

Teet Örd

Stohhastiliste protssside teooria füüsikutele



TARTU ÜLIKOOL
kirjastus

1632

Stohhastiliste protsesside teooria füüsikutele

Teet Örd



1632

TARTU ÜLIKOOL
kirjastus

Teet Örd
Stohhastiliste protsesside teooria füüsikutele

Tartu Ülikool 2022

Kaane kujundus: Kalle Paalits

Õpiku väljaandmist on toetanud Tartu Ülikool

ISBN 978-9916-27-078-3 (pdf)

Autoriõigus: Teet Örd, 2022

Tartu Ülikooli Kirjastus
www.tyk.ee

Eessõna

Käesoleva õpiku aluseks on füüsika eriala üliõpilastele rohkem kui kümne aasta jookul juhuslike protsesside kohta peetud loengute käigus kuju omandanud konspekt.

Õpikus püütakse anda kompaktne teadmiste miinimum stohhastiliste protsesside teooriast, mis peaks kuuluma füüsika baasharidusse laiemas mõttes ning millele tuginedes on võimalik vastavalt vajadusele edasi liikuda konkreetsete ülesannete lahendamisele. Komplitseeritud süsteemide modelleerimine juhuslike protsessidena mängib olulist rolli erinevates füüsika harudes. Vastavad teoreetilised meetodid leiavad rakendamist näiteks fluktuatsioonide ja kineetiliste nähtuste kirjeldamisel kondenseeritud aines. Kuid rakendused ulatuvad oluliselt ka väljapoole füüsikat sellistesse valdkondadesse nagu materjaliteadus, keemia, bioloogia, ökoloogia, neuroloogia, maandusteadus jm.

Autori eesmärgiks on pakkuda esmane ülevaade stohhastiliste protsesside teooria kontseptsioonidest ja meetoditest. Keskseks lähenemisviisiks on Fokkeri-Plancki võrrandi ja stohhastiliste diferentsiaalvõrrandite kasutamine. Esitatakse materjal on liigendatud neljaks peatükiks.

Kaks esimest peatükki on mõeldud eelkõige ettevalmistuseks järgnevatele. Neis defineeritakse põhimõisted ning esitatakse põhiseosed ja kontseptsioonid, mida edaspidi kasutatakse. Ühtlasi formuleeritakse teises peatükis diferentsiaalne Chapmani-Kolmogorovi võrrand ja kineetika põhivõrrand ning seotakse viimane pöördumatute protsesside kirjeldamisega.

Kolmas peatükk on pühendatud Fokkeri-Plancki võrrandile ja selle omadustele. Alustatakse siin üldisemalt, tuletades Kramersi-Moyali reaksarendus ja pöördreaksarendus, ning jõutakse siis erijuhtudena Fokkeri-Plancki võrrandini ja pöördvõrrandini. Fokkeri-Plancki võrrandi alusel analüüsitakse Wieneri protsessi ja Ornstein-Uhlenbecki protsessi. Lahendatakse ka piirkonnast esmakordse väljumise ja ääre esmakordselt läbimise ülesanded.

Neljandas peatükis uuritakse Browni liikumise erinevaid aspekte, kasutades Langevini võrrandit ja Fokkeri-Plancki võrrandit.

Tartu, 2022

Autor

Sisukord

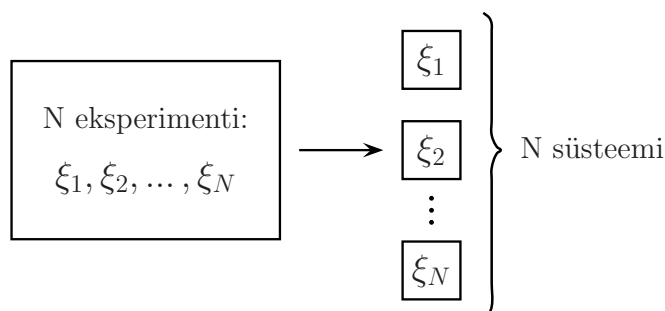
1	Juhuslike suuruste kirjeldamine	7
1.1	Tõenäosustihedus ja keskmistamine üle ansambli	7
1.2	Juhusliku suuruse momendid ja karakteristiklik funktsioon	9
1.3	Kumulandid	10
1.4	Mitu juhuslikku suurust	12
1.5	Tinglik tõenäosustihedus	15
1.6	Juhuslike suuruste korrelatsioonid	16
1.7	Gaussi jaotus	17
2	Juhuslike protsesside kirjeldamine	23
2.1	Ajast sõltuv juhuslik suurus	23
2.2	Statsionaarne juhuslik protsess	25
2.3	Juhuslike protsesside klassifikatsioon	25
2.4	Mitu ajast sõltuvat juhuslikku suurust	27
2.5	Juhuslike suuruste ajaline korrelatsioon	28
2.6	Fluktuatsioonide Fourier' esitus	29
2.7	Wieneri-Khinchini teoreem	31
2.8	Valge ja värviline müra	31
2.9	Gaussi protsess	33
2.10	Chapmani-Kolmogorovi võrrand	33
2.11	Kineetika põhivõrrand (<i>master equation</i>)	34
2.12	Detailne tasakaal	37
2.13	Ajas homogeenne Markovi protsess	38
2.14	Kineetika põhivõrrand ja pöördumatu protsess	39
3	Fokkeri-Plancki võrrand	43
3.1	Kramersi-Moyali reaksarendus	43
3.2	Kramersi-Moyali pöördreaksarendus	46
3.3	Pawula teoreem	47
3.4	Genereerimis- ja rekombinatsiooniprotsessid (ühesammulised protsessid)	50
3.5	Sünni ja surma protsess	54
3.6	Poissoni protsess	55

3.7	Fokkeri-Plancki võrrand ja pöördvõrrand	56
3.8	Fokkeri-Plancki võrrand ja pidevuse võrrand	58
3.9	Ääritingimused Fokkeri-Plancki võrrandi jaoks	60
3.10	Ääritingimused Fokkeri-Plancki pöördvõrrandi jaoks	63
3.11	Wieneri protsess	65
3.12	Ornsteini-Uhlenbecki protsess	68
3.13	Esmakordne väljumine piirkonnast	72
3.14	Ääre esmakordne läbimine	77
4	Browni liikumine ja Langevini võrrand	79
4.1	Langevini võrrand vaba Browni osakese jaoks	79
4.2	Vaba Browni osakese kiirus	81
4.3	Vaba Browni osakese koordinaat	84
4.4	Langevini võrrandi seosed Markovi protsessiga	88
4.5	Vaba Browni osakese kiiruse spektraalne tihedus	89
4.6	Fokkeri-Plancki võrrand vaba Browni osakese kiiruse jaoks	91
4.7	Vaba Browni osakese kiiruse statsionaarne tõenäosusjaotus	93
4.8	Fokkeri-Plancki võrrand vaba Browni osakese koordinaadi jaoks	94
4.9	Ülesumbunud Browni liikumine	95
4.10	Vabade Browni osakeste difusioon	98
4.11	Browni liikumine deterministlikus jõuväljas. Kramersi võrrand	99
4.12	Kramersi võrrandi statsionaarne lahend	103
4.13	Harmoonilise ostsillaatori Browni liikumine	105
4.14	Ostsillaatori fluktuatsioonide spektraalsed tihedused	106
4.15	Elektriline võnkekontuur ja Nyquisti valem	107
4.16	Ülesumbunud Browni liikumine deterministlikus jõuväljas	109
4.17	Potentsiaalbarjääri ületamine	111

1. Juhuslike suuruste kirjeldamine

1.1 Tõenäosustihedus ja keskmistamine üle ansambli

Olgu ξ mingi suurus. Me nimetame suurust *juhuslikuks*, kui tema mõõtmisel saadavad väärtused ei ole üheselt ennustatavad. Tähistame juhusliku suuruse ξ ühesugustel tingimustel tehtud mõõtmiste tulemusi $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N$. Need väärtused võivad olla nii pidevad kui ka diskreetsed. Toome sisse N identsest süsteemist koosneva *statistilise ansambli*, kus iga süsteemiga viiakse läbi üks mõõtmine, vt joonis 1.1.



Joonis 1.1. Statistilise ansambli sissetoomine.

Juhusliku suuruse ξ statistilised omadused on täielikult määratud *tõenäosustihedusega* $W_\xi(x)$. Viimane on defineeritud nagu tuletis

$$W_\xi(x) = \frac{dP_\xi(x)}{dx}, \quad (1.1.1)$$

kus $P_\xi(x)$ on tõenäosus selleks, et juhusliku suuruse väärtus $\xi \leq x$. Eeldame praegu, et x on pidev muutuja, st ξ on pidevalt muutuv juhuslik suurus. Tõenäosus $P_\xi(x)$ avaldub

$$P_\xi(x) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\nu_\xi(x)}{N}, \quad (1.1.2)$$

kus $\nu_\xi(x)$ on selliste süsteemide arv ansamblis, kus $\xi \leq x$. Diferentsiaal

$$dP_\xi(x) = P_\xi(x + dx) - P_\xi(x) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\nu_\xi(x + dx) - \nu_\xi(x)}{N} \quad (1.1.3)$$

annab tõenäosuse selleks, et $x \leq \xi \leq x + dx$. Kasutades Heaviside'i funktsiooni

$$\Theta(x) = \begin{cases} 1, & \text{kui } x \geq 0 \\ 0, & \text{kui } x < 0, \end{cases} \quad (1.1.4)$$

võime kirjutada

$$P_\xi(x) = \lim_{N \rightarrow \infty} N^{-1} \sum_{j=1}^N \Theta(x - \xi_j). \quad (1.1.5)$$

Olgu $f(\xi)$ mingi juhusliku suuruse ξ funktsioon. Defineerime *funktsiooni* $f(\xi)$ keskväärtuse:

$$\langle f(\xi) \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} N^{-1} \sum_{j=1}^N f(\xi_j), \quad (1.1.6)$$

st me keskmistame üle ansambli. Valemitest (1.1.5) ja (1.1.6) järeldub, et

$$P_\xi(x) = \langle \Theta(x - \xi) \rangle. \quad (1.1.7)$$

Avaldistest (1.1.1) ja (1.1.7) saame tõenäosustiheduse jaoks

$$W_\xi(x) = \left\langle \frac{d}{dx} \Theta(x - \xi) \right\rangle.$$

Kuna

$$\frac{d\Theta(x)}{dx} = \delta(x),$$

kus $\delta(x)$ on Diraci δ -funktsioon, siis

$$W_\xi(x) = \langle \delta(x - \xi) \rangle. \quad (1.1.8)$$

Nagu juba öeldud, on juhusliku suuruse ξ statistilised omadused täielikult määratud tõenäosustihedusega. Pidades silmas, et

$$f(\xi) = \int f(x) \delta(x - \xi) dx, \quad (1.1.9)$$

kus integreeritakse üle juhusliku suuruse muutumispiirkonna, saame keskväärtuse jaoks

$$\langle f(\xi) \rangle = \int f(x) \langle \delta(x - \xi) \rangle dx.$$

Seega

$$\langle f(\xi) \rangle = \int f(x) W_\xi(x) dx. \quad (1.1.10)$$

Tõenäosustihedus rahuldab ilmselt normeerimistingimust

$$\int W_\xi(x) dx = 1. \quad (1.1.11)$$

Märgime veel, et kuigi me tõime tõenäosustiheduse sisse pidevalt muutuva juhusliku suuruse jaoks, võib valemist (1.1.10) ning tõenäosustiheduse mõistet üldse rakendada ka diskreetselt muutuva juhusliku suuruse korral, st kui

$$\xi = x_l, \quad l = 1, 2, \dots$$

Sellisel juhul

$$W_\xi(x) = \sum_l p_\xi(x_l) \delta(x - x_l), \quad (1.1.12)$$

kus $p_\xi(x_l)$ on *tõenäosus* selleks, et $\xi = x_l$. Asendades tõenäosustiheduse valemist (1.1.12) avaldisse (1.1.10), saame

$$\langle f(\xi) \rangle = \sum_l p_\xi(x_l) \int f(x) \delta(x - x_l) dx.$$

Seega on diskreetselt muutuva juhusliku suuruse funktsiooni keskvärtus määratud avaldisega

$$\langle f(\xi) \rangle = \sum_l p_\xi(x_l) f(x_l). \quad (1.1.13)$$

Ülesanded

Ülesanne 1.1.1. Näidake, et valemist (1.1.8) järedub tõenäosustiheduse normeerimistingimus (1.1.11).

Ülesanne 1.1.2. Näidake, et valemist (1.1.8) järedub tõenäosustiheduse avaldis (1.1.12).

1.2 Juhusliku suuruse momendid ja karakteristiklik funktsioon

Juhusliku suuruse ξ n -järku momendiks M_n nimetatakse ξ^n keskvärtust

$$M_n = \langle \xi^n \rangle. \quad (1.2.1)$$

Juhusliku suuruse ξ karakteristikuks funktsiooniks nimetatakse keskväärtust

$$C_\xi(u) = \langle e^{iu\xi} \rangle. \quad (1.2.2)$$

Juhusliku suuruse momendid saame me üles kirjutada karakteristikliku funktsiooni abil selliselt:

$$M_n = \left. \frac{d^n C_\xi(u)}{d(iu)^n} \right|_{u=0}. \quad (1.2.3)$$

Seega võib esitada karakteristikliku funktsiooni momentide kaudu Tayloriga reana

$$C_\xi(u) = \sum_{n=0}^{\infty} (iu)^n \frac{M_n}{n!}. \quad (1.2.4)$$

Järelikult, kui on teada juhusliku suuruse kõik momendid, siis on teada ka tema karakteristiklik funktsioon.

Kui juhusliku suuruse muutumispiirkonnaks on $-\infty \leq x \leq \infty$ ¹, siis definitsiooni (1.2.2) kohaselt

$$C_\xi(u) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{iux} W_\xi(x) dx. \quad (1.2.5)$$

Valem (1.2.5) kujutab endast tõenäosustiheduse Fourier' teisendust ning karakteristiklik funktsioon on seega tõenäosustiheduse Fourier' teisend. Fourier' pöördteisendus annab meile tõenäosustiheduse avaldise

$$W_\xi(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-iux} C_\xi(u) du. \quad (1.2.6)$$

1.3 Kumulandid

Juhusliku suuruse n -järku kumulant K_n defineeritakse seosega

$$C_\xi(u) = \exp \left(\sum_{n=0}^{\infty} (iu)^n \frac{K_n}{n!} \right). \quad (1.3.1)$$

Ehk teisiti,

$$\ln C_\xi(u) = \sum_{n=0}^{\infty} (iu)^n \frac{K_n}{n!}. \quad (1.3.2)$$

¹ Olukorras, kus juhusliku suuruse muutumispiirkond on kitsam, võib ikkagi valida integreerimisrajad nagu valemis (1.2.5), kuna väljaspool juhusliku suuruse muutumispiirkonda on tõenäosustihedus võrdne nulliga.

Valemist (1.3.2) võime avaldada

$$K_n = \left. \frac{d^n \ln C_\xi(u)}{d(iu)^n} \right|_{u=0}. \quad (1.3.3)$$

Seega on karakteristliku funktsiooni logaritmi Taylori rida määratud kumulantidega.

Valemist (1.3.3) koos avaldisega (1.2.4) järelduvad seosed kumulantide ja momentide vahel.² Viie esimese kumulandi jaoks on need sellised:

$$K_0 = 0, \quad (1.3.4)$$

$$K_1 = M_1, \quad (1.3.5)$$

$$K_2 = M_2 - M_1^2, \quad (1.3.6)$$

$$K_3 = M_3 - 3M_1M_2 + 2M_1^3, \quad (1.3.7)$$

$$K_4 = M_4 - 3M_2^2 - 4M_1M_3 + 12M_1^2M_2 - 6M_1^4. \quad (1.3.8)$$

Pöördseosed on järgmised:

$$M_0 = 1, \quad (1.3.9)$$

$$M_1 = K_1, \quad (1.3.10)$$

$$M_2 = K_2 + K_1^2, \quad (1.3.11)$$

$$M_3 = K_3 + 3K_1K_2 + K_1^3, \quad (1.3.12)$$

$$M_4 = K_4 + 3K_2^2 + 4K_1K_3 + 6K_1^2K_2 + K_1^4. \quad (1.3.13)$$

Üldkujul on kumulantide ja momentide vahelised seosed esitatavad teatava determinandina.

Valemitest (1.3.5) ja (1.3.6) on näha, et esimest järku kumulant võrdub juhusliku suuruse keskväärtusega ja teist järku kumulant – juhusliku suuruse ruutdispersiooniga³ :

$$K_1 = \langle \xi \rangle, \quad (1.3.15)$$

$$K_2 = \sigma_\xi^2. \quad (1.3.16)$$

² Vt [1] lk 17–18.

³ *Juhusliku suuruse ruutdispersiooniks* (edaspidi ka lihtsalt *dispersioon*) nimetatakse karakteristikut

$$\sigma_\xi^2 = \langle (\xi - \langle \xi \rangle)^2 \rangle = \langle \xi^2 \rangle - \langle \xi \rangle^2. \quad (1.3.14)$$

Ülesanded

Ülesanne 1.3.1. Näidake, et kumulantide jaoks kehtivad valemid (1.3.4)–(1.3.6).

Ülesanne 1.3.2. Olgu ξ determineeritud suurus. Leidke kumulandid.

1.4 Mitu juhuslikku suurust

Läheme üldisema juhu juurde, kui meil on tegemist mitme juhusliku suurusega ξ_1, \dots, ξ_r . Mõõtes neid suurusi N identsest süsteemist koosnevas ansambelis, saadakse väärtused

$$\xi_{j,1}, \dots, \xi_{j,N}, \quad j = 1, 2, \dots, r.$$

Olgu ξ_1, \dots, ξ_r pidevalt muutuvad juhuslikud suurused. Keskmistades üle ansambli, tuuakse sarnaselt valemiga (1.1.8) sisse *r-järku ühistõenäosustihedus*⁴

$$W_{\xi_1, \dots, \xi_r}(x_1, \dots, x_r) \equiv W_r(x_1, \dots, x_r) = \left\langle \prod_{j=1}^r \delta(x_j - \xi_j) \right\rangle. \quad (1.4.1)$$

Siin $W_r(x_1, \dots, x_r) dx_1 \dots dx_r$ on tõenäosus selleks, et juhuslike suuruste väärtused ξ_1, \dots, ξ_r oleksid vahemikes $x_1 \leq \xi_1 \leq x_1 + dx_1, \dots, x_r \leq \xi_r \leq x_r + dx_r$. Keskväertus $\langle f(\xi_1, \dots, \xi_r) \rangle$ saab tõenäosustiheduse (1.4.1) abil kuju

$$\langle f(\xi_1, \dots, \xi_r) \rangle = \int \dots \int f(x_1, \dots, x_r) W_r(x_1, \dots, x_r) dx_1 \dots dx_r. \quad (1.4.2)$$

Kasutades δ -funktsiooni tuntud omadust, järeldub valemist (1.4.1), et ühistõenäosustiheduse järku saab alandada integreerimise teel üle vastavate muutujate. Näiteks tõenäosustihedus $W_{\xi_1, \dots, \xi_{r-s}}$ on leitav tõenäosustihedusest W_{ξ_1, \dots, ξ_r} selliselt:

$$\begin{aligned} W_{\xi_1, \dots, \xi_{r-s}}(x_1, \dots, x_{r-s}) \\ = \int \dots \int W_r(x_1, \dots, x_{r-s}, x_{r-s+1}, \dots, x_r) dx_{r-s+1} \dots dx_r. \end{aligned} \quad (1.4.3)$$

Analoogselt ühe juhusliku suurusega defineeritakse *mitme juhusliku suuruse karakteristik funktsioon* keskväertusena

$$C_{\xi_1, \dots, \xi_r}(u_1, \dots, u_r) \equiv C_r(u_1, \dots, u_r) = \left\langle \exp \left(\sum_{j=1}^r i u_j \xi_j \right) \right\rangle. \quad (1.4.4)$$

⁴ Kui $r = 1$, siis nimetame seda tõenäosustihedust ka *üksiktõenäosustiheduseks*, mis oli toodud sisse juba punktis 1.1.

Kui juhuslike suuruste määramispiirkondadeks on $-\infty \leq x_j \leq \infty$, $j = 1, 2, \dots, r$, siis

$$\begin{aligned} & C_r(u_1, \dots, u_r) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(\sum_{j=1}^r iu_j x_j\right) W_r(x_1, \dots, x_r) dx_1 \dots dx_r. \end{aligned} \quad (1.4.5)$$

Valem (1.4.5) kujutab endast tõenäosustiheduse Fourier' teisendust. Pöördteisendus annab

$$\begin{aligned} & W_r(x_1, \dots, x_r) \\ &= (2\pi)^{-r} \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\sum_{j=1}^r iu_j x_j\right) C_r(u_1, \dots, u_r) du_1 \dots du_r. \end{aligned} \quad (1.4.6)$$

Mitme juhusliku suuruse segamomendiks nimetatakse keskväärtust

$$M_{n_1, \dots, n_r} = \left\langle \prod_{j=1}^r \xi_j^{n_j} \right\rangle. \quad (1.4.7)$$

Valemist (1.4.4) järeldub, et

$$M_{n_1, \dots, n_r} = \frac{\partial^{n_1}}{\partial (iu_1)^{n_1}} \dots \frac{\partial^{n_r}}{\partial (iu_r)^{n_r}} C_r(u_1, \dots, u_r) \Big|_{u_1 = \dots = u_r = 0}. \quad (1.4.8)$$

Seega on karakteristlik funktsioon esitatav momentide kaudu Tayloriga reana

$$C_r(u_1, \dots, u_r) = \sum_{n_1=0}^{\infty} \dots \sum_{n_r=0}^{\infty} M_{n_1, \dots, n_r} \frac{(iu_1)^{n_1}}{n_1!} \dots \frac{(iu_r)^{n_r}}{n_r!}. \quad (1.4.9)$$

Mitme juhusliku suuruse kumulant K_{n_1, \dots, n_r} defineeritakse seosega

$$C_r(u_1, \dots, u_r) = \exp\left(\sum_{n_1=0}^{\infty} \dots \sum_{n_r=0}^{\infty} K_{n_1, \dots, n_r} \frac{(iu_1)^{n_1}}{n_1!} \dots \frac{(iu_r)^{n_r}}{n_r!}\right). \quad (1.4.10)$$

Viimasest saab avaldada

$$K_{n_1, \dots, n_r} = \frac{\partial^{n_1}}{\partial (iu_1)^{n_1}} \dots \frac{\partial^{n_r}}{\partial (iu_r)^{n_r}} \ln C_r(u_1, \dots, u_r) \Big|_{u_1 = \dots = u_r = 0}. \quad (1.4.11)$$

Esimesed kumulandid tulevad järgmised:

$$K_{0_1, \dots, 0_r} = 0, \quad (1.4.12)$$

$$K_{0_1, \dots, 0_{j-1}, 1_j, 0_{j+1}, \dots, 0_r} = K_{1_j} = M_{1_j} = \langle \xi_j \rangle, \quad (1.4.13)$$

$$\begin{aligned} K_{0_1, \dots, 0_{j-1}, 1_j, 0_{j+1}, \dots, 0_{k-1}, 1_k, 0_{k+1}, \dots, 0_r} &= K_{1_j, 1_k} \\ &= M_{1_j, 1_k} - M_{1_j} M_{1_k} = \langle \xi_j \xi_k \rangle - \langle \xi_j \rangle \langle \xi_k \rangle, \end{aligned} \quad (1.4.14)$$

$$\begin{aligned} K_{0_1, \dots, 0_{j-1}, 1_j, 0_{j+1}, \dots, 0_{k-1}, 1_k, 0_{k+1}, \dots, 0_{l-1}, 1_l, 0_{l+1}, \dots, 0_r} \\ &= K_{1_j, 1_k, 1_l} \\ &= M_{1_j, 1_k, 1_l} - M_{1_j, 1_k} M_{1_l} - M_{1_k, 1_l} M_{1_j} - M_{1_j, 1_l} M_{1_k} + 2M_{1_j} M_{1_k} M_{1_l} \\ &= \langle \xi_j \xi_k \xi_l \rangle - \langle \xi_j \xi_k \rangle \langle \xi_l \rangle - \langle \xi_k \xi_l \rangle \langle \xi_j \rangle - \langle \xi_j \xi_l \rangle \langle \xi_k \rangle + 2\langle \xi_j \rangle \langle \xi_k \rangle \langle \xi_l \rangle. \end{aligned} \quad (1.4.15)$$

Siin võib indeksite j, k, l osas olla ka kokkulangevusi. Näiteks, kui $j = k$, siis valemi (1.4.15) alusel

$$\begin{aligned} K_{1_j, 1_j, 1_l} &= K_{2_j, 1_l} \\ &= M_{2_j, 1_l} - M_{2_j} M_{1_l} - M_{1_j, 1_l} M_{1_j} - M_{1_j, 1_l} M_{1_j} + 2M_{1_j}^2 M_{1_l} \\ &= \langle \xi_j^2 \xi_l \rangle - \langle \xi_j^2 \rangle \langle \xi_l \rangle - \langle \xi_j \xi_l \rangle \langle \xi_j \rangle - \langle \xi_j \xi_l \rangle \langle \xi_j \rangle + 2\langle \xi_j \rangle^2 \langle \xi_l \rangle. \end{aligned}$$

Kõrgemat järku ($n_1 + \dots + n_r \geq 4$) kumulantide jaoks on üldised avaldised juba üpris komplitseeritud.⁵

Kui juhuslike suuruste väärtused on diskreetsed,

$$\xi_j = x_{j, l_j}, \quad l_j = 1, 2, \dots, \quad j = 1, 2, \dots, r,$$

siis tõenäosustiheduse (1.1.12) üldistusena

$$\begin{aligned} W_r(x_1, \dots, x_r) \\ &= \sum_{l_1} \dots \sum_{l_r} p_r(x_{1, l_1}, \dots, x_{r, l_r}) \prod_{j=1}^r \delta(x_j - x_{j, l_j}), \end{aligned} \quad (1.4.16)$$

kus $p_{\xi_1, \dots, \xi_r}(x_{1, l_1}, \dots, x_{r, l_r}) \equiv p_r(x_{1, l_1}, \dots, x_{r, l_r})$ on r -järku ühistõenäosus⁶. See on tõenäosus selleks, et $\xi_1 = x_{1, l_1}, \dots, \xi_r = x_{r, l_r}$. Kooskõlas ühistõenäosustiheduse omadusega (1.4.3) kehtib eeskiri ühistõenäosuse järgu alandamiseks. Näiteks

$$\begin{aligned} p_{\xi_1, \dots, \xi_{r-s}}(x_{1, l_1}, \dots, x_{r-s, l_{r-s}}) \\ &= \sum_{l_{r-s+1}} \dots \sum_{l_r} p_r(x_{1, l_1}, \dots, x_{r-s, l_{r-s}}, x_{r-s+1, l_{r-s+1}}, \dots, x_{r, l_r}). \end{aligned} \quad (1.4.17)$$

Valemitest (1.4.2) ja (1.4.16) saame keskvaertuse jaoks

$$\langle f(\xi_1, \dots, \xi_r) \rangle = \sum_{l_1} \dots \sum_{l_r} p_r(x_{1, l_1}, \dots, x_{r, l_r}) f(x_{1, l_1}, \dots, x_{r, l_r}). \quad (1.4.18)$$

⁵ Vt [2] lk 35, kui $n_1 + \dots + n_r = 4$.

⁶ Kui $r = 1$, siis nimetame seda tõenäosust ka *üksiktõenäosuseks*, mis oli toodud sisse juba punktis 1.1.

Ülesanded

Ülesanne 1.4.1. Näidake, et valemist (1.4.1) jäeldub reegel (1.4.3).

Ülesanne 1.4.2. Näidake, et valemitest (1.4.3) ja (1.4.16) jäeldub reegel (1.4.17).

Ülesanne 1.4.3. Tuletage avaldised (1.4.12)–(1.4.14).

1.5 Tinglik tõenäosustihedus

Olgu meil vaatluse all kaks juhuslikku suurust ξ_1 ja ξ_2 . $W_2(x_1, x_2) dx_1 dx_2$ on tõenäosus selleks, et

$$x_1 \leq \xi_1 \leq x_1 + dx_1, \quad x_2 \leq \xi_2 \leq x_2 + dx_2.$$

$W_{\xi_2}(x_2) dx_2$ on tõenäosus selleks, et

$$x_2 \leq \xi_2 \leq x_2 + dx_2.$$

Olgu $W(x_1|x_2) dx_1$ tõenäosus selleks, et $x_1 \leq \xi_1 \leq x_1 + dx_1$, kui $\xi_2 = x_2$. Karakteristikut $W(x_1|x_2)$ nimetatakse *tinglikuks tõenäosustiheduseks*.

Toodud tõenäosuste vahel kehtib seos

$$W_2(x_1, x_2) dx_1 dx_2 = W(x_1|x_2) dx_1 W_{\xi_2}(x_2) dx_2. \quad (1.5.1)$$

Seega

$$W(x_1|x_2) = \frac{W_2(x_1, x_2)}{W_{\xi_2}(x_2)} = \frac{W_2(x_1, x_2)}{\int W_2(x_1, x_2) dx_1}. \quad (1.5.2)$$

Tinglik tõenäosustihedus $W(x_1|x_2, \dots, x_r)$ selleks, et $x_1 \leq \xi_1 \leq x_1 + dx_1$, kui $\xi_2 = x_2, \dots, \xi_r = x_r$, on määratud valemiga

$$W(x_1|x_2, \dots, x_r) = \frac{W_r(x_1, \dots, x_r)}{W_{\xi_2, \dots, \xi_r}(x_2, \dots, x_r)} = \frac{W_r(x_1, \dots, x_r)}{\int W_r(x_1, \dots, x_r) dx_1}. \quad (1.5.3)$$

Kui juhuslikud suurused omandavad diskreetseid väärtuseid, siis defineeritakse *tinglik tõenäosus*

$$\begin{aligned} p(x_{1, l_1}|x_{2, l_2}, \dots, x_{r, l_r}) \\ = \frac{p_r(x_{1, l_1}, \dots, x_{r, l_r})}{p_{\xi_{2, \dots, \xi_r}}(x_{2, l_2}, \dots, x_{r, l_r})} = \frac{p_r(x_{1, l_1}, \dots, x_{r, l_r})}{\sum_{l_1} p_r(x_{1, l_1}, \dots, x_{r, l_r})}. \end{aligned} \quad (1.5.4)$$

See on tõenäosus selleks, et $\xi_1 = x_{1, l_1}$, kui $\xi_2 = x_{2, l_2}, \dots, \xi_r = x_{r, l_r}$.

1.6 Juhuslike suuruste korrelatsioonid

Alustame juhust, kui meil on tegemist kahe juhusliku suurusega. Valemi (1.5.2) kohaselt

$$W_2(x_1, x_2) = W(x_1|x_2) W_{\xi_2}(x_2). \quad (1.6.1)$$

Eristame kahte ekstremaalset juhtu.

i) *See, millise väärtuse omandab suurus ξ_1 , ei sõltu suurusest ξ_2 .* Siis ilmselt $W(x_1|x_2) = W_{\xi_1}(x_1)$ ja ühistõenäosustihedus faktoriseerub

$$W_2(x_1, x_2) = W_{\xi_1}(x_1) W_{\xi_2}(x_2). \quad (1.6.2)$$

Sel juhul öeldakse, et suurused ξ_1 ja ξ_2 on *statistiliselt sõltumatud*.

ii) *Juhuslik suurus ξ_1 on täielikult määratud juhusliku suuruse ξ_2 poolt*, st nende suuruste vahel on ühene funktsionaalne seos $\xi_1 = f(\xi_2)$. Tinglik tõenäosustihedus on nüüd δ -funktsioon,

$$W(x_1|x_2) = \delta(x_1 - f(x_2)). \quad (1.6.3)$$

Ühistõenäosus avaldub vastavalt nagu

$$W_2(x_1, x_2) = W_{\xi_2}(x_2) \delta(x_1 - f(x_2)). \quad (1.6.4)$$

Toodud juhtude vahele jäävad olukorrad, kui kaks juhuslikku suurust on omavahel osaliselt korreleeritud. Seda korreleeritust võib iseloomustada *korrelatsioonifunktsiooniga*

$$\kappa_{\xi_1 \xi_2} = \langle (\xi_1 - \langle \xi_1 \rangle)(\xi_2 - \langle \xi_2 \rangle) \rangle = \langle \xi_1 \xi_2 \rangle - \langle \xi_1 \rangle \langle \xi_2 \rangle. \quad (1.6.5)$$

Kui suurused ξ_1 ja ξ_2 on statistiliselt sõltumatud, siis $\kappa_{\xi_1 \xi_2} = 0$.⁷ Valemist (1.4.14) järeldub, et korrelatsioonifunktsioon (1.6.5) langeb kokku kumulandiga, kus $n_1 = n_2 = 1$ ja $n_3 = \dots = n_r = 0$. Ehk üldiselt

$$\kappa_{\xi_j \xi_k} = K_{1_j, 1_k}, \quad j \neq k. \quad (1.6.6)$$

Seoses suurema arvu juhuslike suurustega defineeritakse kõrgemat järku korrelatsioonifunktsioonid analoogselt vastavate kumulantide abil,

$$\kappa_{\xi_j \xi_k \xi_l \dots} = K_{1_j, 1_k, 1_l, \dots}, \quad j \neq k \neq l \neq \dots. \quad (1.6.7)$$

Kui juhuslikud suurused $\xi_j, \xi_k, \xi_l, \dots$ on statistiliselt sõltumatud, siis

$$W_{\xi_j, \xi_k, \xi_l, \dots}(x_j, x_k, x_l, \dots) = W_{\xi_j}(x_j) W_{\xi_k}(x_k) W_{\xi_l}(x_l) \dots \quad (1.6.8)$$

ja korrelatsioonifunktsioon $\kappa_{\xi_j \xi_k \xi_l \dots} = 0$.

⁷ Samas, $\kappa_{\xi_1 \xi_2} = 0$ ei tähenda alati seda, et ξ_1 ja ξ_2 on statistiliselt sõltumatud.

Ülesanded

Ülesanne 1.6.1. Näidake, et kui kaks juhuslikku suurust on statistiliselt sõltumatud, st kehtib (1.6.2), siis tõepoolest $\kappa_{\xi_1\xi_2} = 0$.

Ülesanne 1.6.2. Näidake, et kui kolm juhuslikku suurust, ξ_1 , ξ_2 ja ξ_3 , on statistiliselt sõltumatud, st $W_{\xi_1, \xi_2, \xi_3}(x_1, x_2, x_3) = W_{\xi_1}(x_1)W_{\xi_2}(x_2)W_{\xi_3}(x_3)$, siis korrelatsioonifunktsioon $\kappa_{\xi_1\xi_2\xi_3} = 0$.

1.7 Gaussi jaotus

Hästi on teada, et väga paljude juhuslike suuruste kirjeldamiseks (vähemalt ligikaudu) sobib Gaussi jaotus. Põhjenduse sellele annab *tsentraalne piirteoreem*⁸, mille kohaselt suurest arvust (lõpmata suurest arvust) liikmetest koosnev juhuslike suuruste summa kujutab endast teatud tingimustel juhuslikku suurust, mis allub Gaussi jaotusele.

Järgnevalt toome sisse teatud piirangud juhuslike suuruste kumulantide jaoks, mille korral nende suuruste ühistõenäosustihedus osutub Gaussi jaotuseks. Lähtume karakteristikliku funktsiooni avaldisest (1.4.10)

$$C_r(u_1, \dots, u_r) = \exp \left(\sum_{n_1=0}^{\infty} \dots \sum_{n_r=0}^{\infty} K_{n_1, \dots, n_r} \frac{(iu_1)^{n_1}}{n_1!} \dots \frac{(iu_r)^{n_r}}{n_r!} \right). \quad (1.7.1)$$

Nõuame nüüd, et valemis (1.7.1) oleksid nullist erinevad ainult need kumulandid, kus

$$n_1 + n_2 + \dots + n_r \leq 2. \quad (1.7.2)$$

Seega, pidades silmas kumulantide ja korrelatsioonifunktsioonide vahelist seost, on tegemist olukorraga, kus muuhulgas *ainult teist järku korrelatsioonifunktsioonid võivad olla nullist erinevad, kõrgemat järku korrelatsioonid aga puuduvad*. Kui kehtib tingimus (1.7.2), siis peab karakteristikliku funktsiooni (1.7.1) struktuur olema järgmine:

$$C_r(u_1, \dots, u_r) = \exp \left(\sum_{j=1}^r a_j i u_j + \frac{1}{2} \sum_{j,k=1}^r \sigma_{jk} i u_j i u_k \right), \quad (1.7.3)$$

⁸ Vt näiteks [2] lk 37–38, [3] I osa lk 11–12, [7] lk 25–27 ja [8] lk 56–57.

kus

$$a_j = K_{1j}, \quad (1.7.4)$$

$$\sigma_{jj} = K_{2j}, \quad (1.7.5)$$

$$\sigma_{jk} = K_{1j,1k}, \quad \sigma_{jk} = \sigma_{kj}, \quad j \neq k, \quad (1.7.6)$$

ning on arvestatud, et $K_{0,\dots,0} = 0$. Valemitest (1.7.4)–(1.7.6) ja (1.4.13), (1.4.14) järeldub, et koefitsient a_j võrdub juhusliku suuruse ξ_j keskvaärtusega,

$$a_j = \langle \xi_j \rangle, \quad (1.7.7)$$

koefitsient σ_{jj} – suuruse ξ_j dispersiooniga,

$$\sigma_{jj} = \sigma_{\xi_j}^2, \quad (1.7.8)$$

ja koefitsient σ_{jk} , kui $j \neq k$, – suuruste ξ_j ja ξ_k korrelatsioonifunktsiooniga,

$$\sigma_{jk} = K_{\xi_j \xi_k}. \quad (1.7.9)$$

Tõenäosustihedus on karakteristliku funktsiooni kaudu määratud valemiga (1.4.6). Funktsiooni (1.7.3) korral saame

$$\begin{aligned} W_r(x_1, \dots, x_r) \\ = (2\pi)^{-r} \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[\sum_{j=1}^r (a_j - x_j) i u_j - \frac{1}{2} \sum_{j,k=1}^r \sigma_{jk} u_j u_k \right] du_1 \dots du_r. \end{aligned} \quad (1.7.10)$$

Eeldatakse, et maatriks elementidega $\sigma_{jk} = \sigma_{kj}$ on positiivselt määratud. Sellisel juhul eksisteerib selle maatriksi positiivselt määratud ruutjuur elementidega $(\sigma^{1/2})_{jk} = (\sigma^{1/2})_{kj}$ ning samuti eksisteerivad vastavad pöördmaatriksid elementidega $(\sigma^{-1})_{jk} = (\sigma^{-1})_{kj}$ ja $(\sigma^{-1/2})_{jk} = (\sigma^{-1/2})_{kj}$.⁹

Läheme valemis (1.7.10) üle uutele integreerimismuutujatele

$$\alpha_j = \sum_{k=1}^r \left[(\sigma^{1/2})_{jk} u_k + i (\sigma^{-1/2})_{jk} (x_k - a_k) \right] \quad (1.7.11)$$

⁹ Vt [1] lk 23.

ja leiame summa

$$\begin{aligned}
& -\frac{1}{2} \sum_{j=1}^r \alpha_j \alpha_j = -\frac{1}{2} \sum_j \sum_k \sum_{k'} \left[(\sigma^{1/2})_{jk} u_k + i(\sigma^{-1/2})_{jk} (x_k - a_k) \right] \\
& \times \left[(\sigma^{1/2})_{jk'} u_{k'} + i(\sigma^{-1/2})_{jk'} (x_{k'} - a_{k'}) \right] \\
& = -\frac{1}{2} \sum_k \sum_{k'} \left\{ \sum_j (\sigma^{1/2})_{jk} (\sigma^{1/2})_{jk'} u_k u_{k'} + i \sum_j (\sigma^{1/2})_{jk} (\sigma^{-1/2})_{jk'} u_k (x_{k'} - a_{k'}) \right. \\
& + i \sum_j (\sigma^{-1/2})_{jk} (\sigma^{1/2})_{jk'} (x_k - a_k) u_{k'} \\
& \left. - \sum_j (\sigma^{-1/2})_{jk} (\sigma^{-1/2})_{jk'} (x_k - a_k) (x_{k'} - a_{k'}) \right\} \\
& = -\frac{1}{2} \sum_k \sum_{k'} \left\{ \sigma_{kk'} u_k u_{k'} + i \delta_{kk'} u_k (x_{k'} - a_{k'}) + i \delta_{kk'} (x_k - a_k) u_{k'} \right. \\
& \left. - (\sigma^{-1})_{kk'} (x_k - a_k) (x_{k'} - a_{k'}) \right\} \\
& = -\frac{1}{2} \sum_{k,k'=1}^r \sigma_{kk'} u_k u_{k'} + i \sum_{k=1}^r u_k (a_k - x_k) + \frac{1}{2} \sum_{k,k'=1}^r (\sigma^{-1})_{kk'} (x_k - a_k) (x_{k'} - a_{k'}).
\end{aligned}$$

Seega saab eksponent valemis (1.7.10) kuju

$$\begin{aligned}
& \exp \left[\sum_{j=1}^r (a_j - x_j) i u_j - \frac{1}{2} \sum_{j,k=1}^r \sigma_{jk} u_j u_k \right] \\
& = \exp \left[-\frac{1}{2} \sum_{j=1}^r \alpha_j^2 - \frac{1}{2} \sum_{j,k=1}^r (\sigma^{-1})_{jk} (x_j - a_j) (x_k - a_k) \right]. \quad (1.7.12)
\end{aligned}$$

Samuti arvestame, et valemis (1.7.10)

$$\begin{aligned}
du_1 \dots du_r & = \det \left[\frac{\partial u_k}{\partial \alpha_j} \right] d\alpha_1 \dots d\alpha_r = \left(\det \left[\frac{\partial \alpha_j}{\partial u_k} \right] \right)^{-1} d\alpha_1 \dots d\alpha_r \\
& = \left(\det [(\sigma^{1/2})_{jk}] \right)^{-1} d\alpha_1 \dots d\alpha_r = \left(\det [\sigma_{jk}] \right)^{-1/2} d\alpha_1 \dots d\alpha_r. \quad (1.7.13)
\end{aligned}$$

Edasi teeme vastavad asendused avaldisse (1.7.10). See annab

$$\begin{aligned}
W_r(x_1, \dots, x_r) & = (2\pi)^{-r} \left(\det [\sigma_{jk}] \right)^{-1/2} \exp \left[-\frac{1}{2} \sum_{j,k=1}^r (\sigma^{-1})_{jk} (x_j - a_j) (x_k - a_k) \right] \\
& \times \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left(-\frac{1}{2} \sum_{j=1}^r \alpha_j^2 \right) d\alpha_1 \dots d\alpha_r.
\end{aligned}$$

Leiame veel integraali

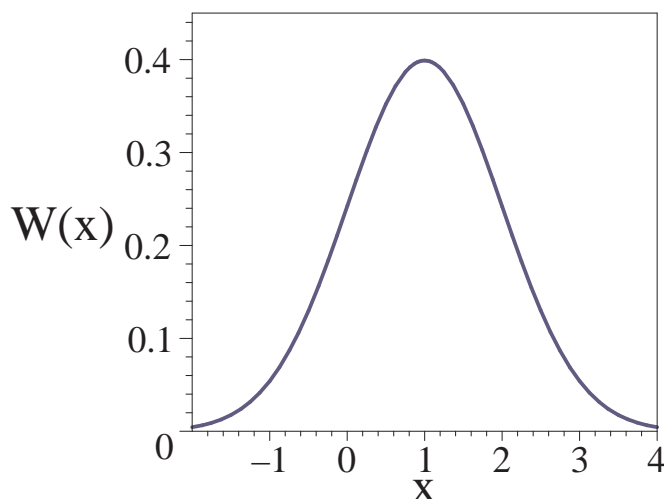
$$\int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{1}{2} \sum_{j=1}^r \alpha_j^2\right) d\alpha_1 \dots d\alpha_r = \left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\alpha^2}{2}} d\alpha\right)^r = (2\pi)^{r/2}.$$

Tulemuseks saame tõenäosustiheduse avaldise

$$W_r(x_1, \dots, x_r) = (2\pi)^{-r/2} \left(\det[\sigma_{jk}]\right)^{-1/2} \exp\left[-\frac{1}{2} \sum_{j,k=1}^r (\sigma^{-1})_{jk} (x_j - a_j)(x_k - a_k)\right]. \quad (1.7.14)$$

Valemit (1.7.14) tuntakse kui üldist *Gaussi jaotust*.

Joonistel 1.2 ja 1.3 on toodud Gaussi jaotused vastavalt ühe ja kahe juhusliku suuruse jaoks.

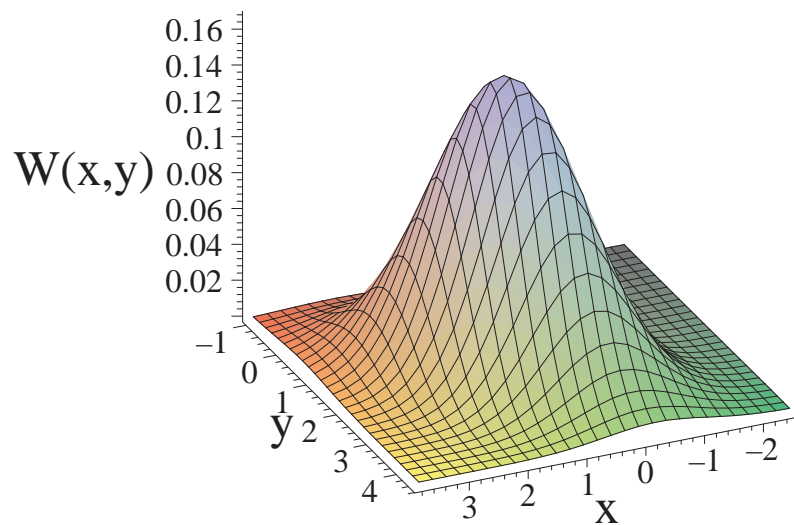


Joonis 1.2. Gaussi jaotus ühe juhusliku suuruse korral, $W_1(x_1) \equiv W(x)$. Parameetrid: $a_1 = 1$, $\sigma_{11} = 1$.

Ülesanded

Ülesanne 1.7.1. Kirjutage üles Gaussi jaotus ühe juhusliku suuruse jaoks. Kasutades vahetut integreerimist,

- i) kontrollige, et see tõenäosustihedus on normeeritud 1-le;
- ii) leidke juhusliku suuruse keskvärtus;
- iii) leidke juhusliku suuruse ruutdispersioon.



Joonis 1.3. Gaussi jaotus kahe juhusliku suuruse korral, $W_2(x_1, x_2) \equiv W(x, y)$. Parameetrid: $a_1 = 1$, $a_2 = 2$, $\sigma_{11} = \sigma_{22} = 1$, $\sigma_{12} = \sigma_{21} = 0.3$.

Ülesanne 1.7.2. Tuletage valem (1.7.3) valemist (1.7.1). Võib piirduda juhuga, kui $r = 2$.

Ülesanne 1.7.3. Olgu suurused ξ_1, \dots, ξ_r determineeritud.

i) Püüdke „ära arvata“, milline on sellisel juhul tõenäosustihedus.

ii) Tuletage see tõenäosustihedus, kasutades karakteristikku funktsiooni.

2. Juhuslike protsesside kirjeldamine

2.1 Ajast sõltuv juhuslik suurus

Vaatleme nüüd suurust, mis muutub ajas,

$$\xi = \xi(t). \quad (2.1.1)$$

Õeldakse, et sõltuvus (2.1.1) kirjeldab teatavat protsessi. Selle konkreetset kuju nimetatakse protsessi *realisatsiooniks*.

Kui ξ on juhuslik suurus, siis kirjeldab sõltuvus (2.1.1) juhuslikku protsessi. Juhusliku protsessi realisatsioon ei ole ühene. Mõõtes juhuslikku protsessi korduvalt, saame me üldiselt rääkides tulemuseks erinevad realisatsioonid. Me kirjeldame olukorda selliselt, et on olemas identsete süsteemide ansambel, kus igas süsteemis mõõdetakse protsessi üks kord.

Mingitel valitud ajahetkedel $t_1 < t_2 < \dots < t_n$ iseloomustab juhuslikku protsessi ühistõenäosus $W_\xi(x_n, t_n; \dots; x_1, t_1) dx_1 \dots dx_n$ (joonis 2.1). See on tõenäosus selleks, et $x_j \leq \xi(t_j) \leq x_j + dx_j$, $j = 1, \dots, n$. Vastav tõenäosustihedus on määratud analoogselt valemiga (1.4.1),

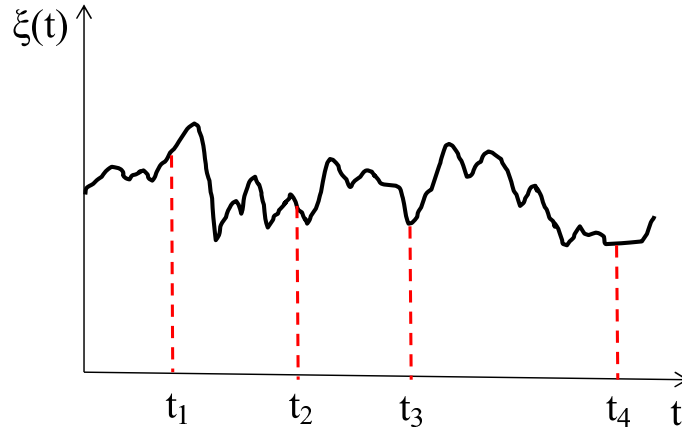
$$W_\xi(x_n, t_n; \dots; x_1, t_1) = \left\langle \prod_{j=1}^n \delta(x_j - \xi(t_j)) \right\rangle. \quad (2.1.2)$$

Keskmistatakse üle ansambli.

Ühistõenäosustiheduse järgu alandamine (mingi ajahetke väljalülitamine) toimub analoogselt valemiga (1.4.3).

Tinglik tõenäosustihedus selleks, et $x_n \leq \xi(t_n) \leq x_n + dx_n$, kui $\xi(t_{n-1}) = x_{n-1}, \dots, \xi(t_1) = x_1$, on defineeritud avaldisega

$$\begin{aligned} & W(x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1}; \dots; x_1, t_1) \\ &= \frac{W_\xi(x_n, t_n; \dots; x_1, t_1)}{W_\xi(x_{n-1}, t_{n-1}; \dots; x_1, t_1)} = \frac{W_\xi(x_n, t_n; \dots; x_1, t_1)}{\int W_\xi(x_n, t_n; \dots; x_1, t_1) dx_n}. \end{aligned} \quad (2.1.3)$$



Joonis 2.1. Juhusliku protsessi üks realisatsioon. Igale realisatsioonile seatakse vastavusse tonaosustihedus $W_\xi(x_n, t_n; \dots; x_1, t_1)$, mis on määratud juhusliku suuruse väärtustega x_1, \dots, x_n vaadeldavatel ajahetkedel t_1, \dots, t_n antud realisatsioonis.

Tonaosustihedust (2.1.3) nimetatakse ka *üleminekutonaosustiheduseks*.

Kui ajast sõltuv juhuslik suurus omandab diskreetseid väärtusi, siis tuuakse sisse ühistonaosus ja tinglik tonaosus (*üleminekutonaosus*) nii nagu punktides 1.4 ja 1.5 seoses mitme juhusliku suurusega. Vastavalt sellele

$$\begin{aligned}
 &W_\xi(x_n, t_n; \dots; x_1, t_1) \\
 &= \sum_{l_1} \dots \sum_{l_n} p_\xi(x_{l_n}, t_n; \dots; x_{l_1}, t_1) \prod_{j=1}^n \delta(x_j - x_{l_j}),
 \end{aligned} \tag{2.1.4}$$

kus $p_\xi(x_{l_n}, t_n; \dots; x_{l_1}, t_1)$ on ühistonaosus, ning

$$\begin{aligned}
 &p(x_{l_n}, t_n | x_{l_{n-1}}, t_{n-1}; \dots; x_{l_1}, t_1) \\
 &= \frac{p_\xi(x_{l_n}, t_n; \dots; x_{l_1}, t_1)}{p_\xi(x_{l_{n-1}}, t_{n-1}; \dots; x_{l_1}, t_1)} = \frac{p_\xi(x_{l_n}, t_n; \dots; x_{l_1}, t_1)}{\sum_{l_n} p_\xi(x_{l_n}, t_n; \dots; x_{l_1}, t_1)}
 \end{aligned} \tag{2.1.5}$$

on üleminekutonaosus.

Ülesanded

Ülesanne 2.1.1. Näidake, et üleminekutonaosustiheduse jaoks kehtib võrdus

$$\int W(x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1}; \dots; x_1, t_1) dx_n = 1.$$

Ülesanne 2.1.2. Näidake, et tõenäosustiheduste vahel kehtib seos

$$W_{\xi}(x_n, t_n) = \int \dots \int W(x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1}; \dots; x_1, t_1) W_{\xi}(x_{n-1}, t_{n-1}; \dots; x_1, t_1) dx_1 \dots dx_{n-1}.$$

2.2 Statsionaarne juhuslik protsess

Juhuslikku protsessi nimetatakse *statsionaarseks*, kui kõik ühistõenäosustihedused rahuldavad tingimust

$$W_{\xi}(x_n, t_n; \dots; x_1, t_1) = W_{\xi}(x_n, t_n + \tau; \dots; x_1, t_1 + \tau), \quad (2.2.1)$$

kus τ on *suvaline aja nihe*.

Omadusest (2.2.1) järeldub, et

$$W_{\xi}(x_1, t_1) = W_{\xi}(x_1) \quad (2.2.2)$$

ja

$$W_{\xi}(x_2, t_2; x_1, t_1) = W_{\xi}(x_2, x_1; t_2 - t_1). \quad (2.2.3)$$

Seega statsionaarse protsessi korral üksiktõenäosustihedus ajast ei sõltu ja teist järku ühistõenäosustihedus sõltub ainult ajahetkede vahest.

Diskreetselt muutuva juhusliku suuruse korral tuleb valemities (2.2.1)–(2.2.3) tõenäosustihedused asendada vastavate tõenäosustega.

Ülesanded

Ülesanne 2.2.1. Põhjendage valemi (2.2.2) kehtivust.

Ülesanne 2.2.2. Põhjendage valemi (2.2.3) kehtivust.

Ülesanne 2.2.3. Põhjendage, et statsionaarse protsessi korral üleminekutõenäosustihedus $W(x_2, t_2 | x_1, t_1)$ sõltub ainult ajahetkede t_1 ja t_2 vahest.

2.3 Juhuslike protsesside klassifikatsioon

Toodud klassifikatsiooni¹ lähtekohaks on üleminekutõenäosustihedus.

i) *Täielikult juhuslik protsess.*

See on protsess, kus $\xi(t_n)$ on iga $n \geq 2$ korral täiesti sõltumatu väärtusest $\xi(t_i) = x_i$, kui $i < n$. Sellisel juhul

$$W(x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1}; \dots; x_1, t_1) = W_{\xi}(x_n, t_n). \quad (2.3.1)$$

¹ M. C. Wang, L. S. Uhlenbeck, *Rev. Mod. Phys.* **17**, 323 (1945). Vt ka [1] lk 26–28.

Valemitest (2.1.3) ja (2.3.1) leiame

$$W_\xi(x_n, t_n; \dots; x_1, t_1) = W_\xi(x_n, t_n)W_\xi(x_{n-1}, t_{n-1}; \dots; x_1, t_1).$$

Jätkates seda protseduuri saame, et ühistõenäosustihedus faktoriseerub

$$W_\xi(x_n, t_n; \dots; x_1, t_1) = W_\xi(x_n, t_n)W_\xi(x_{n-1}, t_{n-1}) \dots W_\xi(x_1, t_1). \quad (2.3.2)$$

Seega sisaldub kogu informatsioon täielikult juhusliku protsessi kohta tõenäosustihedustes $W_\xi(x, t)$.

ii) *Markovi protsess.*

See on protsess, kus $\xi(t_n)$ on iga $n \geq 2$ korral korrelatsioonis ainult väärtusega $\xi(t_{n-1}) = x_{n-1}$. Siis

$$W(x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1}; \dots; x_1, t_1) = W(x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1}). \quad (2.3.3)$$

Valemitest (2.1.3) ja (2.3.3) järeldub, et

$$W_\xi(x_n, t_n; \dots; x_1, t_1) = W(x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1})W_\xi(x_{n-1}, t_{n-1}; \dots; x_1, t_1).$$

Protseduuri jätkamine annab

$$\begin{aligned} W_\xi(x_n, t_n; \dots; x_1, t_1) &= W(x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1}) \\ &\times W(x_{n-1}, t_{n-1} | x_{n-2}, t_{n-2}) \dots W(x_2, t_2 | x_1, t_1)W_\xi(x_1, t_1). \end{aligned} \quad (2.3.4)$$

Järelikult sisaldub kogu informatsioon Markovi protsessi kohta tõenäosustihedustes $W_\xi(x, t; x', t')$.

iii) *Üldisemad juhuslikud protsessid.*

Toodud klassifikatsiooni võib jätkata, eraldades välja protsessi, mille korral

$$W(x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1}; \dots; x_1, t_1) = W(x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1}; x_{n-2}, t_{n-2}),$$

nii et kogu informatsioon vaadeldava protsessi kohta sisaldub tõenäosustihedustes $W_\xi(x, t; x', t'; x'', t'')$ jne. Kuid selline lähenemisviis ei pruugi olla otstarbekas. Markovi protsessist enamkorreleeritud protsessi juhul võib osutada kasulikuks mitme ajast sõltuva juhusliku suuruse arvessevõtmine. Selliste suuruste sobiva valiku korral võib olla tulemuseks *Markovi protsess mitme juhusliku suuruse jaoks*, kuigi need ajast sõltuvad suurused eraldi ei pruugi kujutada endast Markovi protsesse (vt ka punkt 2.4).

Ülesanded

Ülesanne 2.3.1. Olgu ajahetkedega $t_1 < t_2 < \dots < t_n$ antud Markovi protsess, st ühistõenäosustiheduse jaoks kehtib (2.3.4).

i) Näidake, et kui lülitada vaadeldavate hetkede hulgast välja viimane hetk t_n , siis allesjäänud hetkedega on antud endiselt Markovi protsess.

ii) Näidake, et kui lülitada vaadeldavate hetkede hulgast välja esimene hetk t_1 , siis allesjäänud hetkedega on antud endiselt Markovi protsess.

iii) Näidake, et kui lülitada vaadeldavate hetkede hulgast välja mingi vahepealne hetk t_j , $t_1 < t_j < t_n$, siis allesjäänud hetkedega on antud endiselt Markovi protsess.

Ülesanne 2.3.2. Olgu Markovi protsessi jaoks teada, et üksiktõenäosustihedused ajast ei sõltu, $W_\xi(x, t) = W_\xi(x)$, ning teist järku ühistõenäosustihedused sõltuvad ainult ajahetkede vahest, $W_\xi(x, t; x', t') = W_\xi(x, x'; t - t')$. Põhjendage, et selle alusel võib väita, et tegemist on statsionaarse protsessiga, st on täidetud üldine protsessi statsionaarsuse tingimus (2.2.1).

2.4 Mitu ajast sõltuvat juhuslikku suurust

Olgu meil r ajast sõltuvat juhuslikku suurust $\xi_1(t), \dots, \xi_r(t)$. Kui neid suurusi vaadeldakse ajahetkedel t_1, \dots, t_n , siis vastav tõenäosustihedus on antud avaldisega

$$\begin{aligned} W_{\xi_1, \dots, \xi_r}(x_1^{(n)}, \dots, x_r^{(n)}, t_n; \dots; x_1^{(1)}, \dots, x_r^{(1)}, t_1) \\ \equiv W_r(x_1^{(n)}, \dots, x_r^{(n)}, t_n; \dots; x_1^{(1)}, \dots, x_r^{(1)}, t_1) \\ = \left\langle \prod_{j=1}^r \prod_{k=1}^n \delta(x_j^{(k)} - \xi_j(t_k)) \right\rangle. \end{aligned} \quad (2.4.1)$$

Valemi (2.1.3) üldistusena võib nüüd defineerida üleminekutõenäosustiheduse

$$\begin{aligned} W(x_1^{(n)}, \dots, x_r^{(n)}, t_n | x_1^{(n-1)}, \dots, x_r^{(n-1)}, t_{n-1}; \dots; x_1^{(1)}, \dots, x_r^{(1)}, t_1) \\ = \frac{W_r(x_1^{(n)}, \dots, x_r^{(n)}, t_n; \dots; x_1^{(1)}, \dots, x_r^{(1)}, t_1)}{W_r(x_1^{(n-1)}, \dots, x_r^{(n-1)}, t_{n-1}; \dots; x_1^{(1)}, \dots, x_r^{(1)}, t_1)} \\ = \frac{W_r(x_1^{(n)}, \dots, x_r^{(n)}, t_n; \dots; x_1^{(1)}, \dots, x_r^{(1)}, t_1)}{\int \dots \int W_r(x_1^{(n)}, \dots, x_r^{(n)}, t_n; \dots; x_1^{(1)}, \dots, x_r^{(1)}, t_1) dx_1^{(n)} \dots dx_r^{(n)}}. \end{aligned} \quad (2.4.2)$$

Juhul, kui on tegemist *Markovi protsessiga*, siis

$$\begin{aligned} W(x_1^{(n)}, \dots, x_r^{(n)}, t_n | x_1^{(n-1)}, \dots, x_r^{(n-1)}, t_{n-1}; \dots; x_1^{(1)}, \dots, x_r^{(1)}, t_1) \\ = W(x_1^{(n)}, \dots, x_r^{(n)}, t_n | x_1^{(n-1)}, \dots, x_r^{(n-1)}, t_{n-1}). \end{aligned} \quad (2.4.3)$$

Seega sisaldub kogu informatsioon r juhusliku suurusega Markovi protsessi kohta tõenäosustihedustes $W_r(x_1, \dots, x_r, t; x'_1, \dots, x'_r, t')$. Viimastes võib vähendada juhuslike suuruste arvu, integreerides üle vastavate väärtuste. Näiteks võime me üle minna tõenäosustihedustele

$$\begin{aligned} W_{r-1}(x_1, \dots, x_{r-1}, t; x'_1, \dots, x'_{r-1}, t') \\ = \iint W_r(x_1, \dots, x_r, t; x'_1, \dots, x'_r, t') dx_r dx'_r. \end{aligned}$$

Seejuures võib aga juhtuda, et allesjäänud ajast sõltuvatele juhuslikele suurustele ei vasta enam Markovi protsess.

Statsionaarse protsessi korral on täidetud tingimus

$$\begin{aligned} W_r(x_1^{(n)}, \dots, x_r^{(n)}, t_n; \dots; x_1^{(1)}, \dots, x_r^{(1)}, t_1) \\ = W_r(x_1^{(n)}, \dots, x_r^{(n)}, t_n + \tau; \dots; x_1^{(1)}, \dots, x_r^{(1)}, t_1 + \tau), \end{aligned} \quad (2.4.4)$$

kus τ on suvaline aja nihe.

2.5 Juhuslike suuruste ajaline korrelatsioon

Olgu meil vaatluse all kaks ajast sõltuvat juhuslikku suurust $\xi_1(t)$, $\xi_2(t)$. Defineerime nende jaoks valemi (1.6.5) üldistusena *ajalise korrelatsioonifunktsiooni*

$$\kappa_{\xi_1\xi_2}(t, t') = \langle \xi_1(t) \xi_2(t') \rangle - \langle \xi_1(t) \rangle \langle \xi_2(t') \rangle. \quad (2.5.1)$$

Siin

$$\begin{aligned} \langle \xi_1(t) \rangle &= \int x_1 W_{\xi_1}(x_1, t) dx_1, \\ \langle \xi_2(t') \rangle &= \int x'_2 W_{\xi_2}(x'_2, t') dx'_2, \\ \langle \xi_1(t) \xi_2(t') \rangle &= \iint x_1 x'_2 W_{\xi_1\xi_2}(x_1, t; x'_2, t') dx_1 dx'_2. \end{aligned}$$

Funktsioon (2.5.1) iseloomustab suuruste ξ_1 ja ξ_2 vahelist korrelatsiooni erinevatel ajahetkedel. Kui selline korrelatsioon puudub, siis

$$\kappa_{\xi_1\xi_2}(t, t') = 0.$$

Juhul, kui protsess on statsionaarne, siis

$$\begin{aligned} W_{\xi_1}(x_1, t) &= W_{\xi_1}(x_1), \quad W_{\xi_2}(x'_2, t') = W_{\xi_2}(x'_2), \\ W_{\xi_1\xi_2}(x_1, t; x'_2, t') &= W_{\xi_1\xi_2}(x_1, x'_2; t - t'). \end{aligned}$$

Järelikult statsionaarse protsessi korral sõltub korrelatsioonifunktsioon (2.5.1) ainult ajahetkede vahest,

$$\kappa_{\xi_1\xi_2}(t, t') = \kappa_{\xi_1\xi_2}(t - t'). \quad (2.5.2)$$

Ühe juhusliku suuruse väärtuste vahelist ajalist korrelatsiooni võib iseloomustada *autokorrelatsioonifunktsiooniga*

$$\kappa_{\xi\xi}(t, t') = \langle \xi(t) \xi(t') \rangle - \langle \xi(t) \rangle \langle \xi(t') \rangle. \quad (2.5.3)$$

Kõrgemat järku autokorrelatsioonifunktsioonid defineeritakse analoogselt punktiga 1.6 vastavate kumulantide abil. Näiteks valemi (1.4.15) alusel

$$\begin{aligned} \kappa_{\xi\xi\xi}(t, t', t'') &= \langle \xi(t) \xi(t') \xi(t'') \rangle - \langle \xi(t) \xi(t') \rangle \langle \xi(t'') \rangle \\ &\quad - \langle \xi(t') \xi(t'') \rangle \langle \xi(t) \rangle - \langle \xi(t) \xi(t'') \rangle \langle \xi(t') \rangle + 2 \langle \xi(t) \rangle \langle \xi(t') \rangle \langle \xi(t'') \rangle. \end{aligned} \quad (2.5.4)$$

2.6 Fluktuatsioonide Fourier' esitus

Tähistame juhusliku suuruse *fluktuatsiooni*

$$\Delta\xi(t) = \xi(t) - \langle \xi(t) \rangle. \quad (2.6.1)$$

Paneme fluktuatsiooni jaoks kirja Fourier' pöördteisenduse

$$\Delta\xi(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \Delta\tilde{\xi}(\omega) e^{-i\omega t} d\omega, \quad (2.6.2)$$

kus $\Delta\tilde{\xi}(\omega)$ on fluktuatsiooni Fourier' teisend,

$$\Delta\tilde{\xi}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \Delta\xi(t) e^{i\omega t} dt. \quad (2.6.3)$$

Defineerime autokorrelatsioonifunktsiooni

$$\kappa_{\xi\xi^*}(t, t') = \langle \Delta\xi(t) \Delta\xi^*(t') \rangle. \quad (2.6.4)$$

Definitsioon (2.6.4) on valemist (2.5.2) üldisem selle poolest, et ξ võib siin olla ka kompleksne suurus. Kui ξ on reaalne, st $\xi^* = \xi$, siis valemi (2.6.3) alusel

$$\Delta\tilde{\xi}^*(\omega) = \Delta\tilde{\xi}(-\omega). \quad (2.6.5)$$

Järgnevalt eeldame, et meil on tegemist statsionaarse protsessiga. Sellisel juhul

$$\kappa_{\xi\xi^*}(t, t') = \kappa_{\xi\xi^*}(t - t'). \quad (2.6.6)$$

Toome ka sisse autokorrelatsioonifunktsiooni Fourier' teisendi

$$\tilde{\kappa}_{\xi\xi^*}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \kappa_{\xi\xi^*}(\tau) e^{i\omega\tau} d\tau. \quad (2.6.7)$$

Tuletame nüüd seose keskväärtuse $\langle \Delta\tilde{\xi}(\omega) \Delta\tilde{\xi}^*(\omega') \rangle$ ja Fourier' teisendi $\tilde{\kappa}_{\xi\xi^*}(\omega)$ vahel. Selleks leiame

$$\begin{aligned} \langle \Delta\tilde{\xi}(\omega) \Delta\tilde{\xi}^*(\omega') \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t - i\omega' t'} \langle \Delta\xi(t) \Delta\xi^*(t') \rangle dt dt' \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t - i\omega' t'} \kappa_{\xi\xi^*}(t - t') dt dt'. \end{aligned} \quad (2.6.8)$$

Läheme üle uutele integreerimismuutujatele

$$\tau = t - t', \quad \tau' = \frac{1}{2}(t + t').$$

Siis

$$t = \tau' + \frac{\tau}{2}, \quad t' = \tau' - \frac{\tau}{2}.$$

Diferentsiaalide korrutise jaoks saame

$$dt dt' = \det \begin{bmatrix} \frac{\partial(t, t')}{\partial(\tau, \tau')} \end{bmatrix} d\tau d\tau' = \begin{vmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ 1 & 1 \end{vmatrix} d\tau d\tau' = d\tau d\tau'.$$

Valem (2.6.8) omandab nüüd kuju

$$\langle \Delta \tilde{\xi}(\omega) \Delta \tilde{\xi}^*(\omega') \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(\omega - \omega')\tau'} d\tau' \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(\omega + \omega')\tau/2} \kappa_{\xi\xi^*}(\tau) d\tau. \quad (2.6.9)$$

Võtame veel arvesse, et

$$\delta(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} dt. \quad (2.6.10)$$

Seega

$$\langle \Delta \tilde{\xi}(\omega) \Delta \tilde{\xi}^*(\omega') \rangle = 2\pi \delta(\omega - \omega') \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(\omega + \omega')\tau/2} \kappa_{\xi\xi^*}(\tau) d\tau. \quad (2.6.11)$$

Pidades silmas δ -funktsiooni, võime me integraali all võtta $\omega' = \omega$. Siis aga annab see integraal valemi (2.6.7) kohaselt autokorrelatsioonifunktsiooni Fourier' teisendi ning me oleme jõudnud otsitava seoseni

$$\langle \Delta \tilde{\xi}(\omega) \Delta \tilde{\xi}^*(\omega') \rangle = 2\pi \delta(\omega - \omega') \tilde{\kappa}_{\xi\xi^*}(\omega). \quad (2.6.12)$$

Ülesanded

Ülesanne 2.6.1. Kontrollige, et kui juhuslik suurus ξ on reaalne, siis kehtib võrdus (2.6.5).

2.7 Wieneri-Khinchini teoreem

Näitame nüüd, et keskväärtus $\langle |\Delta\xi(t)|^2 \rangle$ on statsionaarse protsessi korral täielikult määratud autokorrelatsioonifunktsiooni Fourier' teisendiga.² Selleks avaldame

$$\langle |\Delta\xi(t)|^2 \rangle = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i(\omega-\omega')t} \langle \Delta\tilde{\xi}(\omega) \Delta\tilde{\xi}^*(\omega') \rangle d\omega d\omega'.$$

Arvestades seosega (2.6.12), saame

$$\langle |\Delta\xi(t)|^2 \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i(\omega-\omega')t} \delta(\omega - \omega') \tilde{\kappa}_{\xi\xi^*}(\omega) d\omega d\omega'.$$

Integreerimine üle ω' -i annab

$$\langle |\Delta\xi(t)|^2 \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\kappa}_{\xi\xi^*}(\omega) d\omega. \quad (2.7.1)$$

Valemist (2.7.1) on näha, et *statsionaarse protsessi korral täidab autokorrelatsioonifunktsiooni Fourier' teisend fluktuatsioonide spektraalse tiheduse $\rho_{\xi}(\omega)$ rolli,*

$$\rho_{\xi}(\omega) = \tilde{\kappa}_{\xi\xi^*}(\omega). \quad (2.7.2)$$

Seda tulemust tuntakse *Wieneri-Khinchini teoreemina*.

Seega, mõõtes *fluktuatsioonide spektraalset tihedust, saab määrata autokorrelatsioonifunktsiooni*.

2.8 Valge ja värviline müra

Vaatame näitena autokorrelatsioonifunktsiooni (vt joonis 2.2)

$$\kappa_{\xi\xi^*}(t - t') = C \frac{1}{2\tau_c} \exp\left(-\frac{|t - t'|}{\tau_c}\right), \quad (2.8.1)$$

kus $C = \text{const}$ ja τ_c on *korrelatsiooniaeg*. Fluktuatsioonide spektraalne tihedus on sellisel juhul

$$\rho_{\xi}(\omega) = C \frac{1}{1 + (\omega\tau_c)^2}. \quad (2.8.2)$$

² Keskväärtus $\langle |\Delta\xi(t)|^2 \rangle$ kujutab endast juhusliku suuruse ruutdispersiooni üldistust kompleksse ξ jaoks.

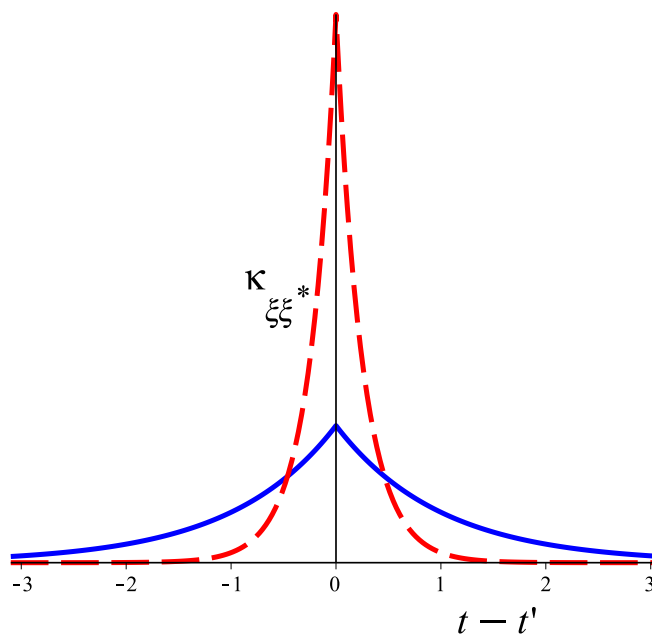
Sageduste piirkonnas $|\omega\tau_c| \ll 1$ spektraalne tihedus sagedusest praktiliselt ei sõltu. Siis räägitakse *valgest müra* selles sageduste piirkonnas. Suvalise sageduse $\omega \neq \pm\infty$ jaoks saame me valge müra, kui läheme piirile

$$\tau_c \rightarrow 0, \tag{2.8.3}$$

mis annab autokorrelatsioonifunktsioon (2.8.1) jaoks³

$$\kappa_{\xi\xi^*}(t - t') = C \delta(t - t'). \tag{2.8.4}$$

Üldjuhul kirjeldab (2.8.1) *värvilist müra*.⁴



Joonis 2.2. Autokorrelatsioonifunktsiooni (2.8.1) muutumine ajas, kui $\tau_c = 1$ (pidev joon) ja $\tau_c = 0.25$ (katkendlik joon).

Ülesanded

Ülesanne 2.8.1. Kontrollige, et autokorrelatsioonifunktsiooni (2.8.1) korral on fluktuatsioonide spektraalne tihedus antud avaldisega (2.8.2).

³ Lihtne on veenduda, et valemiga (2.8.1) määratud autokorrelatsioonifunktsiooni korral $\int_{-\infty}^{\infty} \kappa_{\xi\xi^*}(\theta) d\theta = C$ ning $\lim_{\tau_c \rightarrow 0} \kappa_{\xi\xi^*}(t - t') = 0$, kui $t \neq t'$, ja $\lim_{\tau_c \rightarrow 0} \kappa_{\xi\xi^*}(t - t') = \infty$, kui $t = t'$. Vt ka joonis 2.2.

⁴ Täpsemalt, värviliseks müraks nimetatakse sellist juhuslikku protsessi, mille autokorrelatsiooni sõltuvus ajast erineb δ -funktsioonist.

Ülesanne 2.8.2. Näidake valemi (2.8.4) alusel, et valge müra spektraalne tihe-
dus ei sõltu sagedusest.

2.9 Gaussi protsess

Toome sisse *Gaussi protsessi* mõiste. Juhuslik protsess $\xi(t)$ on Gaussi protsess, kui kõik sellega seotud ühistõenäosustihedused on Gaussi jaotused:

$$W_{\xi}(x_n, t_n; \dots; x_1, t_1) = (2\pi)^{-n/2} \left(\det[\sigma(t_j, t_k)] \right)^{-1/2} \\ \times \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{j,k=1}^n \sigma^{-1}(t_j, t_k) [x_j - a(t_j)] [x_k - a(t_k)] \right\}, \quad (2.9.1)$$

kus

$$a(t_j) = \langle \xi(t_j) \rangle, \quad (2.9.2)$$

$$\sigma(t_j, t_k) = \langle \xi(t_j) \xi(t_k) \rangle - \langle \xi(t_j) \rangle \langle \xi(t_k) \rangle = \kappa_{\xi\xi}(t_j, t_k). \quad (2.9.3)$$

Suurused $\sigma(t_j, t_k)$ on $n \times n$ matriksi ja $\sigma^{-1}(t_j, t_k)$ – vastava pöördmatriksi elemendid.

Gaussi jaotus (2.9.1) on üheselt määratud momendiga $\langle \xi(t) \rangle$ ning autokorrelatsioonifunktsiooniga $\kappa_{\xi\xi}(t, t')$ (kui $t = t'$, siis võib viimast nimetada ka ruutdispersioniks). Kõrgemat järku autokorrelatsioonifunktsioonid, $\kappa_{\xi\xi\xi}(t, t', t'')$ jne, nii nagu ka muud kõrgemat järku kumulandid (vt ka punkt 1.7) on siin võrdsed nulliga.

Seoses Gaussi protsessiga (ja analoogselt Gaussi jaotuse korral üldse) kehtivad juhusliku suuruse fluktuatsioonide jaoks võrdused (*Isserlisi teoreem*⁵)

$$\langle \Delta\xi(t_1) \Delta\xi(t_2) \dots \Delta\xi(t_{2n+1}) \rangle = 0, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (2.9.4)$$

$$\langle \Delta\xi(t_1) \Delta\xi(t_2) \dots \Delta\xi(t_{2n}) \rangle = \sum \prod_{k_i < k_j} \langle \Delta\xi(t_{k_i}) \Delta\xi(t_{k_j}) \rangle, \quad n = 1, 2, \dots, \quad (2.9.5)$$

kus valemis (2.9.5) summeeritakse üle kõikvõimalike korrutiste.

2.10 Chapmani-Kolmogorovi võrrand

Valime ühe juhuslikult muutuva suurusega Markovi protsessis kolm suvalist ajahetke $t_1 < t_2 < t_3$ (vt ka ülesanne 2.3.1). Kirjutame seose (2.3.4) alusel üles ühistõenäosustiheduse⁶

$$W(x_3, t_3; x_2, t_2; x_1, t_1) = W(x_3, t_3 | x_2, t_2) W(x_2, t_2 | x_1, t_1) W(x_1, t_1).$$

⁵ Vt näiteks [8] lk 13.

⁶ Kui puudub otsene vajadus, siis on siin ja edaspidi tõenäosustiheduste tähistustes jäetud ära juhuslikule suurusele osutav indeks. Samuti võib olla edaspidi (eriti peatükis 4) juhusliku suuruse ja tema väärtuse tähistamiseks kasutatud ühte ja sama sümbolit.

Integreerime seda võrdust üle muutuja x_2 ,

$$\begin{aligned} \int W(x_3, t_3; x_2, t_2; x_1, t_1) dx_2 &= W(x_3, t_3; x_1, t_1) \\ &= \int W(x_3, t_3 | x_2, t_2) W(x_2, t_2 | x_1, t_1) W(x_1, t_1) dx_2. \end{aligned} \quad (2.10.1)$$

Võrduse (2.10.1) vasakul poolel kasutame uuesti seost (2.3.4),

$$W(x_3, t_3; x_1, t_1) = W(x_3, t_3 | x_1, t_1) W(x_1, t_1).$$

Siis saame

$$W(x_3, t_3 | x_1, t_1) = \int W(x_3, t_3 | x_2, t_2) W(x_2, t_2 | x_1, t_1) dx_2. \quad (2.10.2)$$

Valemit (2.10.2) nimetatakse *Chapmani-Kolmogorovi võrrandiks* (vahel ka *Smoluchowski võrrandiks*). See võrrand annab seosed *kõikvõimalike* üleminekutõenäosuste $W(x, t | x', t')$, $t > t'$ vahel Markovi protsessis.

Markovi protsess on täielikult määratud, kui on teada *kõik* tõenäosustihedused $W_\xi(x, t; x', t')$ või $W_\xi(x, t | x', t')$ ja $W_\xi(x, t)$, kusjuures üleminekutõenäosustihedused peavad rahuldama Chapmani-Kolmogorovi võrrandit. Kehtib ka väide, et kui on teada kõik tõenäosustihedused $W_\xi(x, t | x', t')$ ja $W_\xi(x, t)$ ning üleminekutõenäosustihedused rahuldavad Chapmani-Kolmogorovi võrrandit, siis on tegemist Markovi protsessiga.

Diskreetselt muutuva juhusliku suuruse korral on Chapmani-Kolmogorovi võrrand järgmine:

$$p(x_{l_3}, t_3 | x_{l_1}, t_1) = \sum_{l_2} p(x_{l_3}, t_3 | x_{l_2}, t_2) p(x_{l_2}, t_2 | x_{l_1}, t_1). \quad (2.10.3)$$

Seda valemit visualiseerib joonis 2.3.

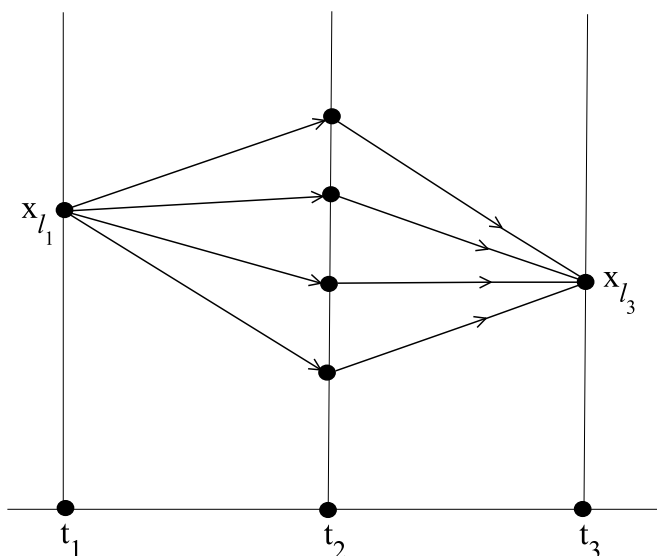
Ülesanded

Ülesanne 2.10.1. Tuletage Chapmani-Kolmogorovi võrrand diskreetselt muutuva juhusliku suuruse jaoks.

2.11 Kineetika põhivõrrand (*master equation*)

Kui me Chapmani-Kolmogorovi võrrandis (2.10.2) võtame $t_3 = t_2$, siis on tulemuseks samasus

$$W(x_3, t_2 | x_1, t_1) = W(x_3, t_2 | x_1, t_1),$$



Joonis 2.3. Chapmani-Kolmogorovi võrrandit (2.10.3) illustreeriv skeem.

kuna

$$W(x_3, t_2 | x_2, t_2) = \delta(x_2 - x_3).$$

Läheme nüüd võrrandis (2.10.2) piirile $t_3 \rightarrow t_2$. Sellisel juhul jõutakse diferentsiaalse Chapman-Kolmogorovi võrrandini. Tuletame selle võrrandi.

Leiame võrrandist (2.10.2) tuletise $\partial/\partial t_3|_{t_3=t_2}$. Saame

$$\left. \frac{\partial W(x_3, t_3 | x_1, t_1)}{\partial t_3} \right|_{t_3=t_2} = \int \left. \frac{\partial W(x_3, t_3 | x_2, t_2)}{\partial t_3} \right|_{t_3=t_2} W(x_2, t_2 | x_1, t_1) dx_2. \quad (2.11.1)$$

Defineerime

$$w(x_2 \rightarrow x_3, t_2) = \left. \frac{\partial W(x_3, t_3 | x_2, t_2)}{\partial t_3} \right|_{t_3=t_2}. \quad (2.11.2)$$

Suurst $w(x \rightarrow x', t)$ nimetatakse *üleminekusageduseks* ning interpreteeritakse järgmiselt:

i) $w(x \rightarrow x', t)$, $x \neq x'$ on tõenäosustiheduse muutumise kiirus selleks, et ajahetkel t juhusliku suuruse väärtus $\xi = x$ asenduks väärtusega vahemikus $x' \leq \xi \leq x' + dx'$;

ii) $w(x \rightarrow x, t)$ on tõenäosustiheduse muutumise kiirus selleks, et ajahetkel t juhusliku suuruse väärtus $\xi = x$ jääks vahemikku $x \leq \xi \leq x + dx$.

Võrrandi (2.11.1) jaoks saame nüüd

$$\frac{\partial W(x_3, t_2 | x_1, t_1)}{\partial t_2} = \int w(x_2 \rightarrow x_3, t_2) W(x_2, t_2 | x_1, t_1) dx_2. \quad (2.11.3)$$

Viime selle võrrandi sümmeetrilisemale kujule. Analoogselt valemiga (2.11.2) võime me defineerida

$$w(x_3 \rightarrow x_2, t_2) = \left. \frac{\partial W(x_2, t_3 | x_3, t_2)}{\partial t_3} \right|_{t_3=t_2}. \quad (2.11.4)$$

Võtame arvesse, et

$$\int W(x_2, t_3 | x_3, t_2) dx_2 = \frac{\int W(x_2, t_3; x_3, t_2) dx_2}{W(x_3, t_2)} = 1.$$

Järelikult

$$\int w(x_3 \rightarrow x_2, t_2) dx_2 = 0. \quad (2.11.5)$$

Arvestades sellega, lisame võrduse (2.11.3) paremale poolele nulliga võrduva liikme:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial W(x_3, t_2 | x_1, t_1)}{\partial t_2} \\ = & \int \left[w(x_2 \rightarrow x_3, t_2) W(x_2, t_2 | x_1, t_1) - w(x_3 \rightarrow x_2, t_2) W(x_3, t_2 | x_1, t_1) \right] dx_2. \end{aligned}$$

Tähistame veel $x_3 \equiv x$, $x_2 \equiv x'$, $t_2 \equiv t$. Tulemuseks on *diferentsiaalne Chapmani-Kolmogorovi võrrand*

$$\begin{aligned} \frac{\partial W(x, t | x_1, t_1)}{\partial t} = & \int \left[w(x' \rightarrow x, t) W(x', t | x_1, t_1) \right. \\ & \left. - w(x \rightarrow x', t) W(x, t | x_1, t_1) \right] dx', \end{aligned} \quad (2.11.6)$$

kus

$$w(x \rightarrow x', t) = \left. \frac{\partial W(x', t' | x, t)}{\partial t'} \right|_{t'=t}. \quad (2.11.7)$$

Korrutame võrrandit (2.11.6) tõenäosustihedusega $W(x_1, t_1)$ ja integreerime üle muutuja x_1 . See annab

$$\frac{\partial W(x, t)}{\partial t} = \int \left[w(x' \rightarrow x, t) W(x', t) - w(x \rightarrow x', t) W(x, t) \right] dx'. \quad (2.11.8)$$

Valemit (2.11.8) nimetatakse *kineetika põhivõrrandiks*.

Kineetika põhivõrrand kujutab endast tõenäosustiheduse $W(x, t)$ bilansi võrrandit. Saab näidata, et $w(x_1 \rightarrow x_2, t) \geq 0$, kui $x_1 \neq x_2$. Kui $x = x'$, siis vastavad liikmed kompenseeruvad võrrandi (2.11.8) paremal poolel. Seega kirjeldab esimene liige kineetika põhivõrrandi paremal poolel tõenäosustiheduse $W(x, t)$ kasvu ajas seoses sellega, et on võimalikud üleminekud $x' \rightarrow x$. Teine liige kirjeldab tõenäosustiheduse $W(x, t)$ kahanemist ajas seoses sellega, et on võimalikud üleminekud $x \rightarrow x'$.

Kui juhuslike suurus omandab diskreetseid väärtusi,

$$\xi = x_l, \quad l = 1, 2, \dots,$$

on kineetika põhivõrrand järgmine:

$$\frac{\partial p(x_l, t)}{\partial t} = \sum_{l'} \left[w(x_{l'} \rightarrow x_l, t) p(x_{l'}, t) - w(x_l \rightarrow x_{l'}, t) p(x_l, t) \right], \quad (2.11.9)$$

kus

$$w(x_l \rightarrow x_{l'}, t) = \left. \frac{\partial p(x_{l'}, t' | x_l, t)}{\partial t'} \right|_{t'=t}. \quad (2.11.10)$$

Ülesanded

Ülesanne 2.11.1. Näidake diskreetselt muutuva juhusliku suuruse jaoks, et üleminekusagedused rahuldavad tingimust $\sum_{l'} w(x_l \rightarrow x_{l'}, t) = 0$.

Ülesanne 2.11.2. Näidake diskreetselt muutuva juhusliku suuruse jaoks, et üleminekusagedused rahuldavad võrratusi

- a) $w(x_l \rightarrow x_{l'}, t) \geq 0$, kui $l \neq l'$;
- b) $w(x_l \rightarrow x_l, t) \leq 0$.

2.12 Detailne tasakaal

Kineetika põhivõrrandil (2.11.8) on olemas statsionaarne lahend, mis ei sõltu ajast ning vastab statsionaarsele protsessile,

$$W(x, t) = W^s(x).$$

See lahend peab valemi (2.11.8) kohaselt rahuldama tingimust

$$\int w(x' \rightarrow x) W^s(x') dx' = \int w(x \rightarrow x') W^s(x) dx'. \quad (2.12.1)$$

Üleminekusagedused ei sõltu siin ajast protsessi statsionaarsuse tõttu.

Võrdus (2.12.1) on täidetud, kui

$$w(x' \rightarrow x) W^s(x') = w(x \rightarrow x') W^s(x), \quad (2.12.2)$$

st üleminekud $x' \rightarrow x$ ja $x \rightarrow x'$ on tasakaalus. Tingimus (2.12.2) on rangem tingimusest (2.12.1). Seost (2.12.2) nimetatakse *detailse tasakaalu printsiibiks*.

Detailse tasakaalu printsiip realiseerub kindlasti siis, kui isoleeritud süsteem on *termodünaamilises tasakaalus*. Samas on see printsiip otseses seoses *mikroskoopiliste protsesside pööratavusega ajas*. Saab näidata⁷, arvestades klassikaliste või kvantmehaaniliste liikumisvõrrandite invariantisusega aja inversiooni suhtes, et termodünaamilises tasakaalus olevas süsteemis kehtib detailse tasakaalu printsiip.

Diskreetsete väärtustega juhusliku suuruse korral väljendab detailse tasakaalu printsiipi võrdus

$$w(x_l' \rightarrow x_l) p^s(x_l') = w(x_l \rightarrow x_l') p^s(x_l), \quad (2.12.3)$$

kus $p^s(x_l)$ on kineetika põhivõrrandi (2.11.9) statsionaarne lahend.

Ülesanded

Ülesanne 2.12.1. Põhjendage, et statsionaarse protsessi korral üleminekusagedused ajast ei sõltu.

2.13 Ajas homogeenne Markovi protsess

Markovi protsessi nimetatakse *ajas homogeenseks*, kui üleminekutõenäosustihedused (üleminekutõenäosused) sõltuvad ainult ajahetkede vahest,

$$W(x', t' | x, t) = W(x' | x; t' - t). \quad (2.13.1)$$

Valemist (2.11.7) järeldub, et ajas homogeenne protsessi korral üleminekusagedused ajast ei sõltu,

$$w(x \rightarrow x', t) = w(x \rightarrow x'). \quad (2.13.2)$$

Ajas homogeenne protsessiga on tegemist *isoleeritud süsteemi* korral, aga ka situatsioonis, kui süsteemile mõjub *statsionaarne väli*. Siis on süsteemile rakendatav aja üldine homogeensuse omadus.

⁷ Vt [3] I osa lk 164–168.

Statsionaarne protsess on ajas homogeenne protsessi erijuhuks, mille saame, kui lisaks tingimusele (2.13.1) *üksiktõenäosustihedused (üksiktõenäosused) ajasat ei sõltu*. Võib ka näidata (vt punkt 2.14), et kui isoleeritud süsteemis kulgeb ajas homogeenne Markovi protsess, siis kineetika põhivõrrandi lahend läheneb aja jooksul monotoonselt statsionaarsele lahendile, st homogeenne protsess läheb üle statsionaarseks protsessiks, mis vastab süsteemi tasakaaluolekule (termodünaamilisele tasakaalule).

Ülesanded

Ülesanne 2.13.1. Põhjendage, et ajas homogeenne Markovi protsessi korral üleminekusagedused ajast ei sõltu.

Ülesanne 2.13.2. Põhjendage, et protsessi statsionaarsusest järeljub protsessi homogeensus ajas.⁸

2.14 Kineetika põhivõrrand ja pöördumatu protsess

Näitame nüüd, et ajas homogeenne Markovi protsess, mis kulgeb isoleeritud süsteemis⁹, kujutab endast *pöördumatut protsessi*, mille käigus süsteem relakseerub tasakaaluolekusse, millele vastab kineetika põhivõrrandi statsionaarne lahend. Kirjeldab sellist süsteemi pöördumatut evolutsiooni kineetika põhivõrrand.

Olgu meil diskreetse muutujaga ajas homogeenne Markovi protsess. Defineerime funktsiooni

$$\mathcal{H}(t) = \sum_l p(x_l, t) \ln \frac{p(x_l, t)}{p^s(x_l)}, \quad (2.14.1)$$

kus $p(x_l, t)$ rahuldab kineetika põhivõrrandit (2.11.9) ja $p^s(x_l)$ selle võrrandi statsionaarne lahend. Leiame tuletise aja järgi

$$\frac{d\mathcal{H}(t)}{dt} = \sum_l \frac{\partial p(x_l, t)}{\partial t} \ln \frac{p(x_l, t)}{p^s(x_l)} + \sum_l \frac{\partial p(x_l, t)}{\partial t}. \quad (2.14.2)$$

Seoses normeerimistingimusega

$$\sum_l p(x_l, t) = 1 \quad (2.14.3)$$

⁸ Vastupidine väide üldjuhul loomulikult ei kehti.

⁹ Isoleeritud süsteemi korral eksisteerib termodünaamilise tasakaalu seisund, kus kehtib detailse tasakaalu printsiip.

on teine liige avaldise (2.14.2) paremal poolel võrdne nulliga. Kasutame kineetika põhivõrrandit (2.11.9), mis annab

$$\frac{d\mathcal{H}(t)}{dt} = \sum_{l,l'} \left[w(x_{l'} \rightarrow x_l) p(x_{l'}, t) - w(x_l \rightarrow x_{l'}) p(x_l, t) \right] \ln \frac{p(x_l, t)}{p^s(x_l)}.$$

Kuna eeldatakse, et protsess on ajas homogeenne, siis üleminekusagedused siin ajast ei sõltu. Esitame nurksulgudes oleva avaldise kujul

$$\begin{aligned} & w(x_{l'} \rightarrow x_l) p(x_{l'}, t) - w(x_l \rightarrow x_{l'}) p(x_l, t) \\ &= w(x_{l'} \rightarrow x_l) p^s(x_{l'}) \frac{p(x_{l'}, t)}{p^s(x_{l'})} - w(x_l \rightarrow x_{l'}) p^s(x_l) \frac{p(x_l, t)}{p^s(x_l)} \end{aligned}$$

ning rakendame seejärel detailse tasakaalu printsiipi (2.12.3). Tulemuseks on

$$\begin{aligned} & w(x_{l'} \rightarrow x_l) p(x_{l'}, t) - w(x_l \rightarrow x_{l'}) p(x_l, t) \\ &= w(x_{l'} \rightarrow x_l) p^s(x_{l'}) \left[\frac{p(x_{l'}, t)}{p^s(x_{l'})} - \frac{p(x_l, t)}{p^s(x_l)} \right]. \end{aligned}$$

Seega

$$\frac{d\mathcal{H}(t)}{dt} = \sum_{l,l'} w(x_{l'} \rightarrow x_l) p^s(x_{l'}) \left[\frac{p(x_{l'}, t)}{p^s(x_{l'})} - \frac{p(x_l, t)}{p^s(x_l)} \right] \ln \frac{p(x_l, t)}{p^s(x_l)}. \quad (2.14.4)$$

Vahetades võrduse paremal poolel summeerimisindeksid ja pidades silmas detailse tasakaalu printsiipi (2.12.3), võime esitada viimase valemi ka kujul

$$\frac{d\mathcal{H}(t)}{dt} = - \sum_{l,l'} w(x_{l'} \rightarrow x_l) p^s(x_{l'}) \left[\frac{p(x_{l'}, t)}{p^s(x_{l'})} - \frac{p(x_l, t)}{p^s(x_l)} \right] \ln \frac{p(x_{l'}, t)}{p^s(x_{l'})}. \quad (2.14.5)$$

Liidame võrdused (2.14.4) ja (2.14.5) ning avaldame siit uuesti tuletise

$$\begin{aligned} \frac{d\mathcal{H}(t)}{dt} &= -\frac{1}{2} \sum_{l,l'} w(x_{l'} \rightarrow x_l) p^s(x_{l'}) \left[\frac{p(x_{l'}, t)}{p^s(x_{l'})} - \frac{p(x_l, t)}{p^s(x_l)} \right] \\ &\quad \times \left[\ln \frac{p(x_{l'}, t)}{p^s(x_{l'})} - \ln \frac{p(x_l, t)}{p^s(x_l)} \right]. \end{aligned} \quad (2.14.6)$$

Võtame arvesse, et kuna logaritmi on monotoonselt kasvav funktsioon, siis kehtib võrratus $(x - y)(\ln x - \ln y) \geq 0$. Järelikult

$$\frac{d\mathcal{H}(t)}{dt} \leq 0. \quad (2.14.7)$$

Anneme nüüd valemiga (2.14.1) defineeritud funktsioonile kuju

$$\mathcal{H}(t) = \sum_l p^s(x_l) \frac{p(x_l, t)}{p^s(x_l)} \ln \frac{p(x_l, t)}{p^s(x_l)}.$$

Siit on näha, et kuna funktsioon $x \ln x$ on altpoolt tõkestatud, siis on ka funktsioon $\mathcal{H}(t)$ altpoolt tõkestatud. Seejuures $\mathcal{H}(t)$ minimaalsele väärtusele $\mathcal{H}(t) = 0$ vastab kineetika põhivõrrandi statsionaarne lahend $p(x_l, t) = p^s(x_l)$.¹⁰

Seega järeldub valemist (2.14.7), et meil on protsess, mille käigus $\mathcal{H}(t)$ kahaneb monotoonselt, kuni jõuab oma minimaalse väärtuseni termodünaamilises tasakaalus. Tegemist on pöördumatu protsessiga.

Ülesanded

Ülesanne 2.14.1. Näidake, et valemiga (2.14.1) defineeritud funktsioon $\mathcal{H}(t)$ on minimaalne, kui $p(x_l, t) = p^s(x_l)$.

¹⁰ Selles võib veenduda, leides \mathcal{H} kui muutujate $p(x_1, t), p(x_2, t), \dots$ funktsiooni ekstreemumi Lagrange'i meetodi abil, kui on täidetud tingimus (2.14.3).

3. Fokkeri-Plancki võrrand

3.1 Kramersi-Moyali reaksarendus

Diferentsiaalne Chapmani-Kolmogorovi võrrand ja kineetika põhivõrrand on võrrandid, mida peavad rahuldama vastavalt tinglik tõenäosustihedus $W(x, t|x', t')$ ja üksiktõenäosustihedus $W(x, t)$ Markovi protsessi korral. Meie eesmärgiks on nüüd tuletada¹ osatuletistega diferentsiaalvõrrandid nimetatud tõenäosustiheduste jaoks.

Kogu informatsioon Markovi protsessi kohta sisaldub ühistõenäosustihedustes

$$W(x, t + \tau; x', t) = W(x, t + \tau|x', t)W(x', t). \quad (3.1.1)$$

Integreerides siin üle x' -i, saame

$$W(x, t + \tau) = \int W(x, t + \tau|x', t) W(x', t) dx'. \quad (3.1.2)$$

Defineerime järgmised momendid:

$$M_n(x', t, \tau) = \left\langle \left[\xi(t + \tau) - \xi(t) \right]^n \right\rangle \Big|_{\xi(t)=x'} = \int (x - x')^n W(x, t + \tau|x', t) dx. \quad (3.1.3)$$

Momendid (3.1.3) on ajahetkel $t + \tau$ määratud tingimusel, et ajahetkel t on juhusliku suuruse väärtus fikseeritud, $\xi(t) = x'$.

Kui $\tau = 0$, siis saame valemist (3.1.3) algtingimuse momentide jaoks ($n \neq 0$)

$$M_n(x', t, 0) = 0 \quad (3.1.4)$$

ning sellega kooskõllaliselt algtingimuse üleminekutõenäosustiheduse jaoks

$$W(x, t|x', t) = \delta(x - x'). \quad (3.1.5)$$

Kirjutame üles identsuse

$$W(x, t + \tau|x', t) = \int \delta(y - x) W(y, t + \tau|x', t) dy. \quad (3.1.6)$$

¹ Lisaks allpool esitatavale Kramersi-Moyali reaksarenduse tuletuskäigule on raamatus [1] lk 63–66 toodud veel kaks detailides alternatiivset tuletuskäiku.

Esitame δ -funktsiooni

$$\delta(y - x) = \delta(x' - x + y - x')$$

Taylori reana $y - x'$ astmete järgi,

$$\delta(y - x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(y - x')^n}{n!} \left(\frac{\partial}{\partial x'} \right)^n \delta(x' - x). \quad (3.1.7)$$

Asendame siit δ -funktsiooni avaldisse (3.1.6).

$$\begin{aligned} W(x, t + \tau | x', t) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \int (y - x')^n W(y, t + \tau | x', t) dy \\ \times \left(\frac{\partial}{\partial x'} \right)^n \delta(x' - x) &= \left[1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} M_n(x', t, \tau) \left(\frac{\partial}{\partial x'} \right)^n \right] \delta(x' - x). \end{aligned} \quad (3.1.8)$$

Edasi asendame üleminekutõenäosustiheduse valemist (3.1.8) avaldisse (3.1.2). See annab

$$\begin{aligned} W(x, t + \tau) &= \int \delta(x' - x) W(x', t) dx' \\ &\quad + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \int M_n(x', t, \tau) \left[\left(\frac{\partial}{\partial x'} \right)^n \delta(x' - x) \right] W(x', t) dx'. \end{aligned}$$

Arvestame, et

$$\left(\frac{\partial}{\partial x'} \right)^n \delta(x' - x) = \left(-\frac{\partial}{\partial x} \right)^n \delta(x' - x).$$

Siis

$$\begin{aligned} W(x, t + \tau) &= \int \delta(x' - x) W(x', t) dx' \\ &\quad + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{\partial}{\partial x} \right)^n \int M_n(x', t, \tau) \delta(x' - x) W(x', t) dx' \end{aligned}$$

ning peale integreerimist saame

$$W(x, t + \tau) = W(x, t) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{\partial}{\partial x} \right)^n M_n(x, t, \tau) W(x, t). \quad (3.1.9)$$

Läheme valemis (3.1.9) piirile $\tau \rightarrow 0$ ja võtame arvesse ainult lineaarseid parandusi τ järgi (kõrgemat järku parandused vaadeldaval piirjuhul panust ei anna). Vastavalt sellele

$$\begin{aligned} W(x, t + \tau) &= W(x, t) + \frac{\partial W(x, t)}{\partial t} \tau, \\ M_n(x, t, \tau) &= M_n(x, t, 0) + \left. \frac{\partial M_n(x, t, \tau)}{\partial \tau} \right|_{\tau=0} \tau. \end{aligned}$$

Peale asendusi valemisse (3.1.9) jõuame tulemuseni

$$\frac{\partial W(x, t)}{\partial t} = \sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{\partial}{\partial x} \right)^n D^{(n)}(x, t) W(x, t), \quad (3.1.10)$$

kus on tähistatud

$$\begin{aligned} D^{(n)}(x, t) &= \frac{1}{n!} \frac{\partial M_n(x, t, \tau)}{\partial \tau} \Big|_{\tau=0} \\ &= \frac{1}{n!} \left[\frac{\partial}{\partial \tau} \left\langle [\xi(t + \tau) - \xi(t)]^n \right\rangle \Big|_{\xi(t)=x} \right]_{\tau=0}. \end{aligned} \quad (3.1.11)$$

Avaldist (3.1.10) nimetatakse *Kramersi-Moyali reaksarenduseks*. Märgime veel, et koefitsiendid (3.1.11) võib esitada ka kujul

$$D^{(n)}(x, t) = \frac{1}{n!} \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{1}{\tau} \left\langle [\xi(t + \tau) - \xi(t)]^n \right\rangle \Big|_{\xi(t)=x}. \quad (3.1.12)$$

Defineerime *Kramersi-Moyali operaatori*

$$\hat{L}_{KM}(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{\partial}{\partial x} \right)^n D^{(n)}(x, t). \quad (3.1.13)$$

Selle abil saab reaksarenduse (3.1.10) esitada kompaktselt,

$$\frac{\partial W(x, t)}{\partial t} = \hat{L}_{KM}(x, t) W(x, t). \quad (3.1.14)$$

Me võime kohe üles kirjutada ka Kramersi-Moyali reaksarenduse üleminekutõenäosustiheduse jaoks. Selleks võtame arvesse, et $W(x, t|x', t')$ langeb ilmselt kokku tõenäosustihedusega $W(x, t)$, $t \geq t'$, kui viimase jaoks on algtingimuseks $W(x, t') = \delta(x - x')$. Kuna valem (3.1.14) kehtib suvalise algtingimuse korral, siis peab üleminekutõenäosustihedus rahuldama analoogset võrrandit

$$\frac{\partial W(x, t|x', t')}{\partial t} = \hat{L}_{KM}(x, t) W(x, t|x', t'). \quad (3.1.15)$$

Algtingimuseks on seejuures võrdus

$$W(x, t'|x', t') = \delta(x - x'), \quad (3.1.16)$$

mis peab alati kehtima.

Ülesanded

Ülesanne 3.1.1. Põhjendage valemi (3.1.12) kehtivust.

3.2 Kramersi-Moyali pöördreaksarendus

Valemid (3.1.15), (3.1.13) kujutavad endast üleminekutõenäosustiheduse liikumisvõrrandit aegade $t \geq t'$ jaoks, kus t' on fikseeritud. Tuletame² nüüd üleminekutõenäosustiheduse liikumisvõrrandi aegade $t' \leq t$ jaoks, kus t on fikseeritud.

Lähtume Chapmani-Kolmogorovi võrrandist (2.10.2) kujul

$$W(x, t|x', t') = \int W(x, t|x'', t' + \tau) W(x'', t' + \tau|x', t') dx'', \quad (3.2.1)$$

kus $t \geq t' + \tau \geq t'$. Analoogselt valemiga (3.1.6) esitame

$$W(x'', t' + \tau|x', t') = \int \delta(y - x'') W(y, t' + \tau|x', t') dy. \quad (3.2.2)$$

Arendame δ -funktsiooni avaldises (3.2.2) Taylori ritta

$$\delta(y - x'') = \delta(x' - x'' + y - x') = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(y - x')^n}{n!} \left(\frac{\partial}{\partial x'} \right)^n \delta(x' - x''). \quad (3.2.3)$$

See annab

$$\begin{aligned} & W(x'', t' + \tau|x', t') \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \int (y - x')^n W(y, t' + \tau|x', t') dy \left(\frac{\partial}{\partial x'} \right)^n \delta(x' - x'') \\ &= \left[1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} M_n(x', t', \tau) \left(\frac{\partial}{\partial x'} \right)^n \right] \delta(x' - x''). \end{aligned} \quad (3.2.4)$$

Asendame selle üleminekutõenäosustiheduse võrrandisse (3.2.1):

$$\begin{aligned} W(x, t|x', t') &= \int W(x, t|x'', t' + \tau) \delta(x' - x'') dx'' \\ &\quad + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} M_n(x', t', \tau) \left(\frac{\partial}{\partial x'} \right)^n \int W(x, t|x'', t' + \tau) \delta(x' - x'') dx''. \end{aligned}$$

Selle võrduse paremal poolel seisva teise liikme struktuuri võiks võrrelda ka vastava liikmega avaldises, mis järgneb vahetult valemile (3.1.8). Peale integreerimist saame

$$\begin{aligned} & W(x, t|x', t') \\ &= W(x, t|x', t' + \tau) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} M_n(x', t', \tau) \left(\frac{\partial}{\partial x'} \right)^n W(x, t|x', t' + \tau). \end{aligned} \quad (3.2.5)$$

² Vt [1] lk 67–69.

Läheme valemis (3.2.5) piirile $\tau \rightarrow 0$ ning piirdume ainult τ järgi lineaarsete parandustega, kuna kõrgemat järku parandused lõppkokkuvõttes panust ei anna. Võrduse (3.2.5) paremal poolel esimeses liikmes seega

$$W(x, t|x', t' + \tau) = W(x, t|x', t') + \frac{\partial W(x, t|x', t')}{\partial t'} \tau.$$

Teises liikmes

$$\frac{1}{n!} M_n(x', t', \tau) = \frac{1}{n!} M_n(x', t', 0) + \frac{1}{n!} \frac{\partial M_n(x', t', \tau)}{\partial \tau} \Big|_{\tau=0} \tau = D^{(n)}(x', t') \tau.$$

Seepärast võib siin võtta

$$W(x, t|x', t' + \tau) = W(x, t|x', t').$$

Tulemuseks saame otsitava liikumisvõrrandi

$$\frac{\partial W(x, t|x', t')}{\partial t'} = - \sum_{n=1}^{\infty} D^{(n)}(x', t') \left(\frac{\partial}{\partial x'} \right)^n W(x, t|x', t'). \quad (3.2.6)$$

Valemit (3.2.6) nimetatakse *Kramersi-Moyali pöördreaksarenduseks*.

Võrrandi (3.2.6) võib esitada ka operaatorkujul

$$\frac{\partial W(x, t|x', t')}{\partial t'} = -\hat{L}_{KM}^+(x', t') W(x, t|x', t'), \quad (3.2.7)$$

kus

$$\hat{L}_{KM}^+(x', t') = \sum_{n=1}^{\infty} D^{(n)}(x', t') \left(\frac{\partial}{\partial x'} \right)^n \quad (3.2.8)$$

on *Kramersi-Moyali operaatori kaasoperaator*.

3.3 Pawula teoreem

Kramersi-Moyali reaksarendus on määratud Kramersi-Moyali operaatoriga

$$\hat{L}_{KM}(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{\partial}{\partial x} \right)^n D^{(n)}(x, t) \quad (3.3.1)$$

ja pöördreaksarendus selle operaatori kaasoperaatoriga

$$\hat{L}_{KM}^+(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} D^{(n)}(x, t) \left(\frac{\partial}{\partial x} \right)^n. \quad (3.3.2)$$

Pawula teoreem³ väidab, et read (3.3.1) ja (3.3.2) katkevad pärast liiget $n = 1$ või pärast liiget $n = 2$ või siis sisaldavad need read lõpmatu arvu nullist erinevaid liikmeid.

Teoreemi tõestuseks kasutame üldistatud Schwartzi võrratust

$$\left[\int f(x) g(x) F(x) dx \right]^2 \leq \left[\int f^2(x) F(x) dx \right] \left[\int g^2(x) F(x) dx \right], \quad (3.3.3)$$

kus $f(x)$ ja $g(x)$ on suvalised funktsioonid ja $F(x)$ on mittenegatiivne funktsioon. Valime

$$\begin{aligned} f(x) &= (x - x')^n, & g(x) &= (x - x')^{n+m}, & n, m &\geq 0, \\ F(x) &= W(x, t + \tau|x', t'). \end{aligned}$$

Võrratus (3.3.3) saab nüüd kuju

$$\begin{aligned} & \left[\int (x - x')^{2n+m} W(x, t + \tau|x', t') dx \right]^2 \\ & \leq \left[\int (x - x')^{2n} W(x, t + \tau|x', t') dx \right] \left[\int (x - x')^{2n+2m} W(x, t + \tau|x', t') dx \right]. \end{aligned}$$

Siit järeldub, pidades silmas definitsiooni (3.1.3), et momentide jaoks peab kehtima võrratus

$$M_{2n+m}^2(x', t, \tau) \leq M_{2n}(x', t, \tau) M_{2n+2m}(x', t, \tau), \quad n \geq 0, m \geq 0. \quad (3.3.4)$$

Valemist (3.3.4) peaksid järelduma teatud tingimused ridades (3.3.1), (3.3.2) sisalduvate koefitsientide

$$D^{(n)}(x, t) = \frac{1}{n!} \left. \frac{\partial M_n(x, t, \tau)}{\partial \tau} \right|_{\tau=0}, \quad n \geq 1 \quad (3.3.5)$$

jaoks.

Paneme kõigepealt tähele, et kui me valime valemis (3.3.4) $m = 0$, $n \geq 0$, siis saame samasuse $M_{2n}^2 = M_{2n}^2$, mis meile mingit uut informatsiooni ei anna. Juhul, kui $n = 0$, $m \geq 1$, saame võrratusest (3.3.4)

$$M_m^2(x', t, \tau) \leq M_{2m}(x', t, \tau), \quad (3.3.6)$$

kuna $M_0 = 1$. Läheme nüüd piirile $\tau \rightarrow 0$ ning esitame momendid kujul (vt punkt 3.1)

$$M_{(\dots)}(x', t, \tau) = (\dots)! D^{(\dots)}(x', t) \tau. \quad (3.3.7)$$

³ R. F. Pawula, *Phys. Rev.* **162**, 186 (1967). Vt ka [1] lk 70–71.

Kui me asendame siit vastavad momendid valemisse (3.3.6), siis jõuame võrratuseni

$$[m! D^{(m)} \tau]^2 \leq (2m)! D^{(2m)} \tau,$$

mis $\tau = 0$ korral annab tingimuse $D^{(2m)} \geq 0$. Teoreemi tõestamiseks see tingimus oluline ei ole.

Seega on võrratus (3.3.4) meie jaoks aktuaalne juhtudel, kui

$$n \geq 1, \quad m \geq 1. \quad (3.3.8)$$

Asendades momendid valemist (3.3.7) võrratusse (3.3.4), saame

$$[(2n+m)! D^{(2n+m)}]^2 \leq (2n)!(2n+2m)! D^{(2n)} D^{(2n+2m)}. \quad (3.3.9)$$

Edasi analüüsime võrratust (3.3.9).

Valem (3.3.9) annab meile kaks järgmist tingimust:

$$\text{kui } D^{(2n)} = 0, \text{ siis } D^{(2n+m)} = 0, \quad n, m \geq 1, \quad (3.3.10)$$

$$\text{kui } D^{(2n+2m)} = 0, \text{ siis } D^{(2n+m)} = 0, \quad n, m \geq 1. \quad (3.3.11)$$

Olgu

$$D^{(2)} = 0. \quad (3.3.12)$$

Tingimusest (3.3.10) järeldeb siis, et

$$D^{(3)} = D^{(4)} = \dots = 0. \quad (3.3.13)$$

Seejuures $D^{(1)}$ võib olla nullist erinev. Seega antud juhul katkevad Kramersi-Moyali reaksarendus ja pöördreaksarendus pärast esimest liiget.

Olgu nüüd

$$D^{(4)} = 0. \quad (3.3.14)$$

Tingimusest (3.3.10) järeldeb, et

$$D^{(5)} = D^{(6)} = \dots = 0. \quad (3.3.15)$$

Tingimusest (3.3.11) aga saame

$$D^{(3)} = 0, \quad (3.3.16)$$

kusjuures $D^{(1)}$ ja $D^{(2)}$ võivad olla nullist erinevad. Seega katkevad Kramersi-Moyali reaksarendus ja pöördreaksarendus nüüd pärast teist liiget.

Edasi näitame, et kui suvaline

$$D^{(2l)} = 0, \quad l \geq 3, \quad (3.3.17)$$

siis saame pärast teist liiget katkevad Kramersi-Moyali read. Selleks esitame $2l = 2n + 4$, $n \geq 1$. Siis

$$D^{(2l)} = D^{(2n+4)} = 0,$$

millest järeldub tingimuse (3.3.11) alusel, et

$$D^{(2n+2)} = D^{(2l-2)} = 0.$$

Kordame seda protseduuri, kuni jõuame tulemuseni $D^{(4)} = 0$, mis annab valemitega (3.3.14)–(3.3.16) kirjeldatud juhu.

Ülaltoodust on selge, et võimalik on veel ainult selline olukord, kui kõik koefitsiendid $D^{(2l)} \neq 0$, $l \geq 1$, st Kramersi-Moyali read ei katke. Seejuures koefitsientide $D^{(2l'+1)}$, $l' \geq 0$ jaoks mingit tingimust ei ole.

Sellega on Pawula teoreem tõestatud.

3.4 Genereerimis- ja rekombinatsiooniprotsessid (ühesammulised protsessid)

Selles punktis käsitletu on näide protsessidest, mida kirjeldavad lõpmata palju liikmeid sisaldavad Kramersi-Moyali read.

Lähtume kineetika põhivõrrandist (2.11.9) diskreetselt muutuva juhusliku suuruse jaoks

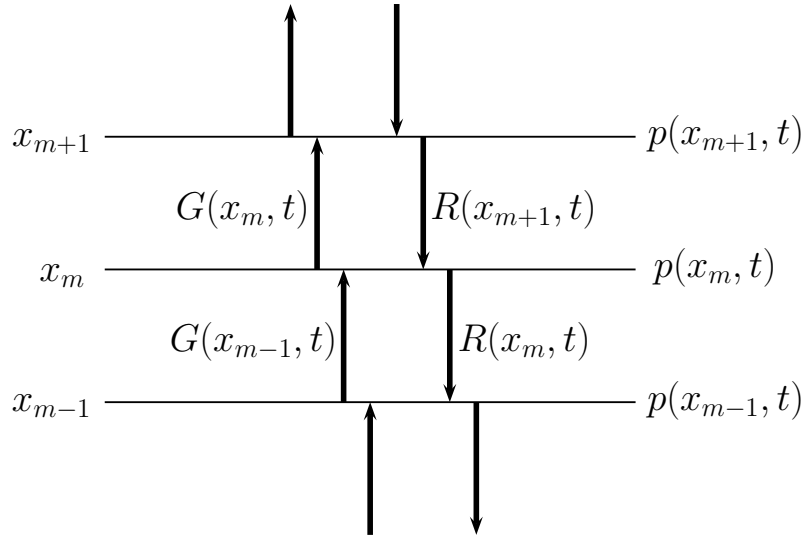
$$\frac{\partial p(x_m, t)}{\partial t} = \sum_{m'} [w(x_{m'} \rightarrow x_m, t) p(x_{m'}, t) - w(x_m \rightarrow x_{m'}, t) p(x_m, t)]. \quad (3.4.1)$$

Vaatleme protsessi, kus $x_m = lm$, $m = 0, 1, 2, \dots$ ning üleminekud leiavad aset ainult lähimate naabrite vahel:

- i) $x_m \rightarrow x_{m+1}$ üleminekusagedusega $G(x_m, t)$, mida nimetatakse *genereerimise kiiruseks*;
- ii) $x_m \rightarrow x_{m-1}$ üleminekusagedusega $R(x_m, t)$, mida nimetatakse *rekombinatsiooni kiiruseks*.

Kineetika põhivõrrand (3.4.1) saab antud juhul kuju (vt ka joonis 3.1)

$$\begin{aligned} \frac{\partial p(x_m, t)}{\partial t} &= G(x_{m-1}, t) p(x_{m-1}, t) - G(x_m, t) p(x_m, t) \\ &\quad + R(x_{m+1}, t) p(x_{m+1}, t) - R(x_m, t) p(x_m, t). \end{aligned} \quad (3.4.2)$$



Joonis 3.1. Olekutevahelised üleminekud genereerimis- ja rekombinatsiooniprotsessis. Igale kujutatud üleminekule vastab üks liige kineetika põhivõrrandi (3.4.2) paremal poolel.

Tähistame siin $x_m \equiv x$ ning esitame võrrandi paremal poolel esimese ja kolmanda liikme Taylori ridadena (käsitledes siin x -i formaalselt pideva muutujana)

$$G(x_{m-1}, t) p(x_{m-1}, t) = G(x, t) p(x, t) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-l)^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial x^n} G(x, t) p(x, t),$$

$$R(x_{m+1}, t) p(x_{m+1}, t) = R(x, t) p(x, t) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{l^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial x^n} R(x, t) p(x, t).$$

Peale asendamist valemisse (3.4.2) saame

$$\begin{aligned} \frac{\partial p(x, t)}{\partial t} &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \frac{\partial^n}{\partial x^n} [(-l)^n G(x, t) p(x, t) + l^n R(x, t) p(x, t)] \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{\partial}{\partial x} \right)^n [l^n G(x, t) p(x, t) + (-l)^n R(x, t) p(x, t)]. \end{aligned}$$

Tulemuseks on Kramersi-Moyali rida (vt (3.1.10))

$$\frac{\partial p(x, t)}{\partial t} = \sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{\partial}{\partial x} \right)^n D^{(n)}(x, t) p(x, t), \quad (3.4.3)$$

kus

$$D^{(n)}(x, t) = \frac{1}{n!} l^n [G(x, t) + (-1)^n R(x, t)]. \quad (3.4.4)$$

Me võime kontrollida, kas avaldis (3.4.4) on kooskõlas üldise valemiga (3.1.11):

$$D^{(n)}(x, t) = \frac{1}{n!} \left. \frac{\partial M_n(x, t, \tau)}{\partial \tau} \right|_{\tau=0}, \quad (3.4.5)$$

kus

$$M_n(x, t, \tau) = \langle [\xi(t + \tau) - \xi(t)]^n \rangle \Big|_{\xi(t)=x}. \quad (3.4.6)$$

Pidades silmas, et meil on tegemist diskreetselt muutuva juhusliku suurusega ning tähistust $x = x_m$, saame

$$M_n(x, t, \tau) = \sum_{m'} (x_{m'} - x_m)^n p(x_{m'}, t + \tau | x_m, t). \quad (3.4.7)$$

Seega

$$\begin{aligned} D^{(n)}(x, t) &= \frac{1}{n!} \sum_{m'} (x_{m'} - x_m)^n \left. \frac{\partial p(x_{m'}, t + \tau | x_m, t)}{\partial \tau} \right|_{\tau=0} \\ &= \frac{1}{n!} \sum_{m'} (x_{m'} - x_m)^n w(x_m \rightarrow x_{m'}, t). \end{aligned}$$

Kuna $x_m = lm$, $x_{m'} = lm'$, siis

$$D^{(n)}(x, t) = \frac{1}{n!} l^n \sum_{m'} (m' - m)^n w(x_m \rightarrow x_{m'}, t). \quad (3.4.8)$$

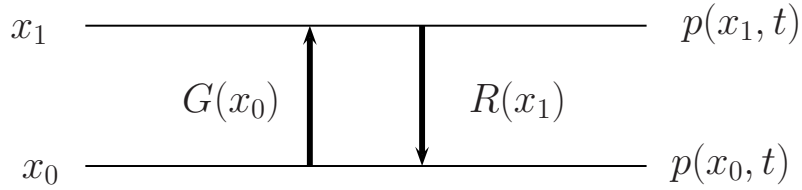
Võtame arvesse, et vaadeldavas protsessis toimuvad üleminekud ainult lähimate naabrite vahel, st summas (3.4.8) $m' = m - 1, m, m + 1$. Seega

$$\begin{aligned} D^{(n)}(x, t) &= \frac{1}{n!} l^n [(m - 1 - m)^n w(x_m \rightarrow x_{m-1}, t) \\ &\quad + (m - m)^n w(x_m \rightarrow x_m, t) + (m + 1 - m)^n w(x_m \rightarrow x_{m+1}, t)] \\ &= \frac{1}{n!} l^n [(-1)^n R(x, t) + G(x, t)]. \end{aligned}$$

Tulemuseks oleme saanud avaldise (3.4.4).

Kõige lihtsamaks genereerimis- ja rekombinatsiooniprotsessiks on selline, kus toimuvad üleminekud ainult kahe oleku, ütleme x_0 ja x_1 vahel, vt joonis 3.2. Olgu meil tegemist ajas homogeenise protsessiga (isoleeritud süsteem). Siis üleminekusagedused ajast ei sõltu. Eeldame ka, et

$$G(x_0) = R(x_1) \equiv w. \quad (3.4.9)$$



Joonis 3.2. Genereerimis- ja rekombinatsiooniprotsess kahe olekuga süsteemis.

Kineetika põhivõrrandist (3.4.2) jõuame nüüd võrrandisüsteemini

$$\begin{aligned} \frac{\partial p(x_0, t)}{\partial t} &= w [p(x_1, t) - p(x_0, t)], \\ \frac{\partial p(x_1, t)}{\partial t} &= w [p(x_0, t) - p(x_1, t)]. \end{aligned} \quad (3.4.10)$$

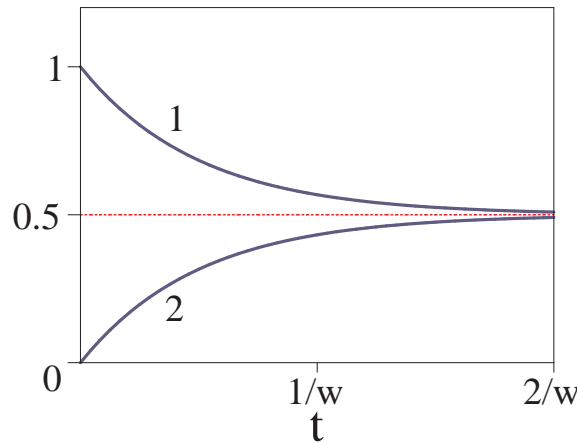
Kehtigu alghetkel $t = t_0$ tõenäosuste jaoks

$$p(x_0, t_0) = 1, \quad p(x_1, t_0) = 0. \quad (3.4.11)$$

Sellise algtingimuse korral on võrrandite (3.4.10) lahenditeks

$$\begin{aligned} p(x_0, t) &= \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \exp[-2w(t - t_0)], \\ p(x_1, t) &= \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \exp[-2w(t - t_0)]. \end{aligned} \quad (3.4.12)$$

Kui me läheme valemities (3.4.12) piirile $t \rightarrow \infty$ (praktiliselt $t - t_0 \gg w^{-1}$), siis



Joonis 3.3. Tõenäosuste $p(x_0, t)$ (kõver (1)) ja $p(x_1, t)$ (kõver (2)) sõltuvus ajast, kui $t_0 = 0$.

saavutab süsteem termodünaamilise tasakaalu, kus vaadeldav protsess on statsionaarne, üksiktõenäosused ajast ei sõltu ning

$$p(x_0) = p(x_1) = \frac{1}{2}.$$

Pöördumatu protsess, mida kirjeldab leitud tõenäosuste (3.4.12) ajaline evolutsioon, on kujutatud joonisel 3.3.

Allpool me osutame veel genereerimis- ja rekombinatsiooniprotsesside kahele olulisele erijuhule, millisteks on sünni ja surma protsess (punkt 3.5) ja Poissoni protsess (punkt 3.6).

3.5 Sünni ja surma protsess

Me saame *sünni ja surma protsessi*, kui võtame võrrandis (3.4.2) $x_m = m$ ja

$$G(m) = \mu m, \quad R(m) = \nu m, \quad \mu, \nu = \text{const.} \quad (3.5.1)$$

Kineetika põhivõrrand on nüüd kujuga

$$\begin{aligned} \frac{\partial p(m, t)}{\partial t} = & \mu [(m-1)p(m-1, t) - mp(m, t)] \\ & + \nu [(m+1)p(m+1, t) - mp(m, t)]. \end{aligned} \quad (3.5.2)$$

Vastav Kramersi-Moyali rida on järgmine:

$$\frac{\partial p(m, t)}{\partial t} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\mu + (-1)^n \nu}{n!} \left(-\frac{\partial}{\partial m} \right)^n mp(m, t). \quad (3.5.3)$$

Kui valemities (3.5.2) ja (3.5.3) $\mu = 0$, siis saame võrrandid, mis kirjeldavad näiteks radioaktiivset lagunemist.⁴

⁴ Radioaktiivset lagunemisprotsessi modelleerib kineetika põhivõrrand

$$\frac{\partial p(n, t)}{\partial t} = \nu [(n+1)p(n+1, t) - np(n, t)], \quad (3.5.4)$$

mis on võrrandi (3.5.2) erijuhuks. Siin $p(n, t)$ tähistab tõenäosust, et ajahetkel t on olemas n radioaktiivset aatomit. Valemi (3.5.4) alusel on lihtne näidata, et keskmine radioaktiivsete aatomite arv ajahetkel t ,

$$\langle n(t) \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} np(n, t),$$

rahuldab võrrandit

$$\frac{d}{dt} \langle n(t) \rangle = -\nu \langle n(t) \rangle. \quad (3.5.5)$$

Ülesanded

Ülesanne 3.5.1. Tuletage võrrandist (3.5.4) võrrand (3.5.5).

3.6 Poissoni protsess

Poissoni protsessiks nimetatakse juhtu, kui võrrandis (3.4.2) $x_m = m$ ja

$$G(m) = \mu = \text{const}, \quad R(m) = 0. \quad (3.6.1)$$

Seega kirjeldavad Poissoni protsessi kineetika põhivõrrand

$$\frac{\partial p(m, t)}{\partial t} = \mu [p(m-1, t) - p(m, t)] \quad (3.6.2)$$

ja Kramersi-Moyali rida

$$\frac{\partial p(m, t)}{\partial t} = \mu \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{\partial}{\partial m} \right)^n p(m, t). \quad (3.6.3)$$

Kui algtingimuseks valida

$$p(m, 0) = \delta_{m,0}, \quad (3.6.4)$$

siis on võrrandite (3.6.2) ja (3.6.3) lahendiks Poissoni jaotus

$$p(m, t) = \frac{\tau^m e^{-\tau}}{m!}, \quad \tau = \mu t. \quad (3.6.5)$$

Leiame juhusliku suuruse kaks esimest momenti Poissoni protsessis. Kõigepealt

$$\begin{aligned} \langle m \rangle &= \sum_{m=0}^{\infty} m \tau^m \frac{e^{-\tau}}{m!} = e^{-\tau} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{m}{m!} \tau^m = e^{-\tau} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{m}{m!} \tau^m \\ &= e^{-\tau} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{\tau^m}{(m-1)!} = \tau e^{-\tau} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{\tau^{m-1}}{(m-1)!} = \tau e^{-\tau} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\tau^m}{m!} \\ &= \tau e^{-\tau} e^{\tau}. \end{aligned}$$

Seega

$$\langle m \rangle = \tau. \quad (3.6.6)$$

Viimase lahendamine annab

$$\langle n(t) \rangle = n_0 \exp[-\nu(t-t_0)], \quad (3.5.6)$$

kus n_0 on radioaktiivsete aatomite arv alghetkel t_0 .

Edasi

$$\begin{aligned}\langle m^2 \rangle &= \sum_{m=0}^{\infty} m^2 \tau^m \frac{e^{-\tau}}{m!} = e^{-\tau} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{m^2}{m!} \tau^m = \tau e^{-\tau} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{m}{(m-1)!} \tau^{m-1} \\ &= \tau e^{-\tau} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{m+1}{m!} \tau^m = \tau e^{-\tau} \left\{ \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\tau^m}{m!} + \sum_{m=0}^{\infty} \frac{m}{m!} \tau^m \right\} \\ &= \tau e^{-\tau} \{e^{\tau} + \tau e^{\tau}\}.\end{aligned}$$

Tulemuseks on

$$\langle m^2 \rangle = \tau + \tau^2. \quad (3.6.7)$$

Valemite (3.6.6) ja (3.6.7) alusel saame juhusliku suuruse ruutdispersiooni Poissoni protsessi korral

$$\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2 = \tau. \quad (3.6.8)$$

Järelikult on Poissoni protsessis juhusliku suuruse esimene moment ja ruutdispersioon võrdsed.

3.7 Fokkeri-Plancki võrrand ja pöördvõrrand

Kramersi-Moyali reaksarendus (3.1.10)

$$\frac{\partial W(x, t)}{\partial t} = \sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{\partial}{\partial x} \right)^n D^{(n)}(x, t) W(x, t) \quad (3.7.1)$$

võib Pawula teoreemi kohaselt katkeda pärast teist liiget, st

$$D^{(n)} = 0, \quad n \geq 3. \quad (3.7.2)$$

Sellisel juhul nimetatakse võrrandit (3.7.1) *Fokkeri-Plancki võrrandiks*,

$$\frac{\partial W(x, t)}{\partial t} = \hat{L}_{FP}(x, t) W(x, t), \quad (3.7.3)$$

kus

$$\hat{L}_{FP}(x, t) = -\frac{\partial}{\partial x} D^{(1)}(x, t) + \frac{\partial^2}{\partial x^2} D^{(2)}(x, t) \quad (3.7.4)$$

on *Fokkeri-Plancki operaator*.

Erijuhul, kui valemis (3.7.4)

$$D^{(2)} = 0, \quad (3.7.5)$$

on Kramersi-Moyali reaksarendus katkenud juba pärast esimest liiget. Siis kirjeldab võrrand (3.7.3) *determineeritud protsessi*.⁵

Valemi (3.1.15) alusel võime kirjutada üles ka Fokkeri-Plancki võrrandi ülemineku-tõenäosustiheduse jaoks

$$\frac{\partial W(x, t|x', t')}{\partial t} = \hat{L}_{FP}(x, t)W(x, t|x', t'). \quad (3.7.10)$$

Juhul, kui Kramersi-Moyali pöördreaksarendus (3.2.6) katkeb pärast teist liiget, saadakse *Fokkeri-Plancki pöördvõrrand*

$$\frac{\partial W(x, t|x', t')}{\partial t'} = -\hat{L}_{FP}^+(x', t')W(x, t|x', t'), \quad (3.7.11)$$

kus

$$\hat{L}_{FP}^+(x', t') = D^{(1)}(x', t') \frac{\partial}{\partial x'} + D^{(2)}(x', t') \frac{\partial^2}{\partial x'^2} \quad (3.7.12)$$

on *Fokkeri-Plancki operaatori kaasoperaator*.

Operaatorites \hat{L}_{FP} ja \hat{L}_{FP}^+ sisalduvat koefitsienti $D^{(1)}$ nimetatakse *triivikoefitsiendiks* ja koefitsienti $D^{(2)}$ – *difusioonikoefitsiendiks*.

Kui on tegemist mitme juhusliku suurusega $\xi_1(t), \dots, \xi_r(t)$, siis Fokkeri-Plancki võrrand (3.7.3) üldistub järgmiselt:

$$\frac{\partial W_r(x_1, \dots, x_r, t)}{\partial t} = \hat{L}_{FP}(x_1, \dots, x_r, t)W(x_1, \dots, x_r, t). \quad (3.7.13)$$

Siin

$$\begin{aligned} \hat{L}_{FP}(x_1, \dots, x_r, t) = & - \sum_{i=1}^r \frac{\partial}{\partial x_i} D_i(x_1, \dots, x_r, t) \\ & + \sum_{i,j=1}^r \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} D_{ij}(x_1, \dots, x_r, t), \end{aligned} \quad (3.7.14)$$

⁵ Determineeritud protsess on antud liikumisvõrrandiga

$$x = x(t), \quad (3.7.6)$$

kus $x(t)$ on ühene aja funktsioon. Sellele liikumisvõrrandile vastavat Fokkeri-Plancki võrrandit

$$\frac{\partial W(x, t)}{\partial t} = -\frac{dx(t)}{dt} \frac{\partial}{\partial x} W(x, t) \quad (3.7.7)$$

rahuldab algtingimuse

$$W(x, t_0) = \delta(x - x(t_0)) \quad (3.7.8)$$

korral tõenäosustihedus

$$W(x, t) = \delta(x - x(t)). \quad (3.7.9)$$

Determineeritud protsessi nimetatakse ka *kõdunud Markovi protsessiks*.

kus

$$\begin{aligned}
& D_i(x_1, \dots, x_r, t) \\
&= \left[\frac{\partial}{\partial \tau} \langle \xi_i(t + \tau) - \xi_i(t) \rangle \Big|_{\xi_1(t)=x_1, \dots, \xi_r(t)=x_r} \right]_{\tau=0} \\
&= \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{1}{\tau} \left\langle \xi_i(t + \tau) - \xi_i(t) \right\rangle \Big|_{\xi_1(t)=x_1, \dots, \xi_r(t)=x_r}, \tag{3.7.15}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& D_{ij}(x_1, \dots, x_r, t) = D_{ji}(x_1, \dots, x_r, t) \\
&= \frac{1}{2} \left[\frac{\partial}{\partial \tau} \langle [\xi_i(t + \tau) - \xi_i(t)][\xi_j(t + \tau) - \xi_j(t)] \rangle \Big|_{\xi_1(t)=x_1, \dots, \xi_r(t)=x_r} \right]_{\tau=0} \\
&= \frac{1}{2} \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{1}{\tau} \left\langle [\xi_i(t + \tau) - \xi_i(t)][\xi_j(t + \tau) - \xi_j(t)] \right\rangle \Big|_{\xi_1(t)=x_1, \dots, \xi_r(t)=x_r}. \tag{3.7.16}
\end{aligned}$$

Suurused D_i , $i = 1, \dots, r$ moodustavad r -dimensionaalse vektori, mida nimetatakse *triivivektoriks*, ning suurused D_{ij} , $i, j = 1, \dots, r$ moodustavad $r \times r$ maatriksi, mida nimetatakse *difusioonimaatriksiks*.

Ülesanded

Ülesanne 3.7.1. Näidake, et kui protsess on determineeritud, siis $D^{(1)}(x, t) = dx(t)/dt$ ja $D^{(2)}(x, t) = 0$ ning Fokkeri-Plancki võrrand saab kuju (3.7.7).

Ülesanne 3.7.2. Kontrollige, et algtingimuse (3.7.8) korral tõenäosustihedus (3.7.9) rahuldab Fokkeri-Plancki võrrandit (3.7.7).

3.8 Fokkeri-Plancki võrrand ja pidevuse võrrand

Fokkeri-Plancki võrrandi (3.7.13) võib ümber kirjutada kujul

$$\frac{\partial W_r(x_1, \dots, x_r, t)}{\partial t} + \sum_{i=1}^r \frac{\partial S_i(x_1, \dots, x_r, t)}{\partial x_i} = 0, \tag{3.8.1}$$

kus

$$\begin{aligned}
& S_i(x_1, \dots, x_r, t) \\
&= \left[D_i(x_1, \dots, x_r, t) - \sum_{j=1}^r \frac{\partial}{\partial x_j} D_{ij}(x_1, \dots, x_r, t) \right] W_r(x_1, \dots, x_r, t). \tag{3.8.2}
\end{aligned}$$

Suurused S_i , $i = 1, \dots, r$ on ühe r -dimensionaalse vektori komponentideks. Võrrandis (3.8.1) vasakul poolel teine liige kujutab endast selle vektori divergentsi juhuslike suuruste väärtuste r -mõõtmelises ruumis. Seega on võrrand (3.8.1) samasuguse

struktuuriga nagu *pidevuse võrrand*. Kuna W_r on tõenäosustihedus, siis tuleb suurus S_i interpreteerida kui *tõenäosusvoo tiheduse komponente*. Järelikult on Fokkeri-Plancki võrrand identne pidevuse võrrandiga⁶ tõenäosuse jaoks.⁷

Juhul, kui on tegemist ainult ühe juhusliku suurusega, mida kirjeldab Fokkeri-Plancki võrrand (3.7.3), siis näeb vastav pidevuse võrrand välja selline:

$$\frac{\partial W(x, t)}{\partial t} + \frac{\partial S(x, t)}{\partial x} = 0, \quad (3.8.6)$$

kus

$$S(x, t) = \left[D^{(1)}(x, t) - \frac{\partial}{\partial x} D^{(2)}(x, t) \right] W(x, t) \quad (3.8.7)$$

on *tõenäosusvoo tihedus*.

Statsionaarse protsessi korral tõenäosustihedus ajast ei sõltu ning Fokkeri-Plancki võrrand (3.8.1) saab kuju

$$\sum_{i=1}^r \frac{\partial S_i(x_1, \dots, x_r)}{\partial x_i} = 0. \quad (3.8.8)$$

⁶ Pidevuse võrrand mingi suuruse jaoks väljendab diferentsiaalsel kujul selle suuruse korral kehtivat jäävusseadust. Antud juhul täidab jäävusseaduse rolli normeerimistingimuse

$$\int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} W_r(x_1, \dots, x_r, t) dx_1 \dots dx_r = 1$$

sõltumatus ajast.

⁷ Determineeritud protsessi korral, mis on antud liikumisvõrranditega $x_i = x_i(t)$, $i = 1, \dots, r$, kus $x_i(t)$ on ühesed aja funktsioonid, on tõenäosusvoo tiheduse komponendid määratud avaldisega

$$S_i(x_1, \dots, x_r, t) = \frac{dx_i(t)}{dt} W_r(x_1, \dots, x_r, t). \quad (3.8.3)$$

Klassikalise mehaanika kontekstis taandub Fokkeri-Plancki võrrand (3.8.1) siis *Liouville'i võrrandiks*

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} W_{2s}(q_1, \dots, q_s, p_1, \dots, p_s, t) \\ = \{H(q_1, \dots, q_s, p_1, \dots, p_s, t), W_{2s}(q_1, \dots, q_s, p_1, \dots, p_s, t)\}, \end{aligned} \quad (3.8.4)$$

kus

$$\{f, g\} = \sum_j \left(\frac{\partial f}{\partial q_j} \frac{\partial g}{\partial p_j} - \frac{\partial f}{\partial p_j} \frac{\partial g}{\partial q_j} \right)$$

on Poissoni sulud, H on s vabadusastmega süsteemi Hamiltoni funktsioon ning q_j ja p_j on üldistatud koordinaadid ja impulsid, mis rahuldavad Hamiltoni võrrandeid

$$\frac{dq_j}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_j}, \quad \frac{dp_j}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_j}, \quad j = 1, \dots, s. \quad (3.8.5)$$

3.9 Ääritingimused Fokkeri-Plancki võrrandi jaoks

Konkreetse Fokkeri-Plancki võrrandi lahendamiseks on vaja anda ette ääritingimused. Olgu meil Fokkeri-Plancki võrrand ühe juhusliku suuruse jaoks

$$\frac{\partial W(x, t)}{\partial t} + \frac{\partial S(x, t)}{\partial x} = 0, \quad (3.9.1)$$

kus tõenäosusvoo tihedus on

$$S(x, t) = \left[D^{(1)}(x, t) - \frac{\partial}{\partial x} D^{(2)}(x, t) \right] W(x, t). \quad (3.9.2)$$

i) *Olgu juhusliku suuruse väärtuste muutumispiirkond lõpmatu: $-\infty \leq x \leq \infty$. Sellisel juhul kasutatakse nn loomulikke ääritingimusi, mis nõuavad, et*

$$W(x, t) \Big|_{x=\pm\infty} = 0, \quad (3.9.3)$$

$$\frac{\partial W(x, t)}{\partial x} \Big|_{x=\pm\infty} = 0. \quad (3.9.4)$$

Tingimus (3.9.3) tagab normeerimisintegraali

$$\int_{-\infty}^{\infty} W(x, t) dx = 1 \quad (3.9.5)$$

koonduvuse. Tingimustest (3.9.3) ja (3.9.4) järeldub, et ka tõenäosusvoo tihedus (3.9.2) saab lõpmatuses võrdseks nulliga,

$$S(x, t) \Big|_{x=\pm\infty} = 0. \quad (3.9.6)$$

ii) *Olgu juhusliku suuruse väärtuste muutumispiirkond (või üldisemalt – vaatlusalune piirkond) lõplik: $A \leq x \leq B$. Integreerime võrrandit (3.9.1) üle selle piirkonna, mis annab*

$$\int_A^B \frac{\partial W(x, t)}{\partial t} dx + \int_A^B \frac{\partial S(x, t)}{\partial x} dx = 0$$

ehk

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_A^B W(x, t) dx + \int_A^B \frac{\partial S(x, t)}{\partial x} dx = 0.$$

Nõuame, et x -i vaatlusaluses piirkonnas oleks tõenäosustihedus normeeritud,

$$\int_A^B W(x, t) dx = 1. \quad (3.9.7)$$

Siis

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_A^B W(x, t) dx = 0$$

ning järelikult kehtib võrdus

$$\int_A^B \frac{\partial S(x, t)}{\partial x} dx = 0.$$

Siit saame

$$S(B, t) - S(A, t) = 0.$$

Seega peab x -i lõpliku vaatlusaluse piirkonna jaoks kehtima

$$S(A, t) = S(B, t) = f(t), \quad (3.9.8)$$

kus funktsioon $f(t)$ on antud ääritingimustega.

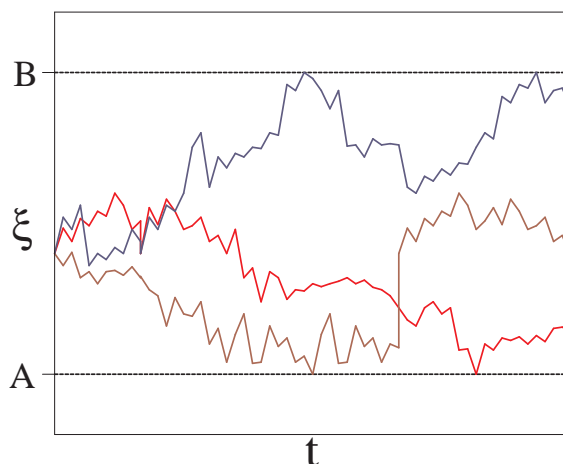
Kui tingimuses (3.9.8) valida $f(t) = 0$, siis saadakse nn *peegeldavad ääritingimused* Fokkeri-Plancki võrrandile (3.9.1),

$$S(A, t) = S(B, t) = 0. \quad (3.9.9)$$

Paneme ka tähele, et tingimusest (3.9.9) ja valemist (3.9.2) ei järeldu, et äärtel $x = A$ ja $x = B$ saaks tõenäosustihedus võrdseks nulliga. Kuna tingimuse (3.9.9) kohaselt tõenäosusvoog läbi äärte puudub, siis tähendab see seda, et protsessi mingi realisatsioon jääb alati äärtega määratud juhusliku suuruse väärtuste vahemikku $A \leq \xi(t) \leq B$. Kui realisatsioon jõuab mingil ajahetkel äärele, siis „peegeldub“ see sealt tagasi (vt joonis 3.4).

Olulist huvi pakuvad ka ülesanded, kus x -i vaatlusaluses piirkonnas tõenäosustihedus ei pruugi olla normeeritud. Taoline situatsioon võib tekkida neelavate ääritingimuste korral. Kui on tegemist neelavate äärtega, siis realisatsioon, mis jõuab äärele, „neeldub“ seal, st katkeb (vt joonis 3.5). Seda väljendavad tingimused

$$W(A, t) = W(B, t) = 0, \quad (3.9.10)$$



Joonis 3.4. Juhusliku protsessi realisatsioonid peegeldavate äärte korral.

$$\begin{aligned} W(x', t' | A, t) &= W(A, t | x'', t'') \\ &= W(x', t' | B, t) = W(B, t | x'', t'') = 0, \quad t' > t > t''. \end{aligned} \quad (3.9.11)$$

Valem (3.9.10) on *neelavateks ääretingimusteks* Fokkeri-Plancki võrrandile (3.9.1). Samal ajal ei pruugi tõenäosusvoo tihedus äärtel võrduda nulliga. Neelavate äärte juhul on võimalik, et

$$W(x, t) \Big|_{t \rightarrow \infty} = 0$$

ning normeerimistingimust ei saa rahuldada.

Ääretingimused võivad olla ka sellised, et *üks äärtest on peegeldav ja teine neelav*. Statsionaarse protsessi korral ei ole see siiski võimalik. Kui protsess on statsionaarne, siis

$$\frac{\partial S(x)}{\partial x} = 0. \quad (3.9.12)$$

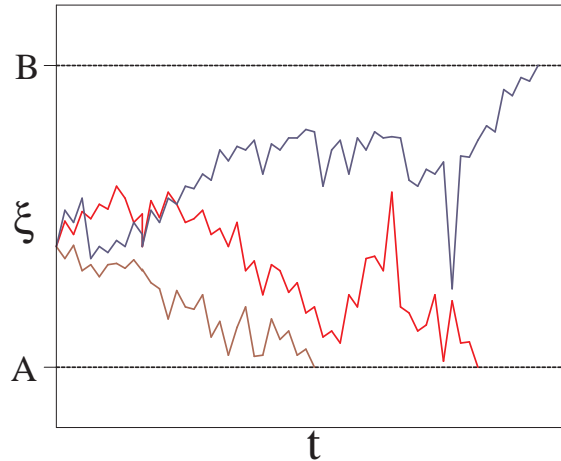
Järelikult

$$S(x) = \text{const} \quad (3.9.13)$$

ning seega

$$S(A) = S(x) = S(B) \equiv S. \quad (3.9.14)$$

Kui nüüd üks äärtest on peegeldav, siis peab valemi (3.9.14) kohaselt olema peegeldav ka teine äär ja ühtlasi kõikjal $S = 0$.



Joonis 3.5. Juhusliku protsessi realisatsioonid neelavate äärte korral.

3.10 Ääritingimused Fokkeri-Plancki pöördvõrrandi jaoks

Vaatleme juhusliku suuruse väärtusi piirkonnas $A \leq x \leq B$. Leiame ääritingimused Fokkeri-Plancki pöördvõrrandile

$$\begin{aligned} \frac{\partial W(x, t|x', t')}{\partial t'} &= -D^{(1)}(x', t') \frac{\partial W(x, t|x', t')}{\partial x'} \\ &\quad - D^{(2)}(x', t') \frac{\partial^2 W(x, t|x', t')}{\partial x'^2}. \end{aligned} \quad (3.10.1)$$

Võrrandi (3.10.1) kõrval rahuldab üleminekutõenäosustihedus ka Fokkeri-Plancki võrrandit

$$\begin{aligned} \frac{\partial W(x, t|x', t')}{\partial t} &= -\frac{\partial}{\partial x} [D^{(1)}(x, t) W(x, t|x', t')] \\ &\quad + \frac{\partial^2}{\partial x^2} [D^{(2)}(x, t) W(x, t|x', t')]. \end{aligned} \quad (3.10.2)$$

Kirjutame üles Chapmani-Kolmogorovi võrrandi

$$W(x, t|x', t') = \int_A^B W(x, t|x'', t'') W(x'', t''|x', t') dx''. \quad (3.10.3)$$

Võtame siit tuletise aja t'' järgi. See annab

$$\int_A^B \left[\frac{\partial W(x, t|x'', t'')}{\partial t''} W(x'', t''|x', t') + W(x, t|x'', t'') \frac{\partial W(x'', t''|x', t')}{\partial t''} \right] dx'' = 0. \quad (3.10.4)$$

Asendame valemisse (3.10.4) ajalised tuletised võrranditest (3.10.1) ja (3.10.2) ning peame ka silmas, et üleminekutõenäosusvoo tihedus on antud valemiga

$$S(x'', t''|x', t') = D^{(1)}(x'', t'') W(x'', t''|x', t') - \frac{\partial}{\partial x''} [D^{(2)}(x'', t'') W(x'', t''|x', t')]. \quad (3.10.5)$$

Järelikult peab kehtima võrdus

$$\int_A^B \frac{\partial}{\partial x''} \left\{ D^{(2)}(x'', t'') W(x'', t''|x', t') \frac{\partial W(x, t|x'', t'')}{\partial x''} + W(x, t|x'', t'') S(x'', t''|x', t') \right\} dx'' = 0. \quad (3.10.6)$$

Võttes integraali, saame tingimuse

$$\begin{aligned} & D^{(2)}(B, t'') W(B, t''|x', t') \frac{\partial W(x, t|x'', t'')}{\partial x''} \Big|_{x''=B} \\ & + W(x, t|B, t'') S(B, t''|x', t') \\ & - D^{(2)}(A, t'') W(A, t''|x', t') \frac{\partial W(x, t|x'', t'')}{\partial x''} \Big|_{x''=A} \\ & - W(x, t|A, t'') S(A, t''|x', t') = 0. \end{aligned} \quad (3.10.7)$$

i) *Olgu ääred A ja B neelavad.* Siis valemi (3.9.11) kohaselt

$$W(x, t|A, t'') = W(A, t''|x', t') = W(x, t|B, t'') = W(B, t''|x', t') = 0. \quad (3.10.8)$$

Sellisel juhul on tingimus (3.10.7) rahuldatud. Valemi (3.10.8) sisaldab ääretingimusi võrrandile (3.10.1). Seega on Fokkeri-Plancki pöördvõrrandi jaoks *neelavateks ääretingimusteks*

$$W(x, t|A, t') = W(x, t|B, t') = 0. \quad (3.10.9)$$

ii) *Olgu ääred A ja B peegeldavad.* Siis vastavalt valemile (3.9.9)

$$S(A, t|x', t') = S(B, t|x', t') = 0. \quad (3.10.10)$$

Tingimus (3.10.7) saab nüüd kuju

$$D^{(2)}(B, t'') W(B, t''|x', t') \frac{\partial W(x, t|x'', t'')}{\partial x''} \Big|_{x''=B} - D^{(2)}(A, t'') W(A, t''|x', t') \frac{\partial W(x, t|x'', t'')}{\partial x''} \Big|_{x''=A} = 0. \quad (3.10.11)$$

Siit järelduvad *peegeldavad ääritingimused* Fokkeri-Plancki pöördvõrrandile

$$\frac{\partial W(x, t|x', t')}{\partial x'} \Big|_{x'=A} = \frac{\partial W(x, t|x', t')}{\partial x'} \Big|_{x'=B} = 0. \quad (3.10.12)$$

3.11 Wieneri protsess

Protsessi nimetatakse *Wieneri protsessiks*, kui Fokkeri-Plancki võrrandis (3.7.3)

$$D^{(1)}(x, t) = 0, \quad D^{(2)}(x, t) = D = \text{const} > 0. \quad (3.11.1)$$

Seega Wieneri protsessi korral saab Fokkeri-Plancki võrrand kuju

$$\frac{\partial W(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 W(x, t)}{\partial x^2}. \quad (3.11.2)$$

Valime algtingimuseks

$$W(x, t_0) = \delta(x - x_0). \quad (3.11.3)$$

Ääritingimusteks olgu loomulikud ääritingimused (3.9.3), (3.9.4).

Lahendame võrrandi (3.11.2), kasutades karakteristlikku funktsiooni. Valemi (1.2.5) kohaselt (üldistades seda ajast sõltuva juhusliku suuruse jaoks)

$$C(u, t) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{iux} W(x, t) dx. \quad (3.11.4)$$

Võttes siin $t = t_0$ ning kasutades tingimust (3.11.3), saame algtingimuse karakteristlikule funktsioonile

$$C(u, t_0) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{iux} W(x, t_0) dx = \int_{-\infty}^{\infty} e^{iux} \delta(x - x_0) dx = e^{iux_0}. \quad (3.11.5)$$

Leiame karakteristlikust funktsioonist (3.11.4) tuletise aja järgi ning kasutame seejärel võrrandit (3.11.2),

$$\frac{\partial C(u, t)}{\partial t} = \int_{-\infty}^{\infty} e^{iux} \frac{\partial W(x, t)}{\partial t} dx = D \int_{-\infty}^{\infty} e^{iux} \frac{\partial^2 W(x, t)}{\partial x^2} dx.$$

Integreerime kaks korda ositi:

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} e^{iux} \frac{\partial^2 W(x, t)}{\partial x^2} dx \\ &= e^{iux} \frac{\partial W(x, t)}{\partial x} \Big|_{-\infty}^{\infty} - iu \int_{-\infty}^{\infty} e^{iux} \frac{\partial W(x, t)}{\partial x} dx \\ &= e^{iux} \frac{\partial W(x, t)}{\partial x} \Big|_{-\infty}^{\infty} - iue^{iux} W(x, t) \Big|_{-\infty}^{\infty} - u^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{iux} W(x, t) dx. \end{aligned}$$

Rakendades loomulikke ääritingimusi (3.9.3), (3.9.4) ja arvestades valemiga (3.11.4), saame siit

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{iux} \frac{\partial^2 W(x, t)}{\partial x^2} dx = -u^2 C(u, t).$$

Tulemuseks on võrrand

$$\frac{\partial C(u, t)}{\partial t} = -Du^2 C(u, t), \quad (3.11.6)$$

mida peab rahuldama karakteristiklik funktsioon.

Algtingimuse (3.11.5) korral on võrrandi (3.11.6) lahendiks

$$C(u, t) = e^{-Du^2(t-t_0)} e^{iux_0}. \quad (3.11.7)$$

Tõenäosustihedus on määratud integraaliga karakteristiklikust funktsioonist

$$W(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} C(u, t) e^{-iux} du. \quad (3.11.8)$$

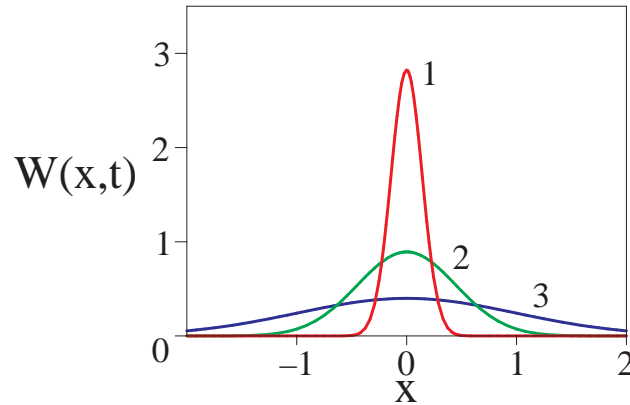
Valemite (3.11.7) ja (3.11.8) alusel

$$W(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-Du^2(t-t_0)} e^{-iu(x-x_0)} du. \quad (3.11.9)$$

Võttes arvesse, et

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{i\alpha x - \beta x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\beta}} e^{-\frac{\alpha^2}{4\beta}}, \quad (3.11.10)$$

kus $\beta > 0$, saame siit tulemuseks tõenäosustiheduse



Joonis 3.6. Tõenäosustiheduse ajaline evolutsioon Wieneri protsessi korra, kui $x_0 = 0$. Kõver (1): $D(t - t_0) = 0.01$, (2): $D(t - t_0) = 0.1$, (3): $D(t - t_0) = 0.5$.

$$W(x, t) = \left[4\pi D(t - t_0) \right]^{-1/2} \exp \left[-\frac{(x - x_0)^2}{4D(t - t_0)} \right]. \quad (3.11.11)$$

Avaldisest (3.11.11) järeldub, et aja kasvades tõenäosustiheduse maksimum $W(x_0, t)$ kahaneb monotoonselt, lähenedes $t \rightarrow \infty$ korral asümptootiliselt nullile (vt joonis 3.6). Seega loomulike ääritingimuste korral ei ole Wieneri protsessil nullist erineva tõenäosusjaotusega statsionaarset lõppolekut.

Ülesanded

Ülesanne 3.11.1. Kontrollige, et Wieneri protsessi kirjeldav tõenäosusjaotus (3.11.11) on normeeritud 1-le.

Ülesanne 3.11.2. Leidke juhusliku suuruse kaks esimest momenti Wieneri protsessis.

Ülesanne 3.11.3. Leidke juhusliku suuruse ruutdispersioon Wieneri protsessis ning analüüsige selle ajalist käitumist.

Ülesanne 3.11.4. Põhjendage, et Wieneri protsessis on üleminekutõenäosustihedus kujuga

$$W(x, t|x', t') = \left[4\pi D(t - t') \right]^{-1/2} \exp \left[-\frac{(x - x')^2}{4D(t - t')} \right]. \quad (3.11.12)$$

Ülesanne 3.11.5. Leidke Wieneri protsessi autokorrelatsioonifunktsioon.

3.12 Ornsteini-Uhlenbecki protsess

Protsessi nimetatakse *Ornsteini-Uhlenbecki protsessiks*, kui Fokkeri-Plancki võrrandis (3.7.3)

$$\begin{aligned} D^{(1)}(x, t) &= -\eta x, \quad \eta = \text{const} > 0, \\ D^{(2)}(x, t) &= D = \text{const} > 0. \end{aligned} \quad (3.12.1)$$

Vastavalt sellele saab Fokkeri-Plancki võrrand kuju

$$\frac{\partial W(x, t)}{\partial t} = \eta \frac{\partial}{\partial x} [x W(x, t)] + D \frac{\partial^2 W(x, t)}{\partial x^2}. \quad (3.12.2)$$

Algtingimuseks valime (3.11.3). Ääritingimusteks olgu loomulikud ääritingimused (3.9.3), (3.9.4).

Võrrandi (3.12.2) saab teisendada lihtsamale kujule.⁸ Selleks läheme üle uuele muutujale

$$y = x e^{\eta t}. \quad (3.12.3)$$

Allpool läheb meil vaja tuletisi

$$\frac{\partial y}{\partial t} = \eta x e^{\eta t}, \quad (3.12.4)$$

$$\frac{\partial y}{\partial x} = e^{\eta t}. \quad (3.12.5)$$

Teisendame võrrandi (3.12.2) liikmeid:⁹

$$\begin{aligned} \frac{\partial W(x, t)}{\partial t} &= \frac{\partial W(y, t)}{\partial t} + \frac{\partial y}{\partial t} \frac{\partial W(y, t)}{\partial y} \\ &= \frac{\partial W(y, t)}{\partial t} + \eta x e^{\eta t} \frac{\partial W(y, t)}{\partial y}, \end{aligned} \quad (3.12.6)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} [x W(x, t)] &= W(y, t) + x \frac{\partial y}{\partial x} \frac{\partial W(y, t)}{\partial y} \\ &= W(y, t) + x e^{\eta t} \frac{\partial W(y, t)}{\partial y}, \end{aligned} \quad (3.12.7)$$

⁸ S. Chandrasekhar, *Rev. Mod. Phys.* **15**, 1 (1943).

⁹ Siin on tähistatud $W(y, t) \equiv W(x(y), t)$.

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 W(x, t)}{\partial x^2} &= \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\partial y}{\partial x} \frac{\partial W(y, t)}{\partial y} \right] = \frac{\partial}{\partial x} \left[e^{\eta t} \frac{\partial W(y, t)}{\partial y} \right] \\ &= e^{\eta t} \frac{\partial y}{\partial x} \frac{\partial^2 W(y, t)}{\partial y^2} = e^{2\eta t} \frac{\partial^2 W(y, t)}{\partial y^2}.\end{aligned}\quad (3.12.8)$$

Teeme vastavad asendused võrrandisse (3.12.2). See annab

$$\begin{aligned}\frac{\partial W(y, t)}{\partial t} + \eta x e^{\eta t} \frac{\partial W(y, t)}{\partial y} \\ = \eta W(y, t) + \eta x e^{\eta t} \frac{\partial W(y, t)}{\partial y} + D e^{2\eta t} \frac{\partial^2 W(y, t)}{\partial y^2}.\end{aligned}$$

Läheme siin üle uuele tõenäosustihedusele

$$\tilde{W}(y, t) = W(y, t) e^{-\eta t}.\quad (3.12.9)$$

Tulemuseks saame võrrandi

$$\frac{\partial \tilde{W}(y, t)}{\partial t} = \tilde{D}(t) \frac{\partial^2 \tilde{W}(y, t)}{\partial y^2},\quad (3.12.10)$$

kus

$$\tilde{D}(t) = D e^{2\eta t}.\quad (3.12.11)$$

Alg- ja ääritingimused võrrandile (3.12.10) on

$$\tilde{W}(y, t_0) = \delta(y - y_0),\quad (3.12.12)$$

$$\tilde{W}(y, t) \Big|_{y=\pm\infty} = 0,\quad (3.12.13)$$

$$\frac{\partial \tilde{W}(y, t)}{\partial y} \Big|_{y=\pm\infty} = 0.\quad (3.12.14)$$

Võrrand (3.12.10) langeb oma kujult kokku Fokkeri-Plancki võrrandiga (3.11.2), mis kirjeldab Wieneri protsessi. Erinevuseks on siiski see, et võrrandis (3.12.10) koeffitsient \tilde{D} sõltub ajast. Vastavalt sellele tuleb võrrandi (3.11.2) lahendis (3.11.11)

asendada¹⁰

$$\begin{aligned} D(t - t_0) &\rightarrow \int_{t_0}^t \tilde{D}(t') dt' = \int_{t_0}^t D e^{2\eta t'} dt' \\ &= \frac{D}{2\eta} (e^{2\eta t} - e^{2\eta t_0}) = \frac{1}{2\eta} [\tilde{D}(t) - \tilde{D}(t_0)]. \end{aligned}$$

Pidades seda silmas ning arvestades ka asjaoluga, et võrrandite (3.12.10) ja (3.11.2) alg- ja ääretingimused langevad oma kujult kokku, saame me võrrandi (3.12.10) lahendiks

$$\tilde{W}(y, t) = [2\pi\eta^{-1} (\tilde{D}(t) - \tilde{D}(t_0))]^{-1/2} \exp \left[-\frac{(y - y_0)^2}{2\eta^{-1} (\tilde{D}(t) - \tilde{D}(t_0))} \right]. \quad (3.12.15)$$

Tehes siia vastavad asendused valemitest (3.12.3), (3.12.9) ja (3.12.11), on lõplikuks tulemuseks

$$W(x, t) = \left[\frac{2\pi D}{\eta} (1 - e^{-2\eta(t-t_0)}) \right]^{-1/2} \exp \left[-\frac{\eta (x - x_0 e^{-\eta(t-t_0)})^2}{2D (1 - e^{-2\eta(t-t_0)})} \right]. \quad (3.12.16)$$

Lühikeste ooteaegade korral, kui

$$\eta(t - t_0) \ll 1, \quad (3.12.17)$$

võime valemis (3.12.16) esitada

$$e^{-2\eta(t-t_0)} \approx 1 - 2\eta(t - t_0),$$

$$e^{-\eta(t-t_0)} \approx 1 - \eta(t - t_0).$$

See annab

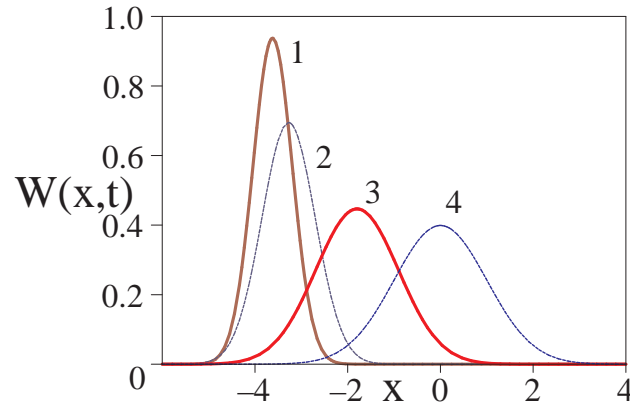
$$W(x, t) = [4\pi D(t - t_0)]^{-1/2} \exp \left[-\frac{[x - (x_0 - x_0\eta(t - t_0))]^2}{4D(t - t_0)} \right]. \quad (3.12.18)$$

¹⁰ Lihtne on näha, et võrrand (3.11.6) karakteristikliku funktsiooni jaoks kehtib ka siis, kui koeffitsient D sõltub ajast,

$$\frac{\partial C(u, t)}{\partial t} = -D(t)u^2 C(u, t).$$

Selle lahendiks on karakteristikliku funktsiooni (3.11.7) asemel funktsioon

$$C(u, t) = \exp \left[-u^2 \int_{t_0}^t D(t') dt' \right] \exp(iux_0).$$



Joonis 3.7. Tõenäosustiheduse ajaline evolutsioon Ornsteini-Uhlenbecki protsessi korral, kui $x_0 = -4$ ja $D/\eta = 1$. Kõver (1): $\eta(t - t_0) = 0.1$, (2): $\eta(t - t_0) = 0.2$, (3): $\eta(t - t_0) = 0.8$, (4): statsionaarne Ornsteini-Uhlenbecki protsess.

Avaldises (3.12.18) eksponendis olev faktor $-x_0\eta$ kujutab endast tõenäosusjaotuse maksimumi liikumise kiirust.

Pikkade aegade korral, kui

$$\eta(t - t_0) \gg 1, \quad (3.12.19)$$

võime valemis (3.12.16) võtta

$$e^{-2\eta(t-t_0)} \approx e^{-\eta(t-t_0)} \approx 0.$$

Tulemuseks saame tõenäosustiheduse *statsionaarse Ornsteini-Uhlenbecki protsessi* jaoks

$$W(x) = \left(\frac{2\pi D}{\eta}\right)^{-1/2} \exp\left(-\frac{\eta x^2}{2D}\right). \quad (3.12.20)$$

Leitud tõenäosusjaotus ei sõltu algtingimusest (3.11.3). Tõenäosustiheduse (3.12.20) maksimum asub punktis $x = 0$.

Joonisel 3.7 on kujutatud Ornsteini-Uhlenbecki protsessi tõenäosusjaotus erinevate ooteaegade jaoks. On näha tõenäosustiheduse lähenemine aja jooksul statsionaarsele jaotusele (kõver 4).

Ülesanded

Ülesanne 3.12.1. Näidake, et võrrandi (3.12.2) algtingimusest (3.11.3) järeldeb võrrandi (3.12.10) algtingimus (3.12.12).

Ülesanne 3.12.2. Kontrollige, et Ornsteini-Uhlenbecki protsessi kirjeldav tõenäosusjaotus (3.12.16) on normeeritud 1-le.

Ülesanne 3.12.3. Leidke juhusliku suuruse kaks esimest momenti Ornsteini-Uhlenbecki protsessis.

Ülesanne 3.12.4. Leidke juhusliku suuruse ruutdispersioon Ornsteini-Uhlenbecki protsessis ning analüüsige selle ajalist käitumist.

Ülesanne 3.12.5. Põhjendage, et Ornsteini-Uhlenbecki protsessis on ülemineku-tõenäosustihedus kujuga

$$W(x, t|x', t') = \left[\frac{2\pi D}{\eta} (1 - e^{-2\eta(t-t')}) \right]^{-1/2} \exp \left[-\frac{\eta (x - x' e^{-\eta(t-t')})^2}{2D (1 - e^{-2\eta(t-t')})} \right]. \quad (3.12.21)$$

Ülesanne 3.12.6. Leidke statsionaarse Ornsteini-Uhlenbecki protsessi autokorrelatsioonifunktsioon.

3.13 Esmakordne väljumine piirkonnast

Olgu alghetkel $t = 0$ juhusliku suuruse $\xi(t)$ väärtus $\xi(0) = x$. Vaatleme mingit juhusliku suuruse väärtuste piirkonda

$$a \leq \xi(t) \leq b, \quad (3.13.1)$$

kusjuures

$$a \leq x \leq b. \quad (3.13.2)$$

Me tahame teada, kui kauaks jääb juhuslik suurus piirkonda (3.13.1), enne kui ta sealt esmakordselt väljub. Et seda ülesannet lahendada, paigutame piirkonna servadele a ja b neelavad ääred. Siis iga realisatsioon, mis esmakordselt jõuab ääreni, ei pöördu enam tagasi vaadeldavasse piirkonda.

Sellistel tingimustel on tõenäosus selleks, et ajahetkel t on juhuslik suurus piirkonnas (3.13.1), kui alghetkel $\xi(0) = x$, määratud integraaliga

$$\int_a^b W(x', t|x, 0) dx' \equiv P(x, t). \quad (3.13.3)$$

Eeldame, et meil on tegemist ajas homogeenise protsessiga. Siis

$$W(x', t|x, 0) = W(x', 0|x, -t). \quad (3.13.4)$$

Rahuldagu üleminekutõenäosustihedus Fokkeri-Plancki pöördvõrrandit (3.7.11), mis antud juhul saab kuju

$$\frac{\partial W(x', 0|x, -t)}{\partial t} = \hat{L}_{FP}^+(x) W(x', 0|x, -t), \quad (3.13.5)$$

$$\hat{L}_{FP}^+(x) = D^{(1)}(x) \frac{\partial}{\partial x} + D^{(2)}(x) \frac{\partial^2}{\partial x^2}. \quad (3.13.6)$$

Arvesse on võetud, et ajas homogeense protsessi korral koefitsiendid $D^{(1)}$ ja $D^{(2)}$ ajast ei sõltu. Pidades silmas võrdust (3.13.4), võime me võrrandi (3.13.5) üles kirjutada ka kujul

$$\frac{\partial W(x', t|x, 0)}{\partial t} = \hat{L}_{FP}^+(x) W(x', t|x, 0). \quad (3.13.7)$$

Integreerime võrrandit (3.13.7) üle muutuja x' . Tulemuseks saame valemi (3.13.3) abil võrrandi, mida peab rahuldama $P(x, t)$,

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = \hat{L}_{FP}^+(x) P(x, t). \quad (3.13.8)$$

Selgitame välja alg- ja ääritingimused võrrandile (3.13.8).

i) *Algtingimused.* Üleminekutõenäosustiheduse jaoks on algtingimuseks

$$W(x', 0|x, 0) = \delta(x - x'). \quad (3.13.9)$$

Valemi (3.13.3) alusel saame siit algtingimuse tõenäosusele $P(x, t)$,

$$P(x, 0) = 1. \quad (3.13.10)$$

ii) *Ääritingimused.* Fokkeri-Plancki pöördvõrrandi jaoks on ääritingimused neelavate äärte korral antud valemiga (3.10.9),

$$W(x', t|a, 0) = W(x', t|b, 0) = 0. \quad (3.13.11)$$

Järelikult ääritingimused tõenäosusele $P(x, t)$ on

$$P(a, t) = P(b, t) = 0. \quad (3.13.12)$$

Olgu \mathcal{T} aeg, mille jooksul realisatsioon jõuab neelava ääreni. *Aega \mathcal{T} tuleb tõlgendada kui juhuslikku suurust.* Vastavalt sellele on $P(x, t)$ tõenäosus selleks, et $\mathcal{T} \geq t$. Suurus $1 - P(x, t)$ annab tõenäosuse selleks, et $\mathcal{T} \leq t$. Järelikult, analoogselt punktiga 1.1, on diferentsiaal

$$d(1 - P(x, t)) = -dP(x, t) = -\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} dt \quad (3.13.13)$$

tõenäosus selleks, et $t \leq \mathcal{T} \leq t + dt$.

Seega on mingi funktsiooni $f(\mathcal{T})$ keskvärtus leitav valemiga

$$\langle f(\mathcal{T}) \rangle = - \int_0^{\infty} f(t) \frac{\partial P(x, t)}{\partial t} dt. \quad (3.13.14)$$

Siit järeldub, et *piirkonnast esmakordse väljumise keskmine aeg*

$$T(x \rightarrow a, b) = \langle \mathcal{T} \rangle \quad (3.13.15)$$

avaldub

$$T(x \rightarrow a, b) = - \int_0^{\infty} t \frac{\partial P(x, t)}{\partial t} dt. \quad (3.13.16)$$

Integreerides ositi

$$\int_0^{\infty} t \frac{\partial P(x, t)}{\partial t} dt = tP(x, t) \Big|_0^{\infty} - \int_0^{\infty} P(x, t) dt$$

ning eeldades, et

$$\lim_{t \rightarrow \infty} tP(x, t) = 0,$$

saame piirkonnast esmakordse väljumise keskmise aja jaoks

$$T(x \rightarrow a, b) = \int_0^{\infty} P(x, t) dt. \quad (3.13.17)$$

Me võime nüüd tuletada hariliku diferentsiaalvõrrandi, mille lahendiks on $T(x \rightarrow a, b)$. Lähtume võrrandist (3.13.8) ja integreerime seda üle aja,

$$\int_0^{\infty} \frac{\partial P(x, t)}{\partial t} dt = \hat{L}_{FP}^+(x) \int_0^{\infty} P(x, t) dt = \hat{L}_{FP}^+(x) T(x \rightarrow a, b).$$

Võrduse vasakul poolel

$$\int_0^{\infty} \frac{\partial P(x, t)}{\partial t} dt = P(x, \infty) - P(x, 0) = -1.$$

Tulemuseks saame diferentsiaalvõrrandi piirkonnast esmakordse väljumise keskmise aja leidmiseks

$$\hat{L}_{FP}^+(x) T(x \rightarrow a, b) = -1. \quad (3.13.18)$$

Valemitest (3.13.12), (3.13.17) järelduvad ääritingimused võrrandile (3.13.18),

$$T(a \rightarrow a, b) = T(b \rightarrow a, b) = 0. \quad (3.13.19)$$

Lahendame võrrandi (3.13.18), mis detailselt üleskirjutatuna on kujuga

$$D^{(1)}(x) \frac{\partial T(x \rightarrow a, b)}{\partial x} + D^{(2)}(x) \frac{\partial^2 T(x \rightarrow a, b)}{\partial x^2} = -1. \quad (3.13.20)$$

Toome sisse abifunktsiooni

$$\psi(x) = \exp \left[\int_a^x \frac{D^{(1)}(x')}{D^{(2)}(x')} dx' \right]. \quad (3.13.21)$$

Leiame tuletise

$$\frac{\partial \psi(x)}{\partial x} = \psi(x) \frac{D^{(1)}(x)}{D^{(2)}(x)}.$$

Avaldame siit

$$D^{(1)}(x) = \frac{D^{(2)}(x)}{\psi(x)} \frac{\partial \psi(x)}{\partial x}$$

ning asendame valemisse (3.13.20). See annab

$$\frac{D^{(2)}(x)}{\psi(x)} \frac{\partial \psi(x)}{\partial x} \frac{\partial T(x \rightarrow a, b)}{\partial x} + D^{(2)}(x) \frac{\partial^2 T(x \rightarrow a, b)}{\partial x^2} = -1.$$

Korrutades viimast võrdust $\psi(x)$ -ga, saame

$$D^{(2)}(x) \left\{ \frac{\partial \psi(x)}{\partial x} \frac{\partial T(x \rightarrow a, b)}{\partial x} + \psi(x) \frac{\partial^2 T(x \rightarrow a, b)}{\partial x^2} \right\} = -\psi(x).$$

Kirjutame selle võrrandi ümber kujul (tähistades $x \equiv z$)

$$\frac{\partial}{\partial z} \left\{ \psi(z) \frac{\partial T(z \rightarrow a, b)}{\partial z} \right\} = -\frac{\psi(z)}{D^{(2)}(z)}$$

ja integreerime $\int_a^y \dots dz$. Seega

$$\psi(y) \frac{\partial T(y \rightarrow a, b)}{\partial y} - \psi(a) \frac{\partial T(z \rightarrow a, b)}{\partial z} \Big|_{z=a} = - \int_a^y \frac{\psi(z)}{D^{(2)}(z)} dz.$$

Võttes arvesse, et $\psi(a) = 1$ (vt valem (3.13.21)), on tulemuseks võrrand

$$\frac{\partial T(y \rightarrow a, b)}{\partial y} = \frac{1}{\psi(y)} \frac{\partial T(z \rightarrow a, b)}{\partial z} \Big|_{z=a} - \frac{1}{\psi(y)} \int_a^y \frac{\psi(z)}{D^{(2)}(z)} dz. \quad (3.13.22)$$

Integreerime võrrandit (3.13.22) kahel viisil: $\int_a^x \dots dy$ ja $\int_x^b \dots dy$. Vastavalt saame

$$\begin{aligned} T(x \rightarrow a, b) - T(a \rightarrow a, b) \\ = \frac{\partial T(z \rightarrow a, b)}{\partial z} \Big|_{z=a} \int_a^x \frac{dy}{\psi(y)} - \int_a^x \frac{dy}{\psi(y)} \int_a^y \frac{\psi(z)}{D^{(2)}(z)} dz, \end{aligned} \quad (3.13.23)$$

$$\begin{aligned} T(b \rightarrow a, b) - T(x \rightarrow a, b) \\ = \frac{\partial T(z \rightarrow a, b)}{\partial z} \Big|_{z=a} \int_x^b \frac{dy}{\psi(y)} - \int_x^b \frac{dy}{\psi(y)} \int_a^y \frac{\psi(z)}{D^{(2)}(z)} dz. \end{aligned} \quad (3.13.24)$$

Arvestame ääritingimustega (3.13.19) ning korrutame võrdust (3.13.23) integraaliga $\int_x^b \psi^{-1}(y') dy'$ ja võrdust (3.13.24) integraaliga $\int_a^x \psi^{-1}(y') dy'$. Tulemuseks on vastavalt

$$\begin{aligned} & \left(\int_x^b \frac{dy'}{\psi(y')} \right) T(x \rightarrow a, b) \\ & = \left(\int_x^b \frac{dy'}{\psi(y')} \right) \left(\frac{\partial T(z \rightarrow a, b)}{\partial z} \Big|_{z=a} \int_a^x \frac{dy}{\psi(y)} - \int_a^x \frac{dy}{\psi(y)} \int_a^y \frac{\psi(z)}{D^{(2)}(z)} dz \right), \\ & - \left(\int_a^x \frac{dy'}{\psi(y')} \right) T(x \rightarrow a, b) \\ & = \left(\int_a^x \frac{dy'}{\psi(y')} \right) \left(\frac{\partial T(z \rightarrow a, b)}{\partial z} \Big|_{z=a} \int_x^b \frac{dy}{\psi(y)} - \int_x^b \frac{dy}{\psi(y)} \int_a^y \frac{\psi(z)}{D^{(2)}(z)} dz \right). \end{aligned}$$

Lahutades nüüd esimesest võrdusest teise ning pidades silmas, et

$$\int_a^x \frac{dy'}{\psi(y')} + \int_x^b \frac{dy'}{\psi(y')} = \int_a^b \frac{dy'}{\psi(y')},$$

avaldame piirkonnast esmakordse väljumise keskmise aja

$$\begin{aligned} T(x \rightarrow a, b) = & \left\{ \left(\int_a^x \frac{dy'}{\psi(y')} \right) \int_x^b \frac{dy}{\psi(y)} \int_a^y \frac{\psi(z)}{D^{(2)}(z)} dz \right. \\ & \left. - \left(\int_x^b \frac{dy'}{\psi(y')} \right) \int_a^x \frac{dy}{\psi(y)} \int_a^y \frac{\psi(z)}{D^{(2)}(z)} dz \right\} \left(\int_a^b \frac{dy'}{\psi(y')} \right)^{-1}. \end{aligned} \quad (3.13.25)$$

3.14 Ääre esmakordne läbimine

Muudame eelmises punktis lahendatud ülesande tingimusi. Olgu a peegeldav äär ja b neelav äär. Seejuures on lubatud ka $a = -\infty$. Siis saame ülesande sellest, kui kauaks jääb protsessi realisatsioon piirkonda

$$a \leq \xi(t) \leq b \quad (3.14.1)$$

enne kui ta väljub sealt ääre b kaudu. Eeldatakse endiselt, et alghetkel $t = 0$

$$\xi(0) = x, \quad a \leq x \leq b. \quad (3.14.2)$$

Tõenäosus selleks, et ajahetkel t on juhuslik suurus piirkonnas (3.14.1), kui alghetkel kehtib (3.14.2), rahuldab võrrandit (3.13.8) (protsess eeldatakse olevat ajas homogeenne)

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = \hat{L}_{FP}^+(x) P(x, t). \quad (3.14.3)$$

Algtingimused selle võrrandi jaoks on antud valemiga (3.13.10). Leiame ääretingimused võrrandile (3.14.3).

Võrrandit (3.14.3) rahuldav tõenäosus oli defineeritud valemiga (3.13.3)

$$P(x, t) = \int_a^b W(x', t|x, 0) dx'. \quad (3.14.4)$$

Peegeldava ääre korral valemi (3.10.12) alusel

$$\left. \frac{\partial W(x', t|x, 0)}{\partial x} \right|_{x=a} = 0. \quad (3.14.5)$$

Seega on võrrandi (3.14.3) ääretingimuseks peegeldaval äärel a

$$\left. \frac{\partial P(x, t)}{\partial x} \right|_{x=a} = 0. \quad (3.14.6)$$

Valemi (3.13.12) kohaselt on võrrandi (3.14.3) ääretingimuseks neelaval äärel b

$$P(b, t) = 0. \quad (3.14.7)$$

Olgu $T(x \rightarrow b)$ ääre b esmakordse läbimise keskmine aeg, mis valemi (3.13.17) alusel avaldub

$$T(x \rightarrow b) = \int_0^{\infty} P(x, t) dt. \quad (3.14.8)$$

See aeg rahuldab võrrandiga (3.13.18) analoogset võrrandit

$$\hat{L}_{FP}^+(x) T(x \rightarrow b) = -1. \quad (3.14.9)$$

Valemitest (3.14.6)–(3.14.8) järelduvad ääritingimused võrrandile (3.14.9):

$$\left. \frac{\partial T(x \rightarrow b)}{\partial x} \right|_{x=a} = 0, \quad (3.14.10)$$

$$T(b \rightarrow b) = 0. \quad (3.14.11)$$

Lahendame võrrandi (3.14.9). Tuues valemiga (3.13.21) jälle sisse abifunktsiooni $\psi(x)$, jõuame nii nagu punktis 3.13 võrrandiga (3.13.22) analoogse võrrandini

$$\frac{\partial T(y \rightarrow b)}{\partial y} = \frac{1}{\psi(y)} \left. \frac{\partial T(z \rightarrow b)}{\partial z} \right|_{z=a} - \frac{1}{\psi(y)} \int_a^y \frac{\psi(z)}{D^{(2)}(z)} dz. \quad (3.14.12)$$

Seoses ääritingimusega (3.14.10) on võrrandi (3.14.12) paremal poolel esimene liige võrdne nulliga. Seega

$$\frac{\partial T(y \rightarrow b)}{\partial y} = - \frac{1}{\psi(y)} \int_a^y \frac{\psi(z)}{D^{(2)}(z)} dz. \quad (3.14.13)$$

Integreerime võrrandit (3.14.13) $\int_x^b \dots dy$. Saame

$$T(b \rightarrow b) - T(x \rightarrow b) = - \int_x^b \frac{dy}{\psi(y)} \int_a^y \frac{\psi(z)}{D^{(2)}(z)} dz.$$

Seoses ääritingimusega (3.14.11) on võrrandi (3.14.12) vasakul poolel esimene liige võrdne nulliga. Sellega me oleme leidnud ääre b esmakordse läbimise keskmise aja

$$T(x \rightarrow b) = \int_x^b \frac{dy}{\psi(y)} \int_a^y \frac{\psi(z)}{D^{(2)}(z)} dz. \quad (3.14.14)$$

Juhul, kui me valime a neelavaks ääreks ja b peegeldavaks ääreks, kusjuures on lubatud ka $b = \infty$, siis jõuame tulemuseni

$$T(x \rightarrow a) = \int_a^x \frac{dy}{\psi(y)} \int_y^b \frac{\psi(z)}{D^{(2)}(z)} dz. \quad (3.14.15)$$

4. Browni liikumine ja Langevini võrrand

4.1 Langevini võrrand vaba Browni osakese jaoks

Browni liikumise all kitsamas mõttes mõistetakse massiivse osakese liikumist keskkonnas (vedelikus), kus talle mõjub keskkonda kuuluvate osakestega põrkumise tulemusena juhuslik jõud. Laiemas mõttes mõeldakse Browni liikumise all mingi suvalise suuruse käitumist, mis on sarnane Browni osakese karakteristikute käitumisega.

Browni liikumist kirjeldatakse *Langevini võrrandiga*,

$$m \frac{dv}{dt} = -m\gamma v + \zeta(t), \quad (4.1.1)$$

kus m on Browni osakese mass ja v on Browni osakese kiirus. Lihtsuse eesmärgil vaatleme ühedimensionaalset juhtu. Võrrandi (4.1.1) paremal poolel seisab jõud, mis mõjub Browni osakesele ning koosneb kahest osast:¹

i) Osakesele mõjuv *hõõrdejõud* $-m\gamma v$, kus γ on hõõrdetegur, mis sõltub nii keskkonna kui ka osakese parameetritest. Kui võrrandis (4.1.1) $\zeta(t) = 0$, siis kirjeldab see Browni osakese pidurduvat liikumist keskkonnas. Võrrandi (4.1.1) lahendiks on sellisel juhul

$$v(t) = v(t_0)e^{-\gamma(t-t_0)}, \quad t \geq t_0,$$

kus $v(t_0)$ on Browni osakese algkiirus ajahetkel $t = t_0$.

ii) Browni osakesele mõjuv *juhuslik jõud* (*Langevini jõud*) $\zeta(t)$. Seejuures eeldatakse, et

$$\langle \zeta(t) \rangle = 0, \quad (4.1.2)$$

$$\langle \zeta(t)\zeta(t') \rangle = m^2 \mathcal{A} \delta(t - t'), \quad (4.1.3)$$

¹ Üldisemal juhul, kui on olemas ka osakese suhtes väline väli, lisandub siia selles väljas osakesele mõjuv deterministlik jõud (vt punkt 4.11).

kus \mathcal{A} on teatav koefitsient, mida nimetatakse *Langevini allika intensiivsuseks*. Kesk-
väärtus (4.1.3) annab Langevini jõu autokorrelatsioonifunktsiooni, kuna

$$\kappa_{\zeta\zeta}(t, t') = \langle \zeta(t)\zeta(t') \rangle - \langle \zeta(t) \rangle \langle \zeta(t') \rangle,$$

ja seega

$$\kappa_{\zeta\zeta}(t, t') = \kappa_{\zeta\zeta}(t - t') = m^2 \mathcal{A} \delta(t - t'). \quad (4.1.4)$$

Valemist (4.1.4) on näha, et erinevatel ajahetkedel on Langevini jõu väärtused statis-
tiliselt sõltumatud. Seoses δ -funktsiooniga avaldises (4.1.4) kujutab Langevini jõud
endast *valget müra* (vt punkt 2.8) spektraalse tihedusega

$$\rho_{\zeta}(\omega) = m^2 \mathcal{A}. \quad (4.1.5)$$

Harilikult defineeritakse Langevini jõud Gaussi protsessina (vt punkt 2.9), st
kui *Gaussi valge müra*. Vastavalt sellele võib olla nullist erinev ainult Langevini jõu
autokorrelatsioonifunktsioon $\kappa_{\zeta\zeta}(t - t')$, kõrgemat järku autokorrelatsioonifunktsioo-
nid on aga samaselt võrdsed nulliga. Langevini jõu momentide jaoks saame valemite
(2.9.4), (2.9.5) alusel

$$\langle \zeta(t_1)\zeta(t_2) \dots \zeta(t_{2n+1}) \rangle = 0, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (4.1.6)$$

$$\langle \zeta(t_1)\zeta(t_2) \dots \zeta(t_{2n}) \rangle = \sum \prod_{k_i < k_j} \langle \zeta(t_{k_i})\zeta(t_{k_j}) \rangle, \quad n = 1, 2, \dots. \quad (4.1.7)$$

Viimase võrduse paremal poolel summeeritakse üle kõikvõimalike korrutiste. Valem
(4.1.7) annab $n = 2$ korral

$$\begin{aligned} \langle \zeta(t_1)\zeta(t_2)\zeta(t_3)\zeta(t_4) \rangle &= \langle \zeta(t_1)\zeta(t_2) \rangle \langle \zeta(t_3)\zeta(t_4) \rangle \\ &+ \langle \zeta(t_1)\zeta(t_3) \rangle \langle \zeta(t_2)\zeta(t_4) \rangle + \langle \zeta(t_1)\zeta(t_4) \rangle \langle \zeta(t_2)\zeta(t_3) \rangle. \end{aligned} \quad (4.1.8)$$

Märgime veel, et Gaussi valge müra lihtsaimaks üldistuseks on *Gaussi värviline
müra* autokorrelatsioonifunktsiooniga (vt punkt 2.8)

$$\kappa_{\zeta\zeta}(t - t') = \frac{m^2 \mathcal{A}}{2\tau_c} \exp\left(-\frac{|t - t'|}{\tau_c}\right), \quad (4.1.9)$$

kus τ_c on korrelatsiooniaeg. Valge müra korral $\tau_c = 0$.

Seoses Browni liikumisega kitsamas mõttes võib eristada järgmisi karakterseid
ajavahemikke: τ_0 – keskmine ajavahemik kahe järjestikuse pörke vahel, $\tau_0 \sim 10^{-17}$ s,
 τ_m – pörke keskmine kestvus keskkonna ühe molekuliga, $\tau_m \sim 10^{-13} \dots 10^{-12}$ s, τ_v
– ajavahemik, mille jooksul Browni osake "unustab" olulisel määral oma esialgse
kiiruse (kiiruse relaksatsiooniaeg), $\tau_v \sim 10^{-8}$ s, mis on määratud hõõrdeteguriga,

$$\tau_v = \gamma^{-1}. \quad (4.1.10)$$

Nende karaktersete ajavahemike jaoks on hästi täidetud võrratus

$$\tau_0 \ll \tau_m \ll \tau_v.$$

Seejuures on tingimus $\tau_m \ll \tau_v$ hädavajalik selleks, et Langevini võrrand oleks korrektselt formuleeritud (ainult sellisel juhul omab mõtet hõõrdejõu ja Langevini jõu eristamine). Rakendatav on Langevini võrrand aegade $t - t_0 \gg \tau_m$ korral, kus t_0 on alghetk, mille jaoks on antud algtingimused. Kui viimane tingimus ei ole täidetud, on meil tegemist juba oluliselt mehaanika ülesandega, kusjuures lootusetult keerulisega.

4.2 Vaba Browni osakese kiirus

Lähtume Langevini võrrandist

$$m \frac{dv}{dt} = -m\gamma v + \zeta(t). \quad (4.2.1)$$

Liikumisvõrrandi (4.2.1) integreerimine annab Browni osakese kiiruse jaoks

$$v(t) = v(t_0)e^{-\gamma(t-t_0)} + e^{-\gamma t} \int_{t_0}^t e^{\gamma t'} \frac{\zeta(t')}{m} dt', \quad t \geq t_0, \quad (4.2.2)$$

kus $v(t_0)$ on algtingimusega antud osakese kiirus hetkel $t = t_0$.

Kontrollime, et funktsioon (4.2.2) rahuldab võrrandit (4.2.1). Kõigepealt, kui võtta valemis (4.2.2) $t = t_0$, siis on algtingimus täidetud. Edasi leiame tuletise

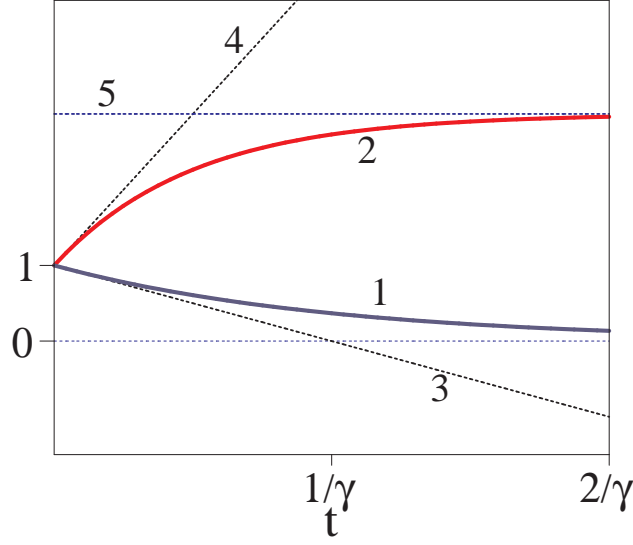
$$\begin{aligned} \frac{dv(t)}{dt} &= -\gamma v(t_0)e^{-\gamma(t-t_0)} - \gamma e^{-\gamma t} \int_{t_0}^t e^{\gamma t'} \frac{\zeta(t')}{m} dt' + e^{-\gamma t} e^{\gamma t} \frac{\zeta(t)}{m} \\ &= -\gamma \left[v(t_0)e^{-\gamma(t-t_0)} + e^{-\gamma t} \int_{t_0}^t e^{\gamma t'} \frac{\zeta(t')}{m} dt' \right] + \frac{\zeta(t)}{m} = -\gamma v(t) + \frac{\zeta(t)}{m}. \end{aligned}$$

Seega on võrrand (4.2.1) rahuldatud.

Valemis (4.2.2) paremal poolel esimesest liikmest on näha, et karakterne ajavahemik $\tau_v = \gamma^{-1}$ iseloomustab tõesti algkiiruse $v(t_0)$ panuse vähenemist aja jooksul osakese kiirusesse $v(t)$.

Seoses Langevini jõudu sisaldava liikmega avaldises (4.2.2) on Browni osakese kiirus juhuslikult muutuv suurus. Leiame vaba Browni osakese kiiruse momendid. Esimene moment on määratud keskväärtusega

$$\langle v(t) \rangle = v(t_0)e^{-\gamma(t-t_0)} + e^{-\gamma t} \int_{t_0}^t e^{\gamma t'} \frac{\langle \zeta(t') \rangle}{m} dt'.$$



Joonis 4.1. Browni osakese kiiruse keskväärtuse $\langle v(t) \rangle / v(t_0)$ (kõver (1)) ja kiiruse ruudu keskväärtuse $\langle v^2(t) \rangle / v^2(t_0)$ (kõver (2)) sõltuvus ajast, kui $t_0 = 0$. Langevini allika intensiivsuseks on valitud $\mathcal{A} = 6\gamma v^2(t_0)$. Sirged (3) ja (4) kujutavad vastavalt kiiruse keskväärtuse ja kiiruse ruudu keskväärtuse asümptootilist käitumist ajaskaalas $t - t_0 \ll \gamma^{-1}$, vt valemid (4.2.6) ja (4.2.7). Sirge (5) vastab kiiruse ruudu keskväärtusele $\langle v^2(t) \rangle = \mathcal{A}/2\gamma$, mis valemi (4.2.10) kohaselt realiseerub ajaskaalas $t - t_0 \gg \gamma^{-1}$.

Arvestades valemiga (4.1.2), on tulemuseks (vt kõver (1) joonisel 4.1)

$$\langle v(t) \rangle = v(t_0) e^{-\gamma(t-t_0)}. \quad (4.2.3)$$

Teise momendi jaoks leiame

$$\begin{aligned} \langle v^2(t) \rangle &= v^2(t_0) e^{-2\gamma(t-t_0)} + 2v(t_0) e^{-\gamma(t-t_0)} e^{-\gamma t} \int_{t_0}^t e^{\gamma t'} \frac{\langle \zeta(t') \rangle}{m} dt' \\ &\quad + e^{-2\gamma t} \int_{t_0}^t \int_{t_0}^t e^{\gamma(t'+t'')} \frac{\langle \zeta(t') \zeta(t'') \rangle}{m^2} dt' dt''. \end{aligned}$$

Asendades siia keskväärtused (4.1.2) ja (4.1.3), saame

$$\begin{aligned} \langle v^2(t) \rangle &= v^2(t_0) e^{-2\gamma(t-t_0)} + \mathcal{A} e^{-2\gamma t} \int_{t_0}^t \int_{t_0}^t e^{\gamma(t'+t'')} \delta(t'' - t') dt' dt'' \\ &= v^2(t_0) e^{-2\gamma(t-t_0)} + \mathcal{A} e^{-2\gamma t} \int_{t_0}^t e^{2\gamma t'} dt'. \end{aligned}$$

Järelikult

$$\langle v^2(t) \rangle = v^2(t_0) e^{-2\gamma(t-t_0)} + \frac{\mathcal{A}}{2\gamma} (1 - e^{-2\gamma(t-t_0)}). \quad (4.2.4)$$

Kiiruse ruudu keskvaartuse sõltuvust ajast kujutab joonisel 4.1 kõver (2).

Seoses keskvaartustega (4.2.3) ja (4.2.4) võib eristada kahte järgmist ajaskaalat.

i) Olgu

$$t - t_0 \ll \gamma^{-1}. \quad (4.2.5)$$

Siis valemis (4.2.3)

$$e^{-\gamma(t-t_0)} \approx 1 - \gamma(t - t_0)$$

ja valemis (4.2.4)

$$e^{-2\gamma(t-t_0)} \approx 1 - 2\gamma(t - t_0).$$

Vastavalt sellele (vt sirged (3) ja (4) joonisel 4.1)

$$\langle v(t) \rangle = v(t_0) [1 - \gamma(t - t_0)], \quad (4.2.6)$$

$$\langle v^2(t) \rangle = v^2(t_0) + (\mathcal{A} - 2v^2(t_0)\gamma)(t - t_0). \quad (4.2.7)$$

Nagu näha, on antud ajaskaalas Browni osakese kiiruse keskvaartus ja kiiruse ruudu keskvaartus oluliselt määratud algkiirusega. Osake „mäletab“ veel küllalt hästi oma algkiirust.

ii) Olgu nüüd

$$t - t_0 \gg \gamma^{-1}. \quad (4.2.8)$$

Siis valemites (4.2.3) ja (4.2.4)

$$e^{-\gamma(t-t_0)} \approx e^{-2\gamma(t-t_0)} \approx 0.$$

Tulemuseks saame

$$\langle v(t) \rangle = 0, \quad (4.2.9)$$

$$\langle v^2(t) \rangle = \frac{\mathcal{A}}{2\gamma}. \quad (4.2.10)$$

Seega ajaskaalas (4.2.8) on Browni osake „unustanud“ oma algkiiruse ning osakese kiirus on omandanud täielikult stohhastilise iseloomu. Kiiruse momendid siin enam ajast ei sõltu (vt ka joonis 4.1). Browni osakesest ja keskkonnast koosnev kinnine

süsteem on jõudnud tasakaaluolekusse, kus osakese kiiruse muutumine ajas kujutab endast statsionaarset protsessi.

Me võime leida ka Browni osakese kiiruse dispersiooni

$$\sigma_v^2(t) = \langle v^2(t) \rangle - \langle v(t) \rangle^2. \quad (4.2.11)$$

i) Esimeses ajaskaalas, kus kehtib (4.2.5), saame valemite (4.2.6) ja (4.2.7) abil, võttes $\gamma^2(t - t_0)^2 \approx 0$, et

$$\sigma_v^2(t) = \mathcal{A}(t - t_0). \quad (4.2.12)$$

Avaldist (4.2.12) tuntakse kui *Einsteini valemit Browni osakese kiiruse dispersiooni jaoks*. Selle kohaselt kasvab Browni osakese kiiruse dispersioon esimeses ajaskaalas ajaga lineaarselt.

ii) Teises ajaskaalas, kus on täidetud (4.2.8), Browni osakese kiiruse dispersioon ajast ei sõltu ning valemite (4.2.9) ja (4.2.10) alusel

$$\sigma_v^2 = \frac{\mathcal{A}}{2\gamma}. \quad (4.2.13)$$

Ülesanded

Ülesanne 4.2.1. Leidke vaba Browni osakese kiiruse autokorrelatsioonifunktsioon.

Ülesanne 4.2.2. Leidke vaba Browni osakese kiiruse ja Langevini jõu korrelatsioonifunktsioon.

4.3 Vaba Browni osakese koordinaat

Browni osakese kiiruse muutumine ajas on määratud Langevini võrrandi lahendiga (4.2.2),

$$v(t) = v(t_0) e^{-\gamma(t-t_0)} + e^{-\gamma t} \int_{t_0}^t e^{\gamma t'} \frac{\zeta(t')}{m} dt', \quad t \geq t_0. \quad (4.3.1)$$

Kasutades seda lahendit, leiame Browni osakese koordinaadi $x(t)$ kui aja funktsiooni. Kuna $v(t) = dx(t)/dt$, siis

$$\begin{aligned} x(t) &= x(t_0) + \int_{t_0}^t v(t') dt' \\ &= x(t_0) + v(t_0) \int_{t_0}^t e^{-\gamma(t'-t_0)} dt' + \int_{t_0}^t e^{-\gamma t'} \int_{t_0}^{t'} e^{\gamma t''} \frac{\zeta(t'')}{m} dt'' dt'. \end{aligned} \quad (4.3.2)$$

Arvutame valemis (4.3.2) olevad integraalid. Kõigepealt

$$\int_{t_0}^t e^{-\gamma(t'-t_0)} dt' = \frac{1}{\gamma} [1 - e^{-\gamma(t-t_0)}]. \quad (4.3.3)$$

Edasi esitame

$$\int_{t_0}^t e^{-\gamma t'} \int_{t_0}^{t'} e^{\gamma t''} \frac{\zeta(t'')}{m} dt'' dt' = -\frac{1}{\gamma} \int_{t_0}^t \int_{t_0}^{t'} e^{\gamma t''} \frac{\zeta(t'')}{m} dt'' d(e^{-\gamma t'})$$

ning integreerime ositi. See annab

$$\int_{t_0}^t e^{-\gamma t'} \int_{t_0}^{t'} e^{\gamma t''} \frac{\zeta(t'')}{m} dt'' dt' = -\frac{1}{\gamma} e^{-\gamma t} \int_{t_0}^t e^{\gamma t'} \frac{\zeta(t')}{m} dt' + \frac{1}{\gamma} \int_{t_0}^t \frac{\zeta(t')}{m} dt'. \quad (4.3.4)$$

Valemitest (4.3.2)–(4.3.4) saame tulemuseks

$$x(t) = x(t_0) + \frac{v(t_0)}{\gamma} [1 - e^{-\gamma(t-t_0)}] + \frac{1}{\gamma} \int_{t_0}^t [1 - e^{-\gamma(t-t')}] \frac{\zeta(t')}{m} dt'. \quad (4.3.5)$$

Lähtudes avaldisest (4.3.5), leiame vaba Browni osakese koordinaadi momendid. Esimene moment tuleb

$$\langle x(t) \rangle = x(t_0) + \frac{v(t_0)}{\gamma} [1 - e^{-\gamma(t-t_0)}]. \quad (4.3.6)$$

Selle sõltuvust ajast kujutab joonisel 4.2 kõver (1). Teine moment avaldub

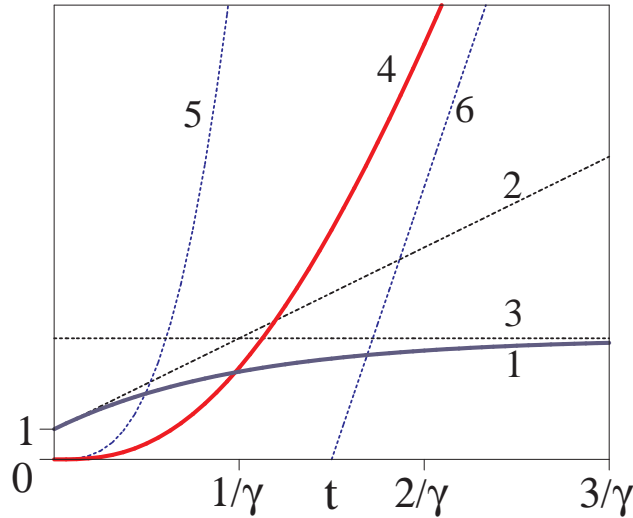
$$\begin{aligned} \langle x^2(t) \rangle &= \left\{ x(t_0) + \frac{v(t_0)}{\gamma} [1 - e^{-\gamma(t-t_0)}] \right\}^2 \\ &\quad + \frac{1}{\gamma^2} \int_{t_0}^t \int_{t_0}^t [1 - e^{-\gamma(t-t')}] [1 - e^{-\gamma(t-t'')}] \frac{\langle \zeta(t') \zeta(t'') \rangle}{m^2} dt' dt'' \end{aligned}$$

ning omandab pärast vastavaid asendusi valemistest (4.3.6) ja (4.1.3) ning integreerimist üle aja t'' kuju

$$\langle x^2(t) \rangle = \langle x(t) \rangle^2 + \frac{\mathcal{A}}{\gamma^2} \int_{t_0}^t [1 - e^{-\gamma(t-t')}]^2 dt'.$$

Võttes veel allesjäänud integraali, jõuame tulemuseni

$$\langle x^2(t) \rangle = \langle x(t) \rangle^2 + \frac{\mathcal{A}}{\gamma^2} (t - t_0) - \frac{2\mathcal{A}}{\gamma^3} [1 - e^{-\gamma(t-t_0)}] + \frac{\mathcal{A}}{2\gamma^3} [1 - e^{-2\gamma(t-t_0)}]. \quad (4.3.7)$$



Joonis 4.2. Browni osakese koordinaadi keskvaartuse $\langle x(t) \rangle / x(t_0)$ (kõver (1)) ja koordinaadi dispersiooni $\sigma_x^2(t) / x^2(t_0)$ (kõver (4)) sõltuvus ajast, kui $t_0 = 0$. On kasutatud parameetrite valikut $\mathcal{A}/\gamma = 6v^2(t_0)$ ja $v(t_0)/\gamma = 3x(t_0)$. Sirge (2) ja kõver (5) kujutavad vastavalt koordinaadi keskvaartuse ja koordinaadi dispersiooni asümptootilist käitumist ajaskaalas $t - t_0 \ll \gamma^{-1}$, vt valemid (4.3.10) ja (4.3.11). Sirged (3) ja (6) vastavad koordinaadi keskvaartuse ja koordinaadi dispersiooni asümptootikatele, vt valemid (4.3.12) ja (4.3.13), mis realiseeruvad ajaskaalas $t - t_0 \gg \gamma^{-1}$.

Koordinaadi ruutdispersiooni

$$\sigma_x^2(t) = \langle x^2(t) \rangle - \langle x(t) \rangle^2 \quad (4.3.8)$$

jaoks saame siit

$$\sigma_x^2(t) = \frac{\mathcal{A}}{\gamma^2}(t - t_0) - \frac{2\mathcal{A}}{\gamma^3}[1 - e^{-\gamma(t-t_0)}] + \frac{\mathcal{A}}{2\gamma^3}[1 - e^{-2\gamma(t-t_0)}]. \quad (4.3.9)$$

Dispersiooni ajaline käitumine on esitatud joonisel 4.2 kõveraga (4).

Vaatleme erinevaid ajaskaalasid.

i) Ajaskaala (4.2.5): $t - t_0 \ll \gamma^{-1}$.

Siis valemis (4.3.6)

$$e^{-\gamma(t-t_0)} \approx 1 - \gamma(t - t_0)$$

ning koordinaadi keskvaartuse avaldub (vt sirge (2) joonisel 4.2)

$$\langle x(t) \rangle = x(t_0) + v(t_0)(t - t_0). \quad (4.3.10)$$

Seega antud ajaskaalas on osakese asukoht tema algasendi suhtes määratud algkiirusega ning sõltub ajast vastavalt mehaanika seadustele.

Kui me valemis (4.3.9) dispersiooni jaoks piirdume lähendusega

$$e^{-\gamma(t-t_0)} \approx 1 - \gamma(t-t_0), \quad e^{-2\gamma(t-t_0)} \approx 1 - 2\gamma(t-t_0),$$

siis $\sigma_x^2(t) = 0$. Esimene nullist erinev panus dispersiooni tekib alles lähenduses

$$\begin{aligned} e^{-\gamma(t-t_0)} &\approx 1 - \gamma(t-t_0) + \frac{1}{2} [\gamma(t-t_0)]^2 - \frac{1}{6} [\gamma(t-t_0)]^3, \\ e^{-2\gamma(t-t_0)} &\approx 1 - 2\gamma(t-t_0) + \frac{1}{2} [2\gamma(t-t_0)]^2 - \frac{1}{6} [2\gamma(t-t_0)]^3, \end{aligned}$$

mis annab

$$\sigma_x^2(t) = \frac{\mathcal{A}}{3}(t-t_0)^3. \quad (4.3.11)$$

See funktsioon on toodud joonisel 4.2 kõveraga (5).

ii) Ajaskaala (4.2.8): $t-t_0 \gg \gamma^{-1}$.

Valem (4.3.6), kus

$$e^{-\gamma(t-t_0)} \approx 0,$$

koos definitsiooniga (4.1.10) annab koordinaadi keskväärtuse jaoks²

$$\langle x(t) \rangle = x(t_0) + \frac{v(t_0)}{\gamma} = x(t_0) + v(t_0)\tau_v. \quad (4.3.12)$$

Leitud keskväärtus ajast ei sõltu, millele vastab sirge (3) joonisel 4.2.

Dispersiooni jaoks saame valemist (4.3.9), võttes seal

$$e^{-\gamma(t-t_0)} \approx e^{-2\gamma(t-t_0)} \approx 0,$$

avaldise

$$\sigma_x^2(t) = \frac{\mathcal{A}}{\gamma^2}(t-t_0) - \frac{3\mathcal{A}}{2\gamma^3} = \frac{\mathcal{A}}{\gamma^2} \left[(t-t_0) - \frac{3}{2}\gamma^{-1} \right] \approx \frac{\mathcal{A}}{\gamma^2}(t-t_0). \quad (4.3.13)$$

² Juhul kui pikkus $v(t_0)\tau_v$ on väiksem Browni osakese raadiusest, võib selle valemis (4.3.12) jätta ligikaudu arvestamata ning

$$\langle x(t) \rangle \approx x(t_0).$$

Lähendus jääb kehtima ka lühemas ajaskaalas, kus tingimus (4.2.8) ei ole täidetud, olles seal veelgi paremini põhjendatud (vt valemid (4.3.6) ja (4.3.10)).

Pidades silmas definitsiooni (4.1.10) ja keskvaartust (4.2.10), võime esitada viimase ka kujul

$$\sigma_x^2(t) = 2\langle v^2 \rangle \tau_v \left[(t - t_0) - \frac{3}{2} \tau_v \right] \approx 2\langle v^2 \rangle \tau_v (t - t_0), \quad (4.3.14)$$

kust on selgemalt näha, millised suurused määravad antud juhul koordinaadi dispersiooni.

Järelikult, *pikemas ajaskaalas kasvab Browni osakese koordinaadi dispersioon ajas lineaarselt*. Selle olulise tulemuseni jõudsid esimestena A. Einstein (1905) ja M. Smoluchowski (1906). Joonisel 4.2 on jälgitav, kuidas dispersioon (kõver(4)) läheneb aja jooksul lineaarfunktsioonile (sirge (6)).

4.4 Langevini võrrandi seosed Markovi protsessiga

Antud küsimuse kontekstis on otstarbekas kasutada üldisemat lähenemist. Olgu $X(t)$ ajast sõltuv juhuslik suurus, mis allub liikumisvõrrandile

$$\frac{dX}{dt} = \mathcal{F}(X) + a \zeta(t), \quad (4.4.1)$$

kus $\mathcal{F}(X)$ on mingi funktsioon, $a = \text{const}$ ja $\zeta(t)$ on Langevini jõud. Sellisel juhul on $X(t)$ Markovi protsess. Järeldub see asjaolust, et esimest järku diferentsiaalvõrrandi (4.4.1) lahend on üheselt määratud algtingimusega

$$X(t_0) = X_0, \quad (4.4.2)$$

ning sellest, et Langevini jõu väärtused erinevatel ajahetkedel on statistiliselt sõltumatud.

Situatsioon muutub, kui on tegemist liikumisvõrrandiga

$$\frac{dX}{dt} = \mathcal{F}(X) + Y(t), \quad (4.4.3)$$

kus $Y(t)$ on valgest müra korreleeritud protsess, st üldiselt $\kappa_{YY}(t, t') \neq 0$ ka siis, kui $t \neq t'$. Meile on aktuaalne olukord, kui suurust $Y(t)$ kirjeldab võrrand

$$\frac{dY}{dt} = \mathcal{G}(Y) + b \zeta(t), \quad (4.4.4)$$

kus $\mathcal{G}(Y)$ on mingi funktsioon ja $b = \text{const}$. Nüüd $X(t)$ ei ole enam Markovi protsess, kuigi $Y(t)$ seda on.

Kui aga vaadelda protsessi, mis on antud kahe juhusliku suurusega $X(t)$ ja $Y(t)$, kusjuures liikumisvõrranditeks on (4.4.3) ja (4.4.4), siis saame taas Markovi protsessi. Protsessi Markovi iseloom säilib ka juhul, kui asendada võrrandid (4.4.3) ja (4.4.4) üldisematega,

$$\frac{dX}{dt} = \mathcal{F}_1(X) + \mathcal{F}_2(Y(t)), \quad (4.4.5)$$

$$\frac{dY}{dt} = \mathcal{G}_1(Y) + \mathcal{G}_2(X) + b\zeta(t). \quad (4.4.6)$$

Ülesanded

Ülesanne 4.4.1. Leidke autokorrelatsioonifunktsioon $\kappa_{YY}(t, t')$, kui kehtib liikumisvõrrand (4.4.4), kus $\mathcal{G}(Y) = -kY$, $k = \text{const} > 0$.

4.5 Vaba Browni osakese kiiruse spektraalne tihedus

Lähtume Langevini võrrandist

$$m \frac{dv(t)}{dt} = -m\gamma v(t) + \zeta(t). \quad (4.5.1)$$

Kiiruse keskväärtuse jaoks saame siit võrrandi

$$m \frac{d\langle v(t) \rangle}{dt} = -m\gamma \langle v(t) \rangle. \quad (4.5.2)$$

Valemite (4.5.1) ja (4.5.2) alusel jõuame võrrandini kiiruse fluktuatsiooni jaoks,

$$m \frac{d\Delta v(t)}{dt} = -m\gamma \Delta v(t) + \Delta\zeta(t), \quad (4.5.3)$$

kus

$$\Delta v(t) = v(t) - \langle v(t) \rangle, \quad \Delta\zeta(t) = \zeta(t) - \langle \zeta(t) \rangle = \zeta(t).$$

Läheme üle Fourier' esitusele:

$$\Delta v(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \Delta \tilde{v}(\omega) e^{-i\omega t} d\omega,$$

$$\Delta\zeta(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \Delta \tilde{\zeta}(\omega) e^{-i\omega t} d\omega.$$

Fourier' teisendid peavad rahuldama võrrandit

$$-im\omega\Delta\tilde{v}(\omega) = -m\gamma\Delta\tilde{v}(\omega) + \Delta\tilde{\zeta}(\omega). \quad (4.5.4)$$

Tõepoolest, kui me korrutame võrrandit (4.5.4) suurusega $(2\pi) \exp(-i\omega t)$ ja integreerime seejärel $\int_{-\infty}^{\infty} \dots d\omega$, siis saame tulemuseks võrrandi (4.5.3). Võrrandist (4.5.4) avaldame

$$\Delta\tilde{v}(\omega) = \frac{\Delta\tilde{\zeta}(\omega)}{m(\gamma - i\omega)}. \quad (4.5.5)$$

Langevini jõu ajaline evolutsioon on statsionaarne protsess. Kasutame ajaskaalat $t - t_0 \gg \gamma^{-1}$. Siis on ka Browni osakese kiiruse ajaline evolutsioon statsionaarne protsess. Sellisel juhul vastavalt valemile (2.6.12)

$$\langle \Delta\tilde{v}(\omega) \Delta\tilde{v}(-\omega') \rangle = 2\pi\delta(\omega - \omega') \tilde{\kappa}_{vv}(\omega), \quad (4.5.6)$$

$$\langle \Delta\tilde{\zeta}(\omega) \Delta\tilde{\zeta}(-\omega') \rangle = 2\pi\delta(\omega - \omega') \tilde{\kappa}_{\zeta\zeta}(\omega), \quad (4.5.7)$$

kus $\tilde{\kappa}_{vv}(\omega)$ on Browni osakese kiiruse autokorrelatsioonifunktsiooni Fourier' teisend ja $\tilde{\kappa}_{\zeta\zeta}(\omega)$ on Langevini jõu autokorrelatsioonifunktsiooni Fourier' teisend. Seejuures on võetud arvesse, et nii Browni osakese kiirus kui ka Langevini jõud on reaalsed suurused, st

$$v^*(t) = v(t), \quad \zeta^*(t) = \zeta(t).$$

Siis vastavalt valemile (2.6.5)

$$\Delta\tilde{v}^*(\omega) = \Delta\tilde{v}(-\omega), \quad \Delta\tilde{\zeta}^*(\omega) = \Delta\tilde{\zeta}(-\omega).$$

Integreerides võrdust (4.5.6) üle ω' -i ning arvestades seostega (4.5.5) ja (4.5.7), saame

$$\begin{aligned} 2\pi \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\kappa}_{vv}(\omega) \delta(\omega - \omega') d\omega' &= 2\pi\tilde{\kappa}_{vv}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \langle \Delta\tilde{v}(\omega) \Delta\tilde{v}(-\omega') \rangle d\omega' \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\langle \Delta\tilde{\zeta}(\omega) \Delta\tilde{\zeta}(-\omega') \rangle}{m^2(\gamma - i\omega)(\gamma + i\omega')} d\omega' = 2\pi \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\tilde{\kappa}_{\zeta\zeta}(\omega) \delta(\omega - \omega')}{m^2(\gamma - i\omega)(\gamma + i\omega')} d\omega' = \frac{2\pi\tilde{\kappa}_{\zeta\zeta}(\omega)}{m^2(\gamma^2 + \omega^2)}. \end{aligned}$$

Seega

$$\tilde{\kappa}_{vv}(\omega) = \frac{\tilde{\kappa}_{\zeta\zeta}(\omega)}{m^2(\gamma^2 + \omega^2)}. \quad (4.5.8)$$

Kuna meil on tegemist statsionaarsete protsessidega, siis Wieneri-Khinchini teoreemi kohaselt

$$\tilde{\kappa}_{vv}(\omega) = \varrho_v(\omega), \quad \tilde{\kappa}_{\zeta\zeta}(\omega) = \varrho_\zeta(\omega),$$

kus $\varrho_v(\omega)$ on Browni osakese kiiruse fluktuatsioonide spektraalne tihedus ja $\varrho_\zeta(\omega)$ – Langevini jõu fluktuatsioonide spektraalne tihedus. Järelikult

$$\varrho_v(\omega) = \frac{\varrho_\zeta(\omega)}{m^2(\gamma^2 + \omega^2)}. \quad (4.5.9)$$

Arvestades ka valemiga (4.1.5), saame Browni osakese kiiruse fluktuatsioonide spektraalse tiheduse jaoks avaldise

$$\varrho_v(\omega) = \frac{\mathcal{A}}{\gamma^2 + \omega^2}. \quad (4.5.10)$$

Kiiruse fluktuatsioonide spektraalse tiheduse abil võime leida kiiruse dispersiooni

$$\sigma_v^2 = \langle [\Delta v(t)]^2 \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \varrho_v(\omega) d\omega.$$

Integreerimine annab

$$\int_{-\infty}^{\infty} \varrho_v(\omega) d\omega = \mathcal{A} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\gamma^2 + \omega^2} = \mathcal{A} \left[\frac{1}{\gamma} \arctan \frac{\omega}{\gamma} \right]_{-\infty}^{\infty} = \frac{\pi \mathcal{A}}{\gamma}.$$

Tulemuseks on avaldis Browni osakese kiiruse dispersiooni jaoks,

$$\sigma_v^2 = \frac{\mathcal{A}}{2\gamma},$$

mis langeb kokku valemiga (4.2.13).

4.6 Fokkeri-Plancki võrrand vaba Browni osakese kiiruse jaoks

Konkretiseerime võrrandit (3.7.3), kui juhuslikuks suuruseks on Browni osakese kiirus,

$$\frac{\partial W(v, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial v} [D^{(1)}(v) W(v, t)] + \frac{\partial^2}{\partial v^2} [D^{(2)}(v) W(v, t)]. \quad (4.6.1)$$

Siin on tähistustes võetud arvesse, et vaba Browni osakese juhul on $v(t)$ ajas homogeenne Markovi protsess³, mille korral koefitsiendid $D^{(1)}$ ja $D^{(2)}$ ajast ei sõltu. Leiame need koefitsiendid. Valemite (3.1.3), (3.1.11) alusel

$$D^{(n)}(v) = \frac{1}{n!} \left[\frac{\partial}{\partial \tau} \langle [v(t+\tau) - v(t)]^n \rangle \Big|_{v(t)=v} \right]_{\tau=0}, \quad (4.6.2)$$

kus v on ajahetkel t fikseeritud kiirus. Vajalikud keskvaartused avalduvad

$$\langle v(t+\tau) - v(t) \rangle \Big|_{v(t)=v} = \langle v(t+\tau) \rangle \Big|_{v(t)=v} - v, \quad (4.6.3)$$

$$\langle [v(t+\tau) - v(t)]^2 \rangle \Big|_{v(t)=v} = \langle v^2(t+\tau) \rangle \Big|_{v(t)=v} - 2v \langle v(t+\tau) \rangle \Big|_{v(t)=v} + v^2. \quad (4.6.4)$$

Kasutades avaldisi (4.2.3) ja (4.2.4), saame siit

$$\langle v(t+\tau) - v(t) \rangle \Big|_{v(t)=v} = v e^{-\gamma\tau} - v, \quad (4.6.5)$$

$$\langle [v(t+\tau) - v(t)]^2 \rangle \Big|_{v(t)=v} = v^2 e^{-2\gamma\tau} + \frac{\mathcal{A}}{2\gamma} (1 - e^{-2\gamma\tau}) - 2v^2 e^{-\gamma\tau} + v^2. \quad (4.6.6)$$

Leiame tuletised

$$\left[\frac{\partial}{\partial \tau} \langle v(t+\tau) - v(t) \rangle \Big|_{v(t)=v} \right]_{\tau=0} = -v\gamma e^{-\gamma\tau} \Big|_{\tau=0} = -v\gamma, \quad (4.6.7)$$

$$\begin{aligned} \left[\frac{\partial}{\partial \tau} \langle [v(t+\tau) - v(t)]^2 \rangle \Big|_{v(t)=v} \right]_{\tau=0} \\ = [-2v^2\gamma e^{-2\gamma\tau} + \mathcal{A}e^{-2\gamma\tau} + 2v^2\gamma e^{-\gamma\tau}] \Big|_{\tau=0} = \mathcal{A}. \end{aligned} \quad (4.6.8)$$

Sellega me oleme määranud võrrandi (4.6.1) koefitsiendid,

$$D^{(1)}(v) = -v\gamma, \quad (4.6.9)$$

$$D^{(2)}(v) = \frac{\mathcal{A}}{2}. \quad (4.6.10)$$

Võib veenduda, et

$$D^{(4)}(v) = 0.$$

³ See, et tegemist on Markovi protsessiga, selgub valemite (4.1.1) ja (4.4.1).

Siis aga, nagu nägime seoses Pawula teoreemi tõestusega,

$$D^{(n)}(v) = 0, \quad \text{kui } n \geq 3. \quad (4.6.11)$$

Seega on meil pärast teist liiget katkev Kramersi-Moyali rida ning Browni osakese kiirust kirjeldab tõepoolest Fokkeri-Plancki võrrand

$$\frac{\partial W(v, t)}{\partial t} = \gamma \frac{\partial}{\partial v} [v W(v, t)] + \frac{\mathcal{A}}{2} \frac{\partial^2 W(v, t)}{\partial v^2}. \quad (4.6.12)$$

Valemite (4.6.12) ja (3.12.2) võrdlusest järeldub, et vaba Browni osakese kiiruse ajaline käitumine kujutab endast Ornsteini-Uhlenbecki protsessi.

Ülesanded

Ülesanne 4.6.1. Pange kirja Fokkeri-Plancki võrrandit (4.6.12) rahuldav vaba Browni osakese kiiruse tõenäosusjaotus $W(v, t)$.

Ülesanne 4.6.2. Leidke võrrandit (4.6.12) rahuldava tõenäosustiheduse abil vaba Browni osakese kiiruse ruutdispersioon nii üldjuhul kui ka statsionaarsel juhul.

4.7 Vaba Browni osakese kiiruse statsionaarne tõenäosusjaotus

Fokkeri-Plancki võrrand (4.6.12) kirjeldab Ornsteini-Uhlenbecki protsessi. Statsionaarsele Ornsteini-Uhlenbecki protsessile vastab tõenäosusjaotus (3.12.20), kus Browni osakese kiiruse korral $\eta = \gamma$ ja $D = \mathcal{A}/2$. Seega on Browni osakese kiiruse statsionaarne tõenäosusjaotus antud valemiga

$$W(v) = \left(\frac{\pi \mathcal{A}}{\gamma} \right)^{-1/2} \exp \left(-\frac{\gamma v^2}{\mathcal{A}} \right). \quad (4.7.1)$$

Tõenäosusjaotus (4.7.1) realiseerub ajaskaalas $t - t_0 \gg \gamma^{-1}$, kui Browni osakesest ja keskkonnast koosnev kinnine süsteem on saavutanud statistilise tasakaalu. Sellises olukorras peaks Browni osakese kiirus alluma *Maxwelli jaotusele*. Valem (4.7.1) annabki Maxwelli jaotuse, kui seal võtta (*Einsteini valem*)

$$\mathcal{A} = 2k_B T \frac{\gamma}{m}, \quad (4.7.2)$$

kus T on temperatuur ja k_B on Boltzmanni konstant. Siis

$$W(v) = \left(\frac{2\pi k_B T}{m} \right)^{-1/2} \exp \left(-\frac{mv^2}{2k_B T} \right). \quad (4.7.3)$$

Võrduse (4.7.2) olulisus on ilmne: see seob Langevini allika intensiivsuse keskkonna mõõdetava karakteristikuga – temperatuuriga.

Pidades veel silmas avaldist (4.1.5), võime ka esitada

$$\rho_\zeta(\omega) = 2m\gamma k_B T. \quad (4.7.4)$$

Valem (4.7.4) annab süsteemi fluktuatiivse karakteristikuga (Langevini jõu fluktuatsioonide spektraalne tihedus $\rho_\zeta(\omega)$) ja dissipatiivse karakteristikuga (hõõrdetegur γ) vahelise seose, olles seega *fluktuatsioon-dissipatsiooni teoreemi*⁴ erijuhuks.

4.8 Fokkeri-Plancki võrrand vaba Browni osakese koordinaadi jaoks

Browni osakese koordinaadi evolutsioon kujutab endast Markovi protsessi ainult jämedamas ajaskaalas, kui $t - t_0 \gg \gamma^{-1}$ (vt punkt 4.9), ja on kirjeldatav seejuures Fokkeri-Plancki võrrandiga

$$\frac{\partial W(x, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}[D^{(1)}(x) W(x, t)] + \frac{\partial^2}{\partial x^2}[D^{(2)}(x) W(x, t)], \quad (4.8.1)$$

kus

$$D^{(n)}(x) = \frac{1}{n!} \left[\frac{\partial}{\partial \tau} \langle [x(t + \tau) - x(t)]^n \rangle \Big|_{x(t)=x} \right]_{\tau=0} \quad (4.8.2)$$

ja x on ajahetkel t fikseeritud koordinaat. Kuna protsess on ajas homogeenne, siis Fokkeri-Plancki võrrandi koefitsiendid ajast ei sõltu.

Leiame koefitsiendid $D^{(1)}$ ja $D^{(2)}$. Vajalikud keskvaartused

$$\langle x(t + \tau) - x(t) \rangle \Big|_{x(t)=x} = \langle x(t + \tau) \rangle - x \quad (4.8.3)$$

ja

$$\langle [x(t + \tau) - x(t)]^2 \rangle \Big|_{x(t)=x} = \langle x^2(t + \tau) \rangle \Big|_{x(t)=x} - 2x \langle x(t + \tau) \rangle \Big|_{x(t)=x} + x^2 \quad (4.8.4)$$

avalduvad valemitega (4.3.12), (4.3.13) arvestamisel järgmiselt:

$$\langle x(t + \tau) - x(t) \rangle \Big|_{x(t)=x} = \frac{v}{\gamma}, \quad (4.8.5)$$

⁴ Vt näiteks L. D. Landau, E. M. Lifshitz „Statistical Physics. Part I“, Butterworth-Heinemann, 2000; R. Balescu „Equilibrium and Nonequilibrium Statistical Mechanics“, John Wiley & Sons Inc, 1975.

$$\langle [x(t + \tau) - x(t)]^2 \rangle \Big|_{x(t)=x} = \frac{\mathcal{A}}{\gamma^2} \tau + \frac{v^2}{\gamma^2}, \quad (4.8.6)$$

kus v on ajahetkel t fikseeritud kiirus. Siit saame

$$D^{(1)}(x) = 0, \quad (4.8.7)$$

$$D^{(2)}(x) = \frac{\mathcal{A}}{2\gamma^2}. \quad (4.8.8)$$

Tulemuseks on Fokkeri-Plancki võrrand

$$\frac{\partial W(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 W(x, t)}{\partial x^2}, \quad D = \frac{\mathcal{A}}{2\gamma^2}, \quad (4.8.9)$$

mis kirjeldab Wieneri protsessi. Valemit (4.8.9) nimetatakse ka *Einsteini-Smoluchowski võrrandiks*.

4.9 Ülesumbunud Browni liikumine

Fokkeri-Plancki võrrandi (4.8.9) saaksime samuti siis, kui lähtuksime mitte Langevini võrrandist (4.1.1), vaid liikumisvõrrandist, kus on võrreldes valemiga (4.1.1) ära jäetud inertsiliige⁵, st koordinaadi ajalist evolutsiooni kirjeldavast esimest järku diferentsiaalvõrrandist⁶

$$\frac{dx}{dt} = \frac{\zeta(t)}{m\gamma}. \quad (4.9.1)$$

Tulemuseks on Browni liikumine, mida nimetatakse *ülesumbunuks*. Realiseerub selline dünaamika, kui

$$t - t_0 \gg \gamma^{-1} = \tau_v. \quad (4.9.2)$$

Langevini võrrandilt (4.1.1) võrrandini (4.9.1) jõudmiseks võib kasutada järgmist protseduuri. Võrrandi (4.1.1) integreerimine annab valemi (4.2.2) alusel

$$v(t) = v(t_0)e^{-(t-t_0)/\tau_v} + e^{-t/\tau_v} \int_{t_0}^t e^{t'/\tau_v} \frac{\zeta(t')}{m} dt', \quad t \geq t_0. \quad (4.9.3)$$

⁵ Sellist skeemi on kasutatud punktis 4.16 üldisema juhu jaoks, kui Browni osakesele mõjub ka deterministlik jõud.

⁶ Siit järeldeb kohe, et antud juhul on $x(t)$ Markovi protsess, vt (4.4.1).

Arvestades tingimusega (4.9.2), saame siit ligikaudu

$$v(t) \approx e^{-t/\tau_v} \int_{-\infty}^t e^{t'/\tau_v} \frac{\zeta(t')}{m} dt'. \quad (4.9.4)$$

Seega on meil liikumisvõrrand koordinaadi jaoks,

$$\frac{dx}{dt} = \frac{\Gamma(t)}{m\gamma}, \quad (4.9.5)$$

kus

$$\Gamma(t) = \frac{1}{\tau_v} \int_{-\infty}^t e^{-(t-t')/\tau_v} \zeta(t') dt'. \quad (4.9.6)$$

Kasutades avaldist (4.9.6), võib leida juhusliku suuruse $\Gamma(t)$ keskväertuse ja auto-korrelatsioonifunktsiooni,

$$\langle \Gamma(t) \rangle = 0, \quad (4.9.7)$$

$$\kappa_{\Gamma\Gamma}(t-t') = \frac{m^2 \mathcal{A}}{2\tau_v} \exp\left(-\frac{|t-t'|}{\tau_v}\right). \quad (4.9.8)$$

Järelikult kujutab protsess $\Gamma(t)$ endast värvilist müra, mille korrelatsiooniajaks on Browni osakese kiiruse relaksatsiooniaeg τ_v . Võrrand (4.9.5) läheb üle võrrandiks (4.9.1) valge müra piiril, kui

$$\tau_v \rightarrow 0, \quad (4.9.9)$$

kuna siis

$$\kappa_{\Gamma\Gamma}(t-t') = \kappa_{\zeta\zeta}(t-t') = m^2 \mathcal{A} \delta(t-t'). \quad (4.9.10)$$

Seega, et vähemalt ligikaudu oleks tagatud võrrandite (4.9.5) ja (4.9.1) ekvivalentsus, peab relaksatsiooniaeg τ_v olema piisavalt väike.⁷

⁷ Saavutatav on see kahe faktori kaudu. Me kirjutasime hõõrdejõu üles kujul

$$-m\gamma v,$$

kus m oli osakese mass ja γ – hõõrdetegur. Keskkonnas liikuvale osakesele mõjuv hõõrdejõud osakese massist tegelikult ei sõltu. Arvestades sellega, toome sisse suuruse

$$\beta = m\gamma \quad (4.9.11)$$

kui massist mittesõltuva hõõrdeteguri. Näiteks kerakujulise osakese korral

$$\beta = 6\pi a\eta, \quad (4.9.12)$$

Õeldu on õige Browni osakese koordinaadi korral, mida kirjeldab ülesumbunud režiimis diferentsiaalvõrrand (4.9.1). Selle integreerimine annab

$$x(t) = x(t_0) + (m\gamma)^{-1} \int_{t_0}^t \zeta(t') dt', \quad t \geq t_0. \quad (4.9.14)$$

kus $\zeta(t')$ on valge müra. Seevastu Browni osakese kiiruse jaoks on meil ülesumbunud režiimis avaldis⁸

$$v(t) = (m\gamma)^{-1} \Gamma(t), \quad (4.9.15)$$

kus $\Gamma(t)$ on värviline müra keskväertusega (4.9.7) ja korrelatsioonifunktsiooniga (4.9.8).

Ülesanded

Ülesanne 4.9.1. Leidke avaldise (4.9.14) abil Browni osakese koordinaadi keskväertus ja dispersioon ning võrrelge saadud tulemusi valemitega (4.3.12) ja (4.3.13).

Ülesanne 4.9.2. Leidke avaldise (4.9.15) abil Browni osakese kiiruse dispersioon ning võrrelge saadud tulemust valemiga (4.2.13).

Ülesanne 4.9.3.

(i) Tuletage, lähtudes liikumisvõrrandist (4.9.1), Fokkeri-Plancki võrrand Browni osakese koordinaadi jaoks (valem (4.8.9)).

(ii) Kontrollige, et tegemist on tõesti Fokkeri-Plancki võrrandiga, st Kramersi-Moyali reaksarenduse koefitsient $D^{(4)}(x) = 0$.

Ülesanne 4.9.4. Tuletage autokorrelatsioonifunktsiooni avaldis (4.9.8).

kus a on osakese diameeter ja η – keskkonna viskoossuskoeffitsient. Browni osakese kiiruse relaksatsiooniaeg avaldub nüüd kujul

$$\tau_v = \frac{m}{\beta}. \quad (4.9.13)$$

Siit järeldub, et ülesumbunud dünaamika rakendamiseks peab hõõrdetegur olema suur ja/või osakese mass väike.

⁸ Võrduse (4.9.1) tõlgendamine Browni osakese kiiruse avaldisena, st

$$v(t) = (m\gamma)^{-1} \zeta(t),$$

tähendaks seda, et

$$\langle v^2(t) \rangle = \mathcal{A} \gamma^{-2} \delta(0) = \infty,$$

mis on ilmselt ebakorrekne tulemus. Selles väljendub üldisem asjaolu: Wieneri protsess ei ole diferentseeritav (vt [2] lk 68). Küll aga on osakese kiiruseks võrduse (4.9.5) vasakul poolel seisev tuletis enne piirväärtuse (4.9.9) võtmist.

4.10 Vabade Browni osakeste difusioon

Einsteini-Smoluchowski võrrand (4.8.9) kirjeldab Browni osakeste difusiooni. Me võime üles kirjutada selle võrrandi kolmedimensionaalse üldistuse

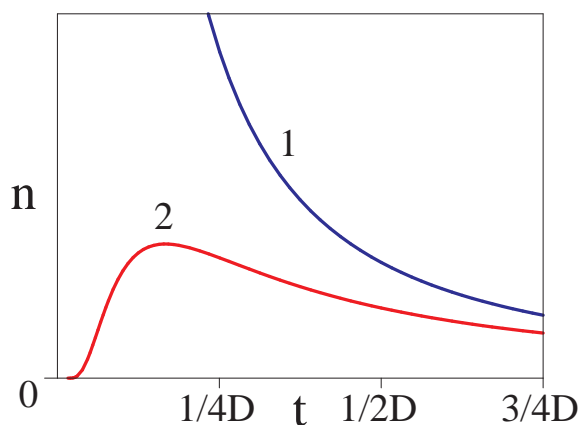
$$\frac{\partial W(\vec{r}, t)}{\partial t} = D \nabla^2 W(\vec{r}, t), \quad (4.10.1)$$

kus \vec{r} on Browni osakese kohavektor. Kui algtingimuseks on

$$W(\vec{r}, t_0) = \delta(\vec{r} - \vec{r}(t_0)), \quad (4.10.2)$$

siis rahuldab võrrandit (4.10.1) piiramata ruumis tõenäosustihedus

$$W(\vec{r}, t) = [4\pi D(t - t_0)]^{-3/2} \exp\left(-\frac{[\vec{r} - \vec{r}(t_0)]^2}{4D(t - t_0)}\right). \quad (4.10.3)$$



Joonis 4.3. Browni osakeste kontsentratsiooni $n(\vec{r}, t)$ sõltuvus ajast erinevates ruumipunktides, kui $t_0 = 0$. Kõver (1): kontsentratsioon ruumipunktis $\vec{r} = \vec{r}(t_0)$, (2): kontsentratsioon ruumipunktis $\vec{r} \neq \vec{r}(t_0)$

Olgu $n(\vec{r}, t)$ Browni osakeste arvu tihedus (kontsentratsioon) ja N – Browni osakeste arv. Ilmselt kehtib võrdus

$$n(\vec{r}, t) = N W(\vec{r}, t). \quad (4.10.4)$$

Seega võime me formuleerida Einsteini-Smoluchowski võrrandi Browni osakeste arvu tiheduse jaoks,

$$\frac{\partial n(\vec{r}, t)}{\partial t} = D \nabla^2 n(\vec{r}, t). \quad (4.10.5)$$

Olgu ajahetkel t_0 Browni osakesed kontsentreeritud ühte ruumpunkti $\vec{r}(t_0)$,

$$n(\vec{r}, t_0) = N \delta(\vec{r} - \vec{r}(t_0)). \quad (4.10.6)$$

Sellise algtingimuse korral on võrrandi (4.10.5) lahend antud valemitega (4.10.3) ja (4.10.4),

$$n(\vec{r}, t) = \frac{N}{[4\pi D(t - t_0)]^{3/2}} \exp\left(-\frac{[\vec{r} - \vec{r}(t_0)]^2}{4D(t - t_0)}\right). \quad (4.10.7)$$

Kirjeldab see Browni osakeste difusiooniprotsessi, mida illustreerib joonis 4.3.

Ülesanded

Ülesanne 4.10.1. Kontrollige, et tõenäosustihedus (4.10.3) on normeeritud 1-le.

Ülesanne 4.10.2. Kontrollige, et tõenäosustihedus (4.10.3) rahuldab algtingimust (4.10.2).

4.11 Browni liikumine deterministlikus jõuväljas. Kramersi võrrand

Browni osakese liikumist deterministlikus jõuväljas kirjeldavad võrrandid

$$\frac{dv}{dt} = -\gamma v + m^{-1}[F(x) + \zeta(t)], \quad (4.11.1)$$

$$\frac{dx}{dt} = v, \quad (4.11.2)$$

kus

$$F(x) = -\frac{dV(x)}{dx}, \quad (4.11.3)$$

$F(x)$ on Browni osakesele mõjuv statsionaarne deterministlik jõud ja $V(x)$ – osakese potentsiaalne energia. Liikumisvõrrandid (4.11.1), (4.11.2) annavad meile kahe juhusliku suurusega Markovi protsessi, vt punkt 4.4.

Browni osakese kiiruse ja koordinaadi ühistõenäosustiheduse $W(v, x, t)$ jaoks kehtib Fokkeri-Plancki võrrand, mida nimetatakse *Kramersi võrrandiks*.⁹ Kuna deterministlik jõud $F(x)$ on statsionaarne, siis on tegemist ajas homogeense protsessiga

⁹ Kasutusel on ka nimetus *Kleini-Kramersi võrrand*.

ja Kramersi võrrandi koefitsiendid ei sõltu ajast. Valemite (3.7.13), (3.7.14) alusel näeb see võrrand üldkujul välja selline:

$$\frac{\partial W(v, x, t)}{\partial t} = \hat{L}_{FP}(v, x) W(v, x, t), \quad (4.11.4)$$

$$\begin{aligned} \hat{L}_{FP}(v, x) = & -\frac{\partial}{\partial v} D_v(v, x) - \frac{\partial}{\partial x} D_x(v, x) + \frac{\partial^2}{\partial v^2} D_{vv}(v, x) \\ & + \frac{\partial^2}{\partial x^2} D_{xx}(v, x) + 2\frac{\partial^2}{\partial v \partial x} D_{vx}(v, x), \end{aligned} \quad (4.11.5)$$

kus

$$D_v(v, x) = \left[\frac{\partial}{\partial \tau} \langle v(t + \tau) - v(t) \rangle \Big|_{v(t)=v, x(t)=x} \right] \Big|_{\tau=0}, \quad (4.11.6)$$

$$D_x(v, x) = \left[\frac{\partial}{\partial \tau} \langle x(t + \tau) - x(t) \rangle \Big|_{v(t)=v, x(t)=x} \right] \Big|_{\tau=0}, \quad (4.11.7)$$

$$D_{vv}(v, x) = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial}{\partial \tau} \langle [v(t + \tau) - v(t)]^2 \rangle \Big|_{v(t)=v, x(t)=x} \right] \Big|_{\tau=0}, \quad (4.11.8)$$

$$D_{xx}(v, x) = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial}{\partial \tau} \langle [x(t + \tau) - x(t)]^2 \rangle \Big|_{v(t)=v, x(t)=x} \right] \Big|_{\tau=0}, \quad (4.11.9)$$

$$D_{vx}(v, x) = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial}{\partial \tau} \langle [v(t + \tau) - v(t)] [x(t + \tau) - x(t)] \rangle \Big|_{v(t)=v, x(t)=x} \right] \Big|_{\tau=0}. \quad (4.11.10)$$

Leiame Kramersi võrrandi koefitsiendid. Kirjutame kõigepealt Browni osakese liikumisvõrrandid (4.11.1), (4.11.2) üles kujul

$$\frac{dv(t + \tau)}{d\tau} = -\gamma v(t + \tau) + \frac{F(x(t + \tau))}{m} + \frac{\zeta(t + \tau)}{m}, \quad (4.11.11)$$

$$\frac{dx(t + \tau)}{d\tau} = v(t + \tau). \quad (4.11.12)$$

Ajahetkel t on osakese kiirus ja koordinaat fikseeritud, $v(t) = v$ ja $x(t) = x$. Läheme diferentsiaalvõrranditelt (4.11.11) ja (4.11.12) üle integraalvõrranditele

$$v(t + \tau) - v = -\gamma \int_0^\tau v(t + \tau') d\tau' + \int_0^\tau \frac{F(x(t + \tau'))}{m} d\tau' + \int_0^\tau \frac{\zeta(t + \tau')}{m} d\tau', \quad (4.11.13)$$

$$x(t + \tau) - x = \int_0^\tau v(t + \tau') d\tau'. \quad (4.11.14)$$

Kramersi võrrandi koefitsientide määramiseks tuleb leida tuletised

$$\left. \frac{\partial}{\partial \tau} (\dots) \right|_{\tau=0}.$$

Kui $\tau \rightarrow 0$, siis $v(t + \tau) \rightarrow v$ ja $x(t + \tau) \rightarrow x$. Seoses sellega esitame valemities (4.11.13) ja (4.11.14)

$$v(t + \tau') = v + [v(t + \tau') - v], \quad (4.11.15)$$

$$F(x(t + \tau')) = F(x) + \frac{\partial F(x)}{\partial x} [x(t + \tau') - x] + \dots \quad (4.11.16)$$

Asendame need avaldised võrranditesse (4.11.13) ja (4.11.14). Tulemuseks on

$$\begin{aligned} v(t + \tau) - v = & \left[-\gamma v + \frac{F(x)}{m} \right] \tau - \gamma \int_0^\tau [v(t + \tau') - v] d\tau' \\ & + \frac{1}{m} \frac{\partial F(x)}{\partial x} \int_0^\tau [x(t + \tau') - x] d\tau' + \int_0^\tau \frac{\zeta(t + \tau')}{m} d\tau', \end{aligned} \quad (4.11.17)$$

$$x(t + \tau) - x = v\tau + \int_0^\tau [v(t + \tau') - v] d\tau'. \quad (4.11.18)$$

Võrdleme võrrandite (4.11.17) ja (4.11.18) paremal poolel olevate liikmete kahane-mise kiirusi, kui $\tau \rightarrow 0$. Selleks leiame piirväärtused

$$\lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{\int_0^\tau [v(t + \tau') - v] d\tau'}{\tau} = \lim_{\tau \rightarrow 0} [v(t + \tau) - v] = 0,$$

$$\lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{\int_0^\tau [x(t + \tau') - x] d\tau'}{\tau} = \lim_{\tau \rightarrow 0} [x(t + \tau) - x] = 0.$$

Seega vaadeldavas piirprotsessis kahanevad võrrandis (4.11.17) paremal poolel teine ja kolmas liige ning võrrandis (4.11.18) teine liige kiiremini kui vastavate võrrandite esimesed liikmed ning me võime need kiiremini kahanevad liikmed kõrvale jätta. Järelikult

$$v(t + \tau) - v = \left[-\gamma v + \frac{F(x)}{m} \right] \tau + \int_0^\tau \frac{\zeta(t + \tau')}{m} d\tau', \quad (4.11.19)$$

$$x(t + \tau) - x = v\tau. \quad (4.11.20)$$

Avaldiste (4.11.19) ja (4.11.20) paremad pooled sisaldavad ainult Langevini jõudu ζ ning fikseeritud suurusi v ja $F(x)$.

Nüüd saame leida Kramersi võrrandi koefitsiendid. Valemite (4.11.6) ja (4.11.19) alusel

$$D_v(v, x) = \frac{\partial}{\partial \tau} \left\{ \left[-\gamma v + \frac{F(x)}{m} \right] \tau + \int_0^\tau \frac{\langle \zeta(t + \tau') \rangle}{m} d\tau' \right\} \Big|_{\tau=0}.$$

Seega

$$D_v(v, x) = -\gamma v + \frac{F(x)}{m}. \quad (4.11.21)$$

Valemite (4.11.7) ja (4.11.20) alusel

$$D_x(v, x) = v. \quad (4.11.22)$$

Valemitest (4.11.8) ja (4.11.19) järeldub, et

$$\begin{aligned} D_{vv}(v, x) &= \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \tau} \left\{ \left[-\gamma v + \frac{F(x)}{m} \right]^2 \tau^2 + 2 \left[-\gamma v + \frac{F(x)}{m} \right] \left[\int_0^\tau \frac{\langle \zeta(t + \tau') \rangle}{m} d\tau' \right] \tau \right. \\ &\left. + \int_0^\tau \int_0^\tau \frac{\langle \zeta(t + \tau') \zeta(t + \tau'') \rangle}{m^2} d\tau' d\tau'' \right\} \Big|_{\tau=0} = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \tau} \left\{ \left[-\gamma v + \frac{F(x)}{m} \right]^2 \tau^2 + \mathcal{A}\tau \right\} \Big|_{\tau=0}. \end{aligned}$$

Seega

$$D_{vv}(v, x) = \frac{\mathcal{A}}{2}. \quad (4.11.23)$$

Valemite (4.11.9) ja (4.11.20) alusel

$$D_{xx}(v, x) = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \tau} (v^2 \tau^2) \Big|_{\tau=0}.$$

Järelikult

$$D_{xx}(v, x) = 0. \quad (4.11.24)$$

Valemite (4.11.10), (4.11.19) ja (4.11.20) alusel

$$D_{vx}(v, x) = \frac{\partial}{\partial \tau} \left\{ \left[-\gamma v + \frac{F(x)}{m} \right] v \tau^2 + \left[\int_0^\tau \frac{\langle \zeta(t + \tau') \rangle}{m} d\tau' \right] v \tau \right\} \Big|_{\tau=0}.$$

Järelikult

$$D_{vx}(v, x) = 0. \quad (4.11.25)$$

Sellega oleme tuletanud Kramersi võrrandi

$$\begin{aligned} \frac{\partial W(v, x, t)}{\partial t} = & -v \frac{\partial W(v, x, t)}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial v} \left[\left(\gamma v - \frac{F(x)}{m} \right) W(v, x, t) \right] \\ & + \frac{\mathcal{A}}{2} \frac{\partial^2 W(v, x, t)}{\partial v^2}. \end{aligned} \quad (4.11.26)$$

Kui deterministlik jõud puudub, st $F(x) = 0$, siis saame võrrandist (4.11.26) selle erijuhuna Fokkeri-Plancki võrrandi vaba Browni osakese ühistõenäosustiheduse $W(v, x, t)$ jaoks

$$\frac{\partial W(v, x, t)}{\partial t} = -v \frac{\partial W(v, x, t)}{\partial x} + \gamma \frac{\partial}{\partial v} [v W(v, x, t)] + \frac{\mathcal{A}}{2} \frac{\partial^2 W(v, x, t)}{\partial v^2}. \quad (4.11.27)$$

Siit võib omakorda jõuda Fokkeri-Plancki võrrandini (4.6.12), mis kirjeldab ainult vaba Browni osakese kiirust. Selleks integreerime võrrandit (4.11.27) üle koordinaadi $\int_{-\infty}^{\infty} \dots dx$ ning arvestame, et

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} W(v, x, t) dx &= W(v, t), \\ \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial W(v, x, t)}{\partial x} dx &= W(v, x, t) \Big|_{x=-\infty}^{x=\infty} = 0. \end{aligned}$$

4.12 Kramersi võrrandi statsionaarne lahend

Kirjutama üles Kramersi võrrandi (4.11.26), võttes arvesse, et $F(x) = -dV(x)/dx$ ja $\mathcal{A} = 2k_B T \gamma / m$,

$$\begin{aligned} \frac{\partial W(v, x, t)}{\partial t} = & -v \frac{\partial W(v, x, t)}{\partial x} + \frac{1}{m} \frac{\partial}{\partial v} \left[\left(\gamma m v + \frac{dV(x)}{dx} \right) W(v, x, t) \right] \\ & + \frac{k_B T \gamma}{m} \frac{\partial^2 W(v, x, t)}{\partial v^2}. \end{aligned} \quad (4.12.1)$$

Selleks, et muuta valemeid veidi kompaktsemaks, läheme üle uutele muutujatele

$$u = v \sqrt{\frac{m}{k_B T}}, \quad y = x \sqrt{\frac{m}{k_B T}}, \quad (4.12.2)$$

toome sisse dimensioonitu potentsiaalse energia

$$U(y) = \frac{V(x)}{k_B T} \quad (4.12.3)$$

ning esitame seejärel võrrandi (4.12.1) selliselt:

$$\begin{aligned} \frac{\partial W(u, y, t)}{\partial t} = & -u \frac{\partial W(u, y, t)}{\partial y} + \frac{dU(y)}{dy} \frac{\partial W(u, y, t)}{\partial u} \\ & + \gamma \frac{\partial}{\partial u} \left[uW(u, y, t) + \frac{\partial W(u, y, t)}{\partial u} \right]. \end{aligned} \quad (4.12.4)$$

Leiame võrrandi (4.12.4) statsionaarse lahendi, mille korral

$$\frac{\partial W(u, y, t)}{\partial t} = 0. \quad (4.12.5)$$

Otsime seda kujul

$$W(u, y) = \exp\left(-\frac{u^2}{2}\right) f(y), \quad (4.12.6)$$

kus $f(y)$ on seni tundmatu funktsioon. Asendame tõenäosustiheduse (4.12.6) võrrandisse (4.12.4). See annab koos tingimuse (4.12.5) arvestamisega

$$\begin{aligned} -u \exp\left(-\frac{u^2}{2}\right) \frac{\partial f(y)}{\partial y} - \frac{dU(y)}{dy} u \exp\left(-\frac{u^2}{2}\right) f(y) \\ + \gamma \frac{\partial}{\partial u} \left[u \exp\left(-\frac{u^2}{2}\right) f(y) - u \exp\left(-\frac{u^2}{2}\right) f(y) \right] = 0. \end{aligned}$$

Sellega oleme saanud funktsiooni $f(y)$ määramiseks võrrandi

$$\frac{\partial f(y)}{\partial y} = -\frac{dU(y)}{dy} f(y), \quad (4.12.7)$$

mille lahendiks on

$$f(y) = Z^{-1} \exp(-U(y)), \quad (4.12.8)$$

kus Z tuleb leida tõenäosustiheduse normeerimistingimusest. Seega

$$W(u, y) = Z^{-1} \exp\left(-U(y) - \frac{u^2}{2}\right). \quad (4.12.9)$$

Minnes nüüd tagasi esialgsetele muutujatele saame lõplikult

$$W(v, x) = Z^{-1} \exp\left(-\frac{V(x)}{k_B T} - \frac{mv^2}{2k_B T}\right). \quad (4.12.10)$$

Valem (4.12.10) kujutab endast *Boltzmanni jaotust*.

Ülesanded

Ülesanne 4.12.1. Lähtudes Boltzmanni jaotusest (4.12.10), leidke välises jõu-väljas liikuva Browni osakese kiiruse statsionaarne tõenäosusjaotus $W(v)$.

4.13 Harmoonilise ostsillaatori Browni liikumine

Harmoonilise ostsillaatori Browni liikumist kirjeldab Langevini võrrand

$$m \frac{dv}{dt} = -m\gamma v - m\omega_0^2 x + \zeta(t), \quad (4.13.1)$$

kus ω_0 on ostsillaatori omavõnkesagedus. Osakese potentsiaalne energia on siin

$$V(x) = \frac{m\omega_0^2}{2} x^2 \quad (4.13.2)$$

ning osakesele mõjub deterministlik jõud

$$F(x) = -\frac{dV(x)}{dx} = -m\omega_0^2 x. \quad (4.13.3)$$

Liikumisvõrrandile (4.13.1) vastava Kramersi võrrandi statsionaarne lahend on valemi (4.12.10) kohaselt

$$W(v, x) = Z^{-1} \exp\left(-\frac{m\omega_0^2 x^2 + mv^2}{2k_B T}\right), \quad (4.13.4)$$

kus

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{mv^2}{2k_B T}\right) dv \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{m\omega_0^2 x^2}{2k_B T}\right) dx.$$

Võttes arvesse, et

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ay^2} dy = \sqrt{\frac{\pi}{a}},$$

kus $a > 0$, saame

$$Z = \frac{2\pi k_B T}{m\omega_0}. \quad (4.13.5)$$

Leiame osakese koordinaadi ja kiiruse kaks esimest momenti statsionaarsel juhul. Üldiselt

$$\langle f(v, x) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(v, x) W(v, x) dv dx.$$

Kuna

$$\int_{-\infty}^{\infty} ye^{-ay^2} dy = 0$$

ja

$$\int_{-\infty}^{\infty} y^2 e^{-ay^2} dy = \frac{\sqrt{\pi}}{2a^{3/2}},$$

kus $a > 0$, siis

$$\langle v \rangle = \langle x \rangle = 0, \quad (4.13.6)$$

$$\langle v^2 \rangle = \omega_0^2 \langle x^2 \rangle = \frac{k_B T}{m}. \quad (4.13.7)$$

Need keskvaartused iseloomustavad harmoonilise ostsillaatori fluktuatsioonide tasakaaluasendi $x = 0$ ümber valge müra toimet.

Ülesanded

Ülesanne 4.13.1. Kontrollige valemite (4.13.6) ja (4.13.7) kehtivust.

4.14 Ostsillaatori fluktuatsioonide spektraalsed tihedused

Leiame kiiruse ja koordinaadi fluktuatsioonide spektraalsed tihedused harmoonilises ostsillaatoris. Kiiruse ja koordinaadi fluktuatsioonide jaoks kehtivad liikumisvõrrandid

$$\begin{aligned} \frac{d \Delta v(t)}{dt} + \gamma \Delta v(t) + \omega_0^2 \Delta x(t) &= \frac{\Delta \zeta(t)}{m}, \\ \frac{d \Delta x(t)}{dt} &= \Delta v(t). \end{aligned} \quad (4.14.1)$$

Fluktuatsioonide Fourier' teisendid rahuldavad siis võrrandeid

$$\begin{aligned} (-i\omega + \gamma) \Delta \tilde{v}(\omega) + \omega_0^2 \Delta \tilde{x}(\omega) &= \frac{\Delta \tilde{\zeta}(\omega)}{m}, \\ -i\omega \Delta \tilde{x}(\omega) &= \Delta \tilde{v}(\omega). \end{aligned} \quad (4.14.2)$$

Siit avaldame

$$\Delta \tilde{v}(\omega) = \omega[\omega\gamma - i(\omega^2 - \omega_0^2)]^{-1} \frac{\Delta \tilde{\zeta}(\omega)}{m}, \quad (4.14.3)$$

$$\Delta\tilde{x}(\omega) = [-i\omega\gamma - (\omega^2 - \omega_0^2)]^{-1} \frac{\Delta\tilde{\zeta}(\omega)}{m}. \quad (4.14.4)$$

Statsionaarse protsessi korral valemi (2.6.12) alusel

$$\langle \Delta\tilde{v}(\omega) \Delta\tilde{v}(-\omega') \rangle = 2\pi\delta(\omega - \omega') \tilde{\kappa}_{vv}(\omega), \quad (4.14.5)$$

$$\langle \Delta\tilde{x}(\omega) \Delta\tilde{x}(-\omega') \rangle = 2\pi\delta(\omega - \omega') \tilde{\kappa}_{xx}(\omega), \quad (4.14.6)$$

$$\langle \Delta\tilde{\zeta}(\omega) \Delta\tilde{\zeta}(-\omega') \rangle = 2\pi\delta(\omega - \omega') \tilde{\kappa}_{\zeta\zeta}(\omega). \quad (4.14.7)$$

Integreerides üle ω' -i, jõuame analoogselt punktiga 4.5 tulemuseni

$$\tilde{\kappa}_{vv}(\omega) = \omega^2 \tilde{\kappa}_{xx}(\omega) = \frac{\omega^2}{\omega^2\gamma^2 + (\omega^2 - \omega_0^2)^2} \frac{\tilde{\kappa}_{\zeta\zeta}(\omega)}{m^2}. \quad (4.14.8)$$

Sellega me oleme leidnud Wieneri-Khinchini teoreemi alusel kiiruse ja koordinaadi fluktuatsioonide spektraalsed tihedused harmoonilise ostsillaatori jaoks

$$\varrho_v(\omega) = \omega^2 \varrho_x(\omega) = \frac{2\omega^2\gamma}{\omega^2\gamma^2 + (\omega^2 - \omega_0^2)^2} \frac{k_B T}{m}, \quad (4.14.9)$$

kus on arvestatud fluktuatsioon-dissipatsiooni teoreemiga (vt valem (4.7.4))

$$\varrho_\zeta(\omega) = 2m\gamma k_B T. \quad (4.14.10)$$

Koordinaadi fluktuatsioonide spektraalne tihedus sageduse funktsioonina on toodud joonisel 4.4.

4.15 Elektriline võnkekontuur ja Nyquisti valem

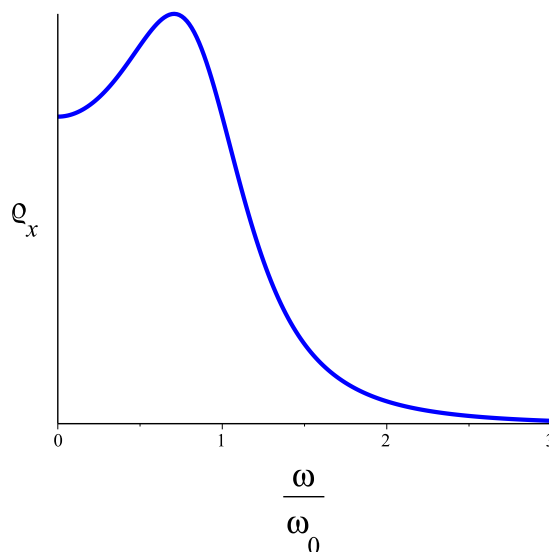
Harmoonilise ostsillaatori Browni liikumise näiteks on elektriline võnkekontuur, mis asub termostaadis. Elektrilisi võnkumisi kontuuris kirjeldavad võrrandid

$$L \frac{dI}{dt} + RI + \frac{q}{C} = \mathcal{E}(t), \quad (4.15.1)$$

$$\frac{dq}{dt} = I, \quad (4.15.2)$$

kus I on voolu tugevus, L – induktiivsus, R – takistus, C – kondensaatori mahtuvus, q – laeng kondensaatori plaatidel ja \mathcal{E} – elektromotoorjõud. Kui väline elektromotoorjõud puudub, siis võib suurust $\mathcal{E}(t)$ tõlgendada Langevini allikana, st fiktiivse elektromotoorjõuna, mis on ekvivalentne laengukandjate soojusliku liikumisega. Võrrand (4.15.1) on identne võrrandiga (4.13.1), kui me teeme viimases asendused

$$\begin{aligned} x &\rightarrow q, & v &\rightarrow I, & m &\rightarrow L, \\ \gamma &\rightarrow R/L, & \omega_0^2 &\rightarrow 1/LC, & \zeta &\rightarrow \mathcal{E}. \end{aligned} \quad (4.15.3)$$



Joonis 4.4. Harmoonilise ostsillaatori koordinaadi fluktuatsioonide spektraalse tiheduse sõltuvus sagedusest. Valitud on $\omega_0 = \gamma$.

Avaldisest (4.14.10) saame siis elektromotoorjõu fluktuatsioonide spektraalse tiheduse jaoks

$$\varrho_{\mathcal{E}}(\omega) = 2Rk_{\text{B}}T, \quad (4.15.4)$$

mis on tuntud kui *Nyquisti valem*¹⁰ (sisuliselt fluktuatsioon-dissipatsiooni teoreem).

Valemi (4.14.9) alusel võime me üles kirjutada ka voolu ja laengu fluktuatsioonide spektraalsed tihedused

$$\varrho_I(\omega) = \omega^2 \varrho_q(\omega) = \frac{2Rk_{\text{B}}T}{|Z(\omega)|^2}, \quad (4.15.6)$$

kus $Z(\omega)$ on kontuuri impedants,

$$Z(\omega) = R - i \left(L\omega - \frac{1}{C\omega} \right). \quad (4.15.7)$$

¹⁰ Valem (4.15.4) kehtib eeldusel, et laengukandjad on klassikalised osakesed. Nyquisti valemi kvantmehaaniliseks üldistuseks on

$$\varrho_{\mathcal{E}}(\omega) = \hbar\omega R \coth \frac{\hbar\omega}{2k_{\text{B}}T}, \quad (4.15.5)$$

kus \hbar on Plancki konstant. Me saame siit klassikalise piirjuhu, kui $\hbar\omega \ll k_{\text{B}}T$. Siis

$$\coth \frac{\hbar\omega}{2k_{\text{B}}T} \approx \frac{2k_{\text{B}}T}{\hbar\omega}$$

ning tulemuseks on avaldis (4.15.4).

4.16 Ülesumbunud Browni liikumine deterministlikus jõuväljas

Kui me jätame Langevini võrrandis (4.11.1) ära inertsiliikme, siis saame ülesumbunud Browni osakese liikumisvõrrandi statsionaarses deterministlikus jõuväljas

$$\frac{dx}{dt} = (\gamma m)^{-1}[F(x) + \zeta(t)]. \quad (4.16.1)$$

Selle võrrandi lahend on Markovi protsess. Seejuures rahuldab osakese koordinaadi tõenäosustihedus $W(x, t)$ Fokkeri-Plancki võrrandit. Leiame viimase koefitsiendid.

Analoogselt punktis 4.11 arendatud skeemiga esitame valemi (4.16.1) alusel

$$x(t + \tau) - x = \frac{F(x)}{\gamma m} \tau + \int_0^\tau \frac{\zeta(t + \tau')}{\gamma m} d\tau', \quad (4.16.2)$$

kus $x(t) = x$ on ajahetkel t fikseeritud koordinaat ja $\tau \rightarrow 0$. Fokkeri-Plancki võrrandi koefitsientide jaoks saame siit

$$D^{(1)}(x) = \left[\frac{\partial}{\partial \tau} \langle x(t + \tau) - x \rangle \right]_{\tau=0} = \left[\frac{\partial}{\partial \tau} \frac{F(x)}{\gamma m} \tau \right]_{\tau=0} = \frac{F(x)}{\gamma m}, \quad (4.16.3)$$

$$\begin{aligned} D^{(2)}(x) &= \frac{1}{2} \left[\frac{\partial}{\partial \tau} \langle [x(t + \tau) - x]^2 \rangle \right]_{\tau=0} \\ &= \frac{1}{2} \left[\frac{\partial}{\partial \tau} \left[\left(\frac{F(x)}{\gamma m} \tau \right)^2 + \frac{\mathcal{A}}{\gamma^2} \tau \right] \right]_{\tau=0} = \frac{\mathcal{A}}{2\gamma^2} = \frac{k_B T}{\gamma m}. \end{aligned} \quad (4.16.4)$$

Tulemuseks on Fokkeri-Plancki võrrand¹¹

$$\frac{\partial W(x, t)}{\partial t} = -\frac{\partial S(x, t)}{\partial x}, \quad (4.16.5)$$

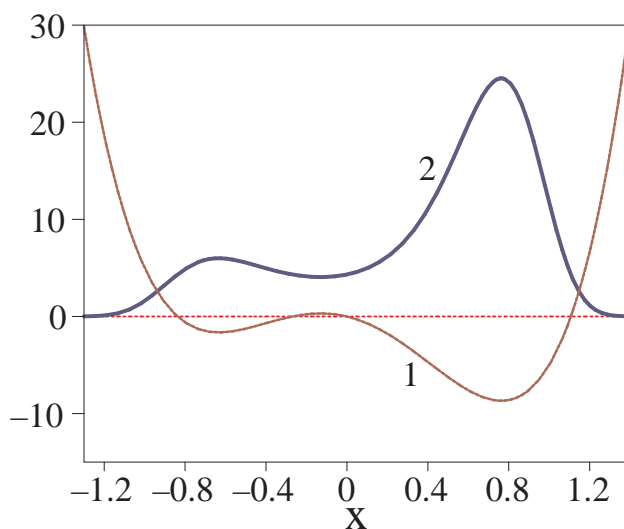
kus tõenäosusvoo tihedus avaldub

$$S(x, t) = (\gamma m)^{-1} \left[F(x) W(x, t) - k_B T \frac{\partial W(x, t)}{\partial x} \right]. \quad (4.16.6)$$

Leiame võrrandi (4.16.5) statsionaarse lahendi, st tõenäosusjaotuse, mis rahuldab tingimust

$$\frac{\partial W(x, t)}{\partial t} = 0. \quad (4.16.7)$$

¹¹ Tuntud ka kui *Smoluchowski võrrand*.



Joonis 4.5. Asümmeetrilise bistabiilse potentsiaali $V(x) = -ax - bx^2 + cx^4$ ja valemiga (4.16.13) antud vastava statsionaarse tõenäosustiheduse sõltuvus koordinaadist x . Kõver (1): $V(x)$, kõver (2): $20 \times W(x)$. Parameetrid: $a/k_B T = 1$, $b/k_B T = 4$ ja $c/k_B T = 4$.

Järelikult

$$\frac{\partial S(x)}{\partial x} = 0 \quad (4.16.8)$$

ehk

$$S(x) = \text{const.} \quad (4.16.9)$$

Olgu ääritingimused kas peegeldavad või loomulikud. Mõlemal juhul x -i muutumispiirkonna äärtel¹²

$$S(A) = S(B) = 0, \quad (4.16.10)$$

Siis aga valemi (4.16.9) alusel

$$S(x) = 0. \quad (4.16.11)$$

Seega rahuldab tõenäosustihedus võrrandit

$$\frac{\partial W(x)}{\partial x} = -(k_B T)^{-1} \frac{dV(x)}{dx} W(x), \quad (4.16.12)$$

¹² Loomulike ääritingimuste korral $A = -\infty$ ja $B = \infty$.

kus $V(x)$ on osakese potentsiaalne energia. Selle võrrandi lahendiks on tõenäosusjaotus

$$W(x) = Z^{-1} \exp\left(-\frac{V(x)}{k_B T}\right) \quad (4.16.13)$$

normeerimiskonstandiga

$$Z = \int_A^B \exp\left(-\frac{V(x)}{k_B T}\right) dx. \quad (4.16.14)$$

Joonisel 4.5 on kujutatud bistabiilsel potentsiaalil liikuva Browni osakese koordinaadi statsionaarne tõenäosusjaotus.

Ülesanded

Ülesanne 4.16.1. Kuidas järeldub tõenäosusjaotus (4.16.13) Boltzmanni jaotusest (4.12.10)?

Ülesanne 4.16.2. Kontrollige, et liikumisvõrrandile (4.16.1) vastab tõesti Fokkeri-Plancki võrrand.

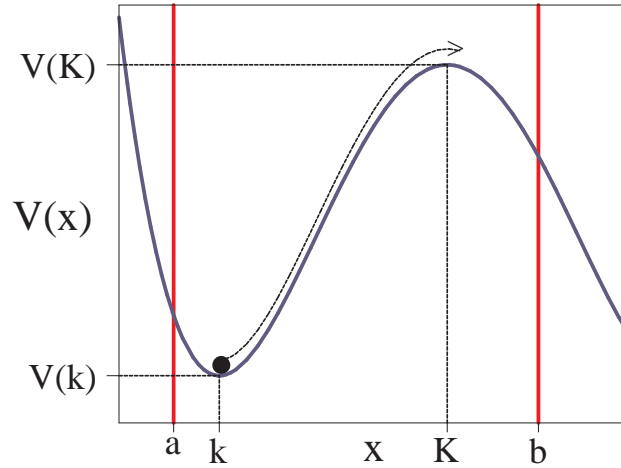
4.17 Potentsiaalbarjääri ületamine

Olgu osakese liikumine kirjeldatav Fokkeri-Plancki võrrandiga (4.16.5). Joonisel 4.6 on kujutatud osakese potentsiaalne energia $V(x)$, millel on punktis $x = k$ miinimum ja punktis $x = K$ maksimum. Me tahame leida keskmist aega, mille jooksul osake väljub potentsiaalaugust, ületades potentsiaalbarjääri. Paigutame peegeldava ääre kohale $x = a < k$ ning neelava ääre kohale $x = b > K$. Keskmine aeg, mille jooksul alghetkel $t = 0$ punktis $x(0) = k$ asunud osake läbib neelava ääre, on valemi (3.14.14) alusel

$$T(k \rightarrow b) = \int_k^b \frac{dy}{\psi(y)} \int_a^y \frac{\psi(z)}{D^{(2)}(z)} dz, \quad (4.17.1)$$

kus valemi (3.13.21) kohaselt

$$\psi(x) = \exp\left[\int_a^x \frac{D^{(1)}(x')}{D^{(2)}(x')} dx'\right]. \quad (4.17.2)$$



Joonis 4.6. Potentsiaalbarjääri ületamine osakese poolt.

Antud juhul

$$D^{(1)}(x) = \frac{F(x)}{\gamma m} = -\frac{1}{\gamma m} \frac{dV(x)}{dx},$$

$$D^{(2)}(x) = \frac{k_B T}{\gamma m}.$$

Seega

$$\psi(x) = \exp \left[-\frac{1}{k_B T} \int_a^x \frac{dV(x')}{dx'} dx' \right] = \exp \left(-\frac{V(x)}{k_B T} \right) \exp \left(\frac{V(a)}{k_B T} \right)$$

ning

$$T(k \rightarrow b) = \frac{\gamma m}{k_B T} \int_k^b dy \exp \left(\frac{V(y)}{k_B T} \right) \int_a^y dz \exp \left(-\frac{V(z)}{k_B T} \right). \quad (4.17.3)$$

Peegeldava ääre võib siin paigutada ka kohale $a = -\infty$.

Kasutades teatavaid lähendusi, on võimalik avaldist (4.17.3) veel oluliselt lihtsustada. Muuhulgas saab valemis (4.17.3) kõrvaldada sõltuvuse peegeldava ääre asukohast a ja neelava ääre asukohast b .

Paneme kõigepealt tähele, et kui potentsiaalil on punktis K piisavalt terav maksimum ning temperatuur on madal, $k_B T \ll [V(K) - V(k)]$ ja $k_B T \ll [V(K) - V(b)]$, siis on avaldises (4.17.3) ka teise integraali ees oleval funktsioonil $\exp(V(y)/k_B T)$ selles punktis terav maksimum, millest eemaldumisel kahaneb funktsiooni kiiresti ning saab palju väiksemaks oma maksimaalsest väärtusest (kõver (1) joonisel 4.7).

Siis me saame integraali I_1 jaoks ligikaudu

$$\begin{aligned} I_1 &= \exp\left(\frac{V(K)}{k_B T}\right) \int_k^b \exp\left(-\frac{|V''(K)|(y-K)^2}{2k_B T}\right) dy \\ &\approx \exp\left(\frac{V(K)}{k_B T}\right) \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{|V''(K)|(y-K)^2}{2k_B T}\right) dy \\ &= \sqrt{\frac{2\pi k_B T}{|V''(K)|}} \exp\left(\frac{V(K)}{k_B T}\right). \end{aligned} \quad (4.17.8)$$

Integraali I_2 annab põhilise panuse potentsiaali miinimumilähedane ümbrus. Arendame potentsiaali Taylori ritta miinimumpunkti ümbruses

$$V(y) = V(k) + \frac{1}{2} V''(k) (y - k)^2 + \dots \quad (4.17.9)$$

Analoogselt valemiga (4.17.8) leiame nüüd integraali I_2 jaoks ligikaudu

$$I_2 = \sqrt{\frac{2\pi k_B T}{V''(k)}} \exp\left(-\frac{V(k)}{k_B T}\right). \quad (4.17.10)$$

Järelikult on keskmine aeg, mis kulub Browni osakesel potentsiaalbarjääri ületamiseks, antud lähenduses

$$T(k \rightarrow b) = \frac{2\pi\gamma m}{\sqrt{V''(k)|V''(K)|}} \exp\left(\frac{V(K) - V(k)}{k_B T}\right). \quad (4.17.11)$$

Barjääri ületamise keskmine aeg kasvab, kui kasvab barjääri kõrgus $V(K) - V(k)$, ning kahaneb, kui temperatuur kasvab.

Avaldist (4.17.11) võib interpreteerida *Arrheniuse valemina* keemiliste reaktsioonide kineetikas. Väga paljude keemiliste reaktsioonide kiirus kasvab oluliselt temperatuuri tõusuga ning reaktsioonikiiruse temperatuurisõltuvus on empiirilise Arrheniuse valemi kohaselt $\sim \exp(-\Delta E/k_B T)$, kus ΔE on reaktsiooni aktiveerimisenergia. Valem (4.17.11) modelleerib seega keemilise reaktsiooni kineetilist aspekti kui difusiooni üle potentsiaalbarjääri kõrgusega $\Delta E = V(K) - V(k)$.

Kasutatud kirjandus

1. H. Risken „The Fokker-Planck Equation“, Springer-Verlag, 1996.
2. C. W. Gardiner „Handbook of Stochastic Methods for Physics, Chemistry and the Natural sciences“, Springer-Verlag, 1996.
3. R. Mankin, E. Reiter „Stohhastilised protsessid I, II“, Tallinn, 1995.
4. N. G. van Kampen „Stochastic Processes in Physics and Chemistry“, Elsevier, 2007.
5. Ju. L. Klimontovich „Statistiline füüsika“, Nauka, 1982. (Vene keeles)
6. G. Röpke „Statistische Mechanik für das Nichtgleichgewicht“, VED Deutsches Verlag der Wissenschaften, 1986. (Olemas ka venekeelne tõlge)
7. W. Paul, J. Baschnagel „Stochastic Processes. From Physics to Finance“, Springer-Verlag, 1999.
8. W. T. Coffey, Yu. P. Kalmykov, J. T. Waldron „The Langevin Equation“, World Scientific, 2005.