переходили к пределу $\gamma \rightarrow \infty$.

Подстановка $s_1 = s\gamma^{-1}$

$$s_1 \bar{v} = \gamma^{-2}PL_2[s_1 - L_1 - (1 - P)L_2\gamma^{-1}]L_2\bar{v}(s) + v(0) \quad (6.4.97)$$

не имеет правильного предела при $\gamma \rightarrow \infty$. Однако она дает разложение, аналогичное обычному для теории возмущений, и, как мы видели, показывает поведение при малых временах.

а) Теория возмущений для больших времен

Выражение (6.4.94) можно представить с точностью до γ^{-2} в виде

$$s_2 v = [A + B\gamma^{-1} + (C + Ds_2)\gamma^{-2}]\bar{v} + v(0), \quad (6.4.98)$$

где

$$A = -PL_2L_1^{-1}L_2$$

$$B = PL_2L_1^{-1}(1 - P)L_2L_1^{-1}L_2 \quad (6.4.99)$$

$$C = -PL_2L_1^{-1}(1 - P)L_2L_1^{-1}(1 - P)L_2L_1^{-1}L_2$$

$$D = PL_2L_1^{-2}L_2.$$

Перегруппировав (6.4.98), получим

$$s_2(1 - \gamma^{-2}D)\bar{v} = [A + B\gamma^{-1} + C\gamma^{-2}]\bar{v} + v(0), \quad (6.4.100)$$

или, с точностью до γ^{-2} ,

$$s_2 \bar{v} = [A + B\gamma^{-1} + (C + DA)\gamma^{-2}]\bar{v} + (1 + \gamma^{-2}D)v(0). \quad (6.4.101)$$

Это дает нам преобразование Лапласа для уравнения движения относительно v , в котором начальным условием будет не $v(0)$, а

$(1 + \gamma^{-2}D)v(0)$. Заметим, что это уравнение будет иметь первый порядок относительно времени, поскольку в него не входит s_2^n для $n > 1$. Разумеется, это невозможно, если проводить разложение до высших порядков по γ .

б) Приложение к броуновскому движению

Для броуновского движения мы уже вычислили оператор A в (6.4.99); он дается выражением (6.4.65):

$$A = -PL_2L_1^{-1}L_2 = \frac{\partial}{\partial y} \left[U'(y) + \frac{\partial}{\partial y} \right]. \quad (6.4.102)$$

Остальные операторы можно вычислить аналогичным образом. Например, из (6.4.63, 64)

$$L_2L_1^{-1}L_2 = - \left[P_0(u) \frac{\partial}{\partial y} + \sqrt{2} P_2(u) \left[U'(y) + \frac{\partial}{\partial y} \right] \right] \left[U'(y) + \frac{\partial}{\partial y} \right].$$

Умножение на $(1 - P)$ устраняет член с P_0 , а последующее умножение на L_1^{-1} умножает на $-1/2$. Таким образом,

$$L_1^{-1}(1 - P)L_2L_1^{-1}L_2 = \sqrt{2} P_2(u) \left[U'(y) + \frac{\partial}{\partial y} \right]^2.$$

Теперь, умножая на L_2 , воспользуемся рекуррентными формулами для многочленов Эрмита (6.4.60, 61); получаем

$$\begin{aligned} L_2P_2(u) &= \left[-\frac{\partial}{\partial y} u + U'(y) \frac{\partial}{\partial u} \right] P_2(u) \\ &= -\sqrt{3} U'(y) P_3(u) - \frac{\partial}{\partial y} \left[\sqrt{3} P_3(u) + \sqrt{2} P_1(u) \right]. \end{aligned} \quad (6.4.103)$$

Наконец, умножение на P уничтожает все члены, поскольку $P_0(u)$ не входит в выражение. Следовательно,

$$B = PL_2L_1^{-1}(1 - P)L_2L_1^{-1}L_2 = 0. \quad (6.4.104)$$

Так же вычисляются C и DA .

Находим, что

$$C = \frac{\partial^2}{\partial y^2} \left[U'(y) + \frac{\partial}{\partial y} \right] \left[U'(y) + \frac{\partial}{\partial y} \right] \quad (6.4.105)$$

и

$$DA = - \frac{\partial}{\partial y} \left[U'(y) + \frac{\partial}{\partial y} \right] \frac{\partial}{\partial y} \left[U'(y) + \frac{\partial}{\partial y} \right], \quad (6.4.106)$$

откуда

$$C + DA = \frac{\partial}{\partial y} U''(y) \left[U'(y) + \frac{\partial}{\partial y} \right] \quad (6.4.107)$$

и (6.4.101) эквивалентно дифференциальному уравнению

$$\frac{\partial \hat{p}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial y} [1 + \gamma^{-2} U''(y)] \left[U'(y) \hat{p} + \frac{\partial \hat{p}}{\partial y} \right] \quad (6.4.108)$$

с начальным условием

$$\lim_{t \rightarrow 0} \hat{p}(y, t) = \left\{ 1 - \gamma^{-2} \frac{\partial}{\partial y} \left[U'(y) + \frac{\partial}{\partial y} \right] \right\} \hat{p}(y, 0). \quad (6.4.109)$$

Изменение начального условия отражает феномен «пограничного слоя». Уравнение (6.4.108) имеет силу для $t \gg \gamma^{-1}$ и известно как *уточненное уравнение Смолуховского*.

Точное решение будет описывать временной ход вплоть до $t \sim \gamma^{-1}$ и должно включать члены типа $\exp(-\gamma t)$. Рассматриваемая ситуация иллюстрируется рис. 6.1, и «пограничный слой» вблизи $t \sim \gamma^{-1}$ объясняется новым начальным условием.

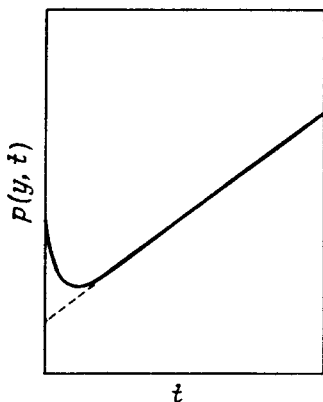


Рис. 6.1. Образование пограничного слоя. Точное решение (сплошная линия) быстро изменяется вблизи границы слева. Приближенное решение является удовлетворительным всюду, за исключением приграничной области. Поэтому в качестве граничного условия для приближения выбирается меньшее значение, соответствующее точке, где прямая пересекается с границей.

в) *Граничные условия*

Получение обусловленных граничными условиями решений высших порядков методами этого раздела невозможно, так как вблизи границы возникает слой быстрого изменения по переменной x , и предположение об ограниченности оператора $\partial/\partial u$ оказывается необоснованным. Значительный шаг вперед был сделан Титулаэром и его коллегами [6.10—12]. Пусть граница находится в $y = 0$. Тогда мы можем подставить в уравнение Крамера (6.4.19) $z = \gamma u$, $\tau = \gamma t$ и получить

$$\frac{\partial P}{\partial \tau} = \left[\frac{\partial}{\partial u} \left(u + \frac{\partial}{\partial u} \right) - u \frac{\partial}{\partial z} \right] P + \frac{1}{\gamma} U'(z/\gamma) \frac{\partial P}{\partial u} \quad (6.4.110)$$

Тогда задача нулевого порядка оказывается решением той части уравнения, которая не зависит от γ : в этот порядок потенциал не входит. До сих пор удалось получить лишь стационарное решение (6.4.110). Можно показать, что стационарное решение (6.4.110) в пределе $\gamma \rightarrow \infty$ может быть записано в виде

$$P(u, z) = \psi'_0(u, z) + d_0^s \psi(u, z) + \sum_{n=1}^{\infty} d_n^s \psi_n(u, z), \quad (6.4.111)$$

где

$$\psi_0(u, z) = (2\pi)^{-1/2} \exp\left(-\frac{1}{2}u^2\right) \quad (6.4.112)$$

$$\psi'_0(u, z) = (2\pi)^{-1/2} (z - u) \exp\left(-\frac{1}{2}u^2\right), \quad (6.4.113)$$

а $\psi_n(u, z)$ являются некоторыми сложными функциями, связанными с эрмитовыми полиномами. Задача определения коэффициентов d_n^s не так проста, и за подробностями читатель может обратиться к [6.12]. Установлено, что решение имеет бесконечную производную в точке $z = 0$, а для малых z имеет вид $a + bz^{1/3}$.

6.5. БЕЛЫЙ ШУМ КАК ПРЕДЕЛЬНЫЙ СЛУЧАЙ КОРРЕЛИРОВАННОГО ПРОЦЕССА

О связи между реальным и белым шумом уже упоминалось в разд. 1.4.4 и 4.1. Нас интересует предел дифференциального уравнения

$$\frac{dx}{dt} = a(x) + b(x)\alpha_0(t), \quad (6.5.1)$$

где $\alpha_0(t)$ — стохастический источник с некоторым ненулевым временем корреляции. Мы покажем, что если $\alpha_0(t)$ представляет собой марковский процесс, то в пределе, когда он переходит в дельта-коррелированный процесс, дифференциальное уравнение превращается в

стохастическое дифференциальное уравнение Стратоновича с теми же коэффициентами, т. е. в уравнение

$$(S) dx = a(x)dt + b(x)dW(t), \quad (6.5.2)$$

которому эквивалентно уравнение Ито

$$dx = [a(x) + \frac{1}{2}b(x)b'(x)]dt + b(x)dW(t). \quad (6.5.3)$$

Для перехода к дельта-коррелированному марковскому процессу нам необходимо найти предел при $\gamma \rightarrow \infty$ для

$$\alpha_0(t) = \gamma\alpha(\gamma^2 t), \quad (6.5.4)$$

где $\alpha(\tau)$ есть стационарный случайный процесс с

$$\langle \alpha(\tau) \rangle = 0 \quad (6.5.5)$$

$$\langle \alpha(\tau)\alpha(0) \rangle_s = g(\tau). \quad (6.5.6)$$

Тогда

$$\langle \alpha_0(t) \rangle = 0$$

$$\langle \alpha_0(t)\alpha_0(0) \rangle_s = \gamma^2 g(\gamma^2 t). \quad (6.5.7)$$

В пределе $\gamma \rightarrow \infty$ корреляционная функция превращается в дельта-функцию. Действительно, пусть

$$\int_{-\infty}^{\infty} g(\tau)d\tau = 1, \quad (6.5.8)$$

а

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\tau|g(\tau)d\tau = \tau_c \quad (6.5.9)$$

определяет время корреляции для процесса $\alpha(t)$. (Если $g(\tau)$ — экспоненциальная функция, то в соответствии с определением (6.5.9)

$$g(\tau) \propto \exp(-\tau/\tau_c),$$

что согласуется с практикой, принятой в разд. 1.4.4, 3.7.1.)

Тогда, очевидно, время корреляции для $\alpha_0(\tau)$ есть τ_c/γ^2 , и оно обращается в нуль при $\gamma \rightarrow \infty$. Кроме того,

$$\lim_{\gamma \rightarrow \infty} \langle \alpha_0(t)\alpha_0(0) \rangle_s = 0 \quad (t \neq 0), \quad (6.5.10)$$

и всегда

$$\int_{-\infty}^{\infty} \langle \alpha_0(t) \alpha_0(0) \rangle_s dt = \int_{-\infty}^{\infty} g(\tau) d\tau = 1, \quad (6.5.11)$$

так что мы можем записать

$$\lim_{\gamma \rightarrow \infty} \langle \alpha_0(t) \alpha_0(0) \rangle_s = \delta(t). \quad (6.5.12)$$

Таким образом, предел $\gamma \rightarrow \infty$ для $\alpha_0(t)$ на самом деле соответствует пределу нормированного белого шума. Можно было бы предположить, что корреляции более высоких порядков тоже существенны, однако это не так.

Рассмотрим в качестве примера случай, когда $\alpha(\tau)$ является марковским диффузионным процессом, для которого уравнение Фоккера — Планка имеет вид

$$\frac{\partial p(\alpha)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial \alpha} [A(\alpha)p(\alpha)] + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} [B(\alpha)p(\alpha)]. \quad (6.5.13)$$

Соответственно УФП для (x, α) имеет вид

$$\frac{\partial p(x, \alpha)}{\partial t} = (\gamma^2 L_1 + \gamma L_2 + L_3)p(x, \alpha), \quad (6.5.14)$$

где

$$\begin{aligned} L_1 &= -\frac{\partial}{\partial \alpha} A(\alpha) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} B(\alpha) \\ L_2 &= -\frac{\partial}{\partial x} b(x) \alpha \\ L_3 &= -\frac{\partial}{\partial x} a(x). \end{aligned} \quad (6.5.15)$$

Асимптотический анализ проводится аналогично тому, как это делалось в разд. 6.4.1, 6.4.3, с той разницей, что нам нужно принять во внимание оператор L_3 . Аналогично разд. 6.4.1 мы определим проектор P на пространстве функций x и α как

$$(Pf)(x, \alpha) = p_s(\alpha) \int d\alpha f(x, \alpha), \quad (6.5.16)$$

где $p_s(\alpha)$ есть решение

$$L_1 p_s(\alpha) = 0. \quad (6.5.17)$$

Мы предполагаем, что для стационарного распределения α среднее значение $\langle \alpha \rangle_s$ равно нулю. Это означает, что проектор P удовлетворяет основному условию

$$PL_2P = 0, \quad (6.5.18)$$

поскольку

$$\begin{aligned} (PL_2Pf)(x, \alpha) &= p_s(\alpha) \int d\alpha' \left[-\frac{\partial}{\partial x} b(x) \alpha p_s(\alpha') \right] \int d\alpha'' f(x, \alpha'') \\ &= -p_s(\alpha) \langle \alpha \rangle_s \frac{\partial}{\partial x} b(x) \int d\alpha' f(x, \alpha') = 0. \end{aligned} \quad (6.5.19)$$

Очевидно также, что

$$PL_3 = L_3P \quad (6.5.20)$$

и, как прежде,

$$PL_1 = L_1P = 0. \quad (6.5.21)$$

Определяя, как ранее,

$$v = Pp \quad (6.5.22)$$

$$w = (1 - P)p, \quad (6.5.23)$$

и используя обозначения \tilde{v} , \tilde{w} для соответствующих преобразований Лапласа, находим

$$\begin{aligned} s\tilde{v}(s) &= P(\gamma^2L_1 + \gamma L_2 + L_3)\tilde{p}(s) + v(0) \\ &= \gamma PL_2[P\tilde{p}(s) + (1 - P)\tilde{p}(s)] + L_3P\tilde{p}(s) + v(0) \end{aligned} \quad (6.5.24)$$

откуда

$$s\tilde{v}(s) = \gamma PL_2\tilde{w}(s) + L_3\tilde{v}(s) + v(0) \quad (6.5.25)$$

и аналогично

$$s\tilde{w}(s) = [\gamma^2L_1 + \gamma(1 - P)L_2 + L_3]\tilde{w}(s) + \gamma L_2\tilde{v}(s) + w(0). \quad (6.5.26)$$

Эти выражения отличаются от (6.4.47) лишь наличием $L_3\tilde{v}(s)$ в (6.5.25) и $L_3\tilde{w}$ в (6.5.26). Мы вновь считаем, что $w(0) = 0$ (т. е. $\alpha(t)$ — стационарный марковский процесс), так что

$$s\tilde{v}(s) = L_3\tilde{v}(s) - \gamma PL_2[-s + \gamma^2L_1 + \gamma(1 - P)L_2 + L_3]^{-1}\gamma L_2\tilde{v}(s) + v(0). \quad (6.5.27)$$

В пределе $\gamma \rightarrow \infty$ получаем

$$s\bar{v}(s) \simeq (L_3 - PL_2L_1^{-1}L_2)\bar{v}(s) + v(0). \quad (6.5.28)$$

Вычислим теперь $PL_2L_1^{-1}L_2\bar{v}$. Запишем

$$\bar{v}(s) = \bar{p}(x)p_s(\alpha) \quad (6.5.29)$$

$$PL_2L_1^{-1}L_2\bar{v} = p_s(\alpha) \int d\alpha' \left[-\frac{\partial}{\partial x} b(x)\alpha' \right] L_1^{-1} \left[-\frac{\partial}{\partial x} b(x)\alpha' \right] p_s(\alpha')\bar{p}(x). \quad (6.5.30)$$

Теперь нам следует оценить

$$\int d\alpha \alpha L_1^{-1} \alpha p_s(\alpha) \equiv -D, \quad (6.5.31)$$

а для этого требуется удобное выражение для L_1^{-1} . Рассмотрим

$$\int_0^t \exp(L_1 t') dt' = L_1^{-1} \exp(L_1 t) - L_1^{-1} \quad (6.5.32)$$

и с учетом (6.4.29) получим

$$\int_0^{\infty} \exp(L_1 t) dt = -L_1^{-1}(1 - P). \quad (6.5.33)$$

Поскольку по предположению

$$P\alpha p_s(\alpha) = p_s(\alpha) \int d\alpha' \alpha' p_s(\alpha') = p_s(\alpha') \langle \alpha \rangle_s = 0, \quad (6.5.34)$$

мы приходим к

$$D = \int d\alpha \alpha \int_0^{\infty} \exp(L_1 t) \alpha p_s(\alpha) dt \quad (6.5.35)$$

Заметим, что

$$\exp(L_1 t) \alpha p_s(\alpha) \quad (6.5.36)$$

есть решение уравнения Фоккера — Планка

$$\partial_t f = L_1 f \quad (6.5.37)$$

с начальным условием

$$f(\alpha, 0) = \alpha p_s(\alpha). \quad (6.5.38)$$

Следовательно,

$$\exp(L_1 t) \alpha p_s(\alpha) = \int d\alpha' p(\alpha, t | \alpha', 0) \alpha' p_s(\alpha'). \quad (6.5.39)$$

Подставляя это в (6.5.35), получаем

$$D = \int_0^{\infty} dt \int d\alpha da' \alpha\alpha' p(\alpha', t | \alpha, 0) p_s(\alpha), \quad (6.5.40)$$

т. е.

$$D = \int_0^{\infty} dt \langle \alpha(t)\alpha(0) \rangle_s, \quad (6.5.41)$$

а в силу (6.5.8) и симметрии корреляционной функции

$$D = 1/2. \quad (6.5.42)$$

Используя это значение D , находим

$$- PL_2 L_1^{-1} L_2 \bar{v} = \frac{1}{2} p_s(\alpha) \frac{\partial}{\partial x} \left[b(x) \frac{\partial}{\partial x} b(x) \hat{p}(x) \right], \quad (6.5.43)$$

так что дифференциальным уравнением для

$$\hat{p}(x, t) = \int d\alpha p(x, \alpha), \quad (6.5.44)$$

соответствующим (6.5.28), является

$$\frac{\partial \hat{p}}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial x} a(x) \hat{p}(x) + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x} b(x) \frac{\partial}{\partial x} b(x) \hat{p}(x). \quad (6.5.45)$$

Это не что иное, как УФП в форме Стратоновича, которое соответствует стохастическому дифференциальному уравнению

$$(S) dx = a(x)dt + b(x)dW(t), \quad (6.5.46)$$

или, в форме Ито,

$$dx = [a(x) + \frac{1}{2}b'(x)b(x)]dt + b(x)dW(t), \quad (6.5.47)$$

как указывалось вначале.

6.5.1 ОБЩНОСТЬ РЕЗУЛЬТАТА

Достаточно взглянуть на доказательство, чтобы увидеть, что от $\alpha(t)$ требовалось лишь быть стационарным марковским процессом с нулевым средним и уравнением движения вида

$$\frac{\partial p(\alpha)}{\partial t} = L_1 p(\alpha), \quad (6.5.48)$$

где L_1 — линейный оператор. Этим требованиям может отвечать любой марковский процесс, в частности случайный телеграфный процесс, в котором $\alpha(t)$ принимает значения $\pm a$. В пределе $\gamma \rightarrow \infty$ результат по-прежнему будет представлять собой уравнение Фоккера — Планка. Это является следствием центральной предельной теоремы. Действительно, эффективный гауссовский белый шум складывается из суммы многих отдельных компонент, когда $\gamma \rightarrow \infty$, и суммарный результат будет все равно гауссовским. Более того, Папаниколау и Колер [6.7] строго доказали, что полученный вывод справедлив, даже если $\alpha(t)$ не является марковским процессом при условии «сильного перемешивания», т. е. когда все корреляционные функции с увеличением разности времен быстро убывают.

6.5.2. БОЛЕЕ ОБЩИЕ ФЛУКТУАЦИОННЫЕ УРАВНЕНИЯ

Заметим, что в (6.5.1) вместо $\alpha_0(t)$ в виде $\gamma\alpha(t/\gamma^2)$ мы можем взять более общее выражение

$$\alpha_0(t, x) = \gamma\psi[x, \alpha(t/\gamma^2)], \quad b = 1 \quad (6.5.49)$$

и принять $b(x) = 1$, поскольку теперь всю зависимость от x можно учесть в определении ψ . Будем предполагать, что

$$\int d\alpha \psi(x, \alpha) p_s(\alpha) = 0 \quad (6.5.50)$$

по аналогии с нашим прежним предположением $\langle \alpha \rangle_s = 0$. Тогда D становится зависящим от x и мы должны принять

$$D(x) = \int_0^\infty dt \langle \psi[x, \alpha(t)] \psi[x, \alpha(0)] \rangle. \quad (6.5.51)$$

и

$$E(x) = \int_0^\infty dt \left\langle \frac{\partial \psi}{\partial x} [x, \alpha(t)] \psi[x, \alpha(0)] \right\rangle. \quad (6.5.52)$$

Уравнение Фоккера — Планка принимает вид

$$\frac{\partial \hat{p}}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial x} [\{ a(x) + E(x) \} \hat{p}] + \frac{\partial^2}{\partial x^2} [D(x) \hat{p}]. \quad (6.5.53)$$

и согласуется с уравнением в форме, полученной Стратоновичем (формулы (4.160, 161) в [6.3]).

6.5.3. СИСТЕМЫ, НЕОДНОРОДНЫЕ ВО ВРЕМЕНИ

Если вместо (6.5.1) принять

$$\frac{dx}{dt} = a(x, t) + b(x, t)\alpha_0(t), \quad (6.5.54)$$

то преобразование Лапласа простым образом применить не удастся. Трудность можно обойти с помощью следующего приема. Введем дополнительную переменную τ , с которой уравнения примут вид

$$dx = [a(x, \tau) + \gamma b(x, \tau)\alpha]dt \quad (6.5.55)$$

$$d\alpha = \gamma^2 A(\alpha)dt + \gamma\sqrt{B(\alpha)} dW(t) \quad (6.5.56)$$

$$d\tau = dt. \quad (6.5.57)$$

Последнее равенство устанавливает эквивалентность t и τ , однако система теперь является однородным марковским процессом в переменных x, α, t . С помощью этого приема любой неоднородный марковский процесс может быть преобразован в однородный. Уравнение Фоккера — Планка имеет вид

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \gamma^2 L_1 + \gamma L_2 + L_3, \quad (6.5.58)$$

где

$$L_1 = -\frac{\partial}{\partial \alpha} A(\alpha) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} B(\alpha) \quad (6.5.59)$$

$$L_2 = -\frac{\partial}{\partial x} b(x, \tau)\alpha \quad (6.5.60)$$

$$L_3 = -\frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{\partial}{\partial x} a(x, \tau). \quad (6.5.61)$$

Действуя так же, как и раньше, получаем

$$\frac{\partial \hat{p}}{\partial t} = \left[-\frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{\partial}{\partial x} a(x, \tau) + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x} b(x, \tau) \frac{\partial}{\partial x} b(x, \tau) \right] \hat{p}, \quad (6.5.62)$$

откуда

$$d\tau = dt, \quad (6.5.63)$$

и, выражая τ через t , мы приходим к

$$\frac{\partial \hat{p}}{\partial t} = \left[-\frac{\partial}{\partial x} a(x, t) + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x} b(x, t) \frac{\partial}{\partial x} b(x, t) \right] \hat{p} \quad (6.5.64)$$

в точном соответствии с (6.5.45).

6.5.4. УЧЕТ ЗАВИСИМОСТИ L_1 ОТ ВРЕМЕНИ

Предположим вдобавок, что A и B также зависят от времени, так что

$$L_1 = -\frac{\partial}{\partial \alpha} A(\alpha, \tau) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} B(\alpha, \tau). \quad (6.5.65)$$

В таком случае P оказывается функцией τ и поэтому не коммутирует с L_3 :

$$PL_3 \neq L_3P. \quad (6.5.66)$$

Выход из положения, однако, существует. Определив $\tilde{v}(s)$ и $\tilde{w}(s)$, как прежде, получим

$$s \tilde{v}(s) = P(\gamma L_2 + L_3) \tilde{w}(s) + PL_3 \tilde{v}(s) + v(0) \quad (6.5.67)$$

$$s \tilde{w}(s) = [\gamma^2 L_1 + \gamma(1 - P)L_2 + (1 - P)L_3] \tilde{w}(s) + \gamma L_2 \tilde{v}(s) + (1 - P)L_3 \tilde{v}(s), \quad (6.5.68)$$

так что

$$s \tilde{v}(s) = PL_3 \tilde{v}(s) + P(\gamma L_2 + L_3) [s - \gamma^2 L_1 - \gamma(1 - P)L_2 - (1 - P)L_3]^{-1} \times [\gamma L_2 + (1 - P)L_3] \tilde{v}(s) + v(0). \quad (6.5.69)$$

Поскольку L_2 умножается на γ , а L_3 нет, в пределе для больших γ мы имеем

$$s \tilde{v}(s) \simeq (PL_3 - PL_2 L_1^{-1} L_2) \tilde{v}(s) + v(0). \quad (6.5.70)$$

В данном случае мы не будем предполагать, что существует возможность нормировки автокорреляционной функции на константу. Член $-PL_2 L_1^{-1} L_2$ дает

$$\frac{\partial}{\partial x} b(x, \tau) \frac{\partial}{\partial x} b(x, \tau) \int_0^\infty dt \langle \alpha_\tau(t) \alpha_\tau(0) \rangle, \quad (6.5.71)$$

где под $\alpha_\tau(t)$ мы понимаем случайную переменную, уравнение Фоккера — Планка для которой имеет вид

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \left[\frac{\partial}{\partial \alpha} A(\alpha, \tau) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} B(\alpha, \tau) \right] p. \quad (6.5.72)$$

Таким образом, в пределе $\gamma \rightarrow \infty$ случайное движение оказывается бесконечно более быстрым, чем движение, обусловленное временной зависимостью α , происходящей из-за зависимости A и B от времени. Определив

$$D(\tau) = \int_0^{\infty} dt \langle \alpha_{\tau}(t) \alpha_{\tau}(0) \rangle, \quad (6.5.73)$$

и исключая, как раньше, τ , получаем

$$\frac{\partial \hat{p}}{\partial t} = \left[-\frac{\partial}{\partial x} a(x, t) + D(t) \frac{\partial}{\partial x} b(x, t) \frac{\partial}{\partial x} b(x, t) \right] \hat{p}. \quad (6.5.74)$$

6.6. АДИАБАТИЧЕСКОЕ ИСКЛЮЧЕНИЕ БЫСТРЫХ ПЕРЕМЕННЫХ: ОБЩИЙ СЛУЧАЙ

Рассмотрим теперь общий случай двух переменных x и α , которые связаны между собой таким образом, что изменение одной из них влечет изменение другой и наоборот. Эта задача аналогична выводу уравнения Смолуховского в случае, когда $V'(x)$ не обращается в нуль, в то время как предыдущий раздел был посвящен обобщению этого уравнения на случай, когда $V'(x) = 0$.

В наиболее общем виде эта задача настолько сложна, что сколько-нибудь вразумительно изложить ее решение невозможно. Для того чтобы познакомиться с подходами к этой проблеме, рассмотрим пример линейной химической системы, а затем обобщим его.

6.6.1 ПРИМЕР: ИСКЛЮЧЕНИЕ КОРОТКОЖИВУЩИХ ПРОМЕЖУТОЧНЫХ ПРОДУКТОВ ХИМИЧЕСКОЙ РЕАКЦИИ

Рассмотрим пример химической реакции



в которой количества веществ X и Y изменяются, а количество вещества A каким-то образом поддерживается постоянным. Детерминистические уравнения скорости реакции для этой системы имеют вид

$$\frac{dx}{dt} = -x + \gamma y \quad (6.6.2a)$$

$$\frac{dy}{dt} = -2\gamma y + x + a. \quad (6.6.2b)$$

Здесь через x , y , a обозначены концентрации веществ X , Y , A . Константы скорости для простоты подобраны так, что $k = 1$.

В реальных процессах Y нередко оказывается короткоживущим промежуточным соединением, которое быстро (с постоянной времени γ^{-1}) превращается в A или в X . Интерес поэтому представляет предел больших γ , когда время существования короткоживущего вещества Y все более сокращается, а его концентрация становится пренебрежимо малой. Тогда в (6.6.2б) $dy/dt = 0$, и

$$y = (x + a)/2\gamma. \quad (6.6.3)$$

Подставляя это выражение в (6.6.2а), получаем

$$\frac{dx}{dt} = \frac{x}{2} - \frac{a}{2}. \quad (6.6.4)$$

В стохастическом случае ситуация осложняется тем, что источники белого шума, которые следует ввести в (6.6.2), коррелированы, и стационарное распределение y зависит от γ . Говоря точнее, в качестве стохастических аналогов (6.6.2) обычно используются уравнения (см. разд. 7.6.1)

$$\begin{aligned} dx &= (-x + \gamma y)dt + \varepsilon B_{11}dW_1(t) + \varepsilon B_{12}dW_2(t) \\ dy &= (-2\gamma y + x + a)dt + \varepsilon B_{21}dW_1(t) + \varepsilon B_{22}dW_2(t), \end{aligned} \quad (6.6.5)$$

где матрица B удовлетворяет условию

$$BB^T = \begin{bmatrix} 2a & -2a \\ -2a & 4a \end{bmatrix}. \quad (6.6.6)$$

Здесь ε — параметр, который определяется как величина, обратная корню квадратному из объема реагирующей системы. Обычно этот параметр мал, хотя в дальнейшем этот факт нам не понадобится.

Мы хотим исключить переменную y , среднее значение которой дается выражением (6.6.3) и становится в пределе исчезающе малым. Развиваемые нами идеи можно применить лишь в том случае, когда исключаемая переменная в стационарном состоянии имеет не зависящую от γ функцию распределения. Таким образом, нам придется определить новую переменную, обладающую этим свойством, как функцию x и y .

Уравнение Фоккера — Планка, соответствующее (6.6.5), имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial p}{\partial t} &= \left[\frac{\partial}{\partial x}(x - \gamma y) + \frac{\partial^2}{\partial x^2} \varepsilon^2 a - 2 \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} \varepsilon^2 a \right. \\ &\quad \left. + \frac{\partial}{\partial y}(2\gamma y - x - a) + 2\varepsilon^2 a \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right] p. \end{aligned} \quad (6.6.7)$$

Рационально, по-видимому, определить новую переменную z как

$$z = 2\gamma y - x - a \quad (6.6.8)$$

(т. е. пропорционально разности между текущим и стационарным значением y). Таким образом, мы формально определяем пару новых переменных (x_1, z) соотношениями

$$x_1 = x \quad x = x_1 \quad (6.6.9)$$

$$z = 2\gamma y - x - a \quad y = (z + x_1 + a)/2\gamma,$$

так что мы можем преобразовать УФП с использованием

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x_1} - \frac{\partial}{\partial z} \quad (6.6.10)$$

$$\frac{\partial}{\partial y} = 2\gamma \frac{\partial}{\partial z}$$

и получить

$$\begin{aligned} \frac{\partial p}{\partial t} = & \left[\frac{\partial}{\partial x_1} \left[\frac{x_1 - a}{2} - \frac{z}{2} \right] + \varepsilon^2 a \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_1 \partial z} (-2\varepsilon^2 a - 4\gamma \varepsilon^2 a) \right. \\ & \left. + \frac{\partial}{\partial z} \left(2\gamma z - \frac{x - a}{2} + \frac{z}{2} \right) + \frac{\partial^2}{\partial z^2} (8\varepsilon^2 \gamma^2 a + \varepsilon^2 a + 4\gamma \varepsilon^2 a) \right] p. \end{aligned} \quad (6.6.11)$$

Предел $\gamma \rightarrow \infty$ еще не дает нам оператор Фоккера — Планка относительно z , который просто пропорционален фиксированному оператору: мы видим, что вклады от сноса и диффузии для z пропорциональны соответственно γ и γ^2 .

Однако подстановка

$$\alpha = z\gamma^{-1/2} \quad (6.6.12)$$

меняет дело. Теперь коэффициенты сноса и диффузии становятся пропорциональны α , и мы видим, что (здесь мы пишем x вместо x_1)

$$\frac{\partial p}{\partial t} = [\gamma L_1 + \gamma^{1/2} L_2(\gamma) + L_3] p, \quad (6.6.13)$$

где

$$L_1 = 2 \frac{\partial}{\partial \alpha} \alpha + 8\varepsilon^2 a \frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} \quad (6.6.14)$$

$$\begin{aligned} L_2(\gamma) = & \frac{\partial}{\partial x} \left[-4\varepsilon^2 a \frac{\partial}{\partial \alpha} - \frac{1}{2} \alpha \right] + 4\gamma^{-1/2} \varepsilon^2 a \frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} - \gamma^{-1} \frac{\partial}{\partial \alpha} \left[\frac{x - a}{2} \right] \\ & + \left\{ -\gamma^{-1/2} \frac{\partial}{\partial \alpha} \alpha - \gamma^{-1} 2\varepsilon^2 a \frac{\partial^2}{\partial x \partial \alpha} + \gamma^{-3/2} \varepsilon^2 a \frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} \right\}, \end{aligned} \quad (6.6.15)$$

$$L_3 = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{x-a}{2} \right) + \varepsilon^2 a \frac{\partial^2}{\partial x^2}. \quad (6.6.16)$$

Заметим, что предел больших γ для $L_2(\gamma)$ определяется первым членом в первой строке (6.6.15). Единственным важным свойством L_2 является то, что $PL_2P = 0$. Определяя, как обычно, P через

$$Pf(x, \alpha) = p_s(\alpha) \int d\alpha' f(x, \alpha'), \quad (6.6.17)$$

где $p_s(\alpha)$ есть стационарное решение для L_1 , мы видим, что для всякого оператора, начинающегося с $\partial/\partial\alpha$ (как, например, зависящая от γ часть $L_2(\gamma)$), справедливо

$$P \frac{\partial}{\partial \alpha} f = p_s(\alpha) \int d\alpha' \frac{\partial}{\partial \alpha} f(x, \alpha') = 0, \quad (6.6.18)$$

при условии, что мы можем отбросить граничные члены. Следовательно, зависящая от γ часть $L_2(\gamma)$ удовлетворяет условию $PL_2P = 0$. Далее, из (6.6.14) следует, что $\langle \alpha \rangle_s = 0$, так что не зависящая от γ часть также удовлетворяет этому условию. Таким образом,

$$PL_2(\gamma)P = 0. \quad (6.6.19)$$

Стоит заметить, однако, что зависящая от γ часть L_2 содержит члены, которые выглядели бы более естественно в L_1 (мы имеем в виду члены, не содержащие производных по x). Но переместив эти члены в L_2 , мы обеспечиваем независимость L_1 от γ ; тогда P не зависит от γ и пределы становятся яснее.

Дальнейшие вычисления довольно просты. Определив, как обычно,

$$P\bar{p}(s) = \bar{v}(s) \quad (6.6.20)$$

$$(1 - P)\bar{p}(s) = \bar{w}(s),$$

и, как обычно, считая $w(0) = 0$, находим

$$s \bar{v}(s) = P[\gamma L_1 + \gamma^{1/2} L_2(\gamma) + L_3] [\bar{v}(s) + \bar{w}(s)] + v(0). \quad (6.6.21)$$

Пользуясь тем, что

$$PL_1 = L_1P = 0 \quad (6.6.22)$$

$$PL_2P = 0$$

$$PL_3 = L_3P,$$

получим

$$s \bar{v}(s) = P\gamma^{1/2} L_2(\gamma) \bar{w}(s) + L_3 \bar{v}(s) + v(0) \quad (6.6.23)$$

и аналогично

$$s \tilde{w}(s) = [\gamma L_1 + \gamma^{1/2}(1 - P)L_2(\gamma) + L_3] \tilde{w}(s) - \gamma^{1/2} L_2(\gamma) \tilde{v}(s), \quad (6.6.24)$$

откуда

$$s \tilde{v}(s) = \{L_3 + \gamma PL_2(\gamma)[s - \gamma L_1 - \gamma^{1/2}(1 - P)L_2(\gamma) - L_3]^{-1} L_2\} \tilde{v}(s) + v(0). \quad (6.6.25)$$

Переходя теперь к пределу $\gamma \rightarrow \infty$, получаем

$$s \tilde{v}(s) \simeq (L_3 - PL_2 L_1^{-1} L_2) \tilde{v}(s) + v(0), \quad (6.6.26)$$

где

$$L_2 = \lim_{\gamma \rightarrow \infty} L_2(\gamma) = \frac{\partial}{\partial x} \left(-4\epsilon^2 a \frac{\partial}{\partial \alpha} - \frac{1}{2} \alpha \right). \quad (6.6.27)$$

Уравнение (6.6.26) в точности совпадает по виду с (6.5.28); впрочем, и его формальный вывод из (6.6.7) почти идентичен. Однако оценка $PL_2 L_1^{-1} L_2$ осуществляется несколько по-иному из-за наличия членов, включающих $\partial/\partial\alpha$. Заметим, во-первых, что, поскольку $P \partial/\partial\alpha = 0$, мы можем записать

$$-PL_2 L_1^{-1} L_2 v = -p_s(\alpha) \int d\alpha' \left(-\frac{1}{2} \alpha' \frac{\partial}{\partial x} \right) L_1^{-1} \frac{\partial}{\partial x} \left(-4\epsilon^2 a \frac{\partial}{\partial \alpha'} - \frac{1}{2} \alpha' \right) p_s(\alpha') \hat{p}(x), \quad (6.6.28)$$

а в силу определения $p_s(\alpha)$ через $L_1 p_s(\alpha) = 0$ и формулы (6.6.14)

$$\frac{\partial}{\partial \alpha} p_s(\alpha) = -\alpha p_s(\alpha) / 4\epsilon^2 a, \quad (6.6.29)$$

и тогда

$$-PL_2 L_1^{-1} L_2 v = \frac{1}{4} p_s(\alpha) \frac{\partial^2}{\partial x^2} \int d\alpha' \alpha' L_1^{-1} \alpha' p_s(\alpha') \hat{p}(x) \quad (6.6.30)$$

$$= -\frac{1}{4} p_s(\alpha) \frac{\partial^2 \hat{p}(x)}{\partial x^2} \int_0^\infty dt \langle \alpha(t) \alpha(0) \rangle_s, \quad (6.6.31)$$

где мы воспользовались рассуждениями, проведенными в разд. 6.5, чтобы записать результат через корреляционную функцию. Здесь оператор L_1 соответствует процессу Орнштейна — Уленбека (см. разд. 3.8.4) с $k = 2$, $D = 16\epsilon^2 a$, так что с учетом (3.8.2)

$$-PL_2 L_1^{-1} L_2 v = -\frac{1}{4} p_s(\alpha) \frac{\partial^2 \hat{p}(x)}{\partial x^2} 4\epsilon^2 a \int_0^\infty dt e^{-2t} \quad (6.6.32)$$

$$= -\frac{1}{2} \epsilon^2 a \frac{\partial^2 \hat{p}(x)}{\partial x^2} p_s(\alpha).$$

Таким образом, из (6.6.26) мы можем записать уравнение Фоккера — Планка в виде

$$\frac{\partial \hat{p}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \frac{x-a}{2} \hat{p}(x) + \frac{1}{2} \varepsilon^2 a \frac{\partial^2 \hat{p}}{\partial x^2}. \quad (6.6.33)$$

Замечания

1) Именно такое уравнение должно соответствовать реакции



где $k = 1$ (разд. 7.5.3), поскольку из общих соображений следует, что стационарное значение дисперсии для флуктуаций концентрации дается выражением

$$\text{var} \{x(t)\}_s = \varepsilon^2 \langle x \rangle_s. \quad (6.6.35)$$

2) Заметим, что суммарный эффект адиабатического исключения сводится к *уменьшению* коэффициента при $\partial^2/\partial x^2$, что является результатом корреляции между шумовыми членами для переменных x и y в исходных уравнениях.

3) Полученный результат отличается от обычного адиабатического исключения тем, что шумовой источник, зависящий от исключаемой переменной, существен. В некоторых случаях это не так; подобный пример мы рассмотрим в дальнейшем.

6.6.2. АДИАБАТИЧЕСКОЕ ИСКЛЮЧЕНИЕ В МОДЕЛИ ХАКЕНА

Хакен предложил простую модель для демонстрации принципа адиабатического исключения (разд. 7.2 в [6.1]). Детерминистический вариант этой модели представляет собой пару связанных уравнений, которые можно записать в виде

$$\dot{x} = -\varepsilon x - ax\alpha, \quad (6.6.36)$$

$$\dot{\alpha} = -\kappa\alpha + bx^2. \quad (6.6.37)$$

Предполагается, что если κ достаточно велико, то, как и прежде, мы можем заменить α стационарным решением (6.6.37) относительно x и получить

$$\alpha = \frac{b}{\kappa} x^2, \quad (6.6.38)$$

$$\dot{x} = -\varepsilon x - \frac{ab}{\kappa} x^3. \quad (6.6.39)$$

Основная цель модели состоит в получении кубической формы в правой части (6.6.39).

Осуществляя переход к стохастической системе, мы обнаруживаем, что для этого существует несколько возможностей. Обычным условием применимости адиабатического исключения является

$$\varepsilon \ll \kappa. \quad (6.6.40)$$

В стохастическом случае в игру вступают и все остальные параметры, и условие (6.6.40) может быть реализовано по меньшей мере тремя различными способами, которые приведут к различным результатам.

Выпишем стохастический вариант уравнений (6.6.36, 37):

$$\begin{aligned} dx &= -(\varepsilon x + ax\alpha)dt + C dW_1(t) \\ d\alpha &= (-\kappa\alpha + bx^2)dt + D dW_2(t). \end{aligned} \quad (6.6.41)$$

Здесь для простоты мы считаем, что C и D константы, а $W_1(t)$ и $W_2(t)$ не зависят друг от друга.

Уравнение Фоккера — Планка имеет вид

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \left[\frac{\partial}{\partial x} (\varepsilon x + ax\alpha) + \frac{1}{2} C^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial}{\partial \alpha} (\kappa\alpha - bx^2) + \frac{1}{2} D^2 \frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} \right] p, \quad (6.6.42)$$

и мы хотим исключить α . Удобно ввести новую переменную

$$\beta = \alpha - \frac{b}{\kappa} x^2, \quad (6.6.43)$$

которая при фиксированном x имеет нулевое среднее значение. Уравнение Фоккера — Планка для этой переменной имеет вид

$$\frac{\partial p}{\partial t} = (L_1^0 + L_2^0 + L_3^0)p \quad (6.6.44)$$

$$\text{где} \quad L_1^0 = \frac{\partial}{\partial \beta} \kappa \beta + \frac{D^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial \beta^2} \quad (6.6.45)$$

$$\begin{aligned} L_2^0 &= \frac{\partial}{\partial \beta} a\beta x - \frac{2bx}{\kappa} \frac{\partial}{\partial \beta} \left(\varepsilon x + \frac{ab}{\kappa} x^3 + ax\beta \right) \\ &\quad - C^2 \left(\frac{bx}{\kappa} \frac{\partial^2}{\partial x \partial \beta} + \frac{\partial^2}{\partial x \partial \beta} \frac{bx}{\kappa} \right) + \frac{2b^2 x^2 C^2}{\kappa^2} \frac{\partial^2}{\partial \beta^2} \end{aligned} \quad (6.6.46)$$

$$L_3^0 = \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\epsilon x + \frac{ab}{\kappa} x^3 \right) + \frac{C^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right]. \quad (6.6.47)$$

В этих переменных предел $\epsilon \rightarrow 0$ не представляет интереса, поскольку мы получим ту же систему с $\epsilon = 0$. Исключение переменной оказывается невозможным, так как L_1 не умножается на большой параметр.

Для того чтобы в детерминистическом смысле предел $\epsilon \rightarrow 0$ означал, что (6.6.39) имеет силу как *предельная форма*, должно существовать A , такое, что

$$\frac{ab}{\kappa} = \epsilon A, \text{ когда } \epsilon \rightarrow 0. \quad (6.6.49)$$

Для того чтобы этот предел можно было распознать в детерминистическом смысле, он не должен быть «забит» шумом, и это приводит нас к условию

$$\frac{C^2}{2} = \epsilon B, \text{ когда } \epsilon \rightarrow 0, A \text{ не зависит от } \epsilon. \quad (6.6.48)$$

что означает

$$L_3^0 \rightarrow \epsilon \left[\frac{\partial}{\partial x} (x + Ax^3) + B \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right], \text{ когда } \epsilon \rightarrow 0. \quad (6.6.50)$$

Для L_2^0 , однако, существует две возможности. Чтобы L_1^0 не зависел от ϵ , κ не должно зависеть от ϵ , что вполне естественно. Таким образом, предел (6.6.48) должен достигаться за счет того, что произведение ab пропорционально ϵ . Рассмотрим различные возможные ситуации.

а) Тихое подчинение: a пропорционально ϵ

Допустим, что

$$a = \epsilon \tilde{a}. \quad (6.6.51)$$

Мы видим, что L_1^0 не зависит от ϵ , в то время как L_2^0 и L_3^0 пропорциональны ϵ . Если изменить масштаб времени

$$\tau = \epsilon t, \quad (6.6.52)$$

то

$$\frac{\partial p}{\partial \tau} = \left(\frac{1}{\epsilon} L_1 + L_2 + L_3 \right) p, \quad (6.6.53)$$

где

$$\begin{aligned} L_1 &= L_1^0 \\ L_2 &= L_2^0/\varepsilon \\ L_3 &= L_3^0/\varepsilon. \end{aligned} \tag{6.6.54}$$

Стандартная процедура исключения дает нам с точностью до низшего порядка

$$\frac{\partial \hat{p}}{\partial t} = L_3 \hat{p} = \left[\frac{\partial}{\partial x} (x + Ax^3) + B \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right] \hat{p}, \tag{6.6.55}$$

поскольку L_2 не уходит в бесконечность при $\varepsilon \rightarrow 0$.

Полученный результат в точности соответствует адиабатическому исключению α , когда мы игнорируем флуктуации величины α и просто подставляем детерминированное значение в уравнение для x . Я называю это «тихим подчинением», поскольку (в терминологии Хакена) α подчиняется x и не дает вклада в шум в уравнении для x . Это, по Хакену, обычная форма подчинения.

б) Шумное подчинение: a пропорционально $\varepsilon^{1/2}$

Допустим теперь, что как a , так и b пропорциональны $\varepsilon^{1/2}$:

$$\begin{aligned} a &= \tilde{a}\varepsilon^{1/2} \\ b &= \tilde{b}\varepsilon^{1/2}, \end{aligned} \tag{6.6.56}$$

где

$$\tilde{a}\tilde{b} = \kappa A. \tag{6.6.57}$$

L_1^0 остается постоянным, L_3^0 пропорционален ε , а

$$L_2^0 = \varepsilon^{1/2}L_2 + \text{члены высших порядков по } \varepsilon, \tag{6.6.58}$$

где

$$L_2 = \tilde{a}\beta \frac{\partial}{\partial x} x. \tag{6.6.59}$$

Таким образом, предельное уравнение имеет вид

$$\frac{\partial \hat{p}}{\partial \tau} = (L_3 - PL_2L_1^{-1}L_2)\hat{p}. \tag{6.6.60}$$

Член $PL_2L_1^{-1}L_2$ можно найти так же, как это сделано выше; получим

$$-PL_2L_1^{-1}L_2 = \bar{a}^2 \frac{D^2}{2\kappa^2} \frac{\partial}{\partial x} x \frac{\partial}{\partial x} x \quad (6.6.61)$$

и

$$\frac{\partial \hat{p}}{\partial \tau} = \left\{ \frac{\partial}{\partial x} \left[x \left[1 - \frac{\bar{a}^2 D^2}{2\kappa^2} \right] + Ax^3 \right] + \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left[B + \frac{\bar{a}^2 D^2 x^2}{2\kappa^2} \right] \right\} \hat{p}. \quad (6.6.62)$$

Я называю это «шумным подчинением», поскольку подчиняемая переменная обнаруживает свое присутствие в получаемом уравнении, увеличивая шум (и влияя на снос, хотя последнее заметно лишь в приводимой здесь форме Ито — в форме Стратоновича дополнительный снос не проявляется).

в) Общий случай

Коль скоро мы предполагаем, что $ab \sim \varepsilon$, второй и третий члены в (6.6.46) всегда пропорциональны ε^p , где $p > 1$, и поэтому ими можно пренебречь (если b ограничена). Таким образом, существенным в L_2^0 является лишь первый член. В таком случае если

$$a = \varepsilon^r \bar{a},$$

то существуют следующие возможности:

$$r > 1/2: \text{ «тихое подчинение», предельное уравнение} \quad (6.6.55);$$

$$r = 1/2: \text{ «шумное подчинение», предельное уравнение} \quad (6.6.62);$$

$r < 1/2$: член $PL_2L_1^{-1}L_2$ пропорционален $\varepsilon^{2r-1} \rightarrow \infty$ и становится основным.

При $r < 1/2$ уравнение принимает асимптотический вид

$$\frac{\partial \hat{p}}{\partial \tau} = \varepsilon^{2r-1} \bar{a}^2 \frac{D^2}{2\kappa^2} \left(\frac{\partial}{\partial x} x \frac{\partial}{\partial x} x \right) \hat{p}. \quad (6.6.63)$$

Все эти ситуации можно, впрочем, описать одной общей формулой

$$\frac{\partial \hat{p}}{\partial \tau} = \left[\frac{\partial}{\partial x} (x + Ax^3) + \frac{\partial^2}{\partial x^2} B + \varepsilon^{2r-1} \bar{a}^2 \frac{D^2}{2\kappa^2} \frac{\partial}{\partial x} x \frac{\partial}{\partial x} x \right] \hat{p}. \quad (6.6.64)$$

Применяя методы адиабатического исключения, следует обращать особое внимание на то, чтобы были учтены верные зависимости всех констант системы от малых параметров.

6.6.3 АДИАБАТИЧЕСКОЕ ИСКЛЮЧЕНИЕ БЫСТРЫХ ПЕРЕМЕННЫХ: НЕЛИНЕЙНЫЙ СЛУЧАЙ

Рассмотрим теперь общий случай двух переменных x и α , которые взаимно влияют друг на друга, но временной масштаб для α гораздо меньше, чем для x .

Пусть система описывается парой стохастических дифференциальных уравнений

$$dx = [a(x) + b(x)\alpha]dt + c(x)dW_1(t), \quad (6.6.65)$$

$$d\alpha = \gamma^2[A(\alpha) - f(x)]dt + \gamma\sqrt{2B(\alpha)}dW_2(t). \quad (6.6.66)$$

Если мы будем слепо следовать схеме, изложенной в разд. 6.4, то сразу же попадем в затруднительное положение. Действительно, в этом пределе следовало бы принять

$$A(\alpha) - f(x) = -\sqrt{\frac{2B(\alpha)}{\gamma^2}} \frac{dW_2(t)}{dt} \quad (6.6.67)$$

на том основании, что для больших γ (6.6.66) всегда таково, что $\gamma^{-2}d\alpha/dt = 0$. Но тогда, разрешая (6.6.67) для α через x , мы получим некоторую сложную нелинейную функцию от x и $dW_2(t)/dt$, разобраться с которой невозможно. Если, однако, $B(\alpha)$ равно нулю, то мы можем определить $u_0(x)$ через

$$A[u_0(x)] = f(x) \quad (6.6.68)$$

и, подставив это в (6.6.65), получить

$$dx = [a(x) + b(x)u_0(x)]dt + c(x)dW_1(t). \quad (6.6.69)$$

Но на базе наших прежних рассуждений мы разработаем несколько более совершенную процедуру, которая позволит учесть влияние флуктуаций в (6.6.66).

Уравнение Фоккера — Планка, эквивалентное (6.6.65, 66), имеет вид

$$\frac{\partial p}{\partial t} = (\gamma^2 L_1 + L_2 + L_3)p, \quad (6.6.70)$$

где

$$L_1 = \frac{\partial}{\partial \alpha} [f(x) - A(\alpha)] + \frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} B(\alpha), \quad (6.6.71)$$

а L_2 и L_3 выбираются так, чтобы удовлетворялось условие $PL_2P = 0$.

Во-первых, как обычно, P определяется как проектор в нуль-пространство L_1 . Стационарное решение $p_x(\alpha)$, т. е. решение уравнения

$$L_1 p_x(\alpha) = 0 \quad (6.6.72)$$

мы записываем так, чтобы оно явно зависело от x , поскольку явная зависимость от x входит в L_1 через функцию $f(x)$. Проектор P определяется как

$$(PF)(x, \alpha) = p_x(\alpha) \int d\alpha' F(x, \alpha') \quad (6.6.73)$$

для всякой функции $F(x, \alpha)$.

Определим теперь функцию $u(x)$ через

$$u(x) = \int d\alpha \alpha p_x(\alpha) \equiv \langle \alpha \rangle_x, \quad (6.6.74)$$

а затем

$$L_2 = - \frac{\partial}{\partial x} \left\{ b(x) [\alpha - u(x)] \right\} \quad (6.6.75)$$

$$L_3 = - \frac{\partial}{\partial x} [a(x) + b(x)u(x)] + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} [c(x)]^2, \quad (6.6.76)$$

так что член $\{\partial/\partial x\} b(x)u(x)$ при сложении уничтожается. Таким образом, уравнение (6.6.70) является корректным УФП, соответствующим СДУ (6.6.65, 66).

Имеем теперь

$$PL_2PF = - p_x(\alpha) \int d\alpha' \frac{\partial}{\partial x} \{ b(x) [\alpha' - u(x)] \} p_x(\alpha') \int d\alpha'' F(x, \alpha'') \quad (6.6.77)$$

$$= 0$$

$$\int \alpha p_x(\alpha) d\alpha = u(x),$$

поскольку $\int \alpha p_x(\alpha) d\alpha = u(x)$.

Разумеется, справедливо

$$PL_1 = L_1P = 0, \quad (6.6.78)$$

но

$$PL_3 \neq L_3P. \quad (6.6.79)$$

Теперь мы можем перейти к обычной процедуре. Записывая, как обычно,

$$P \bar{p}(s) = \bar{v}(s) \quad (6.6.80)$$

$$(1 - P) \bar{p}(s) = \bar{w}(s)$$

и считая $w(0) = 0$, находим

$$s \tilde{v}(s) = P(L_2 + L_3)\tilde{w}(s) + PL_3\tilde{v}(s) + v(0)$$

$$s \tilde{w}(s) = [\gamma^2 L_1 + (1 - P)L_2 + (1 - P)L_3]\tilde{w}(s) + L_2\tilde{v}(s) + (1 - P)L_3\tilde{v}(s), \quad (6.6.81)$$

откуда

$$s \tilde{v}(s) = PL_3\tilde{v}(s) + P(L_2 + L_3)[s - \gamma^2 L_1 - (1 - P)L_2 - (1 - P)L_3]^{-1} \times [L_2 + (1 - P)L_3]\tilde{v}(s) + v(0). \quad (6.6.82)$$

С точностью до второго порядка включительно мы имеем просто

$$s \tilde{v}(s) \simeq \{(PL_3 - \gamma^{-2}P(L_2 + L_3)L_1^{-1}[L_2 + (1 - P)L_3]\} \tilde{v}(s) + v(0). \quad (6.6.83)$$

Наиболее важен член $PL_3\tilde{v}(s)$; он определяет результат адиабатического исключения в детерминистическом случае. Записывая

$$v(t) = p_x(\alpha)\hat{p}(x),$$

находим

$$PL_3v(t) = p_x(\alpha) \int d\alpha' \left\{ -\frac{\partial}{\partial x} [a(x) + b(x)u(x)] + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} [c(x)^2] \right\} p_x(\alpha)\hat{p}(x), \quad (6.6.84)$$

а поскольку

$$\int d\alpha p_x(\alpha) = 1, \text{ то}$$

$$PL_3v(t) = p_x(\alpha) \left\{ -\frac{\partial}{\partial x} [a(x) + b(x)u(x)] + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} [c(x)^2] \right\} \hat{p}(x). \quad (6.6.85)$$

Таким образом, с точностью до низшего порядка дифференциальное уравнение имеет вид

$$\frac{\partial \hat{p}(x)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} [a(x) + b(x)u(x)] \hat{p}(x) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} c(x)^2 \hat{p}(x) \quad (6.6.86)$$

и эквивалентно стохастическому дифференциальному уравнению

$$dx = [a(x) + b(x)u(x)]dt + c(x)dW(t). \quad (6.6.87)$$

В этом порядке уравнение движения не содержит флуктуационного члена, который происходил бы из уравнения для α . Тем не менее результат полного пренебрежения флуктуациями дается уравнением (6.6.69), которое очень похоже на (6.6.87), но содержит $u_0(x)$ вместо $u(x)$. Можно было бы предположить, что среднее значение α в стационарном состоянии будет соответствовать $u_0(x)$, но это не так: в дей-

ствительности они имеют близкие значения лишь в случае, когда шумовой член $B(\alpha)$ мал.

Поправки второго порядка

Уравнение (6.6.83) можно оценить до порядка γ^{-2} . На первый взгляд наличие вторых производных в L_3 указывает на то, что должны появиться производные четвертого порядка, поскольку L_3 встречается дважды. Мы продемонстрируем, однако, что члены четвертого порядка исчезают.

Рассмотрим выражение

$$P(L_2 + L_3)L_1^{-1}[L_2 + (1 - P)L_3]\bar{v}(s). \quad (6.6.88)$$

Как известно,

$$\begin{aligned} 1) \quad P\bar{v}(s) &= \bar{v}(s) \\ 2) \quad (1 - P)L_2P\bar{v}(s) &= L_2P\bar{v}(s) \end{aligned} \quad (6.6.89)$$

(мы пользуемся тем, что $PL_2P = 0$).

С учетом этого (6.6.88) принимает вид

$$\begin{aligned} P(L_2 + L_3)L_1^{-1}(1 - P)(L_2 + L_3)P\bar{v}(s) &= P\{PL_2 + [P, L_3] + L_3P\} \\ &\times (1 - P)L_1^{-1}(1 - P)\{L_2P + [L_3, P] + PL_3\}\bar{v}(s), \end{aligned} \quad (6.6.90)$$

где коммутатор $[A, B]$ по определению равен

$$[A, B] = AB - BA. \quad (6.6.91)$$

Мы учли, что L_1^{-1} коммутирует с $(1 - P)$, и воспользовались тем, что $(1 - P)^2 = (1 - P)$, для того чтобы в (6.6.90) поставить еще раз $(1 - P)$ перед L_1^{-1} . Мы также поставили P перед всем выражением, поскольку $P^2 = P$. С использованием равенства

$$P(1 - P) = (1 - P)P = 0$$

выражение (6.6.90) принимает вид

$$P\{PL_2 + [P, L_3]\}L_1^{-1}(1 - P)\{L_2 + [L_3, P]\}\bar{v}(s). \quad (6.6.92)$$

Вычислим теперь $[P, L_3]$:

$$\begin{aligned} (PL_3f)(x, \alpha) &= p_x(\alpha) \left\{ -\frac{\partial}{\partial x} [a(x) + b(x)u(x)] \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} [c(x)]^2 \right\} \int f(x, \alpha') d\alpha' \end{aligned} \quad (6.6.93)$$

и

$$(L_3 P)f(x, \alpha) = \left\{ -\frac{\partial}{\partial x} [a(x) + b(x)u(x)] + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} [a(x)]^2 \right\} p_x(\alpha) \int d\alpha' f(x, \alpha'). \quad (6.6.94)$$

Вычтя эти выражения и определив

$$r_x(\alpha) = \frac{\partial p_x(\alpha)}{\partial x} / p_x(\alpha) \quad (6.6.95)$$

$$s_x(\alpha) = \frac{\partial^2 p_x(\alpha)}{\partial x^2} / p_x(\alpha), \quad (6.6.96)$$

находим

$$([P, L_3]f)(x, \alpha) = r_x(\alpha)[a(x) + b(x)u(x)]Pf(x, \alpha) - \frac{1}{2}s_x(\alpha)c(x)^2Pf(x, \alpha) - r_x(\alpha)P \frac{\partial}{\partial x} [c(x)^2f(x, \alpha)]. \quad (6.6.97)$$

Последний член здесь можно еще упростить, поскольку нас интересует лишь случай, когда $f(x, \alpha)$ это v , т. е.

$$f(x, \alpha) = p_x(\alpha)\hat{p}(x). \quad (6.6.98)$$

Тогда

$$P \frac{\partial}{\partial x} c(x)^2 p_x(\alpha) \hat{p}(x) \quad (6.6.99)$$

$$= p_x(\alpha) \frac{\partial}{\partial x} c(x)^2 \int d\alpha' p_x(\alpha') \hat{p}(x) \quad (6.6.100)$$

$$= p_x(\alpha) \frac{\partial}{\partial x} c(x)^2 \hat{p}(x). \quad (6.6.101)$$

Далее, можно показать, что

$$P[P, L_3] = 0. \quad (6.6.102)$$

Действительно, поскольку

$$\int d\alpha p_x(\alpha) = 1, \quad (6.6.103)$$

имеем

$$\int d\alpha r_x(\alpha) p_x(\alpha) = \int d\alpha s_x(\alpha) p_x(\alpha) = 0, \quad (6.6.104)$$

что доказывает справедливость (6.6.102). Таким образом, мы можем записать (6.6.92) в виде

$$PL_2L_1^{-1}\{L_2 + [L_3, P]\} \bar{v}(s), \quad (6.6.105)$$

где

$$[L_3, P]\bar{v}(s) = -p_x(\alpha)\{r_x(\alpha)[a(x) + b(x)u(x)] - \frac{1}{2}s_x(\alpha)c(x)^2\}\bar{p}(x) + p_x(\alpha)r_x(\alpha)\frac{\partial}{\partial x}[c(x)^2\bar{p}(x)]. \quad (6.6.106)$$

6.6.4. ПРИМЕР С ПРОИЗВОЛЬНОЙ НЕЛИНЕЙНОЙ СВЯЗЬЮ

Рассмотрим пару уравнений

$$dx = \gamma b(x)\alpha dt \quad (6.6.107)$$

$$d\alpha = -\gamma^2 A(x, \alpha, \gamma)dt + \gamma\sqrt{2B(x, \alpha, \gamma)} dW(t)$$

и предположим существование следующих пределов и асимптотических разложений:

$$A(x, \alpha, \gamma) \sim \sum_{n=0}^{\infty} A_n(x, \alpha)\gamma^{-n} \quad (6.6.108)$$

$$B(x, \alpha, \gamma) \sim \sum_{n=0}^{\infty} B_n(x, \alpha)\gamma^{-n}.$$

Из существования указанных разложений следует, что существует асимптотическое стационарное распределение α при фиксированном x , которое дается выражением

$$p_s(\alpha, x) = \lim_{\gamma \rightarrow \infty} p_s(\alpha, x, \gamma) \quad (6.6.109)$$

$$p_s(\alpha, x) \propto B_0(x, \alpha)^{-1} \exp \left\{ \int d\alpha [A_0(x, \alpha)/B_0(x, \alpha)] \right\}. \quad (6.6.110)$$

Пусть $A_0(x, \alpha)$ и $B_0(x, \alpha)$ таковы, что

$$\langle \alpha(x) \rangle_s = \int d\alpha \alpha p_s(\alpha, x) = 0, \quad (6.6.111)$$

так что из (6.6.108) следует, что для фиксированного γ

$$\langle \alpha(x, \gamma) \rangle_s = \int d\alpha \alpha p_s(\alpha, x, \gamma) \sim \alpha_0(x)\gamma^{-1}, \quad (6.6.112)$$

где $\alpha_0(x)$ может быть найдена из (6.6.108).

Введем новые переменные

$$\beta = \alpha - \frac{1}{\gamma} \alpha_0(x) \quad (6.6.113)$$

$$x_1 = x,$$

в которых оператор Фоккера — Планка (считая, как обычно, якобиан постоянным) записывается, после перехода от x_1 обратно к x , в виде

$$\begin{aligned} L = & -\frac{\partial}{\partial x} \alpha_0(x)b(x) \\ & - \gamma\beta \frac{\partial}{\partial x} b(x) + \frac{1}{\gamma} \alpha_0'(x)\alpha_0(x)b(x) \frac{\partial}{\partial \beta} + \frac{\partial}{\partial \beta} \beta \alpha_0'(x)b(x) \\ & + \gamma^2 \left[\frac{\partial}{\partial \beta} A \left(\frac{\alpha_0(x)}{\gamma} + \beta, x, \gamma \right) + \frac{\partial^2}{\partial \beta^2} B \left(\frac{\alpha_0(x)}{\gamma} + \beta, x, \gamma \right) \right]. \end{aligned} \quad (6.6.114)$$

С использованием асимптотических разложений (6.6.108) это можно записать в виде

$$L = L_3 + \gamma L_2(\gamma) + \gamma^2 L_1, \quad (6.6.115)$$

где

$$L_3 = -\frac{\partial}{\partial x} \alpha_0(x)b(x) \quad (6.6.116)$$

$$L_1 = \frac{\partial}{\partial \beta} A_0(\beta, x) + \frac{\partial^2}{\partial \beta^2} B_0(\beta, x) \quad (6.6.117)$$

$$L_2(\gamma) = L_2 + O(\gamma^{-1}) \quad (6.6.118)$$

$$\begin{aligned} L_2 = & -\beta \frac{\partial}{\partial x} b(x) - \frac{\partial}{\partial \beta} \left[\frac{\partial A_0(\beta, x)}{\partial \beta} \alpha_0(x) + A_1(\beta, x) \right] \\ & - \frac{\partial^2}{\partial \beta^2} \left[\frac{\partial B_0(\beta, x)}{\partial \beta} \alpha_0(x) + B_1(\beta, x) \right]. \end{aligned} \quad (6.6.119)$$

Заметим, что L_3 и L_1 не коммутируют, но как и в разд. 6.5.4, это не влияет на предельный результат:

$$\frac{\partial \hat{p}}{\partial t} = (L_3 - PL_2L_1^{-1}L_2)\hat{p}. \quad (6.6.120)$$

Вычисление члена $PL_2L_1^{-1}L_2$ несложно, но громоздко. Заметим, что после применения к ним оператора P члены, содержащие $\partial/\partial\beta$, ис-

чезают. Используя явный вид $p_s(\alpha, x)$, можно определить $G(\beta, x)$ как

$$\frac{\partial}{\partial \beta} \left\{ \left[\frac{\partial A_0(\beta, x)}{\alpha \beta} \alpha_0(x) + A_1(\beta, x) \right] p_s(\beta, x) \right\} + \left\{ \frac{\partial^2}{\partial \beta^2} \left[\frac{\partial B_0(\beta, x)}{\partial \beta} \alpha_0(x) + B_1(\beta, x) \right] \right\} p_s(\beta, x) = G(\beta, x) p_s(\beta, x), \quad (6.6.121)$$

и тогда мы получим

$$PL_2L_1^{-1}L_2\hat{p} = \left[\frac{\partial}{\partial x} b(x)D(x) \frac{\partial}{\partial x} b(x) + \frac{\partial}{\partial x} b(x)E(x) \right] \hat{p}, \quad (6.6.122)$$

где

$$D(x) = \int_0^{\infty} dt \langle \beta(t), \beta(0) | x \rangle \quad (6.6.123)$$

$$E(x) = \int_0^{\infty} dt \langle \beta(t), G(\beta, x) | x \rangle$$

(здесь $\langle \dots | x \rangle$ обозначает среднее по $p_s(\beta, x)$). Полученные результаты являются довольно сильным результатом адиабатического исключения, причем можно произвести произвольное нелинейное исключение и получить конечный шум. Вычисления оказываются более простыми, чем в предыдущем разделе, поскольку члены, включающие L_3 , имеют более низкий порядок, чем члены, включающие L_2 .

Управляющие уравнения и скачкообразные процессы

Часто случается, что поведение системы, содержащей частицы или индивидуальные объекты (животные, бактерии и т. п.), весьма правдоподобно описывается с помощью скачкообразного процесса. В таких случаях мы обнаруживаем, как уже упоминалось в разд. 1.1, что в соответствующем пределе возникают *макроскопические детерминистические* законы движения, а случайный характер процесса обуславливает флуктуирующую добавку. Однако и детерминированное движение, и флуктуации возникают как следствие из одного и того же описания посредством отдельных скачков или переходов. В этом отношении описание с помощью скачкообразного процесса (и соответствующего управляющего уравнения) оказывается очень успешным.

С другой стороны, мы можем построить приближенную модель подобной системы на базе стохастических дифференциальных уравнений, в которых детерминированное движение и флуктуации имеют полностью независимое происхождение. В такой модели независимое описание флуктуаций и детерминированного движения создает осложнения, и для получения некоторой информации о флуктуациях необходимо привлечение флуктуационно-диссипационной теоремы. С этой точки зрения использование управляющего уравнения позволяет дать гораздо более полное описание.

Тем не менее существование макроскопических детерминистических законов является очень важным результатом, и в этой главе мы покажем, что часто существует предел, в котором решение управляющего уравнения может асимптотически аппроксимироваться (в терминах большого параметра Ω , отвечающего размеру системы) детерминированной частью (которая представляет собой решение детерминистического дифференциального уравнения), на которую накладывается флуктуационная часть, описываемая стохастическим дифференциальным уравнением, коэффициенты которого получаются из исходного управляющего уравнения. О подобных асимптотических разложениях уже упоминалось в разд. 3.8.3, где мы имели дело с простейшим скачкообразным процессом — процессом Пуассона, а в деталях разберем этот вопрос в разд. 7.2.

В результате мы придем к довольно простым правилам, для написания уравнений Фоккера — Планка, эквивалентных (в асимптотическом приближении) управляющим уравнениям. Более того, на практике нередко бывает очень просто записать требуемое приближенное уравнение Фоккера — Планка, даже не формулируя само управляющее уравнение. Существует несколько равноправных способов формулировки уравнения Фоккера — Планка в первом приближении, однако пока что найден лишь один надежный путь, ведущий к разложению по степеням Ω^{-1} — разложение ван Кампена по обратному размеру системы.

Глава завершается изложением *представления Пуассона*. Этот метод, разработанный автором с сотрудниками, позволяет построить для некоторого класса управляющих уравнений уравнение Фоккера — Планка, *в точности* эквивалентное управляющему уравнению. В этом частном случае разложение по обратному размеру системы возникает как разложение по малому шуму для уравнения Фоккера — Планка в представлении Пуассона.

7.1. УПРАВЛЯЮЩИЕ УРАВНЕНИЯ РОЖДЕНИЯ — ГИБЕЛИ: ОДНОМЕРНЫЙ СЛУЧАЙ

Одномерный прототип всех систем типа рождения — гибели представляет собой систему особей вида X , количество которых x может принимать неотрицательные целочисленные значения. Нам приходится рассматривать условную вероятность $P(x, t | x', t')$ и соответствующее управляющее уравнение. Обычно принимается, что *в ходе одного события может возникнуть (рождаться) или исчезать (погибать) лишь конечное число особей*. В простейшем случае рождения и гибели особей X являются единичными событиями с зависящей от времени вероятностью, так что вероятность перехода может быть записана в виде

$$W(x | x', t) = t^+(x')\delta_{x, x'+1} + t^-(x')\delta_{x, x'-1}. \quad (7.1.1)$$

Таким образом, имеют место два процесса:

$$x \rightarrow x + 1: t^+(x) = \text{вероятность перехода в единицу времени}, \quad (7.1.2)$$

$$x \rightarrow x - 1: t^-(x) = \text{вероятность перехода в единицу времени}. \quad (7.1.3)$$

Общее управляющее уравнение (3.5.5) тогда принимает вид

$$\begin{aligned} \partial_t P(x, t | x', t') &= t^+(x-1)P(x-1, t | x', t') + t^-(x+1)P(x+1, t | x', t') \\ &\quad - [t^+(x) + t^-(x)]P(x, t | x', t'). \end{aligned} \quad (7.1.4)$$

Единогo способа решения этого уравнения не существует, за исключением случая, когда отсутствует зависимость от времени.

7.1.1. СТАЦИОНАРНЫЕ РЕШЕНИЯ

Уравнения для стационарного решения $P_s(x)$ можно записать в виде

$$0 = J(x + 1) - J(x), \quad (7.1.5)$$

где

$$J(x) = t^-(x)P_s(x) - t^+(x - 1)P_s(x - 1). \quad (7.1.6)$$

Воспользуемся тем, что x -неотрицательное целое число; у нас не может быть отрицательного числа особей и поэтому

$$1) t^-(0) = 0 \text{ (если число особей равно нулю,} \\ \text{то вероятность гибели равна нулю)} \quad (7.1.7)$$

$$2) P(x, t | x', t') = 0 \text{ для } x < 0 \text{ или } x' < 0. \quad (7.1.8)$$

Это означает, что

$$J(0) = t^-(0)P_s(0) - t^+(-1)P_s(-1) = 0. \quad (7.1.9)$$

Просуммируем (7.1.5) и получим

$$0 = \sum_{z=0}^{x-1} [J(z + 1) - J(z)] = J(x) - J(0). \quad (7.1.10)$$

Следовательно,

$$J(x) = 0, \quad (7.1.11)$$

и тогда

$$P_s(x) = \frac{t^+(x - 1)}{t^-(x)} P_s(x - 1), \quad (7.1.12)$$

откуда

$$P_s(x) = P_s(0) \prod_{z=1}^x \frac{t^+(z - 1)}{t^-(z)}. \quad (7.1.13)$$

а) Интерпретация в терминах детального баланса

Условие $J(x) = 0$ можно рассматривать как *требование детального баланса*, причем x — четная переменная. Действительно, это условие является вариантом (5.3.74), которое здесь принимает вид

$$P(x, \tau | x', 0)P_s(x') = P(x', \tau | x, 0)P_s(x). \quad (7.1.14)$$

Подставляя $x' = x \pm 1$ и переходя к пределу $\tau \rightarrow 0$, а также заметив, что в силу определения (3.4.1)

$$W(x|x', t) = \lim_{\tau \rightarrow 0} P(x, t + \tau | x', t) / \tau, \quad (7.1.15)$$

легко доказываем необходимость указанного условия $J(x) = 0$.

б) Уравнения для скорости изменения средних

Заметим, что среднее значение x удовлетворяет равенству

$$\partial_t \langle x(t) \rangle = \partial_t \sum_{x=0}^{\infty} x P(x, t | x', t') \quad (7.1.16)$$

$$\begin{aligned} &= \sum_{x=0}^{\infty} x [t^+(x-1)P(x-1, t | x', t') - t^+(x)P(x, t | x', t')] \\ &\quad + \sum_{x=0}^{\infty} x [t^-(x+1)P(x+1, t | x', t') - t^-(x)P(x+1, t | x', t')] \quad (7.1.17) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &= \sum_{x=0}^{\infty} [(x+1)t^+(x) - xt^+(x) + (x-1)t^-(x) \\ &\quad - xt^-(x)] P(x, t | x', t'), \quad (7.1.18) \end{aligned}$$

т. е.

$$\boxed{\frac{d}{dt} \langle x(t) \rangle = \langle t^+[x(t)] \rangle - \langle t^-[x(t)] \rangle.} \quad (7.1.19)$$

Соответствующим детерминистическим уравнением будет уравнение, полученное в пренебрежении флуктуациями:

$$\frac{dx}{dt} = t^+(x) - t^-(x). \quad (7.1.20)$$

Заметим, что в детерминистическом случае стационарное состояние возникает, когда

$$t^+(x) = t^-(x). \quad (7.1.21)$$

В соответствии с этим обратим внимание, что максимальное значение $P_s(x)$ достигается, когда

$$P_s(x)/P_s(x-1) \simeq 1, \quad (7.1.22)$$

что с учетом (7.1.12) отвечает случаю

$$t^+(x-1) = t^-(x). \quad (7.1.23)$$

Поскольку переменная x принимает только целочисленные значения, для достаточно больших x выражения (7.1.21) и (7.1.23) практически тождественны.

Таким образом, *модальное значение* x (при котором вероятность максимальна), соответствующее равенству (7.1.23), является стационарным стохастическим аналогом детерминированного стационарного состояния, которое соответствует (7.1.21).

7.1.2. ПРИМЕР: ХИМИЧЕСКАЯ РЕАКЦИЯ $X = A$

Рассмотрим реакцию $X \xrightleftharpoons[k_2]{k_1} A$, предполагая концентрацию вещества A постоянной. Иначе говоря, мы считаем, что

$$t^+(x) = k_2 a \quad (7.1.24)$$

$$t^-(x) = k_1 x, \quad (7.1.25)$$

так что управляющее уравнение принимает простой вид

$$\partial_t P(x, t) = k_2 a P(x-1, t) + k_1 (x+1) P(x+1, t) - (k_1 x + k_2 a) P(x, t), \quad (7.1.26)$$

где для краткости мы пишем $P(x, t)$ вместо $P(x, t | x', t')$.

а) Производящая функция

Для решения этого уравнения введем производящую функцию (ср. разд. 1.4.1, 3.8.2)

$$G(s, t) = \sum_{x=0}^{\infty} s^x P(x, t), \quad (7.1.27)$$

так что

$$\partial_t G(s, t) = k_2 a (s-1) G(s, t) - k_1 (s-1) \partial_s G(s, t). \quad (7.1.28)$$

Если подставить

$$\phi(s, t) = G(s, t) \exp(-k_2 a s / k_1), \quad (7.1.29)$$

выражение (7.1.28) принимает вид

$$\partial_t \phi(s, t) = -k_1 (s-1) \partial_s \phi(s, t). \quad (7.1.30)$$

Дальнейшая подстановка $s-1 = e^z$,

$$\phi(s, t) = \psi(z, t)$$

дает уравнение

$$\partial_t \psi(z, t) + k_1 \partial_z \psi(z, t) = 0, \quad (7.1.31)$$

решением которого является произвольная функция от $k_1 t - z$. Запишем это в виде

$$\begin{aligned} \psi(z, t) &= F[\exp(-k_1 t + z)] e^{-k_2 a / k_1} \\ &= F[(s-1)e^{-k_1 t}] e^{-k_2 a / k_1} \end{aligned}$$

и тогда получим

$$G(s, t) = F[(s-1)e^{-k_1 t}] \exp[(s-1)k_2 a / k_1]. \quad (7.1.32)$$

В силу нормировки $G(1, t) = 1$, и поэтому

$$F(0) = 1. \quad (7.1.33)$$

б) Условная вероятность

Начальное условие определяет F ; принимая $t' = 0$, имеем

$$P(x, 0 | N, 0) = \delta_{x, N}. \quad (7.1.34)$$

Это означает, что

$$G(s, 0) = s^N = F(s-1) \exp[(s-1)k_2 a / k_1], \quad (7.1.35)$$

так что

$$G(s, t) = \exp\left[\frac{k_2 a}{k_1} (s-1)(1 - e^{-k_1 t})\right] [1 + (s-1)e^{-k_1 t}]^N. \quad (7.1.36)$$

Разложив полученное выражение в ряд по степеням s , получим

$$\begin{aligned} P(x, t | N, 0) &= \exp\left[-\frac{k_2 a}{k_1} (1 - e^{-k_1 t})\right] \sum_{r=0}^x \frac{N!}{(N-r)! r! (x-r)!} \left(\frac{k_2 a}{k_1}\right)^{x-r} \\ &\times (1 - e^{-k_1 t})^{N+x-2r} e^{-k_1 t r}. \end{aligned} \quad (7.1.37)$$

Этот очень сложный ответ дает полное решение задачи, но его практическая полезность невелика. За основу для вычислений удобнее брать производящую функцию (7.1.36) или уравнения для средних значений.

Используя производящую функцию, мы можем вычислить

$$\langle x(t) \rangle = \partial_s G(s=1, t) = \frac{k_2 a}{k_1} (1 - e^{-k_1 t}) + N e^{-k_1 t} \quad (7.1.38)$$

$$\langle x(t)[x(t) - 1] \rangle = \partial_s^2 G(s=1, t) = \langle x(t) \rangle^2 - N e^{-2k_1 t} \quad (7.1.39)$$

$$D \{x(t)\} = \left(N e^{-k_1 t} + \frac{k_2 a}{k_1} \right) (1 - e^{-k_1 t}). \quad (7.1.40)$$

в) Уравнения для моментов

Из дифференциального уравнения (7.1.28) получаем

$$\partial_t [\partial_s^n G(s, t)] = \{n[k_2 a \partial_s^{n-1} - k_1 \partial_s^n] + (s-1)[k_2 a \partial_s^n - k_1 \partial_s^{n+1}]\} G(s, t). \quad (7.1.41)$$

Подставляя $s = 1$ и используя равенство

$$\partial_s^n G(s, t)|_{s=1} = \langle x(t)^n \rangle_f, \quad (7.1.42)$$

находим

$$\frac{d}{dt} \langle x(t)^n \rangle_f = n[k_2 a \langle x(t)^{n-1} \rangle_f - k_1 \langle x(t)^n \rangle_f]. \quad (7.1.43)$$

Эти уравнения образуют замкнутую иерархию. Естественно, решения для среднего значения и дисперсии соответствуют равенствам (7.1.38, 40).

г) Автокорреляционная функция и стационарное распределение

Когда $t \rightarrow \infty$ для любой функции F , мы находим из (7.1.32, 33)

$$G(s, t \rightarrow \infty) = \exp[(s-1)k_2 a/k_1], \quad (7.1.44)$$

что соответствует *распределению Пуассона*

$$P_s(x) = \exp(-k_2 a/k_1) (k_2 a/k_1)^x / x!. \quad (7.1.45)$$

Поскольку уравнение, описывающее эволюцию $\langle x(t) \rangle$ во времени, линейно, мы можем применить методы раздела 3.7.4, а именно теорему регрессии, которая устанавливает, что стационарная автокорреляционная функция зависит от времени так же, как среднее значение, а ее значение при $t = 0$ равно стационарной дисперсии. Отсюда

$$\langle x(t) \rangle_s = k_2 a/k_1 \quad (7.1.46)$$

$$D \{x(t)\}_s = k_2 a/k_1 \quad (7.1.47)$$

$$\langle x(t), x(0) \rangle_s = e^{-k_1 t} k_2 a/k_1. \quad (7.1.48)$$

Стационарное решение в виде распределения Пуассона также следует из (7.1.13) путем прямой подстановки.

д) Решения в виде распределения Пуассона, зависящего от времени

Очень интересным свойством этого уравнения является существование решений, представляющих собой *распределения Пуассона, зависящие от времени*. Действительно, если взять

$$P(x, 0) = \frac{e^{-\alpha_0} \alpha_0^x}{x!}, \quad (7.1.49)$$

то

$$G(s, 0) = \exp[(s - 1)\alpha_0], \quad (7.1.50)$$

и из (7.1.32) находим

$$G(s, t) = \exp[(s - 1)(\alpha_0 e^{-k_1 t} + k_2 a/k_1)], \quad (7.1.51)$$

чему соответствует

$$P(x, t) = \frac{e^{-\alpha(t)} \alpha(t)^x}{x!}, \quad (7.1.52)$$

где

$$\alpha(t) = \alpha_0 e^{-k_1 t} + k_2 a/k_1. \quad (7.1.53)$$

Мы видим, что $\alpha(t)$ здесь является решением детерминистического уравнения

$$\frac{dx}{dt} = k_2 a - k_1 x \quad (7.1.54)$$

с начальным условием $x(0) = \alpha_0$. (7.1.55)

Этот результат может быть обобщен на случай многих переменных и составляет основу *представления Пуассона*, которое будет развито в разд. 7.7. Существование решений в виде распространяющегося распределения Пуассона является следствием линейности системы.

7.1.3. ХИМИЧЕСКАЯ БИСТАБИЛЬНАЯ СИСТЕМА

Рассмотрим систему



которая изучалась многими авторами [7.1]. Концентрация вещества A поддерживается постоянной, так что

$$\begin{aligned} t^+(x) &= k_1 Ax(x-1) + k_3 A \\ t^-(x) &= k_2 x(x-1)(x-2) + k_4 x. \end{aligned} \quad (7.1.58)$$

Соответствующим детерминистическим уравнением является, разумеется,

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= t^+(x) - t^-(x) \\ &\simeq -k_2 x^3 + k_1 Ax^2 - k_4 x + k_3 A, \end{aligned} \quad (7.1.59)$$

где мы считаем x достаточно большим, чтобы иметь право записать $x(x-1)(x-2) \simeq x^3$ и т. п. Решение этого уравнения с начальным условием $x(0) = x_0$ имеет вид

$$\begin{aligned} &\left(\frac{x-x_1}{x_0-x_1}\right)^{x_3-x_2} \left(\frac{x-x_2}{x_0-x_2}\right)^{x_1-x_3} \left(\frac{x-x_3}{x_0-x_3}\right)^{x_2-x_1} \\ &= \exp[-k_2(x_1-x_2)(x_2-x_3)(x_3-x_1)t]. \end{aligned} \quad (7.1.60)$$

Здесь x_1, x_2, x_3 являются корнями

$$k_2 x^3 - k_1 Ax^2 + k_4 x - k_3 A = 0, \quad (7.1.61)$$

причем $x_3 \geq x_2 \geq x_1$.

Очевидно, что эти корни являются стационарными значениями решений $x(t)$ уравнения (7.1.59). Из (7.1.59) мы видим, что

$$\begin{aligned} x < x_1 &\implies \frac{dx}{dt} > 0 \\ x_2 > x > x_1 &\implies \frac{dx}{dt} < 0 \\ x_3 > x > x_2 &\implies \frac{dx}{dt} > 0 \\ x > x_3 &\implies \frac{dx}{dt} < 0. \end{aligned} \quad (7.1.62)$$

Таким образом, в области $x < x_2$ решение $x(t)$ будет притягиваться к x_1 , а в области $x > x_2 - k x_3$. Решение $x(t) = x_2$ будет неустойчиво к малым возмущениям. Таким образом, мы имеем дело с системой с двумя детерминированными устойчивыми стационарными состояниями.

а) Стохастическое стационарное решение

В силу (7.1.13)

$$P_s(x) = P_s(0) \prod_{z=1}^x \left\{ \frac{B[(z-1)(z-2) + P]}{z(z-1)(z-2) + Rz} \right\}, \quad (7.1.63)$$

где

$$\begin{aligned} B &= k_1 A / k_2 \\ R &= k_4 / k_2 \\ P &= k_3 / k_1. \end{aligned} \quad (7.1.64)$$

Заметим, что если $P = R$, то решение (7.1.63) является распределением Пуассона со средним значением B . В этом случае мы имеем стационарное состояние, в котором реакции (7.1.56, 57) одновременно находятся в равновесии. Далее мы покажем, что в подобной ситуации химического равновесия всегда существует решение в виде распределения Пуассона (разд. 7.5.1 и 7.7б). Согласно (7.1.21), максимумы в (7.1.63) достигаются, когда

$$B = x[(x-1)(x-2) + R] / [P + x(x-1)]. \quad (7.1.65)$$

Функция $x = x(B)$, получаемая путем обращения (7.1.65), дает максимумы (минимумы), соответствующие значению B при заданных P и R .

Асимптотами для этой функции являются

$$\begin{aligned} x(B) &\sim B \quad \text{при больших } B, \\ x(B) &\sim PB/R \quad \text{при малых } B. \end{aligned} \quad (7.1.66)$$

Если $R > 9P$, то можно показать, что наклон $x(B)$ становится отрицательным в некотором диапазоне значений $x > 0$, и поэтому одному значению B соответствуют три решения, как показано на рис. 7.1. При переходе с одной прямой на другую наблюдается заметный излом.

Заметим также, что при выбранных параметрах бимодальный характер распределения заметен в очень узком диапазоне значений B . Этот диапазон намного уже того, на котором функция $P_s(x)$ имеет два максимума, поскольку отношение высот этих двух пиков может быть очень велико.

Можно привести и более точный результат. Пусть объем системы очень велик, а концентрация у вещества X , определяемая как

$$y = x/V,$$

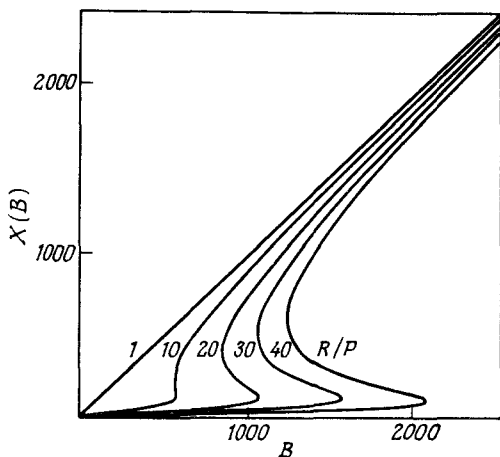


Рис. 7.1. График $x(B)$ относительно B , построенный по решению (7.1.65) для различных значений R/P и $P = 10\,000$.

постоянна. Ясно, что вероятности перехода должны иметь порядок V , поскольку скорость производства вещества X пропорциональна величине $x = yV$. Следовательно,

$$\begin{aligned}
 k_1 A &\sim 1/V \\
 k_3 A &\sim V \\
 k_2 &\sim 1/V^2 \\
 k_4 &\sim 1.
 \end{aligned}
 \tag{7.1.67}$$

а это значит, что

$$\begin{aligned}
 B &\sim V \\
 R &\sim V^2 \\
 P &\sim V^2.
 \end{aligned}
 \tag{7.1.68}$$

Тогда мы можем записать

$$\begin{aligned}
 B &= \tilde{B}V \\
 R &= \tilde{R}V^2 \\
 P &= \tilde{P}V^2.
 \end{aligned}$$

и представить (7.1.65) в виде

$$\tilde{B} \simeq y(y^2 + \tilde{R})/(y^2 + \tilde{P}).$$

Обозначив через y_1 и y_2 два значения y , запишем

$$\log [P_s(y_2)/P_s(y_1)] \simeq \sum_{z=y_1V}^{y_2V} \{ \log \tilde{B}V + \log (z^2 + \tilde{P}V^2) - \log [z(z^2 + \tilde{R}V^2)] \} \quad (7.1.69)$$

и аппроксимируем сумму интегралом

$$\sim V \int_{y_1}^{y_2} dy \left[\log \left(\frac{\tilde{B}(y^2 + \tilde{P})}{y(y^2 + \tilde{R})} \right) \right]$$

Отсюда

$$\frac{P_s(y_2)}{P_s(y_1)} \simeq \exp \left[V \int_{y_1}^{y_2} \log \left(\frac{\tilde{B}(y^2 + \tilde{P})}{y(y^2 + \tilde{R})} \right) dy \right], \quad (7.1.70)$$

и в зависимости от знака интеграла при $V \rightarrow \infty$ это отношение обращается либо в нуль, либо в бесконечность. Таким образом, в пределе больших объемов два пика, если только они не в точности одинаковы, становятся все более различными, и в конце концов сохраняется только один из них.

Дисперсию распределения можно найти с помощью простого приема. Заметим, что в силу (7.1.63) $P_s(x)$ можно записать в виде

$$P_s(x) = B^x G(x), \quad (7.1.71)$$

где $G(x)$ есть функция, определяемая через (7.1.63). Тогда

$$\left. \begin{aligned} \langle x^k \rangle &= \left[\sum_{x=0}^{\infty} x^k B^x G(x) \right] \left[\sum_{x=0}^{\infty} B^x G(x) \right]^{-1} \\ \text{и} \\ B \frac{\partial}{\partial B} \langle x^k \rangle &= \langle x^{k+1} \rangle - \langle x \rangle \langle x^k \rangle, \end{aligned} \right\} \quad (7.1.72)$$

так что

$$D \{x\} = B \frac{\partial}{\partial B} \langle x \rangle. \quad (7.1.73)$$

Отсюда видно, что при $V \rightarrow \infty$

$$\text{var} \{y\} \sim \frac{1}{V} \rightarrow 0, \quad (7.1.74)$$

и мы приближаемся к детерминированному пределу. Далее, если $\langle x \rangle$ пропорционально B , то дисперсия равна среднему значению, и для

двух ветвей (7.1.66) мы получаем

$$\langle x(B) \rangle = D \{x(B)\} = B \quad \text{при больших } B$$

$$\langle x(B) \rangle = D \{x(B)\} = PB/R \quad \text{при малых } B.$$

Это означает, что в этих пределах распределение примерно отвечает распределению Пуассона.

Стохастическое среднее в действительности не определяется точно пиковыми значениями, но хорошо аппроксимируется ими. Разумеется, для всякого B существует одно отчетливо выраженное значение $\langle x(B) \rangle$, а не три. Численные расчеты показывают, что среднее значение вначале движется вплотную к нижней ветви, а затем резко пере-скакивает в точке B_c на верхнюю ветвь. В точке B_c оба максимума имеют равную высоту, и эту точку можно в принципе определить из (7.1.70).

б) Учет зависимости от времени

Точное решение, учитывающее зависимость от времени, получить невозможно. Почти все приближенные методы основаны на приближении большого объема, свойства которого в стационарном случае были перечислены выше, и будут подробно рассматриваться в следующем разделе.

7.2. ПРИБЛИЖЕННОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ УПРАВЛЯЮЩИХ УРАВНЕНИЙ УРАВНЕНИЯМИ ФОККЕРА — ПЛАНКА

Существование систематизирующего масштабного параметра V приводит к понятию *разложения по обратному размеру системы*, впервые последовательно изложенного ван Кампенем [7.2]. Запутанная история этого вопроса, впрочем, насчитывает немало попыток найти предельную форму управляющего уравнения, приводящую к уравнению Фоккера — Планка. Основной же результат состоит в том, что диффузионный процесс может всегда быть аппроксимирован скачкообразным процессом, но не наоборот.

7.2.1. ПРИБЛИЖЕНИЕ ДИФфуЗИОННОГО ПРОЦЕССА СКАЧКООБРАЗНЫМ ПРОЦЕССОМ

Как мы уже обнаружили для случайного блуждания (разд. 3.8.2), в пределе бесконечно малых скачков управляющее уравнение переходит в уравнение Фоккера — Планка. Очевидно, что скачки должны становиться все более малыми и все более вероятными, и этот факт отражается в *гипотезе масштабной инвариантности*: существует пара-

метр δ , такой, что средняя длина шага и ее дисперсия пропорциональны δ , а вероятность скачка увеличивается с уменьшением δ .

Пусть вероятность скачка можно представить в виде

$$W_\delta(x'|x) = \Phi\left(\frac{x' - x - A(x)\delta}{\sqrt{\delta}}, x\right) \delta^{-3/2}, \quad (7.2.1)$$

где

$$\int dy \Phi(y, x) = Q \quad (7.2.2)$$

и

$$\int dy y \Phi(y, x) = 0. \quad (7.2.3)$$

Это означает, что

$$\begin{aligned} \alpha_0(x) &\equiv \int dx' W_\delta(x'|x) = Q/\delta \\ \alpha_1(x) &\equiv \int dx' (x' - x) W_\delta(x'|x) = A(x)Q \\ \alpha_2(x) &\equiv \int dx' (x' - x)^2 W_\delta(x'|x) = \int dy y^2 \Phi(y, x). \end{aligned} \quad (7.2.4)$$

Далее, мы предполагаем, что $\Phi(y, x)$ достаточно быстро уходит в нуль, когда $y \rightarrow \infty$, так что

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} W_\delta(x'|x) = \lim_{y \rightarrow \infty} \left[\left(\frac{y}{x' - x} \right)^3 \Phi(y, x) \right] = 0 \quad \text{для } x' \neq x. \quad (7.2.5)$$

Условия (7.2.4, 5) весьма сходны с условиями (3.4.1, 4, 5) из разд. 3.4, и, выбрав дважды дифференцируемую функцию $f(z)$, мы можем, так же как и в разд. 3.4, показать, что

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} \left\langle \frac{\partial f(z)}{\partial t} \right\rangle = \left\langle \alpha_1(z) \frac{\partial f}{\partial z} + \frac{1}{2} \alpha_2(z) \frac{\partial^2 f}{\partial z^2} \right\rangle. \quad (7.2.6)$$

Отсюда следует, что в пределе $\delta \rightarrow 0$ управляющее уравнение

$$\frac{\partial P(x)}{\partial t} = \int dx' [W(x|x')P(x') - W(x'|x)P(x)] \quad (7.2.7)$$

превращается в уравнение Фоккера — Планка

$$\frac{\partial P(x)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} \alpha_1(x)P(x) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \alpha_2(x)P(x). \quad (7.2.8)$$

Таким образом, имея уравнение (7.2.8), всегда можно построить управляющее уравнение, которое в зависимости от параметра δ будет аппроксимировать его с любой желаемой точностью. В подобное

управляющее уравнение будут входить вероятности перехода, удовлетворяющие критериям (7.2.4). Если же указанные критерии не удовлетворены, то подобное приближение оказывается невозможным. Приведем несколько примеров.

а) Случайное блуждание (разд. 3.8.2)

Пусть $x = nl$; тогда

$$W(x|x') = d(\delta_{x',x-l} + \delta_{x',x+l}). \quad (7.2.9)$$

Далее,

$$\begin{aligned} \alpha_0(x) &= 2d \\ \alpha_1(x) &= 0 \\ \alpha_2(x) &= 2l^2d. \end{aligned} \quad (7.2.10)$$

Пусть

$$\delta = l^2 \quad (7.2.11)$$

и

$$D = l^2d. \quad (7.2.12)$$

Теперь все условия удовлетворены, и предельное уравнение имеет вид

$$\frac{\partial P}{\partial t} = D \frac{\partial^2 P}{\partial x^2}, \quad (7.2.13)$$

как и утверждалось в разд. 3.8.2.

б) Процесс Пуассона (разд. 3.8.3)

Здесь, полагая $x = nl$,

$$W(x|x') = d\delta_{x,x'+l} \quad (7.2.14)$$

и

$$\begin{aligned} \alpha_0(x) &= d \\ \alpha_1(x) &= ld \\ \alpha_2(x) &= l^2d. \end{aligned} \quad (7.2.15)$$

Мы видим, что нельзя выразить l и d через параметр δ так, чтобы $l \rightarrow 0$, а $\alpha_1(x)$ и $\alpha_2(x)$ были конечны. В этом случае предельного уравнения Фоккера — Планка не существует.

в) *Общее приближение диффузионного процесса управляющим уравнением рождения — гибели*

Пусть мы имеем управляющее уравнение, такое, что

$$W_\delta(x' | x) = \left(\frac{A(x)}{2\delta} + \frac{B(x)}{2\delta^2} \right) \delta_{x', x+\delta} + \left(-\frac{A(x)}{2\delta} + \frac{B(x)}{2\delta^2} \right) \delta_{x', x-\delta}; \quad (7.2.16)$$

тогда для достаточно малых δ вероятность $W_\delta(x' | x)$ положительна, и по предположению это возможно на всем интересующем нас диапазоне значений x . Тогда процесс принимает значения из множества чисел, кратных δ , Приведенное выражение имеет иной вид, нежели (7.2.1), но тем не менее в пределе $\delta \rightarrow 0$ даст нам УФП. Действительно,

$$\alpha_0(x) = B(x)/\delta^2 \quad (7.2.17a)$$

$$\alpha_1(x) = A(x) \quad (7.2.17b)$$

$$\alpha_2(x) = B(x) \quad (7.2.17в)$$

и

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} W_\delta(x' | x) = 0 \quad \text{для } x' \neq x. \quad (7.2.17г)$$

Здесь, однако, $\alpha_0(x)$ расходится как $1/\delta^2$, а не как $1/\delta$ в (7.2.4), и представление о скачках, происходящих в соответствии с гладким распределением, перестает быть верным. Доказательство, однако, сохраняет силу, поскольку поведение $\alpha_0(x)$ несущественно, и предельное УФП имеет вид

$$\frac{\partial P(x)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} A(x)P(x) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} B(x)P(x). \quad (7.2.18)$$

Эта форма дает нам способ моделирования диффузионного процесса с помощью аппроксимирующего процесса рождения — гибели. Метод оказывается неприменимым, если $B(x) = 0$ где-либо в диапазоне изменения x , поскольку это ведет к отрицательным значениям $W_\delta(x' | x)$. Заметим, что стационарное решение управляющего уравнения в данном случае имеет вид

$$\begin{aligned} P_s(x) &= P_s(0) \prod_{z=\delta}^x \left[\frac{\delta A(z-\delta) + B(z-\delta)}{-\delta A(z) + B(z)} \right] \\ &= P_s(0) \left[\frac{-\delta A(0) + B(0)}{\delta A(x) + B(x)} \right] \prod_{z=0}^x \left[\frac{1 + \delta A(z)/B(z)}{1 - \delta A(z)/B(z)} \right], \end{aligned} \quad (7.2.19)$$

так что для достаточно малых δ

$$\log P_s(x) \rightarrow \text{const} - \log B(x) + \sum_{z=0}^x 2\delta A(z)/B(z), \quad (7.2.20)$$

т. е.

$$P_s(x) \rightarrow \frac{\mathcal{N}}{B(x)} \exp \left[2 \int_0^x dz A(z)/B(z) \right], \quad (7.2.21)$$

что и требовалось получить. Ясно, что предел одинаков на любом конечном интервале значений x , если $A(x)/B(x)$ ограничено на этом интервале.

7.2.2. РАЗЛОЖЕНИЕ КРАМЕРСА — МОЙАЛА

Простой, хотя и не строгий, вывод был предложен Крамерсом [7.3] и значительно усовершенствован Мойалом [7.4]. В неявном виде это разложение использовал Эйнштейн [7.5], о чем упоминалось в разд. 1.2.1.

В управляющем уравнении (7.2.7) заменим x' , определяя

$$y = x - x' \quad \text{в первом члене и}$$

$$y = x' - x \quad \text{во втором члене.}$$

После замены

$$t(y, x) = W(x + y | x), \quad (7.2.22)$$

управляющее уравнение принимает вид

$$\frac{\partial P(x)}{\partial t} = \int dy [t(y, x - y)P(x - y) - t(y, x)P(x)]. \quad (7.2.23)$$

Разложим теперь правую часть в степенной ряд

$$(7.2.23) = \int dy \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-y)^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial x^n} [t(y, x)P(x)] \quad (7.2.24)$$

$$= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial x^n} [\alpha_n(x)P(x)], \quad (7.2.25)$$

где

$$\alpha_n(x) = \int dx' (x' - x)^n W(x' | x) = \int dy y^n t(y, x). \quad (7.2.26)$$

Ограничившись двумя первыми членами в разложении (7.2.25), получим уравнение Фоккера — Планка (7.2.8).

Предлагая разложение по обратному размеру системы, ван Кампен критиковал это доказательство на том основании, что оно не содержит никаких указаний на то, что принимается за малый параметр.

Тем не менее этот способ получил большое распространение, главным образом благодаря своему удобству и простоте получаемого результата. Однако, как показано в разд. 7.2.1, существуют границы его применимости. Действительно, принимая $W(x' | x)$ в виде (7.2.1), получим

$$\alpha_n(x) = \delta^{n/2-1} \int dy y^n \Phi(y, x), \quad (7.2.27)$$

так что при $\delta \rightarrow 0$ члены порядка выше второго в разложении (7.2.25) (разложение Крамерса — Мойала) обращаются в нуль. И в своем доказательстве Мойал [7.4] потребовал выполнения условий, эквивалентных (7.2.4, 5).

7.2.3. РАЗЛОЖЕНИЕ ВАН КАМПЕНА ПО ОБРАТНОМУ РАЗМЕРУ СИСТЕМЫ [7.2]

Управляющие уравнения рождения — гибели дают хорошие примеры ситуаций, когда разложение Крамерса — Мойала оказывается неосуществимым, и простейшим из этих примеров служит процесс Пуассона, о котором упоминалось в разд. 7.2.1.

Во всех подобных случаях длина скачка равна плюс-минус единице или небольшому целому числу, в то время как типичный масштаб переменной велик, — это, скажем, число молекул или координата точки, совершающей случайное блуждание по длинной сетке.

В этих случаях мы можем ввести параметр Ω размера системы, с помощью которого вероятности перехода можно выразить через интенсивные переменные x/Ω и т. п. Например, в реакции, рассмотренной в разд. 7.1.3, параметром Ω служил объем V , а переменная x/Ω являлась концентрацией. В обозначениях ван Кампена

a = экстенсивная переменная (число молекул и т. п., пропорционально Ω);
 $x = a/\Omega$ интенсивная переменная (концентрация молекул).

Нас интересует предел больших Ω при фиксированном x . Это соответствует подходу к макроскопической системе. Мы можем переписать вероятность перехода в виде

$$W(a|a') = W(a'; \Delta a) \\ \Delta a = a - a'. \quad (7.2.28)$$

Существенным здесь является тот факт, что величина скачка выражается через экстенсивную величину Δa , однако зависимость от a лучше выражается через интенсивную переменную x . Мы считаем, таким образом, что можно записать

$$W(a'; \Delta a) = \Omega \psi \left(\frac{a'}{\Omega}; \Delta a \right). \quad (7.2.29)$$

Если это так, то мы можем осуществить разложение. Введем новую переменную z , в которой

$$a = \Omega \phi(t) + \Omega^{1/2} z, \quad (7.2.30)$$

где $\phi(t)$ есть функция, которую нужно определить. Теперь окажется, что $\alpha_n(a)$ пропорциональны Ω ; запишем

$$\alpha_n(a) = \Omega \tilde{\alpha}_n(x). \quad (7.2.31)$$

Возьмем разложение Крамерса — Мойала (7.2.25) и, заменив переменную, получим

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(z, t)}{\partial t} - \Omega^{1/2} \phi'(t) \frac{\partial P(z, t)}{\partial z} &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\Omega^{1-n/2}}{n!} \\ &\times \left(-\frac{\partial}{\partial z} \right)^n \tilde{\alpha}_n[\phi'(t) + \Omega^{-1/2} z] P(z, t). \end{aligned} \quad (7.2.32)$$

Члены порядка $\Omega^{1/2}$ с обеих сторон уничтожатся, если $\phi(t)$ подчиняется уравнению

$$\phi'(t) = \tilde{\alpha}_1[\phi(t)], \quad (7.2.33)$$

которое является ожидаемым *детерминистическим уравнением*. Раскладывая $\alpha_n[\phi(t) + \Omega^{-1/2} z]$ по степеням $\Omega^{-1/2}$ и перегруппировывая слагаемые, находим

$$\frac{\partial P(z, t)}{\partial t} = \sum_{m=2}^{\infty} \frac{\Omega^{-(m-2)/2}}{m!} \sum_{n=1}^m \frac{m!}{n!(m-n)!} \tilde{\alpha}_n^{(m-n)}[\phi(t)] \left(-\frac{\partial}{\partial z} \right)^n z^{m-n} P(z, t). \quad (7.2.34)$$

При переходе к пределу больших Ω остается только член с $m = 2$, и мы получаем

$$\frac{\partial P(z, t)}{\partial t} = -\tilde{\alpha}_1[\phi(t)] \frac{\partial}{\partial z} z P(z, t) + \frac{1}{2} \tilde{\alpha}_2[\phi(t)] \frac{\partial^2}{\partial z^2} P(z, t). \quad (7.2.35)$$

а) Сравнение с результатом Крамерса — Мойала

Уравнение Фоккера — Планка по Крамерсу — Мойалу, полученное в результате сохранения лишь первых двух членов в (7.2.25), имеет вид

$$\frac{\partial P(a)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial a} [\alpha_1(a) P(a)] + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial a^2} [\alpha_2(a) P(a)]. \quad (7.2.36)$$

Переходя к новой переменной $x = a/\Omega$, получаем

$$\frac{\partial P(x)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} [\tilde{\alpha}_1(x) P(x)] + \frac{1}{2\Omega} \frac{\partial^2}{\partial x^2} [\tilde{\alpha}_2(x) P(x)]. \quad (7.2.37)$$

Теперь мы можем воспользоваться теорией малого шума (разд. 6.3), приняв

$$\varepsilon^2 = \frac{1}{\Omega} \quad (7.2.38)$$

После подстановки

$$z = \Omega^{1/2}[x - \phi(t)], \quad (7.2.39)$$

УФП низшего порядка для z в точности совпадает с членом низшего порядка в разложении ван Кампена (7.2.35). Это означает, что если нас интересует лишь низший порядок, то мы можем воспользоваться УФП в представлении Крамерса — Мойала, которое может оказаться проще, чем метод ван Кампена. С точностью до низшего порядка результаты будут одинаковы, и каждое из этих представлений будет справедливо лишь до этого порядка.

Итак, если УФП получено из управляющего уравнения, то его справедливость будет зависеть от типа предельного перехода, использованного при его выводе. Если использовался предельный переход вида $\delta \rightarrow 0$, как в разд. 7.2.1, то к полученному уравнению можно подходить всерьез и, в частности, до конца исследовать нелинейные зависимости $\alpha_1(a)$ и $\alpha_2(a)$ от a .

Далее, если уравнение получено в результате разложения по Ω , как в разд. 7.2.3, то справедливо лишь приближение теории малого шума. Тогда не имеет смысла рассматривать что-либо кроме линеаризации (7.2.35) относительно детерминированного решения. Решение этого уравнения дается на базе соответствующего стохастического дифференциального уравнения

$$dz = \bar{\alpha}_1[\phi(t)]z dt + \sqrt{\bar{\alpha}_2[\phi(t)]} dW(t) \quad (7.2.40)$$

с помощью результатов разд. 4.4.7 (4.4.49) или 4.4.9 (4.4.83).

б) Пример: химическая реакция $X \rightleftharpoons A$

Согласно разд. 7.1.2, имеем

$$W(x|x') = \delta_{x,x'+1}k_2a + \delta_{x,x'-1}k_1x'. \quad (7.2.41)$$

По предположению

$$a = a_0V \quad (7.2.42)$$

$$x = x_0V,$$

где V — объем системы. Тогда общие количества веществ A и X пропорциональны объему системы (что вполне резонно), а скорости про-

изводства и распада X пропорциональны соответственно a и x . Таким образом,

$$W(x'_0; \Delta x) = V[k_2 a_0 \delta_{\Delta x, 1} + k_1 x'_0 \delta_{\Delta x, -1}] . \quad (7.2.43)$$

Это выражение совпадает с (7.2.29), где $\Omega \rightarrow V$, $a \rightarrow x$ и т. п. Итак,

$$\alpha_1(x) = \sum (x' - x) W(x' | x) = k_2 a - k_1 x = V(k_2 a_0 - k_1 x_0) \quad (7.2.44)$$

$$\alpha_2(x) = \sum (x' - x)^2 W(x' | x) = k_2 a + k_1 x = V(k_2 a_0 + k_1 x_0) .$$

Детерминистическое уравнение имеет вид

$$\phi'(t) = [k_2 a_0 - k_1 \phi(t)] , \quad (7.2.45)$$

а его решение

$$\phi(t) = \phi(0) e^{-k_1 t} + \frac{k_2 a_0}{k_1} (1 - e^{-k_1 t}) . \quad (7.2.46)$$

Уравнение Фоккера — Планка имеет вид

$$\frac{\partial P(z)}{\partial t} = k_1 \frac{\partial}{\partial z} z P(z) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial z^2} [k_2 a_0 + k_1 \phi(t)] P(z) . \quad (7.2.47)$$

Из (4.4.84, 85) мы можем вычислить, что

$$\langle z(t) \rangle = z(0) e^{-k_1 t} . \quad (7.2.48)$$

Обычно полагают $z(0) = 0$, поскольку начальное условие можно полностью учесть, накладывая его на ϕ . Считая $z(0) = 0$, находим

$$D\{z(t)\} = \left[\frac{k_2 a_0}{k_1} + \phi(0) e^{-k_1 t} \right] (1 - e^{-k_1 t}) \quad (7.2.49)$$

так что

$$\langle x(t) \rangle = V \phi(t) = V \phi(0) e^{-k_1 t} + \frac{k_2 a}{k_1} (1 - e^{-k_1 t}) , \quad (7.2.50)$$

$$D\{x(t)\} = V D\{z(t)\} = \left[\frac{k_2 a}{k_1} + V \phi(0) e^{-k_1 t} \right] (1 - e^{-k_1 t}) . \quad (7.2.51)$$

Отождествляя $V \phi(0) = N$, мы видим, что эти выражения полностью совпадают с точными решениями (7.1.38 — 40) разд. 7.1.2. Стационарным решением (7.2.47) является

$$P_s(z) = \mathcal{N} \exp \left(- \frac{k_1 z^2}{2k_2 a_0} \right) , \quad (7.2.52)$$

т. е. гауссово приближение точного распределения Пуассона.

Стационарное решение уравнения (7.2.36) имеет вид

$$\begin{aligned} P_s(x) &= \frac{\mathcal{N}}{\alpha_2(x)} \exp \left[\int_0^x 2 \frac{\alpha_1(x')}{\alpha_2(x')} dx' \right] \\ &= \mathcal{N} (k_2 a + k_1 x)^{-1+4k_2 a/k_1} e^{-2x}. \end{aligned} \quad (7.2.53)$$

Полученный предел можно проверить непосредственно, подставив

$$x = V(k_2 a_0/k_1) + \delta, \quad (7.2.54)$$

так что

$$(7.2.53) \simeq \mathcal{N} (2V k_2 a_0 + k_1 \delta)^{-1+4V k_2 a_0/k_1} e^{-2V k_2 a_0/k_1 - 2\delta}. \quad (7.2.55)$$

Тогда

$$\log P_s(x) \simeq \text{const} - \frac{k_1}{2k_2 a_0 V} (\delta - \delta^2). \quad (7.2.56)$$

Используя точное пуассоново решение, делая ту же подстановку и применяя формулу Стирлинга

$$\log x! \sim (x + \frac{1}{2}) \log x - x + \text{const}, \quad (7.2.57)$$

мы получим результат, совпадающий с (7.2.56). Однако точные результаты различны, и даже отношение логарифмов неодинаково.

Линейный относительно δ член является на самом деле членом низшего порядка относительно V : действительно, используя (7.2.39), мы получим $\delta = z\sqrt{V}$, и

$$\log P_s(z) \sim \text{const} - \frac{k_1}{2k_2 a_0} \left(\frac{z}{\sqrt{V}} - z^2 \right), \quad (7.2.58)$$

так что в пределе больших V мы приходим к простому гауссову распределению с нулевым средним.

в) Цепочка уравнений для моментов

Из разложения (7.2.34) мы можем вывести уравнения для моментов

$$\langle z^k \rangle = \int dz P(z, t) z^k, \quad (7.2.59)$$

путем прямой подстановки и интегрирования по частям:

$$\frac{d}{dt} \langle z^k \rangle = \sum_{m=2}^{\infty} \frac{\Omega^{-(m-2)/2}}{m!} \sum_{n=1}^{m,k} \frac{m!k!}{n!(m-n)!(k-n)!} \tilde{\alpha}_n^{(m-n)}[\phi(t)] \langle z^{m+k-2n} \rangle. \quad (7.2.60)$$

Иерархию уравнений можно получить, разлагая $\langle z^k \rangle$ по степеням $\Omega^{-1/2}$:

$$\langle z^k \rangle = \sum_{r=0}^{\infty} M_r^k \Omega^{-r/2}. \quad (7.2.61)$$

С помощью этой цепочки уравнений мы можем рассчитать стационарные моменты и автокорреляционные функции, используя те же методы, которые применялись в разд. 6.3.1 при вычислении моментов в рамках разложения уравнения Фоккера — Планка по малому шуму. Это осуществил ван Кампен в работе [7.2].

7.2.4. ТЕОРЕМА КУРЦА

Курц [7.6] показал, что в некотором смысле разложение Крамерса — Мойяла может дать несколько более сильный результат, чем разложение ван Кампена. Для ограничения класса процессов рождения — гибели с полиномиальными вероятностями перехода он продемонстрировал следующее. Рассмотрим стохастический процесс, подчиняющийся управляющему уравнению рождения — гибели:

$$\partial_t P(a, t) = \sum_{a'} W(a|a')P(a', t) - \sum_{a'} W(a'|a)P(a, t), \quad (7.2.62)$$

где удовлетворено масштабное условие (7.2.29). Тогда существует процесс $b(t)$, удовлетворяющий стохастическому дифференциальному уравнению

$$db(t) = \alpha_1(b)dt + \sqrt{\alpha_2(b)} dW(t), \quad (7.2.63)$$

и для каждой реализации $a(t)$ в (7.2.62) существует реализация $b(t)$ в (7.2.63), такая, что

$$|b(t) - a(t)| \sim \log V \quad (7.2.64)$$

для любого *конечного* t .

Этот результат соответствует низшему порядку в разложении ван Кампена. Действительно, сделаем подстановку вида (7.2.30), а именно

$$a(t) = V\phi(t) + V^{1/2}z(t) \quad (7.2.65)$$

$$b(t) = V\phi(t) + V^{1/2}y(t). \quad (7.2.66)$$

Тогда характеристической функцией $z(t)$ является

$$\begin{aligned} \langle \exp [isz(t)] \rangle &= \langle \exp [isV^{-1/2}a(t) - isV^{1/2}\phi(t)] \rangle \\ &= \exp [-isV^{1/2}\phi(t)] \langle \exp [isV^{-1/2}b(t)] \rangle + O(V^{-1/2} \log V) \\ &= \langle \exp [isy(t)] \rangle + O(V^{-1/2} \log V). \end{aligned} \quad (7.2.67)$$

Используя асимптотическое разложение для УФП, мы видим, что функция распределения для $y(t)$ приближается к таковой для УФП (7.2.35) с точностью до $O(V^{-1/2})$, откуда следует искомый результат,

имеющий, правда, несколько более слабую сходимость из-за наличия члена с $\log V$. Таким образом, с точки зрения величин, которые можно рассчитать и измерить, средних значений, дисперсий и т. п., кажущийся более сильным результат Курца эквивалентен разложению ван Кампена по обратному размеру системы.

7.2.5. КРИТИЧЕСКИЕ ФЛУКТУАЦИИ

Существование разложения по обратному размеру системы, как указано в разд. 7.2.3, основывается на том, что $\tilde{\alpha}'_1(a)$ не обращается в нуль. Могут, однако, возникнуть ситуации, когда

$$\tilde{\alpha}'_1(\phi_s) = 0, \quad (7.2.68)$$

где ϕ_s — стационарное решение детерминистического уравнения. Такое случается, например, при рассмотрении реакции разд. 7.1.3, для которой (в обозначениях этого раздела)

$$\tilde{\alpha}_1(y) = (\tilde{B}y^2 + \tilde{p} - y^3 - y\tilde{R})\tilde{k}_2,$$

где $\tilde{k}_2 = V^2k_2$.

Возможны два случая, которым соответствуют точки A и B на рис. 7.2. Случай A соответствует неустойчивому стационарному состоянию: всякое отклонение влево приведет в конце концов в точку C ; однако точка B устойчива. Ясно, что детерминистическое уравнение принимает вид

$$\dot{y} = -\tilde{k}_2(y - \phi_s)^3, \quad (7.2.69)$$

и управляющее уравнение у нас представляет собой аналог кубического процесса из разд. 6.2.4а.

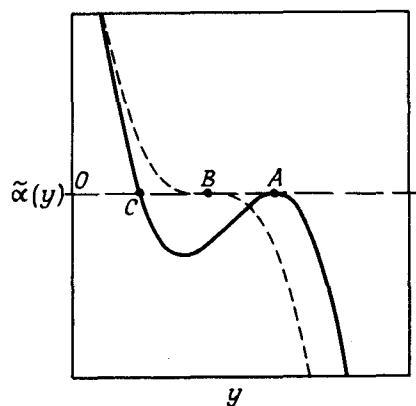


Рис. 7.2. Различные виды кривых $\alpha_1(y)$, имеющих точки $\alpha'_1(y) = 0$.

Ван Кампен [7.13] показал, что в данном случае мы должны принять

$$a = \Omega \phi(t) + \Omega^\mu u, \quad (7.2.70)$$

и тогда (7.2.32) примет вид

$$\frac{\partial P(z, t)}{\partial t} - \Omega^{1-\mu} \phi'(t) \frac{\partial P(z, t)}{\partial z} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\Omega^{1-\mu n}}{n!} \left(-\frac{\partial}{\partial z} \right)^n \tilde{\alpha}_n [\phi(t) + \Omega^{\mu-1} z] P(z, t). \quad (7.2.71)$$

Допустим теперь, что первые $(q - 1)$ производные $\tilde{\alpha}_1(\phi_s)$ обращаются в нуль. Если мы теперь в качестве $\phi(t)$ возьмем ϕ_s , уравнение (7.2.21) с точностью до низшего порядка имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(z, t)}{\partial t} = & -\frac{1}{q!} \tilde{\alpha}_1^{(q)}(\phi_s) \Omega^{(1-q)(1-\mu)} \frac{\partial}{\partial z} z^q p \\ & + \frac{1}{2} \tilde{\alpha}_2(\phi_s) \Omega^{1-2\mu} \frac{\partial^2 p}{\partial z^2} + \text{члены высших порядков.} \end{aligned} \quad (7.2.72)$$

Чтобы обеспечить сохранение z равным по порядку величины единице, положим

$$(1 - q)(1 - \mu) = (1 - 2\mu), \quad \text{т. е.} \quad \mu = \frac{q}{q+1}, \quad (7.2.73)$$

так что в результате

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \Omega^{-(q-1)/(q+1)} \left(-\frac{1}{q!} \tilde{\alpha}_1^{(q)} \frac{\partial}{\partial z} z^q p + \frac{1}{2} \tilde{\alpha}_2 \frac{\partial^2 P}{\partial z^2} \right), \quad (7.2.74)$$

где значения $\tilde{\alpha}_1^{(q)}$ и $\tilde{\alpha}_2$ берутся при ϕ_s . Теперь флуктуации изменяются на более медленном временном масштабе, который дается выражением

$$\tau = t \Omega^{-(q-1)/(q+1)}; \quad (7.2.75)$$

уравнение же для среднего значения имеет вид

$$\frac{d\langle x \rangle}{d\tau} = \frac{1}{q!} \tilde{\alpha}_1^{(q)} \langle x^q \rangle \quad (7.2.76)$$

и уже не связано с линеаризованным детерминистическим уравнением. Разумеется, устойчивость зависит от знака $\tilde{\alpha}_1^{(q)}$ и четности q . Простейший устойчивый случай соответствует $q = 3$ и отвечает критической точке B на рис. 7.2. В этом случае мы имеем дело с кубическим процессом, рассмотренным в разд. 6.3.4а, с долговременным масштабом

$$\tau = \Omega^{-1/2} t. \quad (7.2.77)$$

Мы видим, что для больших Ω зависимость от времени дается функцией от $\tau = \Omega^{-1/2}t$. Только для $t \geq \Omega^{1/2}$ значения τ становятся заметными, и поэтому эволюция системы наблюдается лишь для очень больших t . Таким образом, при больших Ω движение системы становится *очень медленным*.

Условие (7.2.68) обычно контролируется каким-либо внешним параметром (например, температурой), и точка в пространстве параметров, для которой удовлетворяется условие (7.2.68), называется *критической точкой*. Очень медленную эволюцию системы в критической точке называют *критическим замедлением*.

7.3. ГРАНИЧНЫЕ УСЛОВИЯ ДЛЯ ПРОЦЕССОВ РОЖДЕНИЯ — ГИБЕЛИ

Для процессов рождения — гибели существует довольно простой способ введения граничных условий. Если процесс ограничен интервалом $[a, b]$, то отражающие и поглощающие граничные условия, очевидно, сводятся к запрету на выход из интервала или возвращение в интервал соответственно, т. е.

	Отражающая	Поглощающая	
Граница в a	$t^-(a) = 0$	$t^+(a - 1) = 0$	(7.3.1)
Граница в b	$t^+(b) = 0$	$t^-(b + 1) = 0$.	

Иногда, однако, полезно в процесс ввести границы, и вместо того, чтобы полагать некоторые вероятности перехода равными нулю, накладывать граничные условия, подобные использованным в уравнениях Фоккера — Планка (разд. 5.2.1), чтобы результирующее решение на интервале $[a, b]$ было решением управляющего уравнения с обращаемыми в нуль вероятностями перехода. Это может оказаться желательным для сохранения определенного аналитического вида вероятностей перехода.

а) Прямое управляющее уравнение

Прямое управляющее уравнение может быть записано в виде

$$\begin{aligned} \partial_t P(x, t | x', t') = & t^+(x - 1)P(x - 1, t | x', t') + t^-(x + 1)P(x + 1, t | x', t') \\ & - [t^+(x) + t^-(x)]P(x, t | x', t'). \end{aligned} \quad (7.3.2)$$

Пусть мы хотим установить отражающую границу в $x = a$. Мы можем сделать это, потребовав

$$t^-(a) = 0$$

и

$$P(a - 1, t|x', t) = 0. \quad (7.3.3)$$

Единственным уравнением, на котором сказывается это требование, является уравнение для $\partial_t P(a, t|x', t')$. То же самое уравнение, однако, может быть получено не путем наложения условия $t^-(a) = 0$, а путем введения фиктивной вероятности $P(a - 1, t|x', t')$, для которой

$$t^+(a - 1)P(a - 1, t|x', t') = t^-(a)P(a, t|x', t'). \quad (7.3.4)$$

Это можно рассматривать как аналогию с требованием нулевого потока вероятности для отражающей границы в уравнении Фоккера — Планка.

Если нам необходим поглощающий барьер в точке $x = a$, мы можем потребовать

$$t^+(a - 1) = 0. \quad (7.3.5)$$

После достижения точки $a - 1$ процесс уже не возвращается на интервал, и дальнейшее его поведение нас не интересует. Единственным уравнением, на котором это сказывается, является уравнение для $\partial_t P(a, t|x', t')$, и то же самое уравнение мы получим, введя *фиктивную* $P(a - 1, t|x', t')$, для которой

$$P(a - 1, t|x', t') = 0. \quad (7.3.6)$$

Подводя итог, мы можем дать альтернативную формулировку граничных условий, эквивалентных на $[a, b]$ условиям (7.3.1):

Прямое управляющее уравнение на интервале $[a, b]$

	Отражающая	Поглощающая
Граница в a	$t^-(a)P(a) = t^+(a - 1)P(a - 1)$	$P(a - 1) = 0$
Граница в b	$t^+(b)P(b) = t^-(b + 1)P(b + 1)$	$P(b + 1) = 0$

(7.3.7)

б) Обратное управляющее уравнение

Обратное управляющее уравнение имеет вид (см. разд. 3.6)

$$\begin{aligned} \partial_t P(x, t|x', t') = & t^+(x')[P(x, t|x' + 1, t') - P(x, t|x', t')] \\ & + t^-(x')[P(x, t|x' - 1, t') - P(x, t|x', t')]. \end{aligned} \quad (7.3.8)$$

В случае отражающей границы в точке $x = a$ ясно, что $t^-(a) = 0$ эквивалентно введению фиктивной $P(x, t|a - 1, t')$, такой, что

$$P(x, t|a - 1, t') = P(x, t|a, t'). \quad (7.3.9)$$

В случае поглощающего барьера $t^+(a - 1)$ не войдет ни в одно из уравнений для $P(x, t|x', t')$ при $x, x' \in [a, b]$. Однако, поскольку $t^+(a - 1) = 0$, уравнения, в которых $x' < a - 1$, очевидно, не нарушат условия

$$P(x, t|x', t') = 0, \quad x \in [a, b], \quad x' \leq a - 1, \quad (7.3.10)$$

что для уравнения с $x' = a$ будет эквивалентно введению

$$P(x, t|a - 1, t') = 0; \quad (7.3.11)$$

что и является требуемым граничным условием. Суммируя сказанное, получим следующую таблицу:

Обратное управляющее уравнение на интервале $[a, b]$

	Отражающая	Поглощающая	
Граница в a	$P(\cdot a - 1) = P(\cdot a)$	$P(\cdot a - 1) = 0,$	(7.3.12)
Граница в b	$P(\cdot b + 1) = P(\cdot b)$	$P(\cdot b + 1) = 0.$	

7.4. СРЕДНЕЕ ВРЕМЯ ДОСТИЖЕНИЯ ГРАНИЦЫ

Метод расчета указанных времен в простом «одношаговом» случае близок к методу, разработанному для уравнения Фоккера — Планка (разд. 5.2.7). Пусть система ограничена интервалом

$$a \leq x \leq b, \quad (7.4.1)$$

и на каждом конце его частица либо поглощается, либо отражается. Для определенности рассмотрим систему с

отражающей границей в $x = a$ и
поглощающей границей в $x = b + 1$.

Используя, по существу, те же рассуждения, что и в разд. 5.2.7, мы находим, что $T(x)$ — среднее время, необходимое для того, чтобы частица, находящаяся изначально в точке x , была поглощена, — удовлетворяет уравнению, связанному с *обратным управляющим уравнением* (7.3.8):

$$t^+(x)[T(x + 1) - T(x)] + t^-(x)[T(x - 1) - T(x)] = -1 \quad (7.4.2)$$

с граничным условием, соответствующим (5.2.159) и вытекающим из (7.3.12):

$$T(a - 1) = T(a) \quad (7.4.3a)$$

$$T(b + 1) = 0. \quad (7.4.3b)$$

Если определить

$$U(x) = T(x + 1) - T(x), \quad (7.4.4)$$

то (7.4.2) принимает вид

$$t^+(x)U(x) - t^-(x)U(x - 1) = 1. \quad (7.4.5)$$

При

$$\phi(x) = \prod_{z=a+1}^x \frac{t^-(z)}{t^+(z)} \quad (7.4.6)$$

$$S(x) = U(x)/\phi(x) \quad (7.4.7)$$

выражение (7.4.5) эквивалентно уравнению

$$t^+(x)\phi(x)[S(x) - S(x - 1)] = -1 \quad (7.4.8)$$

с решением

$$S(x) = - \sum_{z=a}^x 1/[t^+(z)\phi(z)]. \quad (7.4.9)$$

При этом удовлетворено граничное условие (7.4.3a), согласно которому

$$U(a - 1) = S(a - 1) = 0. \quad (7.4.10)$$

Следовательно,

$$T(x + 1) - T(x) = -\phi(x) \sum_{z=a}^x 1/[t^+(z)\phi(z)], \quad (7.4.11)$$

и

$T(x) = \sum_{y=x}^b \phi(y) \sum_{z=a}^y 1/[t^+(z)\phi(z)]$	a отражающая, b поглощающая, $b > a$,
--	--

(7.4.12)

причем граничное условие (7.4.3) также удовлетворено; $T(b + 1) = 0$.

Аналогично если a является поглощающей, а b — отражающей границей, то

$T(x) = \sum_{y=a}^x \phi(y) \sum_{z=y}^b 1/[t^+(z)\phi(z)]$	a поглощающая, b отражающая, $a < b$.
--	--

(7.4.13)

Можно также вывести формулу, соответствующую (5.2.128), для случая, когда обе границы поглощающие.

7.4.1. ВЕРОЯТНОСТЬ ПОГЛОЩЕНИЯ

Если a и b конечны, то среднее время до поглощения также конечно. Если, однако, граница b является отражающей и находится в бесконечности, то выражение для среднего времени поглощения может расходиться. Само по себе это еще не означает, что существует отличная от нуля вероятность того, что частица не будет поглощена. Точный результат (см. разд. 4.7 в [7.7]) состоит в следующем.

Если процесс происходит на интервале (a, ∞) и a является поглощающей границей, то вероятность поглощения в состоянии $(a - 1)$ для частицы, находящейся в состоянии x , рассчитывается так. Определим функцию

$$M(x) = \sum_{y=a}^{\infty} \left[\prod_{z=a}^y \frac{t^+(y)}{t^-(y)} \right]. \quad (7.4.14)$$

Тогда если $M(x) < \infty$, то искомая вероятность есть

$$\frac{M(x)}{1 + M(x)}, \quad (7.4.15)$$

а если $M(x) = \infty$, то эта вероятность равна единице, и тогда среднее время до поглощения дается формулой (7.4.13).

7.4.2. СРАВНЕНИЕ С УРАВНЕНИЕМ ФОККЕРА — ПЛАНКА

Формулы (7.4.12, 13) в действительности очень сходны с соответствующими формулами для диффузионного процесса (7.4.1, 2). Используя модель, приведенную в разд. 7.2.1в, нетрудно показать, что в пределе $\delta \rightarrow 0$ они совпадают.

Рассматривая задачу о переходе через потенциальный барьер (разд. 5.2.7в), которая для данного типа управляющего уравнения может возникнуть, например для реакции с бистабильностью в контексте разд. 7.1.3, мы можем использовать вполне аналогичное приближение. Определим для нашего примера среднее время перехода из устойчивого стационарного состояния x_1 в другое устойчивое стационарное состояние x_3 .

В этом случае точка $x = 0$ является отражающей границей, и мы рассматриваем интервал $(0, x_3)$, а начальной точкой служит x_1 . Заметим, что

$$\phi(x) = \prod_{z=1}^x \frac{t^-(z)}{t^+(z)} = \frac{P_s(0) t^+(0)}{P_s(x) t^+(x)}, \quad (7.4.16)$$

так что

$$T(x_1 \rightarrow x_3) = \sum_{y=x_1}^{x_3} [P_s(y) t^+(y)]^{-1} \sum_{z=0}^y P_s(z). \quad (7.4.17)$$

Если допустить, что $P_s(y)^{-1}$ имеет *резкий* максимум в неустойчивой точке x_2 , то мы можем положить $y = x_2$ во всех остальных сомножителях в (7.4.17) и получить

$$T(x_1 \rightarrow x_3) \sim \frac{n_1}{t^+(x_2)} \sum_{y=x_1}^{x_3} [P_s(y)]^{-1}, \quad (7.4.18)$$

где

$$n_1 = \sum_{z=0}^{x_2} P_s(z) \quad (7.4.19)$$

есть полная вероятность нахождения на нижнем пике стационарного распределения. Полученный результат является дискретным аналогом результатов разд. 5.2.7в.

7.5. МНОГОМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ РОЖДЕНИЯ — ГИБЕЛИ

Это очень широкий класс систем, эволюция которых во времени может рассматриваться как результат индивидуальных взаимодействий между элементами некоторого множества. К таким системам можно отнести, например,

- химические реакции, при которых молекулы, сталкиваясь друг с другом, претерпевают превращения;
- экологические системы, в которых особи гибнут, дают потомство, спариваются, уничтожают друг друга;
- эпидемии, в которых заболевание передается от одного индивидуума к другому при контакте.

Все системы такого рода можно моделировать с помощью метода, который я называю *комбинаторной кинетикой*; в рамках которого вероятность перехода для некоторого превращения, являющегося следствием определенного взаимодействия, пропорциональна числу возможных взаимодействий данного типа.

Например, в химической реакции $X \rightleftharpoons 2Y$ прямая реакция $X \rightarrow 2Y$ происходит в результате спонтанного распада вырожденного взаимодействия, в котором участвует только один индивидуум. Число возможных взаимодействий этого типа равно числу индивидуумов типа X , следовательно, мы можем принять

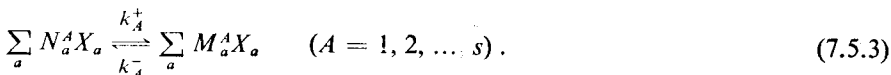
$$t(x \rightarrow x - 1, y \rightarrow y + 2) = k_1 x. \quad (7.5.1)$$

Для обратной реакции существует $y(y - 1)/2$ различных способов выбора пары молекул Y . Следовательно,

$$t(x \rightarrow x + 1, y \rightarrow y - 2) = k_2 y(y - 1). \quad (7.5.2)$$

В общем случае мы можем рассматривать многие типы взаимодействий между многими видами молекул, индивидуумов и т. п. На языке химических реакций мы можем сформулировать общий принцип следующим образом.

Рассмотрим систему из n компонентов, в которой происходят s различных реакций:



Коэффициент N_a^A при X_a есть число молекул типа X_a в левой части уравнения, а M_a^A — соответственно в правой. Воспользовавшись векторным представлением, мы можем записать

$$\begin{aligned} \mathbf{x} &= (x_1, x_2, \dots, x_n) \\ N^A &= (N_1^A, N_2^A, \dots, N_n^A) \\ M^A &= (M_1^A, M_2^A, \dots, M_n^A) \end{aligned} \quad (7.5.4)$$

(где x_a есть число молекул вида X_a). Определим также

$$\mathbf{r}^A = \mathbf{M}^A - \mathbf{N}^A. \quad (7.5.5)$$

Ясно, что когда реакция A продвигается на один шаг в прямом направлении, то

$$\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x} + \mathbf{r}^A, \quad (7.5.6)$$

а в обратном

$$\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x} - \mathbf{r}^A. \quad (7.5.7)$$

Константы скорости определяются выражениями

$$t_A^+(\mathbf{x}) = k_A^+ \prod_a \frac{x_a!}{(x_a - N_a^A)!} \quad (7.5.8)$$

$$t_A^-(\mathbf{x}) = k_A^- \prod_a \frac{x_a!}{(x_a - M_a^A)!}$$

и пропорциональны соответственно числу способов выбора комбинации N^A или M^A из x молекул. Таким образом, управляющее уравнение имеет вид

$$\begin{aligned} \partial_t P(\mathbf{x}, t) &= \sum_A \{ [t_A^-(\mathbf{x} + \mathbf{r}^A)P(\mathbf{x} + \mathbf{r}^A, t) - t_A^+(\mathbf{x})P(\mathbf{x}, t)] \\ &\quad + [t_A^+(\mathbf{x} - \mathbf{r}^A)P(\mathbf{x} - \mathbf{r}^A, t) - t_A^-(\mathbf{x})P(\mathbf{x}, t)] \}. \end{aligned} \quad (7.5.9)$$

Эта форма, разумеется, является самым общим способом записи однородного по времени управляющего уравнения для целочисленной пе-

ременной x , изменяющейся шагами длины r^A . Общее комбинаторное управляющее уравнение возникает именно благодаря специальному выбору вида (7.5.8) для вероятностей перехода за единицу времени. Иначе его называют также химическим управляющим уравнением, поскольку подобные уравнения особенно удобны для описания химических реакций.

7.5.1. СТАЦИОНАРНЫЕ РЕШЕНИЯ ПРИ НАЛИЧИИ ДЕТАЛЬНОГО БАЛАНСА

Вообще говоря, не существует способа записать стационарное решение в явном виде, удобном для практических приложений. Если, однако, детальный баланс имеет место, то стационарное решение можно получить без труда. Будучи просто числовым вектором, переменная x может быть только четной; следовательно, детальный баланс должен записываться в виде

$$t_A^-(x + r^A)P_s(x + r^A) = t_A^+(x)P_s(x) \quad (7.5.10)$$

для всех A (см. разд. 5.3.5). Требование, чтобы данное условие выполнялось для всех A , накладывает довольно жесткие ограничения на t_A^\pm . Это следует из того факта, что (7.5.10) предоставляет возможность вычисления $P_s(x_0 + nr^A)$ для любого n и для любых начальных x_0 . Используя этот метод для всех доступных A , мы можем получить $P_s(x)$ на пространстве всех x , которые могут быть представлены в виде

$$x = x_0 + \sum n_A r^A; \quad (n_A \text{ целое}), \quad (7.5.11)$$

однако получаемые решения могут быть неоднозначными, так как, к примеру, из (7.5.10) мы можем записать

$$\left. \begin{aligned} P_s[(x + r^A) + r^B] &= \frac{P_s(x) t_A^+(x) t_B^+(x + r^A)}{t_A^-(x + r^A) t_B^-(x + r^A + r^B)}, \\ \text{но} \\ P_s[(x + r^B) + r^A] &= \frac{P_s(x) t_B^+(x) t_A^+(x + r^B)}{t_B^-(x + r^B) t_A^-(x + r^A + r^B)}. \end{aligned} \right\} \quad (7.5.12)$$

Используя комбинаторные представления (7.5.8) и подставляя их в (7.5.12), мы видим, что условие удовлетворяется автоматически.

Условие это становится, однако, нетривиальным, если одни и те же две точки могут быть соединены друг с другом двумя существенно различными путями, т.е. если, например,

$$\begin{aligned} N^A &\neq N^B \\ M^A &\neq M^B, \end{aligned} \quad (7.5.13)$$

$$\text{но } r^A = r^B \equiv r.$$

В таком случае для единственности $P_s(x + r^A)$ в (7.5.10) требуется, чтобы

$$\frac{t_A^+(x)}{t_A^-(x+r)} = \frac{t_B^+(x)}{t_B^-(x+r)}, \quad (7.5.14)$$

а это означает, что

$$\frac{k_A^+}{k_A^-} = \frac{k_B^+}{k_B^-}. \quad (7.5.15)$$

Если существуют две цепи реакций A, B, C, \dots , и A', B', C', \dots , такие, что

$$r^A + r^B + r^C + \dots = r^{A'} + r^{B'} + r^{C'} + \dots, \quad (7.5.16)$$

то прямой подстановкой можно убедиться, что

$$P_s(x + r^A + r^B + r^C + \dots) = P_s(x + r^{A'} + r^{B'} + r^{C'} + \dots) \quad (7.5.17)$$

справедливо лишь в том случае, когда

$$\boxed{\frac{k_A^+ k_B^+ k_C^+}{k_A^- k_B^- k_C^-} \dots = \frac{k_{A'}^+ k_{B'}^+ k_{C'}^+}{k_{A'}^- k_{B'}^- k_{C'}^-} \dots} \quad (7.5.18)$$

Последнее равенство является, таким образом, условием детального баланса в управляющем уравнении с комбинаторной кинетикой.

Решением для $P_s(x)$ в данном случае является многомерное распределение Пуассона

$$P_s(x) = \prod_a \frac{\alpha_a^{x_a} e^{-\alpha_a}}{x_a!}, \quad (7.5.19)$$

что можно проверить подстановкой в (7.5.10):

$$\prod_a \frac{\alpha_a^{(x_a+r_a^A)} e^{-\alpha_a}}{(x_a+r_a^A)!} \frac{k_A^-(x_a+r_a^A)!}{(x_a+r_a^A - M_a^A)!} = \prod_a \frac{\alpha_a^{x_a} e^{-\alpha_a}}{x_a!} \frac{k_A^+ x_a!}{(x_a - N_a^A)!}. \quad (7.5.20)$$

Пользуясь тем, что

$$r_a^A = M_a^A - N_a^A,$$

находим

$$k_A^+ \prod_a \alpha_a^{N_a^A} = k_A^- \prod_a \alpha_a^{M_a^A}. \quad (7.5.21)$$

Наиболее общее решение, однако, будет иметь такой вид только при одновременном выполнении разного рода законов сохранения.

Например, в реакции



сохраняется величина $2x + y$. Таким образом, стационарное распределение имеет вид

$$\frac{e^{-\alpha_1} \alpha_1^x}{x!} \frac{e^{-\alpha_2} \alpha_2^y}{y!} \phi(2x + y) \quad (7.5.23)$$

где ϕ — произвольная функция. Выбрав $\phi(2x + y) = 1$, мы получим распределение Пуассона. Или же мы могли бы выбрать

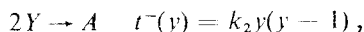
$$\phi(2x + y) = \delta(2x + y, N) \quad (7.5.24)$$

что соответствует фиксированию суммы $2x + y$ на уровне N .

В качестве вырожденного случая эту реакцию иногда рассматривают в виде



где A считают фиксированным детерминированным числом. Возможными реакциями в таком случае являются



и закон сохранения сводится всегда просто к тому, что y сохраняет свою четность (т. е. либо всегда четное, либо всегда нечетное). Стационарное решение имеет вид

$$P_s(y) = \frac{\alpha^y}{y!} \psi(y, \alpha), \quad (7.5.27)$$

где $\psi(y, \alpha)$ является функцией y лишь в том смысле, что она зависит от четности или нечетности y .

7.5.2. СТАЦИОНАРНЫЕ РЕШЕНИЯ В ОТСУТСТВИЕ ДЕТАЛЬНОГО БАЛАНСА (РЕШЕНИЕ КИРХГОФА)

Существует метод, который в принципе позволяет в общем случае найти стационарные решения, хотя большого практического применения он не нашел. За подробностями заинтересованный читатель может обратиться к работам Хакена (разд. 4.8 в [7.8]) и Шнакенберга [7.4]. Приближенные методы, однако, открывают более широкие возможности.

7.5.3. РАЗЛОЖЕНИЕ ПО ОБРАТНОМУ РАЗМЕРУ СИСТЕМЫ И АНАЛОГИЧНЫЕ РАЗЛОЖЕНИЯ

В общем случае мы находим, что для химических управляющих уравнений разложение по обратному размеру системы действительно существует. Предполагается, что скорость производства или поглощения вещества пропорциональна Ω , т. е. размеру системы. Это значит, что при $\Omega \rightarrow \infty$ следует ожидать

$$x \sim \Omega \rho, \quad (7.5.28)$$

где ρ — набор значений химических концентраций. Следовательно, при $\Omega \rightarrow \infty$ величины $t_A^\pm(x)$ должны быть пропорциональны Ω , для чего требуется

$$\left. \begin{aligned} k_A^+ &\sim \kappa_A^+ \Omega^{-\sum_A N_A^+ + 1} \\ k_A^- &\sim \kappa_A^- \Omega^{-\sum_A M_A^- + 1} \end{aligned} \right\} \quad (7.5.29)$$

При этих обстоятельствах можно получить разложение ван Кампена по обратному размеру системы в многомерном случае. Это разложение получается настолько сложным, что здесь мы не будем выписывать его в явном виде. Однако, как и в случае одной переменной, существует разложение Крамерса — Мойала, первые два члена которого описывают диффузионный процесс, имеющий такой же асимптотический вид, как и соответствующий процесс, полученный из разложения по обратному размеру системы.

Разложение Крамерса — Мойала получается из (7.5.9) в точности так же, как это было сделано в разд. 7.2.2, и даже проще, поскольку (7.5.9) уже имеет требуемый вид. Таким образом, мы имеем

$$\partial_t P(\mathbf{x}, t) = \sum_{A,n} \left\{ \frac{(r^A \cdot \nabla)^n}{n!} [t_A^-(\mathbf{x}) P(\mathbf{x}, t)] + \frac{(-r^A \cdot \nabla)^n}{n!} [t_A^+(\mathbf{x}) P(\mathbf{x}, t)] \right\} \quad (7.5.30)$$

и, отбрасывая члены порядка выше второго,

$$\partial_t P(\mathbf{x}, t) = -\sum_a \partial_a [A_a(\mathbf{x}) P(\mathbf{x}, t)] + \frac{1}{2} \sum_{a,b} \partial_a \partial_b [B_{ab}(\mathbf{x}) P(\mathbf{x}, t)] \quad (7.5.31)$$

$$\left. \begin{aligned} A_a(\mathbf{x}) &= \sum_A r_a^A [t_A^+(\mathbf{x}) - t_A^-(\mathbf{x})] \\ B_{ab}(\mathbf{x}) &= \sum_A r_a^A r_b^A [t_A^+(\mathbf{x}) + t_A^-(\mathbf{x})] \end{aligned} \right\} \quad (7.5.32)$$

Итак, мы получили химическое уравнение Фоккера — Планка, соответствующее исходному управляющему уравнению. Следует иметь в

виду, однако, что оно справедливо лишь как приближение, при котором разложение по обратному объему с точностью до порядка $1/\Omega$ совпадает с тем же разложением для соответствующего управляющего уравнения.

Если подобная точность приближения достаточна, то часто бывает удобнее пользоваться уравнением Фоккера — Планка, нежели управляющим уравнением.

7.6. НЕКОТОРЫЕ ПРИМЕРЫ

7.6.1. $X + A = 2X$

Здесь

$$t^+(x) = k_1 ax \quad (7.6.1)$$

$$t^-(x) = k_2 x(x - 1) .$$

Следовательно,

$$\begin{aligned} A(x) &= k_1 ax - k_2 x(x - 1) \sim k_1 ax - k_2 x^2 \quad \text{с точностью до } 1/\Omega, \\ B(x) &= k_1 ax + k_2 x(x - 1) \sim k_1 ax + k_2 x^2 \quad \text{с точностью до } 1/\Omega. \end{aligned} \quad (7.6.2)$$

7.6.2. $X \stackrel{\gamma}{\rightleftharpoons} Y \stackrel{k}{\rightleftharpoons} A$

Здесь мы имеем

$$\left. \begin{aligned} t_1^+(\mathbf{x}) &= \gamma y \\ t_1^-(\mathbf{x}) &= kx \end{aligned} \right\} \quad \mathbf{r}^1 = (1, -1) \quad (7.6.3)$$

$$\left. \begin{aligned} t_2^+(\mathbf{x}) &= ka \\ t_2^-(\mathbf{x}) &= \gamma y \end{aligned} \right\} \quad \mathbf{r}^2 = (0, 1) . \quad (7.6.4)$$

Следовательно,

$$A(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix} (\gamma y - kx) + \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} (ka - \gamma y) \quad (7.6.5)$$

$$= \begin{bmatrix} \gamma y - kx \\ kx + ka - 2\gamma y \end{bmatrix} \quad (7.6.6)$$

$$B(\mathbf{x}) = \left\{ \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix} (1, -1) \right\} (\gamma y + kx) + \left\{ \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} (0, 1) \right\} (ka + \gamma y) \quad (7.6.7)$$

$$= \begin{bmatrix} \gamma y + kx & -\gamma y - kx \\ -\gamma y - kx & 2\gamma y + kx + ka \end{bmatrix} . \quad (7.6.8)$$

Если теперь воспользоваться формой, линеаризованной относительно стационарного состояния, то

$$\gamma y = kx = ka \quad (7.6.9)$$

$$\underline{B}_s = \begin{bmatrix} 2ka & -2ka \\ -2ka & 4ka \end{bmatrix}. \quad (7.6.10)$$

7.6.3. СИСТЕМА ХИЩНИК — ЖЕРТВА

Рассмотренная в разд. 1.3 система хищник — жертва дает нам хороший пример интересующих нас систем. На языке химических реакций мы можем записать



Все реакции необратимы (хотя можно ввести и обратимость), так что

$$t_{\bar{A}}(\mathbf{x}) = 0 \quad (A = 1, 2, 3),$$

но

$$\begin{aligned} t_1^+(\mathbf{x}) &= k_1 a \frac{x!}{(x-1)!} \frac{y!}{y!} = k_1 ax \\ t_2^+(\mathbf{x}) &= k_2 \frac{x!}{(x-1)!} \frac{y!}{(y-1)!} = k_2 xy \\ t_3^+(\mathbf{x}) &= k_3 \frac{x!}{x!} \frac{y!}{(y-1)!} = k_3 y. \end{aligned} \quad (7.6.12)$$

Управляющее уравнение теперь можно выписать с использованием (7.5.9) в явном виде:

$$\begin{aligned} \partial_t P(x, y) &= k_1 a(x-1)P(x-1, y) + k_2(x+1)(y-1)P(x+1, y-1) \\ &\quad + k_3(y+1)P(x, y+1) - (k_1 ax + k_2 xy + k_3 y)P(x, y). \end{aligned} \quad (7.6.13)$$

Это уравнение не имеет точных решений, так что приходится использовать приближенные методы.

Разложение Крамера — Мойала. Из (7.5.32) имеем

$$\mathbf{A}(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} k_1 ax + \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \end{bmatrix} k_2 xy + \begin{bmatrix} 0 \\ -1 \end{bmatrix} k_3 y \quad (7.6.14)$$

$$= \begin{bmatrix} k_1 ax - k_2 xy \\ k_2 xy - k_3 y \end{bmatrix}, \quad (7.6.15)$$

$$\underline{B}(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} (1, 0)k_1ax + \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \end{bmatrix} (-1, 1)k_2xy + \begin{bmatrix} 0 \\ -1 \end{bmatrix} (0, -1)k_3y \quad (7.6.16)$$

$$= \begin{bmatrix} k_1ax + k_2xy & -k_2xy \\ -k_2xy & k_2xy + k_3y \end{bmatrix}. \quad (7.6.17)$$

Детерминистические уравнения имеют вид

$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} k_1ax - k_2xy \\ k_2xy - k_3y \end{bmatrix}. \quad (7.6.18)$$

Стационарное состояние при

$$\begin{bmatrix} x_s \\ y_s \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} k_3/k_2 \\ k_1a/k_2 \end{bmatrix}. \quad (7.6.19)$$

Чтобы определить устойчивость этого состояния, проверим устойчивость линеаризованного детерминистического уравнения

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \begin{bmatrix} \delta x \\ \delta y \end{bmatrix} &= \frac{\partial A(\mathbf{x}_s)}{\partial x_s} \delta x + \frac{\partial A(\mathbf{x}_s)}{\partial y_s} \delta y \\ &= \begin{bmatrix} k_1a - k_2y_s \\ k_2y_s \end{bmatrix} \delta x + \begin{bmatrix} -k_2x_s \\ k_2x_s - k_3 \end{bmatrix} \delta y \end{aligned} \quad (7.6.20)$$

$$= \begin{bmatrix} 0 & -k_3 \\ k_1a & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \delta x \\ \delta y \end{bmatrix}. \quad (7.6.21)$$

Собственные значения матрицы суть

$$\lambda = \pm i(k_1k_3a)^{1/2}, \quad (7.6.22)$$

что указывает на периодическое движение при всяком малом отклонении от стационарного состояния. Таким образом, мы имеем дело с безразличным равновесием, когда возмущение не увеличивается и не затухает.

Это связано с существованием сохраняющейся величины

$$V = k_2(x + y) - k_3 \log x - k_1a \log y, \quad (7.6.23)$$

которая, как легко проверить, удовлетворяет условию $dV/dt = 0$. Таким образом, в системе сохраняется V , а это значит, что существуют различные круговые траектории при постоянных значениях V .

Принимая вновь

$$x = x_s + \delta x \quad (7.6.24)$$

$$y = y_s + \delta y$$

и разлагая до второго порядка, мы видим, что

$$V = \frac{k_2^2}{2} \left(\frac{\delta x^2}{k_3^2} + \frac{\delta y^2}{(k_1 a)^2} \right), \quad (7.6.25)$$

так что изначально орбиты эллиптически (к этому же выводу можно прийти и из рассмотрения линеаризованного случая).

По мере увеличения орбит их эллиптичность уменьшается, и в конце концов либо x , либо y могут обратиться в нуль.

Если x первым обращается в нуль (все жертвы истреблены), то, как видим, y тоже неизбежно обращается в нуль. Если же y становится равным нулю (все хищники погибли от голода), то численность жертв экспоненциально растет, не ограниченная ничем.

Стохастическое поведение. В силу сохранения величины V орбиты имеют безразличное равновесие. Это значит, что при учете флуктуаций размер орбиты будет изменяться со временем. Это можно прямо увидеть из эквивалентных стохастических дифференциальных уравнений

$$\begin{bmatrix} dx \\ dy \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} k_1 a x - k_2 x y \\ k_2 x y - k_3 y \end{bmatrix} dt + \underline{C}(x, y) \begin{bmatrix} dW_1(t) \\ dW_2(t) \end{bmatrix}, \quad (7.6.26)$$

где

$$\underline{C}(x, y) \underline{C}(x, y)^T = \underline{B}(x). \quad (7.6.27)$$

Далее, воспользуемся формулой Ито

$$dV(x, y) = \frac{\partial V}{\partial x} dx + \frac{\partial V}{\partial y} dy + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} dx^2 + 2 \frac{\partial^2 V}{\partial x \partial y} dx dy + \frac{\partial^2 V}{\partial y^2} dy^2 \right), \quad (7.6.28)$$

откуда

$$\begin{aligned} \langle dV(x, y) \rangle &= \left\langle \frac{\partial V}{\partial x} (k_1 a x - k_2 x y) + \frac{\partial V}{\partial y} (k_2 x y - k_3 y) \right\rangle dt \\ &+ \left\langle B_{11} \frac{k_3}{2x^2} + B_{22} \frac{k_1}{2y^2} \right\rangle dt. \end{aligned} \quad (7.6.29)$$

Первое среднее обращается в нуль, поскольку V сохраняется как детерминированная величина, и мы получаем

$$\langle dV(x, y) \rangle = \frac{1}{2} \left\langle \frac{k_3 k_1 a}{x} + \frac{k_3 k_2 y}{x} + \frac{k_1 k_2 a x}{y} + \frac{k_1 k_3 a}{y} \right\rangle. \quad (7.6.30)$$

Все эти члены имеют порядок Ω^{-1} и положительны, когда x и y положительны. Таким образом, $V(x, y)$ в среднем монотонно возрастает. В конце концов будет задета одна из осей, и произойдет

то же самое, что и в детерминистическом случае. Мы видим, что когда x или y обращаются в нуль, $V = \infty$.

В этом случае прямое использование разложения по обратному размеру системы оказывается очень громоздким, и более удобными оказываются уравнения для моментов. Эти уравнения могут быть получены непосредственно из управляющего уравнения, или же из уравнения Фоккера — Планка. Результаты несколько отличаются друг от друга — на величину порядка обратного объема. Для простоты воспользуемся уравнением Фоккера — Планка, откуда

$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} \langle x \rangle \\ \langle y \rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} k_1 a \langle x \rangle - k_2 \langle xy \rangle \\ k_2 \langle xy \rangle - k_3 \langle y \rangle \end{bmatrix} \quad (7.6.31)$$

$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} \langle x^2 \rangle \\ \langle xy \rangle \\ \langle y^2 \rangle \end{bmatrix} = \frac{1}{dt} \begin{bmatrix} \langle 2x dx + dx^2 \rangle \\ \langle x dy + y dx + dx dy \rangle \\ \langle 2y dy + dy^2 \rangle \end{bmatrix} \quad (7.6.32)$$

$$= \begin{bmatrix} 2k_1 a \langle x^2 \rangle - 2k_2 \langle x^2 y \rangle + k_1 a \langle x \rangle + k_2 \langle xy \rangle \\ k_2 \langle x^2 y - y^2 x \rangle + (k_1 a - k_3 - k_2) \langle xy \rangle \\ 2k_2 \langle xy^2 \rangle - 2k_3 \langle y^2 \rangle + k_2 \langle xy \rangle + k_3 \langle y \rangle \end{bmatrix}. \quad (7.6.33)$$

Чтобы разложение по обратному размеру системы было справедливо, мы должны убедиться в том, что все корреляции и дисперсии имеют порядок $1/\Omega$ по сравнению со средними значениями.

Запишем поэтому

$$x = \langle x \rangle + \delta x \quad (7.6.34)$$

$$y = \langle y \rangle + \delta y$$

и оставим в разложении лишь члены низшего порядка. Заметив, что члены, возникающие из $\langle dx^2 \rangle$, $\langle dx dy \rangle$ и $\langle dy^2 \rangle$, имеют порядок по Ω на единицу меньший, чем остальные, получим

$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} \langle x \rangle \\ \langle y \rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} k_1 a \langle x \rangle - k_2 \langle x \rangle \langle y \rangle \\ k_2 \langle x \rangle \langle y \rangle - k_3 \langle x \rangle \langle y \rangle \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -k_2 \langle \delta x \delta y \rangle \\ k_2 \langle \delta x \delta y \rangle \end{bmatrix} \quad (7.6.35)$$

$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} \langle \delta x^2 \rangle \\ \langle \delta x \delta y \rangle \\ \langle \delta y^2 \rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} k_1 a \langle x \rangle + k_2 \langle x \rangle \langle y \rangle \\ -k_2 \langle x \rangle \langle y \rangle \\ k_2 \langle x \rangle \langle y \rangle + k_3 \langle y \rangle \end{bmatrix} \quad (7.6.36)$$

$$+ \begin{bmatrix} 2k_1 a - 2k_2 \langle y \rangle, & -2k_2 \langle x \rangle & , & 0 \\ k_2 \langle y \rangle & , & k_1 a - k_3 + k_2 (\langle x \rangle - \langle y \rangle), & -k_2 \langle x \rangle \\ 0 & , & 2k_2 \langle y \rangle & , & 2k_2 \langle x \rangle - 2k_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \langle \delta x^2 \rangle \\ \langle \delta x \delta y \rangle \\ \langle \delta y^2 \rangle \end{bmatrix}.$$

Заметим, что средние, до низшего порядка, подчиняются детерминистическим уравнениям, однако в следующем порядке появится вклад от члена с $\langle \delta x \delta y \rangle$. Рассмотрим упрощенный случай, когда

$$k_1 a = k_3 = 1, \quad k_2 = \alpha \quad (7.6.37)$$

(этого всегда можно добиться перенормировкой переменных). Вводя обозначения

$$\langle x \rangle \rightarrow x, \quad \langle y \rangle \rightarrow y, \quad \langle \delta x^2 \rangle \rightarrow f, \quad \langle \delta x \delta y \rangle \rightarrow g, \quad \langle \delta y^2 \rangle \rightarrow h, \quad (7.6.38)$$

получаем

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} x - \alpha xy \\ \alpha xy - y \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -\alpha g \\ \alpha g \end{bmatrix} \\ \frac{d}{dt} \begin{bmatrix} f \\ g \\ h \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} x + \alpha xy \\ -\alpha xy \\ \alpha xy + y \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 2 - 2\alpha y & -2\alpha x & 0 \\ \alpha y & \alpha(x - y) & -\alpha x \\ 0 & 2\alpha y & 2\alpha x - 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} f \\ g \\ h \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (7.6.39)$$

Мы можем попытаться решить эти уравнения в стационарном состоянии. Учитывая, что f, g и h на множитель Ω^{-1} меньше, чем x и y , для этого требуется, чтобы α имело порядок Ω^{-1} (это также следует из масштабных условий (7.5.29)). Следовательно, α мало. С точностью до низшего порядка,

$$x_s = y_s = 1/\alpha. \quad (7.6.40)$$

Но уравнения для f, g и h в стационарном состоянии тогда имеют вид

$$\begin{bmatrix} 2g \\ h - f \\ -2g \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2/\alpha \\ -1/\alpha \\ 2/\alpha \end{bmatrix} \quad (7.6.41)$$

и несовместны. Таким образом, использованный метод не приводит нас к стационарному состоянию. Можно тогда попытаться решить все уравнения (7.6.39) для стационарного состояния.

После некоторых преобразований получим

$$x_s = y_s \quad (7.6.42)$$

$$g_s = \alpha^{-1}(x_s - \alpha x_s^2),$$

так что

$$\begin{aligned} f_s &= x_s(-2\alpha x_s^2 + x_s(2 - \alpha) - 1)/(2 - 2\alpha x_s) \\ h_s &= x_s(-2\alpha x_s^2 + x_s(2 + \alpha) + 1)/(2 - 2\alpha x_s). \end{aligned} \quad (7.6.43)$$

и уравнение для g_s дает нам

$$-\alpha x_s^2 + \alpha x_s(f_s - h_s) = 0, \quad (7.6.44)$$

откуда получаются решения для стационарных значений

$$\left. \begin{aligned} x_s &= y_s = \frac{1}{2} \\ f_s &= \frac{1}{2}\alpha/(\alpha - 2) \\ g_s &= \frac{1}{4}(2 - \alpha)/\alpha \\ h_s &= -1/(\alpha - 2). \end{aligned} \right\} \quad (7.6.45)$$

Для малых α , при которых справедлив этот метод, мы приходим к отрицательному значению f_s , которое по определению должно быть положительным. Таким образом, стационарного решения нет.

Если вновь принять приближение $x_s = y_s = 1/\alpha$, то дифференциальные уравнения для f , g и h легко решаются. Считая, что в начальный момент дисперсии и корреляции равны нулю, получим

$$\begin{aligned} f(t) &= \frac{1}{2\alpha}(\cos 2t - 1) + \frac{2t}{\alpha} \\ g(t) &= -\frac{1}{2\alpha} \sin 2t \end{aligned} \quad (7.6.46)$$

$$h(t) = -\frac{1}{2\alpha}(\cos 2t - 1) - \frac{2t}{\alpha}.$$

Заметим, что $f(t)$ и $h(t)$ всегда положительны и монотонно возрастают. Решение справедливо только для малых времен, так как из-за возрастания $g(t)$ среднее значение в конце концов начнет зависеть от времени.

7.6.4. УРАВНЕНИЯ ДЛЯ ПРОИЗВОДЯЩИХ ФУНКЦИЙ

Для системы с комбинаторной кинетикой можно получить довольно простое дифференциальное уравнение для производящей функции

$$G(s, t) = \sum_{\mathbf{x}} \left(\prod_a s_a^{x_a} \right) P(\mathbf{x}, t). \quad (7.6.47)$$

Действительно, заметим, что

$$\partial_t G(s, t) = \partial_t^+ G(s, t) + \partial_t^- G(s, t), \quad (7.6.48)$$

где два члена соответствуют двум частям ($s t^+$ и t^-) управляющего уравнения. Таким образом,

$$\begin{aligned} \partial_t^+ G(s, t) &= \sum_{\mathbf{A}, \mathbf{x}} k_{\mathbf{A}}^+ \left\{ \prod_a \left[\frac{(x_a - r_a^{\mathbf{A}})!}{(x_a - r_a^{\mathbf{A}} - N_a^{\mathbf{A}})!} s_a^{x_a} \right] P(\mathbf{x} - \mathbf{r}^{\mathbf{A}}, t) \right. \\ &\quad \left. - \prod_a \left[\frac{x_a!}{(x_a - N_a^{\mathbf{A}})!} s_a^{x_a} \right] P(\mathbf{x}, t) \right\}. \end{aligned} \quad (7.6.49)$$

Заменяя переменную, по которой производится суммирование, на $x - r^A$ и присваивая ей обозначение x , получаем

$$\partial_i^+ G(s, t) = \sum_{A, x} k_A^+ \left[\prod_a \frac{x_a!}{(x_a - N_a^A)!} s_a^{x_a + r_a^A} - \prod_a \frac{x_a!}{(x_a - N_a^A)!} s_a^{x_a} \right] P(x, t). \quad (7.6.50)$$

Заметим, что

$$\prod_a \frac{s_a^{x_a} x_a!}{(x_a - N_a^A)!} = \prod_a \left(\partial_a^{N_a^A} s_a^{x_a} \right) s_a^{N_a^A} \quad (7.6.51)$$

и

$$\prod_a \frac{s_a^{x_a + r_a^A} x_a!}{(x_a - N_a^A)!} = \prod_a \left(\partial_a^{N_a^A} s_a^{x_a} \right) s_a^{N_a^A}, \quad (7.6.52)$$

откуда

$$\partial_i^+ G(s, t) = \sum_A k_A^+ \left(\prod_a s_a^{M_a^A} - \prod_a s_a^{N_a^A} \right) \partial_a^{N_a^A} G(s, t). \quad (7.6.53)$$

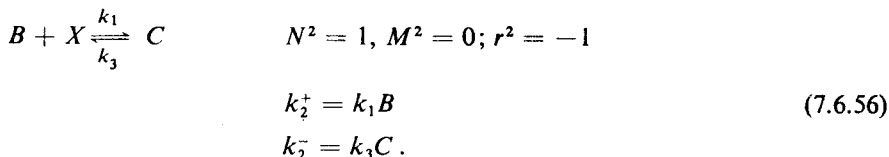
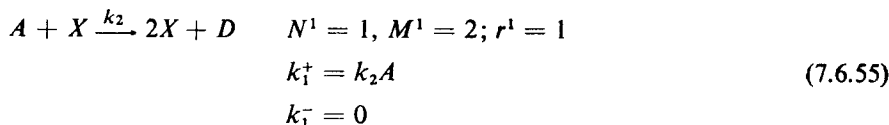
Аналогично получим формулу для $\partial_i^- G(s, t)$ и, объединив их, придем к

$$\partial_i G(s, t) = \sum_A \left(\prod_a s_a^{M_a^A} - \prod_a s_a^{N_a^A} \right) \left(k_A^+ \prod_a \partial_a^{N_a^A} - k_A^- \prod_a \partial_a^{M_a^A} \right) G(s, t). \quad (7.6.54)$$

Это общая формула дифференциального уравнения для производящей функции. Приведем теперь несколько примеров.

a) Модель, допускающая точное решение

Рассмотрим реакции (A, B, C фиксированы)



С учетом (7.6.54) уравнение для производящей функции имеет вид

$$\partial_i G = (s^2 - s)(k_2 A \partial_s G) + (1 - s)(k_1 B \partial_s G - k_3 C G). \quad (7.6.57)$$

Будем решать его методом характеристик. Положим

$$k_1 B = \beta, \quad k_2 A = \alpha, \quad k_3 C = \gamma. \quad (7.6.58)$$

Характеристики

$$\frac{dt}{1} = - \frac{ds}{(1-s)(\beta-\alpha s)} = \frac{dG}{\gamma(1-s)G} \quad (7.6.59)$$

имеют решения

$$\left(\frac{1-s}{\beta-\alpha s}\right) e^{(\alpha-\beta)t} = u \quad (7.6.60)$$

$$(\beta-\alpha s)^{\gamma/\alpha} G = v. \quad (7.6.61)$$

Общее решение может быть записано как $v = F(u)$, т. е.

$$G = (\beta-\alpha s)^{-\gamma/\alpha} F\left[e^{(\alpha-\beta)t} \left(\frac{1-s}{\beta-\alpha s}\right)\right]. \quad (7.6.62)$$

Отсюда мы можем найти различные решения, зависящие от времени.

Условная вероятность $P(x, t | y, 0)$ получается из начального условия

$$G_y(s, 0) = s^\gamma \quad (7.6.63)$$

$$\Rightarrow F(z) = (1-\beta z)^\gamma (1-\alpha z)^{-\gamma/\alpha-\gamma} (\beta-\alpha)^{\gamma/\alpha} \quad (7.6.64)$$

$$\Rightarrow G_y(s, t) = \lambda^{\gamma/\alpha} [\beta(1-e^{-\lambda t}) - s(\alpha - \beta e^{-\lambda t})]^\gamma \times [(\beta - \alpha e^{-\lambda t}) - \alpha s(1 - e^{-\lambda t})]^{-\gamma/\alpha-\gamma}, \quad (7.6.65)$$

где $\lambda = \beta - \alpha$. При $t \rightarrow \infty$ стационарное состояние существует, только если $\beta > \alpha$, и имеет вид

$$G_y(s, \infty) = (\beta - \alpha s)^{-\gamma/\alpha} (\beta - \alpha)^{\gamma/\alpha} \quad (7.6.66)$$

$$\Rightarrow P_s(x) = \frac{\Gamma(x + \gamma/\alpha)(\alpha/\beta)^x}{\Gamma(\gamma/\alpha)x!} (\beta - \alpha)^{\gamma/\alpha}. \quad (7.6.67)$$

Мы можем также получить из уравнения для производящей функции уравнения для моментов, воспользовавшись тем, что

$$\partial_s G(s, t)|_{s=1} = \langle x(t) \rangle \quad (7.6.68)$$

$$\partial_s^2 G(s, t)|_{s=1} = \langle x(t)[x(t) - 1] \rangle.$$

Двигаясь таким образом, получим

$$\frac{d}{dt} \langle x(t) \rangle = (k_2 A - k_1 B) \langle x(t) \rangle + k_3 C \quad (7.6.69)$$

и

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle x(t)[x(t) - 1] \rangle &= 2(k_2A - k_1B) \langle x(t)[x(t) - 1] \rangle \\ &+ 2k_2A \langle x(t) \rangle + 2k_3C \langle x(t) \rangle. \end{aligned} \quad (7.6.70)$$

Эти уравнения имеют устойчивое стационарное решение при условии, что

$$k_2A < k_1B,$$

т. е. $\alpha < \beta$.

В этом случае стационарные значения среднего и дисперсии суть

$$\langle x \rangle_s = k_3C / (k_1B - k_2A) \quad (7.6.71)$$

$$D \{x\}_s = k_1k_3BC / (k_2A - k_1B)^2. \quad (7.6.72)$$

Эта модель является упрощенным представлением процессов, протекающих в ядерном реакторе: X — это нейтрон. Первая реакция описывает деление при поглощении нейтрона ядром A , в результате которого получается осколок (осколки) D плюс два нейтрона. Вторая реакция описывает поглощение и производство нейтронов в процессах, не связанных с делением.

Когда k_2A приближается к k_1B , мы подходим к критической ситуации, где число поглощенных нейтронов почти равно числу выделяющихся. При $k_2A > k_1B$ начинается взрывная цепная реакция. Заметим, что при подходе к критической точке как $\langle x_s \rangle$, так и $D \{x_s\}$ становятся очень велики, и, более того,

$$\frac{D \{x_s\}}{\langle x_s \rangle} = \frac{k_1B}{k_1B - k_2A} \rightarrow \infty. \quad (7.6.73)$$

Таким образом, $\langle x_s \rangle$ испытывает очень большие флуктуации вблизи критической точки.

Заметим также, что уравнения для среднего значения в этой системе линейны и система является марковской. Методами разд. 3.7.4 (теорема регрессии) можно показать, что

$$\langle x(t), x(0) \rangle_s = \exp [(k_2A - k_1B)t] D \{x\}_s, \quad (7.6.74)$$

так что при приближении к критической точке флуктуации становятся исчезающе медленными, т. е. временная корреляционная функция очень медленно убывает со временем.

б) Химическая реакция $X_1 \xrightleftharpoons[k_2]{k_1} X_2$

Для реакции

$$N = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad M = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad r = \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$k_1^+ = k_1, \quad k_1^- = k_2 \quad (7.6.75)$$

$$\partial_t G(s_1, s_2, t) = (s_2 - s_1)(k_1 \partial_{s_1} - k_2 \partial_{s_2})G(s_1, s_2, t)$$

можно получить решение методом характеристик. Производящая функция является произвольной функцией решений уравнения

$$\frac{dt}{1} = -\frac{ds_1}{k_1(s_2 - s_1)} = \frac{ds_2}{k_2(s_2 - s_1)}. \quad (7.6.76)$$

Два интеграла являются решениями уравнений

$$k_2 ds_1 + k_1 ds_2 = 0 \implies k_2 s_1 + k_1 s_2 = v \quad (7.6.77)$$

$$(k_1 + k_2)dt = \frac{d(s_2 - s_1)}{s_2 - s_1} \\ \implies (s_2 - s_1)e^{-(k_1+k_2)t} = u \quad (7.6.78)$$

$$\therefore G(s_1, s_2, t) = F[k_2 s_1 + k_1 s_2, (s_2 - s_1)e^{-(k_1+k_2)t}]. \quad (7.6.79)$$

Начальное условие

$$G(s_1, s_2, 0) = \exp[\alpha(s_1 - 1) + \beta(s_2 - 1)], \quad (7.6.80)$$

соответствующее распределению Пуассона, порождает пуассоново решение

$$G(s_1, s_2, t) = \exp\left\{\frac{k_2 \beta - k_1 \alpha}{k_1 + k_2} (s_2 - s_1)e^{-(k_1+k_2)t} + \frac{\alpha + \beta}{k_1 + k_2} [k_1(s_2 - 1) + k_2(s_1 - 1)]\right\}. \quad (7.6.81)$$

В данном случае стационарное решение не единственно, поскольку $x + y$ является сохраняемой величиной. Из (7.6.79) мы видим, что общее стационарное решение имеет вид

$$G(s_1, s_2, \infty) = F(k_2 s_1 + k_1 s_2, 0). \quad (7.6.82)$$

Таким образом,

$$k_1^n \frac{\partial^n G}{\partial s_1^n} = k_2^n \frac{\partial^n G}{\partial s_2^n}, \quad (7.6.83)$$

откуда следует, что при $s_1 = s_2 = 1$

$$k_1^n \langle x_1^n \rangle_f = k_2^n \langle x_2^n \rangle_f. \quad (7.6.84)$$

7.7. ПРЕДСТАВЛЕНИЕ ПУАССОНА [7.10]

Этот изящный метод позволяет получать уравнения Фоккера — Планка, эквивалентные химическим управляющим уравнениям вида (7.5.9).

По предположению $P(x, t)$ представима как суперпозиция многомерных некоррелированных пуассоновых распределений

$$P(x, t) = \int d\alpha \prod_a \frac{e^{-\alpha_a x_a}}{x_a!} f(\alpha, t). \quad (7.7.1)$$

Это означает, что производящая функция $G(s, t)$ может быть записана в виде

$$G(s, t) = \int d\alpha \exp \left[\sum_a (s_a - 1) \alpha_a \right] f(\alpha, t). \quad (7.7.2)$$

Подставим это в уравнение для производящей функции (7.6.54) и получим

$$\begin{aligned} \partial_t G(s, t) = \sum_A \int d\alpha \left[\prod_a \left(\frac{\partial}{\partial \alpha_a} + 1 \right)^{M_a^A} - \prod_a \left(\frac{\partial}{\partial \alpha_a} + 1 \right)^{N_a^A} \right] \\ \times \left(k_A^+ \prod_a \alpha_a^{N_a^A} - k_A^- \prod_a \alpha_a^{M_a^A} \right) \exp \left[\sum_a (s_a - 1) \alpha_a \right] f(\alpha, t). \end{aligned} \quad (7.7.3)$$

Теперь проинтегрируем по частям, отбросим поверхностные члены и приравняем коэффициенты экспоненты:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f(\alpha, t)}{\partial t} = \sum_A \left[\prod_a \left(1 - \frac{\partial}{\partial \alpha_a} \right)^{M_a^A} - \prod_a \left(1 - \frac{\partial}{\partial \alpha_a} \right)^{N_a^A} \right] \\ \times \left[k_A^+ \prod_a \alpha_a^{N_a^A} - k_A^- \prod_a \alpha_a^{M_a^A} \right] f(\alpha, t). \end{aligned} \quad (7.7.4)$$

а) Уравнения Фоккера — Планка для бимолекулярных реагирующих систем

Уравнение будет иметь вид Фоккера — Планка, если, как это часто бывает в химических реакциях,

$$\sum_a M_a^A \leq 2 \quad (7.7.5)$$

$$\sum_a N_a^A \leq 2,$$

что означает, что в реакции участвуют не более чем по две молекулы. Тогда УФП можно упростить следующим образом. Определим потоки

$$J_A(\alpha) = k_A^+ \prod_a \alpha_a^{N_a^A} - k_A^- \prod_a \alpha_a^{M_a^A}, \quad (7.7.6)$$

сносы

$$A_a[\mathbf{J}(\alpha)] = \sum_A r_a^A J_A(\alpha) \quad (7.7.7)$$

и элементы диффузионной матрицы

$$B_{ab}[\mathbf{J}(\alpha)] = \sum_A J_A(\alpha) (M_a^A M_b^A - N_a^A N_b^A - \delta_{a,b} r_a^A). \quad (7.7.8)$$

Тогда УФП в представлении Пуассона имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial f(\alpha, t)}{\partial t} = & - \sum_a \frac{\partial}{\partial \alpha_a} \{A_a[\mathbf{J}(\alpha)] f(\alpha, t)\} \\ & + \frac{1}{2} \sum_{a,b} \frac{\partial^2}{\partial \alpha_a \partial \alpha_b} \{B_{ab}[\mathbf{J}(\alpha)] f(\alpha, t)\}. \end{aligned} \quad (7.7.9)$$

Заметим также, что если мы воспользуемся явной зависимостью параметров от объема (разд. 7.5.3, формула (7.5.29)) и определим

$$\eta_a = \alpha_a / V \quad (7.7.10)$$

$$\varepsilon = V^{-1/2}, \quad (7.7.11)$$

а $F(\eta, t)$ есть квазивероятность по переменной η , то УФП относительно переменной η принимает вид

$$\frac{\partial F(\eta, t)}{\partial t} = - \sum_a \frac{\partial}{\partial \eta_a} [\hat{A}_a(\eta) F(\eta, t)] + \frac{\varepsilon^2}{2} \sum_{a,b} \frac{\partial^2}{\partial \eta_a \partial \eta_b} [\hat{B}_{a,b}(\eta) F(\eta, t)], \quad (7.7.12)$$

где

$$\hat{A}_a(\eta) = \sum_A r_a^A \hat{J}_A(\eta) \quad (7.7.13a)$$

$$\hat{J}_A(\eta) = \kappa_A^+ \prod_a \eta_a^{N_a^A} - \kappa_A^- \prod_a \eta_a^{M_a^A} \quad (7.7.13b)$$

$$\hat{B}_{ab}(\eta) = \sum_A \hat{J}_A(\eta) (M_a^A M_b^A - N_a^A N_b^A - \delta_{a,b} r_a^A). \quad (7.7.13b)$$

В такой форме мы видим, что разложение по обратному размеру системы (по $V^{-1/2}$) в точности соответствует разложению по малому шуму (по η) для уравнения Фоккера — Планка (7.7.12). Для подобных

управляющих уравнений рождения — гибели этот метод оказывается технически намного более простым, чем прямое разложение по обратному размеру системы.

б) Мономолекулярные реакции

Если для всех A

$$\sum_a M_a^A \leq 1 \quad \text{и} \quad \sum_a N_a^A \leq 1,$$

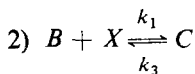
то, как нетрудно убедиться, коэффициент диффузии $B_{ab}(\eta)$ в (7.7.13) обращается в нуль, и мы получаем уравнение Лиувилля. Начальному распределению Пуассона $P(x, t_0)$ соответствует дельта-функция $F(\eta, t_0)$, и эволюция во времени, порожаемая этим уравнением Лиувилля, будет порождать решение в виде дельта-функции $\delta(\eta - \bar{\eta}(t))$, где $\bar{\eta}(t)$ есть решение уравнения

$$d\eta/dt = A(\eta).$$

Это означает, что $P(x, t)$ будет сохранять пуассоновскую форму со средним значением, равным $\bar{\eta}(t)$. Таким образом, мы пришли к общему результату, согласно которому для всякой системы с мономолекулярной реакцией существуют распространяющиеся многомерные пуассоновские решения. Существуют также и непуассоновские решения; они соответствуют начальным $F(\eta, t_0)$, которые не являются дельта-функциями.

в) Пример

В качестве примера рассмотрим пару реакций



$$N^1 = 1, \quad M^1 = 2, \quad k_1^+ = k_2 A, \quad k_1^- = k_4$$

$$N^2 = 1, \quad M^2 = 0, \quad k_2^+ = k_1 B, \quad k_2^- = k_3 C.$$

Тогда (7.7.4) принимает вид уравнения Фоккера — Планка

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \left[\left(1 - \frac{\partial}{\partial \alpha} \right)^2 - \left(1 - \frac{\partial}{\partial \alpha} \right) \right] (k_2 A \alpha - k_4 \alpha^2) f$$

$$+ \left[1 - \left(1 - \frac{\partial}{\partial \alpha} \right) \right] (k_1 B \alpha - k_3 C) f \tag{7.7.15}$$

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \left\{ -\frac{\partial}{\partial \alpha} [k_3 C + (k_2 A - k_1 B)\alpha - k_4 \alpha^2] + \frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} [k_2 A \alpha - k_4 \alpha^2] \right\} f \quad (7.7.16)$$

при условии, что $k_2 A \alpha - k_4 \alpha^2 > 0$. Кроме того, существует простое соотношение между моментами, которое для случая одной переменной принимает вид

$$\begin{aligned} \langle x^r \rangle_f &= \sum_x \int d\alpha [x(x-1) \dots (x-r+1) \frac{e^{-\alpha} \alpha^x}{x!} f(\alpha)] \\ &= \int d\alpha \alpha^r f(\alpha) \equiv \langle \alpha^r \rangle. \end{aligned} \quad (7.7.17)$$

Это следует из факториальных моментов распределения Пуассона (разд. 2.8.3). Однако $f(\alpha)$ не является распределением вероятности; по крайней мере то простое определение, которое мы дали этой величине, не гарантирует ее принадлежности к классу распределений вероятности. Действительно, всякая положительная суперпозиция распределения Пуассона должна иметь дисперсию по меньшей мере такую же широкую, как и распределение Пуассона. Поэтому всякая $P(x)$, для которой дисперсия уже, чем распределение Пуассона, не может быть представлена положительной $f(\alpha)$.

Представление на языке *распределений* возможно всегда — по крайней мере формально. Действительно, если мы определим

$$f_y(\alpha) = (-1)^y \delta^y(\alpha) e^\alpha, \quad \text{то} \quad (7.7.18)$$

$$\int d\alpha f_y(\alpha) e^{-\alpha} \alpha^x / x! = \int d\alpha \alpha^x \left(-\frac{d}{d\alpha} \right)^y \delta(\alpha) / x! \quad , \quad (7.7.19)$$

и после интегрирования по частям получаем

$$(7.7.19) = \delta_{x,y} \quad . \quad (7.7.20)$$

Это значит, что мы можем записать

$$P(x) = \int d\alpha (e^{-\alpha} \alpha^x / x!) \left[\sum_y (-1)^y P(y) \delta^y(\alpha) e^\alpha \right] \quad , \quad (7.7.21)$$

так что в *формальном смысле* для любой $P(x)$ можно всегда подобрать $f(\alpha)$.

В нормальной ситуации приведенное здесь довольно замысловатое выражение обычно не возникает, поскольку, к примеру, мы можем найти стационарное решение УФП (7.7.16) как потенциальное решение (с точностью до нормировки)

$$f_s(\alpha) = e^\alpha (k_2 A - k_4 \alpha)^{(k_1 B / k_4 - k_3 C / k_2 A - 1)} \alpha^{k_3 C / k_2 A - 1} \quad , \quad (7.7.22)$$

что представляет собой более или менее гладкую функцию. отождествление с вероятностью, однако, возможно лишь в том случае, если $f_s(\alpha)$ неотрицательна и нормируема.

Если определить

$$\delta = (k_1 B/k_4 - k_3 C/k_2 A), \quad (7.7.23)$$

то $f_s(\alpha)$ нормируема на интервале $(0, k_2 A/k_4)$ при условии, что

$$\delta > 0 \quad (7.7.24)$$

$$k_3 > 0.$$

Очевидно, k_3 по определению положительно.

Далее следует убедиться в том, что при интегрировании по частям при получении УФП (7.7.4) при указанных условиях поверхностные члены пропадают. Для интервала (a, b) поверхностные члены, которые возникнут в случае реакции (7.7.14), могут быть записаны в виде

$$\begin{aligned} & \{ [(k_2 A \alpha - k_4 \alpha^2 - k_1 B \alpha + k_3 C) f - \partial_a [(k_2 \alpha - k_4 \alpha^2) f]] \} \{ e^{(s-1)\alpha} \} \Big|_a^b \\ & + [(k_2 \alpha - k_4 \alpha^2) f] \{ (s-1) e^{(s-1)\alpha} \} \Big|_a^b. \end{aligned} \quad (7.7.25)$$

Из-за наличия дополнительного множителя $(s-1)$ во второй строке каждая строка независимо обращается в нуль. Легко проверить, что на интервале $(0, k_2 A/k_4)$ каждый член обращается в нуль на каждом конце интервала для f , определенной в (7.7.22), при условии, что δ и k_3 больше нуля.

Если k_3 и δ положительны, то мы получаем УФП, истинно эквивалентное стохастическому дифференциальному уравнению

$$d\alpha = [k_3 C + (k_2 A - k_1 B)\alpha - k_4 \alpha^2] dt + \sqrt{2(k_2 A \alpha - k_4 \alpha^2)} dW(t). \quad (7.7.26)$$

Движение происходит на интервале $(0, k_2 A/k_4)$, и обе границы удовлетворяют критериям для *входных границ*. Это означает, что система не может покинуть интервал $(0, k_2 A/k_4)$ (см. разд. 5.2.1).

Если хотя бы одно из условий (7.7.24) нарушено, то вектор сноса уводит точку за пределы интервала $(0, k_2 A/k_4)$. Например, вблизи $\alpha = 0$ мы имеем

$$d\alpha \sim k_3 C dt, \quad (7.7.27)$$

и если $k_3 C$ отрицательно, то α переходит в область отрицательных значений. В этом случае коэффициент при $dW(t)$ в (7.7.26) становится мнимым и интерпретация результата без дополнительных пояснений оказывается невозможной.

Разумеется, если рассматривать СДУ как уравнение для *комплексной* переменной

$$\alpha = \alpha_x + i\alpha_y, \quad (7.7.28)$$

то оно вовсе не лишается смысла, а просто представляет собой теперь уже пару уравнений для переменных α_x и α_y . Однако соответствующее УФП — это не уравнение (7.7.16) для одной переменной, а уравнение для двух переменных. Такое УФП можно вывести, используя различные варианты представления Пуассона, к которым мы сейчас и перейдем.

7.7.1. РАЗНОВИДНОСТИ ПРЕДСТАВЛЕНИЙ ПУАССОНА

Рассмотрим одномерный случай и запишем

$$P(x) = \int_{\mathcal{D}} d\mu(\alpha)(e^{-\alpha}\alpha^x/x!)f(\alpha). \quad (7.7.29)$$

Здесь $\mu(\alpha)$ есть мера, которую можно выбрать одним из трех способов, и каждый из этих путей приведет к полезному результату; \mathcal{D} обозначает область интегрирования и может принимать различную форму в зависимости от выбора меры.

7.7.2. ДЕЙСТВИТЕЛЬНЫЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ ПУАССОНА

Здесь мы выбираем

$$d\mu(\alpha) = d\alpha \quad (7.7.30)$$

и в качестве \mathcal{D} берем отрезок действительной оси. Как отмечалось в рассмотренном примере, это представление существует не всегда, но когда оно существует, возможна простая интерпретация на языке уравнений Фоккера — Планка.

7.7.3. КОМПЛЕКСНЫЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ ПУАССОНА

Здесь

$$d\mu(\alpha) = d\alpha \quad (7.7.31)$$

и \mathcal{D} представляет собой некоторый контур C на комплексной плоскости. Можно показать, что это представление существует при некоторых ограничительных условиях. Действительно, вместо (7.7.18) мы можем взять

$$f_y(\alpha) = \frac{y!}{2\pi i} \alpha^{-y-1} e^{\alpha}; \quad (7.7.32)$$

и C охватывает начало координат. Это значит, что

$$P_y(x) = \frac{1}{2\pi i} \oint_C d\alpha \frac{y!}{x!} \alpha^{x-y-1} = \delta_{x,y}. \quad (7.7.33)$$

С помощью надлежащего суммирования мы можем выразить данную $P(x)$ через $f(\alpha)$, определяемую как

$$f(\alpha) = \frac{1}{2\pi i} \sum_y P(y) e^{\alpha} \alpha^{-y-1} y! . \quad (7.7.34)$$

Если $P(y)$ таковы, что для всех y величина $y!P(y)$ ограничена, то ряд имеет конечный радиус сходимости, внутри которого $f(\alpha)$ аналитическая. Выбрав контур C так, чтобы он был внутри круга сходимости, мы можем осуществить интегрирование под знаком суммы и найти, что $P(x)$ дается выражением

$$P(x) = \oint_C d\alpha (e^{-\alpha} \alpha^x / x!) f(\alpha) . \quad (7.7.35)$$

a) Пример: реакции (1) $A + X \rightleftharpoons 2X$; (2) $B + X \rightleftharpoons C$

Воспользуемся обозначениями разд. 7.7 и выделим три случая в зависимости от величины δ . Параметр δ определяет направление реакций (7.7.14) при существовании стационарного состояния. Если $\delta > 0$, то при стационарном значении x в реакции (1) производится вещество X , а в реакции (2) поглощается X . Когда $\delta = 0$, обе реакции порознь находятся в равновесии: мы имеем дело с химическим равновесием. При $\delta < 0$ в реакции (1) X расходуется, а в реакции (2) производится.

1) $\delta > 0$. Согласно (7.7.24), это является условием того, что $f_s(\alpha)$ действительно является квазивероятностью на действительном интервале $(0, k_2 A / k_4)$. В этом диапазоне коэффициент диффузии $(k_2 A \alpha - k_4 \alpha^2)$ положителен. Детерминированное среднее α , определяемое равенством

$$\alpha = \frac{k_2 A - k_1 B + [(k_2 A - k_1 B)^2 + 4k_3 k_4 C]^{1/2}}{2k_4} \quad (7.7.36)$$

лежит *внутри* интервала $(0, k_2 A / k_4)$. Таким образом, мы имеем дело с истинным УФП, а $f_s(\alpha)$ обращается в нуль на обоих концах интервала и имеет пик вблизи детерминированного устойчивого состояния.

2) $\delta = 0$. Поскольку обе реакции теперь порознь уравновешены, мы можем ожидать существование пуассоновского стационарного состояния. Заметим, что $f_s(\alpha)$ в этом случае имеет полюс при $\alpha = k_2 A / k_4$, и в качестве области изменения α выберем контур на комплексной плоскости, охватывающий этот полюс. Поскольку контур замкнут, при интегрировании не возникает граничных членов, и $P_s(x)$, полученная в результате выбора этого вида представления Пуассона, с очевидностью удовлетворяет управляющему уравнению для стационарного со-

стояния. С помощью теории вычетов можно показать, что

$$P_s(x) = \frac{e^{-\alpha_0} \alpha_0^x}{x!}, \quad (7.7.37)$$

где

$$\alpha_0 = k_2 A / k_4.$$

3) $\delta < 0$. Здесь мы сталкиваемся с очень интересными явлениями. Стационарное решение (7.7.22) уже не удовлетворяет условию $\delta > 0$. Если, однако, в качестве области изменения α выбирается контур C на комплексной плоскости (рис. 7.3), и мы пользуемся комплексным представлением Пуассона, то $P_s(x)$ в виде

$$P_s(x) = \int_C d\alpha f_s(\alpha) \frac{e^{-\alpha} \alpha^x}{x!} \quad (7.7.38)$$

является решением управляющего уравнения. Детерминированное стационарное состояние теперь достигается в точке на действительной оси справа от сингулярности $\alpha = k_2 A / k_4$, и асимптотические оценки средних значений, моментов и т. п. могут быть получены путем такого выбора C , чтобы этот контур проходил через седловую точку. Сделав это, мы найдем, что дисперсия α , определенная как

$$D\{\alpha\} = \langle \alpha^2 \rangle - \langle \alpha \rangle^2, \quad (7.7.39)$$

отрицательна, так что

$$D\{x\} = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = \langle \alpha^2 \rangle - \langle \alpha \rangle^2 + \langle \alpha \rangle < \langle x \rangle. \quad (7.7.40)$$

Это означает, что стационарное состояние уже, чем распределение Пуассона. Следует, наконец, заметить, что все три случая можно получить из рассмотрения контура C . В случае, когда $\delta = 0$, разрез из сингулярности $\alpha = k_2 A / k_4$ в $-\infty$ исчезает, и контур C можно превратить в простой контур вокруг полюса, в то время как при $\delta > 0$ сингулярная точка $\alpha = k_2 A / k_4$ становится интегрируемой, так что контур можно стянуть на разрез и рассматривать интеграл как разрыв-

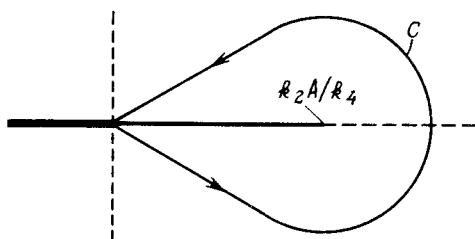


Рис. 7.3. Контур C на комплексной плоскости для отыскания (7.7.38).

ный интеграл на интервале $[0, k_2 A / k_1]$. (Когда δ является положительным целым числом, эти рассуждения следует видоизменить.)

б) Пример: реакции $B \xrightarrow{k_1} X, 2X \xrightarrow{k_2} A$

Уравнение Фоккера — Планка имеет вид

$$\frac{\partial f(\alpha, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial \alpha} [(\kappa_1 V - 2\kappa_2 V^{-1} \alpha^2) f(\alpha, t)] - \frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} [(\kappa_2 V^{-1} \alpha^2) f(\alpha, t)], \quad (7.7.41)$$

где $\kappa_1 V = k_1 B$; $\kappa_2 V^{-1} = k_2$; V — объем системы. Заметим, что коэффициент диффузии в вышеприведенном УФП отрицателен на всей вещественной оси.

Потенциальное решение (7.7.41) есть (с точностью до нормировочного множителя)

$$f(\alpha) = \alpha^{-2} \exp(2\alpha + aV^2/\alpha), \quad (7.7.42)$$

где $a = 2\kappa_2/\kappa_1$, а интегрирование по α должно осуществляться вдоль замкнутого контура, охватывающего начало координат. Разумеется, в принципе существует и другое решение, получаемое из полного рассмотрения стационарного УФП. Лишь потенциальное решение однозначно и позволяет нам выбрать подходящий контур, вдоль которого возможно интегрирование.

Итак, принимая $\alpha = \eta V$, получаем

$$\langle x^r \rangle_f = \frac{V^r \oint d\eta e^{V(2\eta + a/\eta)} \eta^{r-2}}{\oint d\eta e^{V(2\eta + a/\eta)} \eta^{-2}}. \quad (7.7.43)$$

Функция $(2\eta + a/\eta)$ не имеет максимума в детерминированном стационарном состоянии. На самом деле, в детерминированном стационарном состоянии она имеет минимум: $\eta = +(a/2)^{1/2}$. На комплексной плоскости η эта точка, однако, является седлом и дает преобладающий вклад в интеграл.

Таким образом, отрицательность коэффициента диффузии в (7.7.41) проявляется в появлении точки типа седла в детерминированном стационарном состоянии, из-за чего дисперсия X оказывается меньше $\langle x \rangle$.

Формула (7.7.43) позволяет вычислить все точные моменты стационарного состояния; результат имеет вид

$$\langle x^r \rangle_f = \left[V \left(\frac{a}{2} \right)^{1/2} \right]^r \frac{I_{r-1}(2(2a)^{1/2} V)}{I_1(2(2a)^{1/2} V)}, \quad (7.7.44)$$

где $I_r(2(2a)^{1/2}V)$ — модифицированные функции Бесселя. Используя для них разложение по большому аргументу, получим

$$\langle x \rangle = V(a/2)^{1/2} + \frac{1}{8} + O(1/V) \quad (7.7.45)$$

$$D\{x\} = \frac{3}{4} V(a/2)^{1/2} - \frac{1}{16} + O(1/V).$$

Эти асимптотические результаты могут быть также получены путем непосредственного применения метода скорейшего спуска к интегралам (7.7.43). В общем случае этот вид разложения всегда можно осуществить после того, как найдена явная зависимость объема от параметров.

в) Достоинства метода

Комплексное представление Пуассона дает стационарные решения в аналитической форме, удобной для использования как точных, так и асимптотических методов. Для решений, зависящих от времени, этот метод не столь полезен. Наибольшие достоинства, впрочем, открываются в случае исследования квантовомеханических систем, где комплексные представления позволяют получить информацию, недостижимую никаким иным способом. Об этом мы будем говорить в гл. 10.

7.7.4. ПОЛОЖИТЕЛЬНОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ ПУАССОНА

Здесь мы рассматриваем α как комплексную переменную $\alpha_x + i\alpha_y$,
 $d\mu(\alpha) = d^2\alpha = d\alpha_x d\alpha_y$,

$$(7.7.46)$$

а \mathcal{D} — это вся комплексная плоскость. В разд. 10.6.3 мы покажем, что для любой $P(x)$ существует положительная $f(\alpha)$, такая, что

$$P(x) = \int d^2\alpha (e^{-\alpha x/x!}) f(\alpha); \quad (7.7.47)$$

таким образом, всегда существует положительное представление P , которое, однако, не однозначно. Выберем, к примеру,

$$f_p(\alpha) = (2\pi\sigma^2)^{-1} \exp(-|\alpha - \alpha_0|^2/2\sigma^2). \quad (7.7.48)$$

Заметим, что если $g(\alpha)$ — аналитическая функция α , то можно записать

$$g(\alpha) = g(\alpha_0) + \sum_{n=1}^{\infty} g^{(n)}(\alpha_0)(\alpha - \alpha_0)^n/n! \quad (7.7.49)$$

Подставляя это равенство под знак интеграла, легко убедиться, что справедливо тождество

$$\int (2\pi\sigma^2)^{-1} d^2\alpha \exp(-|\alpha - \alpha_0|^2/2\sigma^2) g(\alpha) = g(\alpha_0), \quad (7.7.50)$$

поскольку

$$g^{(n)}(\alpha_0) \{ \exp(-|\alpha - \alpha_0|^2/2\sigma^2)(\alpha - \alpha_0)^n d^2\alpha = 0 \text{ при } n \geq 1.$$

Распределение Пуассона $e^{-\alpha}\alpha^x/x!$ является аналитической функцией от α , поэтому его можно взять в качестве $g(\alpha)$ и вследствие (7.7.50) получить

$$P_p(x) \equiv \int d^2\alpha f_p(\alpha) e^{-\alpha}\alpha^x/x! = e^{-\alpha_0}\alpha_0^x/x! . \quad (7.7.51)$$

Из (7.7.51) видим, что функции $f_p(\alpha)$ и $f(\alpha) = \delta(\alpha - \alpha_0)$ дают одно и то же распределение $P(x)$.

На практике эта неоднозначность является скорее достоинством, чем недостатком.

а) Уравнения Фоккера — Планка

Воспользуемся аналитичностью распределения Пуассона и его производящей функции, чтобы вывести уравнения Фоккера — Планка с положительными матрицами диффузии. УФП вида (7.7.9) возникает из уравнения для производящей функции

$$\partial_t G(s, t) = \int d^2\alpha f(\alpha, t) \left(\sum_a A_a \frac{\partial}{\partial \alpha_a} + \sum_{a,b} \frac{1}{2} B_{ab} \frac{\partial^2}{\partial \alpha_a \partial \alpha_b} \right) \exp \left[\sum_a (s_a - 1) \alpha_a \right]. \quad (7.7.52)$$

Учтем теперь в явном виде тот факт, что α является комплексной переменной

$$\alpha = \alpha_x + i\alpha_y, \quad (7.7.53)$$

и запишем также

$$A(\alpha) = A_x(\alpha) + iA_y(\alpha). \quad (7.7.54)$$

Далее,

$$\underline{B}(\alpha) = \underline{C}(\alpha)\underline{C}^T(\alpha) \quad (7.7.55)$$

и

$$\underline{C}(\alpha) = \underline{C}_x(\alpha) + i\underline{C}_y(\alpha). \quad (7.7.56)$$

Для краткости введем обозначения

$$\begin{aligned} \partial_a &= \frac{\partial}{\partial \alpha_a} \\ \partial_a^x &= \frac{\partial}{\partial \alpha_{x,a}} \\ \partial_a^y &= \frac{\partial}{\partial \alpha_{y,a}}. \end{aligned} \quad (7.7.57)$$

Благодаря аналитичности $\exp\left(\sum_a (s_a - 1)\alpha_a\right)$, в уравнении для производящей функции (7.7.52) мы всегда можем сделать замену

$$\partial_a \leftrightarrow \partial_a^x \leftrightarrow -i\partial_a^y. \quad (7.7.58)$$

Подставим теперь вместо B_{ab} формулу (7.7.54) и заменим ∂_a на ∂_a^x или $-i\partial_a^y$ сообразно с тем, какой индекс стоит при A или C . Получаем

$$\begin{aligned} \partial_t G(s, t) = & \int d^2\alpha f(\alpha, t) \{ [\sum_a (A_{a;x}\partial_a^x + A_{a;y}\partial_a^y) \\ & + \frac{1}{2} \sum_{a,b,c} (C_{a,c;x}C_{c,b;x}\partial_a^x\partial_b^x + C_{a,c;y}C_{c,b;y}\partial_a^y\partial_b^y) \\ & + 2C_{a,c;x}C_{c,b;y}\partial_a^x\partial_b^y] \exp[\sum_a (s_a - 1)\alpha_a] \}. \end{aligned} \quad (7.7.59)$$

Интегрируя по частям и отбрасывая поверхностные члены, приходим к УФП относительно переменных (α_x, α_y) :

$$\begin{aligned} \partial_t f(\alpha, t) = & [-\sum_a (A_{a;x}\partial_a^x + A_{a;y}\partial_a^y) + \frac{1}{2} \sum_{a,b,c} (C_{a,c;x}C_{c,b;x}\partial_a^x\partial_b^x \\ & + C_{a,c;y}C_{c,b;y}\partial_a^y\partial_b^y + 2C_{a,c;x}C_{c,b;y}\partial_a^x\partial_b^y)] f(\alpha, t). \end{aligned} \quad (7.7.60)$$

В пространстве удвоенной размерности это уравнение является УФП с положительно полуопределенной диффузией. Действительно, для переменных (α_x, α_y) вектор сноса есть

$$\mathcal{A}(\alpha) = [A_x(\alpha), A_y(\alpha)] , \quad (7.7.61)$$

а матрица диффузии —

$$\mathcal{B}(\alpha) = \begin{bmatrix} \underline{C}_x \underline{C}_x^T & \underline{C}_x \underline{C}_y^T \\ \underline{C}_y \underline{C}_x^T & \underline{C}_y \underline{C}_y^T \end{bmatrix} = \underline{\mathcal{L}}(\alpha) \underline{\mathcal{L}}(\alpha)^T , \quad (7.7.62)$$

где

$$\underline{\mathcal{L}}(\alpha) = \begin{bmatrix} \underline{C}_x & 0 \\ \underline{C}_y & 0 \end{bmatrix} , \quad (7.7.63)$$

и матрица $\underline{\mathcal{L}}(\alpha)$ с очевидностью является положительно полуопределенной.

б) Стохастическое дифференциальное уравнение

Если снос и диффузия определяются выражениями (7.7.61, 62), мы имеем стохастическое дифференциальное уравнение

$$\begin{bmatrix} d\alpha_x \\ d\alpha_y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_x(\alpha) \\ A_y(\alpha) \end{bmatrix} dt + \begin{bmatrix} \underline{C}_x dW(t) \\ \underline{C}_y dW(t) \end{bmatrix} , \quad (7.7.64)$$

где $W(t)$ есть винеровский процесс той же размерности, что и α_x . Заметим, что в обоих строках винеровский процесс один и тот же, так как матрица (7.7.63) содержит два нулевых элемента.

Объединив действительные и мнимые члены, получим СДУ для комплексной переменной α :

$$d\alpha = A(\alpha)dt + \zeta(\alpha)dW(t). \quad (7.7.65)$$

Разумеется, в точности это же СДУ получилось бы в результате применения обычных правил для преобразования уравнения Фоккера — Планка в стохастическое дифференциальное уравнение к УФП в представлении Пуассона (7.7.9), несмотря на то что $\zeta(\alpha)$ в используемом виде могла бы содержать комплексные элементы, если бы B не была положительно полуопределенной матрицей диффузии.

в) Примеры стохастических дифференциальных уравнений на комплексной плоскости

Рассмотрим вновь реакции (см. разд. 7.7б)



Использование положительного представления Пуассона в применении к этой системе дает нам СДУ, вытекающее из УФП (7.7.16):

$$d\alpha = [k_3C + (k_2A - k_1B)\alpha - k_4\alpha^2]dt + [2(k_2A\alpha - k_4\alpha^2)]^{1/2}dW(t). \quad (7.7.67)$$

В случае $\delta > 0$ мы замечаем, что шумовой член обращается в нуль в точках $\alpha = 0$ и $\alpha = k_2A/k_4$, положителен между этими точками, а снос таков, что точка α , достигая концов интервала, возвращается внутрь него. Таким образом, при $\delta > 0$ выражение (7.7.67) представляет собой действительное СДУ на действительном интервале $[0, k_2A/k_4]$.

В случае $\delta < 0$ стационарная точка лежит вне интервала $[0, k_2A/k_4]$, и точка, изначально находящаяся на этом интервале, будет двигаться, подчиняясь уравнению (7.7.67), пока не достигнет правого конца интервала. Здесь шум обратится в нуль, а снос продолжает вести точку вправо. После выхода точки за пределы интервала шум становится мнимым, и точка будет двигаться по траектории, подобной изображенной на рис. 7.4, пока не вернется обратно на интервал $[0, k_2A/k_4]$.

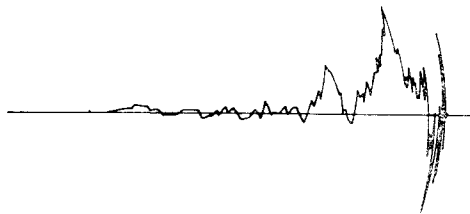


Рис. 7.4. Траектория точки, движение которой подчиняется стохастическому дифференциальному уравнению (7.7.67).

Случай $\delta = 0$ не слишком отличается от предыдущего: по достижении правого конца интервала в нуль обращаются как шум, так и снос, и точка остается здесь.

Для системы

$$\begin{aligned} B &\rightarrow X \\ 2X &\rightarrow A \end{aligned} \quad (7.7.68)$$

СДУ, вытекающее из УФП (7.7.41), имеет вид

$$d\eta/dt = \kappa_1 - 2\kappa_2\eta^2 + i\varepsilon(2\kappa_2)^{1/2}\eta\zeta(t), \quad (7.7.69)$$

где $\alpha = \eta V$ и $\varepsilon = V^{-1/2}$.

СДУ (7.7.69) может моделироваться на ЭВМ, что позволяет получить график движения на комплексной плоскости η (см. рис. 7.5). Видно, что точка остается вблизи $\text{Re}\{\alpha\} = (a/2)^{1/2}$ и флуктуирует в основном в обе стороны параллельно мнимой оси, вследствие чего дисперсия α оказывается отрицательной.

7.7.5. ВРЕМЕННЫЕ КОРРЕЛЯЦИОННЫЕ ФУНКЦИИ

Временная корреляционная функция для пуассоновской переменной α отличается от таковой для переменной x . Это можно видеть на примере реакции $X \rightleftharpoons Y$, для которой УФП в представлении Пуассона не

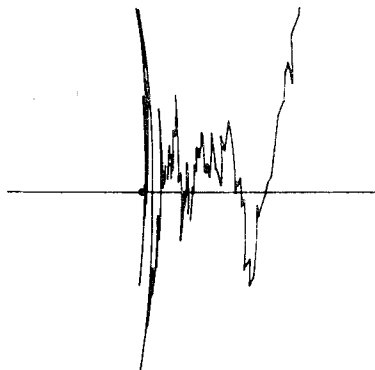


Рис. 7.5. Траектория точки, движение которой описывается стохастическим дифференциальным уравнением (7.7.69).

содержит диффузионного члена. Пуассоновская переменная, следовательно, не флуктуирует. Здесь мы покажем, какая связь существует между указанными корреляционными функциями. Для ясности рассуждения будут проведены лишь для случая одной переменной.

Определим

$$\langle \alpha(t)\alpha(s) \rangle = \int d\mu(\alpha)d\mu(\alpha')\alpha\alpha'f(\alpha, t|\alpha', s)f(\alpha', s). \quad (7.7.70)$$

Заметим, что

$$f(\alpha, s|\alpha', s) = \delta_\mu(\alpha - \alpha')$$

где $\delta_\mu(\alpha)$ — дельта-функция, соответствующая мере $\mu(\alpha)$. Это значит, что

$$\int d\mu(\alpha) e^{-\alpha(\alpha^x/x!)} f(\alpha, s|\alpha', s) = e^{-\alpha'\alpha^x/x!},$$

откуда

$$\int d\mu(\alpha) \alpha f(\alpha, t|\alpha', s) = \sum_{x,x'} x P(x, t|x', s) e^{-\alpha'(\alpha')^x/x'!}. \quad (7.7.71)$$

Следовательно,

$$\begin{aligned} \langle \alpha(t)\alpha(s) \rangle &= \sum_{x,x'} x P(x, t|x', s) \int d\mu(\alpha') (\alpha'^{x'+1} e^{-\alpha'/x'!}) f(\alpha', s) \\ &= \sum_{x,x'} x P(x, t|x', s) \int d\mu(\alpha') \left[\left(-\alpha' \frac{\partial}{\partial \alpha'} + x' \right) ((\alpha')^x e^{-\alpha'/x'!}) \right] f(\alpha', s) \\ &= \sum_{x,x'} x x' P(x, t|x', s) P(x', s) \end{aligned} \quad (7.7.72)$$

$$- \int d\mu(\alpha') f(\alpha', s) \alpha' \frac{\partial}{\partial \alpha'} \sum_{x,x'} x P(x, t|x', s) ((\alpha')^x e^{-\alpha'/x'!}). \quad (7.7.73)$$

По определению,

$$\langle \alpha(t) | [\alpha', s] \rangle \equiv \int d\alpha \alpha f(\alpha, t|\alpha', s) \quad (7.7.74)$$

как среднее $\alpha(t)$ при начальном условии для α' в s . Тогда второй член можно записать в виде

$$- \int d\mu(\alpha') \alpha' \frac{\partial}{\partial \alpha'} \langle \alpha(t) | [\alpha', s] \rangle f(\alpha', s) \equiv - \left\langle \alpha' \frac{\partial}{\partial \alpha'} \langle \alpha(t) | [\alpha', s] \rangle \right\rangle, \quad (7.7.75)$$

откуда

$$\langle x(t)x(s) \rangle = \langle \alpha(t)\alpha(s) \rangle + \left\langle \alpha' \frac{\partial}{\partial \alpha'} \langle \alpha(t) | [\overline{\alpha'}, \overline{s}] \rangle \right\rangle. \quad (7.7.76)$$

Переходя к случаю многих переменных и учитывая, что всегда

$$\langle \mathbf{x}(t) \rangle = \langle \boldsymbol{\alpha}(t) \rangle,$$

получаем

$$\langle x_a(t), x_b(s) \rangle = \langle \alpha_a(t), \alpha_b(s) \rangle + \left\langle \alpha'_b \frac{\partial}{\partial \alpha'_b} \langle \alpha_a(t) | [\alpha', s] \rangle \right\rangle. \quad (7.7.77)$$

Эта формула явно отражает тот факт, что представление Пуассона определяет процесс, тесно связанный с уравнением рождения — гибели, но не изоморфный последнему. Интересующие стохастические величины, такие, как временные корреляционные функции, все могут быть рассчитаны, причем они не выражаются непосредственно через соответствующие величины для пуассоновской переменной¹⁾.

а) Интерпретация на языке статистической механики

Здесь у читателя предполагается знакомство со статистической механикой химических систем. Если мы рассматриваем систему, состоящую из химически реагирующих компонентов A, B, C, \dots , то функ-

¹⁾ Логично функцию $f(\alpha, t | \alpha', s)$, входящую в предыдущие равенства, определить обычным образом при помощи двумерной функции:

$$f(\alpha, t; \alpha', s) = f(\alpha, t | \alpha', s) f(\alpha', s), \quad (1)$$

причем двумерная функция определяется равенством

$$P(x, t; y, s) = \int d\mu(\alpha) d\mu(\alpha') e^{-\alpha - \alpha'} \frac{\alpha^x (\alpha')^y}{x! y!} f(\alpha, t; \alpha', s), \quad (2)$$

аналогичным (7.7.1). Тогда будем иметь

$$\int d\mu(\alpha) d\mu(\gamma) e^{-\alpha - \gamma} \frac{\alpha^x \gamma^y}{x! y!} f(\alpha, t | \gamma, s) f(\gamma, s) = P(x, t | y, s) \times \int d\mu(\gamma) e^{-\gamma} \frac{\gamma^y}{y!} f(\gamma, s). \quad (3)$$

Умножая обе части последнего равенства на x и суммируя по x, y , находим

$$\int d\mu(\alpha) d\mu(\gamma) \alpha f(\alpha, t | \gamma, s) f(\gamma, s) = \sum_{x, y} x P(x, t | y, s) \int d\mu(\gamma) e^{-\gamma} \frac{\gamma^y}{y!} f(\gamma, s).$$

Если здесь положить $f(\gamma, s) = \delta(\gamma - \alpha')$, то получим (7.7.71). Однако нужно отметить, что равенства (7.7.71 — 73) несправедливы (в случае определения (1), (2)) при функциях $f(\gamma, s)$, отличных от дельта-функции. Из (2) легко получить равенство $\langle x(t)x(s) \rangle = \langle \alpha(t)\alpha(s) \rangle$, противоречащее (7.7.77).

Из (3) видно, что $f(\alpha, t | \gamma, s)$ оказывается зависящей от $f(\gamma, s)$, что свидетельствует о немарковском характере процесса $\alpha(t)$. В самом деле, в предположении независимости от функции $f(\gamma, s)$ после подстановки $f(\gamma, s) = \varphi(\gamma) / \int \varphi(\alpha) d\alpha$ и варьирования по $\varphi(\alpha)$ из (3) получаем $P(x, t | x', s) = \int d\mu(\alpha) e^{-\alpha} (\alpha^x / x!) f(\alpha, t | \gamma, s)$. Это равенство абсурдно, так как его правая часть не зависит от x' , а левая от $\gamma \equiv \alpha'$. — *Прим. ред.*

ция распределения для большого канонического ансамбля дается выражением

$$P(I) = \exp \{ \beta [\Omega + \sum_i \mu_i x_i(I) - E(I)] \}, \quad (7.7.78)$$

где I — показатель, описывающий микроскопическое состояние системы, $x_i(I)$ — число молекул вещества X в состоянии I , $E(I)$ — энергия состояния, μ_i — химический потенциал компонента X_i , Ω — нормировочный множитель, и

$$\beta = 1/kT. \quad (7.7.79)$$

Тот факт, что компоненты могут реагировать между собой, означает, что между химическими потенциалами существуют определенные соотношения, поскольку состояние I может перейти в состояние I , лишь если

$$\sum_i \nu_i^A x_i(I) = \sum_i \nu_i^A x_i(J), \quad A = 1, 2, 3, \dots, \quad (7.7.80)$$

где ν_i^A суть некоторые целые числа. Соотношения (7.7.80) отражают стехиометрические ограничения.

Большой микроканонический ансамбль для реагирующей системы определяется из требования

$$\sum_i \nu_i^A x_i(I) = \tau^A, \quad (7.7.81)$$

для некоторых τ^A , в то время как большой канонический ансамбль определяется из требования

$$\sum_i P(I) \sum_i \nu_i^A x_i(I) \equiv \sum_i \nu_i^A \langle x_i \rangle = \tau^A. \quad (7.7.82)$$

Максимизация энтропии при условии (7.7.82) (и обычных условиях фиксированных полной вероятности и средней энергии) дает распределение (7.7.78) для большого канонического ансамбля, в котором химические потенциалы удовлетворяют соотношениям

$$\mu_i = \sum_A k_A \nu_i^A. \quad (7.7.83)$$

Если перейти к пределу идеального раствора или идеального газа, где пренебрегается энергиями взаимодействий (но не кинетической или внутренней энергией), то разницы между функциями распределения для реагирующей и нереагирующей системы нет, если не считать требования, чтобы химические потенциалы были представимы в виде (7.7.83).

Микроканонический ансамбль не так прост, поскольку ограничения должны быть явно учтены в множителе вида

$$\prod_A \delta[\sum_i \nu_i^A x_i(I), \tau^A], \quad (7.7.84)$$

и функция распределения будет своей для каждого вида реагирующей системы (включая и нереагирующую систему как частный случай).

Распределение по полным количествам x молекул реагирующих компонентов в большом каноническом ансамбле для идеальной реагирующей системы легко оценивается; оно имеет вид

$$P(\mathbf{x}) = \exp[\beta(\Omega + \sum_i \mu_i x_i)] \sum_I \prod_i \delta[x_i(I), x_i] \exp[-\beta E(I)]. \quad (7.7.85)$$

Статистическая сумма имеет тот же вид, что и для канонического ансамбля для идеальной нереагирующей смеси, поэтому

$$P(\mathbf{x}) = \exp[\beta(\Omega + \sum_i \mu_i x_i)] \prod_i \frac{1}{x_i!} \left\{ \sum_k \exp[-\beta E_k(i)] \right\}^{x_i}, \quad (7.7.86)$$

где $E_k(i)$ суть собственные энергетические состояния одной молекулы вещества A . В результате мы получаем многомерное распределение Пуассона, средние значения которого даются выражением

$$\log \langle x_i \rangle = \beta \mu_i - \log \left[\sum_k e^{-\beta E_k(i)} \right], \quad (7.7.87)$$

которое, как известно, в сочетании с условием (7.7.82) выражает закон действующих масс.

Микроканонический ансамбль получают, максимизируя энтропию при более сильном ограничении (7.7.81), которое включает в себя и более слабое ограничение (7.7.82). Таким образом, распределение чисел молекул различных сортов, соответствующее микроканоническому ансамблю, будет даваться выражением

$$P(\mathbf{x}) \propto \left\{ \prod_i \frac{1}{x_i!} \left[\sum_k e^{-\beta E_k(i)} \right]^{x_i} \right\} \sum_A \delta[\sum_i \nu_i^A x_i, \tau^A]. \quad (7.7.88)$$

Говоря на языке представления Пуассона, мы только что показали, что в равновесной ситуации квазивероятность (по большому каноническому ансамблю) есть

$$f(\boldsymbol{\alpha})_{eq} = \delta[\boldsymbol{\alpha} - \boldsymbol{\alpha}_{eq}], \quad (7.7.89)$$

поскольку распределение в x -пространстве пуассоново. Для временных корреляционных функций отсюда вытекают два следствия.

1) Переменные $\boldsymbol{\alpha}(t)$ и $\boldsymbol{\alpha}(s)$ являются нефлуктуирующими величинами со значениями $\boldsymbol{\alpha}(eq)$. Поэтому

$$\langle \alpha_r(t), \alpha_s(s) \rangle_{eq} = 0. \quad (7.7.90)$$

2) Равновесное среднее во втором члене в (7.7.77) тривиально. Поэтому

$$\langle x_a(t), x_b(s) \rangle = \left[\alpha'_b \frac{\partial}{\partial \alpha'_a} \langle \alpha_a(t) | [\alpha', s] \rangle \right]_{-\alpha' = \alpha(eq)}. \quad (7.7.91)$$

Полученный результат в точности соответствует теореме Бернара и Каллена [7.11], которая связывает двухвременную корреляционную функцию с производной от среднего значения величины по термодинамически сопряженной переменной.

Рассмотрим систему, в которой $x_1(I)$, $x_2(I)$ и т. п. суть количества молекул веществ X_1 , X_2 и т. п. в состоянии системы I , и эти вещества могут реагировать друг с другом. Тогда, как показано выше, в большом каноническом ансамбле равновесная функция распределения есть

$$Z^{-1}(\mu) \exp \left[\left\{ \sum_i \mu_i x_i(I) - E(I) \right\} / kT \right], \quad (7.7.92)$$

где

$$Z(\mu) = \exp(-\Omega\beta), \quad (7.7.93)$$

— большая статистическая сумма. Как мы говорили, химические потенциалы μ_i для реагирующей системы не могут выбираться произвольно, но должны подчиняться стехиометрическим соотношениям (7.7.82) для разрешенных реакций.

Определим далее величины

$$\langle x_i, t | [I, s] \rangle \quad (7.7.94)$$

как средние значения величин x_i в момент t при условии, что в момент s система была в состоянии I . Тогда нас будет интересовать среднее значение (7.7.94) по распределению (7.7.92), а именно

$$\begin{aligned} \langle x_i, t | [\mu, s] \rangle &= \sum_J \langle x_i, t | [J, s] \rangle Z^{-1}(\mu) \\ &\times \exp \left\{ \frac{1}{kT} \left[\sum_j \mu_j x_j(J) - E(J) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (7.7.95)$$

Когда химические потенциалы удовлетворяют равновесным ограничениям, эта величина не зависит от времени и равна равновесному среднему x_i ; в других случаях она будет зависеть от времени. После некоторых преобразований найдем

$$\left[kT \frac{\partial}{\partial \mu_j} \langle x_i, t | [\mu, s] \rangle \right]_{\mu = \mu(eq)} = \langle x_i(t), x_j(s) \rangle_{eq}. \quad (7.7.96)$$

Левая часть здесь есть функция отклика среднего значения на изменение химических потенциалов вблизи равновесных значений и служит мерой диссипации, в то время как правая часть, равновесная двухвременная корреляционная функция, служит мерой флуктуаций.

Для того чтобы установить связь с результатом (7.7.91), заметим, что в теории идеальных растворов химические потенциалы определяются как

$$\mu_i(\langle \mathbf{x} \rangle) = kT \log \langle x_i \rangle + \text{const}. \quad (7.7.97)$$

С учетом этого (7.7.96) принимает вид

$$\langle x_i(t), x_j(s) \rangle = \left[\langle x_j \rangle \frac{\partial}{\partial \langle x_j \rangle} \langle x_i, t | [\boldsymbol{\mu}(\langle \mathbf{x} \rangle), s] \rangle \right]_{\langle \mathbf{x} \rangle = \langle \mathbf{x} \rangle_{eq}}. \quad (7.7.98)$$

Поскольку в теории идеальных растворов распределение x_i пуассоново, в этом пределе

$$\langle x_i, t | [\boldsymbol{\mu}(\langle \mathbf{x} \rangle), s] \rangle = \langle \alpha_i, t | [\boldsymbol{\alpha}', s] \rangle, \quad (7.7.99)$$

где $\boldsymbol{\alpha}' = \langle \mathbf{x} \rangle$. Таким образом, (7.7.98) принимает вид

$$\langle x_i(t), x_j(s) \rangle = \left[\alpha'_j \frac{\partial}{\partial \alpha'_j} \langle \alpha_i, t | [\boldsymbol{\alpha}', s] \rangle \right]_{\alpha' = \alpha'_{(eq)}}, \quad (7.7.100)$$

и (7.7.91) оказывается частным случаем (7.7.98) в пределе идеального раствора.

Общую формулу (7.7.77) можно рассматривать как обобщение результата Бернара — Каллена на системы, не находящиеся в термодинамическом равновесии. Эта формула заметно отличается от равновесного результата, и два члена можно интерпретировать следующим образом. Второй член является равновесным вкладом (функцией отклика), но, поскольку система не находится в четко выраженном равновесном состоянии, мы берем среднее по равновесным результатам для различных состояний в α -пространстве. Первый член описывает вклад от флуктуаций в α -пространстве и не связан непосредственно с функцией отклика. Он отражает флуктуации вне равновесия.

б) Линеаризованные результаты

Общее дифференциальное уравнение, возникающее на основе положительного представления Пуассона и соответствующее УФП (7.7.12), имеет вид

$$d\boldsymbol{\eta} = \hat{A}(\boldsymbol{\eta})dt + \varepsilon \hat{C}(\boldsymbol{\eta})d\mathbf{W}(t), \quad (7.7.101)$$

где

$$\hat{C}\hat{C}^T = \hat{\mathbf{B}}. \quad (7.7.102)$$

Мы можем осуществить разложение по малому шуму (с учетом первого порядка) вблизи стационарного состояния $\boldsymbol{\eta}$, пользуясь методом

разд. 6.3. Записывая

$$\eta(t) = \bar{\eta} + \varepsilon \eta_1(t) \quad (\varepsilon = V^{-1/2}) , \quad (7.7.103)$$

с точностью до низшего порядка имеем

$$\hat{A}(\bar{\eta}) = 0 \quad (7.7.104)$$

$$d\eta_1 = -F\eta_1 dt + \bar{G} dW(t) ,$$

где

$$F_{rs} = -\frac{\partial}{\partial \eta_s} \hat{A}_r(\bar{\eta}) \quad (7.7.105)$$

$$\bar{G} = \hat{C}(\bar{\eta}) .$$

Далее ,

$$\langle \alpha_r(t), \alpha_s(0) \rangle_s = V \sum_{r'} [\exp(-Ft)]_{rr'} \langle \eta_{r',1}, \eta_{s,1} \rangle_s \quad (7.7.106)$$

и

$$\frac{\partial}{\partial \alpha'_s} \langle \alpha_r(t) | [\alpha', 0] \rangle = \frac{\partial}{\partial \eta'_{s,1}} \langle \eta_{r,1}(t) | [\eta'_1, 0] \rangle = [\exp(-Ft)]_{r,s} . \quad (7.7.107)$$

Следовательно,

$$\langle x_r(t), x_s(0) \rangle = V \sum_{r'} [\exp(-Ft)]_{rr'} [\langle \eta_{r',1}, \eta_{s,1} \rangle_s + \delta_{r',s} \bar{\eta}_s] \quad (7.7.108)$$

$$= \sum_{r'} \exp(-Ft)_{r,r'} \langle x_{r'} , x_s \rangle_s . \quad (7.7.109)$$

Таким образом, линеаризованный результат согласуется с теоремой регрессии (разд. 3.7.4). Корреляционные функции для ряда систем были рассчитаны в [7.10].

7.7.6. ТРИМОЛЕКУЛЯРНЫЕ РЕАКЦИИ

В разд. 7.1.3 мы рассматривали реакцию, которая включала



и построили соответствующее уравнение рождения — гибели. В химии, однако, хорошо известно, что подобные тримолекулярные события имеют исчезающе малую вероятность и осуществляются ступенчато через короткоживущий промежуточный продукт. Реакция (7.7.110), скорее всего, происходит в два этапа



каждый из которых представляет собой бимолекулярную реакцию.

Константы скорости мы положили равными единице, за исключением γ (постоянной распада Y), которую считаем очень большой. Таким образом, Y оказывается короткоживущим промежуточным соединением. Детерминистические уравнения кинетики имеют вид

$$\frac{dx}{dt} = ay - xy + 2(\gamma y - x^2) \quad (7.7.112)$$

$$\frac{dy}{dt} = x^2 - \gamma y ,$$

и, полагая $y = x^2/\gamma$ в обычной процедуре адиабатического исключения, получаем

$$\frac{dx}{dt} = (ax^2 - x^3)/\gamma . \quad (7.7.113)$$

Хотя в детерминистическом смысле процедура вполне проста, нельзя с уверенностью утверждать, что стохастическое управляющее уравнение в виде, использованном в разд. 7.1.3, имеет силу в пределе адиабатического исключения. Приспособить методы адиабатического исключения, использованные в гл. 6, к управляющему уравнению не так легко, однако они могут быть прямо применены к УФП в представлении Пуассона.

а) Уравнение Фоккера — Планка для тримолекулярной реакции

Для того чтобы реакция (7.7.110), в которой прямая и обратная константы скорости равны $1/\gamma$, соответствовала (7.7.113), УФП в представлении Пуассона должно быть преобразовано из (7.7.4) к виду

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{1}{\gamma} \left\{ \left(-\frac{\partial}{\partial \alpha} + 2\frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} - \frac{\partial^3}{\partial \alpha^3} \right) [\alpha^2(a - \alpha)] f \right\} \quad (7.7.114)$$

и содержит производные *третьего порядка*. Какой бы вид представления Пуассона мы ни выбрали, не существует истинно вероятностной интерпретации на языке какого-либо действительного стохастического процесса в α -пространстве. В следующем разделе мы введем понятие *шума третьего порядка* и покажем, каким образом можно по-прежнему использовать вероятностные методы и стохастические дифференциальные уравнения.

б) Адиабатическое исключение

С учетом правил, выработанных в (7.7.9), уравнение Фоккера — Планка для системы (7.7.111) с заменой

$$\begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} \leftrightarrow \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix}$$

имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial \alpha} = & -\frac{\partial}{\partial \alpha} [(a - \alpha)\beta + 2(\gamma\beta - \alpha^2)] + \frac{\partial}{\partial \beta} (\gamma\beta - \alpha^2) \\ & + \frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} (\gamma\beta - \alpha^2) + \frac{\partial^2}{\partial \alpha \partial \beta} [(a - \alpha)\beta]. \end{aligned} \quad (7.7.115)$$

Далее адиабатическое исключение осуществляется так же, как в разд. 6.6.1. Определим новые переменные

$$\begin{aligned} x &= \alpha \\ y &= \gamma\beta - \alpha^2, \end{aligned} \quad (7.7.116)$$

и тогда после замены

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \alpha} &= \frac{\partial}{\partial x} - 2x \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial \beta} &= \gamma \frac{\partial}{\partial y} \end{aligned} \quad (7.7.117)$$

УФП принимает вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial f(x, y)}{\partial t} = & \left\{ -\left(\frac{\partial}{\partial x} - 2x \frac{\partial}{\partial y} \right) \left[\frac{(a - x)(y + x^2)}{\gamma} + 2y \right] + \gamma \frac{\partial}{\partial y} y \right. \\ & \left. + \left(\frac{\partial}{\partial x} - 2x \frac{\partial}{\partial y} \right) \left(\frac{\partial}{\partial x} - 2x \frac{\partial}{\partial y} \right) y + \left(\frac{\partial}{\partial x} - 2x \frac{\partial}{\partial y} \right) \left(\frac{\partial}{\partial y} \right) [(y + x^2)(a - x)] \right\} f. \end{aligned} \quad (7.7.118)$$

Поскольку нам необходимо исключить y , должен существовать хорошо определенный предел оператора L_1 , который управляет движением при фиксированном x . Этот оператор имеет вид

$$\gamma \frac{\partial}{\partial y} y + \frac{\partial^2}{\partial y^2} [4x^2 y - 2x(y + x^2)(a - x)], \quad (7.7.119)$$

и в пределе больших γ мы приходим к детерминированному движению. При

$$y = v\gamma^{-1/2} \quad (7.7.120)$$

формула (7.7.119) переходит в

$$\begin{aligned} \gamma L_1(\gamma) &= \gamma \left\{ \frac{\partial}{\partial v} v + \frac{\partial^2}{\partial v^2} [2x^3(x - a) + (4x^2 - 2x)v\gamma^{-1/2}] \right\} \\ &\xrightarrow{\gamma \rightarrow \infty} \gamma \left\{ \frac{\partial}{\partial v} v + \frac{\partial^2}{\partial v^2} [2x^3(x - a)] \right\} \\ &\equiv \gamma L_1. \end{aligned} \quad (7.7.121)$$

Используя это выражение, мы определяем

$$\gamma^{-1}L_3 = -\gamma^{-1} \frac{\partial}{\partial x} [x^2(a-x)] , \quad (7.7.122)$$

$$\begin{aligned} L_2(\gamma) = & -\frac{\partial}{\partial x} [(a-x)v\gamma^{-3/2} + 2v\gamma^{-1/2}] - \frac{\partial}{\partial x} 2x \frac{\partial}{\partial v} v - 2x \frac{\partial}{\partial v} \frac{\partial}{\partial x} v \\ & + \gamma^{-1/2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} v + \gamma^{1/2} \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial v} [(a-x)(x^2 + v\gamma^{-1/2})] \end{aligned} \quad (7.7.123)$$

и

$$\frac{\partial f}{\partial t} = [\gamma^{-1}L_3 + L_2(\gamma) + \gamma L_1(\gamma)]f. \quad (7.7.124)$$

Оператор P осуществляет проекцию на нуль-пространство L_1 , а поскольку L_1 зависит от x , мы имеем

$$L_3P \neq PL_3. \quad (7.7.125)$$

Это значит, что уравнение движения для $Pf \equiv g$ находится с помощью тех же вычислений, какие использовались в разд. 6.5.4. Находим

$$\begin{aligned} s\tilde{g}(s) = & \gamma^{-1}PL_3\tilde{g}(s) + P[L_2(\gamma) + \gamma^{-1}L_3][s - \gamma L_1 - (1-P)L_2(\gamma) - \gamma^{-1}(1-P)L_3]^{-1} \\ & \times [L_2(\gamma) + \gamma^{-1}(1-P)L_3]\tilde{g}(s) + g(0). \end{aligned} \quad (7.7.126)$$

Заметим, однако, что, поскольку для всякой функции от v

$$P\phi(v) = p_x(v) \int dv \phi(v) , \quad (7.7.127)$$

где $p_x(v)$ удовлетворяет

$$L_1p_x(v) = 0 , \quad (7.7.128)$$

все члены в $PL_2(\gamma)$, содержащие $\partial/\partial v$, обращаются в нуль. Таким образом, до высшего порядка по γ ,

$$PL_2(\gamma) = \gamma^{-1/2} \left(-2v \frac{\partial}{\partial x} + v \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right). \quad (7.7.129)$$

Множитель $[]^{-1}$ в (7.7.126) имеет асимптотику $-\gamma^{-1}L_1^{-1}$, и единственный член в оставшейся квадратной скобке, который может сделать все выражение равным по порядку величины γ^{-1} , как член с L_3 , это член порядка $\gamma^{1/2}$ в $L_2(\gamma)$, т. е.

$$\gamma^{1/2} \frac{\partial}{\partial x} [(a-x)x^2] \frac{\partial}{\partial v}. \quad (7.7.130)$$

Таким образом, в пределе больших γ (7.7.126) принимает вид

$$s\tilde{g}(s) = \gamma^{-1} \left\{ PL_3\tilde{g} - P \left[-2 \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right] v L_1^{-1} \frac{\partial}{\partial x} \left[(a-x)x^2 \frac{\partial}{\partial v} \right] p_x(v)\tilde{p} \right\} + g(0), \quad (7.7.131)$$

где мы записали

$$g = p_x(v)p, \quad \tilde{g} = p_x(v)\tilde{p}. \quad (7.7.132)$$

Теперь мы подошли к центральной проблеме: определению интеграла

$$\int dv' v' L_1^{-1} \frac{\partial}{\partial x} (a-x)x^2 \frac{\partial}{\partial v'} p_x(v'), \quad (7.7.133)$$

который возникает при вычислении второго члена в фигурных скобках в (7.7.131). Было бы желательно вынести $\partial/\partial x$ из-под интеграла, но, поскольку $\partial/\partial x$ и L_1 не коммутируют, эта операция требует осторожности. Итак,

$$\left[L_1^{-1}, \frac{\partial}{\partial x} \right] = L_1^{-1} \left[\frac{\partial}{\partial x}, L_1 \right] L_1^{-1}, \quad (7.7.134)$$

и в силу (7.7.121)

$$= L_1^{-1} \left\{ \frac{\partial^2}{\partial v^2} [8x^3 - 6ax^2] \right\} L_1^{-1}; \quad (7.7.135)$$

$$(7.7.133) = \frac{\partial}{\partial x} \int dv' v' L_1^{-1} (a-x)x^2 \frac{\partial}{\partial v'} p_x(v') \\ + \int dv' v' L_1^{-1} \frac{\partial^2}{\partial v'^2} L_1^{-1} [(8x^3 - 6ax^2)(a-x)x^2] \frac{\partial}{\partial v'} p_x(v'). \quad (7.7.136)$$

Второй член обращается в нуль, хотя доказать это непросто. Действительно, мы знаем, что L_1 описывает процесс Орнштейна — Уленбека по переменной v и что $p_x(v)$ есть стационарное решение. Из свойств собственных функций, рассмотренных в разд. 6.4.2, следует, что

$$L_1^{-1} \frac{\partial^2}{\partial v^2} L_1^{-1} \frac{\partial}{\partial v} p_x(v) \quad (7.7.137)$$

пропорциональна третьей собственной функции, которая ортогональна v , первой собственной функции соответствующего обратного уравнения. Первый член теперь легко вычисляется с учетом того факта, что L_1 соответствует процессу Орнштейна — Уленбека. Используя те же методы, что и в разд. 6.6.1, мы находим, что вся зависимость от x , возникающая в $p_x(v')$, пропадает, и поэтому

$$(7.7.133) = \frac{\partial}{\partial x} (a-x)x^2. \quad (7.7.138)$$

Аналогично находим

$$\begin{aligned} PL_3\bar{g} &= -p_x(v) \int dv' \frac{\partial}{\partial x} [x^2(a-x)] p_x(v') \bar{p} \\ &= -p_x(v) \frac{\partial}{\partial x} [x^2(a-x)] \bar{p}, \end{aligned} \quad (7.7.139)$$

так что в конце концов

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \frac{1}{\gamma} \left[\left(-\frac{\partial}{\partial x} + 2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^3}{\partial x^3} \right) [(a-x)x^2] p \right], \quad (7.7.140)$$

что есть то же самое, что и уравнение Фоккера — Планка (7.7.114) для тримолекулярной реакции. Это значит, что и тримолекулярное управляющее уравнение справедливо в этом пределе.

в) Замечания

1) Отметим, что конечный результат получен не в форме Стратоновича, а в форме Ито, где все производные слева.

2) Вывод (7.7.140) предполагает умение интерпретировать подобные невероятностные уравнения Фоккера — Планка. Мы обсудим это в следующем разделе.

7.7.7. ШУМ ТРЕТЬЕГО ПОРЯДКА

Для того чтобы рассматривать уравнения Фоккера — Планка третьего порядка, возникающие при исследовании тримолекулярных реакций, мы введем стохастическую переменную $V(t)$, плотность условной вероятности которой подчиняется дифференциальному уравнению в частных производных третьего порядка

$$\frac{\partial p(v, t)}{\partial t} = -\frac{1}{\xi} \partial^3 p(v, t) / \partial v^3. \quad (7.7.141)$$

Поскольку, как мы уже показали в разд. 3.4, никакой марковский процесс не может дать подобного члена третьего порядка, величина $p(v, t)$ должна нарушать какое-то фундаментальное условие. Оказывается, $p(v, t)$ не всегда положительна, что для квазивероятности допустимо. Покажем, что, несмотря на это, чисто формальная вероятностная аналогия может быть очень полезна.

Мы знаем, что решение (7.7.141) при начальном условии

$$p(v, t_0) = \delta(v - v_0) \quad (7.7.142)$$

получается методом фурье-преобразования в виде

$$p(v, t | v_0, t_0) = (1/2\pi) \int_{-\infty}^{\infty} dq \exp \{ i[q(v - v_0) + \frac{1}{\xi} q^3(t - t_0)] \}. \quad (7.7.143)$$

После интегрирования можно вычислить моменты V , которые равны

$$\begin{aligned}\langle [V(t) - V_0]^n \rangle &= 0, \quad (n \text{ не кратно } 3), \\ \langle [V(t) - V_0]^{3m} \rangle &= [(t - t_0)/6]^m (3m)!/m!. \end{aligned} \quad (7.7.144)$$

Далее, мы считаем, что (7.7.141) есть некий обобщенный марковский процесс, для которого совместное распределение вероятности есть

$$p(v_2 t_2; v_1 t_1) = p(v_2 t_2 | v_1 t_1) p(v_1, t_1), \quad (7.7.145)$$

а из (7.7.142) мы видим, что первый множитель является функцией лишь $(v_2 - v_1)$ и $(t_2 - t_1)$, так что переменная $V(t_2) - V(t_1)$ статистически независима от $V(t_1)$, и поэтому данный процесс есть *процесс с независимыми приращениями*. Таким образом, $dV(t)$ будет независима от $V(t)$.

Строгое определение стохастического интегрирования по $V(t)$ — это вопрос, который сейчас мы не будем рассматривать. Очевидно, однако, что эта операция не слишком отличается от интегрирования в смысле Ито, и, кстати говоря, Хохберг [7.12] дал строгое определение шумов высших порядков для четных степеней и осуществил стохастическое интегрирование. Мы можем показать, что стохастическое дифференциальное уравнение вида

$$dy(t) = a(y)dt + b(y)dW(t) + c(y)dV(t) \quad (7.7.146)$$

(где $W(t)$ и $V(t)$ — независимые процессы) эквивалентно уравнению Фоккера — Планка третьего порядка. Ясно, что коль скоро $W(t)$ и $V(t)$ суть процессы с независимыми приращениями, $y(t)$ является марковским процессом. Вычислим теперь

$$\lim_{t \rightarrow t_0} \frac{\langle [y(t) - y(t_0)]^n \rangle}{t - t_0} = \lim_{dt_0 \rightarrow 0} \frac{\langle [dy(t_0)]^n \rangle}{dt_0}, \quad (7.7.147)$$

где $y(t_0)$ есть не стохастическая переменная, а численное начальное значение. В силу (7.7.146) $y(t)$ зависит от $W(t')$ и $V(t')$ лишь при $t' \leq t$, и, поскольку $dW(t)$ и $dV(t)$ не зависят от $y(t)$, мы находим

$$\begin{aligned}\langle dy(t_0) \rangle &= \langle a[y(t_0)] \rangle dt_0 + \langle b[y(t_0)] \rangle \langle dW(t_0) \rangle + \langle c[y(t_0)] \rangle \langle dV(t_0) \rangle \\ &= \langle a[y(t_0)] \rangle dt_0 = a[y(t_0)] dt_0 \end{aligned} \quad (7.7.148)$$

(напомним, что $y(t_0)$ — это численное начальное значение). Аналогично до низшего порядка по dt_0

$$\begin{aligned}\langle dy(t_0)^2 \rangle &= b[y(t_0)]^2 \langle dW(t_0)^2 \rangle \\ &= b[y(t_0)]^2 dt_0 \end{aligned} \quad (7.7.149)$$

$$\begin{aligned}\langle dy(t_0)^3 \rangle &= c[y(t_0)]^2 \langle dV(t_0)^3 \rangle \\ &= c[y(t_0)]^3 dt_0.\end{aligned}\quad (7.7.150)$$

Таким образом,

$$\left. \begin{aligned}\lim_{t \rightarrow t_0} [\langle y(t) - y(t_0) \rangle / (t - t_0)] &= a[y(t_0)] \\ \lim_{t \rightarrow t_0} [\langle [y(t) - y(t_0)]^2 \rangle / (t - t_0)] &= b[y(t_0)]^2 \\ \lim_{t \rightarrow t_0} [\langle [y(t) - y(t_0)]^3 \rangle / (t - t_0)] &= c[y(t_0)]^3,\end{aligned}\right\} \quad (7.7.151)$$

а все высшие порядки дают нулевой вклад. С использованием рассуждений, аналогичных проведенным в разд. 3.4, этого достаточно, чтобы показать, что $y(t)$ есть обобщенный диффузионный процесс, обобщенное уравнение Фоккера — Планка для которого имеет вид

$$\frac{\partial p(y, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial y} [a(y)p] + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial y^2} [b(y)^2 p] - \frac{1}{6} \frac{\partial^3}{\partial y^3} [c(y)^3 p]. \quad (7.7.152)$$

Определим источник шума как

$$dV(t) = \zeta(t) dt, \quad (7.7.153)$$

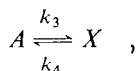
где

$$\langle \zeta(t) \rangle = \langle \zeta(t)\zeta(t') \rangle = 0 \quad (7.7.154)$$

$$\langle \zeta(t)\zeta(t')\zeta(t'') \rangle = \delta(t - t')\delta(t' - t'') \quad (7.7.155)$$

Моменты высших порядков без труда вычисляются из моментов для $dV(t)$. Независимость приращений означает, что, как и в случае с интегралом Ито, интегралы, имеющие в качестве верхнего предела особенность в виде дельта-функции, должны приниматься равными нулю.

Пример использования шума третьего порядка. Рассмотрим химический процесс



для которого УФП в представлении Пуассона имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial f(\alpha, t)}{\partial t} = & -\frac{\partial}{\partial \alpha} [\kappa_1 V^{-1} \alpha^2 - \kappa_2 V^{-2} \alpha^3 + \kappa_3 V - \kappa_4 \alpha] f(\alpha, t) \\ & + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} [4(\kappa_1 V^{-1} \alpha^2 - \kappa_2 V^{-2} \alpha^3) f(\alpha, t)] \\ & - \frac{1}{3!} \frac{\partial^3}{\partial \alpha^3} [6(\kappa_1 V^{-1} \alpha^2 - \kappa_2 V^{-2} \alpha^3) f(\alpha, t)], \end{aligned} \quad (7.7.157)$$

где $\kappa_1 V^{-1} = k_1 A$, $\kappa_2 V^{-2} = k_2$, $\kappa_3 V = k_3$, $\kappa_4 = k_4$.

В стационарном состоянии (7.7.157) сводится к линейному дифференциальному уравнению второго порядка, которое может быть разрешено в гипергеометрических функциях, а асимптотические разложения для моментов могут быть получены методом скорейшего спуска. Эта процедура, хотя и возможная в принципе, не всегда удобна. Именно в таких случаях метод, основанный на стохастических дифференциальных уравнениях, оказывается очень полезным благодаря простоте его применения.

СДУ, эквивалентное (7.7.157), имеет вид

$$\begin{aligned} d\eta(t)/dt = & \kappa_1 \eta(t)^2 - \kappa_2 \eta(t)^3 + \kappa_3 - \kappa_4 \eta(t) \\ & + \mu^3 \{4[\kappa_1 \eta(t)^2 - \kappa_2 \eta(t)^3]\}^{1/2} \xi(t) \\ & + \mu^4 \{6[\kappa_1 \eta(t)^2 - \kappa_2 \eta(t)^3]\}^{1/3} \zeta(t), \end{aligned} \quad (7.7.158)$$

где $\alpha = \eta V$, $\mu = V^{-1/6}$, а шумовой источник $\xi(t)$, далее именуемый «шумом третьего порядка», определен в (7.7.153 — 155).

Уравнение (7.7.158) может быть решено итерационным методом с использованием разложения

$$\eta(t) = \eta_0(t) + \mu^3 \eta_3(t) + \mu^4 \eta_4(t) + \mu^6 \eta_6(t) + \mu^8 \eta_8(t) + \mu^9 \eta_9(t) + \dots, \quad (7.7.159)$$

которое после подстановки в (7.7.158) дает в низшем порядке детерминистическое уравнение, а в более высоких — линейные стохастические дифференциальные уравнения, которые решаются методами разд. 6.2.

Для стационарного случая получаются следующие результаты:

$$\langle x \rangle = V \eta_0 + \langle \eta_6 \rangle + \dots = V \eta_0 + \frac{2ab}{c^2} + \dots \quad (7.7.160a)$$

$$\begin{aligned} \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = & V \langle \eta_3^2 \rangle + [2 \langle \eta_3 \eta_3 \rangle + 2 \langle \eta_8 \eta_4 \rangle + \langle \eta_3^2 \rangle - \langle \eta_6 \rangle^2 + \langle \eta_6 \rangle] + \dots \\ = & V \left[\frac{2a}{c} \right] + \left[\frac{28}{3} \frac{a^2 b^2}{c^4} + \frac{8ab^2 \eta_0}{c^3} - \frac{36\kappa_2 a^2}{c^3} + \frac{8ab}{c^2} \right] + \dots \end{aligned} \quad (7.7.160b)$$

$$\begin{aligned} \langle (x - \langle x \rangle)^3 \rangle &= V[\langle \eta_4^3 \rangle - 3\langle \eta_3^2 \rangle \langle \eta_6 \rangle + 3\langle \eta_3^3 \rangle + \langle \eta_0 \rangle + \dots \\ &= V \left[\frac{8a}{c} - \frac{12a^2b}{c^3} + \eta_0 \right] + \dots, \end{aligned} \quad (7.7.160\text{в})$$

где $a = \kappa_1 \eta_0^2 - \kappa_2 \eta_0^3$, $b = 2\kappa_1 - 3\kappa_2 \eta_0$, $c = \kappa_4 - 2\kappa_1 \eta_0 + 3\kappa_2 \eta_0^2$, а η_0 есть решение стационарного детерминистического уравнения

$$\kappa_1 \eta_0^2 - \kappa_2 \eta_0^3 + \kappa_3 - \kappa_4 \eta_0 = 0. \quad (7.7.161)$$

Здесь следует сделать кое-какие замечания. Шум третьего порядка дает вклад $O(V^{-1})$ в среднее значение, и вклад $O(1)$ в дисперсию, но вклад $O(V)$ в коэффициент асимметрии. Если нас интересуют среднее значение и дисперсия с точностью до $O(V)$, то можно пренебречь шумом третьего порядка в (7.7.158) и проводить разложение по степеням $\varepsilon = V^{-1/2}$. Заметим также, что при $c \rightarrow 0$ дисперсия и поправки высших порядков расходятся. Разумеется, это связано с тем, что в этом пределе поведение системы соответствует фазовому переходу первого рода.

Пространственно-распределенные системы

Системы с химическими реакциями и диффузией, рассматриваемые в этой главе, — прототип огромного множества пространственно-распределенных систем, встречающихся в природе. Мы начнем изложение с эвристического введения в предмет, исходя из уравнений Ланжевена для переменных, зависящих от пространственных координат. Однако такое рассмотрение является недостаточным, поэтому мы перейдем к более удовлетворительному описанию на основе многомерного управляющего уравнения. При этом уравнения Ланжевена получаются в результате приближения, которое основано на разложении по обратному размеру системы. Будет показано также, как на основе представления Пуассона можно вывести подобные уравнения Ланжевена, не используя какого-либо приближения.

Далее мы рассмотрим следствия таких уравнений, а именно пространственно-временные корреляционные структуры, которые могут возникать (главным образом вблизи точек неустойчивостей). Затем покажем, как связаны между собой локальное и глобальное описания флуктуаций. Глава заканчивается рассмотрением систем, описываемых распределением в фазовом пространстве, т. е. в пространстве координат и скоростей. Исследование таких систем проводится на основе *управляющего уравнения Больцмана*.

8.1. ОБЩИЕ ЗАМЕЧАНИЯ

Понятие пространства занимает центральное место в нашем понимании мира главным образом потому, что объекты, отделенные большим расстоянием, не так сильно влияют друг на друга. Это ведет к детерминистическому макроскопическому описанию мира с помощью таких *локальных* величин, как плотность, концентрация, температура, потенциалы электромагнитного взаимодействия и т. д. При детерминистическом описании обычно полагают, что эти величины подчиняются дифференциальным уравнениям в частных производных, таким, как уравнения Навье — Стокса в гидродинамике, уравнения химических *реакций с учетом диффузии* или уравнения Максвелла в классической электродинамике.

Простейшими из таких уравнений являются уравнения, описывающие химические реакции с учетом диффузии, исследование которых составляет основное содержание настоящей главы. Для наглядности рассмотрим вначале описание временной эволюции концентрации химического вещества ρ при помощи уравнения Ланжевена. При этом классическое уравнение химической реакции с диффузией можно вывести следующим образом. Предположим в соответствии с законом Фика, что диффузионный поток $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$ имеет вид

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = -D\nabla \rho(\mathbf{r}, t). \quad (8.1.1)$$

В отсутствие химических реакций этот поток входит в уравнение непрерывности, ибо полное количество химического вещества в произвольном объеме V может меняться только вследствие его переноса через границу S объема V . Обозначая полное количество вещества в объеме V через N , имеем

$$\begin{aligned} \frac{dN}{dt} &= \frac{d}{dt} \int_V d^3\mathbf{r} \rho(\mathbf{r}, t) = - \int_S dS \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) \\ &= - \int_V d^3\mathbf{r} \nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}, t). \end{aligned} \quad (8.1.2)$$

Поскольку объем V произволен, отсюда следует

$$\partial_t \rho(\mathbf{r}, t) + \nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = 0. \quad (8.1.3)$$

Подставляя в это уравнение закон Фика (8.1.1), получаем уравнение диффузии

$$\partial_t \rho(\mathbf{r}, t) = D\nabla^2 \rho(\mathbf{r}, t). \quad (8.1.4)$$

Как же теперь добавить сюда флуктуации? Прежде всего заметим, что уравнение непрерывности (8.1.3) является точным (это следует из его вывода). Мы не можем добавить к этому уравнению флуктуационный член. Однако можно модифицировать закон Фика, добавляя в выражение (8.1.1) источник флуктуаций и переписывая его в виде

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = -D\nabla \rho(\mathbf{r}, t) + \mathbf{f}_d(\mathbf{r}, t), \quad (8.1.5)$$

где $\mathbf{f}_d(\mathbf{r}, t)$ — векторный ланжевеновский источник. Проще всего предположить, что он обладает следующими статистическими свойствами:

$$\langle \mathbf{f}_d(\mathbf{r}, t) \rangle = 0$$

и

$$\langle f_{d,i}(\mathbf{r}, t) f_{d,j}(\mathbf{r}', t') \rangle = K_d(\mathbf{r}, t) \delta_{ij} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t'), \quad (8.1.6)$$

Таким образом, различные компоненты вектора $f_d(\mathbf{r}, t)$, взятые в один момент времени в одной точке пространства, а также все значения $f_d(\mathbf{r}, t)$ в различные моменты времени, в разных точках пространства предполагаются независимыми, что означает *локальность* флуктуаций. Флуктуационное уравнение диффузии принимает тогда вид

$$\partial_t \rho(\mathbf{r}, t) = D \nabla^2 \rho(\mathbf{r}, t) - \nabla \cdot \mathbf{f}_d(\mathbf{r}, t). \quad (8.1.7)$$

Заметим, что

$$\langle \nabla \cdot \mathbf{f}_d(\mathbf{r}, t) \nabla' \cdot \mathbf{f}_d(\mathbf{r}', t') \rangle = \nabla \cdot \nabla' [K_d(\mathbf{r}, t) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t')]. \quad (8.1.8)$$

Теперь включим в рассмотрение химическую реакцию. Закон Фика применим и в этом случае, но уравнение непрерывности следует заменить на уравнение вида

$$\frac{dN}{dt} = \frac{d}{dt} \int_V d^3\mathbf{r} \rho(\mathbf{r}, t) = - \int_S dS \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) + \int_V d^3\mathbf{r} F[\rho(\mathbf{r}, t)], \quad (8.1.9)$$

где $F[\rho(\mathbf{r}, t)]$ — функция концентрации, представляющая производство химического вещества в *локальной* химической реакции.

Из уравнения (8.1.9), не учитывая пока флуктуаций, находим

$$\partial_t \rho(\mathbf{r}, t) + \nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = F[\rho(\mathbf{r}, t)]. \quad (8.1.10)$$

Производство химического вещества в химической реакции обязательно порождает флуктуации, поэтому мы можем добавить к уравнению (8.1.10) член $f_c(\mathbf{r}, t)$, который удовлетворяет соотношениям

$$\begin{aligned} \langle f_c(\mathbf{r}, t) \rangle &= 0 \\ \langle f_c(\mathbf{r}, t) f_c(\mathbf{r}', t') \rangle &= K_c(\mathbf{r}, t) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t') \end{aligned} \quad (8.1.11)$$

выражающим свойства *локальности* (некоррелированность флуктуаций в различных точках) и *марковости* реакции (дельта-коррелированность во времени). Полное уравнение химической реакции с диффузией принимает теперь вид

$$\partial_t \rho(\mathbf{r}, t) = D \nabla^2 \rho(\mathbf{r}, t) + F[\rho(\mathbf{r}, t)] + g(\mathbf{r}, t), \quad (8.1.12)$$

где

$$g(\mathbf{r}, t) = -\nabla \cdot \mathbf{f}_d(\mathbf{r}, t) + f_c(\mathbf{r}, t) \quad (8.1.13)$$

и

$$\langle g(\mathbf{r}, t) g(\mathbf{r}', t') \rangle = \{ K_c(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') + \nabla \cdot \nabla' [K_d(\mathbf{r}, t) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')] \} \delta(t - t'). \quad (8.1.14)$$

Простейшая процедура получения уравнения Ланжевена для классического уравнения реакции с диффузией приводит к довольно сложному выражению (8.1.14). Кроме того, мы ничего не знаем о функциях $K_c(r)$ или $K_d(r)$, и сама процедура основана на весьма эвристических моделях.

Тем не менее форма выведенного уравнения по существу правильна, так как она согласуется с результатами, следующими из более микроскопического подхода, основанного на использовании управляющих уравнений. Однако последний подход позволяет определить все введенные произвольные константы.

8.1.1. ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ ФОККЕРА — ПЛАНКА

Записывая *стохастическое дифференциальное уравнение* типа (8.1.12), мы тотчас же задаемся вопросом, как выглядит соответствующее уравнение Фоккера — Планка. Это должно быть дифференциальное уравнение в частных производных для функции, зависящей от континуального числа переменных $\rho(r)$, где r — непрерывный индекс, помечающий различные переменные. Наиболее простой способ определения функциональных производных состоит в следующем. Прежде всего разобьем все пространство на кубические ячейки с линейным размером l , помеченные индексом i , положение центра которых в пространстве задается векторами r_i . Введем переменные

$$x_i = l^3 \rho(r_i) \quad (8.1.15)$$

и будем рассматривать функции, зависящие от всех этих переменных $x = \{x_i\}$.

Обсудим способы обращения с функциями $F(x)$ от этих ячейечных переменных. Определяя частные производные обычным образом, мы вводим формально функциональную производную с помощью соотношения

$$\frac{\delta F(\rho)}{\delta \rho(r_i)} = \lim_{l \rightarrow 0} l^{-3} \frac{\partial F(x)}{\partial x_i} \quad (8.1.16)$$

В каком смысле этот предел существует, в большей части прикладной литературы остается совершенно неясным. Можно дать строгие определения; при этом, как всегда в вопросах, связанных с функционалами, важным является точное определение сходимости. «Очевидное» определение (8.1.16) в дальнейшем не используется.

Точная формулировка функционального исчисления не является целью этой книги, однако уместно будет показать, как обычно записывают такие уравнения. Мы можем формально определить функцио-

нальную производную при помощи (8.1.16) и сформулировать дискретный аналог стохастического дифференциального уравнения вида (8.1.12). Используя те же обозначения, получаем

$$dx_i = \left[\sum_j D_{ij} x_j + \tilde{F}(x_i) \right] dt + \sum_j \tilde{g}_{ij} dW_j(t). \quad (8.1.17)$$

В этом уравнении D_{ij} — коэффициенты, дающие дискретную аппроксимацию оператора $D\nabla^2$. Функции \tilde{F} и \tilde{g} выбираются так:

$$F[\rho(\mathbf{r}_i, t)] = \lim_{l \rightarrow 0} \tilde{F}(x_i) l^{-3} \quad (8.1.18)$$

$$g(\mathbf{r}_i, t) = \lim_{l \rightarrow 0} l^{-3} \sum_j \tilde{g}_{ij} dW_j(t). \quad (8.1.19)$$

Предположим более общий, чем (8.1.14), вид корреляционной функции, а именно

$$\langle g(\mathbf{r}, t) g(\mathbf{r}', t') \rangle = G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \delta(t - t'), \quad (8.1.20)$$

и потребуем, чтобы

$$G(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) = \lim_{l \rightarrow 0} l^{-6} \sum_k \tilde{g}_{ik} \tilde{g}_{jk}. \quad (8.1.21)$$

В этом случае уравнение Фоккера — Планка для набора переменных $\{x_j\}$ примет вид

$$\partial_t P(\mathbf{x}) = - \sum_{ij} \frac{\partial}{\partial x_i} \{ [D_{ij} x_j + \delta_{ij} \tilde{F}(x_i)] P(\mathbf{x}) \} + \sum_{ijk} \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \tilde{g}_{ik} \tilde{g}_{jk} P(\mathbf{x}). \quad (8.1.22)$$

Рассмотрим теперь предел $l^3 \rightarrow 0$. После некоторых преобразований получим

$$\begin{aligned} \partial_t P(\rho) = & - \int d^3 \mathbf{r} \frac{\delta}{\delta \rho(\mathbf{r})} \{ [D\nabla^2(\mathbf{r}) + F[\rho(\mathbf{r})]] P(\rho) \} \\ & + \frac{1}{2} \iint d^3 \mathbf{r} d^3 \mathbf{r}' \left[\frac{\delta^2}{\delta \rho(\mathbf{r}) \delta \rho(\mathbf{r}')} G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') P(\rho) \right]. \end{aligned} \quad (8.1.23)$$

Плотность вероятности $P(\rho)$ является теперь функционалом. Чтобы записать условие нормировки для $P(\rho)$, требуется аккуратно определить вероятностную меру на пространстве функций $\rho(\mathbf{r})$. Это можно сделать (см. [8.1]), однако обычно под уравнением (8.1.23) подразумевается в действительности дискретный вариант (8.1.22) и почти все вычисления также неявно дискретизируются.

Разумеется, такая ситуация неудовлетворительна. Формально-математическое существование стохастических дифференциальных уравнений в частных производных и их решений установлено, однако в качестве повседневного расчетного инструмента они не используются.

За дальнейшей информацией по математическим вопросам мы отсылаем читателя к книге [8.1]. Однако в большинстве случаев мы будем излагать материал непосредственно в дискретной форме, используя континуальные обозначения просто для упрощения записи.

8.2. ОПИСАНИЕ ПРИ ПОМОЩИ МНОГОМЕРНОГО УПРАВЛЯЮЩЕГО УРАВНЕНИЯ

8.2.1. ДИФFUЗИЯ

Мы предполагаем, что все пространство разбито на кубические *ячейки* с линейным размером l и объемом ΔV . Эти ячейки помечаем индексом i , а число молекул химического вещества X внутри ячейки с номером i обозначаем через x_i . Далее введем многомерное распределение вероятностей

$$P(\mathbf{x}, t) \equiv P(x_1, x_2, \dots, t) \equiv P(x_i, \hat{\mathbf{x}}, t). \quad (8.2.1)$$

Вектор $\hat{\mathbf{x}}$ в последнем из этих выражений обозначает совокупность всех x , кроме тех, которые выписаны явно.

Мы можем моделировать диффузию марковским процессом, в котором молекула перескакивает из ячейки с номером i в ячейку с номером j с вероятностью в единицу времени $d_{ij}x_i$; это значит, что вероятность перехода пропорциональна числу молекул в ячейке. При строго *локальном* описании мы ожидаем, что величины d_{ij} будут отличны от нуля только для соседних ячеек i и j . Однако в общем случае это не так, и в дальнейшем мы этого предполагать не будем.

Мы можем теперь записать управляющее уравнение для процессов рождения — гибели в обозначениях разд. 7.5, полагая

	i	j	
$N^{(i,j)}$	$= (0 \dots 0,$	$1, 0, \dots 0, 0, 0, \dots)$	
$M^{(i,j)}$	$= (0 \dots 0,$	$0, 0, \dots 0, 1, 0, \dots)$	
$r^{(i,j)}$	$= (0 \dots 0,$	$-1, 0, \dots 0, 1, 0, \dots)$	(8.2.2)
$k_{(i,j)}^+$	$= d_{ij}$		
$k_{(i,j)}^-$	$= 0.$		

При этом получаем управляющее уравнение вида

$$\partial_t P(\mathbf{x}, t) = \sum d_{ij} [(x_i + 1)P(\hat{\mathbf{x}}, x_i + 1, x_j - 1, t) - x_i P(\mathbf{x}, t)]. \quad (8.2.3)$$

Это простое линейное управляющее уравнение, которое можно решить различными методами.

Заметим, что, поскольку

$$\mathbf{r}^{(i,j)} = -\mathbf{r}^{(j,i)} \quad (8.2.4)$$

$$N^{(i,j)} = M^{(j,i)},$$

мы можем ограничиться значениями индексов $i > j$ и положить $k_{(i,j)}^- = d_{ji}$. Из формул (7.5.15, 18) мы видим, что условие *детального баланса* в этом случае выполнено, если

$$d_{ij}\langle x_i \rangle_s = d_{ji}\langle x_j \rangle_s. \quad (8.2.5)$$

В системе, в которой происходит диффузия, стационарное решение однородно, т. е. $\langle x_i \rangle_s = \langle x_j \rangle_s$. Таким образом, условие *детального баланса* принимает вид

$$d_{ij} = d_{ji}. \quad (8.2.6)$$

При этом уравнение (8.2.3) имеет стационарное решение в виде многомерного распределения Пуассона.

Для средних значений имеем уравнение

$$d_i \langle x_i(t) \rangle = \sum_{j,k} r_{i,jk}^{(j,k)} [\langle t_{jk}^+(\mathbf{x}) \rangle - \langle t_{jk}^-(\mathbf{x}) \rangle] = \sum_{j,k} (-\delta_{ij} + \delta_{ik}) d_{jk} \langle x_j \rangle,$$

или

$$d_i \langle x_i(t) \rangle = \sum_j (d_{ji} - \delta_{ji} \sum_k d_{jk}) \langle x_j(t) \rangle \quad (8.2.7)$$

$$\equiv \sum_j D_{ji} \langle x_j(t) \rangle. \quad (8.2.8)$$

8.2.2. УПРАВЛЯЮЩЕЕ УРАВНЕНИЕ ДИФФУЗИИ В КОНТИНУАЛЬНОЙ ФОРМЕ

Будем считать, что центр i -й ячейки находится в точке \mathbf{r}_i , и сделаем замену

$$x_i(t) = l^3 \rho(\mathbf{r}_i, t). \quad (8.2.9)$$

Предположим, что $d_{ij} = d$, если ячейки с номерами i и j соседние; в противном случае $d_{ij} = 0$. Тогда в пределе $l \rightarrow 0$ уравнение (8.2.8) принимает вид

$$\partial_t \langle \rho(\mathbf{r}, t) \rangle = D \nabla^2 \langle \rho(\mathbf{r}, t) \rangle \quad (8.2.10)$$

$$\text{при } D = l^2 d. \quad (8.2.11)$$

Таким образом, мы снова получили диффузионное уравнение. Вскоре мы обобщим этот результат.

а) Уравнение Крамерса — Мойала, или разложение по малому параметру, обратному размеру системы

Нам нужен параметр, который бы подходящим образом определял масштаб как числа молекул, так и вероятностей перехода. При возрастании числа молекул возможны два предела:

- 1) предел больших ячеек: $l \rightarrow \infty$ при фиксированной концентрации;
- 2) предел высоких концентраций при фиксированном размере ячейки.

В случае чистой диффузии оба предела приводят к одинаковым результатам. Для любого из них

$$t_{i,j}^+(\mathbf{x}) \rightarrow \infty \quad (8.2.12)$$

и можно применить разложение по обратному размеру системы. В низшем порядке это разложение будет эквивалентно разложению Крамерса — Мойала. Из (7.5.31, 32) мы находим

$$A_i(\mathbf{x}) = - \sum_j D_{ji} x_j \quad (8.2.13)$$

$$B_{lm}(\mathbf{x}) = \delta_{lm} \sum_j (D_{lj} x_l + D_{jl} x_j) - D_{lm} x_l - D_{ml} x_m, \quad (8.2.14)$$

где

$$D_{jl} = d_{jl} - \delta_{jl} \sum_k d_{ik}. \quad (8.2.15)$$

Таким образом, в этом пределе $P(\mathbf{x}, t)$ подчиняется уравнению Фоккера — Планка

$$\partial_t P = - \sum_i \partial_i A_i(\mathbf{x}) P + \frac{1}{2} \sum_{l,m} \partial_l \partial_m B_{lm}(\mathbf{x}) P. \quad (8.2.16)$$

б) Континуальная форма разложения Крамерса — Мойала

Связывая точку \mathbf{r} с i -й ячейкой и производя замены

$$l^3 \sum_i \rightarrow \int d^3 \mathbf{r} \quad (8.2.17)$$

$$D_{ij} \rightarrow D(\mathbf{r}', \mathbf{r}) \equiv \mathcal{D}(\mathbf{r}', \mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (8.2.18)$$

$$l^{-3} \delta_{ij} \rightarrow \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (8.2.19)$$

мы переходим к континуальной форме записи. На этом этапе мы не делаем никаких конкретных предположений о симметрии матрицы D_{ij} , а также других предположений. Таким образом, мы включаем в рассмотрение и случай анизотропной неоднородной диффузии. Однако само содержание понятия «диффузия» приводит к ряду требований.

1) Диффузия наблюдается только при наличии градиента концентрации. Это означает, что стационарное состояние соответствует постоянной концентрации, и из (8.2.13) вытекает равенство

$$\sum_j D_{ji} = 0. \quad (8.2.20)$$

Отсюда в силу (8.2.15) находим

$$\sum_j d_{ji} = \sum_j d_{ij}. \quad (8.2.21)$$

Заметим, что эти формулы следуют также из условия детального баланса (8.2.6).

2) Диффузия не меняет полного количества вещества в системе, т. е.

$$\frac{d}{dt} \sum_I x_I = 0, \quad (8.2.22)$$

причем это равенство должно выполняться при любых значениях x_I . В силу уравнения для средних значений это приводит к требованию

$$\sum_j D_{ij} = 0, \quad (8.2.23)$$

что также следует из (8.2.15).

3) В континуальной форме записи равенство (8.2.20) означает, что для любых r

$$\int d^3\delta \mathcal{D}(r + \delta, -\delta) = 0. \quad (8.2.24)$$

Аналогично из (8.2.23) имеем

$$\int d^3\delta \mathcal{D}(r, \delta) = 0. \quad (8.2.25)$$

4) Если выполняется условие детального баланса, то равенство (8.2.24) заменяется соотношением

$$D_{ij} = D_{ji}, \quad (8.2.26)$$

получаемым подстановкой равенства (8.2.6) в определение величины D . В континуальной форме записи это дает нам соотношение

$$\mathcal{D}(r + \delta, -\delta) = \mathcal{D}(r, \delta). \quad (8.2.27)$$

Вывод уравнения Ланжевена в континуальной форме можно провести по аналогии с разложением Крамерса — Мойала.

Определим условные моменты:

$$\mathbf{M}(\mathbf{r}) = \int d^3\boldsymbol{\delta} \boldsymbol{\delta} \mathcal{D}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\delta}) \quad (8.2.28)$$

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \int d^3\boldsymbol{\delta} \boldsymbol{\delta} \boldsymbol{\delta} \mathcal{D}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\delta}) \quad (8.2.29)$$

и будем считать, что высшие условные моменты исчезают в некотором подходящем пределе, подобном тем пределам, что использовались в разложении Крамерса — Мойала.

Условие детального баланса (8.2.27) дает

$$\begin{aligned} \mathbf{M}(\mathbf{r}) &= \int d^3\boldsymbol{\delta} \boldsymbol{\delta} \mathcal{D}(\mathbf{r} + \boldsymbol{\delta}, -\boldsymbol{\delta}) \\ &= \int d^3\boldsymbol{\delta} \boldsymbol{\delta} [\mathcal{D}(\mathbf{r}, -\boldsymbol{\delta}) + \boldsymbol{\delta} \cdot \nabla \mathcal{D}(\mathbf{r}, -\boldsymbol{\delta}) + \dots] \\ &= -\mathbf{M}(\mathbf{r}) + 2\nabla \cdot \mathbf{D}(\mathbf{r}) + \dots \end{aligned} \quad (8.2.30)$$

Следовательно,

$$\mathbf{M}(\mathbf{r}) = \nabla \cdot \mathbf{D}(\mathbf{r}). \quad (8.2.31)$$

В случае более слабого требования (8.2.24) необходимо выполнение более слабого условия

$$\nabla \cdot [\mathbf{M}(\mathbf{r}) - \nabla \cdot \mathbf{D}(\mathbf{r})] = 0. \quad (8.2.32)$$

Теперь мы можем записать в континуальной форме вектор сноса

$$\begin{aligned} A_i(\mathbf{x}) &\rightarrow -\int d^3\boldsymbol{\delta} \mathcal{D}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\delta}) \rho(\mathbf{r} + \boldsymbol{\delta}) \\ &= -\mathbf{M}(\mathbf{r}) \cdot \nabla \rho(\mathbf{r}) - \mathbf{D}(\mathbf{r}) : \nabla \nabla \rho(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (8.2.33)$$

Если условие детального баланса выполнено, то, используя (8.2.31), мы можем представить это равенство в виде

$$\boxed{A_i(\mathbf{x}) \rightarrow -\nabla \cdot [\mathbf{D}(\mathbf{r}) \cdot \nabla \rho(\mathbf{r})]}. \quad (8.2.34)$$

Общий вид выражения в отсутствие детального баланса можно получить, полагая

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}) = \mathbf{M}(\mathbf{r}) - \nabla \cdot \mathbf{D}(\mathbf{r}). \quad (8.2.35)$$

Из равенства (8.2.32) следует, что

$$\nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}) = 0. \quad (8.2.36)$$

Таким образом, можно записать

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}) = \nabla \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}), \quad (8.2.37)$$

где $E(\mathbf{r})$ — антисимметричный тензор. Подставляя (8.2.37) в (8.2.35), находим

$$M(\mathbf{r}) = \nabla \cdot \underline{H}(\mathbf{r}), \quad (8.2.38)$$

где $\underline{H}(\mathbf{r}) = \underline{D}(\mathbf{r}) + \underline{E}(\mathbf{r})$ есть несимметричный тензор. Если (8.2.38) подставить в (8.2.33) и учесть антисимметричность тензора $\underline{E} = \underline{H} - \underline{D}$, благодаря чему $\underline{E} \cdot \nabla \nabla \rho = 0$, то будем иметь

$$A_i(\mathbf{x}) \rightarrow -\nabla \cdot [\underline{H}(\mathbf{r}) \cdot \nabla \rho(\mathbf{r})]. \quad (8.2.39)$$

Это означает, что при детерминистическом описании справедливо уравнение

$$\partial_t \rho(\mathbf{r}, t) = \nabla \cdot [\underline{H}(\mathbf{r}) \cdot \nabla \rho(\mathbf{r}, t)], \quad (8.2.40)$$

причем тензор $\underline{H}(\mathbf{r})$ симметричен, если выполняется условие детального баланса.

Займемся теперь флуктуационным членом, определяемым выражением (8.2.14). Для расчета $B_{lm}(\mathbf{x})$ рассмотрим сначала предел выражения

$$l^3 \sum_m B_{lm} \phi_m \rightarrow \int d\mathbf{r}' B(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \phi(\mathbf{r}'), \quad (8.2.41)$$

в котором ϕ_m — произвольная функция. После довольно утомительных вычислений, подобных предыдущим, мы окончательно находим

$$l^3 \sum_m B_{lm} \phi_m \rightarrow -2\nabla \cdot [\underline{D}(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}) \cdot \nabla \phi(\mathbf{r})] \quad (8.2.42)$$

так что

$$B(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = 2\nabla' \nabla : [\underline{D}(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')]. \quad (8.2.43)$$

Феноменологическая теория разд. 8.1 имеет теперь рациональную основу, поскольку равенство (8.2.43) следует как раз из равенства

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = -\underline{H}(\mathbf{r}) \nabla \rho(\mathbf{r}, t) - \boldsymbol{\zeta}(\mathbf{r}, t), \quad (8.2.44)$$

где

$$\langle \boldsymbol{\zeta}(\mathbf{r}, t) \boldsymbol{\zeta}(\mathbf{r}', t') \rangle = 2\delta(t - t') \underline{D}(\mathbf{r}) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \rho(\mathbf{r}) \quad (8.2.45)$$

и, следовательно,

$$\partial_t \rho(\mathbf{r}, t) = \nabla \cdot \underline{H}(\mathbf{r}) \cdot \nabla \rho + \nabla \cdot \boldsymbol{\zeta}(\mathbf{r}, t). \quad (8.2.46)$$

Это отвечает теории неоднородной анизотропной диффузии в отсутствие детального баланса. Обычно делается упрощающее предположение

$$\underline{D}(\mathbf{r}) = D\mathbf{1}, \quad (8.2.47)$$

которое дает более известное уравнение. Заметим, что, согласно (8.2.45), флуктуации различных компонент потока в общем случае коррелированы, если только тензор D не является диагональным.

Сравнение с флуктуационно-диссипационной аргументацией. Результат, почти подобный (8.2.43), можно получить с помощью флуктуационно-диссипационного соотношения, если рассматривать стационарное состояние, в котором флуктуации, как известно, пуассоновские. В этом случае справедливо равенство

$$\langle x_i, x_j \rangle = \langle x_i \rangle \delta_{ij}, \quad (8.2.48)$$

соответствующее формуле

$$g(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \langle \rho(\mathbf{r}), \rho(\mathbf{r}') \rangle = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \langle \rho(\mathbf{r}) \rangle.$$

Поскольку мы пользуемся линейной теорией, можно применить соотношение (4.4.51) разд. 4.4.6, в которое надо подставить матрицы A и A^T вида

$$\begin{aligned} A &\rightarrow -\nabla \cdot \underline{H}(\mathbf{r}) \cdot \nabla \\ A^T &\rightarrow -\nabla' \cdot \underline{H}(\mathbf{r}') \cdot \nabla'. \end{aligned} \quad (8.2.49)$$

Поэтому

$$\begin{aligned} B(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &\rightarrow BB^T \\ &= A\sigma + \sigma A^T \rightarrow [-\nabla \cdot \underline{H}(\mathbf{r}) \cdot \nabla - \nabla' \cdot \underline{H}(\mathbf{r}') \cdot \nabla'] g(\mathbf{r}, \mathbf{r}'). \end{aligned} \quad (8.2.50)$$

Заметим, что в стационарном состоянии среднее $\langle \rho(\mathbf{r}) \rangle = \langle \rho \rangle$ не зависит от \mathbf{r} . Таким образом,

$$\begin{aligned} B(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &= [-\nabla \cdot \underline{H}(\mathbf{r}) \cdot \nabla \langle \rho \rangle \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') - \nabla' \cdot \underline{H}(\mathbf{r}') \cdot \nabla' \langle \rho \rangle \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')] \\ &= \nabla \nabla' : \{ [\underline{H}(\mathbf{r}) + \underline{H}^T(\mathbf{r}')] \langle \rho \rangle \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \} \\ &= 2\nabla \nabla' : [\underline{D}(\mathbf{r}) \langle \rho \rangle \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')]. \end{aligned} \quad (8.2.51)$$

Однако этот результат не является столь общим, как (8.2.43), поскольку он справедлив только для стационарного состояния. При этом даже для стационарного состояния в (8.2.51) входит $\langle \rho \rangle$, а не $\rho(\mathbf{r})$, как в (8.2.43). Однако формализм уравнения Фоккера — Планка справедлив только в пределе ячеек большого размера, в котором флуктуации малы, и в этом пределе результаты (8.2.51) и (8.2.43) согласуются между собой.

8.2.3. СОВМЕСТНОЕ РАССМОТРЕНИЕ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ И ДИФФУЗИИ

Включим в рассмотрение химические реакции, полагая, что молекулы вступают в реакцию внутри каждой ячейки в соответствии с управляющим уравнением, подобным уравнениям гл. 7. Имея в виду многокомпонентные химические реакции, обозначим

$$\mathbf{X} = (\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots), \quad (8.2.52)$$

где \mathbf{x}_i — вектор, компоненты которого $x_{i,a}$ представляют собой число молекул веществ X_a в i -й ячейке. Таким образом, мы можем записать управляющее уравнение

$$\begin{aligned} \partial_t P(\mathbf{X}, t) = \partial_t P(\text{дифф.}) + \sum_i \{ \sum_A t_A^+(\mathbf{x}_i - \mathbf{r}^A) P(\mathbf{x}_i - \mathbf{r}^A, \hat{\mathbf{X}}) \\ + t_A^-(\mathbf{x}_i + \mathbf{r}^A) P(\mathbf{x}_i + \mathbf{r}^A, \hat{\mathbf{X}}) - [t_A^+(\mathbf{x}_i) + t_A^-(\mathbf{x}_i)] P(\mathbf{X}) \} \end{aligned} \quad (8.2.53)$$

диффузионная часть которого имеет форму (8.2.3) с добавлением суммирования по различным компонентам.

Разложение Крамерса — Мойала приводит к уравнению Фоккера — Планка с обычными выражениями для коэффициентов сноса и диффузии, определяемыми формулами (7.5.32).

Мы можем записать эквивалентные стохастические дифференциальные уравнения в частных производных, используя пространственно-временной винеровский процесс $W(\mathbf{r}, t)$. Считая тензор диффузии изотропным и постоянным

$$\underline{D}(\mathbf{r}) = D\mathbf{1}, \quad (8.2.54)$$

имеем

$$d\rho_a = [D_a \nabla^2 \rho_a + \sum_A r_a^A (\kappa_A^+ \prod_a \rho_a^{N_a^A} - \kappa_A^- \prod_a \rho_a^{M_a^A})] dt + dW_a(\mathbf{r}, t), \quad (8.2.55)$$

где

$$\begin{aligned} dW_a(\mathbf{r}, t) dW_b(\mathbf{r}', t) = \{ 2\delta_{a,b} \nabla' \cdot \nabla [D_a \rho_a(\mathbf{r}) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')] \\ + \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \sum_A r_a^A r_b^A (\kappa_A^+ \prod_a \rho_a^{N_a^A} + \kappa_A^- \prod_a \rho_a^{M_a^A}) \} dt. \end{aligned} \quad (8.2.56)$$

Применимость уравнения Ланжевена связана с разложением по обратному размеру системы. Уравнения (8.2.55, 56) зависят от характерного масштаба скоростей химических реакций Ω , согласно формуле (7.5.29) разд. 7.5.3. Единственно возможная интерпретация параметра Ω в данном случае: $\Omega = l^3$ — объем ячейки. Заметим, однако, что в то же время диффузионная часть имеет масштаб l , поскольку произведение $l^2 d$ должно оставаться равным коэффициенту диффузии, а члены, связанные с химической реакцией, имеют масштаб l^3 . Это означает,

что, по мере того как возрастает объем ячейки, вклад диффузионного члена уменьшается, но остается больше вклада поправочных членов за счет химических реакций. Последний вклад меньше диффузионного в $(l^3)^n$ раз, где n — целое число.

Точный метод сравнения вкладов диффузии и химических реакций будет рассмотрен в дальнейшем.

ПРИМЕР: $X_1 \rightleftharpoons 2X_2$. Используя метод разд. 7.5 для этой химической реакции, находим

$$N = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad M = \begin{bmatrix} 0 \\ 2 \end{bmatrix}, \quad r = \begin{bmatrix} -1 \\ 2 \end{bmatrix} \quad (8.2.57)$$

$$k^+ = k_1 = \kappa_1 \Omega^{-1+1}, \quad k^- = k_2 = \kappa_1 \Omega^{-2+1}.$$

Подставляя эти выражения в (8.2.55), имеем

$$\begin{aligned} d\rho_1(\mathbf{r}) &= (D_1 \nabla^2 \rho_1 - \kappa_1 \rho_1 + \kappa_2 \rho_2^2) dt + dW_1(\mathbf{r}, t) \\ d\rho_2(\mathbf{r}) &= (D_2 \nabla^2 \rho_2 + 2\kappa_1 \rho_1 - 2\kappa_2 \rho_2^2) dt + dW_2(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad (8.2.58)$$

где $dW(\mathbf{r}, t) dW^T(\mathbf{r}', t) =$

$$\begin{bmatrix} 2\nabla \cdot \nabla' [D_1 \rho_1 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')] + \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') [\kappa_1 \rho_1 + \kappa_2 \rho_2^2], & -2\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') [\kappa_1 \rho_1 + \kappa_2 \rho_2^2] \\ -2\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') [\kappa_1 \rho_1 + \kappa_2 \rho_2^2], & 2\nabla \cdot \nabla' [D_2 \rho_2 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')] + 4\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') [\kappa_1 \rho_1 + \kappa_2 \rho_2^2] \end{bmatrix} dt. \quad (8.2.59)$$

Это уравнение справедливо только в рамках разложения по обратному размеру системы, т. е. по обратному размеру ячейки, причем континуальный предел следует рассматривать только как форму записи. На самом деле мы имеем ячеечную модель, но работаем в масштабах, намного превышающих размер ячейки, хотя сама по себе ячейка является достаточно большой и вмещает много молекул.

На самом деле уравнение рассмотренного вида справедливо только в виде уравнения, линеаризованного вблизи детерминированного состояния. Уравнения такого типа были получены Кайзером [8.2]. Пуассоновское представление имеет в этом отношении то преимущество, что дает уравнения, в точности эквивалентные управляющему уравнению.

8.2.4. МЕТОД ПРЕДСТАВЛЕНИЯ ПУАССОНА

Для реакции с не более чем бимолекулярными стадиями мы получаем из (7.7.9) (используя обозначения (8.2.2)) довольно простое уравнение Фоккера — Планка, поскольку в представлении Пуассона пространственная диффузия не дает вклада в диффузионную матрицу. Обобщенно

ние на пространственно-неоднородный случай получим, переходя к переменной плотности

$$\eta_a(\mathbf{r}) = \alpha_a(\mathbf{r})/l^3, \quad (8.2.60)$$

для которой находим

$$d\eta_a(\mathbf{r}) = [D_a \nabla^2 \eta_a(\mathbf{r}) + \sum_A r_a^A (\kappa_A^+ \prod_a \eta_a^{N_A^+} - \kappa_A^- \prod_a \eta_a^{M_A^+})] dt + dW_a(\mathbf{r}, t) \quad (8.2.61)$$

$$dW_a(\mathbf{r}, t) dW_b(\mathbf{r}', t) = dt \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \sum_A (\kappa_A^+ \prod_a \eta_a^{N_A^+} - \kappa_A^- \prod_a \eta_a^{M_A^+}) \times (M_a^A M_b^A - N_a^A N_b^A - \delta_{ab} r_a^A). \quad (8.2.62)$$

Эти уравнения подобны уравнениям (8.2.55, 56). Они упрощаются, если их записать в явном виде. Например, рассматривая снова реакцию $X_1 \rightleftharpoons 2X_2$, получаем

$$d\eta_1(\mathbf{r}) = (D_1 \nabla^2 \eta_1 - \kappa_1 \eta_1 + \kappa_2 \eta_2^2) dt + dW_1(\mathbf{r}, t) \quad (8.2.63)$$

$$d\eta_2(\mathbf{r}) = (D_2 \nabla^2 \eta_2 + 2\kappa_1 \eta_1 - 2\kappa_2 \eta_2^2) dt + dW_2(\mathbf{r}, t) \quad (8.2.64)$$

$$dW(\mathbf{r}, t) dW^T(\mathbf{r}', t) = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix} (\kappa_1 \eta_1 - \kappa_2 \eta_2^2) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') dt. \quad (8.2.65)$$

Простота уравнений (8.2.63 — 65) при сравнении с (8.2.57, 58) поразительна. Особенно стоит отметить, что эти уравнения (в континуальной записи) в точности эквивалентны управляющему уравнению).

8.3. ПРОСТРАНСТВЕННЫЕ И ВРЕМЕННЫЕ КОРРЕЛЯЦИОННЫЕ СТРУКТУРЫ

В этом разделе мы рассмотрим различные аспекты пространственных, временных и пространственно-временных корреляций в линейных системах уравнений, являющихся, конечно, точно решаемыми. Наиболее важными представляются *факториальные корреляционные функции*, которые выражаются через факториальные моменты так же, как обыкновенные корреляционные функции выражаются через моменты. В приводимых ниже примерах мы увидим, что возникающие уравнения выглядят более естественно, будучи записаны через факториальные моменты.

8.3.1. РЕАКЦИЯ $X \xrightleftharpoons[k_2]{k_1} Y$

Предположим, что диффузия имеет однородный и изотропный характер, а коэффициенты диффузии компонент X и Y одинаковы. Тогда, поскольку уравнения реакции с диффузией линейны, мы находим для

концентрационных переменных η и μ (соответствующих компонентам X и Y) следующие ланжевенковские уравнения в пуассоновском представлении без случайного источника:

$$\begin{aligned} \partial_t \eta(\mathbf{r}, t) &= DV^2 \eta - k_1 \eta + k_2 \mu \\ \partial_t \mu(\mathbf{r}, t) &= DV^2 \mu + k_1 \eta - k_2 \mu. \end{aligned} \quad (8.3.1)$$

а) Пространственные корреляционные функции

Заметим теперь, что

$$\begin{aligned} \langle \eta(\mathbf{r}, t) \rangle &= \langle \rho_x(\mathbf{r}, t) \rangle \\ \langle \mu(\mathbf{r}, t) \rangle &= \langle \rho_y(\mathbf{r}, t) \rangle \\ \langle \eta(\mathbf{r}, t) \eta(\mathbf{r}', t) \rangle &= \langle \rho_x(\mathbf{r}, t) \rho_x(\mathbf{r}', t) \rangle - \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \langle \rho_x(\mathbf{r}, t) \rangle \equiv g(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) \\ \langle \eta(\mathbf{r}, t) \mu(\mathbf{r}', t) \rangle &= \langle \rho_x(\mathbf{r}, t) \rho_y(\mathbf{r}', t) \rangle \equiv f(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) \\ \langle \mu(\mathbf{r}, t) \mu(\mathbf{r}', t) \rangle &= \langle \rho_y(\mathbf{r}, t) \rho_x(\mathbf{r}', t) \rangle - \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \langle \rho_y(\mathbf{r}, t) \rangle = h(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t). \end{aligned} \quad (8.3.2)$$

Все эти соотношения представляют собой континуальную форму записи того факта, что моменты в представлении Пуассона совпадают с факториальными моментами для обычных переменных.

Уравнения для средних концентраций, очевидно, в точности совпадают с уравнениями (8.3.1). В однородном случае мы можем считать, что

$$\left. \begin{aligned} \langle \rho_x(\mathbf{r}, t) \rangle &= \langle \rho_x(t) \rangle \\ \langle \rho_y(\mathbf{r}, t) \rangle &= \langle \rho_y(t) \rangle \\ g(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) &= g(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t) \\ f(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) &= f(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t) \\ h(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) &= h(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t) \end{aligned} \right\} (8.3.3)$$

Для моментов вида $\langle \eta(\mathbf{r}, t) \eta(\mathbf{0}, t) \rangle$ и других находим следующие уравнения движения:

$$\begin{aligned} \frac{\partial g(\mathbf{r}, t)}{\partial t} &= 2DV^2 g(\mathbf{r}, t) - 2k_1 g(\mathbf{r}, t) + 2k_2 f(\mathbf{r}, t) \\ \frac{\partial f(\mathbf{r}, t)}{\partial t} &= 2DV^2 f(\mathbf{r}, t) - (k_1 + k_2) f(\mathbf{r}, t) + k_1 h(\mathbf{r}, t) + k_2 g(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad (8.3.4)$$

$$\frac{\partial h(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = 2DV^2 h(\mathbf{r}, t) - 2k_2 h(\mathbf{r}, t) + 2k_1 f(\mathbf{r}, t).$$

Стационарное решение этих уравнений имеет вид

$$g(\mathbf{r}) = \zeta k_2^2, \quad f(\mathbf{r}) = \zeta k_1 k_2, \quad h(\mathbf{r}) = \zeta k_1^2, \quad (8.3.5)$$

где ξ — произвольный параметр. Соответственно стационарные решения уравнений для средних значений таковы:

$$\langle x(\mathbf{r}_i) \rangle = \lambda k_2, \quad \langle y(\mathbf{r}_i) \rangle = \lambda k_1, \quad (8.3.6)$$

где λ — другой произвольный параметр. Если положить $\xi = 0$, мы вернемся к пуассоновскому случаю, в котором

$$\begin{aligned} \langle \rho_x(\mathbf{r}), \rho_x(\mathbf{r}') \rangle &= \langle \rho_x(\mathbf{r}) \rangle \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \\ \langle \rho_y(\mathbf{r}), \rho_y(\mathbf{r}') \rangle &= \langle \rho_y(\mathbf{r}) \rangle \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \\ \langle \rho_x(\mathbf{r}), \rho_y(\mathbf{r}') \rangle &= 0. \end{aligned} \quad (8.3.7)$$

(Выбирая другие значения параметра ξ , мы получим множество решений, отвечающих различным распределениям вероятностей полного числа молекул в системе.)

Так же легко можно получить решения, зависящие от времени, для произвольных начальных условий. В случае когда в начальный момент решения уравнений (8.3.4) однородны, некоррелированы и имеют пуассоновский вид, уравнения (8.3.7) удовлетворяются и их можно выбрать в качестве начальных условий. Тогда функции f , g и h в начальный момент равны нулю и с течением времени меняться не будут. Таким образом, некоррелированная пуассоновская форма сохраняется во времени, как это было уже ранее выведено в разд. 7.76.

При рассмотрении релаксации к пуассоновскому распределению лучше всего задаться начальной корреляционной функцией специального вида. Например, непуассоновская система, в которой корреляция между переменными в начальный момент времени отсутствует, может быть представлена начальными условиями

$$g(\mathbf{r}, 0) = \alpha \delta(\mathbf{r}), \quad f(\mathbf{r}, 0) = \beta \delta(\mathbf{r}), \quad h(\mathbf{r}, 0) = \gamma \delta(\mathbf{r}). \quad (8.3.8)$$

При этом решения уравнения (8.3.4), зависящие от времени, будут иметь вид

$$\begin{bmatrix} g(\mathbf{r}, t) \\ f(\mathbf{r}, t) \\ h(\mathbf{r}, t) \end{bmatrix} = \frac{\exp(-r^2/8Dt)}{(8\pi Dt)^{3/2}} \begin{bmatrix} k_2^2 \varepsilon_1 - 2k_2 \varepsilon_2 e^{-(k_1+k_2)t} + \varepsilon_3 e^{-2(k_1+k_2)t} \\ k_1 k_2 \varepsilon_1 + (k_2 - k_1) \varepsilon_2 e^{-(k_1+k_2)t} - \varepsilon_3 e^{-2(k_1+k_2)t} \\ k_1^2 \varepsilon_1 + 2k_1 \varepsilon_2 e^{-(k_1+k_2)t} + \varepsilon_3 e^{-2(k_1+k_2)t} \end{bmatrix}, \quad (8.3.9)$$

где

$$\begin{aligned} \varepsilon_1 &= (\alpha + 2\beta + \gamma)/(k_1 + k_2)^2 \\ \varepsilon_2 &= [k_2(\beta + \gamma) - k_1(\alpha + \beta)]/(k_1 + k_2)^2 \\ \varepsilon_3 &= [k_1^2 \alpha + k_2^2 \gamma - 2k_1 k_2 \beta]/(k_1 + k_2)^2. \end{aligned} \quad (8.3.10)$$

Замечания

1) Выражения ε_1 , ε_2 и ε_3 соответствуют отклонениям от некоррелированного пуассоновского распределения величин $\langle (x_i + y_i), (x_j + y_j) \rangle$, $\langle (x_i + y_i), (k_1 x_j - k_2 y_j) \rangle$ и $\langle (k_1 x_i - k_2 y_i), (k_1 x_j - k_2 y_j) \rangle$, являющихся по существу корреляционными функциями флуктуаций плотности, флуктуаций плотности и скорости реакции, а также флуктуаций скорости реакции. Мы замечаем характерный диффузионный множитель перед комбинацией вышеупомянутых членов с временной зависимостью, определяемой константами скоростей химических реакций.

2) Время, требуемое для того, чтобы отклонение от некоррелированной формы (8.3.8) стало пренебрежимо малым по сравнению с пуассоновским распределением, зависит, конечно, от величины начального отклонения. Считая, однако, что все величины α , β , γ , $\langle x_i \rangle$ и $\langle y_i \rangle$ имеют одинаковый порядок малости, можно сделать следующую грубую оценку. Рассмотрим для этого малую сферическую область радиуса R , объем которой намного больше объема наших основных ячеек. Мы находим, что в этой малой области объема V

$$D \{x[V, 0]\} = \int_V d^3r \int_V d^3r' \langle \rho_x(\mathbf{r}, 0), \rho_x(\mathbf{r}', 0) \rangle, \quad \text{т. е.}$$

$$D \{x[V, 0]\} = \langle x[V, 0] \rangle + \alpha V, \quad (8.3.11)$$

и аналогично

$$D \{y[V, 0]\} = \langle y[V, 0] \rangle + \gamma V$$

$$\langle x[V, 0], y[V, 0] \rangle = \beta V.$$

Через время $t \gg R^2/4D$ эти величины будут приближенно равны

$$D \{x[V, t]\} \simeq \langle x[V, t] \rangle$$

$$+ \frac{V^2}{(8\pi Dt)^{3/2}} (k_1^2 \varepsilon_1 - 2k_2 \varepsilon_2 e^{-(k_1+k_2)t} + \varepsilon_3 e^{-2(k_1+k_2)t})$$

$$D \{y[V, t]\} \simeq \langle y[V, t] \rangle$$

$$+ \frac{V^2}{(8\pi Dt)^{3/2}} (k_1^2 \varepsilon_1 + 2k_1 \varepsilon_2 e^{-(k_1+k_2)t} + \varepsilon_3 e^{-2(k_1+k_2)t})$$

$$\langle x[V, t], y[V, t] \rangle \simeq \frac{V^2}{(8\pi Dt)^{3/2}}$$

$$\times [k_1 k_2 \varepsilon_1 + (k_2 - k_1) \varepsilon_2 e^{-(k_1+k_2)t} - \varepsilon_3 e^{-2(k_1+k_2)t}].$$

(8.3.12)

Итак, диффузия уменьшает полное отклонение от пуассоновского некоррелированного поведения на величину порядка $R^3/(Dt)^{3/2}$. Однако

заметим, что если в начальный момент времени мы имеем непуассоновское распределение вероятностей, в котором корреляция между величинами x, y отсутствует ($\beta = 0$), то затем эта корреляция появляется и может стать довольно существенной при достаточно больших скоростях химических реакций.

б) Пространственно-временные корреляционные функции

Поскольку уравнения движения, рассматриваемые нами, линейны, мы можем использовать линейную теорию, развитую в разд. 3.7.4. Введем стационарную двумерную корреляционную матрицу

$$\underline{G}(\mathbf{r}, t) = \begin{bmatrix} \langle \rho_x(\mathbf{r}, t), \rho_x(\mathbf{0}, 0) \rangle_s & \langle \rho_y(\mathbf{r}, t), \rho_x(\mathbf{0}, 0) \rangle \\ \langle \rho_x(\mathbf{r}, t), \rho_y(\mathbf{0}, 0) \rangle_s & \langle \rho_y(\mathbf{r}, t), \rho_y(\mathbf{0}, 0) \rangle \end{bmatrix}. \quad (8.3.13)$$

Тогда уравнению (3.7.63) будет соответствовать уравнение

$$\partial_t \underline{G}(\mathbf{r}, t) = \begin{bmatrix} D\nabla^2 - k_1 & k_2 \\ k_1 & D\nabla^2 - k_2 \end{bmatrix} \underline{G}(\mathbf{r}, t). \quad (8.3.14)$$

Решение этого уравнения можно найти с помощью преобразования Фурье по пространственным переменным. При этом получается дифференциальное матричное уравнение первого порядка с граничными условиями при $t = 0$ (8.3.7), которое решается стандартными методами. В результате имеем

$$\underline{G}(\mathbf{r}, t) = \left(\frac{\langle \rho_x \rangle + \langle \rho_y \rangle}{(k_1 + k_2)^2} \right) \frac{\exp(-r^2/4Dt)}{(4\pi Dt)^{3/2}} \begin{bmatrix} k_2^2 + k_1 k_2 e^{-(k_1+k_2)t} & k_1 k_2 (1 - e^{-(k_1+k_2)t}) \\ k_1 k_2 (1 - e^{-(k_1+k_2)t}) & k_1^2 + k_1 k_2 e^{-(k_1+k_2)t} \end{bmatrix}. \quad (8.3.15)$$

Вводя новые переменные

$$n(\mathbf{r}, t) = \rho_x(\mathbf{r}, t) + \rho_y(\mathbf{r}, t) \quad (8.3.16)$$

$$c(\mathbf{r}, t) = [k_1 \rho_x(\mathbf{r}, t) - k_2 \rho_y(\mathbf{r}, t)] / (k_1 + k_2), \quad (8.3.17)$$

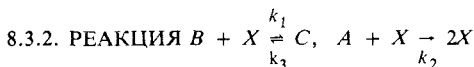
можно представить решение в виде

$$\langle n(\mathbf{r}, t), n(\mathbf{0}, 0) \rangle_s = \langle n \rangle_s \frac{\exp(-r^2/4Dt)}{(4\pi Dt)^{3/2}} \quad (8.3.18)$$

$$\langle n(\mathbf{r}, t), c(\mathbf{0}, 0) \rangle_s = \langle c(\mathbf{r}, t), n(\mathbf{0}, 0) \rangle_s = 0 \quad (8.3.19)$$

$$\langle c(\mathbf{r}, t), c(\mathbf{0}, 0) \rangle_s = \frac{k_1 k_2 \langle n \rangle_s}{(k_1 + k_2)^2} \frac{\exp(-r^2/4Dt)}{(4\pi Dt)^{3/2}} e^{-(k_1+k_2)t}. \quad (8.3.20)$$

Переменные n и c соответствуют полной плотности и скорости химической реакции в единице объема ($\langle c \rangle_s = 0$). Таким образом, мы видим, что корреляционная функция флуктуаций плотности, определяемая выражением (8.3.18), та же, что и в случае чистой диффузии. Но выражение (8.3.20) дает корреляционную функцию флуктуаций скорости химической реакции в единице объема, а выражение (8.3.19) показывает, что они независимы. Во все эти корреляционные функции входит характерный диффузионный множитель. Простота полученного результата обусловлена равенством коэффициентов диффузии различных компонент.



Эта реакция уже рассматривалась в разд. 7.6.4а, но без учета пространственной зависимости. Из формул (8.2.60 — 62), (7.6.55, 56) мы находим уравнение для концентрационной переменной $\eta(\mathbf{r}, t)$ в представлении Пуассона

$$d\eta(\mathbf{r}, t) = [D\nabla^2\eta(\mathbf{r}, t) + (K_2 - K_1)\eta(\mathbf{r}, t) + K_3]dt + dW(\mathbf{r}, t) \quad (8.3.21)$$

$$dW(\mathbf{r}, t)dW(\mathbf{r}', t) = 2dt \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')K_2\eta(\mathbf{r}, t), \quad (8.3.22)$$

где

$$\left. \begin{aligned} k_3C &= K_3l^3 \\ k_1B &= K_1 \\ k_2A &= K_2 \end{aligned} \right\} \quad (8.3.23)$$

Поскольку эта система уравнений линейна, она может быть решена точно, но из-за того, что химический продукт X образуется в ходе второй реакции со скоростью, пропорциональной числу молекул X , мы все-таки получаем в пуассоновском представлении флуктуационный член.

[В методе Крамерса — Мойала мы обычно получаем для $\rho(\mathbf{r}, t)$ уравнение того же вида, что и (8.3.21), но $dW(\mathbf{r}, t)$ удовлетворяет соотношению

$$dW(\mathbf{r}, t) dW(\mathbf{r}', t) = dt \{ 2\nabla' \cdot \nabla [D\rho(\mathbf{r})\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')] + \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')[(K_2 + K_1)\eta(\mathbf{r}, t) + K_3] \}. \quad (8.3.24)$$

а) Пространственные корреляционные функции

Положим теперь

$$\begin{aligned} g(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) &= \langle \rho(\mathbf{r}, t), \rho(\mathbf{r}', t) \rangle - \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \langle \rho(\mathbf{r}, t) \rangle \\ &= \langle \eta(\mathbf{r}, t), \eta(\mathbf{r}', t) \rangle = \langle \eta(\mathbf{r}, t) \eta(\mathbf{r}', t) \rangle - \langle \eta(\mathbf{r}, t) \rangle \langle \eta(\mathbf{r}', t) \rangle. \end{aligned} \quad (8.3.25)$$

Мы рассмотрим стационарный однородный случай, в котором, очевидно,

$$\langle \eta(\mathbf{r}, t) \rangle_s = \langle \rho(\mathbf{r}, t) \rangle_s = \langle \rho \rangle_s. \quad (8.3.26)$$

Тогда

$$\begin{aligned} dg(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) &= d\langle \eta(\mathbf{r}, t) \eta(\mathbf{r}', t) \rangle \\ &= \langle \eta(\mathbf{r}, t) d\eta(\mathbf{r}', t) \rangle + \langle d\eta(\mathbf{r}, t) \eta(\mathbf{r}', t) \rangle + \langle d\eta(\mathbf{r}, t) d\eta(\mathbf{r}', t) \rangle, \end{aligned} \quad (8.3.27)$$

а после применения правил Ито и формул (8.3.21, 22) получим

$$\begin{aligned} &= [D\nabla^2 + D\nabla'^2 + 2(K_2 - K_1)] \langle \eta(\mathbf{r}, t) \eta(\mathbf{r}', t) \rangle \\ &\quad + 2K_3 \langle \rho \rangle_s dt + 2K_2 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \langle \rho \rangle_s dt. \end{aligned} \quad (8.3.28)$$

Заметим, что

$$\langle \rho \rangle_s = K_3 / (K_1 - K_2) \quad (8.3.29)$$

и что в пространственно-однородном случае функция $g(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t)$ может быть функцией только от $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$, которую мы обозначим через $g(\mathbf{r}, t)$.

Используя формулы (8.3.25, 26), получаем для нее уравнение

$$\partial_t g(\mathbf{r}, t) = 2[D\nabla^2 + (K_2 - K_1)]g(\mathbf{r}, t) + 2K_2 \langle \rho \rangle_s \delta(\mathbf{r}). \quad (8.3.30)$$

Стационарное решение этого уравнения лучше всего искать в виде интеграла Фурье

$$g_s(\mathbf{r}) = \int d^3\mathbf{q} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \tilde{g}_s(\mathbf{q}). \quad (8.3.31)$$

Используя также представление

$$\delta(\mathbf{r}) = (2\pi)^{-3} \int d^3\mathbf{q} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}, \quad (8.3.32)$$

получаем

$$\tilde{g}_s(\mathbf{q}) = \frac{K_2 \langle \rho \rangle_s}{(2\pi)^3} \frac{1}{Dq^2 + K_1 - K_2}. \quad (8.3.33)$$

Совершая обратное преобразование Фурье, находим

$$g_s(\mathbf{r}) = \frac{K_2 \langle \rho \rangle_s}{4\pi D r} \exp \left[-r \left(\frac{K_1 - K_2}{D} \right)^{1/2} \right]. \quad (8.3.34)$$

Следовательно,

$$\langle \rho(\mathbf{r}, t), \rho(\mathbf{r}', t) \rangle_s = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \langle \rho \rangle_s + \frac{K_2 \langle \rho \rangle_s}{4\pi D |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \exp \left[-|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \left[\frac{K_1 - K_2}{D} \right]^{1/2} \right]. \quad (8.3.35)$$

Замечания

1) Отметим наличие двух различных слагаемых в (8.3.35): дельтаобразной части, отвечающей пуассоновским флуктуациям, независимым в различных точках пространства, и добавочного члена с характерной корреляционной длиной:

$$l_c = \sqrt{D/(K_1 - K_2)}. \quad (8.3.36)$$

2) *Приближение к равновесию*: в случае когда $K_2 \rightarrow 0$ наша система сводится к простой обратимой реакции $B + X \rightleftharpoons C$, при этом корреляция (8.3.34) исчезает. Однако корреляционная длина в нуль *не* обращается.

3) *Локальные и глобальные флуктуации*: проблема, затронутая первоначально Николисом [8.3], состоит в следующем. Рассмотрим полное число молекул в объеме V :

$$x[V, t] = \int_V d^3\mathbf{r} \rho(\mathbf{r}, t). \quad (8.3.37)$$

Нам хотелось бы знать, чему равна дисперсия этой величины. Очевидно, имеем

$$D \{x(V)\}_s = \int_V d^3\mathbf{r} \int_V d^3\mathbf{r}' \langle \rho(\mathbf{r}, t), \rho(\mathbf{r}', t) \rangle_s, \quad (8.3.38)$$

или, учитывая (8.3.35),

$$= \langle x(V) \rangle_s + \frac{K_2 \langle \rho \rangle_s}{4\pi D} \int_V d^3\mathbf{r} \int_V d^3\mathbf{r}' |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^{-1} \exp(-|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|/l_c). \quad (8.3.39)$$

Можно вычислить два предела этого выражения. Если $V \gg l^3$, то, замечая, что $g(r) \rightarrow 0$ при $r \rightarrow \infty$, мы интегрируем стационарный вариант уравнения (8.3.30), опуская поверхностные члены, возникающие вследствие интегрирования оператора Лапласа по частям, и получаем

$$0 = 2(K_2 - K_1) \int_V d^3\mathbf{r} \int_V d^3\mathbf{r}' g(\mathbf{r} - \mathbf{r}') + 2K_2 \langle \rho \rangle_s \int_V d^3\mathbf{r}'. \quad (8.3.40)$$

Таким образом,

$$\iint_V d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{r}' g(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \sim \frac{K_2 \langle x(V) \rangle_s}{K_1 - K_2}, \quad (8.3.41)$$

поэтому

$$D\{x(V)\}_s \sim \frac{K_1 \langle x(V) \rangle_s}{K_1 - K_2} \quad (V \gg l^3). \quad (8.3.42)$$

Для получения предельного выражения в случае малого объема нужно действовать более тонко. Однако для сферического объема радиуса $R \ll l_c$ мы можем пренебречь экспонентой в выражении (8.3.39) и получить

$$\begin{aligned} \iint_{VV'} d^3r d^3r' |r - r'|^{-1} &= \int_V d^3r' \int_0^R 4\pi r^2 dr d(\cos\theta) (r^2 + r'^2 - 2rr'\cos\theta)^{-1/2} \\ &= \int_V d^3r' \int_0^R \frac{4\pi r}{r'} dr (|r + r'| - |r - r'|) \\ &= 2R^5(4\pi)^2/5, \end{aligned} \quad (8.3.43)$$

так что

$$D\{x(V)\}_s \sim \langle x(V) \rangle_s \left(1 + \frac{2R^2 K_2}{5D}\right) \quad \left(V = \frac{4}{3} \pi R^3 \ll l_c^3\right). \quad (8.3.44)$$

Таким образом, мы видим, что флуктуации в малом объеме пуассоновские. Однако в большом объеме флуктуации непуассоновские и их дисперсия в точности равна выражению (7.6.72), следующему из управляющего уравнения для той же реакции.

Для произвольного сферического объема можно, используя методы преобразования Фурье, сделать непосредственную оценку дисперсии и получить

$$\begin{aligned} D\{x(V)\} &= \langle x(V) \rangle \left\{ 1 + \frac{3K_2 l_c^5}{2DR^3} \left[1 - \left(\frac{R}{l_c}\right)^2 + \frac{2}{3} \left(\frac{R}{l_c}\right)^3 \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - e^{-2R/l_c} \left(1 + \frac{R}{l_c}\right)^2 \right] \right\}, \end{aligned} \quad (8.3.45)$$

что дает более точную асимптотическую формулу для большого объема

$$D\{x(V)\} \sim \langle x(V) \rangle \left(\frac{K_1}{K_1 - K_2} - \frac{3K_1 l_c}{2R(K_1 - K_2)} \right) \quad (V \gg l_c^3). \quad (8.3.46)$$

К этому результату можно прийти более простым способом. Заметим, что корреляционная функция $\langle \rho(r, t), \rho(r', t) \rangle$ в представлении Фурье складывается из фурье-образов функций $g_s(r)$ и $\delta(r) \langle \rho \rangle_s$, что дает просто

$$\langle \rho \rangle_s (2\pi)^{-3} \frac{Dq^2 + K_1}{Dq^2 + K_1 - K_2}. \quad (8.3.47)$$

Это означает, что для малых значений q , т. е. для большой длины волны, выражение (8.3.47) приближенно равно

$$\langle \rho \rangle_s (2\pi)^{-3} \frac{K_1}{K_1 - K_2} \quad (8.3.48)$$

и является фурье-образом от выражения

$$\langle \rho \rangle_s \frac{K_1}{K_1 - K_2} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (8.3.49)$$

которое в точности соответствует дисперсии, найденной из глобального управляющего уравнения.

Для больших значений q , т. е. для малых длин волн, находим

$$\langle \rho \rangle_s (2\pi)^{-3}, \quad (8.3.50)$$

что соответствует выражению

$$\langle \rho \rangle_s \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (8.3.51)$$

т. е. пуассоновским флуктуациям. С физической точки зрения это различие возникает из-за различного масштаба диффузионной и реакционной частей управляющего уравнения, как это было отмечено в разд. 8.2.3. Так, в малом объеме доминирует диффузия, поскольку флуктуации, возникающие из-за диффузии, накапливаются вследствие постоянных перескоков молекул туда и обратно через границы объема V . Это поверхностный эффект; для малого объема он преобладает над объемным эффектом, обусловленным флуктуациями от химических реакций. Для больших объемов, напротив, поверхностный эффект пренебрежимо мал и значительным является только объемный эффект.

б) Пространственно-временные корреляционные функции

Поскольку рассматриваемая система линейна, мы можем, как и в разд. 8.3.1, использовать метод разд. 3.7.4. Введем функцию

$$G(\mathbf{r}, t) = \langle \rho(\mathbf{r}, t), \rho(\mathbf{0}, 0) \rangle_s. \quad (8.3.52)$$

Тогда уравнению (3.7.63) соответствует линейное уравнение

$$\partial_t G(\mathbf{r}, t) = D \nabla^2 G(\mathbf{r}, t) - (K_1 - K_2) G(\mathbf{r}, t) \quad (8.3.53)$$

с начальным условием

$$G(\mathbf{r}, 0) = \langle \rho(\mathbf{r}), \rho(\mathbf{0}) \rangle_s, \quad (8.3.54)$$

определяемым формулой (8.3.35). Представляя функцию $G(r, t)$ в виде интеграла Фурье

$$\tilde{G}(\mathbf{r}, t) = \int d^3\mathbf{q} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \tilde{G}(\mathbf{q}, t), \quad (8.3.55)$$

вместо (8.3.53) получим

$$\partial_t \tilde{G}(\mathbf{q}, t) = -(Dq^2 + K_1 - K_2) \tilde{G}(\mathbf{q}, t). \quad (8.3.56)$$

Используя представление Фурье (8.3.47) начального условия (8.3.54), запишем решение этого уравнения в виде

$$\tilde{G}(\mathbf{q}, t) = (2\pi)^{-3} \frac{Dq^2 + K_1}{Dq^2 + K_1 - K_2} \exp[-(Dq^2 + K_1 - K_2)t]. \quad (8.3.57)$$

При желании можно при помощи стандартных методов получить оригинал этого фурье-изображения, хотя фактически предпочтительнее иметь дело с преобразованием Фурье от корреляционной функции. Это диктуется как практическими соображениями, так и удобством вычислений.

Так, в пространственно-временном представлении имеем

$$\begin{aligned} G(\mathbf{r}, t) = & \frac{\langle \rho \rangle \exp(-r^2/4Dt - Dt/l_c^2)}{(4\pi Dt)^{3/2}} \\ & + \frac{K_2 \langle \rho \rangle}{8\pi Dr} \left\{ [\exp(-r/l_c)] \operatorname{erfc} \left[\frac{(Dt)^{1/2}}{l_c} - \frac{r}{2(Dt)^{1/2}} \right] \right. \\ & \left. + [\exp(r/l_c)] \operatorname{erfc} \left[\frac{(Dt)^{1/2}}{l_c} + \frac{r}{2(Dt)^{1/2}} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (8.3.58)$$

Для малых t находим

$$G(\mathbf{r}, t) \rightarrow \langle \rho \rangle \exp\left(\frac{-r^2}{4Dt}\right) \left[(4\pi Dt)^{-3/2} - \frac{4K_2(Dt)^{3/2}}{r^3 \sqrt{\pi}} \right] + \frac{K_2 \langle \rho \rangle e^{-r/l_c}}{4\pi Dr}, \quad (8.3.59)$$

в то время как для больших t

$$G(\mathbf{r}, t) \sim \left(\frac{\exp(-r^2/4Dt)}{(4\pi Dt)^{3/2}} + \frac{K_2 l_c}{4\pi r (\pi D^2 t)^{1/2}} \right) \langle \rho \rangle \exp(-Dt/l_c^2), \quad (8.3.60)$$

в) Поведение в точке неустойчивости

При $K_1 \rightarrow K_2$ реакция приближается к точке неустойчивости, причем, когда $K_1 = K_2$, стационарных решений не существует. Мы видим, что одновременно:

- 1) корреляционная длина $l_c \rightarrow \infty$ (8.3.36);
- 2) дисперсия флуктуаций в объеме $V \gg l_c^3$ становится бесконечной

[см. (8.3.42)]. Однако, когда $l_c \rightarrow \infty$ при конечных V , достигается точка, в которой $l_c^3 \sim V$, и равенство (8.3.42) перестает быть справедливым. Когда, наконец, $l_c^3 \gg V$, объем делается относительно малым и флуктуации внутри него становятся пуассоновскими;

3) в качестве времени корреляции лучше всего взять

$$\tau_c = l_c^2/D, \quad (8.3.61)$$

поскольку это выражение является коэффициентом при t в экспоненте, определяющей поведение пространственно-временной корреляционной функции (8.3.60) на больших временах (в пренебрежении диффузионной частью). Следовательно, вблизи точки неустойчивости также $\tau_c \rightarrow \infty$. Таким образом, мы имеем медленные коррелированные на больших расстояниях флуктуации. Такое поведение характерно и для многих других подобных ситуаций.

8.3.3. НЕЛИНЕЙНАЯ МОДЕЛЬ С ФАЗОВЫМ ПЕРЕХОДОМ ВТОРОГО РОДА

Рассмотрим реакции



обсуждавшиеся ранее в разд. 7.7в, 7.7.3а, 7.7.4в. Эта модель была впервые введена Шлэглем [8.4] и после этого исследовалась во многих работах.

Детерминистическое уравнение для этой модели имеет вид

$$\partial_t \rho(\mathbf{r}, t) = D\nabla^2 \rho + \kappa_3 + (\kappa_2 - \kappa_1)\rho - \kappa_4 \rho^2, \quad (8.3.63)$$

а его стационарное решение дается выражением

$$\rho(\mathbf{r}) = \rho_s = [\kappa_2 - \kappa_1 + \sqrt{(\kappa_2 - \kappa_1)^2 + 4\kappa_4\kappa_3}]/2\kappa_4. \quad (8.3.64)$$

(Все κ_i определены в (7.5.29) при $\Omega = l^3$.) Для малых значений κ_3 стационарное решение обнаруживает поведение, характерное для фазового перехода, как это показано на рис. 8.1.

Уравнению (8.3.63) соответствует стохастическое дифференциальное уравнение, записанное в представлении Пуассона:

$$\begin{aligned} d\eta(\mathbf{r}, t) &= [(\mathcal{D}\eta)(\mathbf{r}, t) + \kappa_3 + (\kappa_2 - \kappa_1)\eta(\mathbf{r}, t) - \kappa_4\eta^2(\mathbf{r}, t)]dt \\ &+ \sqrt{2}[\kappa_2\eta(\mathbf{r}, t) - \kappa_4\eta^2(\mathbf{r}, t)]^{1/2}dW(\mathbf{r}, t), \end{aligned} \quad (8.3.65)$$

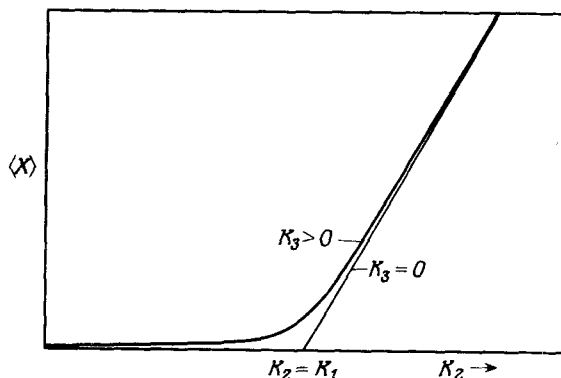


Рис. 8.1. График зависимости $\langle x \rangle$ от κ для модели фазового перехода второго рода.

где

$$dW(\mathbf{r}, t)dW(\mathbf{r}', t) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')dt. \quad (8.3.66)$$

В этом уравнении мы не перешли к континуальному пределу, обсуждавшемуся в разд. 8.2.2, но сохранили возможность нелокальности диффузии, т. е.

$$(\mathcal{D}\eta)(\mathbf{r}, t) = - \int \mathcal{D}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)\eta(\mathbf{r}', t)d^3\mathbf{r}', \quad (8.3.67)$$

хотя ранее рассматривался только случай однородной и изотропной диффузии.

В рассматриваемой модели отсутствует малый параметр при флуктуационном члене, и мы остаемся без обычного параметра разложения. Поэтому вводим формально параметр λ в уравнение (8.3.65):

$$d\eta(\mathbf{r}, t) = [(\mathcal{D}\eta)(\mathbf{r}, t) + \kappa_3 + (\kappa_2 - \kappa_1)\eta(\mathbf{r}, t) - \kappa_4\eta^2(\mathbf{r}, t)]dt + \lambda\sqrt{2}[\kappa_2\eta(\mathbf{r}, t) - \kappa_4\eta^2(\mathbf{r}, t)]^{1/2}dW(\mathbf{r}, t) \quad (8.3.68)$$

Затем разлагаем $\eta(\mathbf{r}, t)$ по степеням λ :

$$\eta(\mathbf{r}, t) = \eta_0(\mathbf{r}, t) + \lambda\eta_1(\mathbf{r}, t) + \lambda^2\eta_2(\mathbf{r}, t) + \dots, \quad (8.3.69)$$

и полагаем в конце вычислений λ равным единице. Однако, вследствие того что все интегралы Фурье обрезаются на масштабе l^{-1} , это разложение будет все еще фактически разложением по параметру $(l^3)^{-1}$.

Подставляя (8.3.69) в (8.3.65), находим

$$\frac{d\eta_0(\mathbf{r}, t)}{dt} = (\mathcal{D}\eta_0)(\mathbf{r}, t) + \kappa_3 + (\kappa_2 - \kappa_1)\eta_0(\mathbf{r}, t) - \kappa_4\eta_0^2(\mathbf{r}, t) \quad (8.3.70)$$

$$d\eta_1(\mathbf{r}, t) = \{(\mathcal{D}\eta_1)(\mathbf{r}, t) + [\kappa_2 - \kappa_1 - 2\kappa_4\eta_0(\mathbf{r}, t)]\eta_1(\mathbf{r}, t)\}dt + \sqrt{2}[\kappa_2\eta_0(\mathbf{r}, t) - \kappa_4\eta_0^2(\mathbf{r}, t)]^{1/2}dW(\mathbf{r}, t) \quad (8.3.71)$$

$$d\eta_2(\mathbf{r}, t) = \{(\mathcal{D}\eta_2)(\mathbf{r}, t) + [\kappa_2 - \kappa_1 - 2\kappa_4\eta_0(\mathbf{r}, t)]\eta_2(\mathbf{r}, t) - \kappa_4\eta_1^2(\mathbf{r}, t)\} dt + \frac{[\kappa_2 - 2\kappa_4\eta_0(\mathbf{r}, t)]\eta_1(\mathbf{r}, t)}{\sqrt{2}[\kappa_2\eta_0(\mathbf{r}, t) - \kappa_4\eta_0^2(\mathbf{r}, t)]^{1/2}} dW(\mathbf{r}, t). \quad (8.3.72)$$

Уравнение (8.3.70) имеет однородное стационарное решение (8.3.64), так что

$$\kappa_2 - \kappa_1 - 2\kappa_4\eta_0 \equiv \kappa = [(\kappa_1 - \kappa_2)^2 + 4\kappa_4\kappa_3]^{1/2}. \quad (8.3.73)$$

Подставляя это равенство в (8.3.70 — 72) и выполняя преобразование Фурье, получаем

$$\eta_1(\mathbf{q}, t) = (2\kappa_1\eta_0)^{1/2} \int_0^t [\exp\{-[\mathcal{D}(q^2) + \kappa](t - t')\}] d\tilde{W}(\mathbf{q}, t') \quad (8.3.74)$$

$$\begin{aligned} \tilde{\eta}_2(\mathbf{q}, t) = & -\kappa_4 \int d^3\mathbf{q}_1 \int_0^t dt' [\exp\{-[\mathcal{D}(q^2) + \kappa](t - t')\}] \tilde{\eta}_1(\mathbf{q} - \mathbf{q}_1, t') \tilde{\eta}_1(\mathbf{q}_1, t') \\ & + \frac{\kappa_1 + \kappa}{[2(\kappa_1\eta_0 - \kappa_3)]^{1/2}} \int d^3\mathbf{q}_1 \int_0^t [\exp\{-[\mathcal{D}(q^2) + \kappa](t - t')\}] \tilde{\eta}_1(\mathbf{q} - \mathbf{q}_1, t') d\tilde{W}(\mathbf{q}_1, t) \end{aligned} \quad (8.3.75)$$

где

$$d\tilde{W}(\mathbf{q}, t) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{3/2} \int \exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) dW(\mathbf{r}, t) d^3\mathbf{r} \quad (8.3.76)$$

$$\tilde{\eta}_1(\mathbf{q}, t) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{3/2} \int \exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) \eta_1(\mathbf{r}, t) d^3\mathbf{r} \quad (8.3.77)$$

и т. д. $\mathcal{D}(q^2)$ является преобразованием Фурье от $\mathcal{D}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$. В (8.3.74, 75) мы опустили тривиальные члены, соответствующие начальным условиям.

Средняя концентрация и корреляционная функция в низшем порядке определяются в стационарном случае выражениями

$$\langle \rho(\mathbf{r}, t) \rangle = \eta_0 \quad (8.3.78)$$

$$\begin{aligned} \langle \rho(\mathbf{r}, t) \rho(\mathbf{r}', t) \rangle - \langle \rho(\mathbf{r}, t) \rangle \langle \rho(\mathbf{r}', t) \rangle = & \eta_0 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \\ & + \langle \eta_1(\mathbf{r}, t) \eta_1(\mathbf{r}', t) \rangle. \end{aligned} \quad (8.3.79)$$

Из (8.3.74) следует, что

$$\langle \tilde{\eta}_1(\mathbf{q}, t) \tilde{\eta}_1(\mathbf{q}', t) \rangle = \frac{\kappa_1\eta_0\delta(\mathbf{q} + \mathbf{q}')}{[\mathcal{D}(q^2) + \kappa]} [1 - \exp\{-2[\mathcal{D}(q^2) + \kappa]t\}]. \quad (8.3.80)$$

Таким образом, вклад низшего порядка в корреляционную функцию имеет вид

$$\begin{aligned} \langle \rho(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}') \rangle - \langle \rho(\mathbf{r}) \rangle \langle \rho(\mathbf{r}') \rangle = & \eta_0 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \\ & + \frac{\kappa_1\eta_0}{(2\pi)^3} \int d^3\mathbf{q} \frac{\exp[i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')] }{\mathcal{D}(q^2) + \kappa}. \end{aligned} \quad (8.3.81)$$

Если положить

$$(\mathcal{D}\eta)(\mathbf{r}) = D\nabla^2\eta(\mathbf{r}), \quad (8.3.82)$$

то

$$\mathcal{D}(q^2) = Dq^2. \quad (8.3.83)$$

Равенство (8.3.81) имеет в точности тот же вид, что и полученное ранее равенство (8.3.35), а именно

$$\langle \rho(\mathbf{r}), \rho(\mathbf{r}') \rangle_s = \langle \rho \rangle_0 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') + \frac{\kappa_1 \langle \rho_0 \rangle}{4\pi D |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \exp(-|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|/l_c), \quad (8.3.84)$$

где

$$l_c = (D/\kappa)^{1/2}. \quad (8.3.85)$$

Из этого результата следуют все ранее сделанные выводы, касающиеся локальных и глобальных флуктуаций, пуассоновских и непуассоновских флуктуаций, поскольку все эти выводы связаны с формой выражения (8.3.84), а не выбором особых значений параметров.

Заметим, что если $\kappa_1 = \kappa_2$, то также $\kappa \rightarrow 0$ и, следовательно, $l_c \rightarrow \infty$ при $\kappa_3 \rightarrow 0$. Таким образом, в этом примере имеют место те же явления корреляции на больших расстояниях, что и в предыдущем примере.

Поправки высшего порядка и проблемы расходимости. Только результаты низшего порядка можно одинаково легко получить с помощью метода разложения по обратному размеру системы, метода Крамерса — Мойала или путем предположений о факторизации в уравнениях для корреляционных функций.

Поправкой следующего порядка к средней концентрации является $\langle \eta_2(\mathbf{r}, t) \rangle$. Из (8.3.75) непосредственно следует

$$\begin{aligned} \langle \tilde{\eta}_2(\mathbf{q}, t) \rangle &= - \int d^3\mathbf{q}_1 \int_0^t dt' \exp\{-[\mathcal{D}(q^2) + \kappa](t - t')\} \\ &\quad \times \langle \eta_1(\mathbf{q} - \mathbf{q}_1, t') \eta_1(\mathbf{q}_1, t') \rangle, \end{aligned} \quad (8.3.86)$$

откуда в стационарном случае имеем

$$\langle \tilde{\eta}_2(\mathbf{q}) \rangle = -\kappa_4 \kappa_1 \eta_0 \delta(\mathbf{q}) \int \frac{d^3\mathbf{q}_1}{\mathcal{D}(q^2) + \kappa}. \quad (8.3.87)$$

Выбирая \mathcal{D} в виде (8.3.83), приходим к выражению

$$\langle \eta_2 \rangle = -\frac{\kappa_4 \kappa_1 \eta_0}{(2\pi)^{3/2}} \int \frac{d^3\mathbf{q}_1}{Dq^2 + \kappa}, \quad (8.3.88)$$

интеграл в котором расходится. Эта сложная ситуация обусловлена выбором континуальной формы, ибо если сохранить на всех стадиях дискретные ячейки, то следует:

1) заменить интеграл $\int d^3q$ суммой по всем допустимым значениям q , которые меньше $1/l$;

2) считать $\mathcal{D}(q^2)$ некоторой тригонометрической функцией от q и l . При $d_{ij} = d$, когда ячейки с номерами i и j являются соседними, и $d_{ij} = 0$ в противном случае, функция $\mathcal{D}(q^2)$ имеет вид

$$\frac{4D}{l^2} \left[\sin^2 \left(\frac{lq_x}{2} \right) + \sin^2 \left(\frac{lq_y}{2} \right) + \sin^2 \left(\frac{lq_z}{2} \right) \right].$$

В этом представлении никаких расходимостей не возникает, поскольку сумма по q является конечной, причем

$$\mathcal{D}(q^2) \rightarrow Dq^2$$

при $l|q| \ll 1$.

Нелокальные реакции. Расходимости, однако, можно избежать и при сохранении континуальной формы, если в уравнениях видоизменить член вида $\eta^2(\mathbf{r})$. Этот член определяется картиной столкновений в химической реакции и является нелокальным по ряду причин:

1) молекулы обладают конечным размером, хотя *строго* локальная форма игнорирует это обстоятельство;

2) постоянная времени, определяющая крупномасштабную временную шкалу, в которой система является марковской, такова, что молекулы за это время будут перемещаться на определенное расстояние. Продукты реакции, являющиеся обычно результатом столкновений в одних местах, образуются уже в других местах в более позднее время. Делая замену

$$\eta(\mathbf{r})^2 \rightarrow \int d^3\mathbf{r}' d^3\mathbf{r}'' m(\mathbf{r} - \mathbf{r}', \mathbf{r} - \mathbf{r}'') \eta(\mathbf{r}') \eta(\mathbf{r}''), \quad (8.3.89)$$

вместо выражения (8.3.88) находим

$$\langle \eta_2 \rangle = - \frac{\kappa_4 \kappa_1 \eta_0}{(2\pi)^{3/2}} \int \frac{d^3\mathbf{q} \tilde{m}(\mathbf{q}, -\mathbf{q})}{Dq^2 + \kappa}, \quad (8.3.90)$$

где $\tilde{m}(\mathbf{q}, \mathbf{q}')$ — фурье-образ функции $m(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$. Если функция m достаточно нелокальная, то при больших значениях q функция $\tilde{m}(\mathbf{q}, -\mathbf{q})$ будет достаточно быстро спадать и выражение для $\langle \eta_2 \rangle$ будет конечным.

8.4. СВЯЗЬ МЕЖДУ ЛОКАЛЬНЫМ И ГЛОБАЛЬНЫМ ОПИСАНИЯМИ

В разд. 8.3.2 мы видели, что дисперсия флуктуаций в элементе объема V является пуассоновской при малых V и приближается к дисперсии, получаемой из управляющего уравнения без диффузии для соответствующей реакции, при достаточно больших значениях V . Это происходит из-за того, что флуктуации, возникающие в химических реакциях, складываются друг с другом, в то время как диффузия, обуславливающая простое перемещение молекул из одного места в другое, эффективно влияет на флуктуации в объеме только через его поверхность.

Имеется точная теорема, которая гласит, что при достаточно большой скорости диффузии молекулы в объеме V будут быстро перемещаться и очень часто сталкиваться между собой. Следовательно, любая молекула с равной вероятностью столкнется с любой другой молекулой. Эти результаты совершенно строго доказаны и подробно изложены в работе Арнольда [8.5].

Метод доказательства основан, по существу, на технике адиабатического исключения, развитой в гл. 5, и может быть легко перенесен на случай пуассоновского представления.

8.4.1. ЯВНОЕ АДИАБАТИЧЕСКОЕ ИСКЛЮЧЕНИЕ НЕОДНОРОДНЫХ МОД

Для химических веществ одного сорта, диффундирующих и реагирующих между собой, в рамках ячеечной модели мы можем записать в представлении Пуассона следующее уравнение Фоккера — Планка:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \left\{ \sum_{i,j} \left[-\frac{\partial}{\partial x_i} D_{ij} x_j \right] + \sum_i \left[\frac{\partial}{\partial x_i} a(x_i) + \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} b(x_i) \right] \right\} P. \quad (8.4.1)$$

Введем собственные векторы $f_i(\mathbf{q})$ матрицы D_{ij} , которые удовлетворяют соотношению

$$\sum_j D_{ij} f_j(\mathbf{q}) = -D\lambda(\mathbf{q}) f_i(\mathbf{q}). \quad (8.4.2)$$

Точный вид собственных функций, зависящий от D_{ij} , не представляется для нас важным. В простейшем случае, когда перенос происходит только между соседними ячейками, а отражающие границы на стенках всей системы предполагаются одномерными, имеем

$$f_j(\mathbf{q}) \propto \cos(\mathbf{q}j). \quad (8.4.3)$$

Наличие отражающих границ, расстояние между которыми $L = Nl$ (где l — линейный размер ячейки), накладывает следующие условия:

$$q = \frac{n\pi}{Nl} \quad (n = 0, 1, \dots, N) \quad (8.4.4)$$

и

$$\lambda(q) = 4 \sin^2 \left(\frac{ql}{2} \right) / l^2. \quad (8.4.5)$$

Случай многих переменных требует соответствующих обобщений, но в основном структура собственных функций и собственных значений остается той же самой, а именно

$$\lambda(\mathbf{0}) = 0, \quad (8.4.6)$$

$$\lambda(\mathbf{q}) > 0 \quad (\mathbf{q} \neq \mathbf{0})$$

$$f_i(\mathbf{0}) = \text{const} = N^{-1/2}. \quad (8.4.7)$$

Последнее равенство соответствует однородному стационарному состоянию, причем $N^{1/2}$ — нормировочный множитель, который определяется из условий полноты и ортогональности

$$\sum_j f_j(\mathbf{q}) f_j(\mathbf{q}') = \delta_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'}, \quad (8.4.8)$$

$$\sum_{\mathbf{q}} f_j(\mathbf{q}) f_j(\mathbf{q}) = \delta_{i,j}.$$

Введем переменные

$$x(\mathbf{q}) = \sum_j f_j(\mathbf{q}) x_j. \quad (8.4.9)$$

Переменная, которая нас интересует, пропорциональна $x(\mathbf{0})$, поскольку величина

$$x(\mathbf{0}) = N^{-1/2} \sum_j x_j \quad (8.4.10)$$

пропорциональна полному количеству вещества в системе. Другие переменные должны быть адиабатически исключены. В предвосхищении подходящего выбора операторов L_1, L_2, L_3 введем определения

$$y(\mathbf{q}) = x(\mathbf{q}) \sqrt{D} \quad (\mathbf{q} \neq \mathbf{0}) \quad (8.4.11)$$

$$x = x(\mathbf{0}) / \sqrt{N} = N^{-1} \sum_j x_j. \quad (8.4.12)$$

Преобразуем теперь различные члены, входящие в уравнение Фоккера — Планка. Первый член можно записать так:

$$\sum_{i,j} \frac{\partial}{\partial x_i} D_{ij} x_j = -D \sum_q \lambda(q) \frac{\partial}{\partial y(q)} y(q). \quad (8.4.13)$$

Введем также

$$v_i = \sum_{q \neq 0} f_i(q) y(q); \quad (8.4.14)$$

тогда

$$\begin{aligned} \sum_i \frac{\partial}{\partial x_i} a(x_i) &= \frac{1}{N} \sum_i \frac{\partial}{\partial x} a \left(x + \frac{1}{\sqrt{D}} v_i \right) \\ &+ \sqrt{D} \sum_{q \neq 0} \frac{\partial}{\partial y(q)} \sum_i f_i(q) a \left(x + \frac{1}{\sqrt{D}} v_i \right), \end{aligned} \quad (8.4.15)$$

$$\begin{aligned} \sum_i \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} b(x_i) &= \frac{1}{N^2} \sum_i \frac{\partial^2}{\partial x^2} b \left(x + \frac{1}{\sqrt{D}} v_i \right) \\ &+ \frac{1}{N} \sqrt{D} \frac{\partial}{\partial x} \sum_{q \neq 0} \frac{\partial}{\partial y(q)} f_i(q) b \left(x + \frac{1}{\sqrt{D}} v_i \right) \\ &+ D \sum_{q', q \neq 0} \frac{\partial^2}{\partial y(q) \partial y(q')} f_i(q) f_i(q') b \left(x + \frac{1}{\sqrt{D}} v_i \right). \end{aligned} \quad (8.4.16)$$

Запишем теперь эти выражения в виде разложения по убывающим степеням параметра $D^{1/2}$. Итак, определим оператор

$$DL_1 = D \sum_{q \neq 0} \left[-\lambda(q) \frac{\partial}{\partial y(q)} y(q) + \frac{\partial^2}{\partial y(q)^2} b(x) \right], \quad (8.4.17)$$

являющийся коэффициентом при D в разложении приведенных выше выражений (члены низшего порядка в операторе L_2). Далее,

$$L_3 = \left\langle \sum_i \left[\frac{1}{N} \frac{\partial}{\partial x} a \left(x + \frac{1}{\sqrt{D}} v_i \right) + \frac{1}{N^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} b \left(x + \frac{1}{\sqrt{D}} v_i \right) \right] \right\rangle, \quad (8.4.18)$$

причем усреднение проводится по стационарному распределению, задаваемому оператором L_1 . Когда D принимает большие значения, имеем

$$L_3 = \left[\frac{\partial}{\partial x} a(x) + \frac{1}{N} \frac{\partial^2}{\partial x^2} b(x) \right] + O\left(\frac{1}{\sqrt{D}}\right). \quad (8.4.19)$$

Мы определим L_2 с точностью до порядка величины \sqrt{D} ; как показывают расчеты, в выражение для оператора L_2 входят только члены, в которых производная $\partial/\partial y(q)$ стоит слева. Таким образом, проводя адиабатическое исключение переменных $y(q)$ при $D \rightarrow \infty$, получаем, что выражение вида $PL_2L_1^{-1}L_2$ не дает вклада в уравнение Фоккера — Планка, и окончательно оно примет форму

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \left[\frac{\partial}{\partial x} a(x) + \frac{1}{N} \frac{\partial^2}{\partial x^2} b(x) \right] P. \quad (8.4.20)$$

Поскольку переменная x в этом уравнении является, согласно (8.4.12), концентрацией, оно соответствует глобальному управляющему уравнению.

Заметим, что условие применимости полученного результата есть

$$D\lambda(1) \gg K, \quad (8.4.21)$$

где K представляет собой характерную скорость химической реакции. Замечая, что $\lambda(1) = (\pi/Nl^2)$, перепишем это условие в виде

$$D \gg \frac{KN^2 l^2}{\pi^2} \quad (8.4.22)$$

или

$$\sqrt{\frac{D}{K}} \gg \frac{L}{\pi}. \quad (8.4.23)$$

Согласно определению диффузии, левая часть этого неравенства представляет собой среднеквадратичное расстояние, проходимое за характерное время химической реакции. Неравенство (8.4.23) утверждает, что это расстояние должно быть намного больше размера системы. Таким образом, диффузия должна привести к однородному распределению вещества в системе.

8.5. УПРАВЛЯЮЩЕЕ УРАВНЕНИЕ В ФАЗОВОМ ПРОСТРАНСТВЕ

Оставшаяся часть этой главы посвящена стохастическому варианту кинетической теории и основана на работах ван Кампена [8.6] и ван ден Брука и др. [8.7].

Рассмотрим газ, молекулы которого описываются указанием их положений r и скоростей v . Молекулы движутся и сталкиваются друг с другом. Когда между двумя молекулами происходит столкновение, скорости молекул изменяются, но их положение остается неизменным. Однако между столкновениями частицы движутся свободно с постоянной скоростью.

Таким образом, мы имеем два процесса — столкновение и свободное движение. Каждый из этих процессов довольно легко описать в отсутствие другого процесса, но их совместное рассмотрение не является тривиальным.

8.5.1. НЕЗАВИСИМОЕ ДВИЖЕНИЕ МОЛЕКУЛ И СООТВЕТСТВУЮЩИЙ ЕМУ ПОТОК ВЕРОЯТНОСТИ

Мы предполагаем, что имеется большое количество частиц с массой m , координатами \mathbf{r}_n и скоростями \mathbf{v}_n , которые не сталкиваются между собой, но движутся под влиянием силы $m\mathbf{A}(\mathbf{r})$, действующей со стороны *внешнего* поля. Уравнения движения имеют при этом вид

$$\dot{\mathbf{r}}_n = \mathbf{v}_n \quad (8.5.1)$$

$$\dot{\mathbf{v}}_n = \mathbf{A}(\mathbf{r}_n).$$

Плотность в фазовом пространстве можно определить тогда как

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = \sum_n \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n(t))\delta(\mathbf{v} - \mathbf{v}_n(t)), \quad (8.5.2)$$

так что

$$\partial_t f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = \sum_n [\dot{\mathbf{r}}_n \cdot \nabla \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n(t))\delta(\mathbf{v} - \mathbf{v}_n(t)) + \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n(t))\mathbf{v}_n \cdot \nabla_v \delta(\mathbf{v} - \mathbf{v}_n(t))].$$

Используя свойства дельта-функции и уравнения движения (8.5.1), получаем

$$[\partial_t + \mathbf{v} \cdot \nabla + \mathbf{A}(\mathbf{r}) \cdot \nabla_v] f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = 0. \quad (8.5.3)$$

Это — детерминистическое уравнение непрерывности для плотности в одночастичном фазовом пространстве. Если частицы распределены по координатам и скоростям в соответствии с некоторым начальным распределением вероятностей, то уравнение (8.5.3) не изменяется, но функцию $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ надо тогда интерпретировать, как результат усреднения функции (8.5.2) по начальным координатам и скоростям.

Уравнение (8.5.3) является точным. Функцию $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ можно рассматривать как случайную переменную, временная эволюция которой определяется этим уравнением. При этом уравнение (8.5.3) можно считать стохастическим дифференциальным уравнением с нулевым шумом. Число частиц в фазовой ячейке, т. е. элементе шестимерного фазового пространства объема Δ_i с центром в точке фазового пространства $(\mathbf{r}_i, \mathbf{v}_i)$, очевидно, равно

$$X(\mathbf{r}_i, \mathbf{v}_i) = \int_{\Delta_i} d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{v} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}) \quad (8.5.4)$$

8.5.2. ПОТОК КАК ПРОЦЕСС РОЖДЕНИЯ — ГИБЕЛИ

Имея в виду совместное рассмотрение потока со столкновениями, описываемыми посредством управляющего уравнения для процессов рождения — гибели, было бы полезно, если это возможно, представить описанный поток как процесс рождения — гибели в ячейках Δ_i . Такое представление невозможно в случае ячеек произвольного размера, но в пределе исчезающе малого размера ячеек оно имеет место для любого потока.

Для иллюстрации сказанного рассмотрим плотность $\rho(r, t)$ одномерной системы, которая подчиняется уравнению

$$\partial_t \rho(r, t) = -\kappa \partial_r \rho(r, t), \quad (8.5.5)$$

Это детерминистическое уравнение — предел дискретного уравнения для величин

$$x_i(t) = \int_{\Delta_i} dr \rho(r, t) \simeq \lambda \rho(r_i, t), \quad (8.5.6)$$

где Δ_i — интервал длины λ в окрестности точки r_i . Уравнение (8.5.5) является тогда пределом при $\lambda \rightarrow 0$ уравнения

$$\partial_t x_i(t) = \frac{\kappa}{\lambda} [x_{i-1}(t) - x_i(t)]. \quad (8.5.7)$$

т. е.

$$\lambda \partial_t \rho(r_i, t) = \frac{\kappa}{\lambda} [\lambda \rho(r_i - \lambda, t) - \lambda \rho(r_i, t)]. \quad (8.5.8)$$

Стохастический вариант этого уравнения получим, рассматривая перескоки частиц из ячейки с номером i в ячейку с номером $i + 1$ с такими вероятностями перехода в единицу времени:

$$\begin{aligned} r^+(\mathbf{x}) &= \kappa x_i / \lambda \\ r^-(\mathbf{x}) &= 0. \end{aligned} \quad (8.5.9)$$

Подобные перескоки рассматривались в разд. 7.5; введенные там обозначения (7.5.4, 5) теперь конкретизируются так:

$$\left. \begin{aligned} A &\rightarrow i \\ N_j^i &\rightarrow \delta_{i,j} \\ M_j^i &\rightarrow \delta_{i+1,j} \\ r_j^i &\rightarrow \delta_{j,i+1} - \delta_{j,i}. \end{aligned} \right\} \quad (8.5.10)$$

Применим разложение Крамерса — Мойала и покажем, что в пределе $\lambda \rightarrow 0$ все моменты исчезают, за исключением моментов первого по-

рядка. Коэффициент сноса определяется формулой (7.5.32), т. е.

$$\begin{aligned} A_a(\mathbf{x}) &= \sum_i (\delta_{a,i+1} - \delta_{a,i}) \kappa x_i / \lambda \\ &= \frac{\kappa}{\lambda} (x_{a-1} - x_a), \end{aligned} \quad (8.5.11)$$

а диффузионная матрица

$$B_{a,b}(\mathbf{x}) = \frac{\kappa}{\lambda} [(\delta_{a,b} - \delta_{a-1,b})x_{a-1} + (\delta_{a,b} - \delta_{a,b-1})x_a]. \quad (8.5.12)$$

Положим теперь $x_i = \rho(r_i)$ в соответствии с (8.5.6) и перейдем к пределу малых λ . Имеем

$$A_a(\mathbf{x}) \rightarrow \frac{\kappa}{\lambda} [\lambda \rho(r_a - \lambda, t) - \lambda \rho(r_a, t)] \quad (8.5.13)$$

$$\rightarrow -\lambda \kappa \partial_r \rho(r, t). \quad (8.5.14)$$

Подобным образом находится предельное значение матрицы $B_{a,b}(\mathbf{x})$. Используя также

$$\delta_{a,b} \rightarrow \lambda \delta(r_a - r_b), \quad (8.5.15)$$

получаем

$$B_{a,b}(\mathbf{x}) \rightarrow \kappa \lambda^3 \partial_r \partial_{r'} [\delta(r - r') \rho(r)]. \quad (8.5.16)$$

Таким образом, в этом пределе $\rho(r, t)$ удовлетворяет стохастическому дифференциальному уравнению

$$d\rho(r, t) = -\kappa \partial_r \rho(r, t) dt + \lambda^{1/2} dW(r, t), \quad (8.5.17)$$

где

$$dW(r, t) dW(r', t) = \kappa dt \partial_r \partial_{r'} [\delta(r - r') \rho(r, t)]. \quad (8.5.18)$$

Мы видим, что в пределе $\lambda \rightarrow 0$ флуктуационный член в уравнении (8.5.17) исчезает, приводя, как и предсказывалось, к детерминистическому результату.

Интересно знать, почему существует этот детерминистический предел? Это не разложение по параметру размера системы в обычном его понимании, поскольку ни числа частиц x_i , ни вероятности перехода $t^+(\mathbf{x})$ не становятся большими в пределе малых λ , однако вероятность перехода отдельной частицы, находящейся в точке r_i , в соседнюю ячейку все же становится в этом пределе бесконечной, так что в этом смысле движение становится детерминированным.

Читатель может также проверить, что описанный результат не зависит от размерности пространства. Поэтому мы можем найти пред-

ставление потока в фазовом пространстве, которое в пределе малого размера ячейки становится эквивалентным уравнению (8.5.3).

Рассмотрим теперь полное описание потока в фазовом пространстве, включающее оба члена уравнения непрерывности. Ячейки в фазовом пространстве берутся в виде шестимерных ящиков с длиной стороны λ для пространственных координат и ξ — для скоростей. Мы определим плотность в фазовом пространстве через полное число молекул X в фазовой ячейке с помощью формулы

$$f(\mathbf{r}^a, \mathbf{v}^a) = X(\mathbf{r}^a, \mathbf{v}^a) / \xi^3 \lambda^3. \quad (8.5.19)$$

Рассмотрим переходы двух типов. Для простоты считаем, что они происходят только в направлении оси x , и определим

$$\boldsymbol{\lambda}_x = (\lambda, 0, 0). \quad (8.5.20)$$

Тип 1: Поток в конфигурационном пространстве

Он описывается переходами

$$X(\mathbf{r}^i, \mathbf{v}^i) \rightarrow X(\mathbf{r}^i, \mathbf{v}^i) - 1$$

и в то же время

$$X(\mathbf{r}^i + \boldsymbol{\lambda}_x, \mathbf{v}^i) \rightarrow X(\mathbf{r}^i + \boldsymbol{\lambda}_x, \mathbf{v}^i) + 1 \quad (v_x > 0) \quad (8.5.21)$$

или

$$X(\mathbf{r}^i - \boldsymbol{\lambda}_x, \mathbf{v}^i) \rightarrow X(\mathbf{r}^i - \boldsymbol{\lambda}_x, \mathbf{v}^i) + 1 \quad (v_x < 0).$$

При этом, полагая $A \rightarrow (i, x, 1)$, будем иметь

$$\left. \begin{aligned} N_a^{(i,x,1)} &= \delta(\mathbf{r}^i, \mathbf{r}^a) \delta(\mathbf{v}^i, \mathbf{v}^a) \\ M_a^{(i,x,1)} &= \delta(\mathbf{r}^i - \boldsymbol{\lambda}_x, \mathbf{r}^a) \delta(\mathbf{v}^i, \mathbf{v}^a) \\ r_a^{(i,x,1)} &= M_a^{(i,x,1)} - N_a^{(i,x,1)} \end{aligned} \right\} \quad (8.5.22)$$

$$\begin{aligned} t_{(i,x,1)}^+(X) &= \lambda^2 |v_x| X(\mathbf{r}^i, \mathbf{v}^i) / \lambda^3 \\ t_{(i,x,1)}^-(X) &= 0. \end{aligned} \quad (8.5.23)$$

Мы записали равенства (8.5.23) для того, чтобы в явном виде показать, что вероятность перехода есть произведение площади торцевой поверхности ячейки (λ^2), числа частиц в единице объема и x -компоненты скорости, являющейся аппроксимацией скорости потока через соответствующую грань ячейки.

Следовательно, считая $v_x > 0$, имеем

$$A_a^{(x,1)} = v_x [X(\mathbf{r}^a + \boldsymbol{\lambda}_x, \mathbf{v}^a) - X(\mathbf{r}^a, \mathbf{v}^a)] / \lambda \quad (8.5.24)$$

$$= \xi^3 \lambda^3 v_x [f(\mathbf{r}^a + \boldsymbol{\lambda}_x, \mathbf{v}^a) - f(\mathbf{r}^a, \mathbf{v}^a)] / \lambda \quad (8.5.25)$$

$$\rightarrow \xi^3 \lambda^3 v_x \frac{\partial}{\partial X} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}). \quad (8.5.26)$$

Тем же способом, что и в предыдущем примере, можно показать, что диффузионная матрица $B_{a,b}$ пропорциональна λ и, следовательно, исчезает при $\lambda \rightarrow 0$.

Тип 2: Поток в пространстве скоростей

Введем вектор

$$\xi_x = (\xi, 0, 0). \quad (8.5.27)$$

Тогда имеем

$$X(\mathbf{r}^i, \mathbf{v}^i) \rightarrow X(\mathbf{r}^i, \mathbf{v}^i) - 1,$$

и в то же время или

$$X(\mathbf{r}^i, \mathbf{v}^i - \xi_x) \rightarrow X(\mathbf{r}^i, \mathbf{v}^i - \xi_x) + 1 \quad (A_x < 0), \quad (8.5.28)$$

или

$$X(\mathbf{r}^i, \mathbf{v}^i + \xi_x) \rightarrow X(\mathbf{r}^i, \mathbf{v}^i + \xi_x) + 1 \quad (A_x > 0).$$

В данном случае

$$A \rightarrow (i, x, 2)$$

$$N_a^{(i,x,2)} = \delta(\mathbf{v}^i, \mathbf{v}^a) \delta(\mathbf{r}^i, \mathbf{r}^a)$$

$$M_a^{(i,x,2)} = \delta(\mathbf{v}^i - \xi_x, \mathbf{v}^a) \delta(\mathbf{r}^i, \mathbf{r}^a)$$

$$r_a^{(i,x,2)} = [\delta(\mathbf{v}^i - \xi_x, \mathbf{v}^a) - \delta(\mathbf{v}^i, \mathbf{v}^a)] \delta(\mathbf{r}^i, \mathbf{r}^a) \quad (8.5.29)$$

$$t_{(i,x,2)}^+(X) = \xi^2 |A_x(\mathbf{r}^i)| X(\mathbf{r}^i, \mathbf{v}^i) / \xi^3$$

$$t_{(i,x,2)}^-(X) = 0.$$

Таким образом, полагая $A_x(\mathbf{r}^a) > 0$, находим коэффициент сноса

$$A_o = [X(\mathbf{r}^a, \mathbf{v}^a + \xi_x) A_x(\mathbf{r}^a) - X(\mathbf{r}^a, \mathbf{v}^a) A_x(\mathbf{r}^a)] / \xi \quad (8.5.30)$$

$$= \xi^3 \lambda^3 A_x(\mathbf{r}^a) [f(\mathbf{r}^a, \mathbf{v}^a + \xi_x) - f(\mathbf{r}^a, \mathbf{v}^a)] / \xi \quad (8.5.31)$$

$$\rightarrow \xi^3 \lambda^3 A_x(\mathbf{r}) \frac{\partial}{\partial v_x} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}). \quad (8.5.32)$$

Аналогичные рассуждения показывают, что коэффициент диффузии снова исчезает при $\xi \rightarrow 0$.

Собирая выражения (8.5.26, 32) вместе, получаем соответствующее уравнение непрерывности в пределе $\lambda, \xi \rightarrow 0$.

8.5.3. ВВЕДЕНИЕ СТОЛКНОВЕНИЙ. УПРАВЛЯЮЩЕЕ УРАВНЕНИЕ БОЛЬЦМАНА

Будем сначала рассматривать частицы только в пространстве скоростей и разделим пространство скоростей на ячейки, как это делалось раньше. Пусть $X(\mathbf{v})$ — число молекул, обладающих скоростью \mathbf{v} (которая, конечно, дискретизирована).

Тогда столкновение представляется как «химическая реакция»

$$X(v_i) + X(v_j) \rightarrow X(v_k) + X(v_l). \quad (8.5.33)$$

Столкновение характеризуется индексами (i, j, k, l). Используя обозначения разд. 7.5, мы находим

$$\begin{aligned} N_a^{ij,kl} &= \delta_{a,i} + \delta_{a,j} \\ M_a^{ij,kl} &= \delta_{a,k} + \delta_{a,l} \\ r_a^{ij,kl} &= -\delta_{a,i} - \delta_{a,j} + \delta_{a,k} + \delta_{a,l}. \end{aligned} \quad (8.5.34)$$

Вероятность перехода в единицу времени берем в виде

$$\begin{aligned} t_{ij,kl}^+(X) &= R(ij, kl)X(v_i)X(v_j) \\ t_{ij,kl}^-(X) &= 0. \end{aligned} \quad (8.5.35)$$

При столкновениях имеются пять инвариантов движения, т. е. величин, сохраняющихся в процессе столкновения, что следует из динамики. К ним относятся:

1) число молекул — имеются две молекулы в каждой части (8.5.33);

2) три компоненты импульса: поскольку все молекулы идентичны, это означает, что в столкновении

$$v_i + v_j = v_k + v_l; \quad (8.5.36)$$

3) полная энергия: это означает, что

$$v_i^2 + v_j^2 = v_k^2 + v_l^2. \quad (8.5.37)$$

Величины v и v^2 известны как аддитивные инварианты, и можно показать, что любая аддитивная сохраняющаяся функция является их линейной комбинацией (с возможным постоянным членом) [8.8].

При всех столкновениях молекул имеется симметрия относительно обращения времени, вследствие которой

$$R(ij, kl) = R(kl, ij). \quad (8.5.38)$$

Наконец, из-за идентичности всех частиц мы имеем соотношения

$$R(ij, kl) = R(ji, kl) = R(ij, lk), \text{ и т. д.} \quad (8.5.39)$$

Мы располагаем теперь следующими возможными подходами.

1) Непосредственное применение *управляющего уравнения*.

2) *Разложение по обратному размеру системы*: мы считаем большим объем ξ^3 фазовой ячейки в фазовом пространстве ξ^3 и можем записать уравнение Фоккера — Планка, используя разложение Крамерса — Мойала.

Из (7.5.32) мы можем найти вектор сноса

$$A_a(\mathbf{X}) = \sum_{i,j,k,l} (-\delta_{a,i} - \delta_{a,j} + \delta_{a,k} + \delta_{a,l}) X(v_i) X(v_j) R(ij, kl). \quad (8.5.40)$$

Используя все имеющиеся симметрии, перепишем правую часть этого выражения в виде

$$= 2 \sum_{j,k,l} R(aj, kl) [X(v_k) X(v_l) - X(v_a) X(v_j)]. \quad (8.5.41)$$

Можно также вывести выражение для коэффициента диффузии

$$B_{ab}(\mathbf{X}) = \sum_{i,j,k,l} r_a^{ij,kl} r_b^{ij,kl} R(ij, kl) X(v_i) X(v_j)$$

и, снова полностью используя все имеющиеся симметрии, получаем

$$\begin{aligned} B_{ab}(\mathbf{X}) = & 2\delta_{a,b} \sum_{j,k,l} R(aj, kl) [X(v_a) X(v_j) + X(v_k) X(v_l)] \\ & + 2 \sum_{i,j} R(ij, ab) [X(v_i) X(v_j) + X(v_a) X(v_b)] \\ & - 4 \sum_{j,l} R(aj, bl) [X(v_a) X(v_j) + X(v_b) X(v_l)]. \end{aligned} \quad (8.5.42)$$

Эти выражения входят в стохастическое дифференциальное уравнение

$$dX(v_a) = \left\{ 2 \sum_{j,k,l} R(aj, kl) [X(v_k) X(v_l) - X(v_a) X(v_j)] \right\} dt + dW(v_a, t), \quad (8.5.43)$$

где

$$dW(v_a, t) dW(v_b, t) = dt B_{ab}(\mathbf{X}). \quad (8.5.44)$$

Пренебрегая стохастическим членом, мы возвращаемся к уравнению Больцмана для $X(v_a)$ в дискретной форме. Как обычно, это уравнение, полученное в результате разложения Крамерса — Мойала, справедливо только в пределе малого шума, эквивалентного разложению по обратному размеру системы; причем размер есть объем ячейки в импульсном пространстве.

3) *Представление Пуассона*: управляющее уравнение Больцмана идеально подходит для применения метода представления Пуассона. Используя, как всегда, переменную $\alpha(v_a)$, мы можем, следуя результатам (7.7.6—9), получить уравнение Фоккера — Планка в представлении Пуассона с вектором сноса

$$A_a(\alpha) = 2 \sum_{j,k,l} R(aj, kl) [\alpha(v_k) \alpha(v_l) - \alpha(v_a) \alpha(v_j)] \quad (8.5.45)$$

и диффузионной матрицей

$$B_{ab}(\alpha) = 2\delta_{ab} \sum_{i,j,l} R(ij, kl) [\alpha(v_l) \alpha(v_j) - \alpha(v_a) \alpha(v_l)] +$$

$$\begin{aligned}
 & + 2 \sum_{i,j} R(ij, ab) [\alpha(v_i)\alpha(v_j) - \alpha(v_a)\alpha(v_b)] \\
 & - \delta_{a,b} \sum_{j,l} R(aj, bl) [\alpha(v_a)\alpha(v_j) - \alpha(v_b)\alpha(v_l)], \quad (8.5.46)
 \end{aligned}$$

что соответствует стохастическому дифференциальному уравнению

$$d\alpha(v_a) = 2 \sum_{j,k,l} R(aj, kl) [\alpha(v_k)\alpha(v_l) - \alpha(v_a)\alpha(v_j)] + d\tilde{W}(v_a, t), \quad (8.5.47)$$

где

$$d\tilde{W}(v_a, t)d\tilde{W}(v_b, t) = dt B_{ab}(\alpha). \quad (8.5.48)$$

Как подчеркивалось ранее, данное стохастическое дифференциальное уравнение в представлении Пуассона в точности эквивалентно предполагаемому управляющему уравнению Больцмана. В отличие от разложения Крамерса — Мойяла, или разложения по обратному размеру системы, оно справедливо для всех размеров ячеек ξ в пространстве скоростей.

4) *Стационарное решение управляющего уравнения Больцмана*: в принятой нами форме записи управляющего уравнения Больцмана мы положили вероятности $t_{ij,kl}^{\pm}(X)$ равными нулю, однако, поступая иначе, можно положить

$$t_{ij,kl}^{-}(X) = t_{ij,kl}^{+}(X) \quad (8.5.49)$$

и соответственно поделить все функции R на два, поскольку теперь все столкновения учитываются дважды.

Условие детального баланса (7.5.18) выполняется тривиальным образом. Хотя мы полагали $t^{-}(ij, kl) = 0$, обратный переход на самом деле определяется вероятностью $t^{+}(kl, ij)$. Следовательно, при выполнении условия симметрии относительно обращения времени (8.5.38) имеем

$$k_{ij,kl}^{+} = k_{ij,kl}^{-} = R(ij, kl). \quad (8.5.50)$$

При этих условиях для среднего значения $\langle X \rangle$ в стационарном состоянии выполняется соотношение

$$\alpha(v_i)\alpha(v_j) = \alpha(v_k)\alpha(v_l). \quad (8.5.51)$$

Это означает, что $\log[\alpha(v_i)]$ является аддитивной сохраняющейся величиной и должен быть функцией инвариантов (8.5.36, 37). Следовательно,

$$\alpha(v) = \exp[-(v - U)^2/mkT]. \quad (8.5.52)$$

Здесь m — масса молекулы, а U и kT — параметры, которые, конечно, отождествляются со средней скоростью молекул и произведением абсолютной температуры на постоянную Больцмана.

Стационарное распределение вероятностей является тогда многомерным распределением Пуассона со средними значениями, определяемыми равенством (8.5.52). При этом флуктуации числа молекул с различными скоростями некоррелированы.

8.5.4. СОВМЕСТНОЕ РАССМОТРЕНИЕ ПОТОКА И СТОЛКНОВЕНИЙ

Совместному рассмотрению потока и процесса столкновений мешает существенное препятствие. Оно возникает из-за того, что стохастическое рассмотрение потока требует бесконечно малых ячеек, в то время как управляющее уравнение Больцмана более понятно, если ячейки имеют конечный размер. Это означает, что почти невозможно записать в явном виде точное стохастическое уравнение, если только не перейти к представлению Пуассона, как это вскоре будет сделано.

Формально записать многомерное управляющее уравнение в фазовом пространстве не трудно после учета того, что ячейки фазового пространства имеют конечный размер $\lambda^3 \xi^3$. Мы просто включим в рассмотрение всевозможные переходы, т. е. переходы, приводящие к потоку в конфигурационном пространстве, потоку в пространстве скоростей и столкновениям. Результирующее управляющее уравнение включает в себя, таким образом, всевозможные переходы, указанные в (8.5.22, 23, 29) и в модифицированной форме в (8.5.34, 35). Однако имеются столкновения, происходящие внутри каждой ячейки; они определяются вероятностью перехода в единицу времени

$$t_{ij,kl}^+(\mathbf{X}) = \delta(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) \delta(\mathbf{r}_k, \mathbf{r}_l) \delta(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_k) R(ij, kl) X_i X_j. \quad (8.5.53)$$

В случае конечных $\lambda^3 \xi^3$ появится дополнительный стохастический эффект, возникающий из-за конечного размера ячеек, как указывалось в разд. 8.5.2. Этот эффект исчезает в пределе малых λ и ξ , когда перенос вследствие потока становится чисто детерминированным.

Результирующее управляющее уравнение довольно громоздкое, и мы не будем приводить его в явном виде. Работать с этим уравнением приходится в основном в рамках разложения по обратному размеру системы, или приближения Крамерса — Мойала. Точный предел, в котором это справедливо, связан с зависимостью $R(ij, kl)$ от размера системы. Параметром размера системы в этом случае является объем $\lambda^3 \xi^3$ шестимерного фазового пространства. Для того чтобы сделать детерминистическое уравнение для плотности

$$f(\mathbf{r}_i, \mathbf{v}_i) = X(\mathbf{r}_i, \mathbf{v}_i) / \lambda^3 \xi^3 \quad (8.5.54)$$

не зависящим от размера ячейки, функция $R(ij, kl)$, определенная в (8.5.53), должна иметь масштаб $(\lambda^3 \xi^3)^4$, т. е.

$$R(ij, kl) = \bar{R}(ij, kl) (\lambda^3 \xi^3)^4. \quad (8.5.55)$$

Это означает, что величину $\bar{R}(ij, kl)$ можно интерпретировать как среднюю частоту столкновений в элементе фазового объема по каждому из аргументов.

Принимая во внимание законы сохранения (8.5.36, 37), мы можем тогда написать

$$R(ij, kl) = 8\sigma[(v_i - v_j)^2, (v_i - v_j) \cdot (v_k - v_l)] \times \delta(v_i^2 + v_j^2 - v_k^2 - v_l^2) \delta(v_i + v_j - v_k - v_l) \quad (8.5.56)$$

предположив, что σ является функцией только от скаляров. (Тот факт, что σ является функцией только от величин $(v_i - v_j)^2$ и $(v_i - v_j) \cdot (v_k - v_l)$, следует из теории рассеяния и основан на инвариантности уравнений по отношению к группе преобразований Галилея, т. е. вращательной инвариантности и того факта, что законы физики не зависят от выбора инерциальной системы отсчета. Мы предпочитаем оставить в функции σ зависимость только от скалярных произведений для упрощения выражений во флуктуационных членах.)

а) Метод Крамерса — Мойала

Заменим суммирование интегрированием в соответствии с

$$(\xi^3 \lambda^3) \sum_j \rightarrow \int d^3 r_j d^3 v_j \quad (8.5.57)$$

и сделаем следующую замену переменных:

$$\begin{aligned} v_j &= v_i \\ v_k &= \frac{1}{2}(p + q) \\ v_l &= \frac{1}{2}(p - q). \end{aligned} \quad (8.5.58)$$

После некоторых преобразований столкновительного члена из (8.5.3, 41) получаем детерминистическое уравнение вида

$$\begin{aligned} df(\mathbf{r}, v) &= \left\{ -v \cdot \nabla f(\mathbf{r}, v) - A \cdot \nabla_v f(\mathbf{r}, v) \right. \\ &+ \int d^3 v_1 \int \frac{d^3 q}{|q|} \delta(|q| - |v - v_1|) \sigma[q^2, q \cdot (v - v_1)] \\ &\left. \times [f[\mathbf{r}, \frac{1}{2}(v + v_1 - q)] f[\mathbf{r}, \frac{1}{2}(v + v_1 + q)] - f(\mathbf{r}, v) f(\mathbf{r}, v_1)] \right\} dt. \end{aligned} \quad (8.5.59)$$

Стохастическое дифференциальное уравнение, следующее из разложения Крамерса — Мойала, получается путем добавления стохастического члена $dW(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$, удовлетворяющего равенству

$$dW(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) dW(\mathbf{r}', \mathbf{v}', t) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') dt \times \left\{ \delta(\mathbf{v} - \mathbf{v}') \int d^3 \mathbf{v}_1 \frac{d^3 \mathbf{q}}{|\mathbf{q}|} \delta(|\mathbf{q}| - |\mathbf{v} - \mathbf{v}_1|) \right. \\ \times \sigma(\mathbf{q}^2, \mathbf{q} \cdot (\mathbf{v} - \mathbf{v}_1)) [f[\mathbf{r}, \frac{1}{2}(\mathbf{v} + \mathbf{v}_1 - \mathbf{q})] f[\mathbf{r}, \frac{1}{2}(\mathbf{v} + \mathbf{v}_1 + \mathbf{q})] + f(\mathbf{r}, \mathbf{v}) f(\mathbf{r}, \mathbf{v}_1)] \\ - 2 \int d^3 \mathbf{k} \delta[(\mathbf{v}_a - \mathbf{v}_b) \cdot \mathbf{k}] \sigma[(\mathbf{v}_a - \mathbf{v}_b)^2 + \frac{1}{4} \mathbf{k}^2, -(\mathbf{v}_a - \mathbf{v}_b)^2 + \frac{1}{4} \mathbf{k}^2] \\ \left. \times [f(\mathbf{v}_a) f(\mathbf{v}, -\mathbf{k}) + f(\mathbf{v}_b) f(\mathbf{v}_a - \mathbf{k})] \right\}. \quad (8.5.60)$$

Используя в таком виде метод Крамерса — Мойала, ван ден Бруку и др. [8.7] удалось применить разложение Чепмена — Энскога и получить при его помощи флуктуационную гидродинамику.

Вопрос о применимости этого метода, в котором требуется большая величина ячеек для применимости разложения Крамерса — Мойала и их малость для справедливости представления потока в виде процесса рождения — гибели, остается открытым. Однако, поскольку метод Чепмена — Энскога, по всей видимости, эквивалентен адиабатическому исключению тех переменных, поведение которых описывается больцмановским столкновительным членом, результат адиабатического исключения вряд ли чувствителен к точному виду оператора. Таким образом, приближение Крамерса — Мойала может на самом деле быть достаточно точным даже для очень малых ячеек.

б) Представление Пуассона

Стохастическое дифференциальное уравнение в представлении Пуассона можно получить подобным же образом из выражений (8.5.45, 46). Используя обозначение

$$\phi(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = \alpha(\mathbf{r}, \mathbf{v}) / (\lambda^3 \xi^3), \quad (8.5.61)$$

находим

$$d\phi(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = dt \left\{ -\mathbf{v} \cdot \nabla \phi(\mathbf{r}, \mathbf{v}) - \mathbf{A} \cdot \nabla_{\mathbf{v}} \phi(\mathbf{r}, \mathbf{v}) + \int d^3 \mathbf{v}_1 \frac{d^3 \mathbf{q}}{|\mathbf{q}|} \delta(|\mathbf{q}| - |\mathbf{v} - \mathbf{v}_1|) \right. \\ \times \sigma(\mathbf{q}^2, \mathbf{q} \cdot (\mathbf{v} - \mathbf{v}_1)) [f[\mathbf{r}, \frac{1}{2}(\mathbf{v} + \mathbf{v}_1 - \mathbf{q})] f[\mathbf{r}, \frac{1}{2}(\mathbf{v} + \mathbf{v}_1 + \mathbf{q})] \\ \left. - f(\mathbf{r}, \mathbf{v}) f(\mathbf{r}, \mathbf{v}_1)] \right\} + dW(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t), \quad (8.5.62)$$

где

$$\begin{aligned}
 dW(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)dW(\mathbf{r}', \mathbf{v}', t) = & \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')dt \times \left(\delta(\mathbf{v} - \mathbf{v}') \int d^3v_1 \frac{d^3\mathbf{q}}{|\mathbf{q}|} \delta(|\mathbf{q}| - |\mathbf{v} - \mathbf{v}_1|) \right. \\
 & \times \sigma[\mathbf{q}^2, \mathbf{q} \cdot (\mathbf{v} - \mathbf{v}_1)] \{ \phi[\mathbf{r}, \frac{1}{2}(\mathbf{v} + \mathbf{v}_1 - \mathbf{q})] \phi[\mathbf{r}, \frac{1}{2}(\mathbf{v} + \mathbf{v}_1 + \mathbf{q})] - \phi(\mathbf{r}, \mathbf{v}) \phi(\mathbf{r}, \mathbf{v}_1) \} \\
 & + \int \frac{d^3\mathbf{q}}{|\mathbf{q}|} \delta(|\mathbf{q}| - |\mathbf{v} - \mathbf{v}_1|) \sigma[\mathbf{q}^2, \mathbf{q} \cdot (\mathbf{v} - \mathbf{v}_1)] \\
 & \left. \times \{ \phi[\mathbf{r}, \frac{1}{2}(\mathbf{r} + \mathbf{r}' - \mathbf{q})] \phi[\mathbf{r}, \frac{1}{2}(\mathbf{v} + \mathbf{v}' + \mathbf{q})] - \phi(\mathbf{r}, \mathbf{v}) \phi(\mathbf{r}, \mathbf{v}') \} \right). \quad (8.5.63)
 \end{aligned}$$

Члены в (8.5.63) соответствуют первым двум членам в (8.5.46). Последний же член в пределе $\xi^3 \lambda^3 \rightarrow 0$ дает нулевой вклад.

Как всегда, подчеркнем, что это стохастическое дифференциальное уравнение в пуассоновском представлении в точности эквивалентно управляющему уравнению Больцмана с добавленными потоковыми членами в пределе малого размера ячеек. Уравнения (8.5.62, 63) не записывались ранее в явном виде и до сих пор не применялись. Используя метод Чепмена — Энскога или подобную технику, из них, вероятно, можно вывести точные уравнения флуктуационной гидродинамики.

Бистабильность, метастабильность и проблемы перехода из одной фазы в другую

Эта глава посвящена асимптотическому изучению систем, в которых возможны по крайней мере два устойчивых состояния, а также решению некоторых связанных с этим задач. Такие системы имеют большое практическое применение, например вышеупомянутым свойством обладают переключающие и накопительные устройства в компьютерах. К ним относятся также молекулы, которые могут изомеризоваться, а совсем недавно был исследован целый ряд радиоэлектронных, химических и физических систем, демонстрирующих огромное разнообразие подобных свойств.

Представляют интерес следующие вопросы.

- а) Какова относительная устойчивость различных состояний?
- б) Сколько времени требуется системе для спонтанного перехода системы из одного состояния в другое?
- в) Как осуществляется переход, т. е. по какому пути в соответствующем пространстве состояний он происходит?
- г) Как происходит релаксация системы из неустойчивого состояния?

На все эти вопросы можно относительно легко ответить в случае одномерных диффузионных процессов. Обобщение на случай нескольких измерений было сделано только в последнее время. Обобщение на случай бесконечно большого числа переменных приводит нас в область исследования перехода жидкость — газ и тому подобных фазовых переходов, в которых система может находиться в одной из двух фаз и произвольно распределена в пространстве. Для этой области пока отсутствует систематическое стохастическое описание, и здесь эта задача рассматриваться не будет.

Глава разделена в основном на три части, в которых исследуются: бистабильные диффузионные процессы, описываемые одной переменной, бистабильные системы с одношаговыми процессами рождения — гибели и диффузионные процессы со многими переменными. Во всех трех случаях мы получаем качественно похожие результаты, но требуется затратить огромные усилия для того, чтобы добиться количественной точности.

9.1. ДИФФУЗИЯ В СЛУЧАЕ ПОТЕНЦИАЛА С ДВУМЯ ЯМАМИ (ОДНА ПЕРЕМЕННАЯ)

Мы снова рассмотрим модель из разд. 5.2.7, в которой плотность вероятностей положения частицы подчиняется уравнению Фоккера — Планка

$$\partial_t p(x, t) = \partial_x [U'(x)p(x, t)] + D\partial_x^2 p(x, t). \quad (9.1.1)$$

Вид потенциала $U(x)$ показан на рис. 9.1. Потенциал имеет два минимума (один из них локальный) и между ними локальный максимум. Стационарное распределение вероятностей имеет вид

$$p_s(x) = \mathcal{N} \exp[-U(x)/D]. \quad (9.1.2)$$

Оно-то и демонстрирует бистабильность. Точкам a , c и b на рис. 9.1 отвечают соответственно два максимума и центральный минимум. Нахождение системы в точках a и c является, таким образом, наиболее вероятным.

9.1.1. ПОВЕДЕНИЕ СИСТЕМЫ В СЛУЧАЕ $D = 0$

В этом случае $x(t)$ удовлетворяет дифференциальному уравнению

$$\frac{dx}{dt} = -U'(x), \quad x(0) = x_0. \quad (9.1.3)$$

Поскольку

$$\frac{dU(x)}{dt} = U'(x) \frac{dx}{dt} = -[U'(x)]^2 < 0,$$

$x(t)$ меняется таким образом, чтобы минимизировать потенциал $U(x)$, и перестает меняться, когда $U'(x)$ обращается в нуль. Таким образом,

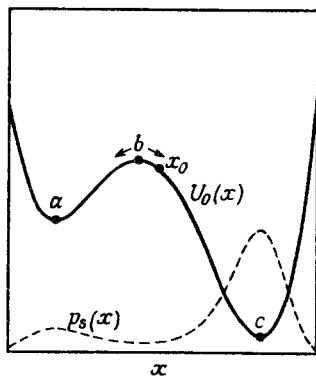


Рис. 9.1. Графики $p_s(x)$ и $U(x)$ для потенциала с двумя потенциальными ямами.

частица заканчивает свое движение в точках c или a в зависимости от того, больше ли x_0 , чем b , или меньше. Это показано с помощью стрелок на рисунке.

Как только частица попадает в точку a или c , она остается в этой точке. Если в начальный момент частица находилась в точке b , она также остается в ней, хотя малейшее возмущение переводит частицу в точки a или c . Таким образом, точка b является неустойчивой стационарной точкой, а точки a и c — устойчивыми стационарными точками.

9.1.2. ПОВЕДЕНИЕ СИСТЕМЫ ПРИ ОЧЕНЬ МАЛЫХ ЗНАЧЕНИЯХ D

С добавлением шума ситуация меняется. Стационарное состояние можно аппроксимировать асимптотически следующим образом. Считая потенциал $U(x)$ всюду достаточно гладким, мы можем записать

$$\begin{aligned} U(x) &\simeq U(a) + \frac{1}{2}U''(a)(x-a)^2 && \text{при малых } |x-a| \\ &\simeq U(c) + \frac{1}{2}U''(c)(x-c)^2 && \text{при малых } |x-c| \end{aligned} \quad (9.1.4)$$

Если величина D очень мала, мы аппроксимируем $p(x)$ выражением

$$\begin{aligned} p_s(x) &\simeq \mathcal{N} \exp[-U(a)/D - \frac{1}{2}U''(a)(x-a)^2/D] && \text{при малых } |x-a| \\ &\simeq \mathcal{N} \exp[-U(c)/D - \frac{1}{2}U''(c)(x-c)^2/D] && \text{при малых } |x-c| \\ &\simeq 0 && \text{в остальной области,} \end{aligned} \quad (9.1.5)$$

так что

$$\mathcal{N}^{-1} \simeq e^{-U(a)/D} \sqrt{2\pi D/U''(a)} + e^{-U(c)/D} \sqrt{2\pi D/U''(c)}. \quad (9.1.6)$$

Будем считать в соответствии с рисунком

$$U(a) > U(c). \quad (9.1.7)$$

Тогда для достаточно малых значений D в выражении для \mathcal{N}^{-1} можно оставить только второй член, так как он значительно больше первого. Подставляя это выражение в (9.1.5), находим

$$\begin{aligned} p_s(x) &= \sqrt{\frac{U''(c)}{2\pi D}} \exp[-\frac{1}{2}U''(c)(x-c)^2/D] && |x-c| \sim \sqrt{D} \\ &= 0 && \text{в противном случае.} \end{aligned} \quad (9.1.8)$$

Это означает, что в пределе очень малых значений D детерминированное состояние, в котором потенциал $U(x)$ имеет абсолютный минимум, является наиболее устойчивым в том смысле, что плотность стационарного распределения вероятностей $p_s(x)$ заметно отлична от нуля только в непосредственной близости от этого состояния.

Конечно, этот результат не согласуется с предыдущим утверждением, что оба состояния одинаково устойчивы. Различие состояний обусловлено временным поведением системы, и мы покажем, что детерминированное поведение воспроизводится стохастически, если в начальный момент времени частица находится в точке с координатой x_0 , и рассматривается предел $p(x, t)$ при $D \rightarrow 0$ в случае конечных t . Методы разд. 6.3 показывают, что это утверждение справедливо, коль скоро применимо разложение вблизи детерминистического уравнения. Из равенства (6.3.10) следует, что последнее условие выполняется, если производная $U'(x_0)$ не равна нулю или, в случае любых конечных значений D , $U'(x_0)$ имеет порядок D^0 . (Здесь D заменяет ε^2 из разд. 6.3.) Для этого требуется, чтобы точка x_0 находилась вне окрестности шириной порядка $D^{1/2}$ точек a , c или b . Это означает, что в точках a и c флуктуации незначительны, и движение частицы приближенно описывается стохастическим дифференциальным уравнением, линеаризованным вблизи точки a или c . Вблизи точки b решение линеаризованного стохастического дифференциального уравнения неустойчиво. Движение частицы описывается процессом Орнштейна — Уленбека до тех пор, пока она не покинет непосредственной окрестности точки $x = b$. На этой стадии асимптотическое разложение по параметру \sqrt{D} перестает быть справедливым.

Однако при $t \rightarrow \infty$ асимптотическое разложение более не применимо. Другими словами, предел при $t \rightarrow \infty$ теории возмущений по параметру малости шума не воспроизводит предела $D \rightarrow 0$ для стационарного распределения.

При этом может происходить процесс перехода через центральный барьер. Шум $dW(t)$ может заставить частицу взобраться на барьер в точке b и упасть, затем с другой его стороны. На это требуется время порядка $\exp(-\text{const}/D)$, которое не дает вклада в разложение по степеням D , поскольку оно экспоненциально мало по сравнению с любыми степенями D при $D \rightarrow 0$.

9.1.3. ВРЕМЯ ДОСТИЖЕНИЯ ГРАНИЦЫ

Оно рассматривалось в разд. 5.2.7в. Время, требуемое частице, первоначально находившейся вблизи точки a , для достижения центральной точки b равно

$$T(a \rightarrow b) = \pi[|U''(b)|U''(a)]^{-1/2} \exp\{[U(b) - U(a)]/D\} \quad (9.1.9)$$

(что составляет половину времени, требуемого частице для достижения точки потенциальной ямы справа от b). При $D \rightarrow 0$ это время становится экспоненциально большим. Время, необходимое для того,

чтобы система достигла стационарного состояния, также становится экспоненциально большим. Поэтому вряд ли имеет смысл для таких времен искать решения в виде ряда по степеням $D^{1/2}$.

9.1.4. РАСЩЕПЛЕННАЯ ВЕРОЯТНОСТЬ

Предположим, что мы помещаем частицу в точку x_0 . Какова будет вероятность того, что частица достигнет точки a скорее, чем точки c , или точки c — скорее, чем точки a ? Эту задачу можно связать с проблемой выхода через один определенный конец интервала (разд. 5.2.8). Помещая поглощающие барьеры в точках $x = a$ и $x = c$ и используя результаты разд. 5.2.8, находим «расщепленные вероятности» π_a и π_c достижения одной из точек a или c первой. Они определяются выражениями

$$\begin{aligned} \pi_a(x_0) &= \left[\int_{x_0}^c dx p_s(x)^{-1} \right] / \left[\int_a^c dx p_s(x)^{-1} \right] \\ \pi_c(x_0) &= \left[\int_a^{x_0} dx p_s(x)^{-1} \right] / \left[\int_a^c dx p_s(x)^{-1} \right]. \end{aligned} \quad (9.1.10)$$

(здесь коэффициент диффузии D не зависит от x). Расщепленные вероятности π_a и π_c можно трактовать более широко как вероятности того, в какую потенциальную яму — левую или правую — свалится частица, первоначально находившаяся в точке x_0 , поскольку частица, достигшая, например, точки a , будет оставаться по эту сторону барьера в течение времени, равного по порядку величины среднему времени достижения точки b .

Рассмотрим теперь две возможные асимптотики выражений (9.1.10) при $D \rightarrow 0$.

a) Точка x_0 находится на конечном расстоянии от b

Оценим сначала интеграл

$$\int_a^c dx p_s(x)^{-1} = \int_a^c dx \mathcal{N}^{-1} \exp [U(x)/D]. \quad (9.1.11)$$

Он определяется главным образом поведением потенциала при $x \sim b$. Правильную асимптотическую оценку получим, если положим

$$U(x) \simeq U(b) - \frac{1}{2} |U''(b)| (b - x)^2. \quad (9.1.12)$$

При $D \rightarrow 0$ пределы интегрирования $x = a$, с можно распространить до $\pm \infty$, после чего находим

$$\int_a^c dx p_s(x)^{-1} \sim \mathcal{N}^{-1} \sqrt{\frac{2\pi D}{|U''(b)|}} \exp[U(b)/D]. \quad (9.1.13)$$

Предположим теперь, что $x_0 < b$. Тогда интеграл $\int_a^{x_0} dx p^{-1}(x)$ можно оценить с помощью подстановки

$$y = U(x) \quad (9.1.14)$$

Обратную функцию обозначим $x = W(y)$. Интеграл асимптотически равен

$$\begin{aligned} \mathcal{N}^{-1} \int_{-\infty}^{U(x_0)} e^{y/D} W'(y) dy &\sim \mathcal{N}^{-1} D e^{U(x_0)/D} W'[U(x_0)] \\ &= \mathcal{N}^{-1} \frac{D e^{U(x_0)/D}}{U'(x_0)}. \end{aligned} \quad (9.1.15)$$

Следовательно,

$$\pi_c \sim \frac{1}{U'(x_0)} \sqrt{\frac{|U''(b)| D}{2\pi}} \exp\left[\frac{U(x_0) - U(b)}{D}\right] \quad (9.1.16)$$

$$\pi_a = 1 - \pi_c. \quad (9.1.17)$$

Из этих выражений видно, что расщепленная вероятность зависит только от x_0 и b . Таким образом, вероятность достижения точки c в этом пределе полностью определяется вероятностью перескока через барьер в точке b . При этом точки a и c практически бесконечно далеки друг от друга.

б) Точка x_0 находится на весьма малом расстоянии от b

Положим

$$x_0 = b - y_0 \sqrt{D}. \quad (9.1.18)$$

В этом случае мы можем сделать аппроксимацию (9.1.12) в обоих интегралах. Определяя, согласно [9.1],

$$\operatorname{erf}(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \int_0^x dt e^{-t^2}, \quad (9.1.19)$$

находим

$$\pi_c = 1 - \pi_a \sim \frac{1}{2} \{1 - \operatorname{erf}[y_0 \sqrt{|U''(b)|}]\} \quad (9.1.20)$$

$$= \frac{1}{2} \left\{1 - \operatorname{erf}\left[(b - x_0) \sqrt{\frac{|U''(b)|}{D}}\right]\right\}. \quad (9.1.21)$$

Результат (9.1.21) мы получили бы, если бы заменили потенциал $U(x)$ его квадратичной аппроксимацией во всей области.

в) Сравнение результатов, полученных для двух областей

Два разобранных случая приводят к различным результатам, и мы приходим к заключению, что простая линейризация стохастического дифференциального уравнения (равносильная квадратичной аппроксимации потенциала $U(x)$) дает правильный результат, только в пределе больших D и в области величиной порядка \sqrt{D} вокруг максимума b .

9.1.5. РАСПАД НЕУСТОЙЧИВОГО СОСТОЯНИЯ

Среднее время, необходимое частице, помещенной в какую-либо точку x_0 потенциала $U(x)$ для того, чтобы достигнуть той или другой ямы, можно измерить экспериментально. Если мы будем описывать такой процесс с помощью уравнения (9.1.1), то сможем точно рассчитать среднее время достижения точек a или c из точки b , используя формулы разд. 5.2.8. Среднее время достижения точки a из b является решением уравнения

$$-U'(x)\partial_x[\pi_a(x)T(a, x)] + D\partial_x^2[\pi_a(x)T(a, x)] = -\pi_a(x) \quad (9.1.22)$$

с граничными условиями

$$\pi_a(a)T(a, a) = \pi_a(c)T(a, c) = 0, \quad (9.1.23)$$

где $\pi_a(x)$ определяется формулой (9.1.10).

Решение уравнения (9.1.22) можно получить непосредственным интегрированием, однако оно довольно громоздко. При этом способ расчета тот же самый, что и при получении (5.2.158), похожи и результаты. Даже случай, охватываемый выражением (5.2.158), в котором мы не различаем выходы вправо или влево, представляется очень сложным.

Для полноты изложения приведем выражение для среднего времени достижения точки a :

$$T(a, x) = \frac{\pi_c(x) \int_x^c dx' p_s(x')^{-1} \int_a^{x'} \pi_a(z) p_s(z) dz - \pi_a(x) \int_a^x dx' p_s(x')^{-1} \int_a^{x'} \pi_a(z) p_s(z) dz}{D\pi_a(x)}; \quad (9.1.24)$$

здесь $\pi_a(x)$ определяется формулой (9.1.10), а $p_s(z)$ — формулой (9.1.2). Можно видеть, что даже в простейшей ситуации, а именно при

$$U(x) = -\frac{1}{2}kx^2, \quad (9.1.25)$$

это выражение почти невозможно осмыслить, скорее всего здесь требуется асимптотическое рассмотрение. К счастью, в случае когда $p_s(z)$ имеет острый максимум в точках a и c и узкий минимум в точке b , задача сводится, по сути, к проблеме релаксации к точкам a и c с отражающим барьером в точке b .

Для того чтобы представить себе это, заметим следующее:

1) явное решение (9.1.10) для $\pi_a(x)$ означает, что

$$\begin{aligned} \pi_a(x) &\simeq 1 & (x < b) \\ &\simeq \frac{1}{2} & (x = b) \\ &\simeq 0 & (x > b), \end{aligned} \quad (9.1.26)$$

и переход из 1 в 0 происходит на расстоянии порядка \sqrt{D} , т. е. ширины пика функции $p_s(x)^{-1}$;

2) в интегралах с подынтегральным выражением $\pi_a(z)p_s(z)$ мы различаем два случая. Когда $x' > b$, приходим к оценке

$$\int_a^{x'} \pi_a(z)p_s(z)dz \simeq n_a/2, \quad (9.1.27)$$

где $n_a = \int_{-\infty}^b p_s(z)dz$ есть вероятность нахождения частицы в левой потенциальной яме.

Однако, когда $x' < a$, мы по-прежнему можем аппроксимировать $\pi_a(z)$ единицей и имеем

$$\int_a^{x'} \pi_a(z)p_s(z)dz \simeq \int_a^{x'} p_s(z)dz = \frac{n_a}{2} - \int_{x'}^b p_s(z)dz. \quad (9.1.28)$$

Подставляя эти оценки в (9.1.24), получаем

$$T(a, b) \simeq D^{-1} \int_a^b dx' p_s(x')^{-1} \int_{x'}^b p_s(z)dz; \quad (9.1.29)$$

это не что иное, как точное среднее время достижения точки a из b при наличии отражающего барьера в точке b . Аналогично

$$T(c, b) \simeq D^{-1} \int_b^c dx' p_s(x')^{-1} \int_b^{x'} p_s(z)dz. \quad (9.1.30)$$

9.2. УСТАНОВЛЕНИЕ РАВНОВЕСИЯ ЗАСЕЛЕННОСТЕЙ КАЖДОЙ ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЯМЫ

Прежде всего предположим, что в начальный момент частица в системе находилась в левой потенциальной яме в некоторой точке с координатой x_i , так что

$$p(x, 0) = \delta(x - x_i). \quad (9.2.1)$$

Если коэффициент D очень мал, то время, требуемое для достижения центра барьера (точки b), очень велико, и для времен, малых по сравнению со временем первого достижения точки b , наличие ямы в точке c не будет оказывать никакого влияния. Таким образом, мы можем считать, что в точке b находится отражающий барьер.

Движение в пределах левой потенциальной ямы хорошо описывается разложением по параметру малости шума, и типичное время релаксации, таким образом, будет то же, что и при детерминированном движении. При аппроксимации

$$U(x) \simeq U(a) + \frac{1}{2}U''(a)x^2 ;$$

в системе будет происходить процесс Орнштейна — Уленбека с характерным масштабом времени порядка $[U''(a)]^{-1}$.

Таким образом, мы предполагаем в описании наличие двух временных масштабов. За короткое время частица релаксирует к квазистационарному состоянию в той яме, с которой она начала свое движение. Затем в крупномасштабной временной шкале она может перепрыгнуть через максимум в точке b . При этом на больших временах устанавливается бимодальное стационарное распределение.

9.2.1. МЕТОД КРАМЕРСА

В 1940 г. Крамерс [9.2] рассмотрел проблему достижения границы, изучая преобразование молекул. Он предложил уравнение, называемое теперь уравнением Крамерса (разд. 5.3.6а), в котором рассматривалось движение в потенциале $U(x)$ с двумя потенциальными ямами. Он показал, что в случае, когда затухание велико, можно использовать уравнение Смолуховского в форме (6.4.18) и свести, таким образом, проблему достижения границы к задаче, которую мы теперь обсуждаем.

Метод Крамерса был переоткрыт и переформулирован много раз [9.3]. Мы изложим его здесь в форме, дающей довольно ясное понимание области его применимости.

Используя обозначения рис. 9.1, определим

$$M(x, t) = \int_{-\infty}^x dx' p(x', t) \quad (9.2.2)$$

$$N_a(t) = 1 - N_c(t) = M(b, t) \quad (9.2.3)$$

$$N_0(t) = (c - a) p(x_0, t) .$$

Далее, введем соответствующие стационарные величины

$$n_a = 1 - n_c = \int_{-\infty}^c p_s(x') dx' \quad (9.2.4)$$

$$n_0 = (c-a) p_s(x_0).$$

Принимая во внимание уравнение Фоккера — Планка (9.1.1) и вид стационарной плотности вероятностей $p_s(x)$, определяемой выражением (9.1.2), мы можем записать равенство

$$d_t M(x, t) = D p_s(x) \partial_x [p(x, t)/p_s(x)], \quad (9.2.5)$$

интегрирование которого дает

$$d_t \int_a^{x_0} dx M(x, t)/p_s(x) = D [p(x_0, t)/p_s(x_0) - p(a, t)/p_s(a)]. \quad (9.2.6)$$

Это уравнение точное. Мы хотим ввести некоторое приближение, которое обычно справедливо на больших временах.

Чтобы представить суть метода, мы вынуждены следовать в некоторой степени менее точной аргументации, чем хотелось бы. Поскольку мы считаем релаксацию в пределах каждой ямы довольно быстрой, мы ожидаем, что распределение в каждой яме (через время, которое конечно при $D \rightarrow 0$) стремится к форме стационарного распределения, но с другими относительными весами двух пиков. Это можно записать формально следующим образом:

$$p(x, t) = p_s(x) N_a(t)/n_a \quad x < b$$

$$= p_s(x) N_c(t)/n_c \quad x > b, \quad (9.2.7)$$

что обычно является точным в низшем порядке по D , за исключением области величиной \sqrt{D} вокруг точки b .

Подставляя эти выражения в (9.2.6), получаем

$$\kappa(x_0) \dot{N}_a(t) = D [N_0(t)/n_0 - N_a(t)/n_a]$$

$$\mu(x_0) \dot{N}_c(t) = D [N_0(t)/n_0 - N_c(t)/n_c],$$

(9.2.8)

где

$$\kappa(x_0) = \int_a^{x_0} p_s(x)^{-1} [1 - \psi(x)] dx \quad (9.2.9)$$

$$\mu(x_0) = \int_{x_0}^c p_s(x)^{-1} [1 - \psi(x)] dx$$

и

$$\begin{aligned} \psi(x) &= n_a^{-1} \int_x^b p_s(z) dz & x < b \\ &= n_c^{-1} \int_b^x p_s(z) dz & x > b. \end{aligned} \quad (9.2.10)$$

Заметим, что если x отличается от a и c на конечную величину, то $\psi(x)$ экспоненциально стремится к нулю при $D \rightarrow 0$, как это непосредственно следует из явного выражения для $p_s(x)$. Поскольку величина x в обоих интегралах (9.2.9) удовлетворяет этому условию во всей области интегрирования, мы можем положить $\psi(x) = 0$ и пользоваться равенствами

$$\begin{aligned} \kappa(x_0) &= \int_a^{x_0} p_s(x)^{-1} dx \\ \mu(x_0) &= \int_{x_0}^c p_s(x)^{-1} dx. \end{aligned} \quad (9.2.11)$$

а) Интерпретация с помощью трех состояний

Уравнения (9.2.8) отвечают процессу, который можно записать в виде химической реакции



отличие в том, что отсутствует уравнение для N_0 — числа молекул X_0 . Замечая, что $N_a + N_c = 1$, мы находим

$$N_0(t) = n_0 [\mu(x_0) N_a(t) + \kappa(x_0) N_c(t)] / [\kappa(x_0) + \mu(x_0)]. \quad (9.2.13)$$

Такое же равенство получается обычно при адиабатическом исключении величины $N_0(t)$ из (9.2.8). Для $N_0(t)$ имеем уравнение

$$\begin{aligned} \dot{N}_0(t) &= D \{ N_a(t) / [n_a \kappa(x_0)] + N_c(t) / [n_c \mu(x_0)] \} \\ &\quad - N_0(t) \{ [n_0 \kappa(x_0)]^{-1} + [n_0 \mu(x_0)]^{-1} \}. \end{aligned} \quad (9.2.14)$$

Поскольку

$$n_0 = p_s(x_0) (c - a) = \mathcal{N} \exp[-U(x_0)/D] (c - a), \quad (9.2.15)$$

мы видим, что предел $D \rightarrow 0$ соответствует $n_0 \rightarrow 0$, и, следовательно, константа $[n_0 \kappa(x_0)]^{-1} + [n_0 \mu(x_0)]^{-1}$ в (9.2.14) становится бесконечно большой. Адиабатическое исключение, таким образом, справедливо.

Эта интерпретация с помощью трех состояний является по существу теорией переходных состояний в химических реакциях, предложенной Эйрингом [9.4].

б) Исключение промежуточных состояний

Исключая из (9.2.8) $N_0(t)$ с помощью добавления двух уравнений, получаем

$$\dot{N}_a(t) = -\dot{N}_c(t) = r_a N_a(t) + r_c N_c(t), \quad (9.2.16)$$

где

$$r_a = D[n_a \int_a^c dx p_s(x)^{-1}]^{-1} \quad r_c = D[n_c \int_a^c dx p_s(x)^{-1}]^{-1}, \quad (9.2.17)$$

причем r_a и r_c не зависят от x_0 . Таким образом, точный выбор x_0 не влияет на межпиковую релаксацию.

Поскольку $N_a + N_c = 1$, время релаксации τ_r дается выражением

$$\tau_r^{-1} = r_a + r_c = \frac{D}{n_a n_c \int_a^c dx p_s(x)^{-1}}. \quad (9.2.18)$$

в) Вероятность достижения в единицу времени точки x_0

Для частицы, находящейся первоначально вблизи точки a , эта вероятность есть не что иное, как скорость затухания $N_a(t)$ при условии что в точке x_0 находится поглощающий барьер. Это означает, что в уравнении (9.2.8) мы полагаем $N_0(t) = 0$ (заметим, однако, что $p_s(x)$ определяется выражением (9.1.2)). Аналогичные рассуждения дают нам уравнение

$$\dot{N}_a(t) = -DN_a(t)/n_a k(x_0), \quad (9.2.19)$$

так что время первого достижения равно

$$\tau_a = n_a D^{-1} \int_a^{x_0} dx p_s(x)^{-1}. \quad (9.2.20)$$

Этот результат по существу совпадает с тем, что был получен в (5.2.166) более строго.

г) Зависимость времени релаксации от заселенностей пиков

Равенство (9.2.18) выглядит как простая формула, связывающая время релаксации с величинами n_a и $n_c = 1 - n_a$. Можно подумать, что все остальные множители не зависят от n_a и $\tau_r \sim n_a(1 - n_a)$. Однако более тщательная оценка показывает, что это не так. Используя асимптотическую оценку (9.1.13), мы находим

$$\tau_r = \frac{n_a n_c}{\mathcal{N} D} \sqrt{\frac{2\pi D}{|U''(b)|}} \exp[U(b)/D]. \quad (9.2.21)$$

Подобным образом можно оценить асимптотически величину \mathcal{N} , учитывая вклад от каждого пика. Мы получаем

$$\mathcal{N}^{-1} = \sqrt{2\pi D} \{ [U''(a)]^{-1/2} \exp[-U(a)/D] + [U''(c)]^{-1/2} \exp[-U(c)/D] \} \quad (9.2.22)$$

и аналогично, согласно определению n_a и n_c (9.2.4),

$$n_a/n_c = \sqrt{U''(c)/U''(a)} \exp \left[\frac{U(c) - U(a)}{D} \right]. \quad (9.2.23)$$

После некоторых алгебраических преобразований мы можем представить (9.2.1) в виде

$$\tau_r = 2\pi H(b; a, c) [n_a n_c]^{1/2}, \quad (9.2.24)$$

где $H(b; a, c)$ — функция, зависящая от относительной высоты пика $U(b)$ по сравнению с высотой, средней между $U(a)$ и $U(c)$:

$$H(b; a, c) = [|U''(b)|^{-1/2} U''(a)^{-1/4} U''(c)^{-1/4}] \exp \left[\frac{2U(b) - U(a) - U(c)}{2D} \right]. \quad (9.2.25)$$

9.2.2. ПРИМЕР: ОБРАТИМАЯ ДЕНАТУРАЦИЯ ХИМОТРИПСИНОГЕНА

Химотрипсиноген — это белок, который можно превратить в денатурированную форму, применяя повышенное давление вплоть до нескольких тысяч атмосфер, как это продемонстрировал Хоули [9.5]. Предположительно молекула внезапно коллапсирует, если приложено достаточное давление.

Отчасти нереалистичная, но простая модель этого процесса дается уравнением

$$dx = \frac{-U'(x)}{\gamma} dt + \sqrt{\frac{2kT}{\gamma}} dW(t), \quad (9.2.26)$$

где x — объем молекулы, $U(x)$ — свободная энергия Гиббса, приходящаяся на одну молекулу, а kT/γ занимает место коэффициента D . Здесь γ — коэффициент трения, возникающий обычно в результате процедуры адиабатического исключения, подобной той, что использовалась при выводе уравнения Смолуховского в разд. 6.4. Стационарное распределение имеет вид

$$p_s(x) = \mathcal{N} \exp[-U(x)/kT], \quad (9.2.27)$$

как этого требуют законы статистической механики.

Явное действие изменения давления можно учесть, записав

$$U(x) = U_0(x) + x \delta p, \quad (9.2.28)$$

где δp — изменение давления по сравнению с состоянием, в котором величины n_a и n_c равны. Член $x\delta p$ меняет относительную устойчивость двух минимумов и эквивалентен работе, совершаемой против давления δp . Согласно (9.2.23), для этого требуется, чтобы потенциал $U_0(x)$ удовлетворял соотношению

$$\sqrt{U_0''(a)} \exp [U_0(a)/kT] = \sqrt{U_0''(c)} \exp [U_0(c)/kT]. \quad (9.2.29)$$

Положение максимумов и минимумов потенциала $U(x)$ слегка отличается от положения их в потенциале $U_0(x)$. Если предположить, что высшие производные от $U_0(x)$ пренебрежимо малы, то максимумы и минимумы потенциала $U(x)$ будут находиться в точках, в которых $U'(x) = 0$. Их координаты равны: $a + \delta a$, $b + \delta b$, $c + \delta c$, где

$$\left. \begin{aligned} \delta a &= -\delta p / U_0''(a) = \beta_a \delta p \\ \delta b &= \delta p / |U_0''(b)| = \beta_b \delta p \\ \delta c &= -\delta p / U_0''(c) = \beta_c \delta p. \end{aligned} \right\} \quad (9.2.30)$$

Мы отождествляем, таким образом, величины β_a и β_c со *сжимаемостями* $dx/\delta p$ состояний a и c , которые являются отрицательными, как этого требует теория устойчивости. Величина β_b является в некотором роде *несжимаемостью* переходного состояния. Поскольку это состояние является неустойчивым, величина β_b положительна.

Значения $U(a)$, $U(b)$, $U(c)$ в этих минимумах равны

$$\left. \begin{aligned} U(a + \delta a) &= U_0(a + \delta a) + (a + \delta a)\delta p \\ &= U_0(a) + a\delta p + \frac{1}{2}\beta_a(\delta p)^2 \\ U(b + \delta b) &= U_0(b) + b\delta p + \frac{1}{2}\beta_b(\delta p)^2 \\ U(c + \delta c) &= U_0(c) + c\delta p + \frac{1}{2}\beta_c(\delta p)^2. \end{aligned} \right\} \quad (9.2.31)$$

Из формулы (9.2.23) мы получаем

$$\frac{n_a}{n_c} = \exp \left[\frac{-(a - c)\delta p}{kT} - \frac{(\beta_a - \beta_c)}{2kT} (\delta p)^2 \right]. \quad (9.2.32)$$

Эта формула в точности совпадает с формулой, следующей из термодинамических рассуждений, и хорошо описывает экспериментальные данные.

Время релаксации к стационарному распределению τ_r также было

измерено. Используя формулы (9.2.24, 25), мы находим

$$\tau_r(0) = \gamma^{-1} \pi \beta_b^{1/2} \exp \left[\frac{U(b)}{kT} \right] \quad (9.2.33)$$

$$\tau_r(\delta p) = (n_a n_c)^{1/2} \tau_r(0) \exp \left[-\frac{a+c-2b}{2kT} \delta p + \frac{\delta p^2}{2kT} (\beta_b - \frac{1}{2}\beta_a - \frac{1}{2}\beta_c) \right].$$

Заметим, что объемы двух состояний a и c и их сжимаемости β_a и β_c можно в принципе измерить экспериментально. Данные, относящиеся к переходному состоянию b : $U(b)$ и β_b , остаются в качестве свободных параметров, которые можно определить из измерений времени жизни. Конечно, квадратичная аппроксимация справедлива только для достаточно малых δp , и для приложений может потребоваться более сложный метод.

На рис. 9.2 показаны рассчитанные по формулам (9.2.32, 33) значения $\tau_r(\delta p)$ и n_a/n_c для возможных значений параметров.

Заметим, что время достижения равновесия имеет максимум вблизи точки, в которой концентрация естественной и денатурированной формы равны. Некоторую асимметрию, однако, можно получить, выбирая асимметричный потенциал. Хоули заметил, что измерения в этой области ограничены фактически «стабильностью приборов и терпением исследователя».

Наконец, для сравнения приводятся кривые с нулевой сжимаемостью. Различие на краях так велико, что становится понятным непри-

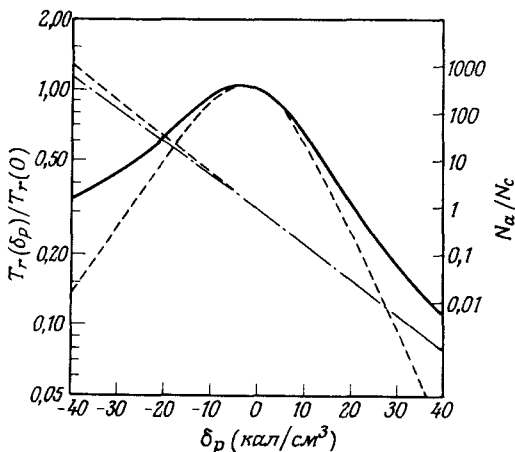


Рис. 9.2. Время релаксации $\tau_r(\delta p)$ и отношение концентраций естественной и денатурированной форм химотрипсिनогена согласно формуле (9.2.33). Штриховая линия — без учета поправок на сжимаемость.

менимость метода квадратичной поправки для кривой $\tau_r(\delta p)$. Однако для кривой n_a/n_c поправки почти исчезают. Реалистическое рассмотрение, включающее большее число переменных, сохраняет качественные черты приведенного описания, но допускает возможность значения $\beta_b < 0$, что при нашем рассмотрении было исключено.

9.2.3. БИСТАБИЛЬНОСТЬ, ОПИСЫВАЕМАЯ УПРАВЛЯЮЩИМ УРАВНЕНИЕМ ДЛЯ ПРОЦЕССОВ РОЖДЕНИЯ — ГИБЕЛИ (СЛУЧАЙ ОДНОЙ ПЕРЕМЕННОЙ)

Качественное поведение бистабильных систем, описываемых управляющими уравнениями для одноступенчатых процессов рождения — гибели, почти такое же, как и при описании с помощью уравнений Фоккера — Планка.

Рассмотрим одноступенчатый процесс с вероятностями перехода $t^+(x)$, $t^-(x)$, при этом управляющее уравнение может быть записано в виде

$$\frac{dP(x)}{dt} = J(x+1, t) - J(x, t), \quad (9.2.34)$$

где

$$J(x, t) = t^-(x)P(x, t) - t^+(x-1)P(x-1, t). \quad (9.2.35)$$

Предположим теперь, что стационарное распределение имеет максимумы в точках a , c и минимум в точке b и, аналогично тому как это сделано в разд. 9.2.1, определим

$$M(x, t) = \sum_{z=0}^{x-1} P(z, t) \quad (9.2.36)$$

$$N_a(t) = 1 - N_c(t) = M(b, t), \quad (9.2.37)$$

а если точка x_0 находится вблизи b ,

$$N_0(t) = P(x_0, t). \quad (9.2.38)$$

Соответствующими стационарными значениями являются

$$n_a = 1 - n_c = \sum_{z=0}^{b-1} P_s(z) \quad (9.2.39)$$

$$n_0 = P_s(x_0). \quad (9.2.40)$$

Выполняя теперь в (9.2.34) суммирование от 0 до $x-1$, получаем

$$\frac{dM(x, t)}{dt} = J(x, t), \quad (9.2.41)$$

поскольку $J(0, t) = 0$. Используем теперь тот факт, что стационарное решение $P_s(x)$ в одноступенчатом процессе находится из условия детального баланса

$$t^-(x)P_s(x) = t^+(x-1)P_s(x-1), \quad (9.2.42)$$

чтобы ввести «интегрирующий множитель» для уравнения (9.2.41). А именно: вводя

$$\beta(x, t) = P(x, t)/P_s(x), \quad (9.2.43)$$

представим уравнение (9.2.41) в виде

$$\frac{dM(x, t)}{dt} = P_s(x)t^-(x)[\beta(x, t) - \beta(x-1, t)], \quad (9.2.44)$$

так что

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \sum_{z=a+1}^{x_0} \left[\frac{M(z, t)}{P_s(z)t^-(z)} \right] &= \beta(x_0, t) - \beta(a, t) \\ &= \frac{P(x_0, t)}{P_s(x_0)} - \frac{P(a, t)}{P_s(a)}. \end{aligned} \quad (9.2.45)$$

Уравнение (9.2.45) почти в точности совпадает по форме с уравнением (9.2.6) для соответствующего уравнения Фоккера — Планка. Оно основано на стационарном решении, полученном путем использования условия детального баланса (9.2.42).

Сделаем те же предположения, что и Крамерс, а именно предположим, что существенна только релаксация между пиками, и запишем

$$\begin{aligned} P(x, t) &= P_s(x)N_a(t)/n_a & x < b \\ &= P_s(x)N_c(t)/n_c & x > b. \end{aligned} \quad (9.2.46)$$

При этом мы получим релаксационные уравнения, почти в точности совпадающие с уравнениями (9.2.8):

$$\begin{aligned} \kappa(x_0)\dot{N}_a(t) &= N_0(t)/n_0 - N_a(t)/n_a \\ \mu(x_0)\dot{N}_c(t) &= N_0(t)/n_0 - N_c(t)/n_c, \end{aligned} \quad (9.2.47)$$

где

$$\kappa(x_0) = \sum_{z=a+1}^{x_0} [P_s(z)t^-(z)]^{-1}[1 - \psi(z)] \quad (9.2.48)$$

$$\mu(x_0) = \sum_{z=x_0+1}^c [P_s(z)t^-(z)]^{-1}[1 - \psi(z)]$$

и

$$\begin{aligned} \psi(z) &= n_a^{-1} \sum_{y=z}^b P_s(y) & z < b \\ &= n_c^{-1} \sum_{y=b+1}^{z+1} P_s(y) & z > b. \end{aligned} \quad (9.2.49)$$

Единственным существенным различием является то, что в правой части уравнения (9.2.8) фигурирует коэффициент D , а здесь вместо него появляется множитель $t^-(z)^{-1}$ в определениях $\kappa(x_0)$ и $\mu(x_0)$.

Можно использовать те же приближения, что и раньше. Единственной трудностью при этом будет точная переформулировка предела $D \rightarrow 0$ (теперь должен соответствовать пределу больших чисел, при котором все функции меняются плавно при $x \rightarrow x \pm 1$). Этот предел будет как раз пределом разложения по обратному размеру системы, в котором во всяком случае может быть использовано описание на основе уравнения Фоккера — Планка.

Мы не будем углубляться в детали, а просто отметим, что точные значения средних времен достижения границы можно получить с помощью метода из разд. 7.4. Приспосабливая методы из разд. 5.2.8 к этой системе, можно найти расщепленные вероятности того, что частица, первоначально находящаяся в точке x_0 , достигнет точек a или c . Они равны

$$\begin{aligned} \pi_a &= \left\{ \sum_{z=x_0+1}^c [P_s(z)t^-(z)]^{-1} \right\} / \left\{ \sum_{z=a+1}^c [P_s(z)t^-(z)]^{-1} \right\} \\ \pi_c &= \left\{ \sum_{z=a+1}^{x_0} [P_s(z)t^-(z)]^{-1} \right\} / \left\{ \sum_{z=a+1}^c [P_s(z)t^-(z)]^{-1} \right\}. \end{aligned} \quad (9.2.50)$$

Таким образом, для всех практических случаев можно с тем же успехом использовать модельное описание на основе уравнения Фоккера — Планка. Редко известны точно все скрытые механизмы процесса, поэтому написание любого уравнения можно считать не более чем научной догадкой, а значит, чем проще уравнение, тем лучше.

9.3. БИСТАБИЛЬНОСТЬ В СИСТЕМАХ СО МНОГИМИ ПЕРЕМЕННЫМИ

Системы со многими переменными открывают перед исследователем широкий диапазон возможностей. Причем если система описывается посредством управляющего уравнения, то возможное многообразие типов переходов и пространства состояний оказывается настолько богатым, что это ставит исследователя в тупик: трудно себе представить, с чего начинать. Однако в разд. 9.2.4 мы видели, что описание посредством полного управляющего уравнения не очень сильно отличается от описания при помощи уравнения Фоккера — Планка. Поэтому кажется разумным ограничиться последним описанием, которое уже оказывается достаточно сложным.

Эвристические подходы к этим проблемам, развитые в основном физиками Лангером, Ландауэром и Свансоном [9.6], в настоящее время

мя подтверждаются строгими математическими рассмотрениями Шусса и Матковского [9.7] и др. Первое строгое рассмотрение было проведено Вентцелем и Фрейдлином [9.8]. Однако оно, по-видимому, не привлекло внимания прикладных исследователей, поскольку только со всей строгостью подтвердило оценки, которые уже давно были угаданы, но не содержало вывода точных асимптотических разложений, как это делалось в более поздних исследованиях.

Мы будем рассматривать ниже системы в l -мерном пространстве, описываемые уравнением Фоккера — Планка, которое удобно представить в следующей форме:

$$\partial_t p = \nabla \cdot [-v(x)p + \varepsilon D(x) \cdot \nabla p], \quad (9.3.1)$$

Стационарное решение этого уравнения в большинстве случаев будем предполагать известным и обозначим его через $p_s(x)$. Его, разумеется, можно оценить асимптотически в пределе малых ε с помощью метода разд. 6.3.3.

9.3.1. РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ТОЧЕК ДОСТИЖЕНИЯ ГРАНИЦЫ

Мы будем рассматривать здесь только упрощенный вариант уравнения (9.3.1), в котором диффузионная матрица $D(x)$ равна единичной матрице

$$D(x) = 1. \quad (9.3.2)$$

Это исключает из рассмотрения особенности, которые могут возникать из-за сильно меняющейся величины D , но результаты в большинстве своем при этом не сильно меняются, если D не вырождено.

Предположим, что система ограничена областью R с границей S и поле скоростей $v(x)$ направлено внутрь области к стационарной точке a . Наша задача заключается в асимптотическом расчете распределения точек b на границе S , через которые осуществляется выход из области R . Воспользуемся тем, что $\pi(b, x)$ — распределение точек b на S , достигнутых из начальной точки x , — определяется уравнением (5.4.49), которое в нашем случае имеет вид

$$v(x) \cdot \nabla \pi(b, x) + \varepsilon \nabla^2 \pi(b, x) = 0 \quad (9.3.3)$$

при граничном условии

$$\pi(b, u) = \delta_s(b - u) \quad (u \in S). \quad (9.3.4)$$

Асимптотическое решение, справедливое при $\varepsilon \rightarrow 0$, строим, следуя методу Матковского и Шусса [9.7].

а) Решение вблизи точки $\mathbf{x} = \mathbf{u}$ и во внутренней области R

Сначала конструируем решение, справедливое внутри области R . При $\varepsilon = 0$ имеем уравнение

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}) \cdot \nabla \pi(\mathbf{b}, \mathbf{x}) = 0, \quad (9.3.5)$$

которое означает, что вероятность $\pi(\mathbf{b}, \mathbf{x})$ не меняется вдоль линий тока $\mathbf{v}(\mathbf{x})$, поскольку это уравнение просто констатирует, что значение производной от $\pi(\mathbf{b}, \mathbf{x})$ вдоль этих линий, равно нулю. Так как мы допускаем, что все линии тока проходят через точку \mathbf{a} , для любых точек \mathbf{x} внутри области R

$$\pi(\mathbf{b}, \mathbf{x}) = \pi(\mathbf{b}, \mathbf{a}). \quad (9.3.6)$$

Однако эта аргументация недействительна, если учесть, что $\mathbf{v}(\mathbf{a}) = 0$, и, следовательно, уравнение (9.3.5) не является более подходящей аппроксимацией.

Рассмотрим поэтому решение уравнения (9.3.3) на расстоянии порядка $\sqrt{\varepsilon}$ от начала координат. Для этого мы введем новые координаты (z, y_r) , которые выберем так, чтобы координата z отсчитывала расстояние от точки \mathbf{a} , в то время как y_r представляли бы собой набор $l - 1$ тангенциальных координат, определяющих ориентацию вокруг точки \mathbf{a} .

Более точно, выберем $z(\mathbf{x})$ и $y_r(\mathbf{x})$ так, чтобы

$$\begin{aligned} \mathbf{v}(\mathbf{x}) \cdot \nabla z(\mathbf{x}) &= -z(\mathbf{x}) \\ \mathbf{v}(\mathbf{x}) \cdot \nabla y_r(\mathbf{x}) &= 0 \\ z(\mathbf{a}) &= 0. \end{aligned} \quad (9.3.7)$$

Отрицательный знак в первом из этих уравнений возникает из-за того, что точка \mathbf{a} предполагается устойчивой, так что скорость $\mathbf{v}(\mathbf{x})$ направлена к точке \mathbf{a} . Следовательно, $z(\mathbf{x})$ *возрастает* по мере того, как точка \mathbf{x} удаляется от точки \mathbf{a} .

Таким образом, для произвольной функции f мы находим

$$\nabla f = \nabla z(\mathbf{x}) \frac{\partial f}{\partial z} + \sum_r \nabla y_r(\mathbf{x}) \frac{\partial f}{\partial y_r}, \quad (9.3.8)$$

а следовательно,

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}) \cdot \nabla \pi = -z \frac{\partial \pi}{\partial z} \quad (9.3.9)$$

$$\begin{aligned} \nabla^2 \pi &= \nabla z(\mathbf{x}) \cdot \nabla z(\mathbf{x}) \frac{\partial^2 \pi}{\partial z^2} + 2 \sum_r \nabla z(\mathbf{x}) \cdot \nabla y_r(\mathbf{x}) \frac{\partial^2 \pi}{\partial z \partial y_r} \\ &+ \sum_{r,s} \nabla y_r(\mathbf{x}) \cdot \nabla y_s(\mathbf{x}) \frac{\partial^2 \pi}{\partial y_r \partial y_s} + \nabla^2 z(\mathbf{x}) \frac{\partial \pi}{\partial z} + \sum_r \nabla^2 y_r(\mathbf{x}) \frac{\partial \pi}{\partial y_r}. \end{aligned} \quad (9.3.10)$$

Найдем теперь функцию π асимптотически, переходя к переменной ξ измененного масштаба, которая определяется равенством

$$z = \xi \sqrt{\varepsilon}. \quad (9.3.11)$$

Подставляя (9.3.8 — 11) в уравнение (9.3.3), мы находим, что в низшем порядке по ε

$$-\xi \frac{\partial \pi}{\partial \xi} + H \frac{\partial^2 \pi}{\partial \xi^2} = 0,$$

где

$$H = \nabla z(\mathbf{a}) \cdot \nabla z(\mathbf{a}). \quad (9.3.12)$$

Мы можем теперь решить это уравнение и получить

$$\pi(\mathbf{b}, \mathbf{x}) = C_1 \int_0^{z/\sqrt{\varepsilon}} d\xi \exp(\xi^2/2H) + \pi(\mathbf{b}, \mathbf{a}). \quad (9.3.13)$$

Так как величина H положительна, это решение для π согласуется с постоянством $\pi(\mathbf{b}, \mathbf{x})$ вдоль линий тока при $\mathbf{x} \neq \mathbf{a}$ только при условии $C_1 = 0$. Следовательно, для всех значений \mathbf{x} внутри области R

$$\pi(\mathbf{b}, \mathbf{x}) = \pi(\mathbf{b}, \mathbf{a}). \quad (9.3.14)$$

(Заметим, что, если скорость $\mathbf{v}(\mathbf{x})$ направлена в другую сторону, а это соответствует неустойчивости точки \mathbf{a} , нужно изменить знак в уравнении (9.3.9). При этом $\pi(\mathbf{b}, \mathbf{x})$ определяется выражением (9.3.13) при замене $H \rightarrow -H$, и, следовательно, на расстоянии порядка $\sqrt{\varepsilon}$ от точки \mathbf{a} значение $\pi(\mathbf{b}, \mathbf{x})$ существенно меняется.)

б) Решение вблизи границы S

Рассмотрим, имея в виду последующие применения, решение несколько более общего уравнения

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}) \cdot \nabla f(\mathbf{x}) + \varepsilon \nabla^2 f(\mathbf{x}) = 0,$$

где

$$f(\mathbf{u}) = g(\mathbf{u}) \quad (\mathbf{u} \in S) \quad (9.3.15)$$

($g(\mathbf{u})$ — известная функция). Граничная задача (9.3.4) является частным случаем последнего равенства. Имеются две возможности:

1) *Нормальная составляющая вектора $\mathbf{v}(\mathbf{x})$ не равна нулю: $\mathbf{v} \cdot \mathbf{v}(\mathbf{x}) \neq 0$ на границе S или всюду в R , за исключением точки $\mathbf{x} = \mathbf{a}$, являющейся устойчивой.* Видно, что при применении любого асимптотического метода граничное условие (9.3.15) несовместимо с постоянным реше-

нием. Следовательно, функция $f(\mathbf{x})$ должна претерпевать быстрые изменения вблизи границы.

Вблизи точки \mathbf{u} на границе S мы можем записать

$$\mathbf{v}(\mathbf{u}) \cdot \nabla f(\mathbf{x}) + \varepsilon \nabla^2 f(\mathbf{x}) = 0. \quad (9.3.16)$$

Вблизи границы S наиболее удобно ввести нормаль $\mathbf{v}(\mathbf{u})$ к границе S — $\mathbf{v}(\mathbf{u})$ (направленную наружу) и определить переменную ρ равенством

$$\mathbf{x} = \mathbf{u} - \varepsilon \rho \mathbf{v}(\mathbf{u}). \quad (9.3.17)$$

При этом остальные переменные y_r направлены параллельно S .

Тогда в низшем порядке по ε уравнение (9.3.16) (в окрестности точки \mathbf{u} на границе S) сводится к уравнению

$$[\mathbf{v} \cdot \mathbf{v}(\mathbf{u})] \frac{\partial f}{\partial \rho} + H(\mathbf{u}) \frac{\partial^2 f}{\partial \rho^2} = 0. \quad (9.3.18)$$

где

$$H(\mathbf{u}) = \mathbf{v}^2 = 1. \quad (9.3.19)$$

Его решение имеет вид

$$f(\mathbf{x}) = g(\mathbf{u}) + C_1(\mathbf{u}) \{1 - \exp[-\mathbf{v} \cdot \mathbf{v}(\mathbf{u})\rho]\}. \quad (9.3.20)$$

При $\rho \rightarrow \infty$ мы заходим на конечное расстояние внутрь области R и при этом

$$f(\mathbf{x}) \rightarrow g(\mathbf{u}) + C_1(\mathbf{u}) = C_0. \quad (9.3.21)$$

Эта величина не зависит от \mathbf{x} в силу (9.3.14). Итак,

$$C_1(\mathbf{u}) = C_0 - g(\mathbf{u}). \quad (9.3.22)$$

Теперь нужно определить значение C_0 , являющееся по существу главной величиной, которую мы ищем.

Это можно сделать с помощью теоремы Грина. Пусть $p_s(\mathbf{x})$ является обычным стационарным решением прямого уравнения Фоккера — Планка. Мы знаем, что его можно записать в виде

$$p_s(\mathbf{x}) = \exp \left\{ -\frac{1}{\varepsilon} [\phi(\mathbf{x}) + O(\varepsilon)] \right\}, \quad (9.3.23)$$

как это было показано в разд. 6.3.3. Возьмем теперь уравнение (9.3.16), умножим его на $p_s(\mathbf{x})$ и проинтегрируем по всей области R . Используя то, что $p_s(\mathbf{x})$ удовлетворяет прямому уравнению Фокке-

ра — Планка, исходное уравнение можно свести к поверхностному интегралу

$$0 = \int_R d\mathbf{x} p_s(\mathbf{x}) [\mathbf{v}(\mathbf{x}) \cdot \nabla f(\mathbf{x}) + \varepsilon \nabla^2 f(\mathbf{x})] \quad (9.3.24)$$

$$= \int_S dS \{ p_s(\mathbf{x}) \mathbf{v} \cdot \mathbf{v}(\mathbf{x}) f(\mathbf{x}) + \varepsilon [p_s(\mathbf{x}) \mathbf{v} \cdot \nabla f(\mathbf{x}) - f(\mathbf{x}) \mathbf{v} \cdot \nabla p_s(\mathbf{x})] \}. \quad (9.3.25)$$

Замечая, что в низшем порядке по ε

$$\mathbf{v} \cdot \nabla f(\mathbf{x}) = -\frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial f}{\partial \rho} = -\mathbf{v} \cdot \mathbf{v}(\mathbf{x}) [C_0 - g(\mathbf{x})], \quad (9.3.26)$$

$$\mathbf{v} \cdot \nabla p_s(\mathbf{x}) = -\mathbf{v} \cdot \nabla \phi(\mathbf{x}) \exp[-\phi(\mathbf{x})/\varepsilon], \quad (9.3.27)$$

получаем

$$C_0 = \frac{\int_S dS e^{-\phi(\mathbf{x})/\varepsilon} [2\mathbf{v} \cdot \mathbf{v}(\mathbf{x}) + \mathbf{v} \cdot \nabla \phi(\mathbf{x})] g(\mathbf{x})}{\int_S dS e^{-\phi(\mathbf{x})/\varepsilon} \mathbf{v} \cdot \mathbf{v}(\mathbf{x})}. \quad (9.3.28)$$

Вспоминая, что для рассматриваемой задачи $g(\mathbf{u}) = \delta_S(\mathbf{u} - \mathbf{b})$, в случае когда точка \mathbf{x} находится внутри области R , имеем

$$\pi(\mathbf{x}, \mathbf{b}) = C_0 = \frac{e^{-\phi(\mathbf{b})/\varepsilon} [2\mathbf{v} \cdot \mathbf{v}(\mathbf{b}) + \mathbf{v} \cdot \nabla \phi(\mathbf{b})]}{\int_S dS e^{-\phi(\mathbf{x})/\varepsilon} \mathbf{v} \cdot \mathbf{v}(\mathbf{x})}. \quad (9.3.29)$$

Из этого выражения следует, что распределение точек достижения границы по существу имеет вид $\exp[-\phi(\mathbf{b})/\varepsilon]$, т. е. приблизительно совпадает со стационарным распределением. Если уравнение Фоккера — Планка допускает потенциальное решение, то

$$\mathbf{v}(\mathbf{b}) = -\nabla \phi(\mathbf{b}) \quad (9.3.30)$$

$$\pi(\mathbf{x}, \mathbf{b}) = e^{-\phi(\mathbf{b})/\varepsilon} \mathbf{v} \cdot \mathbf{v}(\mathbf{b}) / \left[\int_S dS e^{-\phi(\mathbf{x})/\varepsilon} \mathbf{v} \cdot \mathbf{v}(\mathbf{x}) \right],$$

и мы имеем просто результат типа среднего потока.

2) $\mathbf{v} \cdot \mathbf{v}(\mathbf{x}) = 0$ на границе S . Эта задача имеет более непосредственную связь с бистабильностью, поскольку можно ожидать, что на полпути между двумя устойчивыми точками a и c находится кривая $\mathbf{v} \cdot \mathbf{v}(\mathbf{x}) = 0$, которая разделяет две области и называется *сепаратрисой*.

Мы применяем в основном тот же метод, за исключением того, что вблизи точки \mathbf{u} на границе S теперь ожидаем выполнения формулы

$$\mathbf{v} \cdot \mathbf{v}(\mathbf{x}) \sim \mathbf{v} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{u}) \kappa(\mathbf{u}), \quad (9.3.31)$$

где $\kappa(\mathbf{u})$ — коэффициент, зависящий от $\mathbf{v}(\mathbf{x})$, который предполагается отличным от нуля.

Мы имеем теперь вблизи S такую же ситуацию, как и при $\mathbf{x} = \mathbf{a}$. С помощью соответствующей подстановки

$$\mathbf{x} = \mathbf{u} - \sqrt{\varepsilon} \rho \mathbf{v}(\mathbf{u}) \quad (9.3.32)$$

уравнение (9.3.16) в низшем порядке по ε (в окрестности точки \mathbf{u} на границе S) сведется к уравнению

$$\kappa(\mathbf{u}) \rho \frac{\partial f}{\partial \rho} + \frac{\partial^2 f}{\partial \rho^2} = 0, \quad (9.3.33)$$

так что

$$f(\mathbf{x}) = g(\mathbf{u}) + C_1 \int_0^\rho d\rho \exp[-\frac{1}{2}\kappa(\mathbf{u})\rho^2]. \quad (9.3.34)$$

Устремляя $\rho \rightarrow \infty$, мы получаем

$$C_1 = [C_0 - g(\mathbf{u})] \sqrt{\frac{2\kappa(\mathbf{u})}{\pi}}. \quad (9.3.35)$$

Дальнейший расчет такой же, как и в предыдущем пункте. Окончательно получаем

$$\pi(\mathbf{x}, \mathbf{b}) = \frac{e^{-\phi(\mathbf{b})/\varepsilon} \left[\left(1 + \sqrt{\frac{2\kappa(\mathbf{b})}{\pi}} \right) \mathbf{v} \cdot \mathbf{v}(\mathbf{b}) + \mathbf{v} \cdot \nabla \phi(\mathbf{b}) \right]}{\int dS e^{-\phi(\mathbf{x})/\varepsilon} \sqrt{\frac{2\kappa(\mathbf{x})}{\pi}} \mathbf{v} \cdot \mathbf{v}(\mathbf{x})} \quad (9.3.36)$$

9.3.2. АСИМПТОТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ СРЕДНЕГО ВРЕМЕНИ ДОСТИЖЕНИЯ ГРАНИЦЫ

Из нашего опыта обращения с одномерными системами можно ожидать, что среднее время достижения границы из точки внутри области R будет иметь порядок $\exp(K/\varepsilon)$ для некоторого $K > 0$ при $\varepsilon \rightarrow 0$. Поэтому введем функцию

$$\tau(\mathbf{x}) = \exp(-K/\varepsilon) T(\mathbf{x}), \quad (9.3.37)$$

где $T(\mathbf{x})$ среднее время достижения границы области R из точки \mathbf{x} , а величина $\tau(\mathbf{x})$ удовлетворяет уравнениям (см. разд. 5.4)

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}) \cdot \nabla \tau(\mathbf{x}) + \varepsilon \nabla^2 \tau(\mathbf{x}) = -\varepsilon^{-K/\varepsilon} \quad (9.3.38)$$

$$\tau(\mathbf{u}) = 0 \quad \mathbf{u} \in S.$$

Если множитель $\exp(-K/\varepsilon)$ выбран правильно, то любое разложение $\tau(\mathbf{x})$ по степеням ε не будет содержать экспонент, так что уравнение для $\tau(\mathbf{x})$ в низшем порядке по ε по существу будет совпадать с уравнением (9.3.16).

Как и в предыдущем случае, мы покажем, что величина $\tau(\mathbf{x})$ по существу постоянна внутри области R и (в случае $\mathbf{v} \cdot \mathbf{v}(\mathbf{x}) \neq 0$ на границе S) ее можно записать в виде

$$\tau(\mathbf{x}) \sim C_0 \{1 - \exp[-\mathbf{v} \cdot \mathbf{v}(\mathbf{u})\rho]\} \quad (9.3.39)$$

вблизи границы S .

Умножим уравнение (9.3.38) на $p_s(\mathbf{x}) = \exp[-\phi(\mathbf{x})/\varepsilon]$ и, используя теорему Грина (в основном тем же образом, что и при выводе выражения (9.3.25), но при $\tau(\mathbf{x}) = 0$ на границе S), получим

$$-e^{-K/\varepsilon} \int_R d\mathbf{x} e^{-\phi(\mathbf{x})/\varepsilon} = -\int_S dS e^{-\phi(\mathbf{x})/\varepsilon} [C_0 \mathbf{v} \cdot \mathbf{v}(\mathbf{x})], \quad (9.3.40)$$

т. е.

$$C_0 = \int_R d\mathbf{x} e^{-[K+\phi(\mathbf{x})]/\varepsilon} / \int_S dS e^{-\phi(\mathbf{x})/\varepsilon} \mathbf{v} \cdot \mathbf{v}(\mathbf{x}). \quad (9.3.41)$$

Согласно нашей гипотезе, C_0 не меняется экспоненциально подобно $\exp(A/\varepsilon)$. В числителе выражения (9.3.41) основной вклад в интеграл дает минимум функции $\phi(\mathbf{x})$, находящийся в точке \mathbf{a} , тогда как в знаменателе — минимум этой функции в точке границы S ; эту точку мы обозначим \mathbf{x}_0 . Таким образом, отношение ведет себя как

$$\exp\{[\phi(\mathbf{a}) - \phi(\mathbf{x}_0) - K]/\varepsilon\}.$$

и, следовательно, для того чтобы величина C_0 была асимптотически постоянной, нужно положить

$$K = \phi(\mathbf{a}) - \phi(\mathbf{x}_0), \quad (9.3.42)$$

Для точки \mathbf{x} , лежащей внутри области R на значительном расстоянии от границы, имеем

$$\tau(\mathbf{x}) = \int_R d\mathbf{x} e^{\phi(\mathbf{x})/\varepsilon} / \int_S dS [e^{-\phi(\mathbf{x})/\varepsilon} \mathbf{v} \cdot \mathbf{v}(\mathbf{x})]. \quad (9.3.43)$$

В случае когда $\mathbf{v} \cdot \mathbf{v}(\mathbf{x}) = 0$ во всех точках границы S , мы получаем

$$\tau(\mathbf{x}) \sim C_0 \int_0^{\rho} d\rho \exp[-\frac{1}{2}\kappa(\mathbf{u})\rho^2], \quad (9.3.44)$$

и, следовательно, во внутренней области справедлива оценка

$$\tau(\mathbf{x}) \sim C_0 \sqrt{\frac{\pi}{2\kappa(\mathbf{u})}}. \quad (9.3.45)$$

Дальнейший анализ можно провести аналогично предыдущему, и для точки x внутри области R на значительном расстоянии от границы получим

$$\tau(x) \sim \sqrt{\frac{\pi}{2\kappa(u)}} \int_R dx e^{\phi(x)/\varepsilon} / \int_S dS e^{-\phi(x)/\varepsilon}. \quad (9.3.46)$$

9.3.3. МЕТОД КРАМЕРСА ДЛЯ СЛУЧАЯ НЕСКОЛЬКИХ ИЗМЕРЕНИЙ

Обобщение метода Крамерса делается относительно просто. Рассмотрим довольно общее уравнение Фоккера — Планка для случая l измерений (используя обозначение $P(x)$ для плотности вероятности)

$$\partial_t P = \nabla \cdot [-v(x)P + \varepsilon D(x) \cdot \nabla P]. \quad (9.3.47)$$

Стационарное решение этого уравнения $P_s(x)$ можно записать в явном виде только в том случае, когда для уравнения (9.3.47) выполняются условия потенциальности. Предположим, что функция $P_s(x)$ имеет два хорошо очерченных максимума в точках a и c и ясно выраженную седловую точку в b (рис. 9.3). Будем считать, что значение этой функции в седловой точке намного меньше, чем ее значения в точках a и c . Введем семейство $(l-1)$ -мерных плоскостей $S(w)$, где w — параметр, нумерующий плоскости. Мы выберем плоскость $S(a)$, так, чтобы она проходила через точку a , $S(b)$ — через b и $S(c)$ — через c . Предполагается, что плоскости $S(w)$ ориентированы таким образом, что $P_s(x)$ имеет единственный максимум внутри каждой из этих плоскостей. Аналогично тому, как это сделано в разд. 9.2.1, определим

$$M[S(w)] = \int_{L(w)} dx P(x), \quad (9.3.48)$$

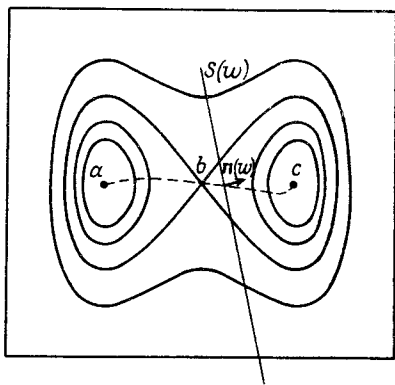


Рис. 9.3. Контуры (линии равной вероятности) стационарной функции распределения $P_s(x)$. Плоскость $S(u)$ ориентирована так, что $P_s(x)$ имеет на ней единственный максимум, а кривая $x = u(w)$ (штриховая линия) является геометрическим местом точек этих максимумов.

где $L(w)$ — область пространства слева от плоскости $S(w)$. Тогда

$$\dot{M}[S(w)] = \int_{S(w)} dS \cdot [-v(x)P + \varepsilon \underline{D}(x) \cdot \nabla P]. \quad (9.3.49)$$

Поток в стационарном состоянии определяется выражением

$$J_s = -v(x)P_s + \varepsilon \underline{D}(x) \cdot \nabla P_s. \quad (9.3.50)$$

Предположение I. Мы не рассматриваем случаи, в которых при очень малых вероятностях $P_s(x)$ имеют место конечные потоки J_s . Поскольку $\nabla \cdot J_s = 0$, мы можем записать

$$J_s = -\varepsilon \nabla \cdot (A P_s), \quad (9.3.51)$$

где A — некоторая антисимметричная матрица. Потребуем, чтобы матрица A имела такой же порядок величины, как $D(x)$, или меньший.

Релаксационные уравнения выводятся в два этапа. Введем величину $\beta(x)$:

$$\begin{aligned} \beta(x) = P(x, t)/P_s(x) &\simeq N_a(t)/n_a & (\mathbf{x} \text{ близко к } a) \\ &\simeq N_c(t)/n_c & (\mathbf{x} \text{ близко к } c). \end{aligned} \quad (9.3.52)$$

Это предположение означает, что релаксация в пределах максимума закончилась. Подставляя $P = \beta P_s$ в (9.3.49), интегрируя по частям и пренебрегая выражениями на бесконечности, получаем

$$\dot{M}[S(w)] = \varepsilon \int_{S(w)} dS \cdot [\mathcal{D}(x) \cdot \nabla \beta] P_s(x), \quad (9.3.53)$$

где

$$\mathcal{D}(x) = \underline{D}(x) + A(x). \quad (9.3.54)$$

Предположение II. $P_s(x)$ имеет резко очерченный изолированный максимум на поверхности $S(w)$, так что имеет место приближенная оценка

$$\dot{M}[S(w)] = \{\varepsilon [n(w) \cdot \mathcal{D}(x) \cdot \nabla \beta]_{\mathbf{u}(w)} + \delta(w)\} \left| \int_{S(w)} dS P_s(x) \right|, \quad (9.3.55)$$

в которой предполагается, что $\delta(w)$ много меньше, чем выражение в квадратных скобках. Здесь $\mathbf{u}(w)$ точка, в которой $P_s(x)$ имеет максимальное значение при ограничении плоскостью $S(w)$, а $\mathbf{n}(w)$ — нормаль к плоскости $S(w)$.

Предположение III. Не нарушив других предположений, направление $\mathbf{n}(w)$ можно выбрать так, чтобы вектор $\mathcal{D}^T(x) \cdot \mathbf{n}(w)$ был параллелен касательной к кривой $x = \mathbf{u}(w)$ в точке w . Следовательно,

$$\mathcal{D}^T[\mathbf{u}(w)] \cdot \mathbf{n}(w) = d(w) \partial_w \mathbf{u}(w). \quad (9.3.56)$$

Определим теперь величину

$$p(w) = \left| \int_{S(w)} dS P_s(\mathbf{x}) \right|, \quad (9.3.57)$$

являющуюся (с точностью до медленно меняющегося множителя) плотностью вероятности нахождения частицы на плоскости $S(w)$. Мы ожидаем, что эта величина имеет двугорбый вид с максимумами в точках $w = a$ и $w = c$ и минимумом в точке $w = b$.

Предположение IV. Эти максимумы и минимум предполагаются острыми. Пренебрегая величиной $\delta(w)$, делая выбор (9.3.56) и замечая, что

$$\partial_w \mathbf{u}(w) \cdot \nabla \beta[\mathbf{u}(w)] = \partial_w \beta[\mathbf{u}(w)], \quad (9.3.58)$$

мы находим

$$\frac{1}{\varepsilon} \int_a^{w_0} dw \{ \dot{M}[S(w)] / [p(w)d(w)] \} = \beta(w_0) - \beta(a). \quad (9.3.59)$$

Благодаря остроте пиков в $p(w)^{-1}$, мы можем аппроксимировать выражение (9.3.59), взяв при этом значение подынтегрального выражения в экстремальных точках, используя (9.3.52) и равенство

$$N(a, t) = M[S(b), t]. \quad (9.3.60)$$

Определяя также

$$\kappa(w_0) = \int_a^{w_0} [p(w)]^{-1} dw \quad (9.3.61)$$

$$\mu(w_0) = \int_{w_0}^b [p(w)]^{-1} dw, \quad (9.3.62)$$

получаем следующие релаксационные уравнения:

$$\kappa(w_0) \dot{N}_a(t) = \varepsilon d(w_0) [N_0(t)/n_0 - N_a(t)/n_a] \quad (9.3.63)$$

$$\mu(w_0) \dot{N}_c(t) = \varepsilon d(w_0) [N_0(t)/n_0 - N_c(t)/n_c]. \quad (9.3.64)$$

Эти уравнения имеют точно такой же вид, как и в случае одной переменной, и допускают ту же интерпретацию.

9.3.4. ПРИМЕР. БРОУНОВСКОЕ ДВИЖЕНИЕ В ПОТЕНЦИАЛЕ С ДВУМЯ ЯМАМИ

Мы рассмотрим броуновское движение в переменных координаты и скорости, изучавшееся в общих чертах в разд. 5.3.6. Запишем уравнение Фоккера — Планка

$$\frac{\partial P(x, p, t)}{\partial t} = -p \frac{\partial P}{\partial x} + U'(x) \frac{\partial P}{\partial p} + \gamma \left[\frac{\partial P}{\partial p} p P + \frac{\partial^2 P}{\partial p^2} \right]. \quad (9.3.65)$$

В обозначениях предыдущего раздела имеем

$$\left. \begin{aligned}
 \mathbf{x} &= (x, p) \\
 v(\mathbf{x}) &= (p, -U'(x) - \gamma p) \\
 \varepsilon &= 1 \\
 \mathbf{D}(\mathbf{x}) &= \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \gamma \end{bmatrix} \\
 P_s(\mathbf{x}) &= \mathcal{N}_2 \exp[-\frac{1}{2}p^2 - U(x)] \\
 \mathcal{N}_2 &= (2\pi)^{-1/2} \mathcal{N}_1 \\
 \mathcal{N}_1 &= \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp[-U(x)] \right\}^{-1}.
 \end{aligned} \right\} \quad (9.3.66)$$

Следовательно, мы можем записать

$$v(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & \gamma \end{bmatrix} \cdot \nabla(\log P_s), \quad (9.3.67)$$

и поток в стационарном состоянии имеет вид

$$\mathbf{J}_s = -vP_s + \mathbf{D} \cdot \nabla P_s = -\nabla \cdot \left\{ \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} P_s \right\}, \quad (9.3.68)$$

так что тензор \mathbf{A} существует и имеет вид

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}. \quad (9.3.69)$$

Таким образом, предположение I выполнено.

Плоскость $S(w)$ можно определить с помощью уравнения

$$\lambda x + p = w. \quad (9.3.70)$$

Предположение II требует максимальности $P_s(\mathbf{x})$ на этой плоскости, т. е. максимальности выражения $-\frac{1}{2}p^2 - U(x)$. Используя стандартные методы, мы находим, что этот максимум должен лежать на кривой $\mathbf{u}(w)$, задаваемой следующим образом:

$$\mathbf{u}(w) = \begin{bmatrix} x(w) \\ p(w) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x(w) \\ w - \lambda x(w) \end{bmatrix}, \quad (9.3.71)$$

где $x(w)$ удовлетворяет уравнению

$$U'[x(w)] + \lambda^2 x(w) - \lambda w = 0. \quad (9.3.72)$$

Наличие же острых пиков у $P_s(\mathbf{x})$ зависит от вида потенциала $U(x)$.

Обеспечим теперь выполнение предположения III.

Параметр λ является функцией от w для специального множества плоскостей, удовлетворяющих условию (9.3.56). Кривая, касательная к $u(w)$, параллельна вектору

$$\left[\frac{dx}{dw}, 1 - \lambda \frac{dx}{dw} - x \frac{d\lambda}{dw} \right]. \quad (9.3.73)$$

Дифференцируя уравнение (9.3.72), имеем

$$\frac{dx}{dw} = (U'' + \lambda^2)^{-1} \left[\lambda - \frac{d\lambda}{dw} (2\lambda x - w) \right]. \quad (9.3.74)$$

Нормаль к плоскости, определяемой уравнением (9.3.70), параллельна вектору $(\lambda, 1)$. Следовательно,

$$\mathcal{D}^T \mathbf{n} = (1 + \lambda^2)^{-1/2} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & \gamma \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda \\ 1 \end{bmatrix} = (1 + \lambda^2)^{-1/2} \begin{bmatrix} 1 \\ \gamma - \lambda \end{bmatrix}, \quad (9.3.75)$$

и этот вектор параллелен вектору (9.3.73), если

$$\frac{dx}{dw} / 1 = \left[1 - \lambda \frac{dx}{dw} - x \frac{d\lambda}{dw} \right] / (\gamma - \lambda). \quad (9.3.76)$$

Мы можем теперь решить совместно уравнения (9.3.74, 76) и получить

$$\frac{dx}{dw} = \frac{1}{\gamma} - \frac{x}{\gamma^2} \left[\frac{U'' - \gamma\lambda + \lambda^2}{x(U'' + \lambda^2) - (2\lambda x - w)} \right] \quad (9.3.77)$$

$$\frac{d\lambda}{dw} = \frac{1}{\gamma} \left[\frac{U'' - \lambda\gamma + \lambda^2}{x(U'' + \lambda^2) - (2\lambda x - w)} \right]. \quad (9.3.78)$$

Седловая точка имеет координаты $(x, p) = (0, 0)$ и, таким образом, $w = 0 \Leftrightarrow x = 0$. Используя это в уравнении (9.3.77), мы видим, что должно выполняться соотношение

$$x \simeq w/\gamma \quad \text{при } w \simeq 0. \quad (9.3.79)$$

Вблизи точки $x = 0$ мы можем приближенно записать

$$U[x] \simeq -\frac{1}{2} U_2 x^2. \quad (9.3.80)$$

Подставляя выражения (9.3.79, 80) в уравнение (9.3.72), получаем

$$\lambda^2 - \gamma\lambda + U''(0) = 0, \quad (9.3.81)$$

откуда находим

$$\lambda(0) = \frac{\gamma}{2} \pm \sqrt{\frac{\gamma^2}{4} + U_2}. \quad (9.3.82)$$

Мы видим теперь, что из уравнения (9.3.82) следует, что $d\lambda/dw = 0$, когда $w = 0$. Таким образом, λ не сильно отличается от выражения (9.3.82) вблизи седловой точки, и поэтому в дальнейшем мы будем аппроксимировать λ выражением (9.3.82).

Только один из корней (9.3.82), а именно корень с положительным знаком, имеет смысл, поскольку с физической точки зрения для получения результата Крамерса нужно, чтобы $\lambda \rightarrow \infty$ в пределе большой величины трения. Другой корень отвечает выбору плоскости, при котором $P_s(x)$ имеет на ней минимум.

Проинтегрируем теперь выражение (9.3.57) и определим функцию $d(w)$. Заметим, что функция $d(w)$ должна быть определена вместе с единичным вектором $n(w)$. Непосредственная подстановка в выражение (9.3.75) и использование равенства (9.3.79) дает

$$(1 + \lambda^2)^{-1/2} = \frac{dx}{dw}(w=0)d(0) = \frac{1}{\gamma} d(0), \quad (9.3.83)$$

так что

$$d(0) = \gamma(1 + \lambda^2)^{-1/2}. \quad (9.3.84)$$

Далее,

$$\begin{aligned} p(w) &= \int_{S(w)} |dS P_s(x)| = \int_{S(w)} \sqrt{dx^2 + dp^2} P_s(x, p) \\ &= \mathcal{N}_2 \frac{[1 + \lambda^2]^{1/2}}{\lambda} \int dp \exp \left[-\frac{p^2}{2} - U \left(\frac{w-p}{\lambda} \right) \right]. \end{aligned} \quad (9.3.85)$$

Точная оценка зависит от выбора $U(x)$. Используя приближенное выражение

$$U(x) \simeq U_0 - \frac{1}{2} U_2 x^2 \quad (9.3.86)$$

и оценивая результат, имеющий гауссовский вид, получаем

$$p(w) = \frac{(1 + \lambda^2)^{1/2}}{\lambda} \mathcal{N}_2 e^{-U_0} \exp \left[\frac{U_2 w^2}{2(\lambda^2 - U_2)} \right], \quad (9.3.87)$$

и, следовательно,

$$\kappa(0) = \int_{-\infty}^0 p(w)^{-1} dw = \frac{1}{2} \mathcal{N}_2^{-1} \frac{\lambda \gamma}{(1 + \lambda^2)^{1/2}} \frac{e^{U_0}}{\sqrt{U_2}} = \mu(0). \quad (9.3.88)$$

Итак, из уравнения (9.2.19), приспособленного к многомерной теории, мы находим следующее выражение для среднего времени первого перехода из одной потенциальной ямы в точку $x = 0$:

$$\tau_0 = \kappa(0)d(0)^{-1} = \frac{\lambda}{2} e^{U_0} \mathcal{N}_1^{-1} \sqrt{\frac{2\pi}{U_2}}, \quad (9.3.89)$$

т. е.

$$\tau_0 = \frac{1}{2} \left(\frac{\gamma}{2} + \sqrt{\frac{\gamma^2}{4} + U_2} \right) e^{U_0} \mathcal{N}_1^{-1} \sqrt{\frac{2\pi}{U_2}}. \quad (9.3.90)$$

Сравнение с другими результатами

а) Точное выражение для среднего времени первого достижения границы в одномерном случае (уравнение Смолуховского)

Уравнение Крамерса в пределе большой величины трения сводится к уравнению Смолуховского для плотности вероятности

$$\hat{P}(x, t) = \int dv P(x, v, t), \quad (9.3.91)$$

а именно к уравнению

$$\frac{\partial \hat{P}(x, t)}{\partial t} = \frac{1}{\gamma} \frac{\partial}{\partial x} \left[U'(x) \hat{P} + \frac{\partial \hat{P}}{\partial x} \right]. \quad (9.3.92)$$

Точный результат для среднего времени первого достижения точки $x = 0$ из точки $x = a$ для этого приближенного уравнения имеет вид

$$\tau_1 = \gamma \int_a^0 dx \exp[U(x)] \int_{-\infty}^x dz \exp[-U(z)]. \quad (9.3.93)$$

Этот результат можно оценить численно.

б) *Результат Крамерса*

Этот результат получается путем применения нашего метода к одномерному уравнению Смолуховского (9.3.92) и гауссовской аппроксимации всех интегралов. Результат имеет вид

$$\tau_2 = \frac{1}{2} \gamma e^{U_0} \mathcal{N}_1^{-1} \sqrt{\frac{2\pi}{U_2}} \quad (9.3.94)$$

и отличается от выражения (9.3.90) для τ_0 заменой $\lambda \rightarrow \gamma$, безусловно справедливой в пределе больших значений γ . В этом пределе

$$\tau_0 \simeq (1 + U_2 \gamma^{-2}) \tau_2. \quad (9.3.95)$$

в) *Уточненное уравнение Смолуховского*

Более точным уравнением, чем уравнение Смолуховского (9.3.1), является обобщенное уравнение Смолуховского (6.4.108)

$$\frac{\partial \hat{P}}{\partial t} = \frac{1}{\gamma} \frac{\partial}{\partial x} \left\{ [1 + \gamma^{-2} U''(x)] \left[U'(x) \hat{P} + \frac{\partial \hat{P}}{\partial x} \right] \right\}. \quad (9.3.96)$$

Используя стандартную теорию, вычислим точное среднее время первого достижения границы для этого уравнения. Оно имеет вид

$$\tau_3 = \gamma \int_a^0 dx [1 + \gamma^{-2} U''(x)] \exp[U(x)] \int_{-\infty}^x dz \exp[-U(z)]. \quad (9.3.97)$$

Заметим, однако, что основной вклад в интеграл по x дает окрестность точки $x = 0$, так что малый поправочный член $\gamma^{-2} U''(x)$ можно оценить достаточно точно, если в выражении (9.3.97) положить

$$U''(x) \simeq U''(0) = -U_2. \quad (9.3.98)$$

Мы получаем тогда уточненный результат Смолуховского

$$\tau_3 = (1 - \gamma^{-2} U_2)^{-1} \tau_1 \simeq (1 + \gamma^{-2} U_2) \tau_1. \quad (9.3.99)$$

Нужно заметить, что в этом приближении

$$\frac{\tau_3}{\tau_1} = \frac{\tau_0}{\tau_2}. \quad (9.3.100)$$

Это означает, что в приближении, когда все интегралы можно оценить как гауссовы, имеющие острые максимумы, наш результат согласуется с уточненным результатом Смолуховского.

г) Численные результаты

Моделируя на ЭВМ эквивалентные стохастические дифференциальные уравнения

$$dx = p dt \quad (9.3.101)$$

$$dp = -[\gamma p + U'(x)] dt + \sqrt{2\gamma} dW(t), \quad (9.3.102)$$

мы можем оценить среднее время первого достижения плоскости S_0 , т. е. линии

$$p = -\lambda x. \quad (9.3.103)$$

Результаты приходится получать для заданного множества потенциалов. Для того чтобы оценить влияние остроты пиков, мы рассматриваем различные температуры T в уравнениях

$$ax = p dt \quad (9.3.104)$$

$$dp = -[\gamma p + U'(x)] dt + \sqrt{2\gamma T} dW(t). \quad (9.3.105)$$

Выполняя подстановку

$$\begin{aligned} p &\rightarrow p T^{1/2} \\ x &\rightarrow x T^{1/2}, \end{aligned} \quad (9.3.106)$$

получаем

$$dx = p dt$$

$$dp = -[\gamma p + V'(x, T)] + \sqrt{2\gamma} dW(t), \quad (9.3.107)$$

где

$$V(x, T) = U(xT^{1/2}). \quad (9.3.108)$$

Численное моделирование выполнялось для потенциала

$$U(x) = \frac{1}{4}(x^2 - 1)^2; \quad (9.3.109)$$

результаты показаны на рис. 9.4. Они делятся естественным образом на два множества: кривые и прямые линии. Наилучшим результа-

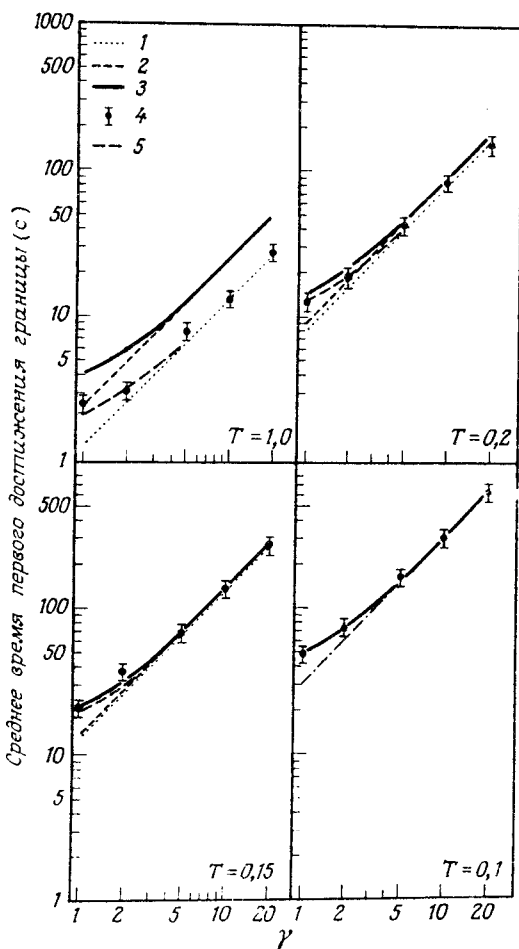


Рис. 9.4. Сравнение различных оценок среднего времени достижения границы в случае потенциала с двумя потенциальными ямами (разд. 9.3.4): 1 — одномерное приближение; 2 — теория Крамерса; 3 — наша теория; 4 — среднее значение из 300 машинных экспериментов; 5 — уточненный результат Смолуховского.

том является уточненный результат Смолуховского, который совпадает при всех температурах с численными результатами, а при низких температурах совпадает с результатом, полученным нашим методом. Таким образом, подтверждается справедливость этого метода в ожидаемой области его применимости, поскольку низкие температуры соответствуют распределениям с острыми пиками.

Заметим также, что выбор плоскости S_0 в качестве сепаратрисы имеет и другое обоснование. В самом деле, вблизи точки $x = 0$, $p = 0$, мы можем записать

$$dx = p dt \quad (9.3.110)$$

$$dp = (-\gamma p + U_2 x) dt + \sqrt{2\gamma T} dW(t). \quad (9.3.111)$$

Условием того, что детерминированная часть вектора $(dx/dt, dp/dt)$, а именно вектор $(p, -\gamma p + U_2 x)$, направлена из точки (x, p) в начало координат, является

$$\frac{p}{-\gamma p + U_2 x} = \frac{x}{p}. \quad (9.3.112)$$

Полагая $p = -\lambda x$, находим

$$\lambda^2 - \lambda\gamma - U_2 = 0, \quad (9.3.113)$$

что совпадает с уравнением (9.3.81) вблизи точки $x = 0$. Два решения этого уравнения соответствуют детерминированному движению, направленному к началу координат (корень со знаком «+») и от начала координат (корень со знаком «-»).

Таким образом, когда частица находится на сепаратрисе, за последующий временной интервал dt только случайный член $dW(t)$ может увести ее с сепаратрисы, причем частица может уйти вправо или влево от сепаратрисы с равной вероятностью. Это означает, что отношение расщепленных вероятностей выхода влево или вправо на плоскости будет 1:1.

Это определение сепаратрисы согласуется также с определениями, данными в разд. 9.1 и 9.2, в которых считается, что вектор $\mathbf{v}(x)$ должен быть перпендикулярен нормали поверхности S .

Квантовомеханические марковские процессы

Квантовая механика со времени своего основания в 20-е годы была признана как такое описание мира, в основе которого лежит существенно статистический аспект. Следовательно, все, что описывает квантовая механика, следует рассматривать как некоторого рода стохастический процесс. Однако только квантовой механике свойственно описание посредством *комплексных амплитуд вероятности*, квадрат модуля которых дает действительную вероятность осуществления какого-либо события.

В настоящей главе мы не собираемся давать формулировку подходящей квантовомеханической теории вероятностей или в терминах соответствующим образом определенного стохастического процесса в этой обобщенной теории вероятностей формулировать квантовую механику. Что для нас действительно представляет интерес, так это ввести читателя в завораживающий мир на границе квантовой и классической теорий вероятностей — царство квантовой оптики и квантовой электроники. Статистические аспекты в нем возникают из-за внутренней квантовой природы системы, так же как флуктуации возникают из-за тепловых эффектов. Мы покажем, как квантовомеханическую теорию оптических систем можно тесно связать с марковскими скачкообразными процессами в соответствующей обобщенной форме. Эти процессы сами часто могут быть связаны с диффузионными процессами на комплексной плоскости посредством так называемых *P -представлений*, или *методов фазового пространства*. Эти диффузионные процессы можно охарактеризовать квазивероятностями, которые могут быть отрицательными или комплексными, или эти процессы могут определять подлинные положительные вероятности. Ситуация здесь очень похожа на ситуацию в разд. 7.7, возникающую при переходе в представление Пуассона, которое фактически есть частный случай *P -представления*.

Мы построим эту главу следующим образом. Сначала набросаем в общих чертах квантовомеханическую теорию гармонического осциллятора и введем центральное для нас понятие когерентных состояний. Затем определим квантовый марковский процесс и покажем, как с по-

мощью метода, подобного методам адиабатического исключения гл. 6, можно вывести для этого процесса обобщенное управляющее уравнение. Из таких управляющих уравнений мы можем вывести иногда обычные управляющие уравнения для процессов рождения — гибели, а иногда, используя P -представления, уравнения Фоккера — Планка. Оба метода позволяют нам применять к этим квантовомеханическим системам весь аппарат классических стохастических процессов.

10.1. КВАНТОВОМЕХАНИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ ГАРМОНИЧЕСКОГО ОСЦИЛЛЯТОРА

Гармонический осциллятор мы будем описывать при помощи операторов рождения и уничтожения a^+ и a , удовлетворяющих коммутационным соотношениям

$$[a, a^+] \equiv aa^+ - a^+a = 1. \quad (10.1.1)$$

Используя эти соотношения, можно показать, что собственные состояния $|n\rangle$ оператора a^+a обладают свойствами

$$a^+a|n\rangle = n|n\rangle \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (10.1.2)$$

$$\left. \begin{aligned} a|n\rangle &= \sqrt{n} |n-1\rangle \\ a^+|n\rangle &= \sqrt{n+1} |n+1\rangle \end{aligned} \right\} \quad (10.1.3)$$

и

$$\langle n|m\rangle = \delta_{m,n}. \quad (10.1.4)$$

Введем оператор N

$$N = a^+a, \quad (10.1.5)$$

известный как оператор числа частиц, поскольку, как это видно из формулы (10.1.2), его собственные значения являются целыми числами.

Гармонический осциллятор задается гамильтонианом

$$H = (a^+a + \frac{1}{2})\hbar\omega, \quad \text{где} \quad (10.1.6)$$

$$h = 2\pi\hbar \quad (10.1.7)$$

есть постоянная Планка, а ω — частота.

Собственными состояниями оператора H являются, конечно, состояния $|n\rangle$, а соответствующие собственные значения этого оператора таковы:

$$E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega. \quad (10.1.8)$$

Динамика вводится с помощью уравнения Шредингера, которое определяет эволюцию во времени любого физического состояния $|A, t\rangle$. Оно имеет хорошо известный вид

$$H|A, t\rangle = i\hbar\partial_t|A, t\rangle. \quad (10.1.9)$$

Свойство ортонормированности (10.1.4) означает, что мы можем представить любое состояние в виде разложения по энергетическим собственным состояниям $|n\rangle$

$$|A, t\rangle = \sum_n |n\rangle \langle n|A, t\rangle, \quad (10.1.10)$$

и, следовательно,

$$\left. \begin{aligned} i\hbar\partial_t|A, t\rangle &= i\hbar \sum_n |n\rangle\partial_t\langle n|A, t\rangle \\ &= \sum_n H|n\rangle \langle n|A, t\rangle \\ &= \sum_n (n + \frac{1}{2})\hbar\omega|n\rangle \langle n|A, t\rangle, \end{aligned} \right\} \quad (10.1.11)$$

так что

$$\begin{aligned} \langle n|A, t\rangle &= e^{-iE_n t/\hbar}\langle n|A, 0\rangle \\ &= e^{-i(n+1/2)\omega t}\langle n|A, 0\rangle. \end{aligned} \quad (10.1.12)$$

Таким образом, эволюция во времени любого состояния теперь полностью определена.

10.1.1. ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ С ВНЕШНИМ ПОЛЕМ

Проблема взаимодействия гармонического осциллятора с некантованным внешним полем полуклассическая. Не забираясь слишком глубоко в физику, мы просто постулируем, что этой задаче соответствует следующий модифицированный по сравнению с (10.1.6) гамильтониан:

$$H(\alpha) = [(a^\dagger a + \frac{1}{2}) - (\alpha a^\dagger + \alpha^* a) + |\alpha|^2]\hbar\omega; \quad (10.1.13)$$

здесь α — комплексное число. Три части этого выражения можно рассматривать соответственно как энергию гармонического осциллятора, энергию взаимодействия между осциллятором и возмущающим полем и, наконец, (постоянную) энергию возмущающего поля.

Более удобно представить $H(\alpha)$ в виде

$$H(\alpha) = \hbar\omega[(a - \alpha)^\dagger(a - \alpha) + \frac{1}{2}]. \quad (10.1.14)$$

Очевидно, что операторы $(a - \alpha)^\dagger$ и $a - \alpha$ обычно подчиняются тем же коммутационным соотношениям, что и операторы a^\dagger и a , так как

α — просто комплексная постоянная. Следовательно, собственные состояния в энергетическом представлении будут иметь тот же самый вид, поскольку существование состояний $|n\rangle$ следует только из коммутационных соотношений.

Уравнение (10.1.3) можно использовать для определения основного, или вакуумного, состояния $|0\rangle$ оператора a^+a при помощи уравнения

$$a|0\rangle = 0. \quad (10.1.15)$$

Соответствующим уравнением для смещенных операторов $(a - \alpha)^+$, $(a - \alpha)$ служит

$$a|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle. \quad (10.1.16)$$

Мы можем убедиться, используя (10.1.3), что решение этого уравнения для $|\alpha\rangle$ имеет вид

$$|\alpha\rangle = \exp\left(-\frac{1}{2}|\alpha|^2\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle, \quad (10.1.17)$$

где точный вид множителя $\exp\left(-\frac{1}{2}|\alpha|^2\right)$ выбран так, чтобы выполнялось соотношение

$$\langle\alpha|\alpha\rangle = 1. \quad (10.1.18)$$

Состояния $|\alpha\rangle$ были введены Глаубером [10.1] и известны как *когерентные состояния*. Когда гармонический осциллятор рассматривают в качестве модели поля излучения для одномодовой системы, когерентное состояние можно считать квантовомеханическим состоянием, приближающимся к классическому состоянию.

Собственными состояниями гамильтониана $H(\alpha)$ в энергетическом представлении теперь являются состояния $|n; \alpha\rangle$, которые имеют те же свойства, что и (10.1.2 — 4), но записываются через смещенные операторы $(a - \alpha)^+$ и $(a - \alpha)$.

10.1.2. СВОЙСТВА КОГЕРЕНТНЫХ СОСТОЯНИЙ

Перечислим важнейшие свойства, доказательства которых приводить не будем, если результат получается простой подстановкой определенных.

a) Определение:

$$|\alpha\rangle = \exp\left(-\frac{1}{2}|\alpha|^2\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle. \quad (10.1.19)$$

б) Скалярное произведение:

$$\langle \alpha | \beta \rangle = \exp(\alpha^* \beta - \frac{1}{2} |\alpha|^2 - \frac{1}{2} |\beta|^2) \quad (10.1.20)$$

$$|\langle \alpha | \beta \rangle|^2 = \exp(-|\alpha - \beta|^2). \quad (10.1.21)$$

в) Формула полноты:

$$1 = \frac{1}{\pi} \int d^2 \alpha |\alpha\rangle \langle \alpha|. \quad (10.1.22)$$

Здесь

$$\begin{aligned} \alpha &= \alpha_x + i \alpha_y, \\ d^2 \alpha &= d\alpha_x d\alpha_y, \end{aligned} \quad (10.1.23)$$

а интеграл берется по всей комплексной плоскости. Докажем это утверждение. Для произвольного вектора $|A\rangle$ можно написать

$$|A\rangle = \sum_n A_n |n\rangle, \quad (10.1.24)$$

так что

$$\frac{1}{\pi} \int d^2 \alpha |\alpha\rangle \langle \alpha | A\rangle = \frac{1}{\pi} \sum_n \int A_n |\alpha\rangle \langle \alpha | n\rangle d^2 \alpha. \quad (10.1.25)$$

Подставим сюда определение (10.1.19) и перейдем к полярным координатам

$$\alpha = r e^{i\theta} \quad (10.1.26)$$

$$d^2 \alpha = r dr d\theta. \quad (10.1.27)$$

Тогда

$$\begin{aligned} (10.1.25) &= \frac{1}{\pi} \sum_{m,n} \int A_n e^{-r^2} r^{n+m} e^{i(m-n)\theta} (n! m!)^{-1/2} |m\rangle r dr d\theta \\ &= 2 \sum_n \int A_n e^{-r^2} r^{2n+1} (n!)^{-1} |n\rangle dr, \end{aligned} \quad (10.1.28)$$

где мы использовали

$$2\delta_{n,m} = \frac{1}{\pi} \int d\theta e^{i(m-n)\theta}. \quad (10.1.29)$$

Замечая теперь, что

$$\int_0^\infty dr e^{-r^2} r^{2n+1} = n!/2, \quad (10.1.30)$$

находим

$$(10.1.25) = \sum_n A_n |n\rangle = |A\rangle. \quad (10.1.31)$$

Формулы (10.1.20, 21) показывают, что *когерентные состояния не ортогональны* для различных α и β и, поскольку перед интегралом в (10.1.22) стоит множитель $1/\pi$, *когерентные состояния образуют переполненную систему* (фактически из формулы (10.1.19) следует, что для любого r мы можем написать выражение

$$|n\rangle = \exp\left(\frac{1}{2}r^2\right)r^{-n} \sqrt{n!} \int d\theta e^{-in\theta} |\alpha\rangle, \quad (10.1.32)$$

которое указывает на то, что состояния для любого фиксированного r образуют полную систему). Указанная переполненность, однако, не является недостатком благодаря очень простой связи между когерентными состояниями и физикой классических полей, а также благодаря тому, что *состояния Баргмана*, определяемые равенством

$$|\alpha\rangle = \exp\left(\frac{1}{2}|\alpha|^2\right)|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle, \quad (10.1.33)$$

являются *аналитическими функциями α* . Это свойство очень важно для последующего изложения.

г) Разложение произвольных состояний по когерентным состояниям

Рассмотрим произвольное состояние $|f\rangle$. Используя соотношение полноты (10.1.22), получаем

$$|f\rangle = \frac{1}{\pi} \int d^2\alpha |\alpha\rangle f(\alpha^*) \exp\left(-\frac{1}{2}|\alpha|^2\right), \quad (10.1.34)$$

где

$$f(\alpha^*) = \langle \alpha | f \rangle \exp\left(\frac{1}{2}|\alpha|^2\right) = \langle \alpha || f \rangle \quad (10.1.35)$$

является *аналитической функцией* от α^* . При этом условии разложение (10.1.34) единственно. Если допускаются функции, зависящие как от α^* , так и от α , то, как показал Глаубер, разложение более не будет единственным.

Нетрудно показать, что скалярное произведение двух состояний $|f\rangle$ и $|g\rangle$ определяется формулой

$$\langle g | f \rangle \langle g | 1 | 1 \rangle = \frac{1}{\pi} \int d^2\alpha [g(\alpha^*)]^* f(\alpha^*) e^{-|\alpha|^2}, \quad (10.1.36)$$

вследствие которой мы имеем, очевидно, гильбертово пространство аналитических функций. Наличие скалярного произведения служит надежной математической основой для изучения гармонического осциллятора, операторов рождения и уничтожения и всего формализма этой главы.

д) *Разложение оператора по когерентным состояниям*

Рассмотрим произвольный оператор T , действующий в квантовом гильбертовом пространстве. Используя дважды разложение единичного вектора, находим

$$\begin{aligned} T &= 1 \cdot T \cdot 1 = \frac{1}{\pi^2} \int d^2\alpha d^2\beta |\alpha\rangle\langle\alpha| T |\beta\rangle\langle\beta| \\ &= \frac{1}{\pi^2} \int d^2\alpha d^2\beta |\alpha\rangle\langle\beta| T(\alpha^*, \beta) \exp(-\frac{1}{2}|\alpha|^2 - \frac{1}{2}|\beta|^2), \end{aligned} \quad (10.1.37)$$

где

$$\begin{aligned} T(\alpha^*, \beta) &= \exp(\frac{1}{2}|\alpha|^2 + \frac{1}{2}|\beta|^2) \langle\alpha| T |\beta\rangle \\ &= \langle\alpha| T |\beta\rangle, \end{aligned} \quad (10.1.38)$$

причем из аналитичности состояний $|\alpha\rangle$ и $|\beta\rangle$ мы заключаем, что $T(\alpha^*, \beta)$ является *аналитической функцией от α^* и β и при этом условии единственной*. Отметим, например, что если

$$T = (a^+)^m (a^n), \quad (10.1.39)$$

то

$$\left. \begin{aligned} T(\alpha^*, \beta) &= \langle\alpha| (a^+)^m (a^n) |\beta\rangle \exp(\frac{1}{2}|\alpha|^2 + \frac{1}{2}|\beta|^2) \\ &= (\alpha^*)^m (\beta)^n \langle\alpha|\beta\rangle \exp(\frac{1}{2}|\alpha|^2 + \frac{1}{2}|\beta|^2) \\ &= (\alpha^*)^m (\beta)^n \exp(\alpha^* \beta). \end{aligned} \right\} \quad (10.1.40)$$

е) *Любой оператор T определяется своим средним значением во всех когерентных состояниях*

Поскольку

$$\langle\alpha| T |\alpha\rangle = \sum_{n,m} \langle n| T |m\rangle e^{-|\alpha|^2} (\alpha^*)^n (\alpha)^m / \sqrt{n!m!},$$

то

$$\langle n| T |m\rangle = \sqrt{n!m!} \frac{\partial^n}{\partial \alpha^{*n}} \frac{\partial^m}{\partial \alpha^m} (e^{\alpha\alpha^*} \langle\alpha| T |\alpha\rangle). \quad (10.1.41)$$

Производные здесь формальные, и, как в теории аналитических функций, их нужно интерпретировать следующим образом:

$$\left. \begin{aligned} \alpha &= x + iy \\ \frac{\partial}{\partial \alpha} &= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \right) \\ \frac{\partial}{\partial \alpha^*} &= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right). \end{aligned} \right\} \quad (10.1.42)$$

При этом $\langle n|I|m\rangle$ являются комбинацией коэффициентов разложения по степеням действительных переменных x и y .

ж) *Когерентные состояния — собственные состояния оператора a*

Именно, имеют место равенства

$$\left. \begin{aligned} a|\alpha\rangle &= \alpha|\alpha\rangle \\ \text{и} \\ \langle\alpha|a^+ &= \langle\alpha|\alpha^* \end{aligned} \right\} \quad (10.1.43)$$

Они доказываются непосредственно, исходя из определения, и являются первоосновой для исследования операторов a и a^+ . При оценке матричных элементов удобно использовать *нормальные произведения* операторов, в которых все операторы уничтожения стоят справа от операторов рождения. Так,

$$\left. \begin{aligned} \langle\alpha|a^+aa^+|\beta\rangle &= \langle\alpha|a^+a^+a + a^+[a, a^+]|\beta\rangle \\ &= \langle\alpha|a^+a^+a + a^+|\beta\rangle \\ &= (\alpha^{*2}\beta + \alpha^*)\langle\alpha|\beta\rangle. \end{aligned} \right\} \quad (10.1.44)$$

Символ $:$, в который заключено выражение, означает, что оно считается нормальным произведением. Например,

$$:(a + a^+)(a + a^+): = a^{+2} + a^2 + 2a^+a. \quad (10.1.45)$$

з) *Пуассоновское распределение для числа квантов в случае когерентных состояний*

Состояние $|n\rangle$ известно как «состояние с n квантами», поскольку его энергия на величину $n\hbar\omega$ больше энергии вакуума $|0\rangle$, т. е. состояния с 0 квантами. Таким образом, вероятность, наблюдения n квантов в когерентном состоянии $|\alpha\rangle$ в квантовой механике равна

$$P_\alpha(n) = |\langle n|\alpha\rangle|^2 = \left| \exp\left(-\frac{1}{2}\alpha^2\right) \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \right|^2 \quad (10.1.46)$$

$$= \frac{e^{-|\alpha|^2} |\alpha|^{2n}}{n!} \quad (10.1.47)$$

и представляет собой распределение Пуассона со средним $|\alpha|^2$.

Поскольку число n соответствует собственному значению оператора числа частиц N , мы имеем

$$\langle N \rangle = \langle\alpha|N|\alpha\rangle = \sum_n nP(n) = |\alpha|^2, \quad (10.1.48)$$

$$\begin{aligned}
 \langle N^2 \rangle &= \langle \alpha | a^+ a a^+ a | \alpha \rangle \\
 &= \langle \alpha | a^+ a^+ a a + a^+ [a, a^+] a | \alpha \rangle \\
 &= |\alpha|^4 + |\alpha|^2.
 \end{aligned}$$

Следовательно,

$$\langle N(N-1) \rangle = |\alpha|^4 = \langle N \rangle^2, \quad (10.1.49)$$

как этого требует распределение Пуассона. Именно пуассоновская природа распределения вероятностей числа квантов обеспечивает связь с пуассоновским представлением.

10.2. МАТРИЦА ПЛОТНОСТИ И РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ВЕРОЯТНОСТЕЙ

Обычная квантовомеханическая формула, определяющая среднее значение величины M в квантовом состоянии $|\psi\rangle$, имеет вид

$$\langle M \rangle = \langle \psi | M | \psi \rangle. \quad (10.2.1)$$

Она относится только к тем экспериментам, в которых идентичное квантовое состояние измеряется неоднократно. Обычно, однако, вследствие случайного характера приготовления состояния — из-за неточности приготовительной аппаратуры — мы измеряем средние значения в каждом эксперименте в различных состояниях $|\psi_\alpha\rangle$. Поэтому если каждое состояние в этом случае реализуется с вероятностью $P(a)$, что обусловлено не квантовыми эффектами, а просто случайным характером приготовления состояния, то измеряемое среднее дается формулой

$$\langle M \rangle = \sum P(a) \langle \psi_a | M | \psi_a \rangle. \quad (10.2.2)$$

Введем теперь матрицу (или оператор) плотности ρ :

$$\rho = \sum_a P(a) |\psi_a\rangle \langle \psi_a|; \quad (10.2.3)$$

при ее помощи (10.2.2) можно записать как

$$\langle M \rangle = \text{Tr} \{ \rho M \}. \quad (10.2.4)$$

Мы ввели здесь операцию взятия следа Tr , определяемую для любого оператора B равенством

$$\text{Tr} \{ B \} = \sum_n \langle n | B | n \rangle, \quad (10.2.5)$$

так что

$$\begin{aligned}\text{Tr}\{\rho M\} &= \sum_{n,a} P(a) \langle n | \psi_a \rangle \langle \psi_a | M | n \rangle \\ &= \sum_{n,a} P(a) \langle \psi_a | M | n \rangle \langle n | \psi_a \rangle \\ &= \sum_a P(a) \langle \psi_a | M | \psi_a \rangle \\ &= \langle M \rangle.\end{aligned}$$

Важным свойством операции взятия следа является ее инвариантность относительно циклической перестановки множителей:

$$\text{Tr}\{\rho M\} = \text{Tr}\{M\rho\}, \quad (10.2.6)$$

$$\text{Tr}\{ABCD\} = \text{Tr}\{BCDA\} \text{ и т.д.} \quad (10.2.7)$$

ВАЖНЕЙШИЕ СВОЙСТВА МАТРИЦЫ ПЛОТНОСТИ:

$$1) \quad \text{Tr}\{\rho\} = 1 \quad (10.2.8)$$

при

$$\text{Tr}\{\rho\} = \sum_a P_a \langle \psi_a | \psi_a \rangle = \sum_a P_a = 1. \quad (10.2.9)$$

2) Матрица плотности ρ является неотрицательно определенной; для любого состояния $|A\rangle$

$$\langle A | \rho | A \rangle = \sum P_a |\langle A | \psi_a \rangle|^2 \geq 0. \quad (10.2.10)$$

3) Если матрица ρ соответствует чистому состоянию, то $\rho^2 = \rho$, и, наоборот, для чистого состояния $P_a = \delta_{a,a_0}$ при некотором a_0 ; следовательно,

$$\rho^2 = |\psi_{a_0}\rangle \langle \psi_{a_0} | \psi_{a_0}\rangle \langle \psi_{a_0} | = \rho. \quad (10.2.11)$$

С другой стороны, в общем случае имеем

$$\rho^2 = \sum P_a P_b |\psi_a\rangle \langle \psi_b | \langle \psi_a | \psi_b \rangle. \quad (10.2.12)$$

Это выражение равно ρ , только если

$$P_a P_b \langle \psi_a | \psi_b \rangle = 0 \quad \text{при } a \neq b$$

$$P_a^2 \langle \psi_a | \psi_a \rangle = P_a.$$

Имеем

$$\langle \psi_a | \psi_a \rangle = 1.$$

Следовательно,

$$P_a^2 = P_a \implies P_a = 1 \text{ или } 0,$$

но, поскольку $\sum P_a = 1$, только одна из величин P_a может быть равна единице, а остальные равны нулю, что отвечает чистому состоянию.

4) $\text{Tr}\{\rho^2\} \leq \text{Tr}\{\rho\}$, знак равенства возможен только для чистых состояний. Принимая во внимание равенство

$$\text{Tr}\{\rho^2\} = \sum_{a,b} P_a P_b |\langle \psi_a | \psi_b \rangle|^2$$

и вытекающее из формулы

$$|\langle \psi_a | \psi_b \rangle|^2 \leq 1 \quad (10.2.14)$$

неравенство

$$\sum_b P_b |\langle \psi_a | \psi_b \rangle|^2 \leq 1 \text{ при любых } a, \quad (10.2.15)$$

получаем

$$\text{Tr}\{\rho^2\} \leq \sum_a P_a = \text{Tr}\{\rho\}. \quad (10.2.16)$$

Очевидно, что знак равенства в формуле (10.2.16) возможен только тогда, когда

$$P_b = \delta_{b,a_0}$$

при некотором a_0 , т. е. когда матрица ρ соответствует чистому состоянию.

10.2.1. УРАВНЕНИЕ НЕЙМАНА

Уравнение Шредингера для любого состояния имеет вид

$$H|\psi\rangle = i\hbar\partial_t|\psi\rangle. \quad (10.2.17)$$

Можно вывести соответствующее уравнение для оператора плотности. В самом деле, из (10.2.3) имеем

$$\begin{aligned} \partial_t \rho &= \sum_a P_a [(\partial_t |\psi_a\rangle)\langle\psi_a| + |\psi_a\rangle(\partial_t \langle\psi_a|)] \\ &= \frac{1}{i\hbar} (H\rho - \rho H). \end{aligned}$$

Отсюда получаем уравнение

$$\boxed{[H, \rho] = i\hbar\partial_t \rho,} \quad (10.2.18)$$

которое называется *уравнением Неймана*, или *квантовым уравнением Лиувилля*. Формальное решение данного уравнения имеет вид

$$\rho(t) = \exp(-iHt/\hbar)\rho(0) \exp(iHt/\hbar). \quad (10.2.19)$$

10.2.2. P-ПРЕДСТАВЛЕНИЕ ГЛАУБЕРА — СУДАРШАНА

Глаубер [10.1] и Сударшан [10.2] ввели представление матрицы плотности, известное теперь как *P-представление Глаубера — Сударшана*. Предполагаем, что матрицу ρ можно представить в виде

$$\rho = \int d^2\alpha P(\alpha, \alpha^*) |\alpha\rangle\langle\alpha|, \quad (10.2.20)$$

где $P(\alpha, \alpha^*)$ играют роль квазивероятностей. Вопросы существования этого *P-представления* мы пока не рассматриваем.

Заметим, что из равенств

$$1 = \langle\alpha|\alpha\rangle = \sum_n \langle\alpha|n\rangle\langle n|\alpha\rangle,$$

$$\text{Tr}\{\rho\} = 1 = \int d^2\alpha P(\alpha, \alpha^*) \sum_n \langle n|\alpha\rangle\langle\alpha|n\rangle;$$

тогда получаем

$$1 = \int d^2\alpha P(\alpha, \alpha^*). \quad (10.2.21)$$

Более того, для любого нормального произведения $(a^+)^r a^s$ имеем

$$\begin{aligned} \text{Tr}\{(a^+)^r a^s \rho\} &= \text{Tr}\{a^s \rho (a^+)^r\} \\ &= \int d^2\alpha P(\alpha, \alpha^*) \sum_n \langle n|a^s|\alpha\rangle \langle\alpha|(a^+)^r|n\rangle, \end{aligned}$$

и, следовательно,

$$\langle(a^+)^r a^s\rangle = \int d^2\alpha (\alpha^+)^r \alpha^s P(\alpha, \alpha^*). \quad (10.2.22)$$

Таким образом, величина $P(\alpha, \alpha^*)$ играет роль некоторой плотности вероятности для переменных α и α^* в том смысле, что средние значения от нормально упорядоченных произведений квантовых операторов являются просто моментами, соответствующими плотности $P(\alpha, \alpha^*)$.

Условия, при которых *P-представление Глаубера — Сударшана* существует, довольно проблематичны. Клаудер и Сударшан [10.3] показали, что оно всегда существует, если только допускать возможность достаточно сингулярных обобщенных функций, через которые выра-

жается $P(\alpha, \alpha^*)$. Конечно, оно не всегда существует как положительная или даже как гладкая функция.

Мы оставим на время эти вопросы. Заметим лишь, что ответы на них очень похожи на ответы, касающиеся существования различных представлений Пуассона.

10.2.3. ОПЕРАТОРНОЕ СООТВЕТСТВИЕ

Известно, что

$$\left. \begin{aligned} a|\alpha\rangle &= \alpha|\alpha\rangle \\ \text{и} \\ \langle\alpha|a^+ &= \alpha^*\langle\alpha|. \end{aligned} \right\} \quad (10.2.23)$$

Другой результат действия операторов a , a^+ получим, если возьмем состояния Баргмана. Будем иметь

$$\begin{aligned} a^+||\alpha\rangle &= \sum_n \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \sqrt{n+1} |n+1\rangle \\ &= \frac{\partial}{\partial\alpha} ||\alpha\rangle \end{aligned} \quad (10.2.24)$$

и аналогично

$$\langle\alpha|a = \frac{\partial}{\partial\alpha^*} \langle\alpha|.$$

Следовательно, используя P -представление матрицы ρ , записанное в более удобном виде, а именно

$$\rho = \int d^2\alpha ||\alpha\rangle \langle\alpha| e^{-\alpha\alpha^*} P(\alpha, \alpha^*),$$

получаем простое равенство

$$a^+\rho = \int d^2\alpha \frac{\partial}{\partial\alpha} (||\alpha\rangle) \langle\alpha| e^{-\alpha\alpha^*} P(\alpha, \alpha^*),$$

Интегрируя его по частям, находим,

$$a^+\rho = \int d^2\alpha ||\alpha\rangle \langle\alpha| e^{-\alpha\alpha^*} \left(\alpha^* - \frac{\partial}{\partial\alpha} \right) P(\alpha, \alpha^*). \quad (10.2.25)$$

Мы можем определить, таким образом, *операторное соответствие* между a^+ и $\alpha^* - \partial/\partial\alpha$. Аналогичная формула справедлива и для оператора a . Учитывая предыдущие формулы, получаем такие оператор-

ные соответствия:

$$a\rho \leftrightarrow \alpha P(\alpha, \alpha^*)$$

$$a^+\rho \leftrightarrow \left(\alpha^* - \frac{\partial}{\partial\alpha}\right) P(\alpha, \alpha^*)$$

$$\rho a \leftrightarrow \left(\alpha - \frac{\partial}{\partial\alpha^*}\right) P(\alpha, \alpha^*)$$

$$\rho a^+ \leftrightarrow \alpha^* P(\alpha, \alpha^*).$$

(10.2.26)

10.2.4. ПРИМЕНЕНИЕ К ВОЗМУЩЕННОМУ ГАРМОНИЧЕСКОМУ ОСЦИЛЛЯТОРУ

Рассмотрим гамильтониан

$$H = \hbar\omega(a^+a + \frac{1}{2}) + (\lambda a^+ + \lambda^* a). \quad (10.2.27)$$

Для него квантовое уравнение Лиувилля имеет вид

$$i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} = \hbar\omega[a^+a, \rho] + \lambda[a^+, \rho] + \lambda^*[a, \rho]. \quad (10.2.28)$$

Используя операторные соответствия (10.2.26), выведем отсюда уравнение для функции $P(\alpha, \alpha^*)$. Так, будем иметь

$$a^+a\rho \rightarrow \left(\alpha^* - \frac{\partial}{\partial\alpha}\right) \alpha P \quad (10.2.29)$$

$$-\rho a^+a \rightarrow -\left(\alpha - \frac{\partial}{\partial\alpha^*}\right) \alpha^* P. \quad (10.2.30)$$

[Заметим, что порядок операторов в (10.2.30) обратный, поскольку на оператор ρ они действуют справа, в то время как на функцию P они действуют слева.]

$$\begin{aligned} [a^+, \rho] &\rightarrow \left[\left(\alpha^* - \frac{\partial}{\partial\alpha}\right) - \alpha^*\right] P \\ &= -\frac{\partial}{\partial\alpha} P. \end{aligned} \quad (10.2.31)$$

Аналогично

$$[a, \rho] \rightarrow \frac{\partial}{\partial\alpha^*} P, \quad (10.2.32)$$

так что получаем уравнение

$$\frac{\partial P}{\partial t} = i\left(-\omega \frac{\partial}{\partial\alpha} \alpha + \omega \frac{\partial}{\partial\alpha^*} \alpha^* - \frac{\lambda}{\hbar} \frac{\partial}{\partial\alpha} + \frac{\lambda^*}{\hbar} \frac{\partial}{\partial\alpha^*}\right) P, \quad (10.2.33)$$

соответствующее уравнению Лиувилля. Но надо быть осторожным. Было бы заманчиво рассматривать α и α^* как независимые переменные, но, строго говоря, это неверно. Используя все приведенные выше соответствия, следует в действительности положить

$$\left. \begin{aligned} \alpha &= x + iy \\ \alpha^* &= x - iy \\ \frac{\partial}{\partial \alpha} &= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \right) \\ \frac{\partial}{\partial \alpha^*} &= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right) \end{aligned} \right\} \quad (10.2.34)$$

и

$$\lambda = \mu + i\nu.$$

В этих действительных переменных уравнение (10.2.30) примет вид

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \left[\frac{\partial}{\partial x} (\omega y + \nu/\hbar) - \frac{\partial}{\partial y} (\omega x + \mu/\hbar) \right] P. \quad (10.2.35)$$

Это есть не что иное, как уравнение Лиувилля, эквивалентное следующим дифференциальным уравнениям:

$$\frac{dx}{dt} = -\omega y - \nu/\hbar \quad (10.2.36)$$

$$\frac{dy}{dt} = \omega x + \mu/\hbar.$$

Последние эквивалентны уравнению

$$\frac{d\alpha}{dt} = i(\omega\alpha + \lambda/\hbar), \quad (10.2.37)$$

которое имеет решение

$$\alpha = -\lambda/\hbar\omega + \xi e^{i\omega t}. \quad (10.2.38)$$

Предполагая детерминистические начальные условия, получаем решение для распределения P :

$$P(\alpha, \alpha^*, t) = \delta \left(x - \operatorname{Re} \left\{ -\frac{\lambda}{\hbar\omega} + \xi e^{i\omega t} \right\} \right) \delta \left(y - \operatorname{Im} \left\{ -\frac{\lambda}{\hbar\omega} + \xi e^{i\omega t} \right\} \right) \quad (10.2.39)$$

$$= \delta^2(\alpha + \lambda/\hbar\omega - \xi e^{i\omega t}). \quad (10.2.40)$$

Здесь комплексная дельта-функция понимается в смысле (10.2.39).

Заметим, что параметр λ может зависеть от времени. В этом слу-

чае (10.2.37) принимает вид

$$\frac{d\alpha}{dt} = i[\omega\alpha + \lambda(t)/\hbar]. \quad (10.2.41)$$

Решение этого уравнения таково:

$$\alpha(t) = \alpha(0) e^{i\omega t} + i \int_0^t dt' e^{i\omega(t-t')} \lambda(t')/\hbar, \quad (10.2.42)$$

а соответствующее распределение P определяется выражением

$$P(\alpha, \alpha^*, t) = \delta^2[\alpha - \alpha(t)]. \quad (10.2.43)$$

10.2.5. КВАНТОВАЯ ХАРАКТЕРИСТИЧЕСКАЯ ФУНКЦИЯ

Преобразование Фурье от распределения $P(\alpha, \alpha^*)$ дает обычную характеристическую функцию, подобную функции, введенной в разд. 2.6. Определим ее с помощью формулы

$$\chi(\lambda, \lambda^*) = \int d^2\alpha \exp(\lambda\alpha^* - \lambda^*\alpha) P(\alpha, \alpha^*). \quad (10.2.44)$$

Заметим, что если

$$\alpha = x + iy$$

$$\lambda = \mu + iv,$$

то

$$\lambda\alpha^* - \lambda^*\alpha = 2i(\nu x - \gamma\mu). \quad (10.2.45)$$

Поэтому выражение (10.2.44) является преобразованием Фурье по двум действительным переменным. Возможна также такая форма записи характеристической функции:

$$\chi(\lambda, \lambda^*) = \text{Tr} \{ \rho \exp(\lambda a^+) \exp(-\lambda^* a) \}. \quad (10.2.46)$$

Она может служить общим определением квантовой характеристической функции. Заметим, что для произвольного оператора A имеем

$$\begin{aligned} \text{Tr} \{ A \} &= \sum_n \langle n | A | n \rangle = \frac{1}{\pi} \int d^2\alpha \sum_n \langle n | \alpha \rangle \langle \alpha | A | n \rangle \\ &= \frac{1}{\pi} \int d^2\alpha \sum_n \langle \alpha | A | n \rangle \langle n | \alpha \rangle, \end{aligned}$$

т. е.

$$\text{Tr} \{ A \} = \frac{1}{\pi} \int d^2\alpha \langle \alpha | A | \alpha \rangle. \quad (10.2.47)$$

Используем теперь формулу Бейкера — Хаусдорфа [10.4]. Для любых двух операторов A и B , таких, что их коммутатор $[A, B]$ коммутирует с ними обоими, можно записать

$$\begin{aligned} \exp(A + B) &= \exp(A) \exp(B) \exp(-\frac{1}{2}[A, B]) \\ &= \exp(B) \exp(A) \exp(\frac{1}{2}[A, B]). \end{aligned} \quad (10.2.48)$$

Замечая, что

$$[\lambda a^+, -\lambda^* a] = |\lambda|^2,$$

мы видим, что

$$\exp(\lambda a^+) \exp(-\lambda^* a) = \exp(-\lambda^* a) \exp(\lambda a^+) \exp(|\lambda|^2).$$

Следовательно,

$$\begin{aligned} \text{Tr} \{ \rho \exp(\lambda a^+) \exp(-\lambda^* a) \} &= \exp(|\lambda|^2) \text{Tr} \{ \rho \exp(-\lambda^* a) \exp(\lambda a^+) \} \\ &= \exp(|\lambda|^2) \text{Tr} \{ \exp(\lambda a^+) \rho \exp(-\lambda^* a) \} \\ &= \frac{\exp(|\lambda|^2)}{\pi} \int d^2 \alpha \langle \alpha | \exp(\lambda a^+) \rho \exp(-\lambda^* a) | \alpha \rangle. \end{aligned}$$

Таким образом,

$$\chi(\lambda, \lambda^*) = \frac{\exp(|\lambda|^2)}{\pi} \int d^2 \alpha \exp(\lambda \alpha^* - \lambda^* \alpha) \langle \alpha | \rho | \alpha \rangle. \quad (10.2.49)$$

Поскольку

$$\langle \alpha | \rho | \alpha \rangle > 0 \quad (10.2.50)$$

и

$$\text{Tr} \{ \rho \} = \frac{1}{\pi} \int d^2 \alpha \langle \alpha | \rho | \alpha \rangle = 1, \quad (10.2.51)$$

выражение (10.2.49), умноженное на $\exp(-|\lambda|^2)$, является преобразованием Фурье функции $\langle \alpha | \rho | \alpha \rangle / \pi$, удовлетворяющей условиям, накладываемым на функцию вероятности. Следовательно, изображение Фурье $\chi(\lambda, \lambda^*) \exp(-|\lambda|^2)$ является характеристической функцией распределения $\langle \alpha | \rho | \alpha \rangle / \pi$ и, согласно разд. 2.6, полностью ее определяет.

Из разд. 10.1.2 мы видим, что функция $\langle \alpha | \rho | \alpha \rangle$ определяет оператор ρ . Следовательно, функция $\chi(\lambda, \lambda^*)$ также определяет оператор ρ .

10.3. КВАНТОВЫЕ МАРКОВСКИЕ ПРОЦЕССЫ

Изложим теперь упрощенную форму квантовой теории затухания. Для этого требуется некоторое знание квантовой статистики.

10.3.1. ТЕРМОСТАТ

На практике затухание происходит из-за того, что система взаимодействует с другой очень большой системой, известной как термостат, в которую диссипирует энергия системы. Однако при этом возникает шум, поскольку термостат возвращает некоторую часть энергии обратно в систему.

В качестве модели термостата рассмотрим большое количество независимых гармонических осцилляторов с операторами Γ_i и гамильтонианом

$$H_B = \sum_i \hbar\omega_i(\Gamma_i^\dagger\Gamma_i + \frac{1}{2}). \quad (10.3.1)$$

Эта система обладает стационарной матрицей плотности, в качестве которой может быть взята любая положительная функция от гамильтониана H_B . Статистическая механика позволяет выбрать *канонический ансамбль*, для которого оператор плотности имеет вид

$$\rho(T) = \exp(-H_B/kT)/\text{Tr}\{\exp(-H_B/kT)\}, \quad (10.3.2)$$

где T — температура термостата. Очевидно, что

$$[H_B, \rho(T)] = i\hbar\partial_t\rho = 0. \quad (10.3.3)$$

Поскольку гамильтониан (10.3.1) представляет собой сумму коммутирующих между собой членов, можно записать

$$\rho = \prod_i \rho_i(T),$$

где

$$\rho_i(T) = \exp\left[-\frac{\hbar\omega_i}{kT}(\Gamma_i^\dagger\Gamma_i + \frac{1}{2})\right] / \text{Tr}\left\{\exp\left[-\frac{\hbar\omega_i}{kT}(\Gamma_i^\dagger\Gamma_i + \frac{1}{2})\right]\right\}. \quad (10.3.4)$$

Обозначим далее

$$Z_i = \text{Tr}\left\{\exp\left[-\frac{\hbar\omega_i}{kT}(\Gamma_i^\dagger\Gamma_i + \frac{1}{2})\right]\right\} = \sum_n \exp\left\{-\frac{(n + \frac{1}{2})\hbar\omega_i}{kT}\right\},$$

т. е.

$$Z_i(T) = \frac{\exp(-\hbar\omega_i/2kT)}{1 - \exp(-\hbar\omega_i/kT)}. \quad (10.3.5)$$

Полезной величиной является среднее число квантов $\langle n_i(T) \rangle$, определяемое формулой

$$\langle n_i(T) \rangle = \langle \Gamma_i^\dagger\Gamma_i \rangle = \sum_n n \exp\left[-\frac{(n + \frac{1}{2})\hbar\omega_i}{kT}\right] / Z_i(T),$$

т. е.

$$\langle n_i(T) \rangle = [\exp(\hbar\omega_i/kT) - 1]^{-1}. \quad (10.3.6)$$

Другими величинами, которые будут полезны, являются корреляционные функции термостата. Для их нахождения введем

$$\Gamma_i(t) = \exp\left(\frac{iH_B t}{\hbar}\right) \Gamma_i \exp\left(-\frac{iH_B t}{\hbar}\right) = \exp(-i\omega_i t) \Gamma_i \quad (10.3.7)$$

Поэтому корреляционные функции термостата таковы:

$$\begin{aligned} \langle \Gamma_i^+(t) \Gamma_j \rangle &= e^{i\omega_i t} \langle \Gamma_i^+ \Gamma_j \rangle = e^{i\omega_i t} \delta_{ij} \langle n_i(T) \rangle \\ \langle \Gamma_i(t) \Gamma_j \rangle &= \langle \Gamma_i^+(t) \Gamma_j^+ \rangle = 0 \\ \langle \Gamma_i(t) \Gamma_j^+ \rangle &= e^{i\omega_i t} \langle \Gamma_j^+ \Gamma_i + \delta_{ij} \rangle = e^{i\omega_i t} \delta_{ij} [\langle n_i(T) \rangle + 1]. \end{aligned} \quad (10.3.8)$$

10.3.2. КОРРЕЛЯЦИИ ГЛАДКИХ ФУНКЦИЙ ОТ ОПЕРАТОРОВ ТЕРМОСТАТА

Введем переменную

$$y(t) = \sum s_i \Gamma_i(t) e^{i\omega_0 t} \quad (10.3.9)$$

(множитель $\exp(i\omega_0 t)$ введен с целью последующего применения в разд. 10.4.2). Имеем

$$\begin{aligned} \langle y(t) \rangle &= 0 \\ \langle y(t) y(0) \rangle &= \langle y^+(t) y^+(0) \rangle = 0 \\ \langle y^+(t) y(0) \rangle &= \sum_i |s_i|^2 \langle n_i(T) \rangle \exp[i(\omega_i - \omega_0)t] \\ \langle y(t) y^+(0) \rangle &= \sum_i |s_i|^2 \langle n_i(T) + 1 \rangle \exp[-i(\omega_i - \omega_0)t]. \end{aligned} \quad (10.3.10)$$

Предположим теперь, что моды, нумеруемые индексом i , расположены так близко друг к другу, что ω_i является гладкой функцией от i .

Тогда можно установить следующее соответствие переменных:

$$s_i \rightarrow s(\omega_i) \rightarrow s(\omega) \quad (10.3.11)$$

$$\langle n_i(T) \rangle \rightarrow \langle n(\omega_i, T) \rangle \rightarrow \langle n(\omega, T) \rangle \quad (10.3.12)$$

и

$$\sum_i |s_i|^2 (\dots) \rightarrow \int d\omega S(\omega) (\dots). \quad (10.3.13)$$

Для достаточно гладких функций $\langle n(\omega, T) \rangle$, $S(\omega)$ корреляционные функции будут быстро (экспоненциально) спадающими функциями времени t . Например, рассмотрим корреляционную функцию

$$\langle y^+(t)y(0) \rangle = \int_0^{\infty} d\omega S(\omega) \langle n(\omega, T) \rangle \exp[i(\omega - \omega_0)t]. \quad (10.3.14)$$

Если, как обычно, функция $S(\omega) \langle n(\omega, T) \rangle$ является гладкой функцией от ω , то ее преобразование Фурье (10.3.14) будет быстро спадающей функцией от времени t . Таким образом, корреляционная функция (10.3.14) должна иметь вид быстро спадающей функции от t , умноженной на $\exp(-i\omega_0 t)$.

Это напоминает соотношение между корреляционной функцией и спектральной плотностью, представленной в разд. 1.4.2, но здесь вместо $\cos \omega t$ мы имеем $\exp[i(\omega - \omega_0)t]$ и корреляционная функция является комплексной.

10.3.3. КВАНТОВОЕ УПРАВЛЯЮЩЕЕ УРАВНЕНИЕ ДЛЯ СИСТЕМЫ, ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩЕЙ С ТЕРМОСТАТОМ

Покажем теперь, что к квантовой системе, взаимодействующей с термостатом, можно применять методы адиабатического исключения из разд. 6.6 с целью получения квантового управляющего уравнения. Используемый здесь метод преобразования Лапласа не является наиболее общим, но наиболее быстро приводит к довольно точному ответу.

Предположим, что система описывается операторами A , A^+ , которые могут удовлетворять произвольным коммутационным соотношениям, а термостат — операторами гармонического осциллятора Γ_i , Γ_i^+ .

Предполагаем, что гамильтониан представим в форме

$$H = \gamma^2 H_1 + \gamma H_2 + H_3, \quad (10.3.15)$$

где H_3 является функцией только от операторов A , A^+ , а H_2 можно записать в виде

$$H_2 = \sum_i (C g_i \Gamma_i^+ + C^+ g_i^* \Gamma_i), \quad (10.3.16)$$

где C — функция от операторов A и A^+ . Здесь g_i могут зависеть от времени. Гамильтониан термостата H_1 имеет вид (10.3.1), хотя это не очень существенно. Операторы системы и термостата коммутируют между собой и действуют в различных пространствах. Таким образом, если положить H_2 равным нулю, то

$$\rho = \rho_B \times \rho_s \quad (10.3.17)$$

и

$$i\hbar \frac{\partial \rho_B}{\partial t} = \gamma^2 [H_1, \rho_B] \quad (10.3.18)$$

$$i\hbar \frac{\partial \rho_s}{\partial t} = [H_s, \rho_s];$$

и, строго говоря, нам следует писать

$$\begin{aligned} A &= 1 \times \hat{A} \\ \Gamma_i &= \hat{\Gamma}_i \times 1, \end{aligned} \quad (10.3.19)$$

чтобы указать, что каждый из этих операторов действует в своем собственном пространстве. Параметр γ введен для того, чтобы подчеркнуть тот факт, что введенная процедура справедлива только тогда, когда переменные термостата меняются гораздо быстрее, чем переменные системы, и то, что для получения конечного предела нужно считать, что функции g_i также должны становиться большими. Точное осуществление этого предела на практике зависит от знания подходящих переменных, которые становятся большими.

Тогда можно записать следующее уравнение движения для матрицы плотности:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = (\gamma^2 L_1 + \gamma L_2 + L_3) \rho, \quad (10.3.20)$$

где

$$L_i \rho = - \frac{i}{\hbar} [H_i, \rho], \quad (10.3.21)$$

Операторы L_i известны как *операторы Лиувилля* и являются линейными. Уравнение (10.3.20) имеет теперь в точности ту форму, какая необходима для применения техники адиабатического исключения. Остается только определить подходящий проектор. Выбираем проектор следующего вида:

$$P\rho = \rho(T) \times \text{Tr}_B\{\rho\} \equiv \rho(T) \times \hat{\rho}; \quad (10.3.22)$$

где оператор $\rho(T)$ определен формулой (10.3.2) и под символом Tr_B мы подразумеваем след только по состояниям термостата. Полный набор состояний для системы плюс термостат можно записать в виде $|n_B, n_s\rangle$

и поэтому

$$\text{Tr}_B\{A\} = \sum_B \langle n_B, n_s | A | n_B, n_s \rangle. \quad (10.3.23)$$

Очевидно, что оператор P является проектором и

$$L_1 P \rho = -\frac{i}{\hbar} [H_1, \rho(T) \times \text{Tr}_B \rho] = 0, \quad (10.3.24)$$

поскольку оператор H_1 действует только на операторы, зависящие от состояния термостата. Кроме того, имеем

$$P L_1 \rho = -\frac{i}{\hbar} \rho(T) \times \text{Tr}_B \{[H_1, \rho]\} = 0, \quad (10.3.25)$$

так что требование

$$P L_1 = L_1 P = 0 \quad (10.3.26)$$

выполнено.

Проверим теперь, исчезает ли выражение $P L_2 P$, т. е. посмотрим, чему равно выражение

$$-\frac{i}{\hbar} \rho(T) \times \text{Tr}_B \{[H_2, \rho(T) \times \hat{\rho}]\}. \quad (10.3.27)$$

Если мы подставим типичный член из H_2 , а именно $C \Gamma_i^+$, в это выражение, то получим

$$-\frac{i}{\hbar} \rho(T) \times \text{Tr}_B \{ \Gamma_i^+ \rho(T) \times C \hat{\rho} - \rho(T) \Gamma_i^+ \times \hat{\rho} C \}, \quad (10.3.28)$$

и, очевидно,

$$\text{Tr}_B \{ \Gamma_i^+ \rho(T) \} = \text{Tr}_B \{ \rho(T) \Gamma_i^+ \} = 0. \quad (10.3.29)$$

Подобным образом исчезают и все остальные члены. Поэтому $P L_2 P = 0$.

Итак, мы можем провести ту же процедуру адиабатического исключения, что и в разд. 6.6, и получить уравнение

$$\frac{\partial}{\partial t} [\rho(T) \times \hat{\rho}] = L_3 \rho(T) \times \hat{\rho} - P L_2 L_1^{-1} L_2 \rho(T) \times \hat{\rho}, \quad (10.3.30)$$

которое сводится к уравнению

$$\frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = L_3 \hat{\rho} - \text{Tr}_B \{ L_2 L_1^{-1} L_2 \rho(T) \times \hat{\rho} \}. \quad (10.3.31)$$

Это уравнение теперь можно привести к более простому виду. Однако сначала нужно рассмотреть член L_1^{-1} . В разд. 6.6 мы использовали соотношение

$$L_1^{-1} (1 - P) = \int_0^{\infty} e^{L_1 t} dt (1 - P), \quad (10.3.32)$$

которое справедливо, когда

$$\lim_{t \rightarrow \infty} e^{L_1 t} (1 - P) = 0$$

Последнее следует из предположения, что оператор L_1 имеет отрицательные собственные значения.

Такое сильное условие здесь фактически не требуется. Необходимо только, чтобы следы операторов Γ_i, Γ_i^+ по состояниям термостата со стационарным оператором плотности $\rho(T)$ исчезали при больших t . Это условие будет выполнено, если определенные линейные комбинации, а именно $\sum g_i \Gamma_i^+$ и др., имеют коэффициенты g_i , которые удовлетворяют условиям гладкости, подобным условиям для функции $S(\omega)$, обсуждавшимся в разд. 10.3.2. Так или иначе, мы принимаем соотношение (10.3.32), а детальную проверку этого соотношения оставляем читателю.

Заметим, что для любого оператора A мы можем определить оператор

$$A(t) \equiv e^{-L_1 t} A = \exp(i H_1 t / \hbar) A \exp(-i H_1 t / \hbar), \quad (10.3.33)$$

что находится в согласии с (10.3.7). Это равенство доказывается с помощью явного дифференцирования и определения оператора L_1 :

$$\frac{dA(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar} [H_1, A(t)] = -L_1 A(t). \quad (10.3.34)$$

Мы можем теперь совершить следующие преобразования:

$$\begin{aligned} & -\text{Tr}_B \{ L_2 L_1^{-1} L_2 \rho(T) \times \hat{\rho} \} \\ &= \frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty \text{Tr}_B \{ [H_2, e^{-i H_1 t / \hbar} [H_2, \rho(T) \times \hat{\rho}] e^{i H_1 t / \hbar}] \} dt \\ &= \frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty \text{Tr}_B \{ [e^{i H_1 t / \hbar} H_2 e^{-i H_1 t / \hbar}, [H_2, \rho(T) \times \hat{\rho}]] \} dt \\ &= \frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty \text{Tr}_B \{ \sum_{i,j} [C g_i \Gamma_i^+(t) + C^+ g_i^* \Gamma_i(t), [C g_j \Gamma_j^+ + C^+ g_j^* \Gamma_j, \rho(T) \times \hat{\rho}]] \} dt. \end{aligned} \quad (10.3.35)$$

В этом выражении 16 членов. Однако только те из них не равны нулю, в которые входят операторы как Γ , так и Γ^+ . Рассмотрим один из таких членов:

$$\frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty \text{Tr}_B \{ \sum_{i,j} C g_i \Gamma_i^+(t) C^+ g_j^* \Gamma_j \rho(T) \times \hat{\rho} \} dt,$$

который мы можем записать через оператор

$$y(t) = \sum g_i^* \Gamma_j(t), \quad (10.3.36)$$

отождествляя $g_i^* \rightarrow S_i$, $\omega_0 \rightarrow 0$ в выражении типа (10.3.9). Введем обозначения, подобные тем, которые обычно используются в квантовой оптике, а именно

$$\begin{aligned} \frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty dt \langle y^+(t)y(0) \rangle &= \frac{1}{2} \bar{N} K + i\delta \\ \frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty dt \langle y^+(0)y(t) \rangle &= \frac{1}{2} K \bar{N} - i\delta \\ \frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty dt \langle y(t)y^+(0) \rangle &= \frac{1}{2} K(\bar{N} + 1) - i\delta' \\ \frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty dt \langle y(0)y^+(t) \rangle &= \frac{1}{2} K(\bar{N} + 1) + i\delta'. \end{aligned} \quad (10.3.37)$$

Оценивая двойные коммутаторы, находим, что управляющее уравнение принимает вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = & -\frac{i}{\hbar} [H_3, \hat{\rho}] - i\delta[C^+C, \hat{\rho}] + i\delta'[CC^+, \hat{\rho}] \\ & + \frac{1}{2} K(1 + \bar{N}) (2C\hat{\rho}C^+ - C^+C\hat{\rho} - \hat{\rho}C^+C) \\ & + \frac{1}{2} K\bar{N} (2C^+\hat{\rho}C - CC^+\hat{\rho} - \hat{\rho}CC^+) \equiv \hat{L}\hat{\rho}. \end{aligned} \quad (10.3.38)$$

Замечания

а) Управляющее уравнение в приведенной выше форме обычно выводится без использования преобразования Лапласа, по существу используются только уравнения во временной области (см., например, работу Люиселла [10.5]). В нашем выводе предполагается, что оператор L_3 много меньше, чем $\gamma^2 L_1$, а на практике в оптических ситуациях это не так, поскольку оператор H_3 описывает быстрые колебания, которые затухают довольно медленно в результате взаимодействия с термостатом. Обычно это можно учесть, переходя к *представлению взаимодействия*, что приводит в результате к управляющему уравнению вида (10.3.38), в котором g_i явно зависят от времени, а ω_0 в выражении (10.3.9) является частотой свободного движения. Эту процедуру мы продемонстрируем на примере двухуровневого атома в разд. 10.4.2. Нашей целью здесь не являются полные и детальные расчеты, и за полным объяснением мы отсылаем читателя к работе Люиселла.

б) Управляющее уравнение типа (10.3.38) можно считать *определением* квантового марковского процесса. Данный частный случай является наиболее простым с математической точки зрения. Величины H_3 и

C , характеризующие свободное движение и взаимодействие с термостатом, совершенно произвольны, так же как и соотношения между ними. Заметим, однако, что такое определение не является полным, если не указать, как определять многовременные средние, или, другими словами, как ввести аналог многовременных совместных вероятностей, лежащих в основе обычных стохастических процессов.

в) При нулевой температуре термостата $\rho_B = |0\rangle\langle 0|$ и все средние от произведения $\Gamma^+ \Gamma$ исчезают. Это означает, что

$$T = 0 \implies \bar{N} = 0, \quad (10.3.39)$$

и третья строка в (10.3.38) вклада в уравнение не дает. Таким образом, выражение, стоящее в этой строке, соответствует тепловому шуму.

10.4. ПРИМЕРЫ И ПРИЛОЖЕНИЯ КВАНТОВЫХ МАРКОВСКИХ ПРОЦЕССОВ

10.4.1. ГАРМОНИЧЕСКИЙ ОСЦИЛЛЯТОР

В этом случае мы полагаем

$$\begin{aligned} C &\rightarrow a \\ C^+ &\rightarrow a^+ \end{aligned} \quad (10.4.1)$$

$$[a, a^+] = 1$$

$$H_3 = \hbar\omega(a^+a + \frac{1}{2}).$$

С помощью коммутационных соотношений находим, что уравнение (10.3.38) (в котором теперь пишем просто ρ вместо $\hat{\rho}$) приводится к виду

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} = & -i\omega'[a^+a, \rho] \\ & + \frac{1}{2}K(\bar{N} + 1)(2a\rho a^+ - a^+a\rho - \rho a^+a) \\ & + \frac{1}{2}K\bar{N}(2a^+\rho a - aa^+\rho - \rho aa^+), \end{aligned} \quad (10.4.2)$$

где

$$\omega' = \omega + \delta - \delta'.$$

а) Диагональные матричные элементы

Диагональный матричный элемент

$$\langle n | \rho | n \rangle \equiv P(n) \quad (10.4.3)$$

представляет вероятность того, что в системе имеется n квантов. Можно легко проверить, что (используя свойства операторов a^+ и a из разд. 10.1) из (10.4.2) получаем уравнение

$$\begin{aligned} \partial_t P(n) = & K(\bar{N} + 1)[(n + 1)P(n + 1) - nP(n)] \\ & + K\bar{N}[nP(n - 1) - (n + 1)P(n)]. \end{aligned} \quad (10.4.4)$$

Это обычное управляющее уравнение для процессов рождения — гибели. Заметим, что вероятности перехода имеют вид

$$\begin{aligned} t^+(n) &= K\bar{N}(n + 1) \\ t^-(n) &= K(\bar{N} + 1)n, \end{aligned} \quad (10.4.5)$$

так что вероятность рождения кванта имеет часть, пропорциональную $n + 1$. Химическая реакция вида



имела бы подобное управляющее уравнение.

Стационарное решение указанного уравнения имеет вид

$$P_s(n) = \left(\frac{\bar{N}}{1 + \bar{N}} \right)^n \frac{1}{1 + \bar{N}}. \quad (10.4.7)$$

Это обычное распределение Больцмана, в котором можно отождествить

$$\frac{\bar{N}}{1 + \bar{N}} = \exp(-\hbar\omega/kT). \quad (10.4.8)$$

Это означает, что

$$\bar{N} = 1/[\exp(\hbar\omega/kT) - 1]. \quad (10.4.9)$$

Последнее равенство выражает \bar{N} через T или наоборот. Заметим, что

$$\begin{aligned} \langle n \rangle_s &= \bar{N} \\ D\{n\}_s &= \bar{N}^2. \end{aligned} \quad (10.4.10)$$

б) Уравнение Фоккера — Планка, следующее из P -представления

Вспользуемся здесь P -представлением Глаубера — Сударшана из разд. 10.2.2 и операторным соответствием (10.2.26) из разд. 10.2.3. Вспоминая, что при использовании операторного соответствия порядок в произведении операторов, стоящих справа от ρ , меняется на об-

ратный, получаем следующее уравнение для функции P :

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \left[\frac{1}{2} K \left(\frac{\partial}{\partial \alpha} \alpha + \frac{\partial}{\partial \alpha^*} \alpha^* \right) + i\omega' \left(\frac{\partial}{\partial \alpha} \alpha - \frac{\partial}{\partial \alpha^*} \alpha^* \right) + K\bar{N} \frac{\partial^2}{\partial \alpha \partial \alpha^*} \right] P. \quad (10.4.11)$$

Оно имеет вид уравнения для комплексного процесса Орнштейна — Уленбека. Мы можем положить в нем

$$\alpha = x + iy$$

и

$$\partial_\alpha = \frac{1}{2}(\partial_x - i\partial_y)$$

и получить уравнение для действительных переменных

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \left[\frac{1}{2} K \left(\frac{\partial}{\partial x} x + \frac{\partial}{\partial y} y \right) - \omega' \left(\frac{\partial}{\partial x} y - \frac{\partial}{\partial y} x \right) + \frac{K\bar{N}}{4} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \right] P. \quad (10.4.12)$$

Этот результат имеет очень простой вид по сравнению с уравнениями Фоккера — Планка в представлении Пуассона, в которые всегда входят непостоянные диффузионные члены. Стохастические дифференциальные уравнения, эквивалентные уравнению (10.4.12), таковы:

$$\begin{aligned} dx &= -\left(\frac{1}{2}Kx - \omega'y\right)dt + \sqrt{\frac{1}{2}K\bar{N}} dW_1(t) \\ dy &= -\left(\frac{1}{2}Ky + \omega'x\right)dt + \sqrt{\frac{1}{2}K\bar{N}} dW_2(t). \end{aligned} \quad (10.4.13)$$

Эти уравнения, подобно уравнениям из разд. 5.3.6, представляют собой уравнения затухающего осциллятора.

Их часто записывают в виде одного комплексного уравнения Ланжевена

$$d\alpha = -\left(\frac{1}{2}K + i\omega'\right)\alpha dt + \sqrt{K\bar{N}} d\eta(t), \quad (10.4.14)$$

где $d\eta(t)$ — дифференциал комплексного винеровского процесса, удовлетворяющий равенствам

$$\begin{aligned} \langle d\eta(t) \rangle &= \langle d\eta^*(t) \rangle = \langle d\eta(t) d\eta(t') \rangle = \langle d\eta^*(t) d\eta^*(t') \rangle = 0 \\ \langle d\eta(t) d\eta^*(t) \rangle &= dt. \end{aligned} \quad (10.4.15)$$

Его можно записать в явном виде

$$d\eta(t) = [dW_1(t) + idW_2(t)]/\sqrt{2}. \quad (10.4.16)$$

Обобщать теорию дифференциальных уравнений на случай комплексных процессов $\alpha(t)$, $\eta(t)$ не очень просто, и поэтому в дальнейшем мы их использовать не будем. Однако уравнение Фоккера — Планка для

комплексной переменной оказывается полезным, и мы будем оперировать им в дальнейшем.

Решения уравнения для процесса Орнштейна — Уленбека даны в разд. 4.4.6. В нашем случае имеем

$$\begin{aligned}\langle \alpha(t) \rangle &= \alpha(0) \exp[-(K/2 + i\omega')t] \\ \langle \alpha^*(t)\alpha(t) \rangle &= \langle \alpha^*(0)\alpha(0) \rangle e^{-Kt} + \bar{N}(1 - e^{-Kt})\end{aligned}\quad (10.4.17)$$

$$\begin{aligned}\langle \alpha^2 \rangle_s &= \langle \alpha^{*2} \rangle_s = 0 \\ \langle \alpha\alpha^* \rangle_s &= \langle a^+a \rangle_s = \bar{N}.\end{aligned}\quad (10.4.18)$$

Видим, что выражение $\langle a^+a \rangle_s$ исчезает лишь при $\bar{N} = 0$, т.е. при нулевой температуре. Интерпретация временных корреляционных функций для этого процесса Орнштейна — Уленбека будет дана в разд. 10.5.

в) Включение возмущающего поля

Рассмотрим теперь возмущаемый гармонический осциллятор с затуханием, взяв его гамильтониан в виде

$$H_3 = \hbar\omega(a^+a + \frac{1}{2}) + \hbar(\varepsilon a^+ + \varepsilon^* a). \quad (10.4.19)$$

Этот гамильтониан описывает квантовый осциллятор, взаимодействующий с неквантовым полем (разд. 10.1.1).

В уравнении Фоккера — Планка появляется тогда дополнительный член

$$\left(i\varepsilon \frac{\partial}{\partial \alpha} - i\varepsilon^* \frac{\partial}{\partial \alpha^*} \right) P, \quad (10.4.20)$$

с учетом которого оно принимает вид

$$\begin{aligned}\frac{\partial P}{\partial t} &= \left[\left(\frac{1}{2}K + i\omega' \right) \frac{\partial}{\partial \alpha} \left(\alpha + \frac{i\varepsilon}{\frac{1}{2}K - i\omega'} \right) \right. \\ &\quad \left. + \left(\frac{1}{2}K - i\omega' \right) \frac{\partial}{\partial \alpha^*} \left(\alpha^* - \frac{i\varepsilon}{\frac{1}{2}K - i\omega'} \right) + K\bar{N} \frac{\partial^2}{\partial \alpha \partial \alpha^*} \right] P.\end{aligned}\quad (10.4.21)$$

Это уравнение снова представляет процесс Орнштейна — Уленбека, но со сдвинутым началом, так что

$$\langle \alpha \rangle_s = -i\varepsilon / (\frac{1}{2}K - i\omega') = \langle a \rangle_s \quad (10.4.22)$$

$$\langle \alpha\alpha^* \rangle - \langle \alpha \rangle \langle \alpha^* \rangle = \bar{N} \quad (10.4.23)$$

$$\langle \alpha^2 \rangle - \langle \alpha \rangle^2 = \langle \alpha^{*2} \rangle - \langle \alpha^* \rangle^2 = 0,$$

а зависящее от времени решение для среднего значения имеет вид

$$\langle \alpha(t) \rangle = \langle \alpha(0) \rangle \exp \left[- \left(\frac{K}{2} + i\omega' \right) t \right] - \frac{i\varepsilon}{\frac{1}{2}K + i\omega'} \left\{ 1 - \exp \left[- \left(\frac{K}{2} + i\omega' \right) t \right] \right\}. \quad (10.4.24)$$

Стационарное распределение в P -представлении является гауссовым с дисперсией \bar{N} и средним значением, определяемым формулой (10.4.22). Если величина \bar{N} мала, то это распределение отвечает матрице плотности ρ , которая мало отличается от матрицы плотности чистого когерентного состояния $|\alpha_s\rangle\langle\alpha_s|$. Таким образом, хорошая аппроксимация когерентного состояния дается классическим возмущающим полем, взаимодействующим с гармоническим осциллятором, который в свою очередь взаимодействует с низкотемпературным термостатом.

г) Воздействие флуктуационного поля

Пусть величина ε в (10.4.19) будет функцией (возможно, стохастической) от времени $-\varepsilon(t)$. Уравнение Ланжевена для α , α^* при этом принимает вид

$$d\alpha(t) = [-(\frac{1}{2}K + i\omega')\alpha(t) - i\varepsilon(t)] dt + \sqrt{\frac{K\bar{N}}{2}} [dW_1(t) + idW_2(t)]. \quad (10.4.25)$$

Поскольку величина $\varepsilon(t)$ входит в это уравнение линейно и умножается на константу, мы можем сделать несколько простых предположений.

Простейшее из них состоит в том, что мы переходим к пределу малых времен корреляции и делаем замену

$$\varepsilon(t)dt = \varepsilon_0 dt + \sqrt{\frac{f}{2}} [dW_3(t) + idW_4(t)],$$

которая задает независимые флуктуации по каждой компоненте (при этом не возникает вопроса об интерпретации по Ито или по Стратоновичу, поскольку коэффициент при $\varepsilon(t)$ постоянен). В результате это приводит к следующей замене в уравнении (10.4.21):

$$K\bar{N} \rightarrow K\bar{N} + f, \quad (10.4.26)$$

означающей, что дополнительный шум просто увеличивает интенсивность теплового шума, уже имеющегося в системе. Поступая иначе, можно записать уравнения движения для $\varepsilon(t)$ и решать их совместно со стохастическим дифференциальным уравнением (10.4.25).

10.4.2. ДЕЙСТВИЕ ВОЗМУЩЕНИЯ НА АТОМ С ДВУМЯ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИМИ УРОВНЯМИ

Двухуровневый атом, который может находиться в одном из двух состояний, является удобной идеализацией и часто используется при рассмотрении атомных систем. Будем описывать его с помощью матричного формализма

$$\begin{aligned} |-\rangle &= \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} && \text{основное состояние} \\ |+\rangle &= \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} && \text{возбужденное состояние.} \end{aligned} \quad (10.4.27)$$

Переходы, которые могут происходить в системе, описываются матрицами Паули

$$S^+ = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad S^- = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad S_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}. \quad (10.4.28)$$

Так, матрица S^+ переводит атом из основного состояния в возбужденное, а матрица S^- — из возбужденного состояния в основное. Гамильтониан системы, взаимодействующей с полем излучения и возмущающим полем $E(t)$, можно записать в виде

$$\begin{aligned} H_3 &= \frac{1}{2}\hbar\omega_0 S_z - \frac{1}{2}\hbar d[S^+ E(t) + S^- E^*(t)] \\ H_2 &= \sum_i [g_i S^+ a_i + g_i^* S^- a_i^+] \\ H_1 &= \sum_i \hbar\omega_i (a_i^+ a_i + \frac{1}{2}). \end{aligned} \quad (10.4.29)$$

С физической точки зрения член $\frac{1}{2}\hbar\omega_0 S_z$ приписывает энергию $\frac{1}{2}\hbar\omega_0$ возбужденному состоянию и $-\frac{1}{2}\hbar\omega_0$ — нижнему состоянию, так что

энергия возбуждения составляет величину $\hbar\omega_0$. Второй член в H_3 представляет взаимодействие возмущающего поля с дипольным моментом атома и имеет по существу тот же вид, что и H_2 , в котором, однако, все моды, описываемые индексом i , квантованы. Считается, что моды i соответствуют фотонам с энергией $\hbar\omega_i$, движущимся в различных направлениях, помечаемых индексом i , в то время как возмущающее поле $E(t)$, являясь строго классическим, распространяется в одном определенном направлении.

Кванты поля излучения служат термостатом. Мы используем здесь обозначение a_i для операторов Γ_i . Хотя в принципе термостат

может иметь любую температуру, в экспериментальных ситуациях он обычно имеет практически нулевую температуру. Мы, однако, сохраняем возможность ненулевой температуры T .

Предполагается, что возмущающее поле $E(t)$ имеет такую частоту ω_0 , которая требуется для возбуждения атома. Таким образом, мы записываем

$$E(t) = \varepsilon e^{-i\omega_0 t}. \quad (10.4.30)$$

В рассматриваемом случае лучше всего перейти к *представлению взаимодействия*, в котором отсутствуют быстрые осцилляции. Введем

$$\tilde{\rho}(t) = \exp\left(\frac{i\omega_0}{2} S_z t\right) \rho \exp\left(-\frac{i\omega_0}{2} S_z t\right). \quad (10.4.31)$$

Тогда изменение $\tilde{\rho}(t)$ можно описать с помощью гамильтонианов

$$\begin{aligned} \tilde{H}_3 &= -\frac{1}{2} \hbar d (S^+ \varepsilon + S^- \varepsilon^*) \\ \tilde{H}_2 &= \sum_i (g_i e^{i\omega_0 t} S^+ a_i + g_i^* e^{-i\omega_0 t} S^- a_i^\dagger) \end{aligned} \quad (10.4.32)$$

$$\tilde{H}_1 = \sum_i \hbar \omega_i (a_i^\dagger a_i + \frac{1}{2}).$$

Читатель может проверить, что все этапы дальнейших выкладок такие же, как и в разд. 10.3.3, с той лишь разницей, что нужно сделать замену

$$g_i \rightarrow g_i e^{i\omega_0 t}, \quad (10.4.33)$$

означающую, что величины $y(t)$ определяются теперь точно так же, как в (10.3.9). Таким образом, явная экспоненциальная зависимость от времени появляется здесь именно в результате свободного движения атома.

Используя алгебраические свойства матриц (10.4.28), получаем для редуцированной матрицы плотности $\hat{\rho}$ в представлении взаимодействия такое управляющее уравнение:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} &= \frac{1}{2} id [S^+ \varepsilon^* + S^- \varepsilon, \hat{\rho}] \\ &+ \frac{1}{2} K (1 + \bar{N}) [2S^- \hat{\rho} S^+ - \frac{1}{2} (1 + S_z) \hat{\rho} - \frac{1}{2} \hat{\rho} (1 + S_z)] \\ &+ \frac{1}{2} K \bar{N} [2S^+ \hat{\rho} S^- - \frac{1}{2} (1 - S_z) \hat{\rho} - \frac{1}{2} \hat{\rho} (1 - S_z)]. \end{aligned} \quad (10.4.34)$$

Мы не можем использовать здесь когерентные состояния, поскольку матрицы S^+ , S_z действуют в двумерном пространстве и не являются операторами гармонического осциллятора. Матрица плотности является 2×2 -матрицей с единичным следом и полностью определяется

величинами $\text{Tr}\{\rho S^\pm\}$, $\text{Tr}\{\rho S_z\}$, являющимися средними от соответствующих операторов. Для этих определяющих величин имеем следующие уравнения:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle S^+ \rangle &= -\frac{1}{2}K(2\bar{N} + 1)\langle S^+ \rangle + i\delta \langle S_z \rangle \\ \frac{d}{dt} \langle S^- \rangle &= -\frac{1}{2}K(2\bar{N} + 1)\langle S^- \rangle - i\delta^* \langle S_z \rangle \\ \frac{d}{dt} \langle S_z \rangle &= -K(2\bar{N} + 1)\langle S_z \rangle - K + \frac{1}{2}i\delta(\varepsilon^* \langle S^+ \rangle - \varepsilon \langle S^- \rangle). \end{aligned} \quad (10.4.35)$$

Данные уравнения детально исследовались Кармайклом и Уоллсом [10.6]. Мы остановимся здесь лишь на некоторых вопросах.

а) Стационарное решение при $\varepsilon = 0$

В этом случае

$$\begin{aligned} \langle S^+ \rangle &= \langle S^- \rangle = 0 \\ \langle S_z \rangle &= -\frac{1}{2\bar{N} + 1}. \end{aligned} \quad (10.4.36)$$

Полагая $\bar{N} = (e^{\hbar\omega/kT} - 1)^{-1}$, мы получаем правильное распределение Больцмана.

б) Релаксация, зависящая от температуры

В отличие от гармонического осциллятора скорость релаксации пропорциональна $2\bar{N} + 1$ и поэтому зависит от температуры. К существенному различию приводит также другая операторная алгебра.

в) Сравнение с температурой термостата

Используя соотношения (10.3.12) и другие связанные с этим формулы, оценим явно величины K , \bar{N} , δ , δ' . Имеем

$$\frac{1}{2}K\bar{N} + i\delta = \hbar^2 \int_0^\infty dt e^{-i\omega_0 t} \int_0^\infty d\omega S(\omega) \langle n(\omega, T) \rangle e^{i\omega t}. \quad (10.4.37)$$

Отметим справедливость тождества

$$\int d\Omega \int_0^\infty f(\Omega) e^{\pm i\Omega t} = \pi f(0) \pm i \int d\Omega f(\Omega)/\Omega, \quad (10.4.38)$$

где символ f означает главное значение Коши интеграла, содержащего $1/\Omega$. Следовательно,

$$\frac{1}{2}K\bar{N} + i\delta = \pi \hbar^2 S(\omega_0) \langle n(\omega_0, T) \rangle + i \hbar^2 \int_0^\infty d\omega S(\omega) \langle n(\omega, T) \rangle (\omega - \omega_0)^{-1}. \quad (10.4.39)$$

Аналогично можем записать

$$\frac{1}{2}K(\bar{N} + 1) + i\delta' = \pi\hbar^2 S(\omega_0) \langle n(\omega_0, T) + 1 \rangle + i\hbar^2 \int_0^{\infty} d\omega S(\omega) \langle n(\omega, T) + 1 \rangle (\omega - \omega_0)^{-1}, \quad (10.4.40)$$

что является более привычной формой выражения постоянных затухания.

Из этих уравнений находим

$$K = 2\pi\hbar^2 S(\omega_0) \quad (10.4.41)$$

$$\bar{N} = \langle n(\omega_0, T) \rangle = [\exp(\hbar\omega_0/kT) - 1]^{-1} \quad (10.4.42)$$

$$-\delta + \delta' = \hbar^2 \int_0^{\infty} d\omega S(\omega) (\omega - \omega_0)^{-1}. \quad (10.4.43)$$

Отметим, что равенство (10.4.42) находится в согласии с (10.4.36), т. е. атом приобретает ту же температуру, что и термостат.

г) *Стационарное среднее значение при ненулевом поле*

Решая уравнения (10.4.35), можно найти

$$\langle S_z \rangle = \frac{-K^2(2\bar{N} + 1)}{K^2(2\bar{N} + 1)^2 + 2d^2|\varepsilon|^2} \quad (10.4.44)$$

$$\langle S^+ \rangle = \langle S^- \rangle^* = \frac{-2idK\varepsilon}{K^2(2\bar{N} + 1)^2 + 2d^2|\varepsilon|^2}. \quad (10.4.45)$$

д) *Связь со случайным телеграфным процессом: уравнения Эйнштейна*

Когда $E(t) = 0$, можно ввести величины

$$P(+)=\langle +|\rho|+\rangle \quad (10.4.46)$$

$$P(-)=\langle -|\rho|-\rangle$$

и получить для них управляющее уравнение

$$\begin{aligned} \partial_t P(+) &= -K(1 + \bar{N})P(+) + K\bar{N}P(-) \\ \partial_t P(-) &= K(1 + \bar{N})P(+)-KNP(-). \end{aligned} \quad (10.4.47)$$

Эти уравнения идентичны уравнениям (3.8.5) для случайного телеграфного процесса. Таким образом, двухуровневый атом можно рас-

смаатривать как квантовый случайный телеграфный процесс. Однако если $E(t) \neq 0$, то эти уравнения зацеплены с уравнениями, определяющими недиагональные матричные элементы, что дает истинно квантовый процесс.

Уравнения (10.4.47) были впервые введены Эйнштейном [10.7] и известны теперь как *уравнения Эйнштейна*. Они наглядно показывают два эффекта:

1) *вынужденное излучение и поглощение*: члены, пропорциональные \bar{N} , зависят от числа фотонов поля излучения и называются вынужденными членами. Таким образом, процессы возбуждения ($- \rightarrow +$) и снятия возбуждения ($+ \rightarrow -$) с соответствующим поглощением или излучением фотона могут происходить вследствие наличия определенного числа фотонов в поле излучения;

2) *спонтанное излучение*: т. е. снятие возбуждения ($+ \rightarrow -$) происходит под влиянием члена $KP(+)$, входящего в оба уравнения. Снятие возбуждения может происходить даже при отсутствии фотона. С современной точки зрения это не удивительно, но в те времена, когда это было впервые получено, это было важным новшеством.

10.5. ВРЕМЕННЫЕ КОРРЕЛЯЦИОННЫЕ ФУНКЦИИ КВАНТОВЫХ МАРКОВСКИХ ПРОЦЕССОВ

Можно легко найти точное выражение для двухвременной корреляционной функции $\langle A(t')B(t) \rangle$ квантовой системы; мы просто приведем здесь конечный результат. Пусть $\rho(t)$ — матрица плотности в представлении Шредингера в момент времени t , H — гамильтониан, A и B — операторы измеряемых переменных. Тогда

$$\langle A(t) \rangle = \text{Tr} \{ A \rho(t) \} \quad (10.5.1)$$

и

$$\langle A(t + \tau)B(t) \rangle = \text{Tr} \{ e^{iH\tau/\hbar} A e^{-iH\tau/\hbar} B \rho(t) \}. \quad (10.5.2)$$

[Справедливость выражения (10.5.2) следует из формы представления Гейзенберга, для которого

$$\langle A(t + \tau)B(t) \rangle = \text{Tr} \{ A_H(t + \tau)B_H(t)\rho_H \}. \quad (10.5.3)$$

причем гейзенберговская матрица плотности ρ_H не зависит от времени.]

Уравнение (10.5.2) точное, но не очень полезное. Мы хотим выразить все в квантовой марковской системе через оператор Лиувилля редуцированной системы, в которой взят след по переменным термостата. После того как это будет сделано, мы можем эффективно опреде-

лить многовременные совместные вероятности, позволяющие нам полностью охарактеризовать квантовый марковский процесс.

Этого можно достичь сравнительно просто. Предположим, что операторы A и B действуют только в пространстве системы, а не в пространстве термостата. Тогда равенство (10.5.3) можно представить в виде

$$\langle A(t + \tau)B(t) \rangle = \text{Tr}_S \{ A \text{Tr}_B \{ e^{-iH\tau/\hbar} B \rho(t) e^{iH\tau/\hbar} \} \}, \quad (10.5.4)$$

поскольку оператор A в пространстве термостата пропорционален единичному оператору.

Уравнение движения для выражения

$$X(\tau, t) = e^{-iH\tau/\hbar} B \rho(t) e^{iH\tau/\hbar}, \quad (10.5.5)$$

рассматриваемого как функция τ , имеет вид

$$i\hbar \partial_\tau X(\tau, t) = [H, X(\tau, t)]. \quad (10.5.6)$$

Аналогично тому как мы вывели уравнение (10.3.38), которое можно записать в абстрактной форме

$$\partial_t \hat{\rho}(t) = \hat{L} \rho(t), \quad (10.5.7)$$

где

$$\hat{\rho} = \text{Tr}_B \{ \rho \}, \quad (10.5.8)$$

теперь можно получить уравнение

$$\partial_\tau [\text{Tr}_B \{ X(\tau, t) \}] = \hat{L} [\text{Tr}_B \{ X(\tau, t) \}], \quad (10.5.9)$$

так что выражение (10.5.4) в этом адиабатическом пределе эквивалентно выражению

$$\langle A(t + \tau)B(t) \rangle = \text{Tr}_S \{ A e^{L\tau} B \hat{\rho}(t) \}. \quad (10.5.10)$$

Используя аналогичную процедуру, можно решить задачу нахождения различных многовременных корреляторов, например найти

$$\langle A(t_3)B(t_2)C(t_1) \rangle = \text{Tr}_S \{ A e^{L(t_3-t_2)} B e^{L(t_2-t_1)} C \hat{\rho}(t_1) \} \quad (10.5.11)$$

при $t_3 \geq t_2 \geq t_1$ (оба оператора L в этом выражении действуют на все, что стоит справа от них).

Поскольку не все операторы коммутируют между собой, временное упорядочение не обязательно совпадает с упорядочением операторов. Это порождает огромный диапазон возможностей, не все из которых описываются простыми формулами.

Частным случаем является следующий:

$$\begin{aligned}\langle A(t)B(t+\tau)C(t+\tau)D(t) \rangle &= \text{Tr} \{ A e^{iH\tau/\hbar} BC e^{-iH\tau/\hbar} D \rho(t) \} \\ &= \text{Tr}_s \{ BC \text{Tr}_B \{ e^{-iH\tau/\hbar} D \rho(t) A e^{iH\tau/\hbar} \} \},\end{aligned}$$

При этом

$$\langle A(t)B(t+\tau)C(t+\tau)D(t) \rangle = \text{Tr}_s \{ BC e^{L\tau} D \hat{\rho}(t) A \}. \quad (10.5.12)$$

Отметим, что выражение (10.5.10) является частным случаем этого выражения, так как, полагая $C(t) = D(t) = 1$, мы находим

$$\langle A(t)B(t+\tau) \rangle = \text{Tr}_s \{ B e^{L\tau} \hat{\rho}(t) A \}. \quad (10.5.13)$$

Полный набор корреляционных функций для всех возможных операторов определяет всевозможные совместные средние значения, и, таким образом, его можно принять за определение марковского свойства квантовой системы, в которой оператор \hat{L} может быть произвольным, но сохраняющим $\text{Tr}_s \{ \rho \}$ и положительность ρ . В частности, можно использовать оператор \hat{L} , определяемый уравнением (10.3.38), который является единственным типом оператора, встречающимся на практике.

10.5.1. КВАНТОВАЯ ТЕОРЕМА РЕГРЕССИИ

В том случае, когда уравнения для средних оказываются линейными, можно доказать квантовую теорему регрессии, подобную аналогичной теореме для обычного марковского процесса (разд. 3.7.4). Этот результат был впервые получен Лэксом [10.8].

Пусть для некоторого набора операторов Y_i и для любого начального $\hat{\rho}$ из управляющего уравнения можно получить линейное уравнение вида

$$\partial_t \langle Y_i(t) \rangle = \sum G_{ij}(t) \langle Y_j(t) \rangle. \quad (10.5.14)$$

Тогда мы утверждаем, что

$$\partial_\tau \langle Y_i(t+\tau) Y_i(t) \rangle = \sum_{i,j} G_{ij}(\tau) \langle Y_j(t+\tau) Y_i(t) \rangle \quad (10.5.15)$$

при $\tau > 0$. В самом деле,

$$\langle Y_i(t+\tau) Y_i(t) \rangle = \text{Tr}_s \{ Y_i e^{L\tau} Y_i \hat{\rho}(t) \}. \quad (10.5.16)$$

Правую часть этого равенства можно трактовать как среднее значение величины $Y_i(t + \tau)$ при начальной матрице плотности

$$\rho_{\text{нач}} = Y_i \rho(t). \quad (10.5.17)$$

Поскольку, согласно принятому предположению, допускается любой начальный оператор $\hat{\rho}$ и среднее $\langle Y_i \rangle$ линейно по $\hat{\rho}$, мы действительно можем взять совершенно любой начальный оператор. (Казалось бы, что требование нормировки, эрмитовости и неотрицательной определенности ограничивает набор возможных начальных операторов, но это не так. Например, в случае двух состояний имеются четыре линейно независимые эрмитовы неотрицательно определенные матрицы с единичным следом, а именно

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2}i \\ -\frac{1}{2}i & \frac{1}{2} \end{bmatrix}, \quad (10.5.18)$$

которые образуют базис в пространстве матриц размерности 2×2 . Это свойство непосредственно обобщается на произвольную размерность пространства.) Следовательно, при выборе ρ_{init} в виде (10.5.17) гипотеза (10.5.14) приводит к результату (10.5.15), являющемуся *квантовой теоремой регрессии*.

10.5.2. ПРИМЕНЕНИЕ К ГАРМОНИЧЕСКОМУ ОСЦИЛЛЯТОРУ В P -ПРЕДСТАВЛЕНИИ

Рассмотрим сначала нормально упорядоченную временную корреляционную функцию

$$\begin{aligned} \langle a^+(t + \tau)a(t) \rangle &= \text{Tr} \{ a^+ e^{L\tau} a \int d^2\alpha P(\alpha, t) |\alpha\rangle \langle \alpha| \} \\ &= \text{Tr} \{ a^+ e^{L\tau} \int d^2\alpha \alpha P(\alpha, t) |\alpha\rangle \langle \alpha| \}. \end{aligned} \quad (10.5.19)$$

Множитель

$$e^{L\tau} \int d^2\alpha \alpha P(\alpha, t) |\alpha\rangle \langle \alpha|$$

является решением обобщенного управляющего уравнения: начальным условием для него служит оператор, который в P -представлении имеет плотность $\alpha P(\alpha, t)$. Если существует уравнение Фоккера — Планка (например (10.4.11), (10.4.21)), соответствующее оператору \hat{L} , то этот множитель является матрицей плотности с P -функцией вида

$$\int d^2\alpha' \alpha' P(\alpha, t + \tau | \alpha', t) P(\alpha', t). \quad (10.5.20)$$

Поэтому, используя циклические свойства операции взятия следа и свойство $\langle \alpha | a^+ = \alpha^* \langle \alpha |$, получаем

$$\begin{aligned} \langle a^+(t + \tau)a(t) \rangle &= \text{Tr} \{ a^+ \int d^2\alpha d^2\alpha' \alpha' P(\alpha, t + \tau | \alpha', t) P(\alpha', t) | \alpha \rangle \langle \alpha | \} \\ &= \int d^2\alpha d^2\alpha' \alpha^* \alpha' P(\alpha, t + \tau; \alpha' t). \end{aligned}$$

Это означает что,

$$\langle a^+(t + \tau)a(t) \rangle = \langle \alpha^*(t + \tau)\alpha(t) \rangle, \quad (10.5.21)$$

где $\alpha(t)$ — стохастическая переменная в P -представлении¹⁾. Аналогично для любой функции операторов a^+ и a имеем

$$\langle F_1[a^+(t + \tau)]F_2[a(t)] \rangle = \langle F_1[\alpha^*(t + \tau)]F_2[\alpha(t)] \rangle. \quad (10.5.22)$$

В случае произведений операторов, не являющихся нормально упорядоченными, результат не будет таким простым.

Рассмотрим, например, выражение

$$\langle a^+(t + \tau)a(t + \tau)a^+(t)a(t) \rangle = \text{Tr} \{ a^+ a e^{L\tau} a^+ a \int d^2\alpha P(\alpha, t) | \alpha \rangle \langle \alpha | \}; \quad (10.5.23)$$

Используя операторные соответствия (10.2.26) из разд. 10.2.3, имеем

$$(10.5.23) = \text{Tr} \left\{ a^+ a e^{L\tau} \int d^2\alpha \left[\alpha^* - \frac{\partial}{\partial \alpha} \right] \alpha P(\alpha, t) \right\} | \alpha \rangle \langle \alpha |. \quad (10.5.24)$$

Действуя по аналогии с предыдущим, находим

$$(10.5.23) = \text{Tr} \left\{ a^+ a \int d^2\alpha \int d^2\alpha' P(\alpha, t + \tau | \alpha', t) \left[\alpha'^* - \frac{\partial}{\partial \alpha'} \right] \alpha' P(\alpha', t) \right\} | \alpha \rangle \langle \alpha |. \quad (10.5.25)$$

¹⁾ Квантовые марковские процессы, рассматриваемые в книге, не могут быть применены для описания равновесных квантовых процессов, соответствующих определенной температуре, даже если в неквантовом пределе эти процессы марковские. В самом деле, используя (10.5.21, 34) и технику (10.5.24 — 29) или применяя к рассматриваемому демпфированному осциллятору квантовую теорему регрессии, можно получить

$$\langle a^+(t)a(0) \rangle = \bar{N} \exp(-K|t|/2 + i\omega't),$$

$$\langle a(0)a^+(t) \rangle = (\bar{N} + 1) \exp(-K|t|/2 + i\omega't),$$

где t любое. Эти равенства не согласуются с известной теоремой (см. например, [10.10*, с. 18]), согласно которой в случае термодинамического равновесия, соответствующего температуре $T = (\beta k)^{-1}$, равновесные средние должны удовлетворять соотношению

$$\langle B(t)D \rangle = \langle DB(t + i\beta\hbar) \rangle \equiv \exp(i\beta\hbar\partial/\partial t) \langle DB(t) \rangle.$$

Здесь операторы $B(t)$, D любые, в том числе $B(t) = a^+(t)$, $D = a(0)$. — Прим. ред.

Наконец, еще раз используя операторные соответствия, получаем

$$(10.5.23) = \int d^2\alpha d^2\alpha' \left[\left(\alpha^* - \frac{\partial}{\partial\alpha} \right) \alpha P(\alpha, t + \tau | \alpha', t) \right] \left[\left(\alpha'^* - \frac{\partial}{\partial\alpha'} \right) \alpha' P(\alpha', t) \right]. \quad (10.5.26)$$

Для упрощения этого выражения мы можем опустить член, содержащий $\partial/\partial\alpha$, оператор $\partial/\partial\alpha'$ слева, поскольку при интегрировании он обращается в нуль, и проинтегрировать $\partial/\partial\alpha$ по частям, что дает

$$(10.5.26) = \int d^2\alpha d^2\alpha' (\alpha^*\alpha)(\alpha'^*\alpha') P(\alpha, t + \tau; \alpha', t) \quad (10.5.27)$$

$$+ \int d^2\alpha' P(\alpha', t) \alpha' \frac{\partial}{\partial\alpha'} \left[\int d^2\alpha (\alpha^*\alpha) P(\alpha, t + \tau | \alpha', t) \right]. \quad (10.5.28)$$

Результирующая формула имеет вид

$$\langle a^+(t + \tau) a(t + \tau) a^+(t) a(t) \rangle = \langle |\alpha(t + \tau)|^2 |\alpha(t)|^2 \rangle + \langle \alpha' \frac{\partial}{\partial\alpha'} \langle |\alpha(t + \tau)|^2 | [\alpha', t] \rangle \rangle. \quad (10.5.29)$$

Этот результат аналогичен результату (7.7.76) для представления Пуассона. В самом деле, если P -функция зависит только от $|\alpha|^2$ и $|\alpha'|^2$, то эти результаты после замены $|\alpha|^2$ (P -представление) на α (представление Пуассона) будут идентичны.

Большой интерес для измерений представляет корреляционная функция

$$\langle a^+(t) a^+(t + \tau) a(t + \tau) a(t) \rangle \equiv G^2(\tau, t). \quad (10.5.30)$$

Как показал Глаубер [10.1], именно она определяется в экспериментах по измерению корреляции интенсивностей света, попадающего на детектор в различные моменты времени.

Используя формулу (10.5.12), запишем

$$G^2(\tau, t) = \text{Tr} \{ a^+ a e^{L\tau} a \rho a^+ \}. \quad (10.5.31)$$

что после рассмотрения, аналогичного предыдущему, принимает вид

$$G^2(\tau, t) = \int d^2\alpha d^2\alpha' |\alpha^2| |\alpha'^2| P(\alpha, t + \tau; \alpha', t) = \langle |\alpha(t + \tau)|^2 |\alpha(t)|^2 \rangle. \quad (10.5.32)$$

Этот особенно простой результат означает, что измеряемая корреляционная функция интенсивности $G^2(\tau, t)$ тождественна корреляционной функции для переменных P -представления, но не совпадает с выражением (10.5.29).

Пример: Возмущаемый осциллятор с затуханием. Из разд. 10.4.1в легко получить стохастическое дифференциальное уравнение для переменной $\alpha - \alpha_s$:

$$d(\alpha - \alpha_s) = -(\frac{1}{2}K + i\omega')(\alpha - \alpha_s)dt + \sqrt{K\bar{N}} d\eta(t),$$

где $d\eta^2 = d\eta^*{}^2 = 0$, $d\eta d\eta^* = dt$. Следовательно, переходя к новой переменной

$$\tilde{I} = |(\alpha - \alpha_s)|^2,$$

получаем

$$d\tilde{I} = -K\tilde{I}dt + \sqrt{K\bar{N}} [(\alpha - \alpha_s)^*d\eta + (\alpha - \alpha_s)d\eta^*] + d(\alpha - \alpha_s)d(\alpha - \alpha_s)^*$$

и

$$\frac{d\langle \tilde{I} \rangle}{dt} = -K\langle \tilde{I} \rangle + K\bar{N}.$$

Итак, величина $\langle \tilde{I} \rangle - \bar{N}$ подчиняется линейному уравнению; следовательно, можно применить квантовую теорему регрессии и получить стационарную корреляционную функцию

$$\langle \tilde{I}(t), \tilde{I}(0) \rangle_s = e^{-Kt} \langle (\tilde{I}(0) - \bar{N})^2 \rangle.$$

Вследствие гауссовской природы стационарного распределения переменных $f(t)$, $\alpha^*(t)$ имеем

$$\langle \tilde{I}(0)^2 \rangle_s = \langle (x^2 + y^2)^2 \rangle = \langle x^4 + 2x^2y^2 + y^4 \rangle \quad (\text{здесь } \alpha - \alpha_s = x + iy).$$

Поскольку переменные x и y в стационарном состоянии независимы (это следует из (10.4.23)), то

$$\langle \tilde{I}(0)^2 \rangle_s = 2\langle \tilde{I}(0) \rangle_s^2 = 2\bar{N}^2 \langle (\tilde{I}(0) - \bar{N})^2 \rangle_s = \bar{N}^2,$$

и, следовательно,

$$\langle \tilde{I}(t), \tilde{I}(0) \rangle_s = G^2(t)_s = \bar{N}^2 e^{-Kt}. \quad (10.5.33)$$

Аналогично получаем формулу

$$\langle \alpha^*(t), \alpha(0) \rangle_s \equiv G^1(t)_s = \bar{N} \exp[-(\frac{1}{2}K - i\omega)t]. \quad (10.5.34)$$

10.5.3. ВРЕМЕННЫЕ КОРРЕЛЯТОРЫ ДЛЯ ДВУХУРОВНЕВОГО АТОМА

В этом случае вполне применима теорема регрессии и выражения для корреляторов быстро получаются из разд. 10.4.2. Для простоты мы будем рассматривать только стационарные корреляционные функции

$$\mathbf{G}(t) = \begin{bmatrix} \langle S^+(t)S^+(0) \rangle_s & \langle S^+(t)S^-(0) \rangle_s & \langle S^+(t)S_z(0) \rangle_s \\ \langle S^-(t)S^+(0) \rangle_s & \langle S^-(t)S^-(0) \rangle_s & \langle S^-(t)S_z(0) \rangle_s \\ \langle S_z(t)S^+(0) \rangle_s & \langle S_z(t)S^-(0) \rangle_s & \langle S_z(t)S_z(0) \rangle_s \end{bmatrix}. \quad (10.5.35)$$

Тогда

$$\frac{d\mathbf{G}(t)}{dt} = \begin{bmatrix} -\frac{1}{2}K(2\bar{N} + 1) & 0 & i\delta\varepsilon \\ 0 & -\frac{1}{2}K(2\bar{N} + 1) & -i\delta\varepsilon^* \\ \frac{1}{2}i\delta\varepsilon^* & -\frac{1}{2}i\delta\varepsilon & -K(2\bar{N} + 1) \end{bmatrix} \mathbf{G}(t). \quad (10.5.36)$$

Это матричное уравнение можно проинтегрировать и получить его полное решение. Начальное условие упрощается при использовании алгебраических свойств матриц (10.4.28) и приводится к виду

$$\mathbf{G}(0) = \begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{2}\langle 1 + S_z \rangle_s & -\langle S^+ \rangle_s \\ \frac{1}{2}\langle 1 - S_z \rangle_s & 0 & \langle S^- \rangle_s \\ \langle S^+ \rangle_s & -\langle S^- \rangle_s & 1 \end{bmatrix}, \quad (10.5.37)$$

а входящие сюда стационарные значения уже были приведены в разд. 10.4.2. Задача нахождения в явном виде корреляционных функций и спектра была решена Кармайклом и Уоллсом [10.6].

10.6. ОБОБЩЕННЫЕ P -ПРЕДСТАВЛЕНИЯ

Идея представления матрицы плотности в виде линейной комбинации матриц плотности когерентных состояний, как это делается в P -представлении Глаубера — Сударшана, является особенно полезной в тех квантовых системах, которые описываются бозе-операторами a^+ и a . Дело в том, что только таким способом квантовое управляющее уравнение можно свести к уравнению для обычных стохастических процессов. Ситуация здесь противоположна случаю представления Пуассона, которое лишь преобразует стохастический процесс рождения — гибели в диффузионный процесс.

Несмотря на формальное сходство с классическим распределением вероятностей, распределение $P(\alpha)$ не является истинным распределением вероятностей, а относится к классу квазивероятностных распределений. В то время как $P(\alpha)$ существует и является неотрицательным для тепловых световых полей (гауссовское распределение см. разд. 10.4.1) и когерентных лазерных полей (распределение в виде δ -функции), для полей с неклассической статистикой фотонов $P(\alpha)$ не обязательно неотрицательная функция с хорошим поведением (Клаудер и Сударшан [10.3] показали, что она существует, но в виде чрез-

вычайно сингулярных распределений). Такие неклассические поля наблюдались в экспериментах по атомной флюоресценции. Существуют и другие квазивероятностные распределения, для которых некоторые из трудностей, возникающих в случае P -представления, отсутствуют. Распределение Вигнера, являющееся исторически первым квазивероятностным распределением, может быть получено из P -представления при помощи интеграла

$$W(\alpha) = \frac{2}{\pi} \int P(\beta) \exp(-2|\beta - \alpha|^2) d^2\beta. \quad (10.6.1)$$

Распределение Вигнера всегда существует в виде несингулярной функции, но может принимать отрицательные значения. Это распределение упрощает усреднение *симметрично упорядоченных* произведений операторов, но менее удобно при усреднении *нормально упорядоченных* произведений операторов.

Другим распределением, которое уже всегда положительно, является распределение Q , связанное с диагональными матричными элементами оператора плотности в α -представлении:

$$Q(\alpha, \alpha^*) = \langle \alpha | \rho | \alpha \rangle / \pi. \quad (10.6.2)$$

Хотя это распределение неотрицательно, оно имеет тот недостаток, что не всякая положительная Q -функция отвечает неотрицательно-определенному эрмитову оператору плотности. Кроме того, выражения для моментов в Q -представлении просты только в случае *анти-нормально упорядоченных* произведений операторов.

Глаубер ввел также R -представление при помощи разложения (10.1.37) произвольного оператора, применив его к оператору плотности:

$$R(\alpha^*, \beta) = \langle \alpha | \rho | \beta \rangle \exp(\frac{1}{2}|\alpha|^2 + \frac{1}{2}|\beta|^2) \quad (10.6.3)$$

$$\rho = \frac{1}{\pi^2} \int |\alpha\rangle R(\alpha^*, \beta) \langle \beta| \exp[-\frac{1}{2}(|\alpha|^2 + |\beta|^2)] d^2\alpha d^2\beta.$$

Это представление аналитично по переменным α^* , β (и, следовательно, несингулярно). Оно также по определению неотрицательно и нормировано на единицу при наличии гауссовского весового множителя. По последней причине для него нельзя записать уравнение Фоккера — Планка и его нельзя интерпретировать как квазивероятность. Тем не менее существование такого распределения указывает на то, что вычисления с нормально упорядоченными наблюдаемыми величинами для любого оператора ρ возможны и при несингулярном представлении.

10.6.1. ОПРЕДЕЛЕНИЕ ОБОБЩЕННОГО P -ПРЕДСТАВЛЕНИЯ

Для решения задач нелинейной квантовой оптики, в которых возникает неклассическая статистика фотонов, Друммонд и Гардинер [10.9] ввели класс обобщенных P -представлений путем разложения оператора плотности по недиагональным проекционным операторам, описывающим когерентные состояния. Используемые при этом методы аналогичны методам, применявшимся для определения различных пуассоновских представлений в разд. 7.7. Обобщенные P -представления определяются следующим образом. Мы полагаем

$$\rho = \int_{\mathcal{D}} A(\alpha, \beta) P(\alpha, \beta) d\mu(\alpha, \beta), \quad (10.6.4)$$

где

$$A(\alpha, \beta) = \frac{|\alpha\rangle\langle\beta^*|}{\langle\beta^*|\alpha\rangle}, \quad (10.6.5)$$

$d\mu(\alpha, \beta)$ — мера интегрирования, выбор которой определяет различные классы возможных представлений, а \mathcal{D} — область интегрирования. Проекционный оператор $A(\alpha, \beta)$ является аналитической функцией от переменных α, β .

Полезными оказываются следующие меры интегрирования:

а) P -представление Глаубера — Сударшана

$$d\mu(\alpha, \beta) = \delta^2(\alpha^* - \beta) d^2\alpha d^2\beta. \quad (10.6.6)$$

Эта мера соответствует P -представлению Глаубера — Сударшана

б) Комплексное P -представление

$$d\mu(\alpha, \beta) = d\alpha d\beta. \quad (10.6.7)$$

Здесь α, β рассматриваются как комплексные переменные, интегрирование по которым ведется по отдельным контурам C, C' . Существование этого распределения при определенных условиях будет продемонстрировано в следующем разделе. Это представление, в частности, существует для оператора, который можно разложить по конечному базису состояний, нумеруемых целыми числами. Эта ситуация характерна для неклассической статистики фотонов (разгруппирование фотонов). При этом P -представление Глаубера — Сударшана обычно сингулярно. Это представление носит название комплексного P -представления, поскольку значения функции $P(\alpha, \beta)$ комплексны. Можно показать, что эта функция $P(\alpha, \beta)$ удовлетворяет уравнению Фоккера — Планка, получаемому из обычного уравнения Фоккера — Планка типа Глаубера — Сударшана с помощью замены (α, α^*) на (α, β) .

При определенных условиях можно найти точные решения этих уравнений Фоккера — Планка, которые, однако, не могут быть нормированы в отличие от P -функций Глаубера — Сударшана. Оперировать с ними можно в рассматриваемом представлении, если выбрать контуры интегрирования C, C' в комплексном фазовом пространстве α, β .

в) Положительное P -представление

$$d\mu(\alpha, \beta) = d^2\alpha d^2\beta.$$

В этом представлении допускается независимое изменение переменных во всей комплексной плоскости. Мы покажем в следующем разделе, что для физического оператора плотности функция $P(\alpha, \beta)$ всегда существует и может быть выбрана положительной. Мы называем такое представление положительным P -представлением. Это означает, что функция $P(\alpha, \beta)$ обладает всеми свойствами истинного распределения вероятностей. Мы также покажем, что если какое-либо уравнение Фоккера — Планка существует в представлении Глаубера — Сударшана, то существует соответствующее уравнение Фоккера — Планка с неотрицательно определенным коэффициентом диффузии и для положительного P -представления. Это позволяет вывести стохастические дифференциальные уравнения и установить соответствие между квантовым марковским процессом и обычным диффузионным процессом.

Моменты операторов определяются, конечно, во всех представлениях выражением

$$\langle (a^+)^m a^n \rangle = \int_{\mathcal{D}} d\mu(\alpha, \beta) \beta^m \alpha^n P(\alpha, \beta). \quad (10.6.8)$$

10.6.2. ТЕОРЕМЫ СУЩЕСТВОВАНИЯ

В этом разделе мы покажем, что для обобщенных P -представлений можно получить довольно сильные результаты, касающиеся условий существования. Мы сделаем это при помощи ряда теорем. Читателю следует обратить внимание на то, что будет использоваться обозначение

$$g = (\alpha, \beta).$$

Теорема 1. Для оператора плотности, который можно разложить в конечный ряд по операторам типа $(a^+)^m |0\rangle\langle 0| a^n$, существует комплексное P -представление.

Доказательство. Пусть

$$\rho = \sum_{n,m} \sum C_{nm} (a^+)^m |0\rangle \langle 0| a^n. \quad (10.6.9)$$

Тогда по теореме Коши имеем

$$\rho = \oint_{C,C'} A(\alpha) P(\alpha) d\mu(\alpha), \quad (10.6.10)$$

где

$$P(\alpha) = (-1/4\pi^2) e^{\alpha\beta} \sum_{n,m} C_{nm} n!m! \alpha^{-m-1} \beta^{-n-1}, \quad (10.6.11)$$

а C, C' — пути интегрирования, окружающие начало координат.

Теорема 2. Комплексное P -представление существует для любого оператора, который можно разложить по когерентным состояниям в ограниченной области, т. е. представить в виде

$$\rho = \int \int_D D' A(\alpha, \beta) C(\alpha, \beta) d^2\alpha d^2\beta, \quad (10.6.12)$$

где D, D' — ограниченные области в каждой комплексной плоскости.

Доказательство. Применяя теорему Коши, можно показать, что если

$$P(\alpha) = -\frac{1}{4\pi^2} \int \int_{D,D'} C(\alpha', \beta') / [(\alpha - \alpha')(\beta - \beta')] d^2\alpha' d^2\beta', \quad (10.6.13)$$

то

$$\rho = \int \int_{C,C'} A(\alpha) P(\alpha) d\alpha d\beta, \quad (10.6.14)$$

где контуры C, C' ограничивают соответственно области D, D' . Следовательно, комплексное P -представление в этом случае существует для любого ограниченного разложения по проекционным операторам когерентных состояний.

Теорема 3. Для любого квантового оператора плотности существует положительное P -представление, имеющее вид

$$P(\alpha) = (1/4\pi^2) \exp(-|\alpha - \beta^*|^2/4) \langle \frac{1}{2}(\alpha + \beta^*) | \rho | \frac{1}{2}(\alpha + \beta^*) \rangle. \quad (10.6.15)$$

Доказательство. Функция $P(\alpha)$ положительна, поскольку она образована из диагонального матричного элемента оператора плотности, умноженного на положительную функцию. Для того чтобы показать, что эта функция представляет в общем случае квантовый оператор плотности, используем характеристическую функцию

$$\chi(\lambda) \equiv \text{Tr} \{ \rho e^{\lambda a^+} e^{-\lambda^* a} \}. \quad (10.6.16)$$

В разд. 10.2.5 было показано, что эта функция определяет оператор ρ единственным образом. Характеристическую функцию можно выразить через R -представление оператора $\hat{\rho}$:

$$\chi(\lambda) = \frac{1}{\pi} \int R(\alpha^*, \lambda + \alpha) \exp(-\lambda^* \alpha - |\alpha|^2) d^2 \alpha. \quad (10.6.17)$$

Подставим теперь R -представление для ρ в формулу (10.6.15), выражающую функцию $P(\alpha)$ через диагональные матричные элементы оператора ρ . Затем введем оператор ρ_P в форме положительного P -представления (10.6.4), функция $P(\alpha)$ в котором определена на предыдущем этапе. Найдем теперь соответствующую характеристическую функцию, используя определение (10.6.16), и покажем, что она совпадает с первоначальной характеристической функцией оператора ρ . Итак,

$$\begin{aligned} \chi_P(\lambda) &= \iint P(\alpha) \exp(\lambda \beta - \lambda^* \alpha) d^2 \alpha d^2 \beta \\ &= \frac{1}{4\pi^4} \iiint R(\alpha'^*, \beta') \exp[\lambda \beta - \lambda^* \alpha - \frac{1}{2} |\alpha|^2 - \frac{1}{2} |\beta|^2 - |\alpha'|^2 - |\beta'|^2 \\ &\quad + \frac{1}{2} \beta'^* (\alpha + \beta^*) + \frac{1}{2} \alpha'^* (\alpha^* + \beta)] d^2 \alpha d^2 \beta d^2 \alpha' d^2 \beta'. \end{aligned}$$

Произведем теперь следующую замену переменных:

$$\begin{aligned} \gamma &= (\alpha + \beta^*)/2 & \delta &= (\alpha - \beta^*)/2 \\ \alpha &= (\gamma + \delta) & \beta^* &= (\gamma - \delta) \\ d^2 \alpha d^2 \beta &= 4d^2 \gamma d^2 \delta. \end{aligned} \quad (10.6.18)$$

Поскольку функция R аналитическая, имеет место полезное тождество

$$R(\alpha^*, \gamma) = \frac{1}{\pi} \int R(\alpha^*, \beta) \exp(\gamma \beta^* - |\beta|^2) d^2 \beta. \quad (10.6.19)$$

Следовательно, полученное выше выражение для характеристической функции можно упростить и получить

$$\begin{aligned} \chi_P(\lambda) &= \frac{1}{\pi^3} \iiint R(\alpha'^*, \gamma) \exp[\lambda(\gamma - \delta)^* - \lambda^*(\gamma + \delta) \\ &\quad - |\gamma|^2 - |\delta|^2 - |\alpha'|^2 + \alpha' \gamma^*] d^2 \gamma d^2 \delta d^2 \alpha' \end{aligned} \quad (10.6.20)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{\pi^2} \iint R(\alpha'^*, \gamma) \exp(|\lambda|^2 + \lambda \gamma^* - \lambda^* \gamma - |\gamma|^2 \\ &\quad - |\alpha'|^2 + \alpha' \gamma^*) d^2 \gamma d^2 \alpha' \end{aligned} \quad (10.6.21)$$

$$= \frac{1}{\pi} \int R(\alpha^*, \lambda + \alpha) \exp(-\lambda^* \alpha - |\alpha|^2) d^2 \alpha. \quad (10.6.22)$$

Таким образом,

$$\chi_P(\lambda) = \text{Tr} \{ \rho e^{\lambda a^+} e^{-\lambda^* a} \} = \chi(\lambda). \quad (10.6.23)$$

Из идентичности характеристических функций заключаем, что $\rho_P = \rho$.

10.6.3. СВЯЗЬ С ПРЕДСТАВЛЕНИЕМ ПУАССОНА

Задавая распределение вероятностей $q(x)$ на множестве целых чисел, мы всегда можем определить соответствующую положительную матрицу плотности по формуле

$$\rho = \sum_n |n\rangle \langle n| q(n), \quad (10.6.24)$$

причем P -представление для матрицы ρ дает соответствующее представление Пуассона для функции $P(n)$. Так, находим

$$q(x) = \langle x | \rho | x \rangle = \langle x | \int d\mu(\alpha, \beta) P(\alpha, \beta) \frac{|\alpha\rangle \langle \beta^*|}{\langle \beta^* | \alpha \rangle} | x \rangle \quad (10.6.25)$$

$$= \int d\mu(\alpha, \beta) \frac{e^{-\alpha\beta} (\alpha\beta)^x}{x!} P(\alpha, \beta). \quad (10.6.26)$$

Следовательно, можно записать равенство

$$q(x) = \int d\mu(\alpha_1) f(\alpha_1) \frac{e^{-\alpha_1} \alpha_1^x}{x!}, \quad (10.6.27)$$

где

$$f(\alpha_1) d\mu(\alpha_1) = \int d\mu(\alpha, \beta) \delta_\mu(\alpha\beta - \alpha_1) P(\alpha, \beta) \quad (10.6.28)$$

а $\delta_\mu(\alpha_1 - \alpha_2)$ — дельта-функция Дирака, определенная на мере $\mu(\alpha_1)$, т. е.

$$\int d\mu(\alpha_1) \delta_\mu(\alpha_1 - \alpha_2) \phi(\alpha_1) = \phi(\alpha_2). \quad (10.6.29)$$

Таким образом, из теоремы 3 мы можем заключить, что положительное представление Пуассона всегда существует, как это утверждалось в разд. 7.7.4. Применяя также первую теорему, можно показать, что комплексное P -представление всегда существует, если $q(x) = 0$ для $x > N$ и некоторого конечного N . Однако в разд. 7.7.3 уже был доказан более общий результат.

10.6.4. ОПЕРАТОРНЫЕ ТОЖДЕСТВА

Из определения (10.6.5) недиагональных проекционных операторов, соответствующих когерентным состояниям, можно получить следующие тождества. Обозначая снова через α пару переменных (α, β) ,

имеем

$$\left. \begin{aligned} \alpha A(\underline{q}) &= \alpha A(\underline{q}) \\ \alpha^+ A(\underline{q}) &= (\beta + \partial/\partial\alpha)A(\underline{q}) \\ A(\underline{q})\alpha^+ &= \beta A(\underline{q}) \\ A(\underline{q})\alpha &= (\partial/\partial\beta + \alpha)A(\underline{q}). \end{aligned} \right\} \quad (10.6.30)$$

Подставляя эти тождества в (10.6.4), определяя обобщенное P -представление и интегрируя по частям (при условии исчезновения соответствующих членов на границе области), мы можем использовать данные тождества для определения операций над P -функцией, которые зависят от выбранного представления.

а) P -представление Глаубера — Сударшана

Мы имеем здесь те же результаты, что и в (10.2.26).

б) Комплексное P -представление

$$\left. \begin{aligned} \alpha \rho &\leftrightarrow \alpha P(\underline{q}) \\ \alpha^+ \rho &\leftrightarrow (\beta - \partial/\partial\alpha)P(\underline{q}) \\ \rho \alpha^+ &\leftrightarrow \beta P(\underline{q}) \\ \rho \alpha &\leftrightarrow (\alpha - \partial/\partial\beta)P(\underline{q}). \end{aligned} \right\} \quad (10.6.31)$$

в) Положительное P -представление

Используем здесь аналитичность функции $\Lambda(\alpha, \beta)$ и заметим, что если

$$\begin{aligned} \alpha &= \alpha_x + i\alpha_y, \\ \beta &= \beta_x + i\beta_y, \end{aligned} \quad (10.6.32)$$

то

$$(\partial/\partial\alpha)A(\underline{q}) = (\partial/\partial\alpha_x)A(\underline{q}) = (-i\partial/\partial\alpha_y)A(\underline{q}) \quad (10.6.33)$$

и

$$(\partial/\partial\beta)A(\underline{q}) = (\partial/\partial\beta_x)A(\underline{q}) = (-i\partial/\partial\beta_y)A(\underline{q}). \quad (10.6.34)$$

Поэтому кроме соотношений (10.6.31), справедливых и в этом случае, мы имеем дополнительные соотношения

$$\begin{aligned} \alpha^+ \hat{\rho} &\leftrightarrow (\beta - \partial/\partial\alpha_x)P(\underline{q}) \leftrightarrow (\beta + i\partial/\partial\alpha_y)P(\underline{q}) \\ \rho \alpha &\leftrightarrow (\alpha - \partial/\partial\beta_x)P(\underline{q}) \leftrightarrow (\alpha + i\partial/\partial\beta_y)P(\underline{q}). \end{aligned} \quad (10.6.35)$$

Все эти соответствия можно использовать по мере необходимости для вывода уравнений Фоккера — Планка.

10.7. ПРИМЕНЕНИЕ ОБОБЩЕННЫХ P -ПРЕДСТАВЛЕНИЙ К УРАВНЕНИЯМ ЭВОЛЮЦИИ ВО ВРЕМЕНИ

Сначала мы покажем, что P -представление Глаубера — Сударшана не всегда дает приемлемое уравнение Фоккера — Планка, но в некоторых отдельных случаях это действительно так.

Рассмотрим одномодовый интерферометр с нелинейным поглотителем, возмущаемый когерентным образом. В этом случае (см. [10.9])

$$H_1 = \sum_i \hbar \omega_i (\Gamma_i^+ \Gamma_i + \frac{1}{2}) \quad (10.7.1)$$

$$H_2 = \sum_i [(a^+)^2 g_i \Gamma_i + a^2 g_i^* \Gamma_i^+] \quad (10.7.2)$$

$$H_3 = \hbar \omega (a^+ a + \frac{1}{2}) + i \hbar (\epsilon \epsilon^{-i\omega t} a^+ - \epsilon^* e^{i\omega t} a). \quad (10.7.3)$$

Этот пример во многом похож на пример, рассмотренный в разд. 10.4.1. Используя уравнение (10.3.38) и предполагая, что температура термостата равна нулю, получаем управляющее уравнение в представлении взаимодействия

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = [\epsilon a^+ - \epsilon^* a, \rho] + \frac{1}{2} K [2a^2 \rho (a^+)^2 - (a^+)^2 a^2 \rho - \rho (a^+)^2 a^2]. \quad (10.7.4)$$

Используя обычные операторные соответствия для представления Глаубера — Сударшана, находим

$$\frac{\partial}{\partial t} P(\alpha, \alpha^*) = \left[-\frac{\partial}{\partial \alpha} (\epsilon - K \alpha^2 \alpha^*) - \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} (K \alpha^2) + \text{компл.сопр.} \right] P(\alpha, \alpha^*). \quad (10.7.5)$$

В действительных переменных

$$x = (\alpha + \alpha^*) / \sqrt{2}$$

$$y = (\alpha - \alpha^*) / i\sqrt{2}.$$

диффузионная матрица имеет вид

$$\begin{bmatrix} -K/2 & -K \\ -K & K/2 \end{bmatrix} \quad (10.7.6)$$

и не является неотрицательно определенной. А значит, уравнение временной эволюции вида (10.7.4) будет проявлять сингулярности. Нам приходится, следовательно, обратиться к альтернативным уравнениям в различных P -представлениях.

Наивное следование правилам, применимым при условии неотрицательной определенности диффузионной матрицы, приводит к стоха-

стическим дифференциальным уравнениям

$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} \alpha \\ \alpha^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \varepsilon - K\alpha^2\alpha^* \\ \varepsilon - K(\alpha^*)^2\alpha \end{bmatrix} + i\sqrt{K} \begin{bmatrix} \alpha\xi_1(t) \\ \alpha^*\xi_2(t) \end{bmatrix}, \quad (10.7.7)$$

в которых $\xi_1(t)$ и $\xi_2(t)$ — независимые белые шумы. Однако при этом возникает следующий парадокс. Поскольку ξ_1 и ξ_2 независимы, α и α^* не остаются комплексно-сопряженными. Мы приходим к ситуации, подобной ситуации в случае представления Пуассона, в которой также появлялись отрицательные матрицы диффузии.

10.7.1. КОМПЛЕКСНОЕ P -ПРЕДСТАВЛЕНИЕ

В этом случае та же процедура приводит к уравнению, очень похожему на уравнение для случая Глаубера — Сударшана. Мы предполагаем, что с помощью соответствующего переупорядочения дифференциальных операторов можно свести квантовомеханическое управляющее уравнение к виду

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} &= \iint_{C, C'} \Lambda(\alpha) \frac{\partial P(\alpha)}{\partial t} d\alpha d\beta \\ &= \iint_{C, C'} \left\{ \left[A^\mu(\alpha) \frac{\partial}{\partial \alpha^\mu} + \frac{1}{2} D^{\mu\nu}(\alpha) \frac{\partial}{\partial \alpha^\mu} \frac{\partial}{\partial \alpha^\nu} \right] \Lambda(\alpha) \right\} P(\alpha) d\alpha d\beta, \end{aligned} \quad (10.7.8)$$

где $(\alpha, \beta) = \alpha \equiv (\alpha^{(1)}, \alpha^{(2)})$; $\mu = 1, 2$. Интегрируя это уравнение по частям и пренебрегая выражениями на границе, что, по-видимому, возможно при соответствующем выборе контуров интегрирования C и C' , мы получаем по крайней мере одно решение, если приравняем коэффициенты при функции $\Lambda(\alpha)$:

$$\frac{\partial P(\alpha)}{\partial t} = \left[-\frac{\partial}{\partial \alpha^\mu} A^\mu(\alpha) + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \alpha^\mu} \frac{\partial}{\partial \alpha^\nu} D^{\mu\nu}(\alpha) \right] P(\alpha). \quad (10.7.9)$$

Этого уравнения достаточно для выполнения уравнения (10.7.8), но оно не единственно, поскольку функции $\Lambda(\alpha)$ не являются линейно-независимыми. Следует отметить, что величины $A^\mu(\alpha)$ и $D^{\mu\nu}(\alpha)$ для данного представления всегда аналитичны по α . Следовательно, если функция $P(\alpha)$ аналитична в начальный момент, то в силу (10.7.9) она сохраняет эту аналитичность во времени.

10.7.2. ПОЛОЖИТЕЛЬНОЕ P -ПРЕДСТАВЛЕНИЕ

Рассмотрим снова уравнение (10.7.8), но в предположении, что P -представление положительно. Симметричную матрицу всегда можно факторизовать и записать в виде

$$\underline{D}(\underline{\alpha}) = \underline{B}(\underline{\alpha})\underline{B}^T(\underline{\alpha}). \quad (10.7.10)$$

Воспользуемся равенствами

$$A(\underline{\alpha}) = A_x(\underline{\alpha}) + iA_y(\underline{\alpha}) \quad (10.7.11)$$

$$\underline{B}(\underline{\alpha}) = \underline{B}_x(\underline{\alpha}) + i\underline{B}_y(\underline{\alpha}), \quad (10.7.12)$$

где величины A_x , A_y , B_x , B_y действительные. Подстановка этих равенств в управляющее уравнение дает уравнение

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} &= \iint d^2\alpha d^2\beta \Lambda(\underline{\alpha}) (\partial P(\underline{\alpha})/\partial t) \\ &= \iint P(\underline{\alpha}) [A_x^\mu(\underline{\alpha})\partial_\mu^x + A_y^\mu(\underline{\alpha})\partial_\mu^y + \frac{1}{2}(B_x^{\mu\sigma}B_x^{\nu\sigma}\partial_\mu^x\partial_\nu^x \\ &\quad + B_y^{\mu\sigma}B_y^{\nu\sigma}\partial_\mu^y\partial_\nu^y + 2B_x^{\mu\sigma}B_y^{\nu\sigma}\partial_\mu^x\partial_\nu^y)] \Lambda(\underline{\alpha}) d^2\alpha d^2\beta. \end{aligned} \quad (10.7.13)$$

Для простоты записи мы использовали здесь обозначения $\partial/\partial\alpha_x^\mu = \partial_\mu^x$ и т. д., а также воспользовались аналитичностью функции $\Lambda(\underline{\alpha})$ для выполнения замен

$$\partial/\partial\alpha^\mu \leftrightarrow \partial_\mu^x \leftrightarrow -i\partial_\mu^y, \quad (10.7.14)$$

чтобы получить уравнение (10.7.13)

При условии что допустимо интегрирование по частям, мы выведем теперь уравнение Фоккера — Планка

$$\begin{aligned} \partial P(\underline{\alpha})/\partial t &= \{-\partial_\mu^x A_x^\mu(\underline{\alpha}) - \partial_\mu^y A_y^\mu(\underline{\alpha}) + \frac{1}{2}[\partial_\mu^x \partial_\nu^y B_x^{\mu\sigma}(\underline{\alpha}) B_x^{\nu\sigma}(\underline{\alpha}) \\ &\quad + 2\partial_\mu^x \partial_\nu^y B_x^{\mu\sigma}(\underline{\alpha}) B_y^{\nu\sigma}(\underline{\alpha}) + \partial_\mu^y \partial_\nu^x B_y^{\mu\sigma}(\underline{\alpha}) B_y^{\nu\sigma}(\underline{\alpha})]\} P(\underline{\alpha}). \end{aligned} \quad (10.7.15)$$

Это уравнение для временной эволюции снова не единственно, но при этом уравнение (10.7.13) является следствием уравнения (10.7.15).

Однако теперь уравнение Фоккера — Планка (10.7.15) обладает неотрицательно определенной диффузионной матрицей в четырехмерном пространстве, задаваемом векторами

$$(\alpha_x^{(1)}, \alpha_x^{(2)}, \alpha_y^{(1)}, \alpha_y^{(2)}) \equiv (\alpha_x, \beta_x, \alpha_y, \beta_y). \quad (10.7.16)$$

Мы получим, что вектор сноса равен

$$\mathcal{A}(\underline{\alpha}) \equiv (A_x^{(1)}(\underline{\alpha}), A_x^{(2)}(\underline{\alpha}), A_y^{(1)}(\underline{\alpha}), A_y^{(2)}(\underline{\alpha})), \quad (10.7.17)$$

а диффузионная матрица такова:

$$\mathcal{D}(\underline{\alpha}) = \begin{bmatrix} \underline{B}_x \underline{B}_x^T & \underline{B}_x \underline{B}_y^T \\ \underline{B}_y \underline{B}_x^T & \underline{B}_y \underline{B}_y^T \end{bmatrix}(\underline{\alpha}) \equiv \mathcal{B}(\underline{\alpha})\mathcal{B}^T(\underline{\alpha}), \quad (10.7.18)$$

где

$$\mathcal{B}(\underline{\alpha}) = \begin{bmatrix} \underline{B}_x & 0 \\ \underline{B}_y & 0 \end{bmatrix}(\underline{\alpha}). \quad (10.7.19)$$

Матрица D , таким образом, неотрицательно определенная (а не положительно определенная). Соответствующие стохастические дифференциальные уравнения Ито можно записать в виде

$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} g_x \\ g_y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_x(g) \\ A_y(g) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} B_x(g)\xi(t) \\ B_y(g)\xi(t) \end{bmatrix}, \quad (10.7.20)$$

или, объединяя вновь действительную и мнимую части, в виде

$$dg/dt = A(g) + \underline{B}(g)\xi(t). \quad (10.7.21)$$

Уравнение (10.7.21) является как раз тем стохастическим дифференциальным уравнением, которое получается при использовании представления Глаубера — Сударшана, если не считать замены $\alpha^* \rightarrow \beta$ и наивного использования уравнения Фоккера — Планка с неположительно определенной диффузионной матрицей в стохастическом дифференциальном уравнении Ито (в случае представления Глаубера — Сударшана).

В нашем выводе две формальные переменные (α, α^*) были заменены на переменные (α, β) на комплексной плоскости, которые могут флуктуировать независимо. Введенное здесь положительное P -представление выступает, таким образом, как математическое обоснование этой процедуры. Используемая здесь процедура близка к методике разд. 7.7.4 для положительного представления Пуассона.

10.7.3. ПРИМЕР

Рассмотрим пример из разд. 10.7. Используя подходящее операторное соответствие, напомним УФП для комплексного P -представления

$$\begin{aligned} \partial_t P(\alpha, \beta) = & \left[-\frac{\partial}{\partial \alpha} (\varepsilon - K\alpha^2\beta) - \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} (K\alpha^2) - \frac{\partial}{\partial \beta} (\varepsilon - K\alpha\beta^2) \right. \\ & \left. - \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \beta^2} (K\beta^2) \right] P(\alpha, \beta). \end{aligned} \quad (10.7.22)$$

Довольно удивительно то, что это уравнение Фоккера — Планка удовлетворяет потенциальным условиям разд. 5.3.3. В обозначениях указанного раздела имеем

$$A = \begin{bmatrix} \varepsilon - K\alpha^2\beta \\ \varepsilon - K\beta^2\alpha \end{bmatrix}, \quad \underline{B} = \begin{bmatrix} -K\alpha^2 & 0 \\ 0 & -K\beta^2 \end{bmatrix}, \quad (10.7.23)$$

Используя также формулы (5.3.22, 23), находим

$$Z = -\frac{2}{K} \left[\frac{\varepsilon/\alpha^2 - K\beta + K/\alpha}{\varepsilon/\beta^2 - K\alpha + K/\beta} \right],$$

$$\frac{\partial Z_\alpha}{\partial \beta} = \frac{\partial Z_\beta}{\partial \alpha} = 2 \quad (10.7.24)$$

и поэтому

$$\begin{aligned} \phi(\alpha, \beta) &= -\int (Z_\alpha d\alpha + Z_\beta d\beta) \\ &= -\frac{2\varepsilon}{K} \left(\frac{1}{\alpha} + \frac{1}{\beta} \right) + 2 \log(\alpha\beta) - 2\alpha\beta. \end{aligned} \quad (10.7.25)$$

Следовательно,

$$P_s(\alpha, \beta) = (\alpha\beta)^{-2} \exp \left[2\alpha\beta + \frac{2\varepsilon}{K} \left(\frac{1}{\alpha} + \frac{1}{\beta} \right) \right]. \quad (10.7.26)$$

Для этого стационарного распределения единственно приемлемыми контурами являются контуры C, C' , которые независимым образом лежат в плоскостях α и β и охватывают существенные сингулярности в точках $\alpha = 0$ и $\beta = 0$.

Потенциальное решение такого типа чрезвычайно полезно, и его нельзя получить из P -представления Глаубера — Сударшана. Моменты этого распределения легко получить при помощи формулы

$$\iint d\alpha d\beta \beta^m \alpha^n (\alpha\beta)^{-2} \exp \left[2\alpha\beta + \frac{2\varepsilon}{K} \left(\frac{1}{\alpha} + \frac{1}{\beta} \right) \right]. \quad (10.7.27)$$

Если мы разложим $\exp(2\alpha\beta)$ в степенной ряд и выполним почленное контурное интегрирование, то получим выражение для моментов в виде ряда

$$\langle (a^+)^m a^n \rangle = \sum_{r=0}^{\infty} \frac{\left(\frac{2\varepsilon}{K} \right)^{n+m-2r-2} 2^r}{r!(n-r-1)!(m-r-1)!}, \quad (10.7.28)$$

который легко вычисляется.

Используя положительное P -представление, получаем стохастическое дифференциальное уравнение

$$\begin{bmatrix} d\alpha \\ d\beta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \varepsilon - K\alpha^2\beta \\ \varepsilon - K\alpha\beta^2 \end{bmatrix} dt + i\sqrt{K} \begin{bmatrix} \alpha dW_1(t) \\ \beta dW_2(t) \end{bmatrix}. \quad (10.7.29)$$

Следует отметить, что это уравнение не содержит какого-либо заметного малого параметра, связанного с шумом. Однако, полагая

$$\begin{aligned} K &= \tilde{K}/\varepsilon^2 \\ \alpha &= \tilde{\alpha}\varepsilon \\ \beta &= \tilde{\beta}\varepsilon, \end{aligned} \tag{10.7.30}$$

можно рассмотреть случай сильного возмущающего поля. При этом

$$\begin{bmatrix} d\tilde{\alpha} \\ d\tilde{\beta} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 - \tilde{K}\tilde{\alpha}^2\tilde{\beta} \\ 1 - \tilde{K}\tilde{\alpha}\tilde{\beta}^2 \end{bmatrix} dt + i \frac{\sqrt{K}}{\varepsilon} \begin{bmatrix} \tilde{\alpha} dW_1(t) \\ \tilde{\beta} dW_2(t) \end{bmatrix}. \tag{10.7.31}$$

В пределе сильного возмущающего поля и малой нелинейности, полезном для практических ситуаций, мы можем линеаризовать указанные уравнения, считая шум малым.

ГЛАВА I

- 1.1. *Rayleigh Lord*, 1891. [Phil. Mag., **32**, Scientific Papers III, 473 (1902)]
- 1.2. *Einstein A.*, Ann. Phys. (Leipzig), **14**, 549 (1905). [Имеется перевод: *Эйнштейн А.* О движении взвешенных в покоящейся жидкости частиц, требуемом молекулярно-кинетической теорией теплоты. — В кн.: *Эйнштейн А., Смолуховский М.* Брауновское движение. — М. — Л.: ОНТИ, 1936, с. 13—27].
- 1.3. *von Smoluchowski M.*, Ann Phys. (Leipzig), **21**, 756 (1906). [Имеется перевод: *Смолуховский М.* К кинетической теории брауновского молекулярного движения и суспензий. — В кн.: *Эйнштейн А., Смолуховский М.* Брауновское движение. — М. — Л., ОНТИ, 1936, с. 133—165.]
- 1.4. *Langevin P.*, Comptes. Rendues, **146**, 530 (1908). [Имеется перевод: *Ланжевэн П.* О теории броуновского движения. — В кн.: *Ланжевэн П.* Избранные труды. — М.: Изд-во АН СССР, 1960, с. 338—341.]
- 1.5. *von Smoluchowski M.*, Phys. Z., **16**, 321 (1915); **17**, 557, 585 (1916). [Имеется перевод: *Смолуховский М.* Три доклада о диффузии, брауновском молекулярном движении и коагуляции коллоидных частиц. — В кн.: *Эйнштейн А., Смолуховский М.* Брауновское движение. — М. — Л.: ОНТИ, 1936, с. 332—416.]
- 1.6. *Berne B. J., Pecora R.*, Dynamic Light Scattering (Wiley, New York 1976).
- 1.7. *Lotka A. J.*, Elements of Physical Biology (Williams and Wilkins, Baltimore 1925). [Переиздано под названием «Elements of Mathematical Biology», Dover 1956.]
- 1.8. *Volterra V.*, Mem. Acad. Lincei, **2**, 31—113 (1926).
- 1.9. *Rice S. O.*, Bell Syst. Tech. J., **23**, 282 (1944); **24**, 46 (1945).
- 1.10. *Schottky W.*, Ann. Phys. (Leipzig), **57**, 541 (1918).
- 1.11. *Taylor G. G.*, Proc. London Math. Soc., **22**, 196 (1920).
- 1.12. *Wiener N.*, Acta Math., **55**, 117 (1930).
- 1.13. *Khinchin A.*, Math. Annalen, **109**, 604 (1934). [Имеется перевод *Хинчин А. Я.*, Теория корреляции стационарных стохастических процессов. — УМН, 1938, т 5, № 2, с. 42.]
- 1.14. *Johnson J. B.*, Phys. Rev., **32**, 97 (1928).
- 1.15. *Nyquist H.*, Phys. Rev., **32**, 110 (1928).
- 1.16. *Huffaker C. G.*, Hilgardia, **27**, 343—383 (1958).
- 1.17. *Hassell M. P.*, The Dynamics of Arthropod Predator-Prey Systems, Monographs in Population Biology, No. 13 (Princeton University Press, Princeton 1978).
- 1.18*. *Эйнштейн А., Смолуховский М.* Броуновское движение: Сб. переводов под ред. Б. И. Давыдова. — М. — Л.: ОНТИ, 1936. (Здесь имеется перевод на русский язык статей [1.2—5] и др.)

¹⁾ Номерами со звездочками отмечена литература, добавленная при переводе. — *Прим. ред.*

- 1.19*. *Ornstein L. S., Zernike F.*, Proc. Amsterdam, **21**, 109, 1014 (1919). (Важная статья по теории броуновского движения.)
- 1.20*. *Рытов С. М.* Введение в статистическую радиофизику. — М.: Наука, 1976, ч. 1.
- 1.21*. *Ахманов С. А., Дьяков Ю. Е., Чиркин А. С.* Введение в статистическую радиофизику и оптику. — М.: Наука, 1981. (В учебных пособиях [1.20*, 21*] доказана формула Найквиста, рассмотрены дробовые шумы, а также много других вопросов.)

ГЛАВА 2

- 2.1. *Feller W.*, An Introduction to Probability Theory and Its Applications, 2nd ed., Vol. II (Wiley, New York 1974). [Имеется перевод 3-го издания: *Феллер В.* Введение в теорию вероятностей и ее приложения. В 2-х томах. — М.: Мир, 1984.]
- 2.2. *Papoulis A.*, Probability, Random Variables, and Stochastic Processes (McGraw-Hill, New York 1965).
- 2.3. *Kolmogorov A. N.*, Foundations of the Theory of Probability (Chelsea, New York 1950). [Оригинал на немецком языке издан в 1933. Имеется перевод: *Колмогоров А. Н.* Основные понятия теории вероятностей. — М. — Л.: ОНТИ, 1936.]
- 2.4. *Стратонович Р. Л.* Избранные вопросы теории флуктуаций в радиотехнике. — М.: Сов. радио, 1961.
- 2.5. *Гнеденко Б. В.* Курс теории вероятностей. — М.: Наука, 1969.
- 2.6. *Meeron E.*, J. Chem. Phys., **27**, 1238 (1957).
- 2.7. *van Kampen N. G.*, Physica, **74**, 215 (1973); **74**, 239 (1973).
- 2.8. *Marcienkiewicz J.*, Math. Z., **44**, 612 (1939).
- 2.9. *Rajagopal A. K., Sudarshan E. C. G.*, Phys. Rev., **A10**, 1852 (1974).

ГЛАВА 3

- 3.1. *Haake F.*, Springer Tracts in Modern Physics, Vol. 66 (Springer, Berlin, Heidelberg, New York 1973).
- 3.2. *Гихман И. И., Скороход А. В.*, Теория случайных процессов. В 3-х томах. — М.: Наука, 1971, 1973, 1975.
- 3.3. (Ссылка [3.2], т. 2.)
- 3.4. *Feller W.*, Ann. Math., **55**, 227—246 (1952).
- 3.5. *Uhlenbeck G. E., Ornstein L. S.*, Phys. Rev., **36**, 823 (1930).
- 3.6. *Papoulis A.*, Probability, Random Variables, and Stochastic Processes (McGraw-Hill, New York 1965).
- 3.7*. *von Smoluchowski M.*, Bull. intern. de l'Ac. de Sciences de Cracovie, **A**, 418—434 (1913).
- 3.8*. *von Smoluchowski M.* Ann. Phys., **48**, 1103—1112 (1915). (В статьях [3.7*, 8*] впервые записано уравнение Чепмена — Колмогорова; их перевод имеется в сб. [1.18*].)

ГЛАВА 4

- 4.1. *Гихман И. И., Скороход А. В.*, Стохастические дифференциальные уравнения. — Киев, Наукова думка, 1968.
- 4.2. *Стратонович Р. Л.*, Избранные вопросы теории флуктуаций в радиотехнике. — М.: Советское радио, 1961.
- 4.3. *Arnold L.*, Stochastic Differential Equations (Wiley-Interscience, New York 1974).

- 4.4. *Kubo R.*, In: Stochastic Processes in Chemical Physics, ed. by K. E. Shuler (Wiley-Interscience, New York 1969).
- 4.5. *van Kampen N. G.*, Phys. Rept., **24C**, 171—228 (1976).

ГЛАВА 5

- 5.1. *Fokker A. D.*, Ann. Phys. (Leipzig), **43**, 310 (1915).
- 5.2. *Planck M.*, Sitzungsber. Preuss. Akad. Wiss. Phys. Math. Kl., **325** (1917).
- 5.3. *Kolmogorov A. N.*, Math. Ann., **104**, 415—418 (1931).
- 5.4. *Feller W.*, Ann. Math., **55**, 227—246 (1952).
- 5.5. *Bharucha-Reid A. T.*, Elements of the Theory of Markov Processes and Their Application (McGraw-Hill, New York 1960). [Имеется перевод: *Баруча-Рид А.* Элементы теории марковских процессов и их приложения. — М.: Наука, 1969.]
- 5.6. *Erdelyi A.*, Bateman Manuscript Project, Vols. 1—3 (McGraw-Hill, New York 1953).
- 5.7. *van Kampen N. G.*, Physica, **23**, 707 (1957); **23**, 816 (1957).
- 5.8. *Uhlhorn U.*, Ark. Fys., **17**, 361 (1960).
- 5.9. *Graham R.*, *Haken H.*, Z. Phys., **243**, 289—302 (1971).
- 5.10. *Kramers H. A.*, Physica, **7**, 284 (1940).
- 5.11. *Onsager L.*, Phys. Rev., **37**, 405 (1931).
- 5.12. *Casimir H. B. G.*, Rev. Mod. Phys., **17**, 343 (1945).
- 5.13*. *Стратонович Р. Л.* Нелинейная неравновесная термодинамика. — М.: Наука, 1985. [Здесь с общих позиций выводятся соотношения Онсагера — Казимира и марковское флуктуационно-диссипационное соотношение, а также рассмотрены формула Найквиста и другие флуктуационно-диссипационные соотношения.]

ГЛАВА 6

- 6.1. *Haken H.*, Synergetics. An Introduction, 2nd ed. (Springer, Berlin, Heidelberg, New York 1978). [Имеется перевод: *Хакен Г.* Синергетика. — М.: Мир, 1980.]
- 6.2. *Brinkman H. C.*, Physica, **22**, 29 (1956).
- 6.3. *Стратонович Р. Л.*, Избранные вопросы теории флюктуаций в радиотехнике. М.: — Советское радио, 1961.
- 6.4. *Wilemski G.*, J. Stat. Phys., **14**, 153—170 (1976).
- 6.5. *Titulaer U. M.*, Physica, **91A**, 321—344 (1978).
- 6.6. *Papanicolauou G. C.*, In Modern Modelling of Continuum Phenomena, Lecture Notes in Applied Maths., Vol. 16 (Am., Math. Soc., Providence RI 1977), p. 109.
- 6.7. *Papanicolauou G. C.*, *Kohler W.*, Comm. Pure Appl. Math., **27**, 641—668 (1974).
- 6.8. *Graham R.*, *Tel T.*, J. Stat. Phys., **35**, 729 (1984).
- 6.9. *Graham R.*, *Tel T.*, Phys. Rev., **A31**, 1109 (1985).
- 6.10. *Beals R.*, *Protopescu V.*, J. Stat. Phys., **36**, 293 (1984).
- 6.11. *Selinger J. V.*, *Titulaer U. M.*, J. Stat. Phys., **36**, 293 (1984).
- 6.12. *Titulaer U. M.*, J. Stat. Phys., **37**, 589 (1985).
- 6.13*. *Хакен Г.* Синергетика: иерархии неустойчивостей в самоорганизующихся системах и устройствах. — М.: Мир, 1985.

ГЛАВА 7

- 7.1. *Matheson I.*, *Walls D. F.*, *Gardiner C. W.*, J. Stat. Phys., **12**, 21 (1975); *Janssen H. K.*, Z. Phys., **260**, 67 (1974).
- 7.2. *van Kampen N. G.*, Can. J. Phys., **39**, 551—567 (1961).

- 7.3. *Kramers H. A.*, *Physica*, **7**, 284 (1940).
- 7.4. *Moyal J. E.*, *J. R. Stat. Soc.*, **11**, 151—210 (1949).
- 7.5. *Einstein A.*, *Ann. Phys. (Leipzig)*, 549 (1905). [Имеется перевод в кн.: *Альберт Эйнштейн. Собрание научных трудов.* — М.: Наука, 1967, т. III, с. 108.]
- 7.6. *Kurtz T. G.*, *J. Chem. Phys.*, **50**, 460 (1969).
- 7.7. *Karlin S., Taylor H. M.*, *A First Course in Stochastic Processes*, 2nd ed. (Academic Press, New York 1975).
- 7.8. *Haken H.*, *Synergetics. An Introduction*, 2nd ed., (Springer, Berlin, Heidelberg, New York 1978) [Имеется перевод: *Хакен Г. Синергетика* — М.: Мир, 1980.]
- 7.9. *Schnakenberg J.*, *Rev. Mod. Phys.*, **48**, 571—586 (1976); *Thermodynamic Network Analysis of Biological Systems*, 2nd ed. (Springer, Berlin, Heidelberg, New York 1981).
- 7.10. *Gardiner C. W., Chaturvedi S.*, *J. Stat. Phys.*, **17**, 429—468 (1977); **18**, 501—522 (1978).
- 7.11. *Bernard W., Callen H. B.*, *Rev. Mod. Phys.*, **31**, 1017 (1959); *Phys. Rev.*, **118**, 1466 (1960).
- 7.12. *Hochberg K.*, *Ann. Probab.*, **3**, 433—458 (1978).
- 7.13. *van Kampen N. G.*, *Adv. Chem. Phys.*, **34**, 245—309 (1976).
- 7.14*. *Николис Г., Пригожин И.* Самоорганизация в неравновесных системах. — М.: Мир, 1979. [Здесь имеется много примеров скачкообразных процессов для случаев химических реакций и биологических систем; приведены решения соответствующих уравнений.]

ГЛАВА 8

- 8.1. *Curtain R. F.*, *Stochastic Partial Differential Equations.* — In: *Stochastic Nonlinear Systems*, ed. by L. Arnold, R. Lefever (Springer, Berlin, Heidelberg, New York 1981).
- 8.2. *Keizer J.*, *J. Chem. Phys.*, **64**, 1679—1687 (1976).
- 8.3. *Nicolis G.*, *J. Stat. Phys.*, **6**, 195 (1972).
- 8.4. *Schlögl F.*, *Z. Phys.*, **253**, 147 (1972).
- 8.5. *Arnold L.*, *Consistency of Models of Chemical Reactions.* — In: *Dynamics of Synergetic Systems*, ed. by H. Haken (Springer, Berlin, Heidelberg, New York 1980).
- 8.6. *van Kampen N. G.*, *Fluctuations in Continuous Systems.* — In: *Topics in Statistical Mechanics and Biophysics*, ed. by R. A. Piccirelli (Am. Inst. of Physics, 1976).
- 8.7. *van den Broek C., Horsthemke W., Malek-Mansour M.*, *Physica* **89A**, 339—352 (1977);
Brenig L., van den Broek C., *Phys. Rev.*, **21A**, 1039 (1980).
- 8.8. *Grad H.*, *Principles of Kinetic Theory of Gases.* — In: *Handbuch der Physik*, Vol. 12, ed. by S. Flügge (Springer, Berlin, Göttingen, Heidelberg 1958).
- 8.9. *Gardiner C. W., Steyn-Ross M. L.*, *Phys. Rev.*, **29A**, 2823 (1984).

ГЛАВА 9

- 9.1. *Abramowitz M., Stegun I.*, *Handbook of Mathematical Functions* (Dover, New York 1964, 1965). [Имеется перевод: *Справочник по специальным функциям с формулами, графиками и математическими таблицами/Под ред. М. Абрамовица, И. Стиган/Пер. с англ. (Issued June, 1964) и под ред. В. А. Диткина, Л. Н. Кармазиной.* — М.: Наука, 1979.]

- 9.2. *Kramers H. A.*, *Physica*, **7**, 284 (1940).
- 9.3. Обзор ситуации дан в приложении к статье: *Buttiker M.*, *Landauer R.*, Transport and Fluctuations in Linear Arrays of Multistable Systems. — In: *Nonlinear Phenomena at Phase Transitions and Instabilities*, ed. by T. Riste (Plenum Press, New York, London 1982).
- 9.4. *Eyring H.*, *J. Chem. Phys.*, **3**, 1935 (1935).
- 9.5. *Hawley S. A.*, *Biochem.*, **10**, 2436 (1971);
Hawley S. A., *Mitchell R. M.*, *Biochem.*, **14**, 3257 (1975).
- 9.6. *Langer J. S.*, *Ann. Phys.*, N. Y., **54**, 258 (1969);
Landauer R., *Swanson J. A.*, *Phys. Rev.*, **121**, 1668 (1961).
- 9.7. *Schuss Z.*, *S.I.A.M. Rev.*, **22**, 119 (1980);
Matkowsky B. J., *Schuss Z.*, *S.I.A.M.J. Appl. Math.*, **33**, 365 (1977).
- 9.8. *Ventsel A. D.*, *Freidlin M. I.*, *Russian. Math. Surveys*, **25**, 1 (1970).
- 9.9*. *Bez W.*, *Talkner P.*, *Phys. Lett.*, **82A**, 313 (1981).

ГЛАВА 10

- 10.1. *Glauber R. J.*, *Phys. Rev.*, **130**, 2529 (1963); **131**, 2766 (1963).
- 10.2. *Sudarshan E. C. G.*, *Phys. Rev. Lett.*, **10**, 277 (1963).
- 10.3. *Klauder J. R.*, *Sudarshan E. C. G.*, *Fundamentals of Quantum Optics* (*Benjamin*, New York 1970). [Имеется перевод: *Клаудер Дж.*, *Сударшан Э.* Основы квантовой оптики. — М.: Мир, 1970.]
- 10.4. *Glauber R. J.*, In: *Quantum Optics*, ed. by S. Kay, A. Maitland (*Academic Press*, New York 1970).
- 10.5. *Louisell W.*, In: *Quantum Optics*, ed. by S. Kay, A. Maitland (*Academic Press*, New York 1970); *Quantum Statistical Properties of Radiation* (*Wiley*, New York 1974). [См. также: *Люиселл У.* Излучение и шумы в квантовой электронике. — М.: Наука, 1972.]
- 10.6. *Carmichael H. J.*, *Walls D. F.*, *J. Phys.*, **B9**, 1199 (1976).
- 10.7. *Einstein A.*, *Phys. Z.*, **18**, 121 (1917).
- 10.8. *Lax M.*, *Phys. Rev.*, **172**, 350 (1968).
- 10.9. *Drummond P. D.*, *Gardiner C. W.*, *J. Phys.*, **A13**, 2353—2368 (1980).
- 10.10*. *Кадашов Л.*, *Бейм Г.* Квантовая статистическая механика. — М.: ИЛ, 1964.
- 10.11*. *Гришанин Б. А.* Квантовая электродинамика для радиофизиков. — М.: изд-во МГУ, 1981. (Здесь имеется другой вывод квантового управляющего уравнения. Квантовые марковские процессы обсуждаются также в [5.13*].)

Литература с комментариями

Agarwal G. S., Quantum Statistical Theories of Spontaneous Emission and their Relation to Other Approaches. Springer Tracts in Modern Physics, vol. 70 (Springer, Berlin, Heidelberg, New York 1974).

Приведены хорошие примеры практического использования квантовых марковских процессов.

Arnold L., Stochastic Differential Equations: Theory and Applications (Wiley, New York 1974).

Авторитетная математическая монография по стохастическим дифференциальным уравнениям. Дает строгое и удобопонятное изложение теории стохастических дифференциальных уравнений.

Arnold L., Lefever R. (eds.), Stochastic Nonlinear Systems (Springer, Berlin, Heidelberg, New York 1981).

Обзор современного состояния прикладных стохастических методов, рассматривающий наиболее важные области их применения.

Bharucha-Reid A. T., Elements of the Theory of Markov Processes and their Applications (McGraw-Hill, New York 1960). [Имеется перевод: *Баруча-Рид А.* Элементы теории марковских процессов и их приложения. — М.: Наука, 1969.]

Полезная с точки зрения приложений монография, охватывающая популяционную биологию, ядерные процессы, астрономию, химию, теорию очередей. Дается много точных решений для моделей, аппроксимирующих реальные системы.

Cox D. R., Miller H. D., The Theory of Stochastic Processes (Methuen, London 1965).

Книга написана в лучших английских традициях. Легко читается и ориентирована более на приложения в статистике нежели в естественных науках.

Feller W., An Introduction to Probability Theory and its Applications, vol. II, 2nd ed. (Wiley, New York 1971).

Очень интересная и даже увлекательная книга, посвященная в основном фундаментальным вопросам стохастических процессов, написана одним из создателей этого научного направления. Приложениям уделяется не особенно много внимания, однако для специалиста по прикладным проблемам книга послужит напоминанием о красоте математического аппарата.

Гихман И. И., Скороход А. В. Стохастические дифференциальные уравнения. — Киев: Наукова думка, 1968.

Фундаментальная монография советских ученых, которая читается не без труда, но оправдывает затраченные на ее изучение силы. Почти все марковские, а также некоторые немарковские процессы рассматриваются здесь с точки зрения теории стохастических дифференциальных уравнений.

Гихман И. И., Скороход А. В. Теория случайных процессов. — Киев: Наукова думка, т. 1 (1971), т. 2 (1973), т. 3 (1975).

Очень основательный, строгий и объемный труд. Упор здесь делается не на приложения, но эта работа является наиболее современным строгим изложением теории. При некотором напряжении доступна для нематематиков.

Goel N. S., Richter-Dyn N., Stochastic Models in Biology (Academic Press, New York 1974).

Прикладная монография, посвященная в основном процессам рождения и гибели в биологии популяций. Используются некоторые приближенные методы.

Graham R., Statistical Theory of Instabilities in Stationary Nonequilibrium Systems with Applications to Lasers and Non Linear Optics. Springer Tracts in Modern Physics, vol. 66 (Springer, Berlin, Heidelberg, New York 1973).

Приложения стохастических методов к квантово-оптическим и другим нелинейным системам.

Haake F., Statistical Treatment of Open Systems by Generalised Master Equations. Springer Tracts in Modern Physics, vol. 66 (Springer, Berlin, Heidelberg, New York 1973).

Дается удобное для физика изложение метода проекционных операторов.

Haken H., Laser Theory (Band XXV/2c of Handbuch der Physik, ed. by L. Genzel) (Springer, Berlin, Heidelberg, New York 1970).

Глубокое исследование в области квантовой оптики, содержащее много интересных для специалиста подробностей. Рассматриваются подходы к квантовым марковским процессам, отличные от использованных в настоящей книге. Подробно рассматриваются P -представления и другие квантово-классические соответствия.

Haken H., Synergetics. An Introduction, 2nd ed., (Springer, Berlin, Heidelberg, New York 1978). [Имеется перевод: *Хакен Г.* Синергетика. — М.: Мир, 1980.]

Эта книга является признанным руководством по приложению теории случайных процессов к широкому классу кооперативных явлений. Приводится много как элементарных, так и более сложных примеров.

Hänggi P., Thomas H., Stochastic Processes: Time Evolution, Symmetries and Linear Response (Physics Reports, **88**, 207—319, 1982).

Обзор приложений теории случайных процессов в физике. Рассматриваются немарковские процессы.

Karlin S., Taylor H. M., A First Course in Stochastic Processes, 2nd ed. (Academic Press, New York 1975).

Вполне доступная математическая монография с большим числом разработанных примеров. Много внимания уделяется марковским цепям и скачкообразным процессам.

Lax M., Classical Noise. I: Rev. Mod. Phys., **32**, 25 (1960); II: Phys. Chem. Solids, **14**, 248 (1960) (соавтор *P. Mengert*); III: Rev. Mod. Phys., **38**, 359 (1966); IV: Rev. Mod. Phys., **38**, 541 (1966).

Пионерская работа, в которой рассматриваются приложения стохастических методов к физическим системам прежде всего в физике твердого тела.

Kay S. M., Maitland A. (eds.), Quantum Optics. Proceedings of Scottish Universities Summer School (Academic Press, New York 1970).

Классический сборник по применению квантовых марковских систем в том виде, в каком они использовались, когда квантовая оптика только оформилась как самостоятельная дисциплина. Особенно полезны статьи Глаубера, Хакена и Люиселла.

Louisell W. Radiation and Noise in Quantum Electronics (McGraw-Hill, New York 1964).

Первое систематическое исследование в области квантовой электроники. Книга ориентирована прежде всего на специалистов по электронной технике и не содержит сведений по квантовым управляющим уравнениям.

Louisell W. Quantum Statistical Properties of Radiation (Wiley, New York 1974).

Содержатся все необходимые сведения по приложению марковских методов в квантовой оптике. По сути, эта книга является вторым изданием более ранней работы.

Nicolis G., Prigogine I. Self Organization in Nonequilibrium Systems (Wiley, New York 1977). [Имеется перевод: *Николис Г., Пригожин И. Самоорганизация в неравновесных системах. — М.: Мир, 1979.*]

Посвященная в основном вопросам самоорганизации, эта книга содержит ясный и полезный обзор стохастических методов, используемых Пригожиным и его учениками. Книгу можно настоятельно рекомендовать как современный источник по приложениям стохастических методов к реакционно-диффузионным системам и неравновесным термодинамическим системам.

Oppenheim I., Shuler K. E., Weiss G. H. Stochastic Methods in Chemical Physics — the Master Equation (MIT Press, Cambridge 1977).

Книга содержит краткое введение в стохастические методы, за которым следует чрезвычайно интересная и полезная подборка статей по данному вопросу, включающая и работы Цванцига, в которых впервые используются проекционные методы.

Papoulis A. Probability, Random Variables, and Stochastic Processes (McGraw-Hill, New York 1965).

Прекрасное руководство для знакомства с практичными и достаточно строгими вероятностными методами. Практические приложения относятся, главным образом, к электротехнике.

Risken H., The Fokker Planck Equation (Springer, Berlin, Heidelberg, New York 1984).

Весьма полное исследование методов решения и применения уравнения Фоккера — Планка. Содержит исследование движения в периодическом потенциале и много материала, обычно не включаемого в менее специальные издания.

Стратонович Р. Л. Избранные вопросы теории флуктуации в радиотехнике. — М.: Советское радио, 1961.

Монография, в которой дано концентрированное изложение стохастических методов применительно к радиотехнике. Содержится много красивых результатов, изложенных в характерном для автора ясном стиле. Стохастические дифференциальные уравнения

рассматриваются как предельный случай реальных процессов. Одна из фундаментальных книг по прикладным аспектам стохастических дифференциальных уравнений.

van Kampen N. G., *Stochastic Processes in Physics and Chemistry* (North-Holland, Amsterdam, New York, Oxford 1981).

Книга посвящена приложению стохастических методов к химическим и физическим процессам. В точном и ясном изложении особое внимание уделяется условиям применимости приближений, обычно используемых в решении физических и химических задач.

Wax N. *Selected Papers on Noise and Stochastic Processes* (Dover, New York 1954).

Фундаментальный исторический обзор, содержащий оригинальную работу Уленбека и Орнштейна по броуновскому движению, классическую работу Чандрасекара¹⁾, а также ряд других, ставших классическими, работ.

¹⁾ См.: *Чандрасекар С.* *Стохастические проблемы в физике и астрономии.* — М.: ИЛ, 1947. — *Прим. перев.*

Предметный указатель

- Автокорреляционная матрица** стационарная 99
- Автокорреляционная функция** 37, 91
- — выраженная через собственные функции 176
 - — для марковского процесса 98—100
 - — при учете детального баланса 196
- Аддитивные инварианты** 407
- Адиабатическое исключение** быстрых переменных 247
- — в квантовом случае 468
 - — неоднородных мод в системах с реакциями и диффузией 398—401
- Аксиомы теории вероятностей** 47
- Аррениуса формула** 187
- Баргмана** состояния, определение 454
- Бейкера—Хаусдорфа** формула 465
- Бернулли** испытания 71
- распределение 107
- Бистабильная система**, интерпретация с помощью трех состояний 424
- — установление квазиравновесия 421
 - — химическая 298—303
- Бистабильность** 414
- в системах со многими переменными 431
- Больцмана** управляющее уравнение 368, 406—410
- — — получение уравнения *Больцмана* 408
 - — — разложение по обратному размеру системы 407, 411
- Броуновская частица** 25
- Броуновское движение** 20
- — в потенциале с двумя ямами 441—448
 - — и адиабатическое исключение 247
 - — непрерывность реализаций 76
 - — поправки к уравнению *Смолуховского* 260—264
 - — уравнение *Крамерса* 203
- Ван Кампена** разложение по обратному размеру системы 308
- Вектор сносов**, определение 83
- Вероятность** 46
- априорная 48
 - выхода частицы за границу в потенциале с двумя ямами 425
 - перехода 30
 - поток, определение 162
 - расщепленная в потенциале с двумя ямами 418
 - совместная 50
 - условная 51
- Вигнера** представление 490
- Винера—Хинчина** теорема 39
- Винеровский процесс** 101—105
- — автокорреляционная функция 105

- — как предел случайных блужда-
ний 108
- — недифференцируемость реализа-
ций 103
- — независимость приращений 104
- — нерегулярность реализаций 103
- — собственные функции 177
- Вольтерры—Лотки* система см. Си-
стема хищник—жертва 29
- Время достижения границ, перехода
через границу 186
- корреляций 43, 91
- релаксаций, зависимость от засе-
ленности пика 425—426
- Вязкость 25

- Гармонический осциллятор без зату-
хания при внешнем воздействии
450
- — квантовая теория 450
- — определение 450
- — при внешнем воздействии в
P-представлении 462
- — при воздействии флуктуирую-
щего поля 477
- — с затуханием при воздействии
поля 476, 477

Гаусса распределение 64—66

Гипотеза масштабной инвариантно-
сти для аппроксимации управляю-
щего уравнения 303

- Граничные условия для процессов
рождения—гибели 316—318
- — для уравнения *Крамерса* 258,
259
- — — — *Смолуховского* 259, 260
- — для УФП в местах разрыва не-
прерывности 165
- — — — в случае многих перемен-
ных 192
- — — — на бесконечности 167
- — — — отражающие 164
- — — — поглощающие 164
- — для УФП обратного 173

- — — — — отражающие 174
- — — — — поглощающие 173, 174

Двухуровневый атом, временные
корреляции 489

— — при наличии внешнего воздей-
ствия 478—482

Детальный баланс 194

— — для управляющего уравнения
рождения—гибели 293—295

— — определение 194

— — при диффузии 374

— — условия для 198, 199

Детерминированный процесс 84

Дисперсия 30

Диффузия в поле силы тяжести 170

— коэффициент 22

— определение потока 369

— при неоднородности и анизотро-
пии 375

— уравнение 23

— флуктуационное дифференциаль-
ное уравнение в частных производ-
ных 378

Достижение границ и переход через
границу 114

Зависящие от времени пуассоновские
решения некоторого класса управ-
ляющих уравнений 298

Закон больших чисел 57

Инвариантность относительно обра-
щения времени 197

Ито стохастический интеграл, опре-
деление 122

— — — свойства 127—131

— формула, вывод 135

Когерентные состояния, определение
452

— — пуассоновское распределение
для числа квантов 456

- Когерентные состояния, разложение оператора 455
 — — разложение произвольного состояния 454
 — — свойства 452—457
- Комбинаторная кинетика, определение 321
- Коммутационные соотношения 449
- Корреляции гладких функций от операторов термостата 467
 — поведение при неустойчивости 392
 — пространственно-временные 386
 — пространственные 382—397
- Корреляционная длина 389
- Корреляционная функция временная см. Автокорреляционная функция
- Корреляционные функции временные для двухуровневого атома 488, 489
 — — — для квантовых марковских процессов 482—489
 — — — и квантовый гармонический осциллятор 485—488
 — — — и P -представление 485
 — — определение 61
 — — термостата 467
- Корреляция 57
- Крамерса* метод для задач о достижении границ 422—426
 — — для многомерного случая 439—441
 — — уравнение 203
- Крамерса—Мойала* разложение в случае управляющего уравнения *Больцмана* 407, 411
 — — — — — — рождения—гибели 326—327
 — — и разложение по обратному размеру системы 309
 — — определение 307
- Критическое замедление 316
- Кумулянт 60—64
 — факториальный 67
- Кумулянтная производящая функция 61
 — — — факториальная 67
- Курца* теорема 313
 — — и разложение по обратному размеру системы 313
- Лагерра* полиномы 181
- Ланжевена* уравнение 25, 34, 117—120
- Лапласа* преобразование и адиабатическое исключение 253
- Линдберга* условие 65, 75
- Лиувилля* операторы, определение 469
 — уравнение 84
 — — квантовое 460
- Маркова* процесс 70—116
 — — автокорреляции 98—100
 — — квантовый 449
 — — — вывод 465—473
 — — непрерывный, определение 75
 — — однородный 92
 — — — определение 88, 89
 — — определение 71
 — — стационарный 449
 — — условие (постулат) 24, 30, 71
- Матрица диффузионная, определение 83
 — корреляционная 57
 — плотности 457—459
 — — свойства 458, 459
 — спектральная при наличии детального баланса 197
- Метастабильность 414
- Микроскопическая обратимость 207
- Многовременные средние в квантовом случае 472
- Множества нулевой вероятности 55
- Множество событий 45, 46
- Момент 57
- Найквиста* формула 40—44
- Независимость 27, 53
- Неймана* уравнение 459
- Нелинейный поглотитель 497

- Непрерывность стохастических процессов 73—75
 Неупреждающая функция, определение 124
 Неустойчивое состояние, распад 420
- Обратное управляющее уравнение и время достижения границ 318**
Онсагера соотношения 208—214
 Оператор проектирования, соответствующий адиабатическому ис-
 ключению 250, 251
 — рождения 450
 — уничтожения 450
Орнштейна—Уленбека процесс, вре-
 менная корреляционная матрица
 для стационарного состояния 154
 — — — — — функция 111
 — — — время выхода из области R
 220
 — — — в случае разложения по ма-
 лому шуму для СДУ 230
 — — — зависящий от времени 158
 — — — и квантовый гармонический
 осциллятор 475
 — — — и соотношения *Онсагера* 210
 — — — СДУ 148, 149
 — — — — со многими переменными
 151—155
 — — — собственные функции 179
 — — — спектральная матрица 154
 — — — стационарная дисперсия 153
 — — — — в случае двух перемен-
 ных 154
 — — — стационарное распределение
 170
 Осциллятор с флуктуирующей частотой 146
- Паули* матрицы, определение 478
 Плотность распределения вероятностей 54
 Подчинение тихое 280
 — шумное 281
- Потенциал с двумя ямами 185
 — — — диффузия 415—421
 Потенциальный барьер, переход
 184—187
 Почти наверное 55
 Предел в среднеквадратичном 68
 — — — при определении стохастиче-
 ского интеграла 122
 — по вероятности 68
 — по распределению 69
 — последовательности случайных пе-
 ременных 67
 — почти наверное 68
 Представление взаимодействия 472
 — — и двухуровневый атом при
 внешнем воздействии 479
P-представление *Глаубера—Сударшана*
 460—462, 491
 — — операторные соответствия 460
 — комплексное, определение 491
 — — операторные тождества 496
 — обобщенное 489—502
 — — и уравнения эволюции 497—502
 — — определение 491
 — — положительное, определение 492
 — — операторные тождества 496
 — теорема существования 492—496
Q-представление 490
R-представление 490
 Принцип подчинения 250
 Проблемы расходимости для нели-
 нейных систем с реакциями и диф-
 фузией 396
 Производящая функция 33
 — — для уравнения рождения—ги-
 бели 333, 334
 — — для распределения *Пуассона* 66
 — — моментов 59
Пуассона представление 292, 338—367
 — — в системе с реакциями и диф-
 фузией 381, 382
 — — действительное, определение
 343
 — — и временные корреляционные
 функции 351—358

- Пуассона* представление и мономолекулярные реакции 340
 — — и управляющее уравнение Больцмана 409, 413
 — — комплексное, определение 343
 — — положительное, определение 347—351
 — — связь с обобщенным *P*-представлением 495
 — — распределение 33, 66, 67
 — — релаксация в системе с реакциями и диффузией 384—386
- Размер системы 291
 Рассеяние лазерного излучения 27
 Реализация непрерывная 24, 73—75
- Свойства эргодичности и стационарные процессы 89
 СДУ см. Стохастическое дифференциальное уравнение
 Сепаратриса 436, 448
 — алгебра 46
 Система хищник—жертва 28
 — — — химическое УФП 268—273
 — с реакциями и диффузией 368
 — — — — фазовый переход второго рода 393
 — — — — — флуктуационные дифференциальные уравнения в частных производных 480
 Системы рождения—гибели, случай многих переменных 321
 Случайная величина 49
 — — гауссова 64
 Случайные блуждания 105—109
 — — приближенное описание уравнением *Фоккера—Планка* 304
 — — величины, независимые 53
 — — — и характеристическая функция 59
 — — — и центральная предельная теорема 65
 Случайный процесс диффузионный 83
 — — — аппроксимация скачкообразным процессом 303—307
 — — *Коши* 76
 — — определение 70
 — — *Пуассона* 33, 109—111
 — — рэлеевский 190, 194
 — — — собственные функции 180
 — — рождения—гибели 28
 — — — для потока 403—406
 — — сепарабельный 70
 — — скачкообразный 82
 — — стационарный, приближение 93—98
 — — телеграфный 115—116
 — — — и двухуровневый атом при наличии внешнего воздействия 481, 482
 — — третьего порядка 236
Смолуховского уравнение 249, 250
 — — для диффузии в потенциале с двумя ямами 422
 — — и задача о переходе через потенциальный барьер 445
 — — определение 249, 256
 — — поправки 260—264
 — — уточненное 263
 — — — и задача о достижении границ 445
 Собственные функции для УФП, вариационный принцип 218
 — — и автокорреляционная матрица 218
 — — и время достижения границ 222
 — — и матричная спектральная плотность 218
 — — и условная вероятность 176, 218
 Событие 45
 Спектральная плотность 37
 — — равномерная 41
 Среднее значение 54, 56
 Среднеквадратичное отклонение 57
 Статистическая механика 25
 Стационарность 40
 Стационарные системы 39

- Столкновения и потоки 410—413
 — управляющее уравнение *Больцмана* 406—410
 Стохастический интеграл, определение 98
 Стохастическое дифференциальное уравнение 25, 26, 35, 36, 117
 — — — в частных производных 371
 — — — зависимость решений от начальных условий 143
 — — — — от параметров 143
 — — — и положительное представление Пуассона 349—351
 — — — линейное 155—157
 — — — — для одной переменной 155
 — — — — со многими переменными 157
 — — — определение и свойства 132—144
 — — — при стремлении цветного шума к белому 264—273
 — — — разложение по малому шуму 230—239
 — — — связь с УФП 136
 — — — *Стратоновича* 139
 — — — — как предел стремления недельтакоррелированного воздействия к дельтакоррелированному 264—273
 — — — — определение и связь с СДУ *Ито* 139—141
Стратоновича стохастический интеграл 124

 Теорема регрессии 99
 — — квантовая 484, 485
 Термостат, определение 466
 Тримолекулярная реакция как предел бимолекулярной реакции 358—363

 Управляющее уравнение 82, 291
 — — аппроксимация уравнением *Фоккера—Планка* 303

 — — в случае многих переменных 321
 — — — — — для системы с диффузией 373, 374
 — — — — — разложение *Крамерса—Мойала* 326
 — — в фазовом пространстве 401
 — — диффузии, непрерывная форма 374—379
 — — — разложение по обратному размеру системы 375
 — — квантовое, вывод 468—473
 — — — определение 472
 — — — для гармонического осциллятора 473—477
 — — описывающее реакции и диффузию 480
 — — — — — разложение по обратному размеру системы 380
 — — разложение по обратному размеру системы 308—316
 — — рождения—гибели 30, 34
 — — — — для квантового гармонического осциллятора 473
 — — — — для одной переменной 292
 — — — — и бистабильность 429—431
 — — — — разложение по обратному размеру системы 326
 — — случай одной переменной, стационарное решение 293—295
 — — среднее время достижения границ 318—321
 — — стационарные решения без учета детального баланса 325
 Усреднение по ансамблю 39
 УФП см. *Фоккера—Планка* уравнение

Феноменологическая сила 210
Феноменологический поток 210
Флуктации критические 314
 — — и разложение по обратному размеру системы 314

- Флуктуации локальные и глобальные 389
 Флуктуационно-диссипационная теорема, применение 211
 Фоккера—Планка уравнение 160
 — — — в комплексном P -представлении 498
 — — — — — условие потенциальности 500—502
 — — — в положительном P -представлении 498—500
 — — — в P -представлении 476, 496
 — — — вариационный принцип для собственных функций 217
 — — — граница входная 166
 — — — естественная 166
 — — — разложение по малому шуму 239
 — — — с одной переменной
 — — — — — потенциальное решение 168, 169
 — — — — — собственные функции 174—181
 — — — — — среднее время достижения границ 183
 — — — со многими переменными, собственные функции 214
 — — — — — стационарные решения 193, 194
 — — — — — условие потенциальности 193
 — — — стационарное распределение, асимптотический метод 246
 — — — химическое 326
- Жакена** модель 278
 Хаос 19
 Характеристическая функция 59
 — — гауссова распределения 64
 — — и моменты 59
 — — квантовая 464, 465
 Химическая реакция
 $A + 2X \rightleftharpoons 3X$, $A \rightleftharpoons X$ 365
 — — управляющее уравнение 298, 299
 — — в представлении Пуассона 358, 359
 $A + X \rightarrow 2X + D$, $B + X \rightleftharpoons C$, решение управляющего уравнения 334—336
 $A + X \rightleftharpoons 2X$, $B + X \rightleftharpoons C$, комплексное представление Пуассона 344—346
 — — положительное представление Пуассона 350
 — — пространственно-распределенная 393—397
 — — решение в представлении Пуассона 340—343
 $A + Y \rightleftharpoons X + Y$, $Y \rightleftharpoons 2X$, исключение промежуточного соединения 359—363
 $B + X \rightleftharpoons C$, $A + X \rightleftharpoons 2X$, пространственно-распределенная 38 — 393
 $B \rightarrow X$, $2X \rightarrow A$ и положительное представление Пуассона 350, 351
 — — комплексное представление Пуассона 346, 347
 $B \rightleftharpoons X$, $A + X \rightarrow 2X$, аналогия, с гармоническим осциллятором 474
 $X + A \rightleftharpoons 2X$, УФП 171
 — — химическое 327—333
 $X \rightleftharpoons A$ и разложение по обратному размеру системы 310
 — управляющее уравнение 295
 $X \rightleftharpoons Y$, как система с реакциями и диффузией 382—386
 $X \rightleftharpoons Y \rightleftharpoons A$ 273
 — химическое УФП 327—333
 $X_1 \rightleftharpoons 2X_2$, уравнение реакции с диффузией 381
 $X_1 \rightleftharpoons X_2$, решение управляющего уравнения 337, 338
 в системе хищник—жертва, УФП 328—333
 исключение короткоживущих промежуточных продуктов 273
 мономолекулярная 340

- нелокальная 397
 связь между локальным и глобальным описанием 398—402
- Химические реакции, теория переходного состояния 424
- Химическое уравнение реакции с диффузией 370
- Химотрипсиноген, обратимая денатурация 426
- Центральная предельная теорема 65
- Чепмена—Колмогорова* уравнение 24, 72, 73
 — — — дифференциальное 76—82
 — — — — обратное 87
- Шредингера* уравнение 451
- Шум 31
 — белый 40—44, 117—120
 — — как предел цветного шума 264
 — дробовой 32
 — тепловой 40—44
 — третьего порядка 359
 — — — определение 363, 364
- Эйнштейна* уравнение и двухуровневый атом 481
- Эргодичность 39
- Эрмита* полиномы 179
 — — при адиабатическом исключении 255

Оглавление

Предисловие редактора перевода	5
Предисловие редактора серии «Синергетика»	8
Предисловие к 2-му изданию	9
Предисловие к 1-му изданию	10
Список обозначений	15
1. ВВЕДЕНИЕ	19
1.1. Предыстория вопроса	19
1.2. Некоторые примеры	20
1.2.1. Броуновское движение	20
1.2.2. Уравнение Ланжевена	25
1.3. Процессы рождения — гибели	28
1.4. Шум в радиоэлектронных устройствах	31
1.4.1. Дробовой шум	32
1.4.2. Автокорреляционные функции и спектральные плотности ..	37
1.4.3. Фурье-анализ случайных функций: стационарные системы ..	39
1.4.4. Тепловой шум и теорема Найквиста	40
2. ПОНЯТИЯ ТЕОРИИ ВЕРОЯТНОСТЕЙ	45
2.1. События и множества событий	45
2.2. Вероятности	46
2.2.1. Вероятностные аксиомы	47
2.2.2. Смысл $P(A)$	47
2.2.3. Смысл аксиом	48
2.2.4. Случайные переменные	49
2.3. Совместные и условные вероятности. Независимость	50
2.3.1. Совместные вероятности	50
2.3.2. Условные вероятности	51
2.3.3. Соотношения между совместными вероятностями различ-	
ных порядков	52
2.3.4. Независимость	53
2.4. Средние значения и плотности вероятности	54
2.4.1. Определение плотности вероятности через средние значе-	
ния произвольных функций	55
2.4.2. Множества нулевой вероятности	55
2.5. Средние	56
2.5.1. Моменты и корреляции	57
2.5.2. Закон больших чисел	57
2.6. Характеристическая функция	59
2.7. Производящая функция кумулянтов: корреляционные функции и ку-	
мулянты	60
2.7.1. Пример: кумулянт 4-го порядка $\langle\langle X_1 X_2 X_3 X_4 \rangle\rangle$	62
2.7.2. Значимость кумулянтов	63
2.8. Гауссовское и пуассоновское распределение вероятностей	64
2.8.1. Гауссовское распределение	64
2.8.2. Центральная предельная теорема	65
2.8.3. Пуассоновское распределение	66

2.9.	Пределы последовательностей случайных переменных	67
2.9.1.	Предел почти наверное	68
2.9.2.	Предел в среднеквадратичном	68
2.9.3.	Стохастический предел, или предел по вероятности	68
2.9.4.	Предел по распределению	69
2.9.5.	Взаимосвязь различных пределов	69
3.	МАРКОВСКИЕ ПРОЦЕССЫ	70
3.1.	Стохастические процессы	70
3.2.	Марковский процесс	71
3.2.1.	Согласованность. Уравнение Чепмена — Колмогорова	72
3.2.2.	Дискретное пространство состояний	73
3.2.3.	Более общие меры	73
3.3.	Понятие непрерывности для стохастических процессов	73
3.3.1.	Математическое определение непрерывного марковского процесса	75
3.4.	Дифференциальное уравнение Чепмена — Колмогорова	76
3.4.1.	Вывод дифференциального уравнения Чепмена — Колмогорова	78
3.4.2.	Статус дифференциального уравнения Чепмена — Колмогорова	81
3.5.	Интерпретация условий и результатов	82
3.5.1.	Скачкообразные процессы. Управляющее уравнение	82
3.5.2.	Диффузионные процессы. Уравнение Фоккера — Планка	83
3.5.3.	Детерминированные процессы. Уравнения Лиувилля	84
3.5.4.	Процессы общего вида	86
3.6.	Уравнения, описывающие изменение вероятностей при изменении начального времени. Обратные уравнения	87
3.7.	Стационарные и однородные марковские процессы	88
3.7.1.	Эргодические свойства стационарного процесса	89
3.7.2.	Однородные процессы	92
3.7.3.	Приближение к стационарному процессу	93
3.7.4.	Автокорреляционная функция марковских процессов	98
3.8.	Примеры марковских процессов	101
3.8.1.	Винеровский процесс	101
3.8.2.	Одномерные случайные блуждания	105
3.8.3.	Пуассоновский процесс	109
3.8.4.	Процесс Орнштейна — Уленбека	111
3.8.5.	Случайный телеграфный процесс	115
4.	РАСЧЕТЫ МЕТОДОМ ИТО И СТОХАСТИЧЕСКИЕ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ	118
4.1.	Обоснования	118
4.2.	Стохастическое интегрирование	120
4.2.1.	Определение стохастического интеграла	120
4.2.2.	Пример $\int_{t_0}^t W(t')dW(t')$	122
4.2.3.	Интеграл Стратоновича	124
4.2.4.	Неупреждающие функции	124
4.2.5.	Доказательство того, что $dW(t)^2 = dt$ и $dW(t)^{2+N} = 0$	125

4.2.6.	Свойства стохастического интеграла Ито	127
4.3.	Стохастические дифференциальные уравнения (СДУ)	132
4.3.1.	Стохастическое дифференциальное уравнение Ито. Определе- ление	132
4.3.2.	Марковское свойство решения стохастического дифферен- циального уравнения Ито	135
4.3.3.	Замена переменных. Формула Ито	135
4.3.4.	Связь между уравнением Фоккера — Планка и стохастиче- ским дифференциальным уравнением	136
4.3.5.	Системы с несколькими переменными	137
4.3.6.	Стохастическое дифференциальное уравнение Стратоно- вича	139
4.3.7.	Зависимость решений от начальных условий и параметров	143
4.4.	Примеры и решения	144
4.4.1.	Коэффициенты, не зависящие от x	144
4.4.2.	Мультипликативный линейный белый шум	145
4.4.3.	Комплексный осциллятор с шумящей частотой	146
4.4.4.	Процесс Орнштейна — Уленбека	148
4.4.5.	Переход от декартовых координат к полярным	149
4.4.6.	Процесс Орнштейна — Уленбека для случая многих пере- менных	151
4.4.7.	Общее линейное уравнение для одной переменной	155
4.4.8.	Линейные уравнения для многих переменных	157
4.4.9.	Процесс Орнштейна — Уленбека, зависящий от времени ..	158
5.	УРАВНЕНИЕ ФОККЕРА — ПЛАНКА	160
5.1.	Общие замечания	160
5.2.	Уравнение Фоккера — Планка в одномерном случае	161
5.2.1.	Граничные условия	162
5.2.2.	Стационарные решения однородных уравнений Фоккера — Планка	168
5.2.3.	Примеры стационарных решений	170
5.2.4.	Граничные условия для обратного уравнения Фоккера — Планка	173
5.2.5.	Методы собственных функций (однородные процессы)	174
5.2.6.	Примеры	177
5.2.7.	Время достижения границы для случая однородных про- цессов	181
5.2.8.	Вероятность достижения того или иного конца интервала ..	187
5.3.	Уравнения Фоккера — Планка в многомерном случае	189
5.3.1.	Замена переменных	190
5.3.2.	Граничные условия	192
5.3.3.	Стационарные решения: потенциальные условия	193
5.3.4.	Детальный баланс	194
5.3.5.	Следствия детального баланса	197
5.3.6.	Примеры детального баланса в уравнениях Фоккера — Планка	203
5.3.7.	Методы собственных функций для случая многих перемен- ных. Однородные процессы	214
5.4.	Время первого достижения границы области (однородные процессы)	219

5.4.1.	Решения задач, связанных с достижением границ	221
5.4.2.	Распределение точек выхода	224

6. ПРИБЛИЖЕННЫЕ МЕТОДЫ ДЛЯ ДИФФУЗИОННЫХ ПРОЦЕССОВ 227

6.1.	Теории возмущений, основанные на малости шума	227
6.2.	Разложения по малому шуму для стохастических дифференциальных уравнений	230
6.2.1.	Пределы применимости разложения	233
6.2.2.	Стационарные решения (однородные процессы)	234
6.2.3.	Среднее значение, дисперсия и временная корреляционная функция	235
6.2.4.	Сложности теории возмущений для малого шума	236
6.3.	Разложение по малому шуму для уравнения Фоккера — Планка	239
6.3.1.	Уравнения для моментов и автокорреляционных функций	241
6.3.2.	Пример	244
6.3.3.	Асимптотический метод для стационарного распределения	246
6.4.	Адиабатическое исключение быстрых переменных	247
6.4.1.	Абстрактная формулировка на языке операторов и проекций	250
6.4.2.	Решение с использованием преобразования Лапласа	253
6.4.3.	Поведение на малых временных масштабах	256
6.4.4.	Граничные условия	258
6.4.5.	Систематический анализ в рамках теории возмущений	260
6.5.	Белый шум как предельный случай коррелированного процесса	264
6.5.1.	Общность результата	269
6.5.2.	Более общие флуктуационные уравнения	270
6.5.3.	Системы, неоднородные во времени	271
6.5.4.	Учет зависимости L_1 от времени	272
6.6.	Адиабатическое исключение быстрых переменных: общий случай	273
6.6.1.	Пример: исключение короткоживущих промежуточных продуктов химической реакции	273
6.6.2.	Адиабатическое исключение в модели Хакена	278
6.6.3.	Адиабатическое исключение быстрых переменных: нелинейный случай	283
6.6.4.	Пример с произвольной нелинейной связью	288

7. УПРАВЛЯЮЩИЕ УРАВНЕНИЯ И СКАЧКООБРАЗНЫЕ ПРОЦЕССЫ ... 291

7.1.	Управляющие уравнения рождения — гибели: одномерный случай	292
7.1.1.	Стационарные решения	293
7.1.2.	Пример: химическая реакция $X \rightleftharpoons A$	295
7.1.3.	Химическая бистабильная система	298
7.2.	Приближенное представление управляющих уравнений уравнениями Фоккера — Планка	303
7.2.1.	Приближение диффузионного процесса скачкообразным процессом	303
7.2.2.	Разложение Крамера — Мойала	307
7.2.3.	Разложение ван Кампена по обратному размеру системы [7.2]	308
7.2.4.	Теорема Курца	313

7.2.5.	Критические флуктуации	314
7.3.	Граничные условия для процессов рождения — гибели	316
7.4.	Среднее время достижения границы	318
7.4.1.	Вероятность поглощения	320
7.4.2.	Сравнение с уравнением Фоккера — Планка	320
7.5.	Многомерные системы рождения — гибели	321
7.5.1.	Стационарные решения при наличии детального баланса ...	323
7.5.2.	Стационарные решения в отсутствие детального баланса (решение Кирхгофа)	325
7.5.3.	Разложение по обратному размеру системы и аналогичные разложения	326
7.6.	Некоторые примеры	327
7.6.1.	$X + A \rightleftharpoons 2X$	327
7.6.2.	$X \xrightleftharpoons[k]{\gamma} Y \xrightleftharpoons[\gamma]{k} A$	327
7.6.3.	Система хищник — жертва	328
7.6.4.	Уравнения для производящих функций	333
7.7.	Представление Пуассона [7.10]	338
7.7.1.	Разновидности представлений Пуассона	343
7.7.2.	Действительные представления Пуассона	343
7.7.3.	Комплексные представления Пуассона	343
7.7.4.	Положительное представление Пуассона	347
7.7.5.	Временные корреляционные функции	351
7.7.6.	Тримолекулярные реакции	358
7.7.7.	Шум третьего порядка	363
8.	ПРОСТРАНСТВЕННО-РАСПРЕДЕЛЕННЫЕ СИСТЕМЫ	368
8.1.	Общие замечания	368
8.1.1.	Функциональные уравнения Фоккера — Планка	371
8.2.	Описание при помощи многомерного управляющего уравнения	373
8.2.1.	Диффузия	373
8.2.2.	Управляющее уравнение диффузии в континуальной форме	374
8.2.3.	Совместное рассмотрение химических реакций и диффузии	380
8.2.4.	Метод представления Пуассона	381
8.3.	Пространственные и временные корреляционные структуры	382
8.3.1.	Реакция $X \xrightleftharpoons[k_2]{k_1} Y$	382
8.3.2.	Реакция $B + X \xrightleftharpoons[k_3]{k_1} C, A + X \xrightleftharpoons[k_2]{k_2} 2X$	387
8.3.3.	Нелинейная модель с фазовым переходом второго рода ...	393
8.4.	Связь между локальным и глобальным описаниями	398
8.4.1.	Явное адиабатическое исключение неоднородных мод	398
8.5.	Управляющее уравнение в фазовом пространстве	401
8.5.1.	Назависимое движение молекул и соответствующий ему поток вероятности	402
8.5.2.	Поток как процесс рождения — гибели	403
8.5.3.	Введение столкновений. Управляющее уравнение Больц- мана	406
8.5.4.	Совместное рассмотрение потока и столкновений	410

9.	БИСТАБИЛЬНОСТЬ, МЕТАСТАБИЛЬНОСТЬ И ПРОБЛЕМЫ ПЕРЕХОДА ИЗ ОДНОЙ ФАЗЫ В ДРУГУЮ	414
9.1.	Диффузия в случае потенциала с двумя ямами (одна переменная)	415
9.1.1.	Поведение системы в случае $D = 0$	415
9.1.2.	Поведение системы при очень малых значениях D	416
9.1.3.	Время достижения границы	417
9.1.4.	Расщепленная вероятность	418
9.1.5.	Распад неустойчивого состояния	420
9.2.	Установление равновесия заселенностей каждой потенциальной ямы	421
9.2.1.	Метод Крамерса	426
9.2.2.	Пример: обратимая денатурация химотрипсиногена	426
9.2.3.	Бистабильность, описываемая управляющим уравнением для процессов рождения — гибели (случай одной переменной)	429
9.3.	Бистабильность в системах со многими переменными	431
9.3.1.	Распределение точек достижения границы	432
9.3.2.	Асимптотический анализ среднего времени достижения границы	437
9.3.3.	Метод Крамерса для случая нескольких измерений	439
9.3.4.	Пример. Броуновское движение в потенциале с двумя ямами	441
10.	КВАНТОВОМЕХАНИЧЕСКИЕ МАРКОВСКИЕ ПРОЦЕССЫ	449
10.1.	Квантовомеханическая теория гармонического осциллятора	450
10.1.1.	Взаимодействие с внешним полем	451
10.1.2.	Свойства когерентных состояний	452
10.2.	Матрица плотности и распределения вероятностей	457
10.2.1.	Уравнение Неймана	459
10.2.2.	P -представление Глаубера — Сударшана	460
10.2.3.	Операторное соответствие	461
10.2.4.	Применение к возмущенному гармоническому осциллятору	462
10.2.5.	Квантовая характеристическая функция	464
10.3.	Квантовые марковские процессы	465
10.3.1.	Термостат	466
10.3.2.	Корреляция гладких функций от операторов термостата	467
10.3.3.	Квантовое управляющее уравнение для системы, взаимодействующей с термостатом	468
10.4.	Примеры и приложения квантовых марковских процессов	473
10.4.1.	Гармонический осциллятор	473
10.4.2.	Действие возмущения на атом с двумя энергетическими уровнями	478
10.5.	Временные корреляционные функции квантовых марковских процессов	482
10.5.1.	Квантовая теорема регрессии	484
10.5.2.	Применение к гармоническому осциллятору в P -представлении	485
10.5.3.	Временные корреляторы для двухуровневого атома	488
10.6.	Обобщенные P -представления	489

10.6.1.	Определение обобщенного P -представления	491
10.6.2.	Теоремы существования	492
10.6.3.	Связь с представлением Пуассона	495
10.6.4.	Операторные тождества	495
10.7.	Применение обобщенных P -представлений к уравнениям эволюции во времени	497
10.7.1.	Комплексное P -представление	498
10.7.2.	Положительное P -представление	498
10.7.3.	Пример	500
Литература		503
Литература с комментариями		508
Предметный указатель		512

Учебное издание

Криспин В. Гарднер

СТОХАСТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ В ЕСТЕСТВЕННЫХ НАУКАХ