Н.Г.Ван Кампен

СТОХАСТИЧЕСКИЕ ПРОЦЕССЫ В ФИЗИКЕ И ХИМИИ

Книга является введением в теорию флуктуации и стохастические методы. В ней изложены вопросы теории вероятностей, случайных событий и стохастических процессов. Рассмотрены Марковские процессы и основное кинетическое уравнение, уравнения Фоккера —Планка, Ланжевена, а также приложения приближенных методов к флуктуациям в нелинейных, неустойчивых и пространственно-распределенных системах. Приведено много задач и упражнений.

Для студентов и аспирантов инженерно-физических и математических специальностей вузов.

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие редактора 5
Предисловие автора 8
Глава 1. Стохастические переменные 11
1.1. Определения 11
1.2. Средние 14
1.3. Распределения для многих переменных 19
1.4. Сложение стохастических переменных 23
1.5. Преобразование переменных 26
1.6. Распределение Гаусса 30
1.7. Центральная предельная теорема 33
Глава 2. Случайные события 37
2.1. Определения 38
2.2 Распределение Пуассона 41
2.3. Еще один способ описания случайных событий 43
2.4. Формула обращения 47
2.5. Корреляционная функция 51
2.6. Время ожидания 54
Глава 3. Стохастические процессы 57
3 1. Определения 57
3.2. Стохастические процессы в физике 60
3.3. Преобразование Фурье стационарных процессов 64
3.4. Иерархия функций распределения 67
3.5. Колебания струны и случайные поля 71
3.6. Ветвящиеся процессы 75
Глава 4. Марковские процессы 78
4.1. Свойство марковости 78
4.2. Уравнение Чепмена — Колмогорова 84
4.3. Стационарные марковские процессы 87
4.4. Выделение подансамбля 92
4.5. Марковские цепи 95
4.6. Процессы распада 98

Глава 5. Основное кинетическое уравнение 100
5.1. Вывод основного кинетического уравнения 100
5.2. Класс W-матриц 104
5.3. Предел больших времен 108
5.4. Замкнутые изолированные физические системы 112
5.5. Возрастание энтропии 115
5.6. Доказательство соотношения детального равновесия 119
5.7. Разложение по собственным функциям 122
5.8. Макроскопическое уравнение 126
5.9. Сопряженное уравнение 131
Глава 6. Одношаговые процессы 134
6.1. Определения; процесс Пуассона 134
6.2. Случайное блуждание с непрерывным временем 136
6.3. Общие свойства одношаговых процессов 139
6.4. Примеры линейных одношаговых процессов 143
6.5. Естественные граничные условия 147
6.6. Линейный одношаговый процесс с естественными граничными условиями 149
6.7. Искусственные граничные условия 153
6.8. Искусственные граничные условия и нормальные моды 157
6.9. Нелинейные одношаговые процессы 161
6.10. Проблема первого прохождения 164
Глава 7. Химические реакции 169
7.1. Кинематика химических реакций 170
7.2. Динамика химических реакций 174
7.3. Стационарное решение 176
7.4. Открытые системы 179
7.5. Одномолекулярные реакции 181
7.6. Коллективные системы 186
7.7. Составные марковские процессы 190
Глава 8. Уравнения Фоккера — Планка и Ланжевена 195
8.1. Введение 195
8.2. Вывод уравнения Фоккера — Планка 199
8.3. Броуновское движение 202
8.4. Рэлеевская частица 205
8.5. Приложение к одношаговым процессам 208
8.6. Линейное уравнение Фоккера—Планка в случае многих переменных 212
8.7. Уравнение Крамерса 215
8.8. Метод Ланжевена ' 219
8.9. Как применять метод Ланжевена 228
Глава 9. Разложение основного кинетического уравнения 233
9.1. Вводные рассуждения 233

9.2. Общая формулировка метода разложения 237
9.3. Природа макроскопического закона 242
9.4. Приближение линейного шума 245
9.5. Разложение основного кинетического уравнения в случае многих переменных 250
9.6. Высшие порядки 254
Глава 10. Процессы диффузионного типа 259
10.1. Основное кинетическое уравнение диффузионного типа 259
10.2. Диффузия во внешнем поле 262
10.3. Диффузия в неоднородной среде 265
10.4. Уравнение диффузии в случае многих переменных 268
10.5. Предел нулевых флуктуации 272
Глава 11. Неустойчивые системы 276
11.1. Бистабильные системы 276
11.2. Время перехода 283
11.3. Вероятность расщепления 287
11.4. Проблема Мальтуса — Ферхюльста 290
11.5. Критические флуктуации 293
11.6. Диффузия в потенциале с двумя ямами 296
11.7. Параболическое приближение 300
11.8. Предельные циклы и флуктуации 304
11.9. Лазер как диффузионная система 307
Глава 12. Флуктуации в непрерывных системах 312
12.1. Введение 312
12.2. Диффузионный шум 315
12.3. Метод составных моментов 317
12.4. Флуктуации плотности в фазовом пространстве 321
12.5. Флуктуации и уравнение Больцмана 324
Глава 13. Статистика скачкообразных событий 331
13.1. Основные формулы и простой пример 331
13.2. Скачкообразные события в нелинейных системах 334
13.3. Фотоэффект: флуктуации числа падающих фотонов 336
13.4. Фотоэффект (продолжение) 339
Глава 14. Стохастические дифференциальные уравнения 343
14.1. Определения 344
14.2. Эвристический анализ мультипликативных уравнений 347
14.3. Разложение по кумулянтам 350
14.4. Три критических замечания 356
14.5. Нелинейные стохастические дифференциальные уравнения 36!
14.6. Большие времена корреляции 365
14.7. Неоднородное линейное уравнение 371

ПРЕДИСЛОВИЕ РЕДАКТОРА

Имя автора этой книги хорошо известно в научном мире, в частности специалистам в области физики плазмы и гидродинамики. Именно Ван Кампен [**П1**], исходя из физических соображений, расширил класс волновых решений в плазме, включив в него обобщенные функции, не удовлетворяющие классическим условиям интегрируемости. Среди новых волновых решений оказались и те, для которых нет однозначной связи между частотой и волновым вектором. В дальнейшем именно такой метод позволил эффективно исследовать эховые явления в плазме, проблему просветления волновых барьеров и др. Этот подход автора книги, связанный с работой на «стыке» физики и математики, оказывается очень полезным при исследовании случайных процессов, где без ясного физического понимания трудно рассчитывать на обнаружение интересных физических эффектов; но, с другой стороны, здесь же возможны различные математические ловушки, как, например, при использовании «белого шума» — «беспамятного» процесса, являющегося предельным случаем короткокоррелированного процесса.

В последние два-три десятилетия интерес к шуму резко возрос в силу большого числа новых явлений физики и химии, которые связаны с ролью флуктуаций, как внутренних, так и особенно внешних (последние часто называют флуктуациями среды). Поскольку автор предисловия является физиком, то это и предопределяет приводимые примеры, иллюстрирующие нарастающую важность случайных процессов. Так, Ф. Андерсоном еще в [**П2**] были высказаны аргументы и найдены условия, при которых за счет рассеяния на случайном потенциале примесей каждый электрон оказывается локализованным в определенной области проводника. Иначе говоря, проводимость металла (теперь уже «бывшего» металла) обращается в нуль. Разумеется, «андерсоновская локализация» не может быть выделенным примером в природе. Необходим направленный поиск связанных состояний (а также обратных явлений — понижения потенциального барьера), обязанных эффективному влиянию случайных сил на движение системы. Приложения подобного

круга явлений в случае успеха трудно переоценить: новые типы химических реакций, влияние на термоядерные реакции и сверхпроводимость, связанные состояния в классической физике и др.

Другой круг связан с проблемой динамического хаоса, т. е. с возникновением стохастичности в детерминированных системах (см., например, [**П3**]). Здесь желательно подчеркнуть два момента. В отсутствие начального шума в системе действительно возможно возникновение хаотического состояния, но этот хаос достаточно сложен: он, вообще говоря, неоднороден и неизотропен. Вторая особенность, на которую хотелось бы обратить внимание,— роль малого шума. Конечно, получить шум без шума элегантно и по существу важно. Но дело в том, что в системе всегда имеется малый шум и пренебрежение им фактически основывается на предположении о его «неагрессивном» поведении. Однако в [**П4**, **П5**] обнаружен новый тип хаотического состояния—флуктуационный хаос с экспоненциально быстро или даже взрывным образом нарастающей дисперсией, инициированный малыми флуктуациями среды в условиях, когда динамический хаос еще невозможен. Необходимо также обратить внимание на такие интересные физические явления, как обращение знака флуктуирующих коэффициентов переноса [**П6**], а также ускоренное развитие неустойчивостей под влиянием турбулентности или шума (см., например, [**П5**]).

Из отмеченного видно, насколько повысился накал исследований шума за последние годы. Поэтому книга Ван Кампена с нужной математикой и приложениями очень своевременна. Книга хорошо написана и может служить введением в предмет. Автору удалось остаться на физическом уровне строгости изложения, и поэтому изложение не загромождено деталями, многие из которых сформулированы в виде упражнений. В тексте книги имеется много примечаний, разъяснений, предостережений и прочих отступлений от основного текста, проясняющих отдельные моменты. Особо следует сказать о многочисленных упражнениях, которые столь необходимы для глубокого овладения предметом. Некоторые из них не содержат вопроса, а сформулированы в виде утверждений. Такие упражнения надо понимать как дополнения к основному тексту.

Книга Ван Кампена впервые была опубликована в 1981 г. и с тех пор переиздавалась еще несколько раз без изменений. За это время были опубликованы и переведены на русский язык еще некоторые монографии, посвященные близким вопросам (см., например, [**П7—П9**]). Однако книга Ван Кампена является учебным пособием, а не обзором. Вероятно, поэтому список цитированной в ней литературы не полон и зачастую не дает всего представления о развитии данной области науки, но по поводу некоторых вопросов и приложений, лишь намеченных в книге, автор переадресует читателя к упомянутым работам. До настоящего времени на русском языке отсутствовала литература учебного характера, дающая

элементарное введение в стохастические методы. Книга Ван Кампена заполняет этот пробел, она адресована прежде всего студентам старших курсов и аспирантам, но может заинтересовать также физиков, химиков и математиков.

Проф. С. С. Моисеев

Литература к предисловию редактора

П1. Van Kampen N. G. Physica, **21**, 949 (1955).
П2. Андерсон Ф., 127, № 1, 19, 1979.
П3. Заславский Г. М. Стохастичность динамических систем. М., 1984.
П4. Барц Б. И., Моисеев С. С. В кн.: Нелинейные волны. Динамика и эволюция. М., 1989. С. 153—159.
П5. Буц В. А., Колыхалов П. И., Моисеев С. С., Пунгин В. Г. Доклад на XIV Генеральной ассамблее Европейского геофизического общества. Барселона, 1989.
П6. Моффат Г. Возбуждение магнитного поля в проводящей среде. М., 1980.
П7. Лихтенберг А., Либерман М. Регулярная и стохастическая динамика. М., 1984.
П8. Хорстхемке, Лефевр Р. Индуцированные шумом переходы. М., 1987.
П9. Заславский Г. М., Сагдееев Р. Х. Введение в нелинейную физику. От маятника до нелинейности и хаоса. М., 1988.

Памяти
Ф. ЦЕРНИКЕ,
чье влияние на эту работу
простирается даже глубже,
чем я это осознаю

ПРЕДИСЛОВИЕ АВТОРА

К чему набивать полное брюхо мясом, если это мясо не переваривается? если оно не превращается в другие элементы? и если оно не придает нам сил?

Монтень

В последние десятилетия интерес к случайным флуктуациям и описывающим их стохастическим методам чрезвычайно возрос. Число статей, рассеянных по литературе из разных областей знания, исчисляется, должно быть, тысячами. Этим проблемам посвящены специальные журналы. И тем не менее физик или химик, желающий познакомиться с этой темой, должен немало потрудиться, чтобы отыскать подходящую вводную литературу. Он прочтет статьи Ванга, Уленбека и Чандрасекара — предтечи современной теории, которым уже почти по сорок лет; какие-то полезные сведения он извлечет из книг Феллера, Барухи-Рейда, Стратоновича и немногих других авторов. Помимо этих книг он столкнется с устрашающей массой математических работ, большая часть которых имеет мало отношения к его потребностям. Предлагаемая книга — попытка заполнить этот пробел в литературе.

Первая часть содержит основные положения теории. Ее задача — предоставить физику и химику логически последовательное и достаточно полное изложение основ теории на понятном им языке. При этом глубокое интуитивное понимание материала считается более важным инструментом исследования, чем математическая строгость и общность. Физические системы в лучшем случае лишь приближенно удовлетворяют математическим условиям, на которых основаны строгие доказательства, и физик должен постоянно сознавать приближенность своих выкладок. (К примеру, колмогоровский вывод уравнения Фоккера — Планка ничего не говорит о том, к каким реальным системам приложимо это уравнение.) Физику также не нужны самые общие формулировки, но глубокое понимание частных случаев позволит ему, когда в этом возникнет необходимость, распространить теорию на новые примеры. В соответствии с таким мнением теория в этой книге развивается в тесной связи с многочисленными приложениями и примерами.

Вторая часть, начинающаяся с гл. 9, посвящена случайным флуктуациям в нелинейных системах. Этот предмет связан с рядом концептуальных трудностей, впервые указанных Д. К. К. Мак-Дональдом. Эти трудности имеют скорее физическую, чем математическую, природу. Много затруднений вызывает все еще преобладающее мнение, что нелинейные флуктуации можно исследовать с тех же физических позиций, что и линейные, используя лишь более сложные математические методы. В действительности же нужно иметь более прочное физическое основание и знать свойства физических систем более детально, чем это было нужно при изучении линейного шума. Этому и посвящена вторая часть, характер которой ближе к монографическому и которая неизбежно основана на моих собственных работах.

Преобладающая часть книги написана на уровне, понятном для старшекурсника. Разделы, где излагаются более трудные темы, перечислены ниже. Упражнения меняются по трудности от почти тривиальных до довольно сложных. Во многих из них приведены приложения теории, а другие содержат дополнения к основному тексту; некоторые дополнения используются позже. Я надеюсь, что упражнения не вызовут затруднений у читателя, а помогут ему активно вжиться в материал.

Особую трудность составляют литературные ссылки. Они не претендуют даже на приближение к полноте. Отбирая ссылки, я хотел лишь помочь читателю. Чтобы подчеркнуть это, ссылки даны в постраничных сносках, где читатель без труда найдет их, не роясь в других местах книги. Моя цель будет достигнута, если приведенных ссылок окажется достаточно для дальнейших поисков необходимой литературы. Ряд важных работ не упоминается явно, их результаты изложены без прямых ссылок. Этого нельзя было избежать, и я приношу свои извинения авторам этих работ и прошу их помнить, что это учебник, а не исследование по истории науки.

Полезными могут оказаться следующие рекомендации по пользованию книгой. В нумерации параграфов первая цифра означает номер главы, к которой относится данный параграф. В нумерации формул первые две цифры — номер параграфа, в котором приведена данная формула, третья цифра — ее порядковый номер. При первом чтении книги некоторые ее части можно пропустить. Пропуск гл. 2 и § 3.2; 3.5; 4.5; 5.3; 5.6; 5.9; 6.6—6.9, а также гл. 7 не прервет общую нить рассуждений, а потребует лишь небольших дополнительных усилий. Это касается также 8.9; 9.6; 12.5 и гл. 13, где использованы некоторые результаты гл. 2, в то время как гл. 14 посвящена важной, но стоящей особняком теме.

Я благодарю Б. Р. А. Нейбоера, Х. Фальк и Дж. Гринвельда за сделанные ими критические замечания, студентов, исправивших большое число опечаток в тексте, и Дж. М. Силкенс, неутомимо печатавшую и перепечатывавшую рукопись.

Н. Г. Ван Кампен

Приведенный ниже список книг несколько отличается от остального потока литературы. Все это работы более общего плана. Ссылки на них приводятся в тексте в виде цифры (соответствующей номеру книги в списке) в квадратных скобках.

1. W. Feller, An Introduction to Probability Theory and its Applications, Vol. 1 (2nd Ed., Wiley, New York, 1957);
   Феллер В. Введение в теорию вероятностей и ее приложения. М.: Наука 1984.— Т. 1.
2. W. Feller: idem, Vol. 2 (Wiley, New York, 1966);
   Феллер В. Там же.— Т. 2.
3. A. T. Bharucha-Reid, Elements of the Teory of Markov Processes and their Applications (McGraw-Hill, New York, 1960);
   Баруча—Рид А. Т. Элементы теории марковских процессов и их приложения. М.: Наука, 1969.
4. D. R. Cox and H. D. Miller, The Theory of Stochastic Processes (Methuen, London, 1965; Chapman and Hall, London, 1972),
5. Selected Papers on Noise and Stochastic Processes (N. Wax ed., Dover Publ., New York, 1954).
6. R. L. Stratonovich, Topics in the Theory of Random Noise, Vol, 1 (R. A. Silverman transl., Gordon and Breach, New York, 1963).
7. S. R. de Groot and P. Mazur, Non-equilibrium Thermodynamics (North-Holland, Amsterdam, 1962);
   Де Гроот С. Р., Мазур П. Неравновесная термодинамика. М.: Мир, 1964.
8. N. G. van Kampen in: Advances in Chemical Physics **34** (I. Prigogine and S. A. Rice eds., Willey, New York, 1976).

ГЛАВА 1

СТОХАСТИЧЕСКИЕ ПЕРЕМЕННЫЕ

Эта глава задумана как обзор теории вероятностей, или, скорее, как сводка фактов и концепций, которые понадобятся нам в дальнейшем. Многие читатели в целях экономии времени могут опустить эту главу и обращаться к ней только от случая к случаю, когда ссылки на нее встретятся в последующем тексте.

1.1. ОПРЕДЕЛЕНИЯ

Определить стохастическую переменную X — это значит задать:

а) множество ее возможных значений (называемых «областью значений», «множеством состояний», «пространством выборочных значений» или «фазовым пространством»);

б) распределение вероятностей на этом множестве.

Добавление к **а.** Множество возможных значений может быть дискретным, например: орлы или решки; число электронов в зоне проводимости полупроводника; число молекул определенной компоненты в реагирующей смеси. Множество возможных значений может быть *непрерывным* — состоять из значений, непрерывно заполняющих некоторый интервал, например: одна компонента скорости броуновской частицы (интервал $-\infty$, $+\infty$), кинетическая энергия этой частицы (0, ∞), разность потенциалов между концами электрического сопротивления ($-\infty$, $+\infty$). Множество может быть *частично дискретным*, *частично непрерывным*, например энергия электрона в присутствии связывающих центров. Помимо того, множество состояний может быть *многомерным*. В этом случае X удобно записывать как вектор $\mathbf{X}$. Например, $\mathbf{X}$ может обозначать: три компоненты скорости броуновской частицы, совокупность чисел молекул различных компонент в реагирующей смеси, количество электронов, захваченных примесями разных видов в полупроводнике.

Для простоты мы будем часто использовать обозначения лишь для множества дискретных состояний и непрерывных одномерных областей, предоставляя читателю возможность выбирать удобные обозначения для других случаев.

Добавление к **б.** В случае непрерывной одномерной области распределение вероятностей дается неотрицательной функцией

$$P(x) \geqslant 0, \tag{1.1.1}$$

с условием нормировки

$$\int P(x)\,\mathrm{d}x = 1, \tag{1.1.2}$$

где интегрирование распространяется на всю область. Вероятность того, что X принимает значение между x и $x+\mathrm{d}x$, есть

$$P(x)\,dx.$$

Примечание. Физики любят изображать распределение вероятностей с помощью *ансамбля*. Вместо того чтобы представлять себе одну величину с распределением вероятностей, они вводят воображаемый набор произвольно большого числа N величин, имеющих значения в заданной области. Причем число величин, имеющих значение между x и $x+\mathrm{d}x$, равно $NP(x)\,\mathrm{d}x$. Тогда распределение вероятностей заменяется плотностью распределения большого числа «выборок». Это никоим образом не влияет на результат, а является удобным языком для рассуждения о вероятностях, и мы иногда будем им пользоваться. Добавим к этому, что физическая система на самом деле может состоять из большого числа одинаковых объектов, которые в определенной мере и составляют физическую реализацию ансамбля. Например, молекулы идеального газа могут служить ансамблем, представляющим максвелловскую функцию распределения вероятностей по скоростям. Другой пример — пучок электронов, рассеивающийся на мишени, представляет распределение вероятностей по углам отклонения. Однако использование понятия ансамбля не ограничивается такими случаями и не основано на них, а просто служит более наглядным представлением распределения вероятностей. Попытки ввести физическое взаимодействие между элементами ансамбля или даже простое рассмотрение этого вопроса являются в принципе неправильными.

В непрерывной области функция $P(x)$ может включать в себя дельта-функции:

$$P(x) = \sum_n p_n \delta(x - x_n) + \tilde{P}(x), \tag{1.1.3}$$

где $\tilde{p}$ — финитная или по крайней мере интегрируемая неотрицательная функция ($p_n > 0$), и

$$\sum_n p_n + \int \tilde{P}(x)\,\mathrm{d}x = 1.$$

Физически это можно представить как множество дискретных состояний x_n с вероятностью p_n, как бы наложенных на непрерывную область. Если $P(x)$ состоит из одних дельта-функций, т. е. $\tilde{P}(x) = 0$, то такое распределение может рассматриваться как дискретное распределение p_n на дискретном наборе состояний x_n. Математическая теорема утверждает, что практически любое распределение на $-\infty < x < \infty$ может быть записано в виде (1.1.3). В общем виде выражение (1.1.3) содержит три члена, но не выписанный здесь третий член имеет достаточно странный вид и, как правило, не встречается в физических задачах *.

Упражнение. Пусть X — число очков, полученных при подбрасывании игральной кости. Определите множество возможных значений и распределение вероятностей. Тот же вопрос — для подбрасывания двух игральных костей.

* В [2, p. 143] первый член в выражении (1.1.3) назван «атомическим распределением».

Упражнение. Подбрасываем монету N раз. Докажите, что вероятность выпадения «орла» точно n раз составляет

$$p_n = 2^{-N} \binom{N}{n} \qquad (n = 0,\ 1,\ 2,\ \ldots,\ N) \tag{1.1.4}$$

(«биномиальное распределение»). Если выпадение «орла» приводит к выигрышу одного пенни, а «решки» — к проигрышу одного пенни, найдите распределение вероятности суммарного выигрыша.

Упражнение. Пусть X составлено из трех компонент скорости молекулы газа. Найдите множество возможных значений и распределение вероятностей.

Упражнение. Электрон свободно движется через кристалл объемом Ω или может быть захвачен одним из некоторого количества точечных центров. Каково распределение вероятностей его координат $\mathbf{r}$?

Упражнение. Два объема V_1, V_2 связаны друг с другом отверстием и содержат N невзаимодействующих молекул. Покажите, что вероятность найти n молекул в объеме V_1 есть

$$p_n = (1+\gamma)^{-N} \binom{N}{n} \gamma^n, \tag{1.1.5}$$

где $\gamma = V_1/V_2$ (*обобщенное биномиальное распределение, или распределение Бернулли*).

Замечание. Много других упражнений можно найти в учебниках по элементарной теории вероятностей, например в кн.: J. R. Gray, *Probability* (Oliver and Boyd, Edinburgh, 1967).

Уточнение. В качестве альтернативного описания распределения вероятностей (в одномерном случае) вместо $P(x)$ часто используется функция $\mathbf{P}(x)$, определенная как полная вероятность того, что X принимает любое значение $\leqslant x$. Тогда

$$\mathbf{P}(x) = \int_{-\infty}^{x+0} P(x')\,\mathrm{d}x',$$

где верхний предел интегрирования показывает, что, если P имеет дельта-пик в точке x, он должен быть включен в интеграл *. Математики называют $\mathbf{P}$ *функцией распределения вероятностей* и предпочитают ее *плотности вероятности* P, так как она не содержит дельта-пиков, имеет более простое поведение при преобразовании x, а также в силу привычки. Физики называют $\mathbf{P}$ *кумулятивной функцией распределения*, но предпочитают ей P, потому что ее величина в точке x определена самим значением вероятности в x; кроме того, во многих приложениях P оказывается более простой функцией; еще одна причина состоит в том, что такой подход более тесно связан с устоявшимся описанием вероятности на дискретных множествах состояний и немалое значение имеют просто привычки. В частности, в многомерных распределениях, таких, как максвелловское распределение скоростей, $\mathbf{P}$ довольно неудобна. Далее повсюду мы будем использовать плотность вероятности $P(x)$ и не будем бояться называть ее распределением вероятности или просто вероятностью.

Более общее и абстрактное рассмотрение дается аксиоматической теорией вероятностей **. Ось x заменяется множеством S, интервалы $\mathrm{d}x$ — подмножествами $A \subset S$, принадлежащими к соответственно определенному семейству

---

* Это, конечно произвольное условие; можно было бы определить $\mathbf{P}(x)$ как вероятность того, что X принимает значение меньшее, чем x.

** A. Kolmogoroff. Grundbergriffe der Wahrscheinlich heitsrechnung, Ergebn. Mathem. Grenzgeb. 2, no. 3 (Springer, Berlin, 19[illegible])-Foundations of the Theory of Probability/Chelsea Press, New York, 1950). Или любой учебник с большим математическим уклоном, например, [p. 110] или M. Loeve. Probability Theory I and II (Springer, New York, 1977/78).

подмножеств. Распределение вероятностей ставит в соответствие неотрицательное число $\mathbf{P}(A)$ каждому A семейства, причем $\mathbf{P}(S)=1$, и если A и B не пересекаются, то

$$\mathbf{P}(A+B)=\mathbf{P}(A)+\mathbf{P}(B).$$

Такую функцию множества называют *вероятностной мерой*. Стохастическая переменная ставит в соответствие подмножествам A множество чисел $f(A)$. В соответствии с нашей программой мы не будем использовать этот подход, а будем пользоваться более конкретным языком.

Упражнение. Покажите, что $\mathbf{P}(x)$ должна быть монотонной неубывающей функцией с $\mathbf{P}(-\infty)=0$ и $\mathbf{P}(\infty)=1$. Как это свойство переносится на функцию $\mathbf{P}(A)$ в последнем равенстве?

Упражнение. В стране с несколькими политическими партиями проводится опрос общественного мнения. Какого объема нужно взять выборку, чтобы быть вполне уверенным, что партия, составляющая 5%, оказалась бы в ней с представительством между 4,5 и 5,5%?

Упражнение. Томас Янг заметил, что если два разных языка содержат одинаковые слова, обозначающие одно и то же понятие, то отсюда еще нельзя сделать вывода, что языки связаны, так как это может быть простым совпадением *. В связи с этим он решил следующую «задачу о случайной встрече», или «задачу о совпадениях»: какова вероятность того, что случайная перестановка предметов не оставит ни одного предмета на месте? Естественно положить, что каждая перестановка имеет вероятность $n!^{-1}$. Покажите, что искомая вероятность p как функция n подчиняется рекуррентному соотношению

$$np(n)-(n-1)\,p(n-1)=p(n-2).$$

Найдите $p(n)$ и покажите, что $p(n)\to e^{-1}$ когда $n\to\infty$.

1.2. СРЕДНИЕ

Множество состояний и распределение вероятностей совместно полностью определяют стохастическую переменную, однако часто используют «некоторые дополнительные понятия». *Среднее* (или *ожидаемое*) *значение* любой функции $f(X)$, определенной на том же пространстве состояний, дается выражением

$$\langle f(X)\rangle=\int f(x)\,P(x)\,\mathrm{d}x;$$

в частности, $\langle X^m\rangle\equiv\mu_m$ называют *m-м моментом* X, а μ_1 — *средним*. Величину

$$\sigma^2=\langle(X-\langle X\rangle)^2\rangle=\mu_2-\mu_1^2 \qquad (1.2.1)$$

называют *дисперсией*, она является квадратом *стандартного отклонения* σ.

Не все распределения вероятностей имеют конечную дисперсию: контрпримером служит *распределение Лоренца* (или *распределение Коши*)

$$P(x)=\frac{1}{\pi}\,\frac{\gamma}{(x-a)^2+\gamma^2} \qquad (-\infty<x<\infty). \qquad (1.2.2)$$

---

* Phylos. Trans. Roy. Soc. (London, 1819), p 70; M. G. Kendall. Biometrika, **55**, 249 (1968).

Упражнение. Найдите моменты «прямоугольного» распределения, определенного выражением

$$P(x)=0 \text{ при } |x|>a;$$
$$P(x)=(2a)^{-1} \text{ при } |x|<a. \tag{1.2.3}$$

Упражнение. Распределение Гаусса определено выражением (ср. § 1.6)

$$P(x)=(2\pi)^{-\frac{1}{2}}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}x^2} \qquad (-\infty<x<\infty). \tag{1.2.4}$$

Покажите, что $\mu_{n+1}=0$ и

$$\mu_{2n}=(2n-1)!!=(2n-1)(2n-3)(2n-5)\ldots 1.$$

Упражнение. Постройте распределение, у которого существуют моменты μ_n вплоть до заданного порядка n, но не выше.

Упражнение. Из (1.2.1) можно вывести неравенство $\mu_2\geqslant\mu_1^2$. Аналогично, из очевидного факта $\langle|\lambda_0+\lambda_1X+\lambda_2X^2|^2\rangle\geqslant 0$ для всех λ_0, λ_1, λ_2 докажите неравенство

$$\begin{vmatrix} 1 & \mu_1 & \mu_2 \\ \mu_1 & \mu_2 & \mu_3 \\ \mu_2 & \mu_3 & \mu_4 \end{vmatrix}\geqslant 0.$$

Найдите аналогичные неравенства для высших моментов *.

Упражнение. Убедитесь, что требование (1.1.1) можно заменить условием $\int f(x)P(x)\,\mathrm{d}x\geqslant 0$ для любой неотрицательной непрерывной функции f, которая равна нулю вне конечного интервала. Это условие относится также к случаю (1.1.3) и исключает появление производных от дельта-функций в P.

Упражнение. Покажите, что для каждого $n=1, 2, 3$ функция

$$P(x)=n\frac{\mathrm{e}^{-x}}{x}I_n(x),$$

представляющая плотность распределения вероятностей на $0<x<\infty$, не имеет среднего (здесь через I_n обозначена модифицированная функция Бесселя).

Характеристическая функция стохастической переменной X, у которой областью возможных значений является множество действительных чисел или его подмножество, определяется выражением

$$G(k)=\langle\mathrm{e}^{\mathrm{i}kX}\rangle=\int_I \mathrm{e}^{\mathrm{i}kX}P(x)\,\mathrm{d}x. \tag{1.2.5}$$

Характеристическая функция определена для всех действительных k и обладает свойствами

$$G(0)=1,\ |G(k)|\leqslant 1. \tag{1.2.6}$$

Она также является *производящей функцией моментов* в том смысле, что коэффициенты ее разложения в ряд Тейлора по k являются моментами:

$$G(k)=\sum_{m=0}^{\infty}\frac{(\mathrm{i}k)^m}{m!}\mu_m. \tag{1.2.7}$$

---

* J. A. Shohat and J. D. Tamarkin. The Problem of Moments (American Mathematical Society, New York, 1943).

Это предполагает, что производные от $G(k)$ при $k=0$ существуют вплоть до тех значений m, что и сами моменты. Та же самая функция служит производящей функцией *кумулянтов* $\varkappa_m$, которые определены выражением

$$\log G(k) = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(ik)^m}{m!} \varkappa_m. \tag{1.2.8}$$

Они являются комбинациями моментов, т. е.

$$\begin{aligned} \varkappa_1 &= \mu_1; \\ \varkappa_2 &= \mu_2 - \mu_1^2 = \sigma^2; \\ \varkappa_3 &= \mu_3 - 3\mu_2\mu_1 + 2\mu_1^3; \\ \varkappa_4 &= \mu_4 - 4\mu_3\mu_1 - 3\mu_2^2 + 12\mu_2\mu_1^2 - 6\mu_1^4. \end{aligned} \tag{1.2.9}$$

Упражнение. Вычислите характеристическую функцию прямоугольного распределения (1.2.3) и найдите таким путем его моменты.

Упражнение. Покажите, что для распределения Гаусса (1.2.4) все кумулянты, кроме второго, равны нулю. Найдите наиболее общее распределение, обладающее таким свойством.

Упражнение. *Распределение Пуассона* на множестве натуральных чисел $n=0$, 1, 2, ... определено выражением

$$p_n = \frac{a^n}{n!} e^{-a}. \tag{1.2.10}$$

Найдите его кумулянты *.

Упражнение. Перейдите в выражении (1.1.5) к пределу $V_2 \to \infty$, $N \to \infty$, $N/V_2 = \rho = \text{const}$. В результате должно получиться выражение (1.2.10) с $a = \rho V_1$. Таким образом, число молекул в малом объеме, связанном с бесконечным резервуаром, распределено по Пуассону.

Упражнение. Вычислите характеристическую функцию для распределения Лоренца (1.2.2). Как с ее помощью можно показать, что моменты этого распределения не существуют?

Упражнение. Найдите распределение и его моменты, соответствующие характеристической функции $G(k) = \cos ak$.

Упражнение. Докажите, что характеристическая функция любого распределения вероятностей равномерно непрерывна на действительной оси k.

Упражнение. Нет причин, из-за которых характеристическая функция должна быть положительной для всех k. Почему это обстоятельство не ограничивает справедливости определения кумулянтов (1.2.8)?

Из уравнения (1.2.5) следует, что $G(k)$ является Фурье-образом от функции $\overline{P}(x)$, которая совпадает с $P(x)$ внутри интервала I и равна нулю вне его. Тогда

$$\overline{P}(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} G(k) e^{-ikx} dk.$$

При нормальном обращении небольшая разница между P и $\overline{P}$ может не проявиться, но для прояснения ситуации сделаем следующее примечание.

---

* Выражение для моментов дано C. S. Kelly. Phys. Rev., **B 20**, 3221 (1979).

Предположим, что x принимает только целые значения $n = \ldots$ $\ldots, -2, -1, 0, 1, 2, \ldots$ с вероятностями p_n. Для того чтобы построить характеристическую функцию, нужно записать это дискретное распределение как распределение на всех действительных числах:

$$\overline{P}(x) = \sum_n p_n \delta(x - n). \tag{1.2.11}$$

Тогда общее определение (1.2.5) дает

$$G(k) = \sum_n p_n e^{ikn};$$

$G(k)$ является периодической функцией k, а ее Фурье-образ воспроизводит, конечно, выражение (1.2.11). Переменная k изменяется в интервале $(-\infty, +\infty)$. Добавим однако, что сама вероятность p_n получается выполнением преобразования Фурье по одному периоду:

$$p_n = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} G(k) e^{-ikr} dk. \tag{1.2.12}$$

Любое распределение с множеством возможных значений, состоящим из точек

$$na \ (a > 0;\ n = \ldots, -2, -1, 0, 1, 2, \ldots), \tag{1.2.13}$$

называют *решеточным распределением*. Для таких распределений $|G(k)|$ является периодической функцией с периодом $2\pi/a$, и, следовательно, она принимает максимальное значение, равное единице, не только при $k = 0$. Этот факт характеризует решеточные распределения; для всех других распределений неравенство (1.2.6) может быть сделано строгим *:

$$|G(k)| < 1, \quad k \neq 0. \tag{1.2.14}$$

В более общем случае можно задать вопрос: как отражается на свойствах функции G тот факт, что значения величины x содержатся в подмножестве I множества действительных чисел? Если I представляет собой $-a < x < a$, то известно, что $G(k)$ аналитична во всей комплексной k-плоскости и относится к «экспоненциальному типу» **. Если I является полуосью $x \geqslant 0$, функция $G(k)$ аналитична и ограничена в верхней полуплоскости. Однако полного ответа на поставленный вопрос в общем виде не существует, и это обстоятельство оказывается важным в некоторых задачах.

---

* Об этих и других свойствах характеристических функций см.: E. Lukacs Characteristic Functions (Griffin, London, 1960); P. A. P. Moran, An Introduction to prabability theory (Clarendon, Oxford, 1968).

** R. E. A. C. Paley and Wiener, Fourier Transforms in the Complex Domain (American Mathematical Society, New York, 1934).

Примечание. В практических вычислениях множитель i в (1.2.7) и (1.2.8) неудобен. Этого можно избежать, если положить $ik=s$ и использовать характеристическую функцию $\langle e^{sX}\rangle$; надо, однако, иметь в виду, что ее существование гарантировано только для чисто мнимых s. Когда X принимает только положительные значения, использование функции $\langle e^{-sX}\rangle$, существующей в правой полуплоскости комплексной s-плоскости, имеет некоторые преимущества. Если X принимает только целые значения, удобно использовать *производящую функцию вероятности* $F(z)=\langle z^X\rangle$, которая однозначно определена для всех z на единичной окружности $|z|=1$ и будет использована в гл. 6. Когда X принимает только неотрицательные целые значения, $F(z)$ также определена и аналитична внутри этого круга.

Упражнение. В действительности наиболее общее решеточное распределение определяется не множеством возможных значений (1.2.13), а множеством $na+b$. Пользуясь этим определением докажите, что (1.2.14) остается в силе тогда и только тогда, когда $P(x)$ не является решеточным распределением.

Упражнение. Возьмите любые r действительных чисел $k_1, k_2, \ldots, k_r$ и рассмотрите $r\times r$-матрицу, у которой элементом с индексами i, j служит $G(k_i-k_j)$. Докажите, что эта матрица нормально положительно определена, но может быть полуопределенной для некоторых специальных распределений. Функции G, обладающие этим свойством для всех множеств $\{k\}$, называют положительно определенными или положительного типа.

Упражнение. Когда X принимает значения только 0, 1, 2, ..., *факториальные моменты* Φ_m можно определить следующим образом:

$$\Phi_0=1,$$
$$\Phi_m=\langle X(X-1)(X-2)\ldots(X-m+1)\rangle (m\geqslant 1). \tag{1.2.15}$$

Покажите, что все они также генерируются функцией F, а именно;

$$F(1-x)=\sum_{m=0}^{\infty}\frac{(-x)^m}{m!}\Phi_m. \tag{1.2.16}$$

Упражнение. *Факториальные кумулянты* θ_m определены выражением

$$\log F(1-x)=\sum_{m=1}^{\infty}\frac{(-x)^m}{m!}\theta_m. \tag{1.2.17}$$

Выразите несколько первых из них через моменты. Покажите, что у распределения Пуассона (1.2.10) все факториальные моменты, кроме θ_1, равны нулю.

Упражнение. Найдите факториальные моменты и кумулянты для распределения (1.1.5).

Упражнение. Гармонический осциллятор с уровнями $nh\nu$ ($n=0, 1, 2, \ldots$) в термодинамическом равновесии имеет вероятность находиться на уровне n:

$$p_n=(1-\gamma)\gamma^n, \tag{1.2.18}$$

где $\gamma=\exp[-h\nu/kT)]$. Эту функцию называют геометрическим распределением или распределением Паскаля. Найдите факториальные моменты и кумулянты такого распределения и покажите, что его дисперсия больше, чем у распределения Пуассона с тем же самым средним.

Упражнение. Hohlraum — это набор большого числа осцилляторов с различными частотами. Предположим, что имеется Z осцилляторов в интервале частот $\Delta\nu$, много меньшем, чем kT/h. Вероятность найти n квантов в этой группе осцилляторов дается «отрицательным биномиальным распределением» *

$$p_n=(1-\gamma)^Z\frac{(Z+n-1)!}{(Z-1)!\,n!}\gamma^n \tag{1.2.19}$$

---

* См., например: D. der Haar, Elements of Statistical Mechanics (Holt, Kinehart, and Winston, New York, 1954), p. 74.

(для $Z=1$ это выражение сводится, конечно, к (1.2.18)). Выведите из (1.2.19) аналогичную формулу для равновесных флуктуаций в Бозе-газе.

Упражнение. Обычные кумулянты удобно использовать, если приходится иметь дело с распределением Гаусса, а факториальные кумулянты — с распределением Пуассона. Другие кумулянты можно определить таким образом, чтобы они были удобны в работе с другими распределениями. Например, определите π_m следующим образом:

$$\frac{1}{F(1-x)}=1-\sum_{m=1}^{\infty}\frac{(-x)^m}{m!}\pi_m$$

— и покажите, что все π_m для $m>1$ равны нулю тогда и только тогда, когда распределение имеет вид (1.2.18).

1.3. РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ДЛЯ МНОГИХ ПЕРЕМЕННЫХ

Пусть X — случайная переменная, имеющая r компонент X_1, X_2, ..., X_r. Ее плотность вероятности $P_r(x_1, x_2, \ldots, x_r)$ называют также *совместным распределением вероятности* r переменных X_1, X_2, ..., X_r. Возьмем подмножество $s<r$ переменных $X_1, X_2, \ldots, X_s$. Вероятность того, что эти переменные имеют значения, лежащие между x_1, $x_1+\mathrm{d}x_1$, x_2, $x_2+\mathrm{d}x_2$ и т. д., независимо от значений остальных переменных $X_{s+1}, \ldots, X_r$ составляет

$$P_s(x_1, \ldots, x_s)=\int P_r(x_1, \ldots, x_s, x_{s+1}, \ldots, x_r)\,\mathrm{d}x_{s+1}\ldots\mathrm{d}x_r. \qquad (1.3.1)$$

Это так называемое *частное распределение* для подмножества.

С другой стороны, переменным $X_{s+1}, \ldots, X_r$ можно приписать фиксированные значения и рассматривать совместную вероятность распределения остальных переменных $X_1, \ldots, X_s$. Это называется *условной вероятностью* переменных $X_1, \ldots, X_s$ при условии, что остальные переменные $X_{s+1}, \ldots, X_r$ имеют заданные значения $x_{s+1}, \ldots, x_r$. Условную вероятность будем обозначать следующим образом *:

$$P_{s\,|\,r-s}(x_1, \ldots, x_s\,|\,x_{s+1}, \ldots, x_r). \qquad (1.3.2)$$

Понятие условной вероятности можно пояснить на физическом языке следующим образом: из ансамбля, представляющего распределение в r-мерном пространстве, можно выделить подансамбль выборок, в которых $X_{s+1}=x_{s+1}, \ldots, X_r=x_2$, тогда распределение вероятности в таком подансамбле есть (1.3.2).

Полное совместное распределение P_r равно частному распределению вероятности того, что переменные $X_{s+1}, \ldots, X_r$ принимают значения $x_{s+1}, \ldots, x_r$, умноженному на условную вероятность того, что это в самом деле так, когда остальные переменные принимают

---

* Некоторые авторы используют обратное обозначение, записывая заданные переменные в первой части скобки.

значения $x_1, \ldots, x_s$:

$$P_r(x_1, \ldots, x_r) = P_{r-s}(x_{s+1}, \ldots, x_r) P_{s|r-s}(x_1, \ldots, x_s | x_{s+1}, \ldots, x_r).$$

Это так называемое *правило Байеса*. Его обычно записывают в виде

$$P_{s|r-s}(x_1, \ldots, x_s | x_{s+1}, \ldots, x_r) = \frac{P_r(x_1, \ldots, x_r)}{P_{r-s}(x_{s+1}, \ldots, x_r)}. \quad (1.3.3)$$

Предположим, что r переменных можно разбить на два множества $(X_1, \ldots, X_s)$ и $(X_{s+1}, \ldots, X_r)$, так что P_r факторизуется:

$$P_r(x_1 \ldots, x_r) = P_s(x_1, \ldots, x_s) P_{r-s}(x_{s+1}, \ldots, x_r).$$

Тогда эти два множества называют *статистически независимыми* друг от друга. В этом случае множитель P_s является *частной плотностью вероятности* переменных $X_1, X_2, \ldots, X_s$. В то же время он является *условной плотностью вероятности*

$$P_{s|r-s}(x_1, \ldots, x_s | x_{s+1}, \ldots, x_r) = P_s(x_1, \ldots, x_s).$$

Это означает, что задание величин $X_1, \ldots, X_s$ не влияет на распределение переменных $X_{s+1}, \ldots, X_r$, и наоборот.

Замечание. Нетрудно убедиться, что если знаменатель в выражении (1.3.3) обращается в нуль, числитель также обращается в нуль. Для таких значений $x_{s+1}, \ldots, x_r$ левая часть равенства не определена. Таким образом, условная вероятность не определена, если условие не может быть выполнено.

Упражнение. Докажите и поясните нормировку условной вероятности

$$\int P_{s|r-s}(x_1, \ldots, x_s | x_{s+1}, \ldots, x_r) = P_s(x_1, \ldots, x_s) = 1. \quad (1.3.4)$$

Упражнение. Какой вид имеет совместная плотность вероятности, если все переменные взаимно независимы?

Упражнение. Максвелловский вывод распределения по скоростям в газе основан на предположениях, что распределение может зависеть только от модуля скорости $|v|$ и декартовы компоненты скорости статистически независимы. Покажите, что эти предположения приводят к закону Максвелла.

Упражнение. Вычислите частную и условную вероятности для двумерного кольцеобразного распределения:

$$P_2(x_1, x_2) = \pi^{-1} \delta(x_1^2 + x_2^2 - a^2).$$

Упражнение. Обобщите это распределение на случай r переменных, равномерно распределенных на гиперсфере в r измерениях, т. е. микроканоническое распределение идеального газа. Найдите частное распределение для x_1. Покажите, что оно становится гауссовым в пределе $r \to \infty$ при условии, что радиус сферы возрастает пропорционально $\sqrt{r}$.

Упражнение. При бросании двух игральных костей выпало 9 очков. Найдите распределение вероятности очков, выпавших на первой кости при заданной сумме. Почему этот результат не противоречит очевидному факту независимости игральных костей?

Упражнение. Пусть $P(t)$ — распределение вероятности продолжительности жизни в популяции. Покажите, что условная вероятность дожить до возраста τ для отдельного представителя популяции дается выражением

$$P(t | \tau) = P(t) \Big/ \int_\tau^\infty P(t')\, dt'. \quad (1.3.5)$$

Отметим, что в случае $P(t)=\gamma e^{-\gamma t}$ имеем $P(t\mid\tau)=P(t-\tau)$: вероятность выживания не зависит от возраста. Покажите, что это единственный случай, когда это так.

Моменты многомерного распределения имеют вид

$$\langle X_1^{m_1}X_2^{m_2}\ldots X_r^{m_r}\rangle=\int x_1^{m_1}x_2^{m_2}\ldots x_r^{m_r}P(x_1,\ x_2,\ \ldots,\ x_r)\,dx_1\,dx_2\ldots dx_r$$

(их можно было бы обозначать $\mu_{m_1,\,m_2,\,\ldots,\,m_r}$, но это обозначение становится неудобным в случае многих переменных). Характеристическая функция в этом случае зависит от r вспомогательных переменных:

$$G(k_1,\ k_2,\ \ldots,\ k_r)=\langle e^{i(k_1X_1+k_2X_2+\ldots+k_rX_r)}\rangle.$$

Ее разложение в ряд Тейлора по переменным k генерирует моменты

$$G(k_1,\ k_2,\ \ldots,\ k_r)=\sum_0^\infty\frac{(ik_1)^{m_1}(ik_2)^{m_2}\ldots(ik_r)^{m_r}}{m_1!\,m_2!\ldots m_r!}\langle X_1^{m_1}X_2^{m_2}\ldots X_r^{m_r}\rangle. \quad (1.3.6)$$

Кумулянты теперь будем обозначать двойными угловыми скобками, определив их следующим образом:

$$\log G(k_1,\ k_2,\ \ldots,\ k_r)=\sum_0^\infty{}'\frac{(ik_1)^{m_1}(ik_2)^{m_2}\ldots(ik_r)^{m_r}}{m_1!\,m_2!\ldots m_r!}\langle\langle X_1^{m_1}X_2^{m_2}\ldots X_r^{m_r}\rangle\rangle, \quad (1.3.7)$$

где штрих означает отсутствие члена со всеми m, одновременно равными нулю (обозначение с двойными скобками не является общепринятым, но удобно в случае нескольких переменных). Вторые моменты можно объединить в $r\times r$-матрицу $\langle X_iX_j\rangle$. Более важным понятием является *матрица ковариаций*

$$\langle\langle X_iX_j\rangle\rangle=\langle(X_i-\langle X_i\rangle)(X_j-\langle X_j\rangle)=\langle X_iX_j\rangle-\langle X_i\rangle\langle X_j\rangle. \quad (1.3.8)$$

Ее диагональные элементы являются дисперсиями, а недиагональные элементы называют *ковариацией* или *смешанными моментами второго порядка*. Когда последние нормированы, их называют *коэффициентами корреляции*:

$$\rho_{ij}=\frac{\langle\langle X_iX_j\rangle\rangle}{\sqrt{\langle\langle X_i^2\rangle\rangle\langle\langle X_j^2\rangle\rangle}}=\frac{\langle X_iX_j\rangle-\langle X_i\rangle\langle X_j\rangle}{\sqrt{(\langle X_i^2\rangle-\langle X_i\rangle^2)(\langle X_j^2\rangle-\langle X_j\rangle^2)}}. \quad (1.3.9)$$

Рассмотрим случай, когда $r=2$; статистическая независимость выражается одним из следующих трех критериев:

1) все моменты факторизуются: $\langle X_1^{m_1}X_2^{m_2}\rangle=\langle X_1^{m_1}\rangle\langle X_2^{m_2}\rangle$;
2) характеристическая функция факторизуется:

$$G(k_1,\ k_2)=G_1(k_1)\,G_2(k_2); \quad (1.3.10)$$

3) кумулянты $\langle\langle X_1^{m_1} X_2^{m_2}\rangle\rangle$ обращаются в нуль, когда обе величины m_1 и m_2 отличны от нуля.

Переменные X_1, X_2 называют *некоррелированными*, когда известно, что их ковариация равна нулю. Это условие является более слабым, чем статистическая независимость. Причина, по которой такое свойство имеет специальное название, состоит в том, что первый и второй моменты достаточно хорошо описывают многие конкретные случаи.

Упражнение. Рассмотрите частное распределение некоторого подмножества всех переменных. Выразите его моменты через моменты полного распределения, а его характеристическую функцию — через полную характеристическую функцию.

Упражнение. Докажите упомянутые выше три критерия статистической независимости и обобщите их на случай r переменных.

Упражнение. Докажите, что $-1 \leqslant \rho_{ij} \leqslant 1$. Докажите, что если ρ_{ij} принимает значения 1 или -1, переменные X_i, X_j связаны линейным соотношением.

Упражнение. Покажите, что для любого множества $X_1, \ldots, X_r$ можно найти r линейных комбинаций

$$Y_i = \sum_{j=1}^{r} a_{ij} X_j \qquad (i = 1, \ldots, r)$$

таких, что новые переменные Y взаимно некоррелированы (процедура ортогонализации И. Шмидта).

Упражнение. Покажите, что каждый кумулянт $\langle\langle X_1^{m_1} X_2^{m_2} \ldots X_r^{m_r}\rangle\rangle$ является «изобарической» комбинацией моментов, т. е. линейной комбинацией произведений моментов, такой, что сумма показателей в каждом произведении одна и та же, а именно $m_1 + m_2 + \ldots + m_r$.

Упражнение. Докажите, что «независимость» подразумевает «некоррелированность», и постройте пример, показывающий, что обратное утверждение неверно.

Упражнение. Найдите моменты и кумулянты двумерного распределения Гаусса

$$P(x, y) = \text{const} \cdot e^{-\frac{1}{2}(ax^2 + 2bxy + cy^2)} \qquad (ac - b^2 > 0,\ a > 0).$$

Покажите, что для этого распределения «некоррелированность» и «независимость» эквивалентны.

Упражнение. Молекула может занимать различные уровни n_1, n_2, ... с вероятностями p_1, p_2, ... Предположим, что имеется N таких молекул. Вероятность найти следующие одним за другим уровни, занятые N_1, N_2, ... молекулами, дается мультиноминальным распределением

$$P(N_1, N_2, \ldots) = \frac{N!}{N_1!\, N_2! \ldots} p_1^{N_1} p_2^{N_1} \ldots . \tag{1.3.11}$$

Упражнение. Коэффициенты корреляции для трех переменных удовлетворяют условию

$$(1 + \rho_{12})(1 + \rho_{13})(1 + \rho_{23}) \geqslant \frac{1}{2}(1 + \rho_{12} + \rho_{13} + \rho_{23})^2.$$

Упражнение. Если распределение получено из серии наблюдений, оно часто имеет вид одного горба. Первый и второй кумулянты — это грубые показатели его положения и ширины. Дальнейшая информация о его форме содержится в его «асимметрии», определенной соотношением $\gamma_3 = \varkappa_3/\varkappa_2^{3/2}$ и его

«эксцессом» $\gamma_4 = \varkappa_4/\varkappa_2^2$. Докажите *, что

$$\gamma_3^2 \leqslant \gamma_4 + 2.$$

Упражнение. *Многомерные факториальные моменты*, обозначенные фигурными скобками, определены очевидным обобщением выражения (1.2.16):

$$\left\langle \prod_j (1-z_j)^{X_j} \right\rangle = \sum_{\{m\}} \frac{(-z_1)^{m_1}(-z_2)^{m_2}}{m_1!\, m_2! \ldots} \{X_1^{m_1} X_2^{m_2}\}. \qquad (1.3.12)$$

Многомерные факториальные кумулянты, обозначенные квадратными скобками, определяются выражением

$$\log \left\langle \prod_j (1-z_j)^{X_j} \right\rangle = \sum_{\{m\}}{}' \frac{(-z_1)^{m_1}(-z_2)^{m_2} \ldots}{m_1!\, m_2! \ldots} [X_1^{m_1} X_2^{m_2} \ldots]. \qquad (1.3.13)$$

Выразите несколько низших из них через моменты, в частности

$$[X_i X_j] = \langle X_i X_j \rangle - \langle X_i \rangle \langle X_j \rangle. \qquad (1.3.14)$$

Упражнение. Факториальный кумулянт суммы двух статистически независимых переменных является суммой их факториальных кумулянтов. Факториальный кумулянт, включающий два взаимно независимых набора переменных, равен нулю.

1.4. СЛОЖЕНИЕ СТОХАСТИЧЕСКИХ ПЕРЕМЕННЫХ

Пусть X_1, X_2 — две переменные с совместным распределением $P_X(x_1, x_2)$. Вероятность того, что $Y = X_1 + X_2$ принимает значение между y и $y + \Delta y$, составляет

$$P_Y(y)\,\Delta y = \iint\limits_{y < x_1 + x_2 < y + \Delta y} P_X(x_1, x_2)\, dx_1\, dx_2.$$

Отсюда следует

$$P_Y(y) = \iint \delta(x_1 + x_2 - y)\, P_X(x_1, x_2)\, dx_1\, dx_2 = \int P_X(x_1, y - x_1)\, dx_1. \qquad (1.4.1)$$

Если X_1, X_2 независимы, это соотношение превращается в следующее:

$$P_Y(y) = \int P_{X_1}(x_1)\, P_{X_2}(y - x_1)\, dx_1. \qquad (1.4.2)$$

Таким образом, *плотность вероятности суммы двух независимых переменных является сверткой их отдельных плотностей вероятности*. Легко вывести следующие три правила, касающиеся моментов. Первое универсальное тождество

$$\langle Y \rangle = \langle X_1 \rangle + \langle X_2 \rangle$$

утверждает: *среднее суммы равно сумме средних*, при этом не имеет значения, являются ли X_1, X_2 независимыми или нет. Второе правило состоит в том, что *если X_1, X_2 некоррелированы, то*

$$\sigma_Y^2 = \sigma_{X_1}^2 + \sigma_{X_2}^2, \qquad (1.4.3а)$$

* Другие неравенства такого типа даны А. А. Дубковым и А. Н. Малаховым: Radiophys., Quantum. Electron. (USA) 19, 833 (1977).

или в наших обозначениях

$$\langle\langle(X_1+X_2)^2\rangle\rangle=\langle\langle X_1^2\rangle\rangle+\langle\langle X_2^2\rangle\rangle. \qquad (1.4.3б)$$

Для переменной Y характеристическая функция

$$G_Y(k)=G_{X_1X_2}(k,\ k).$$

Если X_1, X_2 независимы, правая часть факторизуется в соответствии с (1.3.10), так что

$$G_Y(k)=G_{X_1}(k)\,G_{X_2}(k). \qquad (1.4.4)$$

Это третье правило: *для независимых переменных характеристическая функция суммы является произведением их отдельных характеристических функций.*

Примечание. Можно было бы выдвинуть следующее логическое возражение. В § 1.1 стохастические переменные были определены как объекты, состоящие из множества возможных значений и распределения вероятностей. Алгебраические операции с такими объектами, следовательно, должны быть скорее определены, чем выведены. Значит, логичнее было бы сложение, обсуждаемое в этом параграфе, и преобразования, рассматриваемые в следующем разделе, рассматривать как определения, конечно, если будет показано, что свойства этих операций, очевидные для нас, действительно являются следствиями определений.

Усреднение является особым видом операции, поскольку оно связывает стохастическую переменную с нестохастическим, или «регулярным», числом. Оно может быть рассмотрено и как проецирование, осуществляемое следующим образом. Множество всех стохастических переменных содержит подмножество переменных, плотность вероятности которых есть дельта-пик. Это подмножество изоморфно «регулярным» числам из множества возможных значений и может быть отождествлено с ними. Тогда операция усреднения является проецированием полного пространства стохастических переменных на это подмножество. Этот факт будет использован в (14.4.6).

Упражнение. Докажите свойства (1.4.3) и покажите на примере, что условие некоррелированности переменных X_1, X_2 является необходимым.

Упражнение. Обобщите эти утверждения на сложение более чем двух переменных.

Упражнение. Сформулируйте правила для суммы двух или большего числа векторных переменных (дисперсию нужно заменить матрицей ковариаций).

Упражнение. Для независимых переменных кумулянты суммы равны сумме кумулянтов. Соотношение (1.4.3) является частным случаем этого правила.

Упражнение. Все три приведенные выше правила используют как само собой разумеющееся в кинетической теории газов. Приведите примеры.

Упражнение. В пространстве стохастических переменных скалярное произведение можно определить как $\langle XY\rangle$. Докажите, используя это определение, что проецирование на среднее является эрмитовым оператором.

Упражнение. В пространстве действительных матриц X размером $N\times N$ функция

$$X\longrightarrow\langle X\rangle\equiv(\mathrm{Sp}\,MX)/(\mathrm{Sp}\,M),$$

где M — фиксированная матрица, является линейной проекцией X на действительные числа, эта функция отображает единичную матрицу на 1. Этих свойств достаточно для установления тождества

$$\langle e^X\rangle=\exp\left[\langle X\rangle+\frac{1}{2}\langle\langle X^2\rangle\rangle+\frac{1}{3!}\langle\langle X^3\rangle\rangle+\ldots\right].$$

Старый, но все еще поучительный пример — это дискретные по времени случайные блуждания. Пьяница движется вдоль прямой, делая

каждый следующий шаг либо влево, либо вправо с одинаковой вероятностью. Его возможные положения представляют собой целые числа $-\infty < n < \infty$. Требуется найти вероятность $p_n(r)$ его нахождения в положении n после r шагов с точкой старта в $n=0$. В § 4.5 мы будем трактовать этот пример как случайный процесс, здесь же рассмотрим его как задачу о сложении переменных.

Каждому шагу соответствует стохастическая переменная X_j ($j=1, 2, \ldots, r$), принимающая значения 1 и -1 с вероятностью 1/2 каждое. Положение после r шагов дается выражением

$$Y = X_1 + X_2 + \ldots + X_r.$$

Отсюда сразу находим $\langle Y \rangle = 0$, и так как шаги взаимно независимы, то

$$\langle Y^2 \rangle = r \langle X^2 \rangle = r. \tag{1.4.5}$$

Тот факт, что средний квадрат смещения пропорционален числу шагов, является типичным для процессов диффузионного типа. Это предполагает для смещения за единичное время

$$\left\langle \left(\frac{Y}{r} \right)^2 \right\rangle = \frac{1}{r} \to 0 \quad \text{при } r \to \infty.$$

Отсюда следует, что дисперсия средней скорости с увеличением времени стремится к нулю. Это отличает диффузионное рассасывание от распространения посредством свободно разлетающихся частиц или в виде волн.

Для того чтобы найти детальное распределение вероятности Y, используем характеристическую функцию

$$G_Y(k, r) = [G_X(k)]^r = \left[\frac{1}{2} e^{ik} + \frac{1}{2} e^{-ik} \right]^r. \tag{1.4.6}$$

Вероятность того, что Y принимает значение n, есть коэффициент при e^{ink}:

$$p_n(r) = \frac{1}{2^r} \binom{r}{(r-n)/2}. \tag{1.4.7}$$

Понятно, что биномиальные коэффициенты равны нулю, пока $(r-n)/2$ есть целое между 0 и r включительно.

Распределение (1.4.7) параметрически зависит от числа шагов r. Его асимптотическая форма для больших r представляет особый интерес, потому что она имеет простой вид, который, как будет видно в гл. 7, в значительной мере нечувствителен к деталям модели. В соответствии с (1.4.5) распределение становится очень широким с ростом r и, следовательно, покрывает много отдельных положений n. Тогда имеет смысл заменить дискретное n непрерывной переменной x и «размазать» p_n. Формально плотность вероят-

ности $P(x, r)$ мы вводим, полагая

$$P(x, r)\Delta x = \sum_{x < nr^{-1/2} < x+\Delta x} p_n(r).$$

Масштаб подбирают таким образом, чтобы сделать ширину постоянной. В результате отдельные шаги перенормируются множителем $r^{-1/2}$. Интервал Δx мал, но конечен, так что для больших r он содержит много положений, а именно $r^{1/2}\Delta x$. Используя формулу Стирлинга, находим

$$P(x, r)\Delta x \simeq \frac{1}{2} r^{1/2}\Delta x \frac{1}{2^r} \exp\left[r\log r - r + \frac{1}{2}\log 2\pi r - \frac{r-n}{2}\log\frac{r-n}{2} + \right.$$
$$\left. + \frac{r-n}{2} - \frac{1}{2}\log\pi(r-n) - \frac{r+n}{2}\log\frac{r+n}{2} + \frac{r+n}{2} - \frac{1}{2}\log\pi(r+n)\right].$$

Коэффициент 1/2 введен, потому что каждая вторая p_n равна нулю. Собирая члены требуемого порядка, получаем выражение

$$\lim_{r\to\infty} P(x, r) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}x^2}, \tag{1.4.8}$$

которое является распределением Гаусса (1.2.4).

Упражнение. Дайте чисто комбинаторный вывод выражения (1.4.7) путем подсчета числа последовательностей из r шагов, оканчивающихся на n.

Упражнение. Положив $k = ur^{-1/2}$, получите из (1.4.6) асимптотическую формулу (1.4.8).

Упражнение. При *асимметричных случайных блужданиях* на каждом шаге вероятность шага влево есть q и вероятность шага вправо $1-q$. Найдите $p_n(r)$ для этого случая.

Упражнение. Предположим, что на каждом шаге имеется вероятность q_ν сделать шаг длиной ν единиц ($\nu = \pm 1, \pm 2, \ldots$), а также вероятность q_0 остаться на месте. Найдите $p_n(r)$ для больших r.

Упражнение. Пусть имеется бесконечное множество $\{X_j\}$ независимых стохастических переменных с одинаковыми распределениями $P(x)$ и характеристической функцией $G(k)$. Пусть r есть случайное положительное целое число с распределением p_r и производящей функцией вероятности $f(z)$. Тогда $Y = X_1 + X_2 + \ldots + X_r$ есть случайная переменная. Покажите, что ее характеристическая функция есть $f(G(k))$. (Распределение Y называют «сложным распределением», см. [1, гл. XII].)

1.5. ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ПЕРЕМЕННЫХ

Пусть непрерывная однокомпонентная переменная X отображается на новую переменную Y с помощью соотношения

$$Y = f(X). \tag{1.5.1}$$

Хорошо знакомыми примерами служат переход к логарифмической шкале ($Y = \log X$) и преобразование от частот к длинам волн ($Y = 1/X$). Вообще говоря, области изменения Y и X могут отличаться друг от друга. Вероятность того, что Y принимает значения, лежащие

между y и $y+\Delta y$, дается выражением

$$P_Y(y)\,\Delta y = \int\limits_{y<f(x)<y+\Delta y} P_X(x)\,\mathrm{d}x.$$

Интеграл берется по всем интервалам области изменения X, в которых выполняется неравенство. Это же соотношение можно записать в следующем виде:

$$P_Y(y) = \int \delta\left[f(x)-y\right] P_X(x)\,\mathrm{d}x. \tag{1.5.2}$$

Отсюда для характеристической функции переменной Y выводим:

$$G_Y(K) = \langle \mathrm{e}^{ikf(X)} \rangle. \tag{1.5.3}$$

Эти выражения остаются справедливыми, если векторы $\mathbf{X}$ и $\mathbf{Y}$ имеют соответственно r и s компонент, причем s и r могут быть не равны. Типичный пример случая с $r=3$, $s=1$ — это преобразование распределения Максвелла для $X=(v_x, v_y, v_z)$ в распределение по энергиям $E={}^1/_2 m(v_x^2+v_y^2+v_z^2)$:

$$P(E) = \int \delta\left(\frac{1}{2}mv^2 - E\right)\left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2} \mathrm{e}^{-\frac{mv^2}{2kT}}\,\mathrm{d}v_x\,\mathrm{d}v_y\,\mathrm{d}v_z =$$

$$= 2\pi^{-1/2}(kT)^{-3/2}E^{1/2}\mathrm{e}^{-\frac{E}{kT}}$$

(«гамма-распределение», или «χ^2-распределение»).

В частном случае, когда только одно значение X соответствует каждому значению Y (и следовательно, $r=s$), можно обратить (1.5.1) и получить $X=g(Y)$. В этом случае преобразование плотности вероятности сводится к

$$P_Y(y) = P_X(x)\,J,$$

где J — *абсолютное значение* определителя Якоби $\mathrm{d}(x)/\mathrm{d}(y)$. Это соотношение можно запомнить в виде

$$P_Y(y)\,\mathrm{d}^r y = P_X(x)\,\mathrm{d}^r x,$$

при этом нужно позаботиться о выполнении условия единственности и иметь в виду, что может возникнуть необходимость изменить знак.

Примечание. Рассмотрим, в частности, группу линейных преобразований

$$Y = aX + b, \qquad a \neq 0 \tag{1.5.4}$$

Они преобразуют P_X в P_Y, но разница столь незначительна, что они часто рассматриваются как одно и то же распределение и имеют одинаковое название. Это преобразование можно использовать для приведения распределения к стандартному виду, например к распределению с нулевым средним значением и единичной дисперсией. В случае решеточного распределения преобразование (1.5.4) можно применять для того, чтобы совместить узлы решетки с целыми числами. Действительно, использование (1.5.4) для сведения распределения к простой форме столь тривиально, что оно часто делается неявно при постановке задачи или при выборе нуля и масштаба.

Упражнение. Выведите уравнения для сложения переменных как частный случай формул преобразования настоящего раздела.

Упражнение. Семейство гамма-распределений определено при помощи соотношения

$$P(x) = \frac{a^{\nu}}{\Gamma(\nu)} x^{\nu-1} e^{-ax} \quad (a > 0,\ \nu > 0,\ 0 < x < \infty). \tag{1.5.5}$$

Пусть $X_1, X_2, \ldots, X_r$ — независимые гауссовы переменные с нулевыми средними значениями и дисперсией σ^2. Докажите, что $Y = X_1^2 + X_2^2 + \ldots + X_r^2$ является гамма-распределением.

Упражнение. Предположим, что диаметры набора шаров распределены в соответствии с (1.5.5). Предположим, что все они имеют одинаковую форму, так что их объем $y = x^3$. Найдите распределение y, его среднее и дисперсию и сравните их с соответствующими свойствами x.

Упражнение. Пушка выстреливает ядро с начальной скоростью v и углом к горизонту θ. Обе переменные v и θ могут быть источником неопределенности, которая описывается гауссовым распределением для каждой переменной. Распределения центрированы соответственно в точках v_0 и θ_0 и столь остры, что нефизическими значениями, такими, как отрицательные v или θ, можно пренебречь. Каково распределение вероятности дальности полета пушечного ядра?

Упражнение. Как преобразование (1.5.4) влияет на кумулянты?

Упражнение. Множеством возможных значений X является интервал $(0, 2\pi)$, плотность вероятности постоянна в этой области. Найдите распределение $Y = \sin X$. Сделать то же самое, когда $P(x) = A + B \sin x$ $\left(\text{причем } |B| < A = \frac{1}{2\pi}\right)$.

Упражнение. Точка занимает с равной вероятностью любое место на окружности. Каково распределение ее азимутального угла по отношению к некоторой точке, смещенной из центра окружности?

Упражнение. Рассеивающий центр бомбардируется однородным пучком частиц. Налетающая частица с прицельным параметром отклоняется на угол $\theta(b)$. Найдите дифференциальное сечение рассеяния.

Уточнение. Вся теория вероятностей представляет собой не что иное, как преобразование переменных. Некоторые распределения вероятности должны быть априорно заданы на множестве элементарных событий; дальнейшая задача состоит в преобразовании их в распределения вероятностей для возможных исходов, каждый из которых соответствует набору элементарных событий. Когда бросают две игральные кости, имеется 36 элементарных событий, при этом предполагается, что они имеют равную вероятность. Задача состоит в нахождении вероятности различных возможных сумм очков путем подсчета числа элементарных событий, приводящих к набору каждой суммы.

Математика может только вывести вероятности исходов из заданных a priori распределений. В приложении к реальному миру сначала нужно решить, какие заданные a priori распределения правильно описывают данную ситуацию. В задачах об азартных играх или о шарах в урнах правильный выбор (или по крайней мере правильный выбор, который имеет в виду автор) обычно столь ясен, что его обычно даже не упоминают. Это привело к ошибочной точке зрения, что чистая математика способна указать вероятности действительных событий, которые должны произойти, что, в свою очередь, привело к появлению большого количества литературы полуфилософского характера *.

Одна из попыток избежать явного предположения об априорной вероятности представляет собой «принцип недостаточности причин», который утверж-

* В качестве обзора: Lucas J. R. The Concept of Probability (Clarendon, Oxford, 1970).

дает, что *два элементарных события имеют одну и ту же вероятность, если нет причин считать иначе*. Это в лучшем случае рабочая гипотеза: никакой философский принцип не подскажет, как идет игра — честно или краплеными картами. Этот принцип определенно не может лежать в основе квантовой статистики *.

Более того, этот принцип становится вообще неприменимым, когда область возможных состояний непрерывна (так называемая «геометрическая вероятность»). Любое интуитивное представление, что равные вероятности должны быть приписаны интервалам равной длины или равным объемам, зависит от выбора переменных. Поэтому такая интуитивная гипотеза лишена смысла, пока не определен выбор переменных. Обычно это можно сделать несколькими способами и иногда неясно, какой из них предпочтительнее. Равномерное распределение в пространстве скоростей — это не то же самое, что равномерное распределение по энергиям.

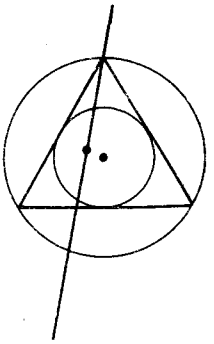

Рис. 1. Окружность Бертрана со случайной хордой

Опасность интуитивных представлений о равных вероятностях была красиво продемонстрирована Бертраном **. Возьмем фиксированную окружность единичного радиуса и нарисуем «случайным образом» прямую линию, пересекающую ее (рис. 1). Какова вероятность того, что хорда имеет длину больше, чем $\sqrt{3}$? (Значение $\sqrt{3}$ является длиной стороны равностороннего треугольника, вписанного в единичную окружность.)

Первый ответ. Возьмем две случайные прямые, проведенные через произвольно выбранную фиксированную точку P, принадлежащую окружности. Все они, кроме касательной (вероятность равна нулю), пересекают окружность. Для того чтобы хорда была длиннее, чем $\sqrt{3}$, она должна лежать внутри угла 60°, в то время как допустимы углы от 0 до 180°, следовательно, вероятность этого равна 1/3.

Второй ответ. Возьмем случайные прямые, перпендикулярные фиксированному диаметру. Длина хорды окажется больше $\sqrt{3}$, если точка пересечения принадлежит средней половине диаметра; тогда вероятность составит 1/2.

Третий ответ. Для того чтобы хорда была длиннее $\sqrt{3}$, ее центр должен лежать на расстоянии, меньшем 1/2 от центра. Площадь круга радиуса 1/2 составляет четверть площади исходного круга, тогда вероятность равна 1/4. Читатель может легко заметить, что каждое решение основано на различных предположениях о равных априорных вероятностях. Неопределенное выражение «случайным образом» не определяет априорной вероятности в достаточной мере для того, чтобы сделать выбор между решениями.

Использование метода наименьших квадратов для выделения информации из несовершенных наблюдений предполагает специфическое априорное распределение вероятности ошибок, а именно распределение Гаусса. То же самое предположение не может быть справедливым для всех переменных, которые могут быть использованы для измерения наблюдаемых величин (не более чем для одной переменной и тех переменных, которые связаны с ней линейными соотношениями). Метод наименьших квадратов, примененный к одним и тем же данным, записанным в частотной шкале и как функция длины волны, не дает одинаковых результатов. «Наилучшая оценка» яркости звезды зависит от того, применяется метод наименьших квадратов к звездной величине или к ее светимости, выраженной в энергетических единицах. Спасительным обстоятельством служит то, что при малых ошибках любое разумное преобразование

---

* Tolman R. C. The Principles of Statistical Mechanics (Clarendon, Oxford, 1938).

** Berntrand J. Calcul des probabilités (Gauthiers-Villars, Paris, 1889).

является практически линейным в соответствующей области. Однако нет логического обоснования для применения этого метода к данным с широким разбросом.

Существует особый аспект вечной проблемы индукции: каким образом наука умудряется выводить общие законы из неизбежно ограниченного количества наблюдений? Поскольку классическая логика не может ответить на этот вопрос, было предпринято много попыток обратиться к вероятностному рассмотрению. Целью такого подхода является вычисление вероятности того, что гипотетический закон справедлив, если задан набор наблюдений. Предыдущее обсуждение показало, что этот вопрос не имеет ответа до тех пор, пока не будет задана или предположена априорная вероятность всех возможных гипотез. Если я вытащу шар из урны и он окажется черным, какова вероятность того, что все шары в этой урне черные? Вопрос не имеет ответа до тех пор, пока не будет известно, что урны выбраны из заданного ансамбля урн, содержащих черные и другие шары в заданной пропорции. Когда гипотеза является научной теорией, выдвинутой для объяснения определенных наблюдаемых фактов, никакие априорные вероятности не даны и даже «множество всех возможных гипотез» является весьма туманным понятием *.

Вероятность того, что теория верна, не может, следовательно, быть выражена объективно в виде процентов, а является субъективной величиной и может обсуждаться. И все же часто соглашение может быть достигнуто, когда число подтверждающих наблюдаемых фактов велико и вероятность a posteriori также велика, несмотря на то что выбранные априорные вероятности очень малы. Но эти вероятности невозможно разумным способом выразить числами.

Упражнение. Вычислите распределение вероятности длины хорды в трех случаях примера Бертрана.

Упражнение. N урн содержат b_k черных шаров и a_k других ($k=1, 2, \ldots, N$). Я случайным образом выбираю одну урну (все урны равновероятны) и случайным образом вытаскиваю один шар. Если он черный, какова вероятность, что я выбрал k-ю урну? Найдите ответ для случая, когда я выбираю урну с вероятностью, пропорциональной количеству шаров, содержащихся в ней.

Упражнение. Покажите, что распределение Лоренца по частотам является также распределением Лоренца по длинам волн.

Упражнение. Предположим, вы ожидаете, что x является функцией t в виде $f(t;\ \alpha)$, где α означает набор параметров, которые должны быть найдены из наблюдаемых величин x_i в моменты t_i. Метод наименьших квадратов состоит в их определении из условия

$$\sum_i \{x_i - f(t_i;\ \alpha)\}^2 = \text{minimum}.$$

Преобразуйте задачу к новой переменной $y=\Phi(x)$ и покажите, что минимизация этой переменной приводит к другому значению α.

1.6. РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ГАУССА

В общем виде это распределение для одной переменной записывается следующим образом:

$$P(x) = Ce^{-\frac{1}{2}Ax^2 - Bx} \quad (-\infty < x < \infty), \tag{1.6.1}$$

* K. R. Popper на с. 287 в: «Предположения и опровержения» (Harper and Row, New York, 1968) утверждает, что наименее вероятные теории наиболее ценны. Он имеет в виду, что на наиболее определенные предсказания, которые дает теория, менее всего можно положиться a priori, но тем больше их ценность, когда они оказываются правильными, т. е. когда их вероятность a posteriori после проверки и сравнения с действительностью оказывается близкой к единице.

где A — положительная константа, определяющая ширину распределения, B определяет положение пика, а постоянная нормировки,

$$C = \left(\frac{A}{2\pi}\right)^{1/2} e^{-B^2/(2A)}. \tag{1.6.2}$$

Часто бывает удобным выразить параметры A и B в терминах среднего $\mu_1 = -B/A$ и дисперсии $\sigma^2 = 1/A$:

$$P(x) = (2\pi\sigma^2)^{-1/2} \exp\left[\frac{(x-\mu_1)^2}{2\sigma^2}\right]. \tag{1.6.3}$$

Это распределение называют *распределением Гаусса* или *нормальным распределением* *. Для ссылок мы запишем его характеристическую функцию

$$G(k) = e^{i\mu_1 k - \frac{1}{2}\sigma^2 k^2}. \tag{1.6.4}$$

Для этого распределения особенно удобно использовать кумулянты

$$\varkappa_1 = \mu_1, \quad \varkappa_2 = \sigma^2, \quad \varkappa_3 = \varkappa_4 = \ldots = 0.$$

Если $X_1, X_2, \ldots, X_r$ — взаимно независимые гауссовы переменные, то их сумма $Y = X_1 + X_2 + \ldots + X_r$ тоже является гауссовой, что сразу видно из формулы (1.4.4). Среднее значение и дисперсия Y являются суммами средних и дисперсий переменных X. Это полностью определяет распределение Y.

Упражнение. Найдите моменты распределения (1.6.3).

Упражнение. Докажите, что (1.6.3) стремится к $\delta(x-\mu_1)$, когда δ^2 стремится к нулю (умножьте на пробную функцию и проинтегрируйте).

Упражнение. Свойство двух независимых гауссовых переменных образовывать в сумме снова гауссову переменную не является уникальным. Докажите, что распределения Лоренца и Пуассона обладают аналогичным свойством.

Упражнение. Докажите, что свертка двух гамма-распределений (1.5.5) с одним и тем же a тоже является гамма-распределением.

Многомерное распределение Гаусса имеет вид

$$P(x) = C \exp\left[-\frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{r} A_{ij} x_i x_j - \sum_{i=1}^{r} B_i x_i\right] \tag{1.6.5}$$

с положительно определенной симметричной матрицей A. Перепишем (1.6.5) в векторных обозначениях:

$$P(x) = C \exp\left[\frac{1}{2}\mathbf{x}\cdot\mathbf{A}\cdot\mathbf{x} - \mathbf{B}\cdot\mathbf{x}\right]. \tag{1.6.6}$$

Константу нормировки C находят с помощью (1.6.2) после преобразования к новым переменным, в которых $\mathbf{A}$ диагональна. В резуль-

* Однако Гауссу (1809) предшествовали Лаплас (1780) и де Нуавр (1733). Вводящее в заблуждение прилагательное «нормальное» было введено К. Пирсоном, который позднее сожалел об этом: Biometrika, 13, 25 (1920).

тате получаем

$$C = (2\pi)^{-r/2} (\mathrm{Det}\, \mathbf{A})^{1/2} \exp\left[-\frac{1}{2}\mathbf{B}\cdot\mathbf{A}^{-1}\mathbf{B}\right]. \qquad (1.6.7)$$

Соответствующая характеристическая функция имеет вид

$$G(k) = \exp\left[\frac{1}{2}\mathbf{k}\cdot\mathbf{A}^{-1}\cdot\mathbf{k} - \mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{A}^{-1}\cdot\mathbf{B}\right]. \qquad (1.6.8)$$

Раскладывая в ряд по $\mathbf{k}$, находим

$$\langle X_i \rangle = -\sum_j (\mathbf{A}^{-1})_{ij} B_j; \qquad (1.6.9а)$$

$$\langle\langle X_i X_j \rangle\rangle = (\mathbf{A}^{-1})_{ij}. \qquad (1.6.9б)$$

Отсюда следует, что матрица ковариаций, определенная в (1.3.8), для распределения Гаусса равна $\mathbf{A}^{-1}$. Следовательно, *распределение Гаусса полностью определяется средними значениями переменных и их матрицей ковариаций*. В частности, если переменные некоррелированы, матрица $\mathbf{A}^{-1}$ диагональна, но тогда и $\mathbf{A}$ также диагональна; следовательно, переменные независимы. Таким образом, *если известно, что совместное распределение гауссово, «некоррелированность» подразумевает «независимость»* (ср. упражнение в § 1.3). Эта независимость всегда может быть получена с помощью линейного и даже ортогонального преобразования переменных.

Моменты многомерного распределения Гаусса с нулевым средним обладают замечательным свойством. Рассмотрим распределение (1.6.6) с $\boldsymbol{B} = 0$. Мы запишем его характеристическую функцию в терминах $s_j = \mathrm{i}k_j$ для того чтобы избавиться от нежелательного множителя i:

$$G(-\mathrm{i}s_1, -\mathrm{i}s_2, \ldots, -\mathrm{i}s_r) = \prod_{p,q} \exp\left[\frac{1}{2}\langle X_p X_q\rangle s_p s_q\right] =$$

$$= \prod_{p,q}\left\{1 + \frac{1}{2}\langle X_p X_q\rangle s_p s_q + \ldots\right\}. \qquad (1.6.10)$$

Для того чтобы найти момент $\langle \boldsymbol{X}_i X_j X_k \ldots\rangle$, нужно сгруппировать члены, пропорциональные $s_i s_j s_k \ldots$. Мы предполагаем, что число множителей четно и что индексы отличны друг от друга. Тогда члены, замененные многоточием в (1.6.10), не могут давать вклада. Следовательно, $s_i s_j s_k \ldots$ может войти в (1.6.10) единственным способом в результате перемножения подходящих пар $s_p s_q$. С другой стороны, каждое произведение пар $s_p s_q$, которое составляет $s_i s_j s_k \ldots$, обязательно встречается. Результат следующий:

$$\langle X_i X_j X_k \ldots\rangle = \sum \langle X_p X_q\rangle \langle X_u X_v\rangle \ldots. \qquad (1.6.11)$$

Индексы p, q, u, v те же самые, что i, j, k, ..., но разбитые попарно. Суммирование распространяется на все возможные способы, которыми i, j, k, ... могут быть разбиты на пары. Множитель $^1/_2$ в (1.6.10) сокращается, потому что произведение в (1.6.10) содержит каждую пару дважды.

Упражнение. Константу нормировки C находят из соотношения

$$C^{-1}=\int \exp\left[-\frac{1}{2}x\cdot\mathbf{A}\cdot x-\mathbf{B}\cdot x\right]\mathrm{d}^r x.$$

Для того чтобы вычислить интеграл, нет необходимости использовать *ортогональное* преобразование x: можно использовать любое линейное преобразование, которое приводит матрицу $\mathbf{A}$ к диагональному виду. Выведите таким способом (1.6.7) и (1.6.8).

Упражнение. Выполните следующий вывод соотношения (1.6.9). Сначала сдвиньте начало координат так, чтобы $\langle X_i\rangle=0$. Затем

$$\sum_j \langle X_i X_j\rangle A_{jk}=C\int x_i x_j A_{jk}\exp\left[-\frac{1}{2}\sum A_{pq}x_p x_q\right]\mathrm{d}^r x=$$

$$=C\int x_i\left(-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x_k}\right)\exp[\quad]\,\mathrm{d}^r x,$$

которое после интегрирования по частям дает желаемый результат *.

Упражнение. Кумулянты первого и второго порядков многомерного распределения Гаусса определены соотношениями (1.6.9). Докажите, что все кумулянты более высокого порядка равны нулю.

Упражнение. Если X — многомерная гауссова переменная с нулевым средним значением, а $f(X)$ — многочлен, то

$$\langle X_k f(\mathbf{X})\rangle=\sum_j \langle X_k X_j\rangle\left\langle\frac{\partial f(\mathbf{X})}{\partial X_j}\right\rangle.$$

Упражнение. Стандартный вид двумерного распределения Гаусса с нулевым средним, аналогичный (1.6.3), следующий:

$$P(x,\ y)=\frac{1}{2\pi\sigma_x\sigma_y\sqrt{1-\rho^2}}\exp\left[-\frac{1}{2}\left\{\frac{x^2}{\sigma_x^2}-2\rho\frac{xy}{\sigma_x\sigma_y}+\frac{y^2}{\sigma_y^2}\right\}\frac{1}{1-\rho^2}\right]. \qquad (1.6.12)$$

Какой вид должна иметь аналогичная запись для n переменных?

Упражнение. Для случая $\sigma_x=\sigma_y=1$, раскладывая (1.6.12), получаем

$$P(x,\ y)=\frac{1}{2\pi}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}(x^2+y^2)}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\rho^n}{n!}\mathrm{He}_n(x)\cdot\mathrm{He}_n(y), \qquad (1.6.13)$$

где He_n — полиномы Эрмита, определенные в кн.: Magnus W., Oberhettinger F. and Soni R. P. Formulas and Theorems for the Special Functions of Mathematical Physics (3 rd Ed; Springer, Berlin, 1966), p. 250.

1.7. ЦЕНТРАЛЬНАЯ ПРЕДЕЛЬНАЯ ТЕОРЕМА

Пусть $X_1, X_2, \ldots, X_r$ — множество r независимых стохастических переменных, каждая из которых имеет одинаковую гауссову плотность вероятности $P_X(x)$ с нулевым средним значением и дисперсией σ^2. Их сумма Y имеет следующую плотность вероятности:

$$P_Y(y)=[2\pi r\sigma^2]^{-1/2}\exp\left[-\frac{y^2}{2r\sigma^2}\right].$$

Тогда $\langle Y^2\rangle=r\sigma^2$ возрастает линейно с ростом r. С другой стороны, распределение среднего арифметического переменных X становится

* Onsager L. Phys. Rev. 38, 2265 (1931).

у́же с увеличением r:

$$\left\langle\left(\frac{X_1+X_2+\ldots+X_r}{r}\right)^2\right\rangle=\frac{\sigma^2}{r}.$$

Поэтому полезно определить соответствующим образом нормированную сумму

$$Z=\frac{X_1+X_2+\ldots+X_r}{\sqrt{r}}.$$

Эта сумма имеет дисперсию σ^2 и, следовательно,

$$P_Z(z)=[2\pi\sigma]^{-1/2}\exp\left[-\frac{z^2}{2\sigma^2}\right]. \tag{1.7.1}$$

Центральная предельная теорема утверждает, что если даже $P_X(x)$ не гауссовы, а какие-либо другие распределения с нулевыми средними и конечными дисперсиями σ^2, уравнение (1.7.1) остается справедливым в пределе $r\to\infty$. На этом замечательном факте основана определяющая роль распределения Гаусса во всех областях статистики.

Для того чтобы получить этот результат, запишем характеристическую функцию произвольного распределения P_X:

$$G_X(k)=\int e^{ikx}P_X(x)\,dx=1-\frac{1}{2}\sigma^2k^2+\ldots. \tag{1.7.2}$$

Тогда для характеристической функции Z находим

$$G_Z(k)=\left[G_X\left(\frac{k}{\sqrt{r}}\right)\right]^r=\left[1-\frac{\sigma^2k^2}{2r}\right]^r\to e^{-\frac{1}{2}\sigma^2k^2}, \tag{1.7.3}$$

что действительно соответствует распределению (1.7.1). Слагаемые в (1.7.2), обозначенные многоточием, приводят к появлению в $G_X(k/\sqrt{r})$ членов порядка $r^{-3/2}$ и поэтому в пределе $r\to\infty$ вклада не дают.

Пример. Для прояснения полезно проследить явно, как распределение вероятности стремится к своему пределу*. Пусть X — стохастическая переменная, которая принимает значения 0 и 1 с вероятностью 1/2 каждое. Пусть Y — сумма r таких переменных. Тогда Y принимает значения 0, 1, 2, ..., r с вероятностью

$$p_n=2^{-r}\binom{r}{n}. \tag{1.7.4}$$

Для нахождения предела необходимо сначала найти подходящую новую переменную Z. Среднее значение и дисперсия следуют из (1.7.4) или могут быть найдены непосредственно:

$$\langle Y\rangle=r\langle X\rangle=\frac{1}{2}r,\quad \sigma_y^2=r\sigma_x^2=\frac{1}{4}r,$$

---

* Kac M. Amer. Mathem. Monthly, 54, 369 (1974). Domb C. and Offenbacher E. L., Amer. J. Phys., **46**, 49 (1978).

соответственно полагаем

$$Y=\frac{1}{2}r+\frac{1}{2}r^{1/2}Z.$$

Вероятность того, что Z лежит между z и $z+\Delta z$, составляет

$$P_Z(z)\,\Delta z=\sum_{1/2r+1/2r^{1/2}z<n<1/2r+1/2r^{1/2}(z+\Delta z)} p_n. \qquad (1.7.5)$$

Когда r велико, это выражение определяет гладкую плотность вероятности P_Z, которую и нужно определить.

Для больших r выражение (1.7.4) может быть написано в виде

$$\log p_n=-r\log 2+\left(r+\frac{1}{2}\right)\log r-\left(n+\frac{1}{2}\right)\log n-$$
$$-\left(r-n+\frac{1}{2}\right)\log(r-n)-\frac{1}{2}\log(2\pi)=$$
$$=-r\log 2-\frac{1}{2}\log r-\left(n+\frac{1}{2}\right)\log\left(\frac{1}{2}+\frac{1}{2}r^{-1/2}z\right)-$$
$$-\left(r-n+\frac{1}{2}\right)\log\left(\frac{1}{2}-\frac{1}{2}r^{-1/2}z\right)-\frac{1}{2}\log 2\pi=$$
$$=\log 2-\frac{1}{2}\log r-\left(\frac{1}{2}r+\frac{1}{2}r^{1/2}z+\frac{1}{2}\right)\left(r^{-1/2}z-\frac{1}{2}r^{-1}z^2+\ldots\right)-$$
$$-\left(\frac{1}{2}r-\frac{1}{2}r^{1/2}z+\frac{1}{2}\right)\left(-r^{-1/2}z-\frac{1}{2}r^{-1}z^2+\ldots\right)-\frac{1}{2}\log 2\pi=$$
$$=\log 2-\frac{1}{2}\log r-\frac{1}{2}z^2-\frac{1}{2}\log 2\pi+O\left(r^{-1/2}\right).$$

Подставим этот результат в (1.7.5):

$$P_Z(z)\,\Delta z=$$
$$=\frac{1}{2}r^{1/2}\Delta z\exp\left[\log 2-\frac{1}{2}\log r-\frac{1}{2}z^2-\frac{1}{2}\log 2\pi\right]=(2\pi)^{-1/2}e^{-\frac{1}{2}z^2}\Delta z. \qquad (1.7.6)$$

Важность для физики этого предельного выражения состоит в его применении: при больших r выражение (1.7.4) можно заменить его приближенным значением

$$P_Y(y)=\left(\frac{1}{2}\pi r\right)^{-1/2}\exp\left[-\frac{\left(y-\frac{1}{2}r\right)^2}{\frac{1}{2}r}\right]. \qquad (1.7.7)$$

Возникает вопрос: как дискретное распределение вероятности можно аппроксимировать непрерывным? Ответ дает соотношение (1.7.5) — это описание, огрубленное по масштабам. Более точно (1.7.7) представляет собой вероятность найти Y в интервале y, $y+dy$, когда $\Delta y\gg 1$. В то же время очевидно, что оно некорректно описывает вероятность, когда $\Delta y\leqslant 1$.

Другой парадокс состоит в том, что (1.7.7) простирается от $-\infty$ до $+\infty$, несмотря на то что по построению Y не может принимать отрицательных значений. Нельзя просто произвести обрезание (1.7.7) в нуле не нарушая нормировки. Разрешение парадокса состоит в том, что (1.7.7) является аппроксимацией, которая при отрицательных y дает правильное нулевое значение лишь приближенно. Приближение является очень хорошим при больших r:

$$P_Y(y<0)<\left(\frac{1}{2}\pi r\right)^{-1/2}\exp\left[-\frac{1}{2}r\right].$$

Упражнение. Покажите, что результат (1.7.7) в действительности совпадает с полученным из центральной предельной теоремы.

Упражнение. Примените центральную предельную теорему к случайным блужданиям в § 1.4, сравните с (1.4.8). Сравните результат с явным вычислением, как было проделано выше.

Упражнение. Покажите, что распределение Пуассона стремится к распределению Гаусса при $a \to \infty$.

Упражнение. Верификацию, аналогичную проделанной выше, можно выполнить, когда X принимает значения 0, 1 с вероятностями α, β, где $\alpha+\beta=1$ (а не 1/2, 1/2) так что p задается (1.1.5) с $\gamma=\alpha/\beta$ (см., например: [1, pp. 169 ff]). Однако теперь мы перейдем к пределу $N \to \infty$ *и одновременно устремим* α *к нулю*, $\alpha = a/N$, так что $\langle Y \rangle = a$ остается фиксированным. Покажите, что в этом пределе биномиальное распределение стремится к распределению Пуассона.

Различные наборы строгих математических условий, при которых справедлива центральная предельная теорема, можно найти в учебниках *. Однако тому, кто занимается физикой, важнее качественно понимать область ее применимости. С этой целью мы добавим несколько замечаний.

Во-первых, не требуется гладкости $p(x)$. Это ясно из приведенного выше примера, где

$$p(x) = {}^1/_2\delta(x) + \frac{1}{2}\delta(x-1).$$

С другой стороны, необходимо минимальное условие гладкости характеристической функции $G(k)$, а именно чтобы существовала вторая производная в начале координат. То, что такое условие нельзя игнорировать безнаказанно, было продемонстрировано с помощью распределения Лоренца. Если переменные X_i независимы и имеют одно и то же распределение Лоренца, то их сумма Y тоже имеет распределение Лоренца. Следовательно, оно не стремится к распределению Гаусса.

Во-вторых, понятно, что нет необходимости требовать, чтобы все переменные X имели одинаковое распределение. Допустим, имеется r_1 переменных с одним распределением и r_2 переменных с другим. И пусть оба числа r_1 и r_2 стремятся к бесконечности так, что их отношение остается фиксированным. Тогда обе суммы Y_1 и Y_2 могут быть аппроксимированы распределением Гаусса и общая сумма $Y = Y_1 + Y_2$ опять гауссова. Ее характеристическая функция в обычных обозначениях имеет вид

$$G_Y(k) = e^{i(\mu_1 r_1 + \mu_2 r_2)k - \frac{1}{2}(\sigma_1^2 r_1 + \sigma_2^2 r_2)k^2}.$$

С другой стороны, последовательность переменных X_j, у которой среднее нарастает с j неограниченно, может привести к негауссовой полной сумме Y; соответствующий пример нетрудно построить.

---

* Feller J. Ch. X; B. W. Gnedenko and A. N. Kolmogorov, Grenzverteilingen von Summen unathangiger Zufallsgrossen (Academie Verlag, Berlin, 1959); M. Hoeve, Probability Theory 1 (4 th Ed; Springer, New York, 1977) Ch. VI.

В-третьих, легко видеть, что имеет важное значение условие независимости переменных X. Если в качестве всех r переменных взять одну и ту же величину X, результат будет не верен. С другой стороны, достаточно слабая зависимость переменных друг от друга является допустимой. Это видно из вывода распределения Максвелла по скоростям из микроканонического ансамбля для идеального газа (см. упражнение в § 1.3). Микроканоническое распределение в фазовом пространстве является совместным распределением, которое не факторизуется, но в пределе $r \to \infty$ распределение скорости каждой молекулы гауссово. Эквивалентность различных ансамблей в статистической механике основана на этом факте.

Упражнение. Проверьте с помощью явных вычислений, что доказательство центральной предельной теоремы для лоренцевых переменных не справедливо, а ее результат не верен.

Упражнение. В случайном блуждании шаги чередуются по длине: каждый второй шаг покрывает две единицы (влево или вправо). Найдите предельное распределение.

Упражнение. Возьмите последовательность переменных X_j ($j=1, 2, 3, \ldots, r$) с распределениями $P_j(x)=f(x-j)$ и фиксированным f. Покажите, что центральное предельное свойство неприменимо, но что переменные Z, определенные соотношением

$$\sum_{j=1}^{r} X_j = \frac{1}{2} r(r+1) + Z,$$

стремятся к гауссовости. Как это можно было заметить a priori?

Упражнение. Примером переменных, которые не являются независимыми, служат *случайные блуждания с памятью*. Предположим, что после шага вправо вероятность того, что следующий шаг будет сделан вправо, есть α, а для шага влево — β. Аналогично, после шага влево вероятность движения в ту же сторону есть α и в противоположную — β. Имеем $\langle X_j \rangle = 0$; $\langle X_j^2 \rangle = 1$; $\langle X_j X_{j+1} \rangle = \alpha - \beta = \rho$. Находим $\langle X_j X_{j+k} \rangle = \rho^k$. Следовательно, $\langle Y \rangle = 0$ и

$$\langle Y^2 \rangle = \sum_{j=1}^{r} \langle X_j^2 \rangle + 2 \sum_{j=2}^{r} \sum_{k=1}^{j-1} \langle X_j X_k \rangle = \frac{1+\rho}{1-\rho} r + O(r^0). \tag{1.7.8}$$

В § 4.5 будет показано, что в пределе переменная Y стремится стать гауссовой.

ГЛАВА 2
СЛУЧАЙНЫЕ СОБЫТИЯ

В этой главе описан более сложный класс случайных переменных, которые встречаются в некоторых областях физики и других наук. Эти случайные переменные можно рассматривать и как случайные функции, поэтому нам кажется логичным поместить эту главу здесь. С другой стороны, из педагогических соображений было бы лучше отложить этот материал на более позднее время,

поскольку он достаточно сложен, а приведенные здесь результаты не будут использоваться вплоть до гл. 8. Читатели, которые не интересуются этим предметом как таковым, вполне могут отложить чтение настоящей главы на более позднее время, пока им не понадобится этот материал.

2.1. ОПРЕДЕЛЕНИЯ

Отсчеты счетчика Гейгера, попадание электронов на анод вакуумной лампы или появление покупателей у прилавка — это все события, которые могут быть отмечены точками на оси времени. В качестве других примеров можно привести собственные значения случайной эрмитовой матрицы, принадлежащие действительной оси * и отмеченные точками на энергетической шкале значения энергии частиц в космических лучах. Случайный характер расположения этих точек приводит к изучению определенного класса стохастических переменных, называемых «случайным множеством точек» ** (или событий) [**6**, гл. 6] или «точечными процессами» ***.

а. Пространство выборок состоит из состояний, каждое из которых, в свою очередь, состоит:

1) из неотрицательного целого $s=0, 1, 2, \ldots$;

2) для каждого s — из множества s действительных чисел τ_σ, удовлетворяющих неравенствам

$$-\infty < \tau_1 < \tau_2 < \ldots < \tau_s < \infty. \tag{2.1.1}$$

Читатель может заметить аналогию с большим каноническим ансамблем в статистической механике и пространством Фока в теории поля.

б. Распределение вероятности этих состояний дается последовательностью неотрицательных функций **** $Q_s(\tau_1, \tau_2, \ldots, \tau_s)$, определенной в области (2.1.1) и нормированной в соответствии с выражением

$$Q_0 + \int_{-\infty}^{\infty} d\tau_1 Q_1(\tau_1) + \int_{-\infty}^{\infty} d\tau_1 \int_{\tau_1}^{\infty} d\tau_2 Q_2(\tau_1, \tau_2) + \ldots = 1. \tag{2.1.2}$$

Для многих целей удобно исключить ограничение (2.1.1) с помощью следующего чисто алгебраического приема. Допустим, что каждое τ_σ изменяется от $-\infty$ до $+\infty$, но договоримся, что все $s!$

---

* Porter C. E. Statistical Theories of Spectra (Acad. Press, New York, 1965); Mehta M. L., Random Martices (Acad. Press, New York, 1967); Elliott R. J., Krumhansl J. A. and Leath P. L. Rev. Mod. Phys. **46**, 465 (1974).

** В данном контексте не следует смешивать эти точки с точками, обозначающими определенные значения t. См. также Ramakrishnan, in: Encyclopedia in Physics 3/2 (S. Flugge ed., Springer, Berlin, 1959) Sec. 33.

*** Snyder D. L. Random Point Processes (Wiley, New York, 1975).

**** Мы используем букву Q для этого распределения вероятности, т. к. P уже перегружено различными значениями.

наборов $\{\tau_1, \tau_2, \ldots, \tau_s\}$, отличающиеся друг от друга только перестановками, соответствуют одному и тому же состоянию. Кроме того, распространим определение $Q_s(\tau_1, \tau_2, \ldots, \tau_s)$ на все s-мерное пространство, поставив дополнительное условие, что Q_s является симметричной функцией своих аргументов. Тогда условие нормировки (2.1.2) может быть записано в виде

$$Q_0 + \sum_{s=1}^{\infty} \frac{1}{s!} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau_1 d\tau_2 \ldots d\tau_s Q_s(\tau_1, \tau_2, \ldots, \tau_s) = 1. \quad (2.1.3)$$

В этом интеграле две или несколько переменных τ могут совпадать, тогда величина Q_s в этих точках не определена. К счастью, множество таких точек имеет меру нуль в s-мерном пространстве, так что они не дают вклада в интеграл при условии, что Q_s не содержит дельта-функций вида $\delta(\tau_1 - \tau_2)$. Таким образом, мы ограничиваемся такими ситуациями, в которых отсутствует положительная вероятность совпадения точек: прилавок, у которого появляются покупатели, не обслуживает супружеские пары.

Средние определены для функций A на том же пространстве состояний; такие функции состоят из последовательности

$$\{A_0, A_1(\tau_1), A_2(\tau_1, \tau_2), \ldots, A_s(\tau_1, \tau_2, \ldots, \tau_s), \ldots\}. \quad (2.1.4)$$

В принципе каждое A_s необходимо определить только в области (2.1.1), но, имея в виду распространение на все s-пространство, мы опять дополняем определение функции A_s требованием ее симметрии. Тогда

$$\langle A \rangle = A_0 Q_0 + \sum_{s=1}^{\infty} \frac{1}{s!} \int A_s(\tau_1, \tau_2, \ldots, \tau_s) Q_s(\tau_1, \tau_2, \ldots, \tau_s) d\tau_1 \ldots d\tau_s. \quad (2.1.5)$$

Таким образом, угловые скобки, означающие усреднение, подразумевают суммирование по всем s и s-кратное интегрирование для каждого s.

В качестве примера возьмем N точек в заданном интервале (t_a, t_b). Для того чтобы записать его в виде (2.1.4), мы определим *индикатор** интервала $\chi(t)$, полагая $\chi(t) = 1$ для $t_a < t < t_b$ и $\chi(t) = 0$ для всех других значений t. Тогда физическая величина N представляется в виде последовательности

$$N \to \{0, \chi(\tau_1), \chi(\tau_1) + \chi(\tau_2), \chi(\tau_1) + \chi(\tau_2) + \chi(\tau_3), \ldots\}.$$

---

* Более общепринятое название *характеристическая функция* внесло бы путаницу в данном контексте.

Ее среднее значение записывается в виде

$$\langle N\rangle = \left\langle \sum_{\sigma=1}^{s} \chi(\tau_\sigma)\right\rangle =$$

$$= \sum_{s=1}^{\infty} \frac{1}{s!} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau_1 \ldots d\tau_s Q(\tau_1, \ldots, \tau_s) \sum_{\sigma=1}^{s} \chi(\tau_\sigma) =$$

$$= \sum_{s=1}^{\infty} \frac{1}{(s-1)!} \int_{-\infty}^{\infty} \chi(\tau_1) d\tau_1 \int_{-\infty}^{\infty} d\tau_2 \ldots d\tau_s Q_s(\tau_1, \ldots, \tau_s) =$$

$$= \sum_{s=1}^{\infty} \frac{1}{(s-1)!} \int_{t_a}^{t_b} d\tau_1 \int_{-\infty}^{\infty} d\tau_2 \ldots d\tau_s Q_s(\tau_1, \ldots, \tau_s). \qquad (2.1.6)$$

Как мы видим, результат получился весьма непростым и искомое среднее оказалось выраженным через сумму по всем Q_s. В § 2.3 будет развит еще один подход к описанию случайных точек, который лучше приспособлен для вычисления таких средних.

Упражнение. Переход от ограниченной области (2.1.1) к полной области с симметричной функцией Q_s особенно удобен (если не обязателен) для обобщенного описания случайных точек на плоскости или в пространстве. Запишите явно функции Q_s для большого канонического ансамбля молекул идеального газа в заданном объеме.

Упражнение. Покажите, что средний квадрат числа точек N в интервале (t_a, t_b) дается выражением

$$\langle N^2\rangle = \langle N\rangle + \sum_{s=2}^{\infty} \frac{1}{(s-2)!} \int_{t_a}^{t_b} d\tau_1 \int_{t_a}^{t_b} d\tau_2 \int_{-\infty}^{\infty} d\tau_3 \ldots d\tau_s Q_s. \qquad (2.1.7)$$

Упражнение. Случайное множество точек в интервале $(0, \infty)$ строится следующим образом: вероятность того, что первая точка лежит в интервале $(\tau_1, \tau_1 + d\tau_1)$, есть $w(\tau_1)\, d\tau_1$, где w — заданная неотрицательная функция, удовлетворяющая условию

$$\int_0^{\infty} w(\tau)\, d\tau = \frac{1}{\gamma} < 1. \qquad (2.1.8)$$

Плотность вероятности для второй точки есть $w(\tau_2 - \tau_1)$ и т. д. Вычислите Q_s.

Упражнение. Электроны попадают на катод случайным образом, причем этот процесс определяется заданными Q_s. Попадание электрона в момент τ вызывает отклик в выходной цепи, который в момент t имеет значение $\psi(-\tau)$. Полный отклик в момент времени t есть $Y(t) = \sum_s \psi(t - \tau_s)$. Выразите $\langle Y(t)\rangle$, $\langle Y(t)^2\rangle$, $\langle Y(t_1) Y(t_2)\rangle$ через эти данные.

Упражнение. Обобщите этот подход на описание точек двух (или большего количества) сортов («меченые точки»).

Упражнение. Предположим, что существует ненулевая вероятность совпадения пары точек. Этот случай можно описать с помощью введения точек двух сортов, а именно изолированных и двойных точек. Покажите, что соответствующее двухсортовое распределение может быть перестроено в одно-

сортную последовательность Q_s, которая в этом случае содержит дельта-функции.

Упражнение. Объекты (2.1.4) образуют линейное векторное пространство. Скалярное произведение определено с весовой функцией $1/s!$, так что выражение (2.1.5) является скалярным произведением (A, Q). Запишите выражения (2.1.3) и (2.1.7) также в виде скалярных произведений.

2.2. РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ПУАССОНА

Случайные события называют *независимыми*, если каждое факторизуется:

$$Q_s(\tau_1, \tau_2, \ldots, \tau_s) = e^{-} q(\tau_1) q(\tau_2) \ldots q(\tau_s); \quad Q_0 = e^{-\nu}, \tag{2.2.1}$$

где q — некоторая неотрицательная интегрируемая функция. Константа нормировки $e^{-\nu}$ определяется выражением

$$\nu = \int_{-\infty}^{\infty} q(\tau)\, d\tau. \tag{2.2.2}$$

В этом случае для среднего числа N в интервале (t_a, t_b) из выражения (2.1.6) легко находим

$$\langle N \rangle = \int_{t_a}^{t_b} q(\tau)\, d\tau. \tag{2.2.3}$$

Из выражения (2.1.7) находим также средний квадрат:

$$\langle N^2 \rangle = \langle N \rangle^2 + \langle N \rangle. \tag{2.2.4}$$

Распределение вероятности N можно вычислить явно. Его характеристическая функция имеет вид:

$$\left\langle e^{-ikN} \right\rangle = \left\langle \exp\left[ik \sum_{\sigma=1}^{s} \chi(\tau_\sigma)\right]\right\rangle = e^{-\nu} \sum_{s=0}^{\infty} \frac{1}{s!} \left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{ik\chi(\tau)} q(\tau)\, d\tau \right)^s =$$

$$= \exp\left[\int_{-\infty}^{\infty} (e^{ik\chi(\tau)} - 1)\, q(\tau)\, d\tau \right] = \exp\left[(e^{ik} - 1) \int_{t_a}^{t_b} q(t)\, d\tau \right] =$$

$$= \exp\left[(e^{ik} - 1)\langle N \rangle\right] = e^{-\langle N \rangle} \sum_{N=0}^{\infty} \frac{\langle N \rangle}{N!} e^{ikN}. \tag{2.2.5}$$

Сравнивая коэффициенты при e^{ikN} в левой и правой частях этого равенства, находим, что *вероятность того, что N независимых случайных точек попадает в заданный интервал, есть*

$$P_N = \frac{\langle N \rangle^N}{N!} e^{-\langle N \rangle}. \tag{2.2.6}$$

Именно таким путем распределение Пуассона (1.2.10) возникает в физических задачах. Это распределение определяет вероятность нахождения числа независимых событий в ограниченной области,

например вероятность попадания дождевых капель в заданную черепицу. Оно определяется единственным параметром — средним значением, которое, как видно из (2.2.4), также является дисперсией. Распределение Пуассона для целых неотрицательных чисел столь же распространено, как распределение Гаусса для непрерывной области $(-\infty, \infty)$. Однако это распределение нельзя рассматривать как универсальное, поскольку оно было выведено только для независимых событий. В § 7.3 мы увидим, что в химических реакциях это предположение не всегда справедливо. Кроме того, далеко не всегда дисперсия случайного числа частиц равна их среднему числу. Несмотря на это, в качестве полезного способа приближенной оценки часто можно полагать, что дисперсия имеет тот же порядок величины, что и среднее значение.

В качестве дальнейшего уточнения предположим, что $q(\tau)$ постоянно в интервале $(-T, T)$ и равно нулю вне этого интервала. Постоянная $\nu/(2T) = \rho$ и представляет собой среднее число событий в единичное время. В пределах $T \to \infty$, $\nu \to \infty$ при фиксированном ρ получаем приближение стационарного распределения точек, называемое *дробовым шумом* *. Тот факт, что стационарные распределения могут быть описаны только с помощью предельного перехода, является еще одним недостатком настоящего рассмотрения случайных точек. Этот недостаток мы устраним в следующем разделе.

Упражнение. Убедитесь в том, что соотношение (2.2.2) — правильное условие нормировки, и покажите, что ν представляет собой среднее значение количества всех точек: $\nu = \langle s \rangle$.

Упражнение. Обобщите формулы для случайных независимых точек в трехмерном пространстве. Покажите, что число точек N в произвольной области также подчиняется распределению (2.2.6).

Упражнение. Обобщите формализм на случай, когда рассматриваются точки разных сортов, и покажите, что многомерный аналог распределения Пуассона — это просто произведение одномерных распределений (2.2.6).

Упражнение. Если N_1, N_2 — две статистически независимые переменные, каждая из которых подчиняется распределению Пуассона, то их сумма тоже распределена по Пуассону.

Упражнение. Рассмотрите суперпозицию распределений Пуассона:

$$p_n = \int_0^\infty \Phi(\alpha) \frac{\alpha^n}{n!} e^{-\alpha} d\alpha, \tag{2.2.7}$$

где $\Phi^0(\alpha)$ в свою очередь является распределением вероятности. Выведите соотношения

$$\langle N \rangle_p = \langle \alpha \rangle_\Phi; \quad \langle N^2 \rangle_p - \langle N \rangle_p^2 = \langle \alpha^2 \rangle_\Phi.$$

Таким образом, дисперсия такого распределения всегда больше дисперсии чисто пуассоновского распределения с тем же самым средним. Выразите также производящую функцию вероятности p_n через характеристическую функцию распределения $\Phi(\alpha)$ и выведите отсюда, что моменты переменной α равны факториальным моментам переменной n (ср. с. (1.2.15)).

---

* Иногда это название применяют также к нестационарному набору независимых событий. Точное определение «стационарности» дано в (2.3.13).

Упражнение. Любое распределение p_n может быть представлено в виде (2.2.7), если отбросить условие, что Φ должна быть плотностью вероятности, а также допустить другие пути интегрирования *.

2.3. ЕЩЕ ОДИН СПОСОБ ОПИСАНИЯ СЛУЧАЙНЫХ СОБЫТИЙ

Соотношения (2.1.6) и (2.1.7) для числа точек в заданном интервале наводят на мысль о том, что полезно определить последовательность функций $f_n(t_1, t_2, \ldots, t_n)$ для $n=1, 2, \ldots$, положив

$$f_1(t_1)=\sum_{s=1}^{\infty}\frac{1}{(s-1)!}\int_{-\infty}^{\infty}d\tau_2\ldots d\tau_s Q_s(t_1, \tau_2, \ldots, \tau_s),$$

$$f(t_1, t_2)=\sum_{s=2}^{\infty}\frac{1}{(s-2)!}\int_{-\infty}^{\infty}d\tau_3\ldots d\tau_s Q_s(t_1, t_2, \tau_3, \ldots, \tau_s),$$

$$\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots$$

$$f(t_1, t_2, \ldots, t_n)=\sum_{s=n}^{\infty}\frac{1}{(s-n)!}\int_{-\infty}^{\infty}d\tau_{n+1}\ldots d\tau_s Q_s(t_1, t_2, \ldots, t_n, \tau_{n+1}, \ldots, \tau_s). \quad (2.3.1)$$

Тогда соотношения (2.1.6) и (2.1.7) можно записать в более простом виде:

$$\langle N\rangle=\int_{t_a}^{t_b}f_1(t_1)\,dt_1; \quad (2.3.2)$$

$$\langle N^2\rangle=\langle N\rangle+\int_{t_a}^{t_b}f_2(t_1, t_2)\,dt_1\,dt_2. \quad (2.3.3)$$

Интуитивно значение функций f_n можно уяснить из определяющих выражений (2.3.1): произведение $f_n(t_1, t_2, \ldots, t_n)\,dt_1\,dt_2\ldots dt_n$ равно вероятности того, что каждый из интервалов (t_1, t_1+dt_1), (t_2, t_2+dt_2) и т. д. содержит точку независимо от того, сколько точек может быть вне этих интервалов. Вероятность того, что один из этих интервалов содержит две точки или более, пренебрежимо мала, так как в соответствии с нашей договоренностью Q_s не содержит дельта-функций. Это соглашение приводит еще и к тому, что f_n также не содержит дельта-функций. В свою очередь, нет необходимости задавать значение величины f_n, когда у нее совпадают два аргумента.

Функция f_n обладает следующими очевидными свойствами:

1) $f_n \geqslant 0$;

2) f_n является симметричной функцией своих аргументов $t_1, t_2, \ldots, t_n$.

---

* Gardiner C. N. and Chaturvedi S., J. Stat. Phys. **17**, 429 (1977); **18**, 501, (1978).

Функции f_n не удовлетворяют условиям нормировки и поэтому сами не являются плотностями вероятности. Здесь может возникнуть небольшая путаница, поскольку раньше мы интерпретировали их как вероятности. Но их вероятностная интерпретация применима только к *бесконечно малым* интервалам или по крайней мере интервалам настолько малым, что отсутствует заметная вероятность нахождения в них двух или большего числа точек. Что касается больших интервалов (t_a, t_b), то, как можно видеть из выражения (2.3.2), проинтегрированная функция f_1 является средним числом точек, а не полной вероятностью найти точку в этом интервале. Таким образом, она представляет собой среднюю плотность точек. Аналогично, функции более высокого порядка f_n представляют собой нечто вроде «средних совместных плотностей». Только для бесконечно малых интервалов они действительно сводятся к вероятностям. Стратонович [8, гл. 6] называет их *функциями распределения*, но, для того чтобы избежать неправильного толкования, мы будем их называть *функциями* f_n.

Упражнение. Вычислите функции f_n для независимых точек и покажите, что

$$f_n(t_1, t_2, \ldots, t_n) = f_1(t_1) f_1(t_2) \ldots f_1(t_n). \tag{2.3.4}$$

Упражнение. Предположим, что попадания фотонов в счетчик образуют случайное множество с известными стохастическими свойствами. Вероятность срабатывания счетчика для каждого попадания есть α. Выразите функцию f_n срабатывания счетчика через соответствующую функцию попадания фотонов в счетчик.

Упражнение. При описании точек функция f_n является более полезной, чем Q_n, по следующей причине. Большинство величин A, средними от которых мы интересуемся, являются «суммарными функциями», т. е. они состоят из одночастичных функций $a(\tau_\sigma)$, просуммированных по всем частицам, или из двухчастичных функций $a(\tau_\sigma, \tau_\sigma)$, просуммированных по всем парам частиц, и т. д. * В общем виде

$$A = \sum_{\sigma_1, \sigma_2, \ldots, \sigma_n} a(\tau_{\sigma_1}, \tau_{\sigma_2}, \ldots, \tau_{\sigma_n}),$$

где a — функция лишь небольшого числа частиц. Примерами могут служить выражения (2.3.2) и (2.3.3). Покажите, что среднее значение A включает только $f_1, f_2, \ldots, f_n$ и не содержит функций распределения более высокого порядка. При каком условии оно содержит только f_n?

Предположим, прибор реагирует на попадание фотонов или электронов с некоторой чувствительностью, которая по внешним причинам зависит от времени. Пусть реакция на попадание в момент τ есть $\psi(\tau)$. (Существенным обстоятельством является то, что ответ не зависит от попадания других частиц: отсутствуют «мертвые зоны» или время восстановления работоспособности прибора.) Если s попаданий происходит в моменты времени $\tau_1, \tau_2, \ldots, \tau_s$, общая реак-

* Важность этого факта для статистической механики была подчеркнута А. И. Хинчиным (Khinchin A. I. Mathematical, Foundations of Statistical Mechanics (G. Gamow transl., Dover Publ., New York, 1949, p. 63)), но он называет A суммарными функциями только при $n = 1$.

ция прибора имеет вид

$$U = \sum_{\sigma=1}^{s} \psi(\tau_\sigma).$$

Если попадания случайны, среднее значение общей реакции прибора в соответствии с (2.1.5) дается выражением

$$\left\langle \sum_{\sigma=1}^{s} \psi(\tau_\sigma) \right\rangle = \sum_{s=1}^{\infty} \frac{1}{(s-1)!} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau_1 \ldots d\tau_s Q_s(\tau_1, \ldots, \tau_s)\, \psi(\tau_1) =$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\tau_1) f_1(t_1)\, dt_1. \qquad (2.3.5)$$

Средний квадрат U имеет вид

$$\left\langle \sum_{\sigma} \psi(\tau_\sigma) \sum_{\sigma'} \psi(\tau_{\sigma'}) \right\rangle = \left\langle \sum_{\sigma} \psi(\tau_\sigma)^2 \right\rangle + \left\langle \sum_{\sigma \neq \sigma'} \psi(\tau_\sigma)\, \psi(\tau_{\sigma'}) \right\rangle =$$

$$= \int \psi(t_1)^2 f_1(t_1)\, dt_1 + \iint \psi(t_1)\, \psi(t_2)\, f_2(t_1, t_2)\, dt_1\, dt_2.$$

Можно продолжить это рассуждение, вычисляя высшие моменты, и таким путем вычислить полную характеристическую функцию U. Но тот же самый результат можно получить намного более простым способом, если сначала ввести производящий функционал для f_n.

В гл. 1 было показано, как использование производящей функции моментов упрощает обращение с моментами и кумулянтами. Сейчас мы введем аналогичную технику для f_n. Однако вместо вспомогательной переменной k нам теперь понадобится вспомогательная *функция*, или «пробная функция» $v(t)$, а вместо производящей функции у нас будет тогда *функционал*, т. е. величина, зависящая от всех v, взятых для $-\infty < t < \infty$ (их обозначают квадратными скобками). Производящий функционал для f_n имеет вид

$$L([v]) = \left\langle \prod_{\sigma=1}^{s} \{1 + v(\tau_\sigma)\} \right\rangle. \qquad (2.3.6)$$

Раскрывая произведение, получаем

$$L([v]) = 1 + \left\langle \sum_{\sigma} v(\tau_\sigma) \right\rangle + \left\langle \sum_{\sigma < \sigma'} v(\tau_\sigma)\, v(\tau_{\sigma'}) \right\rangle + \ldots =$$

$$= 1 + \int v(t_1) f_1(t_1)\, dt_1 + \frac{1}{2} \int v(t_1)\, v(t_2)\, f_2(t_1, t_2)\, dt_1\, dt_2 + \ldots =$$

$$= 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \int v(t_1)\, v(t_2) \ldots v(t_n)\, f_n(t_1, t_2, \ldots, t_n)\, dt_1\, dt_2 \ldots dt_n. \qquad (2.3.7)$$

Получилось, что f_n являются коэффициентами разложения функционала L по степеням пробной функции v, так что знание функционала $L([v])$ для всех функций v однозначно определяет все f_n.

Для того чтобы найти следствие из этого результата, мы выразим v через другую функцию u с помощью равенства

$$v(t) = e^{iu(t)} - 1,$$

тогда тождество (2.3.7) дает

$$\left\langle \exp\left[i \sum_{\sigma} u(\tau_\sigma) \right] \right\rangle = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \int \{e^{iu(t_1)} - 1\} \ldots \{e^{iu(t_n)} - 1\} \times$$
$$\times f_n(t_1, \ldots, t_n)\, dt_1 \ldots dt_n. \quad (2.3.8)$$

Упражнение. Покажите, что этот результат сразу приводит к выражению характеристической функции $\langle e^{ikU} \rangle$ через f_n, где U обозначает то же самое, что и выше.

Упражнение. Проверьте (2.3.7) и (2.3.8) для независимых точек.

Упражнение. Докажите (2.3.8) непосредственно, т. е. раскладывая левую часть в ряд Тейлора и выражая каждый член через сумму, включающую несколько f_n.

Упражнение. Пусть $\{t_\mu\}$ — множество моментов времени, содержащее m точек. Тогда $m \times m$-матрица $f_2(t_\mu, t_\nu)$ положительно определена или по крайней мере неотрицательна.

Упражнение. Выведите следующее соотношение для характеристической функции распределения числа точек N в заданном интервале (t_a, t_b):

$$\langle e^{ikN} \rangle = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(e^{ik} - 1)^n}{n!} \int_{t_a}^{t_b} f_n(t_1, t_2, \ldots, t_n)\, dt_1\, dt_2 \ldots dt_n. \quad (2.3.9)$$

Как следует из него, вероятность того, что в интервале (t_a, t_b) не окажется ни одной точки, дается выражением

$$p_0(t_a, t_b) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int_{t_a}^{t_b} f_n(t_1, t_2, \ldots, t_n)\, dt_1\, dt_2 \ldots dt_n = L([1 - \chi]), \quad (2.3.10)$$

где χ — индикатор (t_a, t_b).

Упражнение. Возьмите ν неперекрывающихся интервалов и выразите характеристическую функцию $G(k_1, k_2, \ldots, k_r)$ совместного распределения вероятности их чисел заполнения $N_1, N_2, \ldots, N_\nu$ через f_n.

Упражнение. Докажите следующее тождество для функциональных производных от L:

$$\frac{\delta^r L}{\delta v(Q_1) \ldots \delta v(Q_r)} =$$
$$= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \int v(t_1) \ldots v(t_n) f_{r+n}(Q_1, \ldots, Q_r, t_1, \ldots, t_n)\, dt_1 \ldots dt_n. \quad (2.3.11)$$

При подстановке $v \equiv 0$ это выражение сводится к $f_r(Q_1, \ldots, Q_r)$.

Упражнение. Соотношение (2.3.1) между Q_s и f_n представляет собой линейное отображение в векторном пространстве объектов вида (2.1.4). Матрица этого отображения Ω дается выражением

$$(n;\, t_1, t_2, \ldots, t_n \,|\, \Omega \,|\, s;\, \tau_1, \tau_2, \ldots, \tau_s) =$$
$$= \frac{1}{(s-n)!} \delta(t_1 - \tau_1)\, \delta(t_2 - \tau_2) \ldots \delta(t_n - \tau_n), \quad (2.3.12)$$

где $\frac{1}{(s-n)!} = 0$ при $s < n$.

Хотя все физические процессы ограничены во времени, на практике довольно часто это можно не учитывать. Так, при изучении шума в электронных устройствах обычно не интересуются эффектами, связанными с включением и выключением. Описание, в которое длительность процесса не входит, с одной стороны, проще, а с другой — является более адекватным. Таким образом, мы приходим к изучению множеств точек с плотностями, не стремящимися к нулю при $t \to \pm\infty$. Такие множества не могут быть описаны с помощью Q_s, так как условие нормировки (2.1.3) требует обращения Q_s на бесконечности в нуль. Понятно, что этот недостаток можно устранить с помощью введения вымышленного длинного интервала времени T, но это приведет к появлению в уравнениях величины, не имеющей отношения к делу. В то же время описание функций f_n переносится на этот случай без дополнительных ухищрений.

Особый интерес представляют случайные события, у которых стохастические свойства не меняются со временем. Их называют *стационарными* и определяют соотношением

$$f_n(t_1+\tau,\ t_2+\tau,\ \ldots,\ t_n+\tau) = f_n(t_1,\ t_2,\ \ldots,\ t_n) \text{ (для всех } n,\ t_j,\ \tau). \tag{2.3.13}$$

В частности, плотность событий f_1 может быть постоянной. Как уже говорилось в § 2.2, если случайные события стационарны и независимы, множество состояний называют дробовым шумом. В этом случае в соответствии с (2.3.4) получаем

$$f_n(t_1,\ t_2,\ \ldots,\ t_n) = (f_1)^n.$$

Следовательно, дробовой шум полностью определяется единственным параметром, а именно своей плотностью. Альтернативное название «пуассоновский процесс» показывает, что он может рассматриваться как стохастический процесс (мы в этом убедимся в § 4.2).

Упражнение. Вычислите $L([v])$ для дробового шума.

Упражнение. Примените результаты (2.3.9) и (2.3.10) к дробовому шуму.

Упражнение. Катод подогревают переменным током таким образом, что вероятность испускания электрона в интервале времени $(\tau,\ \tau+d\tau)$ есть $\Phi(\tau)\,d\tau$ независимо от испускания других электронов. Найдите функции f_n, описывающие события, состоящие в опускании электронов.

2.4. ФОРМУЛА ОБРАЩЕНИЯ

Последовательность уравнений (2.3.1) выражает функции f_n через линейные комбинации Q_s. В этом параграфе мы получим обратные формулы, которые выразят Q_s через f_n. Так как эти результаты не будут нами использоваться в дальнейшем, материал настоящего параграфа можно рассматривать в качестве упражнения.

Первый шаг состоит в задании величины I, которая действует как единичный оператор на пространстве состояний. Возьмем точку в пространстве состояний, т. е. положительное целое r и действи-

тельные числа $\theta_1, \theta_2, \ldots, \theta_r$. К каждому θ_ρ присоединим окрестности длиной ε и определим индикатор:

$$\chi_\rho(t) = 1 \quad \text{для} \quad \theta_\rho - {}^1/_2\,\varepsilon < t < \theta_\rho + {}^1/_2\varepsilon,$$
$$\chi_\rho(t) = 0 \quad \text{для} \quad |t - \theta_\rho| \geqslant {}^1/_2\varepsilon.$$

Будем считать ε настолько малым, что никакие две окрестности не перекрываются, и в конечном счете ε устремим к нулю. Пусть также $\bar{\chi}$ — характеристическая функция дополнения всех окрестностей

$$\bar{\chi}(t) = 1 - \sum_{\rho=1}^{r} \chi_\rho(t).$$

Кроме того, мы введем $\Delta(n)$ для символа Кронекера $\delta_{n,0}$. Для $\Delta(n)$ используем следующее представление:

$$\Delta(n) = \int_0^{2\pi} e^{ikn} \frac{dk}{2\pi}. \tag{2.4.1}$$

И наконец, определим функцию I в пространстве состояний с помощью соотношения

$$I_s(\tau_1, \tau_2, \ldots, \tau_s) = \varepsilon^{-r} \sum_{\sigma_1=1}^{s} \chi_1(\tau_{\sigma_1}) \cdot \sum_{\sigma_2=1}^{s} \chi_2(\tau_{\sigma_2}) \ldots$$
$$\ldots \sum_{\sigma_r=1}^{s} \chi_r(\tau_{\sigma_r}) \cdot \Delta\left(\sum_{\sigma=1}^{s} \bar{\chi}(\tau_\sigma)\right). \tag{2.4.2}$$

Эта функция зависит параметрически от r, $\theta_1, \theta_2, \ldots, \theta_r$ и ε.

В качестве *второго шага* вычислим среднее значение I, выразив его через θ_s:

$$\langle I \rangle = \varepsilon^{-r} \sum_{s=0}^{\infty} \frac{1}{s!} \sum_{\sigma_1, \ldots, \sigma_r} \int \chi_1(\tau_{\sigma_1}) \ldots \chi_r(\tau_{\sigma_r}) \times$$
$$\times \Delta\left(\sum_{\sigma=1}^{s} \bar{\chi}(\tau_\sigma)\right) \cdot Q_s(\tau_1, \ldots, \tau_s)\, d\tau_1 \ldots d\tau_s.$$

Для того чтобы получить ненулевой вклад, нужно выбрать из переменных интегрирования набор r переменных и приписать им r окрестностей:

$$\langle I \rangle = \sum_{s=r}^{\infty} \frac{1}{s!} \binom{s}{r} r! \int \Delta\left(\sum_{\sigma=r+1}^{s} \bar{\chi}(\tau_\sigma)\right) \times$$
$$\times Q_s(\theta_1, \ldots, \theta_r, \tau_{r+1}, \ldots, \tau_s)\, d\tau_{r+1} \ldots d\tau_s,$$

где ε считалось достаточно малым, чтобы заменить каждый множитель $\varepsilon^{-1}\chi_\rho(t)$ дельта-функцией. Кроме того, подынтегральное выражение обращается в нуль, как только одна из оставшихся пере-

менных интегрирования попадает в дополнение окрестностей. Поэтому остается только область интегрирования порядка ε^{s-r}. Следовательно, в пределе выживает только член с $s=r$, так что

$$\langle I\rangle = Q_r(\theta_1, \theta_2, \ldots, \theta_r). \tag{2.4.3}$$

Третий шаг состоит в расписывании среднего I через f_n. Используя (2.4.1), получаем

$$\langle I\rangle = \varepsilon^{-r}\int_0^{2\pi}\frac{dk}{2\pi}\Big\langle \sum_{\sigma_1,\ldots,\sigma_r}\chi_1(\tau_{\sigma_1})\ldots\chi_r(\tau_{\sigma_r})\prod_{\sigma}\exp\left[ik\bar{\chi}(\tau_\sigma)\right]\Big\rangle.$$

Поскольку $\bar{\chi}(\tau_\sigma)$ — либо ноль, либо единица, получаем

$$\langle I\rangle = \varepsilon^{-r}\int_0^{2\pi}\frac{dk}{2\pi}\Big\langle \sum_{\sigma_1,\ldots,\sigma_r}\chi_1(\tau_{\sigma_1})\ldots\chi_r(\tau_{\sigma_r})\prod_{\sigma}\{1+(e^{ik}-1)\bar{\chi}(\tau_\sigma)\}\Big\rangle =$$

$$= \varepsilon^{-r}\int_0^{2\pi}\frac{dk}{2\pi}\sum_{n=0}^{\infty}(e^{ik}-1)^n\Big\langle\sum\chi_1(\tau_{\sigma_1})\ldots\chi_r(\tau_{\sigma_r})\bar{\chi}(\tau_{\sigma_{r+1}})\ldots\bar{\chi}(\tau_{\sigma_{r+n}})\Big\rangle. \tag{2.4.4}$$

Кратное суммирование проводится по всем значениям $\sigma_1, \sigma_2, \ldots, \sigma_r$, но при этом подразумевается выполнение неравенств $\sigma_{r+1} < \sigma_{r+2} < \ldots < \sigma_{r+n}$. Каждый член, в котором два значения σ совпадают, равен нулю. Следовательно, среднее значение под интегралом в (2.4.4) имеет вид

$$\langle\ \rangle = \frac{1}{n!}\int\chi_1(t_1)\ldots\chi_r(t_r)\chi(t_{r+1})\ldots\bar{\chi}(t_{r+n})f_{r+n}(t_1,\ldots,t_{r+n})\,dt_1\ldots dt_{r+n}. \tag{2.4.5}$$

(Множитель $1/n!$ заменяет ограничения на $\sigma_{r+1}, \ldots, \sigma_{r+n}$.) Для малых ε функции χ_ρ сводятся к дельта-функциям, а $\bar{\chi}$ равна единице, исключая набор интервалов с общей длиной $r\varepsilon$. Следовательно, (2.4.5) сводится к

$$\langle\ \rangle = \frac{\varepsilon^r}{n!}\int f_{r+n}(\theta_1,\ldots,\theta_r\ t_{r+1},\ldots,t_{r+n})\,dt_{r+1}\ldots dt_{r+n} + O(\varepsilon^{r+1}).$$

Подставляя это выражение в (2.4.4) и замечая, что интегрирование приводит множитель $(e^{ik}-1)$ к $(-1)^n$, находим среднее значение I, выраженное через f_n в пределе $\varepsilon\to 0$:

$$\langle I\rangle = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^n}{n!}\int f_{r+n}(\theta_1,\ldots,\theta_r,\ t_{r+1},\ldots,t_{r+n})\,dt_{r+1}\ldots dt_{r+n}. \tag{2.4.6}$$

Окончательный результат определяем, комбинируя (2.4.6) и (2.4.3). После упрощения обозначений получаем

$$Q_r(\theta_1,\ldots,\theta_r) = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^n}{n!}\int f_{r+n}(\theta_1,\ldots,\theta_r,\ t_1,\ldots,t_n)\,dt_1\ldots dt_n. \tag{2.4.7}$$

Эта формула дает выражение набора функций Q_1 через набор функций f_n и представляет собой обращение формулы (2.3.1).

Упражнение. Проверьте результат явно для случая независимых точек.

Упражнение. Предположим, мы обобщили определение I, положив $\Delta(n) = \delta_{n,N}$ с некоторым фиксированным целым N. Какое выражение получим в результате для $\langle I \rangle$ и какова его интерпретация?

Упражнение. Вероятность иметь в точности $N \geqslant 1$ точек в заданном интервале (t_a, t_b) дается выражением

$$\left\langle \Delta\left(\sum_{\sigma} \chi(\tau_\sigma) - N\right)\right\rangle,$$

где χ — индикатор интервала. Покажите, что эта вероятность имеет вид

$$p_N(t_a, t_b) = \frac{1}{N!} \sum_{n=N}^{\infty} \frac{(-1)^{n-N}}{(n-N)!} \int_{t_a}^{t_b} f_n(t_1, t_2, \ldots, t_n)\, dt_1\, dt_2 \ldots dt_n. \qquad (2.4.8)$$

Сравните результат с (2.3.9).

Упражнение. Матрица Ω, определенная в (2.3.12), отображает вектор $\{1, 0, 0\}$ в нуль. Получается, что мы нашли в (2.4.7) обратную к ней матрицу. Как разрешить этот парадокс?

Пример. Фотон движется в среде, в которой он с вероятностью β в единичное время порождает вторичный фотон с помощью стимулированного излучения. Допустим, вы хотите узнать распределение вероятности p_s числа s вторичных фотонов. Вероятность того, что n вторичных фотонов испускается в моменты $t_1, t_2, \ldots, t_n$ независимо от событий в другие моменты времени, есть

$$f_n(t_1, t_2, \ldots, t_n) = \beta^n.$$

Используя (2.4.7), получаем

$$Q_s(\tau_1, \tau_2, \ldots, \tau_s) = \beta^s e^{-\beta T},$$

где T — время движения в среде. Следовательно,

$$p_s = \frac{1}{s!} \int_0^T Q_s(\tau_1, \ldots, \tau_s)\, d\tau_1 \ldots d\tau_s = \frac{(\beta T)^s}{s!} e^{-\beta T}. \qquad (2.4.9)$$

Этот результат становится очевидным, если заметить, что события, состоящие в испускании вторичных фотонов, статистически независимы.

Предположим далее, что среда безгранична, но за единичное время первичный фотон может поглотиться с вероятностью α. Тогда

$$f_n(t_1, t_2, \ldots, t_n) = \beta^n \exp\left[-\alpha \max t_\nu\right].$$

Аналогичные вычисления теперь дают при условии $\alpha > \beta$

$$p_s = \frac{1}{s!} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} (n+s)! \left(\frac{\beta}{\alpha}\right)^{n+s} = \frac{(\beta/\alpha)^s}{(1+\beta/\alpha)^{s+1}}. \qquad (2.4.10)$$

Соответствующая производящая функция вероятности имеет вид

$$F(z) = \sum_{s=0}^{\infty} z^s p_s = \frac{\alpha}{\alpha + \beta - \beta z}. \qquad (2.4.11)$$

Полное число фотонов, порожденных в каскаде (вторичных, третичных и т. д.), будет вычислено в (3.6.11).

2.5. КОРРЕЛЯЦИОННАЯ ФУНКЦИЯ

Кроме функций распределения f_n полезно ввести еще одну последовательность симметричных функций g_m, называемых *корреляционными функциями*. Эти функции определяют через f_n с помощью следующего кластерного разложения:

$$
\begin{aligned}
&f_1(t_1) = g_1(t_1),\\
&f_2(t_1, t_2) = g_1(t_1)\, g_1(t_2) + g_2(t_1, t_2),\\
&f_3(t_1, t_2, t_3) = g_1(t_1)\, g_1(t_2)\, g_1(t_3) +\\
&\quad + g_1(t_1)\, g_2(t_2, t_3) + g_1(t_2)\, g_2(t_1, t_3) + g_1(t_3)\, g_2(t_1, t_2) + g_3(t_1, t_2, t_3),\\
&\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots
\end{aligned}
\tag{2.5.1}
$$

Общее разложение функции f_n получается с помощью следующего правила.

1. Разбиваем переменные $t_1, t_2, \ldots, t_n$ на подмножества всеми возможными способами (не считая пустого множества, но включая полное множество, как одно из возможных подмножеств).

2. Для каждого разбиения берем произведение функций g для отдельных подмножеств.

3. Суммируем эти произведения по всем возможным разбиениям. Например, f_6 содержит член (см. рис. 2)

$$g_1(t_6)\, g_2(t_1, t_3)\, g_3(t_2, t_4, t_5). \tag{2.5.2}$$

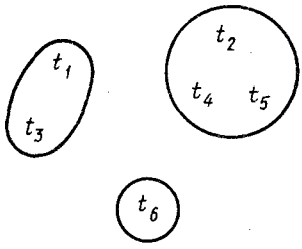

Рис. 2. Член (2.5.2) в кластерном разложении функции f_6

Вскоре мы используем следующую эквивалентную формулировку правила:

1′. Представим целое число n в виде суммы положительных целых чисел, не обязательно различных. Чтобы представить их в виде суммы разных чисел, выберем неотрицательные целые k такие, что

$$k_1 \cdot 1 + k_2 \cdot 2 + k_3 \cdot 3 + \ldots + k_n \cdot n = n.$$

(При этом условии все k, начиная с k_n и далее, авмоматически равны нулю.) Такое представление числа n будем называть *разбиением* n.

2′. Образуем произведение k_1 множителей g_1, k_2 множителей g_2 и т. д.

$$g_1(t_1)\, g_1(t_2) \ldots g_1(t_{k_1})\, g_2(t_{k_1+1}, t_{k_1+2}) \ldots .$$

3′. Строим все различные члены, соответствующие данному разбиению, получающиеся перестановкой переменных t. При этом члены не считаются разными, если они отличаются один от другого только порядком переменных в отдельных функциях g, или порядком мно-

жителей g. Одному разбиению соответствует

$$\frac{n!}{k_1!\,k_2!\ldots k_n!\,(1!)^{k_1}(2!)^{k_2}\ldots(n!)^{k_n}} \tag{2.5.3}$$

членов, построенных указанным способом.

4′. Суммируем все эти члены, а затем выполняем суммирование по всем возможным разбиениям числа N:

$$f_n(t_1,\ t_2,\ \ldots,\ t_n)=\sum_{\text{разбиения}}\ \sum_{\text{перестановки}} g_1^{(k_1)}g_2^{(k_2)}\ldots g_n^{(k_n)}, \tag{2.5.4}$$

где введены сокращенные обозначения того, что имеется k_1 множителей g_1 с различными аргументами, k_2 множителей g_2 и т. д.

Теперь докажем фундаментальное тождество

$$1+\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n!}\int v(t_1)\,v(t_2)\ldots v(t_n)\,f_n(t_1,\ t_2,\ \ldots,\ t_n)\,\mathrm{d}t_1\ldots\mathrm{d}t_n=$$
$$=\exp\left[\sum_{m=1}^{\infty}\frac{1}{m!}\int v(t_1)\,v(t_2)\ldots v(t_m)\,g_m(t_1,\ t_2,\ \ldots,\ t_m)\,\mathrm{d}t_1\,\mathrm{d}t_2\ldots\mathrm{d}t_m\right]. \tag{2.5.5}$$

Подставляем в первую строку f_n в виде (2.5.1). Различные члены, полученные в соответствии с п. 3′ правила и принадлежащие к одному разбиению, дают одинаковые вклады в интеграл. Тогда первая строка может быть записана в виде

$$1+\sum_{n}\ \sum_{\text{разбиения}}\frac{1}{k_1!}\left\{\int v(t)\,g_1(t)\,\mathrm{d}t\right\}^{k_1}\times$$
$$\times\frac{1}{k!}\left\{\frac{1}{2!}\int v(t')\,v(t'')\,g_2(t',\ t'')\,\mathrm{d}t'\,\mathrm{d}t''\right\}^{k_2}\ldots. \tag{2.5.6}$$

Суммирование проводится по всем значениям n и для каждого отдельного значения n по всем его разбиениям. Но каждый набор целых чисел k является разбиением некоторого n. И наоборот, все разбиения всех чисел n получаются присвоением каждому k в выражении (2.5.6) неотрицательного целого значения. Единственным исключением является случай одновременного обращения в нуль всех чисел k. Следовательно, эту сумму можно записать в виде кратной суммы по всем значениям k, а один недостающий член дополняется дописыванием единицы перед всем выражением. Таким образом, для первой строки выражения (2.5.5) получаем

$$\sum_{k_1=0}^{\infty}\frac{1}{k_1!}\left\{\int v(t)\,g_1(t)\,\mathrm{d}t\right\}^{k_1}\sum_{k_2=0}^{\infty}\frac{1}{k_2!}\left\{\frac{1}{2!}\int v(t')\,v(t'')\,g_2(t',\ t'')\,\mathrm{d}t'\,\mathrm{d}t''\right\}^{k_2}\ldots.$$

Это выражение идентично второй строке формулы (2.5.5), что и требовалось доказать. Первая строка выражения (2.5.5) является

производящим функционалом (2.3.7) функции f_n. Следовательно, формула (2.5.5) может быть представлена в виде

$$\log L([v]) = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{m!} \int v(t_1) v(t_2) \ldots v(t_m) g_m(t_1, t_2, \ldots, t_m) \, dt_1 \, dt_2 \ldots dt_m. \tag{2.5.7}$$

Из этой записи видно, что $\log L$ является производящим функционалом функции g_m, так же как кумулянты генерировались логарифмом производящей функции моментов. Естественно, с помощью (2.5.7) можно дать *определение* g_m и затем доказать, что они удовлетворяют соотношениям (2.5.1).

Основной причиной введения корреляционных функций является их следующее свойство: если точки независимы, все g_m при $m > 1$ равны нулю (это свойство может быть легко доказано). Если возникает физическая ситуация, в которой точки являются почти независимыми, то можно ожидать, что g_m будут быстро убывать. Однако это указание скорее является физическим соображением, чем математической истиной.

Во многих случаях можно ожидать, что точки будут статистически зависимыми только в течение коротких отрезков времени. Формальное выражение этого «свойства кластеризации» можно записать в виде

$$\lim_{\tau \to \infty} g_{m+m'}(t_1, t_2, \ldots, t_m, t_{m+1} + \tau, t_{m+2} + \tau, \ldots, t_{m+m'} + \tau) = 0 \tag{2.5.8}$$

(для всех m, m', $t_1, \ldots, t_{m+m'}$). То же самое свойство, выраженное в терминах f_n, имеет вид

$$\lim_{\tau \to \infty} [f_{n+n'}(t_1, t_2, \ldots, t_n, t_{n+1} + \tau, t_{n+2} + \tau, \ldots, t_{n+n'} + \tau) - \\ - f_n(t_1, t_2, \ldots, t_n) f_{n'}(t_{n+1} + \tau, t_{n+2} + \tau, \ldots, t_{n+n'} + \tau)] = 0 \tag{2.5.9}$$

(для всех n, n', $t_1, \ldots, t_{n+n'}$), иногда его называют *свойством произведения*.

Упражнение. Проверьте (2.5.5) для независимых точек.

Упражнение. Покажите, что (2.5.1) и (2.5.4) эквивалентны.

Упражнение. Используя результат (2.3.9), покажите, что характеристическая функция для N точек в интервале (t_a, t_b) имеет вид

$$\langle e^{ikN} \rangle = \exp \left[\sum_{m=1}^{\infty} \frac{(e^{ik} - 1)^m}{m!} \int_{t_a}^{t_b} g_m(t_1, t_2, \ldots, t_m) \, dt_1 \, dt_2 \ldots dt_m. \right. \tag{2.5.10}$$

В частности, вероятность того, что в интервале не окажется точек, такова:

$$p_0(t_a, t_b) = \exp \left[\sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m!} \int_{t_a}^{t_b} g_m(t_1, t_2, \ldots, t_m) \, dt_1 \, dt_2 \ldots dt_m. \right. \tag{2.5.11}$$

2.6. ВРЕМЯ ОЖИДАНИЯ

Предположим, что задано случайное множество точек, представляющее последовательность событий. Можно поставить следующий вопрос: если мы начинаем наблюдение в некоторый момент времени t_0, как долго нам придется ждать, пока произойдет следующее событие? Естественно, время θ от момента времени t_0 до следующего события является случайной переменной, принимающей значения в интервале $(0, \infty)$, а ее плотность вероятности $w(\theta;\ t_0)$ является величиной, которой мы интересуемся (w параметрически зависит от t_0, если множество событий не стационарно). Этот вопрос возникает, в частности, в задачах теории массового обслуживания. Функцию распределения $w(\theta;\ t_0)$ попадания фотонов, излученных при люминесценции, измеряют также с помощью электронных приборов.

Мы хотим выразить функцию $w(\theta;\ t_0)$ через величины, определяющие случайное множество. Обозначим $p_0(t_0,\ t_0+\theta)$ вероятность того, что между моментами времени t_0 и $t_0+\theta$ события не происходит. Тогда $w(\theta;\ t_0)\,d\theta$ — вероятность того, что первое событие с момента времени t_0 произойдет в промежутке времени между $t_0+\theta$ и $t_0+\theta+d\theta$,— равна $p_0(t_0,\ t_0+\theta)-p_0(t_0,\ t_0+\theta+d\theta)$. Следовательно,

$$w(\theta;\ t_0)=-\frac{d}{d\theta}p_0(t_0,\ t_0+\theta). \tag{2.6.1}$$

Величина $p_0(t_0,\ t_0+\theta)$ выражается через функции распределения с помощью соотношения (2.3.10). Подставляя этот результат, находим

$$w(\theta;\ t_0)=f_1(t_0+\theta)+ \\ +\sum_{n=1}^{\infty}\frac{(-1)^n}{n!}\int_{t_0}^{t_0+\theta} f_{n+1}(t_0+\theta,\ t_1,\ \ldots,\ t_n)\,dt_1\ldots dt_n. \tag{2.6.2}$$

Это соотношение выражает распределение вероятности времени ожидания через последовательность функций распределения случайного множества.

Упражнение. Найдите $w(\theta;\ t_0)$ для независимых событий. В частности, для дробового шума справедливо выражение

$$w(\theta;\ t_0)=f_1\exp[-\theta f_1]. \tag{2.6.3}$$

Упражнение. Выведите следующую формулу, выражающую $w(\theta;\ t_0)$ через корреляционные функции:

$$w(\theta;\ t_0)=p_0(t_0,\ t_0+\theta)\,[g_1(t_0+\theta)+ \\ +\sum_{m=1}^{\infty}\frac{(-1)^m}{m!}\int_{t_0}^{t_0+\theta} g_{m+1}(t_0+\theta,\ t_1,\ t_2,\ \ldots,\ t_m)\,dt_1\,dt_2\ldots dt_m]. \tag{2.6.4}$$

Упражнение. Покажите, что

$$w(\theta;\ t_0)=\left[\frac{\delta L(|v|)}{\delta v(t_0+\theta)}\right]_{v=-\chi} \tag{2.6.5}$$

В правой части этого выражения нужно сначала вычислить вариационную производную по v в точке $t_0+\theta$, а затем вместо v подставить отрицательный индикатор $(t_0,\ t_0+\theta)$.

Можно сформулировать еще одну задачу: *предположим, мы зарегистрировали событие в момент времени* t_a, требуется найти функцию $w(\theta\,|\,t_a)$, описывающую распределение вероятности промежутков времени, по истечении которых произойдет следующее событие. Совместная вероятность того, что одно событие произойдет в промежутке времени между $t_a-\mathrm{d}t_a$ и t_a, и того, что в течение времени $(t_b,\ t_b+\mathrm{d}t_b)$ событие не произойдет, дается формулой

$$[p_0(t_a,\ t_b)-p_0(t_a,\ t_b+\mathrm{d}t_b)]-$$
$$-[p_0(t_a-\mathrm{d}t_a,\ t_b)-p_0(t_a-\mathrm{d}t_a,\ t_b+\mathrm{d}t_b)]=-\mathrm{d}t_a\,\mathrm{d}t_b\,\frac{\partial^2 p(t_a,\ t_b)}{\partial t_a\,\mathrm{d}t_b}. \quad (2.6.6)$$

Условную вероятность события в промежутке $(t_b,\ t_b+\mathrm{d}t_b)$ при условии того, что другое событие произошло в интервале $(t_a-\mathrm{d}t_a,\ t_a)$, можно получить разделив выражение (2.6.6) на $f_1(t_a)\,\mathrm{d}t_a$ — вероятность события в промежутке $(t_a-\mathrm{d}t_a,\ t_a)$ (правило Байеса (1.3.3)). Тогда распределение вероятности времени ожидания t_b-t_a после регистрации события в момент t_a дается формулой

$$w(t_b-t_a\,|\,t_a)=-\frac{1}{f_1(t_a)}\,\frac{\partial^2 p_0(t_a,\ t_b)}{\partial t_a\,\mathrm{d}t_b}. \quad (2.6.7)$$

С помощью (2.3.10) распределение вероятности можно выразить через функции распределения f_n:

$$w(t_b-t_a\,|\,t_a)=\frac{1}{f_1(t_a)}\Big[f_2(t_a,\ t_b)+$$
$$+\sum_{n=1}^{\infty}\frac{(-1)^n}{n!}\int_{t_a}^{t_b} f_{n+2}(t_a,\ t_b,\ t_1,\ \ldots,\ t_n)\,\mathrm{d}t_1\ldots\mathrm{d}t_n\Big]. \quad (2.6.8)$$

Примечание. Рассмотрим еще один вывод этого результата, который позволит нам его лучше понять. Случайное множество точек на оси времени можно представить как ансамбль большого количества отдельных множеств выборочных значений. Из этого ансамбля выделим подансамбль таких множеств выборочных значений, которые содержат одну точку, принадлежащую интервалу $t_a-\mathrm{d}t_a$. Этот подансамбль, в свою очередь, представляет собой случайное множество точек. Величины, принадлежащие этому новому случайному множеству, будем обозначать с помощью тильды. Искомое распределение времени ожидания $w(\theta\,|\,t_a)$ совпадает с $\tilde{w}(\theta;\ t_a)$ и представляет собой аналог (2.6.1), примененный к подансамблю с заменой t_0 на t_a.

Заметим, что точка с запятой в (2.6.1) заменяет черту в (2.6.7)!

Для того чтобы определить $\tilde{w}(\theta;\ t_a)$, можно использовать формулу (2.6.2) при условии, что мы найдем сначала $\tilde{f}_n$. Теперь функция распределения $\tilde{f}_n$ может быть интерпретирована следующим образом: $\tilde{f}_n(t_1,\ t_2,\ \ldots,\ t_n)\,\mathrm{d}t_1\,\mathrm{d}t_2\ldots\mathrm{d}t_n$ — это вероятность для интервалов $(t_1,\ t_1+\mathrm{d}t_1)$, $(t_2,\ t_2+\mathrm{d}t_2)$ и т. д. содержать точку при условии того, что одна точка лежит в интервале $(t_a-\mathrm{d}t_a,\ t_a)$.

Тогда правило Байеса дает

$$\tilde{f}_n(t_1, t_2, \ldots, t_n) = \frac{f_{n+1}(t_a, t_1, t_2, \ldots, t_a)}{f_1(t_a)} \qquad (n = 1, 2, \ldots). \qquad (2.6.9)$$

Таким образом, мы выразили функции распределения подансамбля через исходные функции распределения. В соответствии с (2.3.10) получаем

$$\tilde{p}_a(t_a, t_a+\theta) = 1 + \frac{1}{f_1(t_a)} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int_{t_a}^{t_a+\theta} f_{n+1}(t_a, t_1, \ldots, t_n)\, dt_1 \ldots dt_n \qquad (2.6.10)$$

и в соответствии с (2.6.1) получаем

$$\tilde{w}(\theta; t_a) = \frac{1}{f_1(t_a)} [f_2(t_a, t_a+\theta) + \\ + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int_{t_a}^{t_a+\theta} f_{n+2}(t_a, t_a+\theta, t_1, \ldots, t_n)\, dt_1 \ldots dt_n].$$

Эта формула совпадает с (2.6.8).

Упражнение. Найдите распределение промежутков времени для независимых событий.

Упражнение. Для дробового шума $w(\theta; t_0) = w(\theta_0)$ не зависит от t_0. Покажите, что $w(\theta \mid t_a) = w(\theta)$ также обладает этим свойством. Тогда время ожидания, отсчитываемое от произвольного момента времени, окажется тем же самым, что и отсчитываемое от одного из событий. С одной стороны, это очевидно, так как момент времени, в который произошло событие, можно выбрать в качестве произвольного момента времени t_0 и этот выбор не влияет на статистику остальных событий. С другой стороны, это парадоксально, так как среднее время, прошедшее *с момента последнего события, предшествующего времени* t_0, должно быть тем же самым. Следовательно, среднее время между событиями, взятое по обе стороны от t_0, удваивается. Поясните этот парадокс. [См. обсуждение в „Weglängenpäradoxon" by F. Zernike in Hanbruch der Physik, 4 (Geiger and Scheel eds., Springer, Berlin 1929), p. 440].

Упражнение. Покажите, что для дробового шума распределение промежутков времени между данным событием и k-м событием, считая с данного, имеет вид

$$w_k(\theta) = \nu^k \theta^{k-1} e^{-\nu\theta}/(k-1)! \qquad (2.6.11)$$

(χ^2-распределение, которое в этой связи называют также «эрланг-k-распределением» *).

Упражнение. Покажите, что (ср. (6.5))

$$w(t_b - t_a) \mid t_a) = \frac{1}{f_1(t_a)} \left| \frac{\delta^2 L([v])}{\delta v(t_a)\, \delta v(t_b)} \right|_{v=-\chi}.$$

Упражнение. Обобщите (2.6.8) для случая, когда задано более одного события.

Упражнение. Докажите (2.6.9), сначала определив условную вероятность $\tilde{Q}_s$ для подансамбля, а затем выведите из нее соответствующую функцию $\tilde{f}_n$.

Упражнение. Если событие было зарегистрировано в момент времени t_a, то плотность вероятности для регистрации некоторого другого события (не обязательно следующего за ним) в момент времени t_b составляет $f_2(t_a, t_b)/f_1(t_a)$. *Парная функция* распределения определяется соотношением

$$g(t_a, t_b) = \frac{f_2(t_a, t_b)}{f_1(t_a) f_1(t_b)} = 1 + \frac{g_2(t_a, t_b)}{f_1(t_a) f_1(t_b)}.$$

---

* Kosten L., Stochastic Theory of Service Systems (Pergamon, Oxford, 1973).

Обобщите это определение на точки в трехмерном пространстве и убедитесь в том, что это есть парная функция распределения в статистической механике.

Упражнение. Условная вероятность $q_k(\tau \mid t_a)$ — это вероятность того, что, зарегистрировав событие в момент t_a, вы зарегистрируете еще k событий между t_a и $t_a+\tau$. Эту функцию называют *функцией Пальма*. Выразите $q_k(\tau \mid t_a)$ через f_n.

ГЛАВА 3
СТОХАСТИЧЕСКИЕ ПРОЦЕССЫ

В этой главе определяются стохастические процессы и некоторое количество вспомогательных концепций. Обсуждается вопрос, почему эти понятия применяются в физике. Выводятся их общие свойства, подробно рассматриваются некоторые примеры.

3.1. ОПРЕДЕЛЕНИЯ

Если определена стохастическая переменная X, из нее можно вывести бесконечное количество других стохастических переменных, а именно все величины Y, определенные с помощью некоторого отображения f как функции переменной X. Эти величины Y могут быть математическими объектами любого вида, в частности они могут быть и функциями, зависящими от дополнительной переменной t:

$$Y_X(t) = f(X,\ t).$$

Такую величину $Y(t)$ называют *случайной функцией* или, поскольку в большинстве случаев в качестве t берут время, *стохастическим процессом*. Таким образом, стохастический процесс — это просто функция двух переменных, одна из которых — время, а другая — стохастическая переменная X, определенная в гл. 1. Если вместо X подставить одно из ее возможных значений x, то получится обычная функция от t

$$Y_x(t) = f(x,\ t),$$

которую называют *выборочной функцией* или *реализацией* процесса. На физическом языке стохастический процесс можно представить как „ансамбль" таких выборочных функций.

На основе заданной плотности вероятности $P_X(x)$ переменной X легко образовать средние. Например,

$$\langle Y(t)\rangle = \int Y_x(t)\, P_X(x)\, \mathrm{d}x.$$

В более общем случае берем n значений $t_1,\ t_2,\ \ldots,\ t_n$ переменной времени (не обязательно все разные) и образуем n-й момент:

$$\langle Y(t_1)\, Y(t_2)\ \ldots\ Y(t_n)\rangle = \int Y_x(t_1)\, Y_x(t_2)\ \ldots\ Y_x(t_n)\, P_X(x)\, \mathrm{d}x. \qquad (3.1.1)$$

Представляет определенный интерес *автокорреляционная функция*

$$\varkappa(t_1, t_2) = \langle\langle Y(t_1) Y(t_2)\rangle\rangle = \langle\{Y(t_1) - \langle Y(t_1)\rangle\}\{Y(t_2) - \langle Y(t_2)\rangle\}\rangle = \langle Y(t_1) Y(t_2)\rangle - \langle Y(t_1)\rangle\langle Y(t_2)\rangle. \quad (3.1.2)$$

Для $t_1 = t_2$ она сводится к зависящей от времени дисперсии

$$\langle\langle Y(t)^2\rangle\rangle = \sigma^2(t).$$

Стохастический процесс называют *стационарным*, если моменты не меняются при сдвиге по времени, т. е. когда выполняется соотношение

$$\langle Y(t_1 + \tau) Y(t_2 + \tau) \ldots Y(t_n + \tau)\rangle = \langle Y(t_1) Y(t_2) \ldots Y(t_n)\rangle \quad (3.1.3)$$

для всех n, всех τ и всех $t_1, t_2, \ldots, t_n$. В частности, когда $\langle Y\rangle$ не зависит от времени, удобно вычесть эту константу из $Y(t)$ и иметь дело со случайным процессом $\tilde{Y}(t) = Y(t) - \langle Y\rangle$ с равным нулю средним значением. Автокорреляционная функция $\varkappa(t_1, t_2)$ стационарного процесса зависит только от $|t_1 - t_2|$ и не меняется при вычитании константы. Во многих случаях существует константа τ_c такая, что $\varkappa(t_1, t_2)$ обращается в ноль или становится пренебрежимо малой для $|t_1 - t_2| > \tau_c$. В таких случаях τ_c называют *автокорреляционным временем*.

Как отмечалось ранее в § 2.3, чисто стационарные процессы в природе не существуют (не считая лаборатории). Но когда продолжительность процессов намного превышает длительность изучаемого явления, их можно приближенно рассматривать как стационарные. Единственное условие состоит в том, что длительность должна быть много больше автокорреляционного времени. Процессы, не обладающие конечным τ_c, никогда не «забывают», что они были когда-то в прошлом включены, и поэтому не могут рассматриваться как приближенно стационарные.

Стохастическая величина $Y(t)$ может иметь несколько компонент $Y_j(t)$ $(j = 1, 2, \ldots, r)$. В таких случаях часто бывает удобно записывать ее как вектор $\mathbf{Y}(t)$. Тогда автокорреляционная функция заменяется на корреляционную матрицу:

$$K_{ij}(t_1, t_2) = \langle\langle Y_i(t_1) Y_j(t_2)\rangle\rangle. \quad (3.1.4)$$

Диагональные элементы представляют автокорреляции, недиагональные элементы — взаимные корреляции *. В случае стационарного процесса с нулевым средним значением это равенство сводится к следующему:

$$K_{ij}(\tau) = \langle Y_i(t) Y_j(t + \tau)\rangle = \langle Y_i(0) Y_j(\tau)\rangle.$$

---

* Эти термины общеприняты в физике, однако они не вполне согласуются с (1.3.8) и (1.3.9).

Отметим следующее очевидное свойство автокорреляционной функции стационарных процессов:

$$K_{ij}(\tau) = K_{ji}(-\tau). \tag{3.1.5}$$

Когда $Y(t)$ является комплексной величиной (например, амплитудой осцилляций), ее можно рассматривать как двухкомпонентный процесс, однако зачастую удобнее сохранить комплексные обозначения. В этом случае можно определить комплексную автокорреляционную функцию

$$\varkappa(\tau) \equiv \langle\langle Y(o)^* Y(\tau)\rangle\rangle = \varkappa(-\tau)^*, \tag{3.1.6}$$

которая часто является полезной, несмотря на то что она содержит меньше информации, чем корреляционная 2×2-матрица.

Упражнение. Пусть заданы функция $\psi(t)$, зависящая от t, и случайная переменная X. Тогда

$$Y(t) = \psi(t)\, X \tag{3.1.7}$$

является стохастическим процессом. Вычислите его n-й момент, дисперсию и автокорреляционную функцию (т. е. выразите их через стохастические свойства переменной X).

Упражнение. Найдите соотношение, связывающее корреляционную 2×2-матрицу комплексного процесса и его комплексную автокорреляционную функцию.

Упражнение. Возьмите в качестве X случайное множество точек (см. гл. 2) и определите стохастический процесс

$$Y(t) = \sum_{\sigma=1}^{s} \delta(t-\tau_\sigma). \tag{3.1.8}$$

Найдите $\langle Y(t)\rangle$ и $\langle Y(t_1)\, Y(t_2)\rangle$.

Упражнение. Тот же вопрос для процесса

$$Y(t) = \sum_{\sigma=1}^{s} \psi(t-\tau_\sigma), \tag{3.1.9}$$

где ψ — заданная функция конечной ширины.

Упражнение. Когда в (3.1.9) точки в случайном множестве τ_s независимы и распределены стационарно с плотностью ν, результат имеет вид

$$\langle Y\rangle = \nu \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\tau)\, d\tau, \quad \varkappa(t) = \nu \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\tau)\, \psi(t+\tau)\, d\tau. \tag{3.1.10}$$

Эти соотношения называют *теоремой Кэмпбелла* *, и мы будем называть этот процесс *процессом Кэмпбелла*.

Упражнение. Пусть Y — процесс Кэмпбелла. Найдите характеристическую функцию для значения $Y(t)$ в момент времени t. Покажите, что его кумулянты имеют вид

$$\langle\langle Y(t)^m\rangle\rangle = \nu \int_{-\infty}^{\infty} \{\psi(\tau)\}^m\, d\tau.$$

---

* Campbell N. R. Proc. Camb. Philos. Soc. 15,117 (1909); Rice S. O., Bell System Technical Journal, 23, 282 (1944) u 24,46 (1945), reprinted in Wax.

Упражнение. Пусть $Y(t)=\sin(\omega t+X)$, где X имеет постоянную плотность вероятности в интервале $(0,2\pi)$. Найдите автокорреляционную функцию процесса Y.

Упражнение. Для того же самого $Y(t)$ покажите, что характеристическая функция совместного распределения $Y(t_1)$, $Y(t_2)$ при $\omega=1$ имеет вид

$$J_0\left(\sqrt{k_1^2+k_2^2+2k_1k_2\cos(t_1-t_2)}\right)=\sum_{-\infty}^{\infty}(-1)^m J_m(k_1)\,J_m(k_2)\,e^{im(t_1-t_2)}.$$

Тогда $|y_1|<1$, $|y_2|<1$ и

$$P_2(y_1,\ t_1;\ y_2,\ t_2)=$$

$$=(1-y_1^2)^{-1/2}(1-y_2^2)^{-1/2}\left[1+\sum_{m=1}^{\infty}2^{m+1}T_m(y_1)\,T_m(y_2)\cos m(t_1-t_2)\right],$$

где T_m — полиномы Чебышева.

Упражнение. Пусть стохастический процесс $Y(t)$ определен соотношением

$$Y(t)=X_n \quad \text{для } \xi+n<t<\xi+n+1,$$

где n пробегает все целые значения, $\{X_n\}$ — бесконечное множество стохастических переменных с одинаковыми распределениями, ξ — стохастическая переменная в интервале $(0,1)$, имеющая постоянную плотность вероятности в этом интервале. Покажите, что $Y(t)$ — стационарный процесс, и найдите его автокорреляционную функцию.

3.2. СТОХАСТИЧЕСКИЕ ПРОЦЕССЫ В ФИЗИКЕ

Роль вероятности вообще и стохастических процессов в частности в физике является предметом многочисленных глубоких исследований. Здесь же мы просто хотим сделать несколько практических замечаний.

а. *Почему* стохастические процессы вошли в физику? Ответ состоит в том, что многие явления зависят от времени исключительно сложным образом, настолько сложным, что это исключает возможность их вычисления и даже наблюдения. Однако такие явления могут иметь средние черты, которые можно наблюдать и которые должны подчиняться простым законам. Например, точное мгновенное значение сил, действующих со стороны молекулы газа на поршень меняется исключительно быстро и непредсказуемо, но после интегрирования по малым временны́м интервалам (происходящим автоматически из-за инерции поршня) оно становится плавной функцией, подчиняющейся закону Бойля. Аналогично, мгновенные флуктуации тока в цепи, содержащей омическое сопротивление или вакуумную лампу, очень сложны, но после возведения в квадрат и вычисления интеграла по малым временам получается величина, связанная простыми законами с другими физическими величинами.

Часто высказывается мнение, что вероятностное рассмотрение в физике оправдывается тем, что мы пренебрегаем точным микроскопическим состоянием *. Однако это и другие антропоморфные

* Tolman R. C., цитированный в (3.1.5); Jaynes E. T., Phys. Rev. 106,620 и 108,171 (1957); The Maximum Entropy Formalism, Levine R. D. and Tribus M. eds., M.I.T. Press, Cambridge, Mass. 1979).

объяснения — только одна половина правды. В частности, при таком подходе не объясняется, почему некоторые переменные можно устранить усреднением, а другие, например полную энергию или химический состав газа, — нельзя. В действительности, *из опыта мы знаем*, что, несмотря на пренебрежение большинством микроскопических переменных, все же можно выявить закономерности макроскопического поведения и сформулировать их в виде общих законов. Таким образом, *ясно*, что точные значения этих микроскопических переменных не важны и, *следовательно*, по ним можно провести усреднение. Это свойство изучаемых систем, а не наблюдателя. Задача физики — объяснить, каким образом происходит это чудо и, в частности, понять, что отличает не имеющие отношения к делу микроскопические переменные от остальных макроскопических. Грубо говоря, переменные, которые быстро меняются во времени, — это несущественные переменные, хотя строгое разграничение переменных на существенные и несущественные затруднительно. Как мне кажется, это основная проблема статистической механики.

б. *Каким образом* стохастические процессы входят в физику? Для определенности рассмотрим одноатомный газ, состоящий из N молекул в ящике с жесткими отражающими стенками. Микросостояние этой системы определяется $6N$ координатами и импульсами. Выбираем фиксированный момент, который назовем «начальный момент времени»; $6N$ значений координат и импульса в этот момент времени обозначим x. С помощью уравнений движения начальное микросостояние единственным образом определяет микросостояние в любой другой момент времени. Физическая величина Y, связанная с системой, является функцией $6N$ переменных. Примерами таких величин могут служить число частиц в элементе объема или сила, действующая на поршень. Значение Y в момент t является функцией $Y_x(t)$, зависящей только от x, t.

Основная идея статистической механики состоит в том, что систему можно заменить соответствующим а н с а м б л е м таких систем, которые описываются теми же уравнениями движения, но имеют другие начальные микросостояния x. Структура ансамбля определяется функцией плотности $\rho(x)$ таким образом, что $\rho(x)\,\mathrm{d}x$ представляет число выборочных систем, обладающих начальными микросостояниями, принадлежащими элементу объема $\mathrm{d}x$. Подстановка ансамбля в случае отдельной системы превращает x в стохастическую переменную X. Множество выборочных значений X состоит из всех возможных микросостояний, а плотность вероятности с точностью до нормировки равна ρ:

$$P_X(x) = \frac{\rho(x)}{\int \rho(x')\,\mathrm{d}x'}.$$

Поскольку мы приняли эту основную идею, остается выбрать соответствующее распределение P_X, с его помощью вычислить средние и интерпретировать получившиеся числа как наблюдаемые значения

физических величин. *Ансамбль служит просто средством представления распределения вероятности*: вероятность того, что x принадлежит определенному элементу фазового пространства dx, равна доле выборочных систем ансамбля, принадлежащих этому интервалу.

Подстановка ансамбля для реально существующих систем приводит к тому, что каждая физическая величина $Y(t)$ становится стохастическим процессом, среднее значение и моменты которой можно связать с наблюдениями. Наблюдаемое давление на поршень отождествляется скорее со средним по ансамблю сил, с которыми отдельные молекулы действуют на поршень, чем со средним значением сил по времени. Вопрос о том, почему и в каком случае оба вида средних совпадают, является фундаментальной проблемой обоснования равновесной статистической механики, но выходит за пределы темы этой книги *.

Понятно, что такой подход не ограничен газом одноатомных молекул. Например, если тяжелая частица погружена в газ легких частиц, а x — начальные значения всех координат и импульсов тяжелой частицы и легких частиц, то $Y_x(t)$ может являться координатами или скоростью тяжелой частицы. Из теории броуновского движения (см. гл. 8) известно, что средняя скорость подчиняется макроскопическому закону затухания, в то время как его автокорреляционная функция определяет коэффициент диффузии. Опять-таки основная идея статистической механики (для стационарных процессов) состоит в том, что можно использовать среднее по ансамблю вместо среднего по времени, которое непосредственно связано с наблюдениями.

в. Но это еще не все, потому что усреднение по начальному состоянию x не упрощает задачу, так как для нахождения $Y_x(t)$ все еще необходимо решить микроскопические уравнения движения. Решить уравнения Лиувилля отнюдь не проще, чем эти уравнения. Довольно существенный добавочный элемент состоит в решающем предположении, называемом *Stosszahlansatz*, *молекулярным хаосом* или *приближением случайных фаз*. В результате этого допущения из рассмотрения исключаются несущественные быстро меняющиеся переменные, что приводит к дифференциальным уравнениям, описывающим эволюцию только медленно меняющихся переменных. Например, скорость химической реакции между двумя компонентами X и Y можно считать пропорциональной произведению их концентраций независимо от того, каковы точные значения координат и скоростей молекул.

Полученные в результате дифференциальные уравнения являются *макроскопическими уравнениями*. Примеры: уравнения для скоростей химических реакций, уравнение затухающих колебаний гармониче-

* Обзор и обсуждение обширной литературы по этой проблеме см. Farquhar I. E., Ergodic Theory in Statistical Mechanics (Interscience, London, 1964); Balescu R., Equilibrium and Nonequilibrium Statistical Mechanics (Wiley, New York, 1975) Appendix; Penrose O., Reports on Progress in Physics, 42, 1937 (1979).

ского осциллятора для маятника в воздухе, уравнение диффузии (закон роста населения). Все эти уравнения являются приближенными, в действительности же существуют небольшие отклонения от них, которые проявляются как *флуктуации*. Они являются стохастическими, которые и составляют предмет настоящей книги.

Флуктуации, естественно, нельзя найти точно, что было бы равносильно решению микроскопических уравнений. Однако их стохастические свойства подчиняются довольно простым законам. Более того, для того чтобы установить эти законы, требуется повторить предположение о случайности, которое делалось при выводе макроскопических законов. Такой подход к теории флуктуаций мы будем называть *мезоскопическим*. Мезоскопическое приближение дает более подробное описание, чем макроскопическое, поскольку оно включает в себя описание флуктуаций, однако оно обрезает микроскопические уравнения с помощью повторного предположения о случайности.

Повторное предположение о случайности является центральным местом в рассуждении — это видно из того, что получающиеся макроскопические и мезоскопические уравнения необратимы, в то время как лежащие в их основе микроскопические уравнения обратимы во времени. С тех пор как Больцман впервые использовал свой Stosszahlansatz, было сделано много попыток исключить это основное предположение*, обычно заканчивающихся тем, что оно пряталось под ковер математического формализма.

Ясно, что кроме чистой математики необходимо еще что-то, чтобы понять, почему природа входит в противоречие с нами только в тех процессах, в которых энтропия возрастает, хотя обратные процессы также совместимы с микроскопическими уравнениями движения. Это фундаментальная проблема обоснования статистической механики необратимых процессов.

г. До сих пор наши рассуждения основывались на классической механике. Квантовая механика дает дополнительную непредсказуемость, которая связана с основами теории, а не со сложной природой системы. Стохастическая природа радиоактивного распада исключительно квантово-механического происхождения. Естественно, разница между классическими и квантовомеханическими флуктуациями туманна, поскольку природа (насколько нам известно) в своей основе квантова. Однако следует понимать, что для ответа на вопрос «почему стохастические процессы входят в физику?» нет необходимости обращаться к квантово-механической неопределенности. Действительно, стохастические методы применяются также к движению комет и игре в рулетку.

Классическое усреднение по всем микроскопическим состояниям в некоторой области фазового пространства эквивалентно усредне-

---

* См.: Ter Haar D., Rev. Mod. Phys., 27, 289 (1957); Davies P. C. W., The Physics of Time Asymmetry (Surrey University Press, London, 1974).

нию в квантовой механике по всем векторам (единичной длины) в линейном подпространстве гильбертова пространства системы. Это равносильно усреднению по полной ортонормированной системе единичных векторов в этом подпространстве, что является более принятой процедурой.

Упражнение. Равновесие описывается не зависящим от времени ансамблем. Докажите, что в этом случае $Y(t)$ является стационарным стохастическим процессом. При этом, естественно, предполагается, что гамильтониан не зависит явно от времени (система автономна: не испытывает влияния извне), то же самое предполагается относительно Y: она изменяется со временем только вследствие зависимости от положения в фазовом пространстве.

3.3. ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ФУРЬЕ СТАЦИОНАРНЫХ ПРОЦЕССОВ

Рассмотрим однокомпонентный действительный процесс $Y(t)$ в некотором фиксированном интервале $0 < t < T$. Каждая реализация $Y_x(t)$ является обычной функцией времени и может быть разложена в ряд Фурье в этом интервале. Чтобы избежать комплексных коэффициентов, мы используем синус-преобразование Фурье:

$$Y_x(t) = \sum_{n=1}^{\infty} A_{n,x} \sin\left(\frac{n\pi}{T} t\right).$$

Коэффициенты ряда Фурье $A_{n,x}$ заданы выражениями

$$A_{n,x} = \frac{2}{T} \int_0^T \sin\left(\frac{n\pi}{T} t\right) Y_x(t)\, \mathrm{d}t \tag{3.3.1}$$

и удовлетворяют тождеству Парсеваля

$$\frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} A_{n,x}^2 = \frac{1}{T} \int_0^T Y_x(t)^2\, \mathrm{d}t. \tag{3.3.2}$$

Если рассмотреть все возможные значения x вместе с их плотностью вероятности $P_X(x)$, то величины $A_{n,x}$ становятся стохастическими переменными A_n. Например, их среднее

$$\langle A_n \rangle = \frac{2}{T} \int_0^T \sin\left(\frac{\pi n}{T} t\right) \langle Y(t) \rangle\, \mathrm{d}t,$$

а усредняя (3.3.2), получаем

$$\frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \langle A_n^2 \rangle = \frac{1}{T} \int_0^T \langle Y(t)^2 \rangle\, \mathrm{d}t.$$

Предположим, $Y(t)$ — стационарный случайный процесс с равным нулю средним значением и конечным временем автокорреляции τ_c,

тогда $\langle Y(t)^2\rangle$ не зависит от времени и

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{2}\langle A_n^2\rangle = \langle Y^2\rangle.$$

В этом отношении средний квадрат флуктуаций $\langle Y^2\rangle$ выражается через сумму членов, каждый из которых относится к одной синусоидальной волне с частотой $\pi n/T$. Вопрос состоит в том, чтобы узнать, как полный квадрат $\langle Y^2\rangle$ распределен по частотам, или, другими словами, найти *спектральную плотность флуктуаций* $S(\omega)$, определенную соотношением

$$S(\omega)\,\Delta\omega = \sum_{\omega < \pi n/T < \omega + \Delta\omega} \frac{1}{2}\langle A_n^2\rangle. \tag{3.3.3}$$

Для того чтобы иметь возможность взять $\Delta\omega$ малым, надо выбрать T большим и тогда много значений n попадет в интервал $\Delta\omega$.

Ответ на поставленный нами вопрос дает *теорема Винера—Хинчина*, которая утверждает, что $S(\omega)$ — это косинус-преобразование автокорреляционной функции:

$$S(\omega) = \frac{2}{\pi}\int_0^{\infty} \cos(\omega\tau)\,\varkappa(\tau)\,d\tau. \tag{3.3.4}$$

Чтобы доказать это, нужно только представить в (3.3.3) явное выражение коэффициентов Фурье (3.3.1):

$$\langle A_n^2\rangle = \frac{4}{T^2}\int_0^T dt \int_0^T dt' \sin\frac{\pi n t}{T}\sin\frac{\pi n t'}{T}\langle Y(t)\,Y(t')\rangle =$$

$$= \frac{4}{T^2}\int_0^T \sin\frac{\pi n t}{T}\,dt \int_{-t}^{T-t} \sin\frac{\pi n(t+\tau)}{T}\,\varkappa(\tau)\,d\tau.$$

Поскольку мы предположили, что $\varkappa(\tau)$ быстро убывает при $|\tau| > \tau_c$,

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\varkappa(t)|\,d\tau = 2\int_0^{\infty} |\varkappa(\tau)|\,d\tau < \infty.$$

Кроме того, T можно выбрать большим по сравнению с интервалом τ, на котором $\varkappa(\tau)$ заметно отличается от нуля. Далее понятно, что второй интеграл может быть взят в пределах от $-\infty$ до ∞:

$$\langle A_n^2\rangle = \frac{4}{T^2}\int_0^T \sin^2\frac{\pi n t}{T}\,dt \int_{-\infty}^{\infty} \cos\frac{\pi n\tau}{T}\,\varkappa(\tau)\,d\tau +$$

$$+ \frac{4}{T^2}\int_0^T \sin\frac{\pi n t}{T}\cos\frac{\pi n t}{T}\,dt \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\pi n\tau}{T}\,\varkappa(\tau)\,d\tau =$$

$$= \frac{4}{T^2}\,\frac{T}{2}\int_{-\infty}^{\infty} \cos\frac{\pi n\tau}{T}\,\varkappa(\tau)\,d\tau.$$

Подставляя этот результат в (3.3.3) и предполагая, что $\varkappa(\tau)$ — функция, достаточно гладкая для того, чтобы можно было подставить интервал $\Delta\omega$, получаем

$$\int_{-\infty}^{\infty} \cos\frac{\pi n\tau}{T}\varkappa(\tau)\,d\tau = \int_{-\infty}^{\infty} \cos(\omega\tau)\varkappa(\tau)\,d\tau.$$

Поскольку в интервале $\Delta\omega$ имеется $(T/\pi)\Delta\omega$ членов, в результате находим

$$S(\omega)\Delta\omega = \frac{T}{\pi}\Delta\omega\frac{1}{2}\frac{4}{T^2}\frac{T}{2}\int_{-\infty}^{\infty} \cos(\omega\tau)\varkappa(\tau)\,d\tau.$$

Это и есть желаемый результат (3.3.4).

Упражнение. Теорему Винера — Хинчина (3.3.4) можно представить в другом виде:

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

$$S(f) = 4\int_{0}^{\infty} \cos(2\pi f\tau)\varkappa(\tau)\,d\tau,$$

где $f = \omega/(2\pi)$ — обычная частота. Для комплексного процесса

$$S(\omega) = \frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \cos(\omega\tau)\varkappa(\tau)\,d\tau,$$

где $\varkappa$ — комплексная автокорреляционная функция (3.1.6).

Упражнение. Если Y имеет r компонент и они все действительны, естественно определить

$$S_{ij}(\omega) = \frac{2}{\pi}\int_{0}^{\infty} \cos(\omega\tau)K_{ij}(\tau)\,d\tau. \tag{3.3.5}$$

Тогда спектр флуктуаций произвольной линейной комбинации $Z = \sum_j c_j Y_j$ дается выражением $S_z(\omega) = \sum_{ij} S_{ij}(\omega)c_i c_j$. Найдите аналогичную формулу для r комплексных компонент.

Упражнение. Спектральная плотность процесса Кэмпбелла, определенная выражением (3.1.9) со стационарным независимым τ_s, имеет вид

$$S(\omega) = 2\nu\,|\hat{\psi}(\omega)|^2, \tag{3.3.6}$$

где $\hat{\psi}$ — Фурье-образ от ψ.

Упражнение. Отклик инерционного гальванометра с критическим демпфированием на импульсе тока при $t=0$ есть $\Psi(t) = cte^{-\gamma t}$. Найдите спектральную плотность отклика на стационарный поток независимых случайных импульсов.

Упражнение. Катод испускает электроны в независимые случайные моменты времени. Выведите соотношение

$$S_I(f) = 2e\langle I\rangle \tag{3.3.7}$$

для спектральной плотности флуктуаций тока, где $f=\omega/(2\pi)$ — частота. Это теорема Шотки для дробового шума в насыщенном токе диода *.

Упражнение. Пусть $Y(t)$ — флуктуирующая часть электрического тока. Во многих случаях бывает проще измерить перенесенный заряд $Z(t)=\int\limits_0^t Y(t')\,dt'$.

Покажите, что его спектральная плотность Y связана с флуктуациями заряда «теоремой Макдональда» **:

$$S(\omega)=\frac{\omega}{\pi}\int\limits_0^\infty \sin\omega t\,\frac{d}{dt}\langle Z(t)^2\rangle\,dt. \tag{3.3.8}$$

(Указание. Сначала покажите, что $(d/dt)\langle Z(t)^2\rangle=2\int\limits_0^t k(t')\,dt'$.)

Верхний предел интегрирования в (3.3.8) определен в смысле Чезаро *** или с помощью обеспечивающего сходимость множителя $e^{-\varepsilon\tau}$. В частности, для дробового шума, заданного соотношением (3.3.7), имеем ****

$$\langle\langle\{Z(t)^2\}\rangle\rangle=e\langle I\rangle t.]$$

3.4. ИЕРАРХИЯ ФУНКЦИЙ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ

Предположим, что некоторый стохастический процесс $Y_X(t)$ задан описанным в § 3.1 способом. Тогда плотность вероятности для $Y_X(t)$ получить значение y в момент времени t дается выражением

$$P_1(y,\ t)=\int\delta\{y-Y_x(t)\}\,P_X(x)\,dx. \tag{3.4.1}$$

Аналогично, совместная плотность вероятности того, что Y принимает значения y_1 в момент времени t_1 и y_2 в момент t_2 и т. д. до y_n, t_n, есть

$$P_n(y_1,\ t_1;\ y_2,\ t_2;\ \ldots;\ y_n,\ t_n)=$$
$$=\int\delta\{y_1-Y_x(t_1)\}\,\delta\{y_2-Y_x(t_2)\}\ \ldots\ \delta\{y_n-Y_x(t_n)\}\,P_X(x)\,dx. \tag{3.4.2}$$

Таким образом, задается бесконечная иерархия плотностей вероятности P_n $(n=1,\ 2,\ \ldots)$. Эти распределения позволяют вычислить все средние, использовавшиеся нами ранее, такие, как

$$\langle Y(t_1)\,Y(t_2)\ \ldots\ Y(t_n)\rangle=$$
$$=\int y_1y_2\ \ldots\ y_nP_n(y_1,\ t_1;\ y_2t_2;\ \ldots;\ y_n,\ t_n)\,dy_1\,dy_2\ \ldots\ dy_n.$$

Хотя правая часть соотношения (3.4.2) имеет смысл и тогда, когда некоторые моменты времени совпадают, мы будем полагать, что распределения P_n определены только для разных моментов времени. Тогда иерархия функций P_n удовлетворяет следующим четырем «условиям непротиворечивости»:

---

* Schottky W., Ann. Physik, 57,541 (1918); Van der Ziel A., Noise (Prentice-Hall, Englewood Cliffs, N. J., 1954).

** MacDonald D. K. C., Report on Progress in Physics, 12,66 (1948).

*** Titchmarsh E. C. The Theory of Functions (Oxford University Press, 1932).

**** Milatz J. M. W. Nederl. Tijdschr. Natuurk., 8,19 (1941).

1) $P_n \geqslant 0$;

2) P_n не меняется при внутренней перестановке пар (x_k, t_k) и (x_l, t_l);

3) $\int P_n(y_1, t_1; \ldots; y_{n-1}, t_{n-1}; y_n, t_n)\,\mathrm{d}y_n = P_{n-1}(y_1, t_1; \ldots; y_{n-1}, t_{n-1})$;

4) $\int P_1(y_1, t_1)\,\mathrm{d}y_1 = 1$.

Функции P_n позволяют вычислить все средние и, значит, определяют стохастический процесс (на самом деле эта спецификация в значительной степени избыточна, поскольку в соответствии с п. 3 любое конечное число функций P_n может быть опущено без потери информации). Колмогоровым было доказано*, что произвольный набор функций, удовлетворяющий четырем условиям непротиворечивости, определяет стохастический процесс $Y(t)$ в том смысле, как он был определен в § 3.1. Следовательно, иерархия совместных плотностей вероятности дает еще одну равноценную возможность определить стохастические процессы, которая служит альтернативой определению, данному в гл. 1. Правда, в общем доказательстве конструкция переменной X, соответствующая данной иерархии, достаточно абстрактна. Однако, как разъясняется в § 3.2, в физических приложениях X известно a priori.

Условная вероятность $P_{1|1}(y_2, t_2 | y_1, t_1)$ — это плотность вероятности того, что величина Y принимает значение y_2 в момент времени t_2, если известно, что в момент времени t_1 ее значение было y_1. Сформулируем это по-другому: из всех выборочных функций $Y_x(t)$ ансамбля выбираем те, которые удовлетворяют условию, что они проходят через точку y_1 в момент t_1; часть этого *подансамбля*, попадающая в интервал y_2, $y_2 + \mathrm{d}y_2$ в момент t_2, обозначают $P_{1|1}(y_2, t_2 | y_1, t_1)\,\mathrm{d}y_2$. Ясно, что вероятность $P_{1|1}$ неотрицательна и нормирована:

$$\int P_{1|1}(y_2, t_2 | y_1, t_1)\,\mathrm{d}y_2 = 1.$$

В более общем случае можно зафиксировать значения величины Y в k различные моменты времени $t_1, \ldots, t_k$ и интересоваться совместной вероятностью в другие l моментов времени $t_{k+1}, \ldots, t_{k+l}$. Таким образом, мы приходим к общему определению условной вероятности:

$$P_{l|k}(y_{k+1}, t_{k+1}; \ldots; y_{k+l}, t_{k+l} | y_1, t_1; \ldots; y_k, t_k) = \frac{P_{k+l}(y_1, t_1; \ldots; y_k, t_k; y_{k+1}, t_{k+1}; \ldots; y_{k+l}, t_{k+l})}{P_k(y_1, t_1; \ldots; y_k, t_k)}. \quad (3.4.3)$$

* Kolmogoroff A. Grundbegriffe der Wahrscheinlichkeitsrechnung, Ergebn. Mathem. Frenzgeb., 2, no. 3 (Springer, Berlin, 1933)-Foundations of Probability Theory (Chelsea Press, New York, 1950); Friedman A. Stochastic Differential Equations and Applications I Acad. Press, New York, 1975) Ch. I. Papoulis A., Probability, Random Variables and Stochastic Processes (McGraw-Hill, New York, 1965) Gewohnliche Differentialgleichungen mit zufalligen Parametern (Academie-Verlag, Berlin, 1972).

По определению, $P_{l|k}$ симметрична по парам переменных в множестве, содержащем k пар, и в множестве, содержащем l пар переменных. Эта условная вероятность также может трактоваться как вероятность в подансамбле тех выборочных функций, которые попадают в k заданных интервалов в моменты $t_1, t_2, \ldots, t_k$.

Обобщением понятия характеристической функции на стохастические процессы является характеристический *функционал*. (В другой связи эта идея была использована в § 2.3.) Пусть $Y(t)$ — заданный случайный процесс. Введем произвольную вспомогательную пробную функцию $k(t)$. Тогда характеристический или генерирующий моменты функционал, зависящий от $k(t)$, определяется с помощью следующего соотношения:

$$G[(k)] = \left\langle \exp\left[i \int_{-\infty}^{\infty} k(t)\, Y(t)\, \mathrm{d}t \right] \right\rangle. \tag{3.4.4}$$

Обозначение $G([k])$ подчеркивает, что G зависит от всей функции k, а не от ее значения в какой-либо определенный момент времени t. Сходимость интеграла не должна вызывать беспокойства, потому что класс функций k можно ограничить только теми из них, которые быстро убывают при достаточно больших $|t|$.

Раскладывая (3.4.4) по степеням k, получаем

$$G([k]) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{i^m}{m!} \int k(t_1) \ldots k(t_m) < Y(t_1) \ldots Y(t_m) > \mathrm{d}t_1 \ldots \mathrm{d}t_m. \tag{3.4.5}$$

Тогда каждый момент совместного распределения $Y(t_1), Y(t_2), \ldots$ можно найти как коэффициент при члене с $k(t_1)\,k(t_2) \ldots$ в этом выражении. Аналогично, кумулянты могут быть найдены из выражения

$$\log G([k]) = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{i^m}{m!} \int k(t_1) \ldots k(t_m) \langle\langle Y(t_1) \ldots Y(t_m) \rangle\rangle \mathrm{d}t_1 \ldots \mathrm{d}t_m. \tag{3.4.6}$$

Процесс является *стационарным*, когда все P_n зависят только от разности времен:

$$P_n(y_1, t_1+\tau, y_2, t_2+\tau; \ldots; y_n, t_n+\tau) = P_n(y_1, t_1; y_2, t_2; \ldots; y_n, t_n).$$

Необходимым, но отнюдь не достаточным условием для этого является независимость функции $P_1(y_1)$ от времени.

Процесс называют *гауссовым*, если все его функции P_n (многомерные) являются гауссовыми распределениями. В этом случае все

кумулянты, кроме $m=2$, обращаются в нуль и

$$G([k])=\exp\left[\mathrm{i}\int k(t_1)\langle Y(t_1)\rangle\,\mathrm{d}t_1-\right.$$
$$\left.-\frac{1}{2}\iint k(t_1)\,k(t_2)\,\langle\langle Y(t_1)\,Y(t_2)\rangle\rangle\,\mathrm{d}t_1\,\mathrm{d}t_2\right]. \qquad (3.4.7)$$

Гауссов процесс полностью определяется его средним значением $\langle Y(t)\rangle$ и вторым моментом $\langle Y(t_1)\,Y(t_2)\rangle$. Гауссовы процессы особенно просты в обращении и поэтому хорошо изучены. Их часто используют для приближенного описания таких физических процессов, при описании которых можно пренебречь кумулянтами более высокого порядка. В гл. 9 будет показано, что это предположение оказывается приемлемым во многих случаях, но гл. 9 и 11 показывают, что это отнюдь не всегда так.

Упражнение. Рассмотрите случай когда P_k в (3.4.3) равны нулю.

Упражнение. Определение гауссова процесса было бы спорным, если бы оно было несовместно с § 3.4. Покажите, однако, что когда некоторое P_n гауссово, то гауссовы и все P_k более низкого порядка. Покажите также, что условные вероятности гауссовы.

Упражнение. Вычислите иерархию функций P_n для процесса (3.1.7), полагая $\psi(t)>0$. Проверьте, что условия п. 1—4 удовлетворяются.

Упражнение. Выразите характеристический функционал процесса (3.1.7) через характеристическую функцию случайной переменной X.

Упражнение. Вычислите характеристический функционал процесса Кэмпбелла и выведите для кумулянтов следующее соотношение:

$$\langle\langle Y(t_1)^{m_1}Y(t_2)^{m_2}\ldots\rangle\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}\{\psi(t_1-\tau)\}^{m_1}\{\psi(t_2-\tau)\}^{m_2}\ldots\,\mathrm{d}\tau. \qquad (3.4.8)$$

Упражнение. Пусть $x(t)$, $p(t)$ — координаты и импульс свободной частицы. Начальные значения $x(0)$, $p(0)$ представляют собой случайные переменные с заданным распределением $P_1(x,\ p,\ 0)$. Тогда $\{x(t),\ p(t)\}$ образуют двумерный случайный процесс. Вычислите $P_1(x_1,\ p_1,\ t_1)$, $P_2(x_1,\ p_1,\ t_1;\ x_2,\ p_2,\ t_2)$, $P_{1\,|\,1}(x_2,\ p_2,\ t_2\,|\,x_1,\ p_1,\ t_1)$ и функции P_n более высокого порядка.

Упражнение. Переменная $x(t)$ в предыдущем упражнении сама по себе является стохастическим процессом. Вычислите функции распределения для случая

$$P_1(x,\ p,\ 0)=(2\pi)^{-1}\exp\left[-{}^1/_2\,(x^2+p^2)\right].$$

Упражнение. Пусть $Y^{(1)}(t)$ и $Y^{(2)}(t)$ — два случайных процесса с иерархиями $P^{(1)}$ и $P^{(2)}$. Пусть α_1 и α_2 — два неотрицательных числа, причем $\alpha_1+\alpha_2=1$. Покажите, что $P_n=\alpha_1P_n^{(1)}+\alpha_2P_n^{(2)}$ («выпуклая комбинация») тоже является допустимой иерархией. Какой случайный процесс она описывает?

Упражнение. Покажите, что факториальные кумулянты (1.3.13) для процесса Y даются выражением

$$\log G([k])=\sum_{m=1}^{\infty}\frac{1}{m!}\int\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}k(t_1)}-1\right)\ldots\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}k(t_m)}-1\right)\times$$
$$\times[Y(t_1)\ldots Y(t_m)]\,\mathrm{d}t_1\ldots\mathrm{d}t_m. \qquad (3.4.9)$$

Упражнение. Случайное множество событий определяет процесс $Y(t)=\sum\delta(t-t_\sigma)$. Применив (3.4.9), выведите другим способом выражение (2.5.10).

Упражнение. Покажите, что настоящее определение «стационарности» через P_n эквивалентно определению (3.1.3).

Упражнение. Пусть $(X(t), Y(t))$ — двумерный стохастический процесс с иерархией P_n. Определим функцию

$$\overline{P}_n(x_1, t_1; \ldots; x_n, t_n) = \int P_n(x_1, y_1, t_1; \ldots; x_n, y_n, t_n)\, dy_1 \ldots dy_n. \quad (3.4.10)$$

Покажите, что эти частные функции распределения снова определяют процесс $X(t)$.

3.5. КОЛЕБАНИЯ СТРУНЫ И СЛУЧАЙНЫЕ ПОЛЯ

Большая часть стохастических процессов в физике и химии относится к марковскому типу, и поэтому они включены в материал следующей главы. Однако имеется пример, иллюстрирующий применение и не марковского процесса. Рассмотрим следующую физическую задачу: невесомая упругая струна закреплена при $x=0$ и $x=L$. Пусть $y(x)$ — поперечное смещение, тогда энергия упругой деформации струны, форма которой определяется функцией $y(x)$, имеет вид

$$E = \frac{1}{2}\int_0^L \left(\frac{dy}{dx}\right)^2 dx. \quad (3.5.1)$$

Когда струна подвергается воздействию тепловых флуктуаций (из-за окружающего ее воздуха), $y(x)$ становится случайной функцией, x играет роль переменной, которую мы до сих пор называли t. Можно ожидать, что вероятность реализации любой частной зависимости $y(x)$ пропорциональна величине

$$e^{-E/(kT)} = \exp\left[-\frac{\beta}{2}\int_0^L \left(\frac{dy}{dx}\right)^2 dx, \quad (3.5.2)$$

где $\beta = 1/(kT)$, T — температура воздуха.

Это приближенное соотношение (по крайней мере до тех пор, пока мы не научимся различать и учитывать отдельные «формы» $y(x)$, т. е. пока не научимся интегрировать в пространстве функций y).

Чтобы сформулировать эти эвристические идеи точно, определим стохастическую функцию $Y(x)$, выборочными реализациями которой являются функции $y(x)$. Возьмем n различных точек x_ν в интервале $(0, L)$ и пронумеруем их числами от 1 до n:

$$0 < x_1 < x_2 < \ldots < x_n < L. \quad (3.5.3)$$

В каждой точке x_ν зададим интервал $(y_\nu, y_\nu + dy_\nu)$. Энергия струны, приходящаяся на эти интервалы, равна

$$\frac{1}{2}\left(\frac{y_1^2}{x_1} + \frac{(y_2-y_1)^2}{x_2-x_1} + \ldots + \frac{(y_n-y_{n-1})^2}{x_n-x_{n-1}} - \frac{y_n^2}{L-x_n}\right).$$

Для удобства записи введем обозначения $x_0=0$, $y_0=0$, $x_{n+1}=L$, $y_{n+1}=0$, тогда это выражение для энергии можно записать в виде

$$\frac{1}{2}\sum_{\nu=0}^{n}\frac{(y_{\nu+1}-y_\nu)^2}{x_{\nu+1}-x_\nu}.$$

Проделав эту подготовительную работу, определим иерархию P_n, полагая

$$P_n(y_1, x_1; \ldots; y_n, x_n)=$$
$$=\left(\frac{2\pi L}{\beta}\right)^{1/2}\prod_{\nu=0}^{n}\left(\frac{\beta}{(2\pi(x_{\nu+1}-x_\nu)}\right)^{1/2}\exp\left[-\frac{\beta}{2}\frac{(y_{\nu+1}-y_\nu)^2}{x_{\nu+1}-x_\nu}\right]. \qquad (3.5.4)$$

Это выражение определяет P_n, когда x_ν удовлетворяет условиям (3.5.3). Для другого упорядочивания P_n определено условием симметрии (см. п. 2 § 3.4). Выполнение условия совместимости п. 1 § 3.4 очевидно. Условие п. 3 § 3.4 может быть проверено с помощью явного вычисления, условие п. 4 § 3.4 справедливо из-за нормирующего множителя, который мы дописали перед произведением. Более того, для больших n, т. е. для достаточного частого разбиения интервала $(0, L)$, понятно, что P_n согласуется с интуитивной формулой (3.5.2). Тогда соотношение (3.5.4) определяет стохастический процесс, который отражает физическую идею состояния теплового равновесия струны.

Каждое P_n представляет собой многомерное распределение Гаусса, так что мы имеем дело с гауссовым процессом. Это обстоятельство позволяет использовать соотношение (3.1.6). Далее находим $\langle Y(x_1)\rangle=0$ и для $x_1\leqslant x_2$

$$\langle Y(x_1)Y(x_2)\rangle=\frac{1}{\beta}\frac{x_1(L-x_2)}{L}. \qquad (3.5.5)$$

Заметим, что вследствие нестационарности процесса* его автокорреляционная функция зависит не от $|x_1-x_2|$, и даже содержит полную длину струны L. Следовательно, теорема Винера—Хинчина непосредственно неприменима, однако аналогичное вычисление коэффициентов Фурье A_n дает $\langle A_n\rangle=0$ и

$$\langle A_nA_m\rangle=\delta_{nm}\frac{2L}{n^2\pi^2}\frac{1}{\beta}. \qquad (3.5.6)$$

Это равенство просто означает, что флуктуации нормальных мод некоррелированны и каждой нормальной моде соответствует энергия $^1/_2kT$. (Множитель $^1/_2$ возникает из-за того, что колебания нашей струны затухают и струна не имеет кинетической энергии.)

---

* Поскольку наша переменная x, а не t, слово «однородный» было бы более подходящим, но этот термин мы будем использовать в другой связи (см. § 4.4).

Примечание. В соответствии с этим вычислением среднее значение полной энергии оказывается бесконечным. Для физической струны это не является парадоксом, потому что выражение для энергии (3.5.2) становится неприменимым при слишком малых длинах волн. Однако аналогичное вычисление применимо к электромагнитным волнам, распространяющимся между двумя отражающими зеркалами при $x=0$ и $x=L$. В этом случае можно ожидать, что формулы остаются справедливыми при всех длинах волн, поэтому бесконечное значение энергии представляет собой проблему. Этот парадокс называется *ультрафиолетовой катастрофой* Рэлея — Джинса. Он был разрешен введением планковских квантов.

Здесь можно добавить, что эта трудность позже появится вновь, когда окажется, что каждый осциллятор обладает энергией в нулевой точке. Эта энергия существует также в пустом пространстве и не зависит от температуры. Следовательно, ее можно вычесть из полной энергии, что не должно отразиться на наблюдаемых фактах. Однако разность между энергией в нулевой точке поля между зеркалами и поля в вакууме не равна нулю и зависит от L. Следовательно, это приводит к возникновению силы между зеркалами, которая является макроскопическим вариантом силы Вад-дер-Ваальса, действующей между молекулами. Эта сила подробно изучена *.

Упражнение. Физик разложил бы $y(x)$ по нормальным модам и зная, что средняя потенциальная энергия гармонического осциллятора равна $^1/_2kT$, применил формулу (3.5.6). Выведите таким путем формулу (3.5.5).

Упражнение. В выражении (3.5.6) замените множитель $1/\beta$ на распределение Планка и найдите таким способом квантово-механический аналог формулы (3.5.5).

Упражнение. Рассмотрите струну, состоящую из точечных масс, соединенных гармоническими пружинами и закрепленную на концах:

$$\ddot{y}_\nu = y_{\nu+1} + y_{\nu-1} - 2y_\nu, \quad y_0 = 0, \quad y_{n+1} = 0.$$

Вычислите $\langle y_\nu y_\mu \rangle$ в тепловом равновесии и покажите, что в этом случае не возникает трудностей с расходимостями.

Родственной, но более сложной концепцией является понятие случайного поля, которое возникает в теории излучения **. Пусть $u(\mathbf{r}, t)$ — поле, подчиняющееся некоторому не зависящему от времени линейному дифференциальному уравнению в частных производных, например

$$\nabla^2 u - \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = 0. \tag{3.5.7}$$

Решения этого уравнения можно представить в виде суперпозиции нормальных мод $u_q(\mathbf{r}, t)$:

$$u(\mathbf{r}, t) = \sum_q A_q u_q(\mathbf{r}, t). \tag{3.5.8}$$

Связанное с этим равенством выражение для энергии решения представляет собой сумму энергий нормальных мод:

$$E = \sum_q \varepsilon_q A_q^2.$$

---

* Langbein D. Theory of Van der Waals Attraction (Ergebn. exakten Naturw., 72; Springer, Berlin, 1974).

** Другие приложения могут быть найдены в кн.: Preston C. Random Fields (Lecture Notes in Mathematics, 534; Springer, Berlin, 1976).

Тепловое равновесие описывается ансамблем, т. е. A_q становится случайной переменной с распределением вероятности (в классической статистике), пропорциональным

$$e^{-E/(kT)} = \prod_q e^{-\beta\varepsilon_q A_q^2}. \tag{3.5.9}$$

Таким образом, величины A_q представляют собой независимые гауссовы случайные переменные с равными нулю средними значениями. Соответственно $u(\mathbf{r}, t)$ становится также случайным полем, т. е. случайной функцией *четырех* переменных $\mathbf{r}$, t, а не только одного t. Будем интересоваться ее стохастическими свойствами, например двухточечной корреляционной функцией

$$\langle u(\mathbf{r}_1, t_1)\, u(\mathbf{r}_2, t_2)\rangle = \sum_{qq'} \langle A_q A_{q'}\rangle\, u_q(\mathbf{r}_1, t_1)\, u_{q'}(\mathbf{r}_2, t_2) = \\ = \sum_q (2\beta\varepsilon_q)^{-1}\, u_q(\mathbf{r}_1, t_1)\, u_q(\mathbf{r}_2, t_2). \tag{3.5.10}$$

В бесконечном пространстве нормальные моды образуют непрерывное множество и (3.5.8) должно быть интегралом. Это затрудняет применение (3.5.9), и поэтому все поле часто помещают в большой куб Ω. В качестве граничных условий можно выбрать $u=0$ на стенках Ω, но нормальные моды принимают более простой вид, если потребовать, чтобы u были периодическими функциями с периодом Ω. Результаты не зависят от этих манипуляций при условии, что Ω в конечном счете устремляется к бесконечности.

Вычислим (3.5.10) для реального поля, подчиняющегося волновому уравнению (3.5.7). Действительные решения уравнения (3.5.7) имеют общий вид

$$u(\mathbf{r}, t) = \sum_q \left[a_q e^{i(\mathbf{qr} - qt)} + a_q^* e^{-i(\mathbf{qr} - qt)}\right]. \tag{3.5.11}$$

Здесь $\mathbf{q}$ — вектор с дискретными пространственными компонентами:

$$\mathbf{q} = \left(\frac{2\pi}{L} n_x,\ \frac{2\pi}{L} n_y,\ \frac{2\pi}{L} n_z\right), \quad q = |\mathbf{q}|$$

с целыми n_x, n_y, n_z, пробегающими значения от $-\infty$ до $+\infty$, L — ребро куба Ω. Для каждого q имеется только один комплексный коэффициент $a_q = a_q' + ia_q''$, его действительная и мнимая части представляют собой коэффициенты, которые мы раньше называли A_q. Полная энергия

$$E = \frac{1}{2}\int_\Omega \{(\nabla u)^2 + (\partial_t u)^2\}\, d\mathbf{r} = 2\Omega \sum_q q^2 (a_q'^2 + a_q''^2).$$

В тепловом равновесии в соответствии с (3.5.9) имеем

$$\langle a_q'^2\rangle = \langle a_q''^2\rangle = (4\Omega\beta q^2)^{-1},$$

или

$$\langle a_q a_{q'}^*\rangle = \delta_{qq'}(2\Omega\beta q^2)^{-1}; \quad \langle a_q a_{q'}\rangle = \langle a_q^* a_{q'}^*\rangle = 0.$$

Теперь легко находим

$$\langle u(\mathbf{r}_1, t_1)\, u(\mathbf{r}_2, t_2)\rangle = \\ = \sum_{\mathbf{q}} (2\Omega\beta q^2)^{-1} \left\{ e^{i\mathbf{q}(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2) - iq(t_1-t_2)} + e^{-i\mathbf{q}(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2) + iq(t_1-t_2)} \right\}.$$

Для больших Ω сумму по $\mathbf{q}$ можно заменить интегралом, принимая во внимание, что в единичном объеме $\mathbf{q}$-пространства имеется $[L/(2\pi)]^3$ дискретных значений:

$$\sum_{\mathbf{q}} \ldots \to \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int \ldots \, d^3\mathbf{q}.$$

Тогда, полагая $\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 = \boldsymbol{\rho}$, $t_1 - t_2 = \tau$, получаем

$$\langle u(\mathbf{r}_1, t_1)\, u(\mathbf{r}_2, t_2)\rangle = \frac{1}{2\beta(2\pi)^3} \int \frac{d^3\boldsymbol{q}}{q^2} \left(e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{\rho} - iq\tau} + e^{-i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{\rho} + iq\tau}\right).$$

Упражнение. Докажите, что (3.5.11) является общим решением и что изменяя его можно подобрать a_q для любых заданных начальных значений u и $\partial_t u$.

Упражнение. Вычислите $\langle u(x_1, t_1)\, u(x_2, t_2)\rangle$ для вибрирующей струны.

Упражнение. Покажите, что (3.5.12) обращается в нуль внутри светового конуса и равно $kT/(4\pi|\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2|)$ вне его.

3.6. ВЕТВЯЩИЕСЯ ПРОЦЕССЫ

Существует класс процессов, которые хотя и не являются марковскими, но все же в значительной степени могут быть рассмотрены явно*. Такие процессы чаще встречаются в задачах о популяциях, чем в физике. Впервые подобная задача была рассмотрена в 1874 г., когда Гальтон поставил вопрос о том, связано ли отмирание родовых имен высшего света в Англии со статистикой или с бесплодием богатых людей.

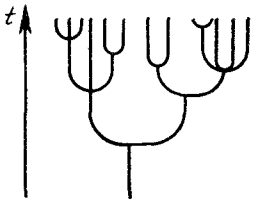

Рис. 3. Одна из реализаций ветвящегося процесса общего вида

Рассмотрим популяцию бактерий или других клеток, размножающихся давлением. Клетка, имеющая возраст τ, с вероятностью $\gamma(\tau)\,dt$ делится на две клетки в течение последующего промежутка времени dt, каждая из которых образует новую ветвь родового дерева. Задача состоит в определении вероятности $P(n, t\,|\,m, 0)$ иметь n индивидуумов в момент t, если при $t = 0$ их было m.

Модель, конечно, можно изменить, например, включив в нее вероятность смерти. Такой подход применим также к каскадам в космических лучах или к нейтронам в реакторе, если допустить возможность рождения более чем двух частиц в каждом событии (рис. 3). Однако в этих двух случаях γ не зависит от возраста, что делает задачу марковской и, следовательно, более простой (см. гл. 4).

* Harris T. E. The Theory of Branching Processes (Springer, Berlin, 1963); Jagers P. Branching Processes with Biological Applications (Wiley, London, 1975).

Особенности, определяющие ветвящиеся процессы, следующие

1) с каждого индивидуума начинается семейство потомков;

2) все эти семейства обладают одинаковыми стохастическими свойствами;

3) они не взаимодействуют друг с другом (если эволюция семейств зависит от спаривания между индивидуумами, то это уже не ветвящийся процесс).

Как следствие п. 3, условная вероятность $P(n, t \mid m, 0)$ представляет собой свертку m множителей $P(n, t \mid 1, 0)$. Это приводит к первому тождеству для производящей функции вероятности ветвящегося процесса, начинающегося с m индивидуумов при $t=0$:

$$F(z, t \mid m, 0) = \{F(z, t \mid 1, 0\}^m. \quad (t \geqslant 0). \tag{3.6.1}$$

Следовательно, достаточно изучить потомство от одного индивидуума.

Вероятность деления клетки, имеющей возраст τ, за время $d\tau$ есть $\gamma(\tau)\,d\tau$. Это означает, что вероятность деления клетки зависит только от ее возраста. Допустим, что некоторая клетка родилась при $t=0$. Пусть $w(\tau)$ — вероятность того, что клетка достигнет возраста τ, ни разу не разделившись. Тогда $w(0)=0$ и

$$dw(\tau) = -\gamma(\tau)\,w(\tau)\,d\tau. \tag{3.6.2}$$

Таким образом, w однозначно определяется функцией

$$w(\tau) = \exp\left[-\int_0^\tau \gamma(\tau')\,d\tau'\right]. \tag{3.6.3}$$

Вероятность того, что в момент времени t имеется всего одна клетка, в точности равна $w(t)$. Вероятность того, что эта клетка испытает деление за время, прошедшее между моментами τ и $\tau + d\tau$, есть $-dw(\tau)$, что следует из (3.6.2). Если это случится, популяция будет состоять из двух вновь рожденных клеток, каждая из которых породит свою родовую ветвь. Тогда вероятность иметь n клеток в момент времени t, если в начальный момент времени $t=0$ была только одна клетка, дается выражением

$$P(n, t \mid 1, 0) = \delta_{n,1} w(1) - \int_0^t dw(\tau)\,P(n, t \mid 2, \tau). \tag{3.6.4}$$

Это *второе тождество* для ветвящихся процессов *.

Умножая это тождество на z^n и суммируя по $n=1, 2, 3, \ldots$, получаем

$$F(z, t \mid 1, 0) = zw(t) - \int_0^t dw(\tau)\,F(z, t \mid 2, \tau). \tag{3.6.5}$$

---

* Здесь предполагалось, что возможно деление только на два индивидуума (см. упражнение).

Из-за однородности по времени, которая вытекает из п. 2, имеем

$$F(z,\ t\,|\,2,\ \tau)=F(z,\ t-\tau\,|\,2,\ 0)=\{F(z,\ t-\tau\,|\,1,\ 0)\}^2.$$

Подстановка этого выражения в (3.6.5) после перегруппировки членов дает

$$\begin{aligned} F(z,\ t\,|\,1,\ 0)-z &= -\int_0^t dw(\tau)\,[\{F(z,\ t-\tau\,|\,1,\ 0)\}^2-z]= \\ &= -\int_0^t w'(t-t')\,[\{F(z,\ t'\,|\,1,\ 0)\}^2-z]\,dt'. \end{aligned} \tag{3.6.6}$$

Это уравнение содержит только одну неизвестную функцию $F(z,\ t\,|\,1,\ 0)$, оно определяет производящую функцию вероятности и, следовательно, распределение вероятности, поскольку $\gamma(\tau)$ известно. Таким образом, рассмотрение ветвящихся процессов сведено к решению нелинейного интегрального уравнения. К сожалению, это можно сделать явно только лишь для нескольких видов функции $\gamma(\tau)$.

Упражнение. Решите задачу для $\gamma(\tau)=\text{const}$.

Упражнение. Предположим, индивидуум, имеющий возраст τ, обладает вероятностью $\gamma_\nu(\tau)$ разделиться на $\nu=0,\ 1,\ 2,\ \ldots$ новых индивидуумов за единичное время. Пусть $\Phi(\zeta,\ \tau)=\sum\zeta^\nu\gamma_\nu(\tau)$ — соответствующая производящая функция вероятности. Выведите для этого случая интегральное уравнение, аналогичное (3.6.6):

$$\begin{aligned} F(z,\ t\,|\,1,\ 0) &= zw(t)+\int_0^t w(t-t')\,\Phi\{F(z,\ t'\,|\,1,\ 0),\ t-t'\}\,dt'= \\ &= z+\int_0^t w(t-t')\,[\Phi\{F(z,\ t'\,|\,1,\ 0),\ t-t'\}-z\Phi(1,\ t-t')]\,dt' \end{aligned} \tag{3.6.7}$$

при соответствующем определении w.

Упражнение. Продифференцируйте (3.6.6) по z и положите $z=1$. В результате получится интегральное уравнение для $\langle n\rangle_t$, которое можно решить.

Упражнение. Задача Гальтона — Ватсона в оригинальной постановке была сформулирована для дискретной переменной времени $t=0,\ 1,\ 2,\ \ldots$, нумерующей последовательность поколений. Покажите, что в этом случае

$$F_t(z)=F_{t-1}(F_1(z)), \tag{3.6.8}$$

так что $F_t(z)$ — t-я итерация функции $F_1(z)$. Те же самые уравнения применимы к электронным каскадам в умножающих трубках* и фотонным умножителям на стимулированном излучении**.

Упражнение. В случае фотона в бесконечной среде с поглощением и стимулированным излучением $F_1(z)$ описывается выражением (2.4.11). Производя-

---

* Woodward P. M. Proc. Camb. Philos. Soc., 44, 404 (1948).

** Van Vliet K. M., Zijlstra R. J. J. Physica, 89 A (1977); Van Vliet K. M., Zijlstra R. J. J., Van Kampen N. G. in: Noise in Physical Systems (Proc. Fifth Intern. Conf. on Noise; D. Wolf ed., Springer, Berlin, 1978).

щая функция для m-поколения дается непрерывной дробью

$$\cfrac{1}{1+\theta-\cfrac{\theta}{1+\theta-\cfrac{\theta}{1+\theta-\cdots\cfrac{\theta}{1+\theta-\theta z}}}},$$

где $\theta+\beta/\alpha$. Найдите отсюда

$$F_m(z)=\frac{1-\theta^m-(\theta-\theta^m)z}{1-\theta^{m+1}-(\theta-\theta^{m+1})z}. \tag{3.6.9}$$

Упражнение. Для того же случая последовательных поколений введем $\tilde{F}_t(z)$ — производящую функцию распределения вероятностей всех потомков в поколениях 1, 2, ..., t. Покажите, что

$$\tilde{F}_t(z)=\tilde{F}_{t-1}(z\tilde{F}_1(z)). \tag{3.6.10}$$

Упражнение. Для фотона в бесконечной среде функция $F_1(z)$ равна (2.4.11). Производящая функция полного количества вторичных фотонов в каскаде имеет вид

$$\tilde{F}_t(z)=\frac{z}{(1+\theta)^t-\{(1+\theta)^t-1\}z}. \tag{3.6.11}$$

Упражнение. Формула (3.6.11) может быть получена и по-другому. Пусть $P(N)$ — вероятность того, что налетающий фотон порождает общее количество N вторичных фотонов в каскаде. Тогда

$$P(N)=p_0\delta_{N,0}+\sum_{s=1}^{\infty}p_s\sum_{N_1+N_2+\ldots+N_s=N-s}P(N_1)P(N_2)\ldots P(N_s),$$

где p_s — то же самое, что и в (2.4.11).

ГЛАВА 4
МАРКОВСКИЕ ПРОЦЕССЫ

В настоящей главе определен и описан подкласс стохастических процессов, обладающих свойством марковости. Такие процессы наиболее важны в физике и химии. В оставшейся части книги мы будем иметь дело исключительно с марковскими процессами.

4.1. СВОЙСТВО МАРКОВОСТИ

Марковский процесс определяется как стохастический процесс, обладающий следующим свойством: для любого набора n *последовательных* моментов времени (т. е. $t_1<t_2<\ldots<t_n$) имеет место соотношение

$$P_{1|n-1}(y_nt_n|y_1,t_1;\ldots;y_{n-1},t_{n-1})=P_{1|1}(y_n,t_n|y_{n-1},t_{n-1}), \tag{4.1.1}$$

которое означает, что условная плотность вероятности в момент времени t_n однозначно определяется заданным значением y_{n-1} в момент t_{n-1} и не зависит от каких-либо величин в более ранние моменты времени. Величину $P_{1|1}$ называют *вероятностью перехода*.

Марковский процесс полностью определяется двумя функциями $P_1(y_1, t_1)$ и $P_{1|1}(y_2, t_2|y_1, t_1)$. По этим двум функциям можно восстановить всю иерархию. Действительно, положив $t_1 < t_2 < t_3$, имеем

$$\begin{aligned} P_3(y_1, t_1; y_2, t_2; y_3, t_3) &= \\ &= P_2(y_1, t_1; y_2, t_2) P_{1|2}(y_3, t_3|y_1, t_1; y_2, t_2) = \\ &= P_1(y_1, t_1) P_{1|1}(y_2, t_2|y_1, t_1) P_{1|1}(y_3, t_3|y_2, t_2). \end{aligned} \quad (4.1.2)$$

Продолжая этот алгоритм, можно последовательно найти P_n. Это свойство делает марковские процессы особенно удобными в обращении и служит причиной, по которой они оказываются столь полезными во многих приложениях.

Упражнение. Покажите, что число нейтронов в ядерном реакторе является марковским процессом (ср. с примечанием § 3.6).

Упражнение. Азартный игрок играет в орла и решку. Пусть Y_t — его капитал после t бросков. Покажите, что Y_t является дискретным по времени марковским процессом, и найдите его вероятность перехода.

Упражнение. Рассмотрите обычное дифференциальное уравнение $\dot{x} = f(x)$. Запишите решение, имеющее начальное значение x_0 в момент t_0, в виде $x = \varphi(x_0, t - t_0)$. Покажите, что x удовлетворяет определению марковского процесса с вероятностью перехода

$$P_{1|1}(x, t|x_0, t_0) = \delta[x - \varphi(x_0, t - t_0)]. \quad (4.1.3)$$

Это равенство справедливо также для многомерного x. Покажите, что любой детерминированный процесс является также марковским, хотя и сингулярного типа.

Упражнение. Хотя определение марковского процесса и выделяет одно направление времени, из него же следует аналогичное свойство для обратного упорядочения по времени. Докажите это с помощью (4.1.2).

Наиболее старым и хорошо известным примером марковского процесса в физике является броуновское движение*. Тяжелая частица погружена в жидкость, состоящую из легких молекул, которые сталкиваются с ней случайным образом. Вследствие этого под влиянием большого количества малых и, по-видимому, некоррелированных скачков скорость тяжелой частицы изменяется. Для простоты будем рассматривать движение как одномерное. Частица, имеющая скорость V, в среднем будет испытывать больше встречных столкновений, чем соударений, направленных по ходу движения. Следовательно, вероятность определенного изменения скорости δV

* По поводу истории броуновского движения см.: G. L. de Haas-Lorentz, Thesis (Leiden, 1912) перевод на немецкий; «Заметки» в: A. Einstein, Investigations on the Theory of Brownian Movement (A. D. Cowper transl., R. Furth ed. with notes, Methuen, London, 1926; Dover Publ., New York, 1956); S. G. Brush, Archive for the History of Exact Sciences 5, 1 (1968/69) = S. G. Brush, The Kind of Motion We Call Heat (North-Holland, Amsterdam, 1976) Vol. 2, Ch. 15.

в следующий отрезок времени Δt зависит от V, но не зависит от скорости в более ранние моменты времени. Значит, изменение скорости тяжелой частицы во времени является марковским процессом. Когда вся система находится в равновесии, процесс является стационарным и его автокорреляционное время представляет собой время затухания начальной скорости. Этот процесс подробно изучен в § 8.4.

Однако оказывается, что такая картина не дает согласия с экспериментами по броуновскому движению. Качественный скачок в понимании произошел, когда Эйнштейн и Смолуховский поняли, что это не то движение, которое наблюдается экспериментально. Действительно, между двумя последовательными наблюдениями положения броуновской частицы ее скорость увеличивается и уменьшается множество раз, так как интервал между двумя наблюдениями значительно превышает автокорреляционное время скорости. *То, что наблюдается, является результирующим смещением, происшедшим после большого количества изменений скорости.*

Рис. 4. Траектория броуновской частицы

Предположим, серия наблюдений одной и той же броуновской частицы дает последовательность координат X_1, X_2, ... Каждое смещение $X_{k+1}-X_k$ (рис. 4) случайно, но его распределение вероятности не зависит от предыстории, т. е. не зависит от X_{k-1}, X_{k-2}, ... Следовательно, марковским процессом является изменение не только скорости, но и координаты X частицы, измеренной в крупномасштабной шкале времени, что предписывается условиями эксперимента. Эта картина является основой теории броуновского движения, приведенной в § 8.3.

Этот пример демонстрирует несколько характерных черт, имеющих общее значение. Во-первых, понятно, что свойство марковости выполняется только приближенно. Если предыдущее смещение X_k-X_{k-1} оказалось большим, то в точке X_k более вероятна большая скорость. Эта скорость сохраняется в течение короткого времени (порядка времени автокорреляции скорости), и вследствие этого большие значения следующего смещения $X_{k+1}-X_k$ окажутся более предпочтительными. Таким образом, тот факт, что время автокорреляции *скорости* не нуль, приводит к некоторой корреляции между двумя последовательными *смещениями*. Этот эффект мал при условии, что время между двумя наблюдениями значительно превышает автокорреляционное время скорости.

Аналогично, сама скорость является марковским процессом только приближенно, потому что столкновения с молекулами не являются мгновенными, а имеют определенную длительность. В течение времени столкновения изменения скорости в ближайшем прошлом дают некоторую информацию о характере соударения и, следовательно, об изменении скорости в ближайшем будущем. Этот эффект мал при условии, что каждое отдельное столкновение происходит очень быстро, т. е. время взаимодействия мало, как если бы частицы

были почти твердыми сферами. В дополнение нужно, конечно, предположить, что движение броуновской частицы не вызывает упорядоченного течения в окружающей жидкости; такое течение могло бы влиять на вероятность столкновения в более поздние времена и, таким образом, действовать как накопитель памяти, нарушающий свойство марковости. Числовые расчеты * показали, что скорость выделенной молекулы газа не является марковским процессом как раз по этим причинам **.

Вторая, менее выраженная, черта состоит в том, что одну и ту же физическую систему можно описать двумя разными марковскими процессами в зависимости от уровня огрубления. Другим примером того же факта является диссоциация газа, состоящего из бинарных молекул:

$$AB \rightarrow A + B$$

(предполагается, что этот процесс происходит в присутствии фонового инертного газа, который обеспечивает необходимые столкновения). При достаточно грубом описании можно считать, что каждая молекула AB имеет определенную вероятность быть разбитой за единичное время в результате какого-либо столкновения. Следовательно, изменение концентрации в промежуток времени между t и $t + \Delta t$ имеет определенное распределение вероятности, зависящее от концентрации в момент времени t, но не зависящее от ее значения в предыдущие моменты времени. Таким образом, на этом уровне огрубления концентрация является марковским процессом. При более подробном описании различают колебательные состояния молекулы и изучают механизм расщепления, в котором последовательные столкновения перебрасывают молекулу с уровня на уровень, пока не перебросят через потенциальный барьер. Эти случайные блуждания по колебательным уровням представляют другой пример марковского процесса, который будет описан более подробно в § 7.5.

Применимость понятия марковского процесса не ограничена однокомпонентными процессами, но распространяется также на процессы, имеющие r компонент. Примеры: три компоненты скорости броуновской частицы, r химических компонент в реагирующей смеси. Сделаем, однако, одно существенное примечание.

Можно пренебречь некоторым количеством компонент любого r-компонентного стохастического процесса, а оставшиеся s компонент снова составят стохастический процесс. Однако если r-компонентный процесс был марковским, то процесс, образованный из $s < r$

---

* Alder B. J. and Wainwright T. E. Phys. Rev. Letters 18, 988 (1967); W. W. Wood in: Fundamental Problems in Statistical Mechanics III (Proc. Intern. Summer School at Wageningen, 1974; North-Holland, Amsterdam, 1975).

** Даже без упорядоченного течения марковское свойство нарушается возможностью захвата броуновской частицей молекулы, с которой произошло предыдущее столкновение. Однако, если частица тяжелая, такое событие происходит редко.

компонент, вообще говоря, уже не будет марковским. Если известны не все, а только несколько компонент, то этого еще не достаточно для предсказания вероятности на будущее даже для этих же самых нескольких компонент. В первом из вышеприведенных примеров каждая компонента скорости сама по себе является марковским процессом, однако во втором примере будущее распределение вероятности для количества вещества каждой из химических компонент определяется имеющимися в настоящий момент количествами вещества во *всех* компонентах.

Наоборот, если заданный физический процесс не является марковским, иногда можно его представить как часть марковского процесса, вводя дополнительные компоненты. Эти дополнительные компоненты нужны для явного описания информации, которая в естественном случае содержалась бы неявно в прошлых значениях переменных. В качестве примера снова рассмотрим броуновскую частицу, но на этот раз в поле неоднородной внешней силы. Тогда изменение скорости в течение времени Δt уже не определяется одними столкновениями, а зависит также от внешней силы и, следовательно, от положения частицы. Координаты частицы зависят от скорости во все предыдущие моменты времени, так что скорость частицы уже не является марковским процессом. Однако двухкомпонентный процесс, образованный скоростью и координатами частицы, является марковским (см. § 8.7).

Любую замкнутую изолированную физическую систему в принципе можно описать с помощью марковского процесса, если ввести все микроскопические переменные как компоненты Y. Действительно, микроскопическое движение в фазовом пространстве детерминистично и, следовательно, обладает свойством марковости (ср. с (4.1.3)). Физический вопрос, однако, состоит в том, можно ли найти намного меньшее множество переменных, изменение которых со временем будет описываться многокомпонентным марковским процессом. Хорошо известен, но все еще остается загадочным экспериментальный факт, что это действительно возможно для большинства многочастичных систем в природе. Конечно же, такое описание даже в лучшем случае является приближенным на ограниченно макроскопическом, очень грубом уровне. Такое сведение к намного меньшему числу переменных называют *сверткой* или *проекцией*, но обоснование этого приближения затрагивает фундаментальные проблемы статистической механики и все еще является объектом многочисленных дискуссий *.

Предостережение. В физической литературе эпитет «марковский» часто используют с вольностью, достойной сожаления. Этот термин обладает магической притягательностью, которая привлекает использовать его в интуитивном смысле, выходящем за рамки его определения. Читатель должен остерегаться таких ловушек.

---

* См. литературу к § 3.2.

1. Когда физик говорит о «процессе», он обычно подразумевает определенное *явление*, включающее время. Что касается процесса, определенного таким образом, было бы неправильным обсуждать вопрос, является ли он марковским или нет, пока не будут определены переменные, в которых он будет описываться. Искусство физика состоит в выборе переменных, которые делают описание приближенно марковским.

2. Критерий (4.1.1) является условием на все функции распределения P_n иерархии. Нельзя утверждать, что процесс марковский, имея информацию только о нескольких первых функциях P_n. С другой стороны, если известно, что процесс марковский, то, конечно же, знания функций P_1 и P_2 достаточно, чтобы определить весь процесс.

3. Часто возникают уравнения вида

$$\dot{P}(y, t) = \Omega[P(y, t)], \tag{4.1.4}$$

где Ω — линейный или нелинейный оператор, действующий на переменную y. В соответствии с этим уравнением $P(y, t_0)$ в любой момент времени t_0 однозначно определяет $P(y, t)$ при любых $t > t_0$. Из этого факта зачастую делают неправильный вывод, что $Y(t)$ — марковский процесс. Сначала нужно выяснить, что означает $P(y, t)$. Если окажется, что это $P_1(y, t)$, то уравнение просто указывает, что одновременное распределение вероятности величины $Y(t)$ описывается дифференциальным уравнением, но это уравнение не дает информации о функциях распределения высших порядков, которые входят в (4.1.1). Например, для любого стационарного процесса имеет место уравнение $\dot{P}_1(y, t) = 0$, но, конечно же, не все стационарные процессы являются марковскими.

С другой стороны, уравнение (4.1.4) может означать, что любое решение с начальным условием $P(y, t_0) = \delta(y - y_0)$ идентично вероятности перехода $P_{1|1}(y, t \mid y_0, t_0)$. Действительно, основное кинетическое уравнение, выведенное в следующей главе для марковских процессов, относится к тому же типу. Однако оно не может гарантировать марковости ввиду того, что ничего не говорит нам о функциях распределения высших порядков *.

4. Иногда из уравнений следует, что $\dot{P}$ выражается через все более ранние значения P, например

$$\dot{P}(t) = \int_0^t G(t, t') P(t') \, dt', \tag{4.1.5}$$

где G — линейный оператор, действующий на переменную y. Основная мысль состоит в том, что решение с начальным значением $P(y, 0) = \delta(y - y_0)$ представляет собой $P_{1|1}(y, t \mid y_0, 0)$. Из этого «немарковского» уравнения можно сделать вывод, что $Y(t)$ при $t > 0$ не может быть марковским процессом. Однако уравнение (4.1.5) не означает, что необходимо знать значения $P_{1|1}(y, t' \mid y_0, 0)$ в предшествующие моменты времени для того, чтобы узнать их будущие значения. Контрпример будет дан в (4.2.9).

Упражнение. Должно ли случайное блуждание с памятью (1.7.8) называться марковским процессом? (Ответ дан в § 4.5.)

Упражнение. В качестве примера (4.1.4) решите уравнение

$$\frac{\partial P(y, t)}{\partial t} = \int_{-\infty}^{\infty} P(y', t) P(y - y', t) \, dy' - P(y, t) \quad (-\infty < y < \infty)$$

---

* Оператор Ω в основном кинетическом уравнении линеен. Можно показать, что вероятность перехода марковского процесса не может удовлетворять нелинейному уравнению вида (4.1.4). Аргументы в пользу этого утверждения аналогичны использованным в работе D. Polder, Phil. Mag. **45**, 69 (1954).

с начальным условием $P(y, t_0) = \delta(y - y_0)$. Если $Y(t)$ — стохастический процесс, вероятность перехода которого $P_{1|1}(y, t | y_0, t_0)$ дается этим решением, он не может быть марковским, потому что решение не удовлетворяет уравнению Чепмена — Колмогорова (следующий параграф).

4.2. УРАВНЕНИЕ ЧЕПМЕНА — КОЛМОГОРОВА

Интегрируя тождество (4.1.2) по y_2, получаем для $t_1 < t_2 < t_3$

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

Разделив обе части на $P_1(y_1, t_1)$, получим

$$P_{1|1}(y_3, t_3 | y_1, t_1) = \\ = \int P_{1|1}(y_3, t_3 | y_2, t_2) P_{1|1}(y_2, t_2 | y_1, t_1) \, dy_2. \qquad (4.2.1)$$

Это соотношение называют *уравнением Чепмена — Колмогорова* *. Этому тождеству должна удовлетворять вероятность перехода любого марковского процесса. Упорядочение по времени существенно: t_2 лежит между t_1 и t_3. Уравнение, конечно же, справедливо и в том случае, когда y является вектором, имеющим r компонент, и в том, когда y принимает только дискретные значения, но интеграл в этом случае является суммой.

Как отмечено в § 4.1, любой марковский процесс полностью определяется функциями P_1 и $P_{1|1}$, потому что по ним можно построить всю иерархию P_n. Эти две функции не могут быть выбраны произвольно, а должны удовлетворять двум тождествам:

1) уравнению Чепмена — Колмогорова (4.2.1);
2) очевидному, но необходимому соотношению

$$P_1(y_2, t_2) = \int P_{1|1}(y_2, t_2 | y_1, t_1) P_1(y_1, t_1) \, dy_1. \qquad (4.2.2)$$

И наоборот, любые две неотрицательные функции P_1, $P_{1|1}$, удовлетворяющие этим условиям непротиворечивости, однозначно определяют некоторый марковский процесс.

Упражнение. Уравнение Чепмена — Колмогорова (4.2.1) утверждает, что процесс, имеющий начальное значение y_1 в момент t_1, достигает значения y_3 в момент t_3 через любое из возможных значений y_2 в промежуточный момент времени t_2. В каком месте марковское свойство входит в уравнение?

Упражнение. Предположим, что решение уравнения Чепмена — Колмогорова известно и мы хотим его использовать для построения марковского процесса. Как это можно сделать и какой свободой при этом мы еще обладаем?

---

* Его называют также *уравнением Смолуховского*, но мы будем избегать этого названия, поскольку оно беспорядочно используется для тесно связанных, но неодинаковых уравнений. Более ранняя ссылка (на Бэчеллера (Bachelier)) дана в работе E. W. Montroll and B. J. West in: Studies in Statistical Mechanics VII (E. W. Montroll and J. L. Lebowitz eds., North-Holland, Amsterdam, 1979), p. 76.

Упражнение. Пусть Y имеет множество возможных значений ± 1. Покажите, что

$$P_{1|1}(y, t \mid y', t') = \frac{1}{2}\left\{1 + e^{-2\gamma(t-t')}\right\}\delta_{y,y'} + \frac{1}{2}\left\{1 - e^{-2\gamma(t-t')}\right\}\delta_{y,-y'} \quad (4.2.3)$$

удовлетворяет уравнению Чепмена—Колмогорова. Покажите, что это не противоречит соотношению $P_1(y, t) = {}^1/_2(\delta_{y,1} + \delta_{y,-1})$. Марковский процесс, определенный таким образом, называют *дихотомическим марковским процессом* или *случайным «телеграфным процессом»*.

Упражнение. Предположим, что величина Y принимает два возможных значения и вероятность скачкообразного изменения за время dt есть $\gamma\, dt$. Покажите, что $Y(t)$—тот же самый процесс, что и выше.

Упражнение. Запишите соотношение (4.2.3) в виде 2×2-матрицы и сформулируйте уравнение Чепмена—Колмогорова как свойства этой матрицы.

Упражнение. Пусть $Y(t)$—процесс, в котором величина Y принимает значения 0, 1, а t может иметь только три значения. Тогда существуют восемь выборочных функций. Из этих восьми мы приписываем вероятность 1/4 каждой из следующих четырех:

$$1,\ 0,\ 0;\quad 0,\ 1,\ 0;\quad 0,\ 0,\ 1;\quad 1,\ 1,\ 1.$$

Остальные четыре имеют нулевую вероятность. Покажите, что этот процесс удовлетворяет уравнению Чепмена—Колмогорова, но не является марковским *.

Упражнение. Приведенную выше модель можно распространить на бесконечную последовательность единиц и нулей путем объединения таких триплетов. Является ли эта последовательность стационарным процессом?

Упражнение. Если вероятность перехода $P_{1|1}(y_2, t_2 \mid y_1, t_1)$ зависит от t_1, t_2 только посредством их разности $t_2 - t_1$, то, вообще говоря, возможно выбирать P_1 в (4.2.2) так, что марковский процесс получится стационарным. Однако приведенное ниже выражение (4.2.4) является исключением.

Следующие два примера марковских процессов имеют особую важность:

1. Легко проверить, что для $-\infty < y < \infty$ уравнение Чепмена—Колмогорова удовлетворяется, если считать, что для $t_2 > t_1$ имеет место

$$P_{1|1}(y_2, t_2 \mid y_1, t_1) = \frac{1}{\sqrt{2\pi(t_2 - t_1)}} \exp\left[-\frac{(y_2 - y_1)^2}{2(t_2 - t_1)}\right]. \quad (4.2.4)$$

Выбрав $P_1(y_1, 0) = (y_1)$, определим нестационарный марковский процесс, который называют *винеровским процессом* или *процессом Винера—Леви* **. Обычно его рассматривают только для $t > 0$, и вначале он был изобретен для описания стохастического поведения координаты броуновской частицы (см. § 8.3). Плотность вероятности при $t > 0$ в соответствии с (4.2.2) имеет вид

$$P_1(y, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi t}} \exp\left[\frac{y^2}{2t}\right]. \quad (4.2.5)$$

---

* E. Parzen, Stochastic Processes (Holden-Day, San Francisco, 1962), p. 203. Другие примеры такого эффекта даются в работах P. Levy, Comptes Rendus 228, 2004 (1949) и W. Feller, Ann. Mathem. Statist. 30, 1252 (1959).

** N. Wiener, J. Math. and Phys. 2, 131 (1923); Cox and Milller, p. 205.

2. Величина $Y(t)$ принимает только значения $n=0, 1, 2, \ldots$ $t \geqslant 0$. Марковский процесс определен соотношением ($t_2 \geqslant t_1 \geqslant 0$)

$$P_{1|1}(n_2, t_2 | n_1, t_1) = \frac{(t_2-t_1)^{n_2-n_1}}{(n_2-n_1)!} e^{-(t_2-t_1)}; \qquad (4.2.6)$$
$$P_1(n, 0) = \delta_{n,0}.$$

При этом подразумевается, что $P_{1|1}=0$ для $n_2 < n_1$. Таким образом, каждая выборочная функция $y(t)$ представляет собой последовательность шагов единичной высоты в случайные моменты времени (рис. 5). Эта последовательность однозначно определяется моментами времени, в которые эти шаги совершаются. Эти моменты времени образуют случайное множество точек на оси времени. Их количество между любыми двумя моментами времени распределено по закону Пуассона (4.2.6). Поэтому $Y(t)$ называют *пуассоновским процессом*, он описывает ту же ситуацию, что рассмотрена в § 2.2.

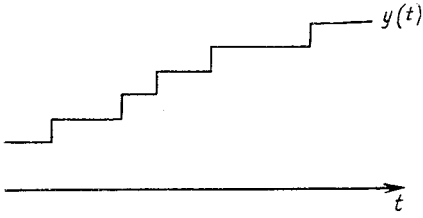

Рис. 5. Выборочная функция процесса Пуассона

Упражнение. Запишите иерархию функций P_n для винеровского процесса.

Упражнение. Докажите следующие соотношения для винеровского процесса:

$$\langle Y(t_1) Y(t_2) \rangle = \mathrm{Min}(t_1, t_2); \qquad (4.2.7а)$$
$$\langle \{Y(t_1) - Y(t_2)\} \{Y(t_3) - Y(t_4)\} \rangle = (t_1, t_2) \cap (t_3, t_4). \qquad (4.2.7б)$$

Правая часть (4.2.7б) означает длину перекрытия обоих интервалов.

Упражнение. Докажите также для винеровского процесса, что при $0 < t_1 < t_2$

$$\langle y_2 \rangle_{y_1} = y_1, \qquad \langle\langle y_2^2 \rangle\rangle_{y_1} = t_2 - t_1, \qquad (4.2.7в)$$
$$\langle y_1 \rangle_{y_2} = \frac{t_1}{t_2} y_2, \qquad \langle\langle y_1^2 \rangle\rangle_{y_2} = \frac{t_1}{t_2}(t_2 - t_1). \qquad (4.2.7г)$$

Здесь y_1, y_2 обозначены $Y(t_1)$, $Y(t_2)$; символ $\langle\ \rangle_z$ означает условное среднее при постоянном z.

Упражнение. Найдите моменты $\langle Y(t_1) Y(t_2) \ldots Y(t_n) \rangle$ винеровского процесса. (Используйте (1.6.11).)

Упражнение. Покажите, что (4.2.5) удовлетворяет уравнению диффузии

$$\frac{\partial P}{\partial t} = D \frac{\partial^2 P}{\partial y^2} \qquad (4.2.8)$$

для $D = 1/2$. Каково решение для произвольного $D > 0$?

Упражнение. Убедитесь в том, что определение (2.2.6) непротиворечиво.

Упражнение. Определите для пуассоновского процесса те же величины, что и в (4.2.7).

Упражнение. Вероятность перехода $P_{1|1}(y, t | y_0, 0)$ винеровского процесса подчиняется (4.1.5), когда G — заданный оператор с ядром

$$G(y, t | y', t') = \frac{\partial}{\partial t} \frac{1}{t} \frac{1}{\sqrt{2\pi(t-t')}} \exp\left[\frac{(y-y')^2}{2(t-t')}\right]. \qquad (4.2.9)$$

Упражнение. Как замечено в § 4.1, марковский процесс с обращенным направлением времени также является марковским процессом. Постройте иерархию функций распределения для такого обращенного марковского процесса и убедитесь в том, что его вероятность перехода удовлетворяет уравнению Чепмена — Колмогорова.

4.3. СТАЦИОНАРНЫЕ МАРКОВСКИЕ ПРОЦЕССЫ

Стохастические процессы, которые одновременно являются марковскими и стационарными, представляют собой интерес, в частности для описания равновесных флуктуаций. Предположим, что замкнутая изолированная физическая система описывается величиной или множеством величин $Y(t)$, которые можно рассматривать как марковский процесс. В том случае, когда эта система находится в равновесии, $Y(t)$ является стационарным марковским процессом. В частности, P_1 не зависит от времени и является обычным

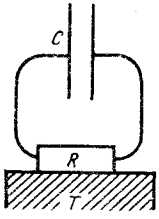

Рис. 6. RC-цепь с сопротивлением, поддерживаемым при постоянной температуре

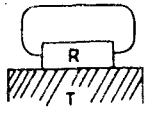

Рис. 7. Шунтированное сопротивление при фиксированной температуре

равновесным распределением величины Y, определенным в соответствии с равновесной статистической механикой. В качестве примера рассмотрим систему, состоящую из цепи, образованной сопротивлением R и емкостью C (рис. 6). Флуктуирующее напряжение $Y(t)$ на конденсаторе в хорошем приближении является марковским процессом при условии, что индуктивностью цепи можно пренебречь. Когда R поддерживается при постоянной температуре T, напряжение $Y(t)$ является стационарным марковским процессом и

$$P_1(y_1) = \left(\frac{C}{2\pi kT}\right)^{1/2} \exp\left[-\frac{Cy_1^2}{2kT}\right].$$

В качестве альтернативного примера можно привести флуктуации тока в цепи, образованной шунтированным сопротивлением при постоянной температуре (рис. 7).

Даже тогда, когда система находится в стационарном состоянии, отличном от равновесия, определенные физические величины могут описываться стационарными марковскими процессами. В качестве примера можно привести флуктуации тока в цепи, изображенной на рис. 7, когда в нее добавлена батарея, что означает постоянную

разность потенциалов и, следовательно, ненулевой средний ток. Другим примером является броуновская частица в однородном гравитационном поле: ее вертикальная скорость является стационарным процессом, однако это утверждение несправедливо относительно ее координаты.

Вероятность перехода $P_{1|1}$ стационарного марковского процесса зависит не от двух времен, а только от временнóго интервала, для этого случая введем специальные обозначения

$$P_{1|1}(y_2,\ t_2 \mid y_1,\ t_1) = T_\tau(y_2 \mid y_1), \tag{4.3.1}$$

где $\tau = t_2 - t_1$. Тогда уравнение Чепмена — Колмогорова принимает вид ($\tau,\ \tau' > 0$)

$$T_{\tau+\tau'}(y_3 \mid y_1) = \int T_{\tau'}(y_3 \mid y_2)\, T_\tau(y_2 \mid y_1)\, dy_2. \tag{4.3.2}$$

Если понимать интеграл как произведение двух матриц или интегральных ядер, то это уравнение можно переписать в следующем виде:

$$T_{\tau+\tau'} = T_{\tau'} T_\tau \qquad (\tau,\ \tau' > 0). \tag{4.3.3}$$

Примечание. Хотя формулы (4.3.2) и (4.3.3) справедливы только при положительных τ и τ', определение (4.3.1) не ограничено положительными τ. Однако величины T_τ и $T_{-\tau}$ связаны тождеством. Вспоминая значения $P_{1|1}$ (см. (3.4.3)), получаем при $\tau = t_2 - t_1$

$$P_2(y_1,\ t_1;\ y_2,\ t_2) = T_\tau(y_2 \mid y_1)\, P_1(y_1). \tag{4.3.4}$$

Поскольку P_2 симметрична, имеем

$$T_\tau(y_2 \mid y_1)\, P_1(y_1) = T_{-\tau}((y_1 \mid y_2)\, P_1(y_2). \tag{4.3.5}$$

Это тождество справедливо для всех стационарных марковских процессов и поэтому может быть применено к физическим системам, находящимся в равновесии *без дополнительного вывода его из уравнений движения*. Однако это тождество не следует путать с соотношением детального равновесия, которое отличается от него тем, что имеет $+\tau$ в члене, стоящем в правой части равенства. Детальное равновесие является физическим свойством, которое не вытекает из явного определения T_τ, но требует физического вывода (см. § 4.6). Для того чтобы избежать неправильного использования уравнений (4.3.2) и (4.3.3), мы условимся, что в будущем не будем использовать символ T_τ для отрицательных τ.

Упражнение. Мы не исключаем $\tau = 0$, но определяем

$$T_0(y_2 \mid y_1) = \delta(y_2 - y_1). \tag{4.3.6}$$

Покажите, что это равенство согласуется с (4.3.2) и (4.3.3).

Упражнение. Покажите, что (4.3.2) также может быть справедливым, когда и τ и τ' отрицательны. (Если только мы не должны исключать отрицательные значения.)

Упражнение. Убедитесь в том, что дихотомический марковский процесс (4.2.3) стационарен и удовлетворяет уравнению (4.3.3). Что может означать $T_{-\tau}$ в этом случае? Покажите, что уравнение (4.3.3) несправедливо при $\tau > 0$, $\tau' < 0$.

Упражнение. Автокорреляционная функция стационарного марковского процесса дается выражением

$$\varkappa(\tau) = \iint y_1 y_2 T_\tau(y_2 \mid y_1)\, P_1(y_1)\, dy_1\, dy_2 \qquad (\tau \geq 0). \tag{4.3.7}$$

Упражнение. Докажите тождества

$$\int T_\tau(y_2 \mid y_1)\, dy_2 = 1, \tag{4.3.8}$$

$$\int T_\tau(y_2 \mid y_1)\, P_1(y_1)\, dy_1 = P_1(y_2). \tag{4.3.9}$$

Выведите отсюда, что если T_τ рассматривать как оператор, то он имеет собственное значение, равное 1 с левым собственным вектором $\psi(y) \equiv 1$ и правым P_1.

Самым известным примером стационарного марковского процесса является *процесс Орнштейна—Уленбека* *, определенный соотношениями

$$P_1(y_1) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2} y_1^2}, \tag{4.3.10}$$

$$T_\tau(y_2 \mid y_1) = \frac{1}{\sqrt{2\pi(1-e^{-2\tau})}} \exp\left[-\frac{(y_2 - y_1 e^{-2\tau})^2}{2(1-e^{-2\tau})}\right]. \tag{4.3.11}$$

Читателю не составит труда убедиться в том что оба условия непротиворечивости, приведенные в § 4.2, удовлетворяются. Первоначально этот процесс был построен для описания стохастического поведения *скорости* броуновской частицы (см. § 8.2) Ясно, что он имеет нулевое среднее значение и автокорреляционную функцию простого вида

$$\varkappa(\tau) = e^{-\tau}. \tag{4.3.12}$$

Процесс Орнштейна—Уленбека стационарен и обладает свойствами гауссовости и марковости. *Теорема Дуба* ** утверждает, что *имеется практически только один процесс, обладающий этими тремя свойствами*. Под словами «практически один процесс» мы понимаем, что допустимы линейные преобразования величин y и t и что имеется еще один, хотя и тривиальный, процесс, обладающий такими же свойствами (см. упражнение ниже). Дадим набросок доказательства.

Пусть $Y(t)$ — стационарный гауссов марковский процесс. Путем сдвига и изменения масштаба системы координат мы можем убедиться в том, что $P_1(y)$ равно (4.3.10). Вероятность перехода — гауссова и, следовательно, имеет общий вид

$$T_\tau(y_2 \mid y_1) = D e^{-\frac{1}{2}(Ay_2^2 + 2By_2y_1 + Cy_1^2)},$$

где A, B, C, D — функции, зависящие от τ. Условие нормировки (4.3.8) дает

$$D = \sqrt{A/(2\pi)}, \quad C = B^2/A,$$

---

* G. E. Uhlenbeck and L. S. Ornstein, Phys. Rev. 36, 823 (1930); reprinted in Wax.

** J. L. Doob, Annals of Math. 43, 351 (1942); reprinted in Wax. Other theorems about Gaussian processes are given in J. L. Doob, Ann. Mathem. Statist. 15, 229 (1944).

в то время как из (4.3.9) следует дополнительное условие $B^2 = A(A-1)$. Остается только один неизвестный параметр A, который можно выразить через другой неизвестный параметр — автокорреляционную функцию, используя формулу (4.3.7), которая дает $A = (1-\varkappa^2)^{-1}$. Отсюда

$$T_\tau(y_2 \mid y_1) = \frac{}{\sqrt{2\pi(1-\varkappa^2)}} \exp\left[-\frac{(y_2-\varkappa y_1)^2}{2(1-\varkappa^2)}\right]. \tag{4.3.13}$$

Теперь возьмем третий момент времени $t_3 = t_2 + \tau'$ $(\tau' > 0)$ и, использовав (4.3.2), получим

$$\varkappa(t_3-t_1) = \int y_3\,\mathrm{d}y_3 \int T_{\tau'}(y_3 \mid y_2)\,\mathrm{d}y_2, \tag{4.3.14}$$
$$T_\tau(y_2 \mid y_1)\, y_1 P_1(y_1)\,\mathrm{d}y_1 = \varkappa(t_3-t_2)\,\varkappa(t_2-t_1).$$

Это функциональное соотношение для функции $\varkappa(\tau)$ показывает, что

$$\varkappa(\tau) = \mathrm{e}^{-\gamma\tau}. \tag{4.3.15}$$

Подстановка этого результата в (4.3.13) завершает доказательство (ср. с (4.3.11)).

Вторая теорема утверждает, что *если $Y(t)$ — стационарный гауссов случайный процесс, имеющий экспоненциальную автокорреляционную функцию*

$$\varkappa(\tau) = \varkappa(0)\,\mathrm{e}^{-\gamma\tau},$$

то *$Y(t)$ — процесс Орнштейна — Уленбека и, следовательно, марковский процесс.* Для доказательства предположим, что процесс имеет нулевое среднее значение и единичную дисперсию. Тогда производящий функционал (3.4.7) имеет вид

$$G([k]) = \exp\left[-\frac{1}{2}\iint k(t_1)\,k(t_2)\,\mathrm{e}^{-\gamma|t_1-t_2|}\,\mathrm{d}t_1\,\mathrm{d}t_2\right],$$

что совпадает с производящим функционалом процесса Орнштейна — Уленбека.

Упражнение. Найдите производящий функционал и все моменты процесса Орнштейна — Уленбека.

Упражнение. Пусть φ — случайный угол и $0 \leqslant \varphi < 2\pi$. Пусть $P_1(\varphi) = 1/(2\pi)$ и $T_\tau(\varphi \mid \varphi_0)$ — решение уравнения

$$\frac{\partial T_\tau(\varphi)}{\partial\tau} = \gamma\frac{\partial^2 T_\tau(\varphi)}{\partial\varphi^2}; \qquad T_0(\varphi \mid \varphi_0) = \delta(\varphi-\varphi_0). \tag{4.3.16}$$

Найдите функции P_n для этого негауссова стационарного марковского процесса.

Упражнение. Определим случайный процесс $Y(t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha t + \mathrm{i}\varphi}$ с фиксированными α и φ, как в предыдущем упражнении. Покажите, что его спектральная плотность имеет лоренцевский вид (1.2.2).

Упражнение. Выведите (4.3.13) из (1.6.12).

Упражнение. «Абсолютно случайный процесс» определяется свойством

$$P_n(y_1, t_1; y_2, t_2; \ldots; y_n, t_n) = P_1(y_1, t_1)\,P_1(y_2, t_2)\ldots P_1(y_n, t_n).$$

Постройте такой процесс, обладающий тремя свойствами, обусловленными в теореме Дуба. В каком месте нашего доказательства мы упустили эту возможность?

Упражнение. Найдите три примера процессов, каждый из которых обладает двумя, но не тремя свойствами, обусловленными в теореме Дуба.

Упражнение. Докажите, что для любого гауссова процесса (с нулевым средним и единичной дисперсией) условное среднее в точке t_2 при заданном значении в точке t_1 имеет вид

$$\langle Y(t_2)\rangle_{Y(t_1)=y_1} = \varkappa(t_2, t_1)\, y_1. \tag{4.3.17}$$

Тогда для марковского процесса следует, что при $t_1 < t_2 < t_3$

$$\varkappa(t_3, t_1) = \varkappa(t_3, t_2)\,\varkappa(t_2, t_1). \tag{4.3.18}$$

Упражнение. Пусть Y — гауссов марковский процесс, имеющий r переменных. Примените линейное преобразование, с тем чтобы $P_1(y, t) \sim \exp \sim [-{}^1/_2 y^2]$. Затем выведите для автокорреляционной матрицы соотношение

$$K(t_3, t_1) = K(t_3, t_2)\, K(t_2, t_1) \qquad (t_1 \leqslant t_2 \leqslant t_3). \tag{4.3.19}$$

Если процесс является еще и стационарным, то отсюда следует, что $K(\tau) = e^{-\tau G}$ с постоянной матрицей G *.

Упражнение. Покажите, что (4.3.11) удовлетворяет уравнениям

$$\frac{\partial T}{\partial \tau} = \frac{\partial}{\partial y_2} y_2 T + \frac{\partial^2 T}{\partial y_2^2}, \tag{4.3.20}$$

$$\frac{\partial T}{\partial \tau} = -y_1 \frac{\partial T}{\partial y_1} + \frac{\partial^2 T}{\partial y_1^2}, \tag{4.3.21}$$

которые представляют собой прямое и обратное уравнения Колмогорова для процесса Орнштейна — Уленбека (ср. с. (6.10.9)).

Упражнение. Пусть $Y(t)$ — процесс Орнштейна — Уленбека; определим $Z(t) = \int_0^t Y(t')\,dt'$ при $t \geqslant 0$. Процесс $Z(t)$ является гауссовым, но не является ни стационарным, ни марковским. Покажите, что

$$\langle Z(t_1)\, Z(t_2)\rangle = e^{-t_1} + e^{-t_2} - 1 - e^{-|t_1 - t_2|} + 2\min(t_1, t_2).$$

Упражнение. Для того же процесса $Z(t)$ найдите характеристический функционал и используйте его для получения следующего соотношения:

$$\langle \cos\{Z(t_1) - Z(t_2)\}\rangle = \exp\left[-e^{-|t_1 - t_2|} + 1 + |t_1 - t_2|\right].$$

Упражнение. В процессе Орнштейна — Уленбека измените масштаб переменных: $y = \alpha y'$, $t = \beta t'$ — и покажите, что в соответствующим образом выбранном пределе по α и β величина $P_{1|1}$ сводится к вероятности перехода для винеровского процесса.

Упражнение. Более общая формулировка второй теоремы дана в [2, p. 94]. Пусть $Y(t)$ — нестационарный гауссов процесс с дисперсией $\sigma^2(t)$; $\rho(t_1, t_2) = \varkappa(t_1, t_2)/\sigma(t_1)\,\sigma(t_2)$ — его коэффициент корреляции. (1.3.9). Тогда соотношение (ср. с (4.3.18))

$$\rho(t_3, t_1) = \rho(t_3, t_2)\,\rho(t_2, t_1) \qquad (t_1 \leqslant t_2 \leqslant t_3)$$

является необходимым и достаточным условием марковости процесса $Y(t)$. Убедитесь в том, что винеровский процесс удовлетворяет этому соотношению.

Упражнение. Если $Y(t)$ — процесс Орнштейна — Уленбека, определенный выше,

---

* См. [5, с. 130, замечание II] также R. F. Fox and G. E. Uhlenbeck, Phys. Fluids **13**, 1893 (1970).

и $t > t_1 > t_2 > \ldots > t_n$, то

$$\frac{d}{dt}\langle Y(t)\,Y(t_1)\,Y(t_2)\ldots Y(t_n)\rangle = -\langle Y(t)\,Y(t_1)\,Y(t_2)\ldots Y(t_n)\rangle.$$

Следовательно, если $\varphi(t\,[Y])$ — функционал, зависящий от t и всех значений Y во все предшествующие t моменты времени, то имеет место равенство *

$$\frac{d}{dt}\langle Y(t)\,\varphi(t,\,[Y])\rangle = \left\langle Y(t)\frac{d\varphi}{dt}\right\rangle - \langle Y(t)\,\varphi\rangle.$$

4.4. ВЫДЕЛЕНИЕ ПОДАНСАМБЛЯ

В § 3.4 было отмечено, что, налагая условие на выборочные функции стохастического процесса, можно определить подансамбль. Эта концепция «выделения подансамбля» оказывается особенно полезной в случае стационарных марковских процессов. Поэтому мы рассмотрим этот случай более строго.

Пусть стационарный марковский процесс $Y(t)$ задан функциями $P_1(y_1)$ и $T_\tau(y_2\,|\,y_1)$. Возьмем выделенный момент времени t_0 и зафиксируем величину y_0. Определим новый нестационарный марковский процесс $Y^*(t)$ для $y \geqslant t_0$, полагая

$$P_1^*(y_1,\ t_1) = T_{t_1-t_0}(y_1\,|\,y_0), \tag{4.4.1а}$$

$$P_{1|1}^*(y_2,\ t_2\,|\,y_1,\ t_1) = T_{t_2-t_1}(y_2\,|\,y_1). \tag{4.4.1б}$$

В несколько более общем случае можно выделить подансамбль, в котором в зафиксированный момент времени t_0 значения Y_0 распределены в соответствии с заданным распределением вероятности $p(y_0)$. Это равносильно тому, что

$$P_1^*(y_1,\ t_1) = \int T_{t_1-t_0}(y_1\,|\,y_0)\,p(y_0)\,dy_0, \tag{4.4.2а}$$

$$P_{1|1}^*(y_2,\ t_2\,|\,y_1,\ t_1) = T_{t_2-t_1}(y_2\,|\,y_1). \tag{4.4.2б}$$

Этот процесс можно рассматривать как усиленный вариант смеси процессов (4.4.1).

Эти процессы нестационарны из-за условия, выделяющего определенный момент времени t_0. Однако их вероятность перехода зависит только от разности времен, так же как и вероятность перехода исходного стационарного процесса. Нестационарные марковские процессы с вероятностью перехода, зависящей только от разности времени, называют *однородными* **). Они часто оказываются подансамблями стационарных марковских процессов в смысле, описанном выше. Однако винеровский процесс, определенный в § 4.2, является при-

* V. E. Shapiro and V. M. Loginov. Physica, 91A, 563 (1978).

** Название относится к однородности во времени. К сожалению, это может привести к путанице, потому что процесс может быть однородным в пространстве, т. е. инвариантным относительно сдвигов в пространстве в состоянии y. Поэтому чаще мы будем употреблять длинное выражение «марковский процесс со стационарной вероятностью перехода».

мером однородного процесса, который нельзя представить как подансамбль стационарного марковского процесса.

С физической точки зрения выделение подансамбля означает, что система должна находиться в определенном равновесном состоянии. Можно ожидать, что по прошествии большого времени система вернется к равновесию, так что

$$P_1^*(y_1, t_1) \to P_1(y_1) \qquad \text{при } t \to \infty.$$

Так как это должно быть справедливым при произвольном $p(y_0)$, то должно выполняться условие

$$T_{t_1 - t_0}(y_1 \mid y_0) \to P_1(y_1). \tag{4.4.3}$$

Доказательство того, что это в самом деле так, является одной из принципиальных проблем теории марковских процессов (см. § 5.3).

Выделение однородного процесса из стационарного марковского процесса является обычной процедурой в теории линейного отклика. В качестве примера* возьмем образец парамагнитного материала, помещенный в постоянное внешнее магнитное поле B. Намагниченность Y в направлении поля является стационарным стохастическим процессом с макроскопическим средним значением и малыми флуктуациями около него. На минуту предположим, что это марковский процесс. Функция $P_1(y)$ дается каноническим распределением

$$P_1(y) = \frac{\mathrm{Sp}\left[\delta(y-Y)\,\mathrm{e}^{-(H-BY)/(kT)}\right]}{\mathrm{Sp}\,\mathrm{e}^{-(H-BY)/(kT)}}. \tag{4.4.4}$$

Здесь H — оператор Гамильтона системы в отсутствие внешнего поля, Y — оператор, соответствующий намагниченности, а Sp является квантово-механическим эквивалентом классического интеграла по фазовому пространству.

Теперь предположим, что для $-\infty < t < t_0$ индукция магнитного поля есть $B + \Delta B$ и в момент времени t_0 это значение скачком изменяется и становится равным B. Тогда распределение в момент t_0 имеет вид

$$p(y) = \frac{\mathrm{Sp}\left[\delta(y-Y)\,\mathrm{e}^{-\{H-(B+\Delta B)Y\}/(kT)}\right]}{\mathrm{Sp}\,\mathrm{e}^{-\{H-(B+\Delta B)Y\}/(kT)}}. \tag{4.4.5}$$

При $t > t_0$ намагниченность Y будет однородным процессом с начальным распределением p, заданным (4.4.5) и той же самой вероятностью перехода, что и в равновесном случае с внешним полем B. Следовательно,

$$\langle Y(t)\rangle^* = \iint y T_{t-t_0}(y \mid y_0)\, p(y_0)\, \mathrm{d}y_0\, \mathrm{d}y. \tag{4.4.6}$$

---

* R. Kubo and K. Tomita, J. Phys. Soc. Japan 9, 888 (1954); C. P. Slichter, Principles of Magnetic Resonance (Harper and Row, New York, 1963) R. Lenk, Brownian Motion and Spin Relaxation (Elsevier, Amsterdam, 1977).

Таким образом, путь, по которому макроскопическое среднее приспосабливается к новому полю B, определяется вероятностью перехода равновесных флуктуаций в этом поле.

Если интересоваться только *линейным* откликом, то можно получить более изящный результат. Разложение (4.4.5) в первом порядке по ΔB имеет вид

$$p(y) = P_1(y) + \frac{\Delta B}{kT}\{y - \langle Y\rangle_B\} P_1(y) + O(\Delta B^2),$$

где $P_1(y)$ — распределение (4.4.4); $\langle Y\rangle_B$ — соответствующее среднее. Подстановка этого выражения в (4.4.6) после небольших алгебраических вычислений дает

$$\langle Y(t)\rangle^* = \langle Y\rangle_B + \frac{\Delta B}{kT}\varkappa(t - t_0).$$

Таким образом, необратимая релаксация средней намагниченности (в линейном приближении) определяется автокорреляционной функцией равновесных флуктуаций. Это является примером знаменитой флуктуационно-диссипативной теоремы, хотя обычно эта теорема формулируется в терминах частот *.

Примечание. Мы предположили, что $Y(t)$ — марковский процесс. Однако обычно наибольший интерес представляют материалы, в которых наблюдаются эффекты памяти, поскольку они дают больше информации о микроскопических магнитных моментах и их взаимодействии. В этом случае полученные выше результаты остаются формально правильными, однако надо иметь в виду следующую особенность. По-прежнему остается верным то, что $p(y_0)$ — это функция распределения величины Y в момент времени t_0, в который выключается малое поле B. Однако уже несправедливо, что это распределение $p(y_0)$ однозначно определяет подансамбль и тем самым будущее $Y(t)$. Теперь уже важно знать, что система «стареет» в присутствии поля $B + \Delta B$, так что ее плотность в фазовом пространстве является канонической не только по переменной Y, но и по всем другим переменным, которые определяют ее будущее. Следовательно, полученные формулы неприменимы к зависящим от времени полям $B(t)$, если только изменения не настолько медленны, что система способна все время поддерживать равновесное распределение, соответствующее мгновенному значению $B(t)$.

Упражнение. Из винеровского процесса выделите подансамбль, соответствующий $Y(t_0) = y_0$. Найдите эволюцию среднего $\langle Y(t)\rangle$ при $t > t_0$. Найдите также дисперсию $\langle\langle Y(t^2)\rangle\rangle$ в этом ансамбле.

Упражнение. Тот же вопрос для процесса Орнштейна — Уленбека.

Упражнение. *Процесс с независимыми приращениями* — это однородный марковский процесс с вероятностью перехода

$$T_\tau(y_2 \mid y_1) = T_\tau(y_2 - y_1). \tag{4.4.7}$$

Он не является подансамблем стационарного процесса. Для таких процессов тождество (4.2.2) можно разрешить с помощью преобразования Фурье. Покажите, что получающаяся в результате функция $P_1(y, t)$ стремится к гауссову виду. Примерами служат винеровский процесс и случайные блуждания.

---

* H. B. Callen and R. F. Greene, Phys. Rev. 86, 702 (1952); R. F. Greene and H. B. Callen, Phys. Rev. 88, 1387 (1952); De Groot and Mazur.

4.5. МАРКОВСКИЕ ЦЕПИ

Особенно простым классом марковских процессов являются марковские цепи, которые мы определим с помощью следующих свойств *.

1. Множество возможных значений Y представляет собой дискретное множество состояний.

2. Переменная времени дискретна и принимает только целые значения $t = \ldots, -2, -1, 0, 2, \ldots$.

3. Процесс является стационарным или по крайней мере однородным, так что вероятность перехода зависит только от разности времен.

Конечными марковскими цепями называют такие цепи, у которых множество возможных значений представляет собой конечное число N состояний. Они широко изучены, так как хотя и являются простейшими марковскими процессами, но обладают большинством характерных для них черт **. Первая функция распределения вероятности $P_1(y, t)$ является N-компонентным вектором $p_n(t)$ $(n = 1, 2, \ldots, N)$. Вероятность перехода $T_\tau(y_2 | y_1)$ представляет собой $N \times N$-матрицу. Марковское свойство (4.3.3) приводит к матричному уравнению

$$T_\tau = (T_1)^\tau \qquad (\tau = 0, 1, 2, \ldots). \tag{4.5.1}$$

Распределение вероятности $p(t)$, возникающее из начального распределения $p(0)$, в матричных обозначениях (индексы не выписываем) имеет вид

$$p(t) = T^t p(0). \tag{4.5.2}$$

Следовательно, изучение конечных марковских цепей равносильно изучению степеней $N \times N$-матриц T, о которых известно только, что:

1) их элементы неотрицательны,

2) сумма элементов в каждом столбце равна единице.

Такие матрицы называются *стохастическими* ***, они были изучены Перроном и Фробениусом. Ясно, что у матрицы T имеется левый собственный вектор $(1, 1, \ldots, 1)$ с собственным значением, равным 1, и, следовательно, правый собственный вектор p^s такой, что $Tp^s = p^s$. В соответствии с (4.3.9) это и есть функция $P_1(y)$

---

* Это определение представляет собой компромисс. Некоторые авторы определяют марковские цепи только с помощью первого свойства, другие — только второго свойства. Большинство авторов не включают третье свойство в определение, но рассматривают только такие случаи. Ср. со сноской в [1, p. 340].

** См. например: J. G. Kemeny and J. L. Shell, Finite Markov Chains (Van Nostrand, Princeton, 1960); D. L. Isaacson and R. W. Madsen, Markov Chains, Theory and Applications (Wiley, New York, 1976).

*** Чтобы отличать их от случайных матриц, т. е. матриц, у которых элементы являются стохастическими переменными.

для стационарного процесса. Она не обязательно соответствует состоянию физического равновесия, но, например, может представлять стационарное состояние, в котором поддерживается постоянное течение. Принципиальной задачей теории является доказательство того, что для любого начального $p(0)$ имеет место

$$\lim_{t \to \infty} p(t) = \lim_{t \to \infty} T^t p(0) = p^s. \tag{4.5.3}$$

Из теорем Перрона и Фробениуса следует, что это справедливо практически всегда, кроме нескольких исключений *. Однако мы не будем развивать здесь этот подход, потому что в следующей главе выведем все соответствующие результаты для непрерывного времени другим способом.

Упражнение. Найдите иерархию совместных функций распределения $P_n(y_1, t_1; y_2, t_2; \ldots; y_n, t_n)$ (переменные y и t — целые) для конечной марковской цепи, определенной заданными функциями T и $P_1(y_1, 0)$.

Упражнение. Для случая $N=2$ запишите наиболее общее T и найдите соответствующее p^s. Затем докажите, что (4.5.3) справедливо с двумя исключениями.

Упражнение. Дихотомический марковский процесс (4.2.3) можно свести к марковской цепи, если рассматривать распределение вероятности только в последовательные эквидистантные моменты времени. Постройте соответствующее T и исследуйте, имеют ли место вышеуказанные исключения.

$$\left(\begin{array}{c|c} T_{\mathrm{I}} & 0 \\ \hline 0 & T_{\mathrm{II}} \end{array}\right)$$

Рис. 8. Разложимая матрица перехода

Упражнение. Предположим, T разбивается на два блока, как на рис. 8. Покажите, что в этом случае собственный вектор p^s не единствен и собственное значение 1 вырождено. У системы есть два множества состояний, переходы между которыми невозможны. Как изменится соотношение (4.5.3) для этого случая?

Упражнение. Сформулируйте задачу о случайных блужданиях из § 1.4 как марковскую цепь. Из-за бесконечного множества возможных значений здесь нет нормировки p^s. Устраните этот недостаток, рассмотрев случайные блуждания на циклическом массиве N точек таком, что $(N+1)$-я позиция совпадает с первой. Найдите p^s для этой конечной марковской цепи. Правильно ли, что каждое решение стремится к p^s?

Упражнение. Для иллюстрации приближения к равновесию Эренфест придумал следующую модель **: N шаров, помеченных номерами 1, 2, ..., N, поделены между двумя урнами. Каждую секунду случайно из множества 1, 2, ..., N с равной вероятностью выбирается число, и шар с этим номером переносится из одной урны в другую. Состояние системы определяется числом n шаров в одной из урн. Процесс является марковской цепью с

$$T_{nn'} = \frac{n'}{N}\,\delta_{n+1,\,n'} + \left(1 - \frac{n'}{N}\right)\delta_{n-1,\,n'}. \tag{4.5.4}$$

Покажите, что биномиальное распределение является стационарным решением.

---

* См., например, F. R. Gantmacher, Applications of the Theory of Matricest (Interscience, New York, 1959), or Cox and Miller, p. 120.

** P. and T. Ehrenfest, Mathem.— Naturw. Blatter 3 (1906)=P. Ehrenfest Collected Scientific Papers (M. Klein ed., North-Holland, Amsterdam, 1959) p. 128; M. Kac, Probability and Related Topics in Physical Sciences (interscience, London, 1959) pp. 73 ff; H. Falk, Physica 104A, 459, (1980).

Модель случайных блужданий можно обобщить путем включения статистической корреляции между двумя последовательными шагами таким образом, что вероятность α-шага в том же направлении, что и предыдущий шаг, отличается от вероятности β-шага в обратную сторону («случайные блуждания с памятью»). В этом случае пространственная переменная Y уже не является марковским процессом, потому что ее распределение вероятности в момент времени $r+1$ зависит не только от ее значения в момент времени r, но также и от значения в момент $r-1$. Однако марковский характер процесса может быть восстановлен путем введения этого предшествующего значения явно в качестве добавочной переменной. Двухкомпонентный процесс (Y_1, Y_2), в котором Y_1 — координата в любой момент времени r, а Y_2 — предшествующая координата в момент $r-1$, снова является марковским процессом. Если обозначить n и m соответственно значения Y_1 и Y_2, то матрица перехода имеет вид

$$T(n_2, m_2 | n_1, m_1) = [\delta_{n_2, n_1+1}(\alpha\delta_{n_1, m_1+1} + \beta\delta_{n_1, m_1-1}) + \\ + \delta_{n_2, n_1-1}(\beta\delta_{n_1, m_1+1} + \alpha\delta_{n_1, m_1-1})]\,\delta_{m_2, n_1}. \qquad (4.5.5)$$

Ее можно подробно изучить потому, что этот процесс снова удалось свести к марковскому. Стохастический процесс, который можно свести к марковскому путем введения марковской переменной, будем называть *марковским процессом второй степени*, если же необходимо добавить большее число переменных, то это будет марковский процесс более высокой степени *.

Случайные блуждания на квадратной решетке в двумерном случае или в случае большего числа размерностей сложнее, чем в одномерном случае, но существенных трудностей не вызывают. Например, легко показать, что средний квадрат расстояния после r шагов снова пропорционален r. Однако в многомерном случае можно также поставить *задачу с исключением объема*, которая описывает такое случайное блуждание с «памятью», что никакой узел решетки не может быть занят более одного раза. Эту модель используют для упрощенного описания полимера: каждый атом углерода может находиться в любой точке пространства, заданной только фиксированной длиной связей и ограничением, что никакие два атома углерода не могут находиться в одном месте. Эта задача была объектом широких исследований приближенными **, численными *** и асимптотическими **** методами. Они показали, что средний квадрат расстояния между концами полимера из r связей при боль-

---

* По поводу этих и других обобщений см.: M. N. Barber and B. W. Ninham, Random and Restricted Walks (Gordon and Breach, New York, 1970).

** P. J. Flory, Principles of Polymer Chemistry (Cornel University Press, Ithaca, 1953); I. M. Lifshitz, A. Yu. Grosberg and A. R. Kokhlov, Rev. Mod. Phys. 50, 683 (1978).

*** C. Domb J. Gillis and G. Wilmers, Proc. Phys. Soc. 85, 625 (1965).

**** S. F. Edwards, Proc. Phys. Soc. 85, 613 (1965).

ших r пропорционален $r^{6/5}$. Однако достаточно полного решения задачи найти не удалось. Трудность состоит в том, что эта модель *существенно* не марковская: распределение вероятности пространственной координаты следующего атома углерода зависит от координат не только одного или двух, а всех предыдущих атомов. Эту модель формально можно рассматривать как марковский процесс, если добавить бесконечное число переменных, чтобы учесть всю предысторию, но это не может помочь решению задачи.

Упражнение. Матрица перехода (4.5.5) для случайных блужданий с памятью действует в слишком большом пространстве, потому что имеют значения только состояния $m = n \pm 1$. Почему, несмотря на это, результат получается правильным?

Упражнение. Найдите более простой способ сведения случайного блуждания с памятью к марковской цепи путем добавления второй переменной Y_2, принимающей только два значения.

Упражнение. Средний квадрат расстояния случайного блуждания с памятью легко найти с помощью следующего альтернативного метода (ср. с (1.7.8)). Он равен $\langle (X_1 + X_2 + \ldots + X_r)^2 \rangle$, где каждая X_k принимает значения ± 1 и $\langle X_k X_{k+1} \rangle \neq 0$.

Упражнение. Найдите средний квадрат расстояния после r шагов при случайном блуждании на квадратной решетке в d измерениях.

Упражнение. Найдите средний квадрат расстояния после r шагов случайного блуждания на двумерной квадратной решетке и если U поворотов запрещено. (Это не является задачей с исключением объема, потому что каждое место можно занимать много раз при условии, что интервал между возвращениями составляет не менее двух шагов.)

Упражнение. Покажите, что для одномерного случайного блуждания с памятью распределение стремится к гауссову.

4.6. ПРОЦЕССЫ РАСПАДА

Рассмотрим кусок радиоактивного материала, содержащий n_0 активных ядер при $t = 0$. Число $N(t)$ активных ядер, выживающих через время $t > 0$, является нестационарным стохастическим процессом. Это чисто марковский процесс, потому что распределение вероятности величины $N(t_2)$ при $t_2 > t_1$ при условии, что $N(t_1) = n_1$, не зависит от предыстории. Эти же вычисления оказываются применимыми к испусканию света возбужденными атомами, просачиванию молекул кнутсеновского газа через небольшое отверстие, гибели вражеских войск при случайной стрельбе и разрушению клеток радиацией. Их используют для описания поглощения электронов космического излучения в материале, при этом под t понимают поперечную толщину *.

Этот процесс представляет собой просто совокупность взаимно независимых процессов распада определенных ядер. Пусть w — вероятность выживания отдельного ядра за время t_1. Даже до вы-

* H. J. Bhabna and W. Heitler, Proc. Roy. Soc., A 159, 432 (1937); Bharucha — Reid, Ch. 5.

числения w можно утверждать, что вероятность выживания n_1 ядер

$$P_1(n_1,\ t_1)=\binom{n_0}{n_1}w^{n_1}(1-w)^{n_0-n_1}. \tag{4.6.1}$$

Отметим, что эта формула справедлива для *всех* целых значений n_1 при условии, что биномиальные коэффициенты равны нулю, когда $n_1<0$ или $n_1>n_0$. Используя стандартные вычислительные приемы классической теории вероятностей, из этой формулы можно вывести

$$\langle N(t_1)\rangle\left[\sum_{n_1} n_1\binom{n_0}{n_1}w^{n_1}v^{n_0-n_1}\right]_{v=1-w}=$$
$$=\left[w\frac{\partial}{\partial w}(w+v)^{n_0}\right]_{v=1-w}=wn_0. \tag{4.6.2}$$

Теперь мы должны вычислить вероятность выживания $w=w(t_1)$, если известно, что вероятность распада за единичное время для выжившего ядра постоянна и равна γ. Эта задача нами уже решена (см. (3.6.3)). Результат при постоянном γ имеет вид

$$w(t)=e^{-\gamma t}. \tag{4.6.3}$$

Явное выражение величины P_1 для нашего нестационарного процесса получим, подставив это выражение в (4.6.1):

$$P_1(n_1,\ t_1)=\binom{n_0}{n_1}e^{-\gamma t_1 n_1}(1-e^{-\gamma t_1})^{n_0-n_1}. \tag{4.6.4}$$

Та же формула позволяет выписать вероятность перехода для $t_2>t_1$:

$$P_{1\,|\,1}(n_2,\ t_2\,|\,n_1,\ t_1)=\binom{n_1}{n_2}e^{-\gamma(t_2-t_1)n_2}(1-e^{-\gamma(t_2-t_1)})^{n_1-n_2}. \tag{4.6.5}$$

Совместно они полностью определяют марковский процесс.

Примечание. Из формулы (4.6.4) видно, что в пределе $t_1\to\infty$

$$P_1(n,\ \infty)=\delta_{n,\,0}. \tag{4.6.6}$$

Тогда вся вероятность сосредоточивается в состоянии $N=0$, которое поэтому называют *абсорбирующим* или *поглощающим*. Все другие состояния ($N\geqslant 1$) исчерпываются с течением времени; их называют *переходными*. Они могут встречаться только тогда, когда продукты распада исчезают в бесконечно большой области. Для конечных физических систем переходные состояния исключены (см. § 5.5). Если наш радиоактивный образец поместить в непроницаемый контейнер, то вероятность повторного поглощения испущенных частиц будет отлична от нуля. Такая ситуация встречается при испускании и поглощении фотонов атомами в лазерах. Применим этот пример для иллюстрации одного важного места, которое нам понадобится в следующей главе. Вероятность перехода (4.6.5) при $t_2-t_1=0$ сводится к

$$P_{1\,|\,1}(n_2,\ t_1\,|\,n_1,\ t_1)=\delta_{n_1,\,n_2}, \tag{4.6.7}$$

как это и должно быть.

Теперь возьмем $t_2-t_1=\tau$ и, опустив члены второго и более высокого порядка по τ, получим

$$P_{1\,|\,1}(n_2,\ t_1+\tau\,|\,n_1,\ t_1)=\delta_{n_1,\,n_2}(1-\gamma n_1\tau)+\delta_{n_1-1,\,n_2}n_1\gamma\tau+O(\tau^2). \tag{4.6.8}$$

Легко заметить, что последний член представляет собой вероятность того, что одно из n_1 активных ядер распадается в течение времени τ; вероятность большего числа распадов является величиной более высокого порядка по τ. Первый член представляет собой вероятность отсутствия переходов. Амплитуда начального символа Кронекера выбирается в соответствии с условием нормировки условной вероятности (1.3.4).

Упражнение. Проверьте с помощью непосредственного вычисления, что (4.6.5) удовлетворяет уравнению Чепмена — Колмогорова.

Упражнение. Получите для производящей функции вероятности процесса $N(t_1)$ выражение

$$F(z) = \langle z^{N(t_1)} \rangle = \{1 + w(z-1)\}^{n_0} \tag{4.6.9}$$

и выведите из него формулу (4.6.2), а также найдите дисперсию процесса $N(t_1)$.

Упражнение. Найдите факториальные кумулянты (1.2.17) для процесса распада.

Упражнение. Представьте процесс распада как ветвящийся процесс и используйте (3.6.7) для получения таким способом формулы (4.6.9).

Упражнение. Некая марковская цепь для двух состояний имеет одно поглощающее и одно переходное состояния. Какой вид имеет матрица перехода T?

ГЛАВА 5
ОСНОВНОЕ КИНЕТИЧЕСКОЕ УРАВНЕНИЕ

Основное кинетическое уравнение представляет собой разновидность уравнения Чепмена — Колмогорова для марковских процессов, но оно проще в обращении и более тесно связано с физикой. Оно станет основным стержнем большей части книги.

5.1. ВЫВОД ОСНОВНОГО КИНЕТИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ

Рассмотрим марковский процесс, который для удобства выберем однородным, так что матрицу перехода можно написать в виде T_τ. Уравнение Чепмена — Колмогорова (4.3.2) представляет собой функциональное соотношение для T_τ, с которым довольно трудно работать в реальных приложениях. Основное кинетическое уравнение оказывается более удобным видом того же самого уравнения. Оно является дифференциальным уравнением, полученным в результате предельного перехода, когда разность времен τ' стремится к нулю. Чтобы выполнить предельный переход, необходимо сначала выяснить, как ведет себя $T_{\tau'}$ при стремлении τ' к нулю. В предыдущем разделе мы показали, что $T_{\tau'}(y_2 \mid y_1)$ при малых τ' имеет вид *

$$T_{\tau'}(y_2 \mid y_1) = (1 - a_0\tau')\,\delta(y_2 - y_1) + \tau' W(y_2 \mid y_1) + O(\tau'), \tag{5.1.1}$$

где $W(y_2 \mid y_1)$ — *вероятность перехода за единичное время* из состояния y_1 и y_2; следовательно,

$$W(y_2 \mid y_1) \geqslant 0. \tag{5.1.2}$$

* Символ $O(\tau')$ использован для обозначения некоторого члена, о котором известно только, что $O(\tau')/\tau'$ стремится к нулю, при $\tau' \longrightarrow 0$.

Коэффициент $1-a_0\tau'$ перед δ-функцией представляет собой вероятность того, что в течение времени τ' перехода не происходит; отсюда следует *

$$a_0(y_1)=\int W(y_2\,|\,y_1)\,\mathrm{d}y_2. \tag{5.1.3}$$

Это следует и из (4.3.8). Пока соотношение (5.1.1) мы примем на веру, но обещаем читателю продолжить обсуждение этого важного места в § 10.1. Теперь подставим это выражение для $T_{\tau'}$ в уравнение Чепмена—Колмогорова (4.3.2):

$$T_{\tau+\tau'}(y_3\,|\,y_1)=[1-\alpha_0(y_3)\,\tau']\,T_\tau(y_3\,|\,y_1)+\tau'\int W(y_3\,|\,y_2)\,T_\tau(y_2\,|\,y_1)\,\mathrm{d}y_2.$$

Разделим на τ', перейдя к пределу $\tau'\to 0$ и использовав (5.1.3). Получим

$$\frac{\partial}{\partial\tau}T_\tau(y_3\,|\,y_1)=\int\{W(y_3\,|\,y_2)\,T_\tau(y_2\,|\,y_1)-W(y_2\,|\,y_3)\,T_\tau(y_3\,|\,y_1)\}\,\mathrm{d}y_2. \tag{5.1.4}$$

Это дифференциальная запись уравнения Чепмена—Колмогорова, справедливая для вероятности перехода любого стационарного марковского процесса, удовлетворяющего соотношению (5.1.1); ее называют *основным кинетическим уравнением.*

Будет полезным понять это уравнение на более качественном уровне. Сначала отметим, что $T_\tau(y_2\,|\,y_1)$ совпадает с функцией распределения $P_1^*(y_2)$ подансамбля, определенного начальным значением y_1. Тогда, опуская ненужные индексы, запишем

$$\frac{\partial P(y,\ t)}{\partial t}=\int\{W(y\,|\,y')\,P(y',\ t)-W(y'\,|\,y)\,P(y,\ t)\}\,\mathrm{d}y'. \tag{5.1.5}$$

Это обычный вид основного кинетического уравнения. Функция $P(y,\ t)$ не обязательно относится к подансамблю, определенному начальным значением, а может быть определена некоторым начальным распределением $P(y,\ 0)$ (ср. с § 4.4).

Если множество возможных значений Y является дискретным множеством состояний, пронумерованных числами n, то это уравнение сводится к

$$\frac{\partial p_n(t)}{\partial t}=\sum_{n'}\{W_{nn'}p_{n'}(t)-W_{n'n}p_n(t)\}. \tag{5.1.6}$$

При такой записи уравнения становится ясен смысл: *основное кинетическое уравнение представляет собой балансовое уравнение* (*отражающее приход—расход*) *для вероятности каждого состояния* n. Первый член соответствует возрастанию вероятности из-за переходов из других состояний n', а второй—уменьшению вероятности из-за переходов в другие состояния. Следует помнить, что $W_{nn'}\geqslant 0$ для

* Обоснование обозначения $a_0(y)$ станет ясным из (5.8.2).

$n' \neq n$, а член с $n' = n$ может быть опущен при суммировании. Мы специально использовали название «основное кинетическое уравнение» только в этом единственном смысле *, т. е. только для дифференциального вида уравнения Чепмена — Колмогорова, а не для любых его немарковских или нелинейных модификаций, не говоря уже о нестохастических уравнениях. С другой стороны, мы не ограничиваем применимость нашего названия только дискретным случаем (5.1.6) в отличие от непрерывного случая (5.1.5), потому что это различие не имеет существенного значения.

Предостережение. Заменяя (5.1.4) на (5.1.5), мы проясняем физический смысл, но одновременно увеличиваем опасность неправильной интерпретации. Основное кинетическое уравнение — это уравнение для вероятности перехода величины $Y(t)$, *а не* для ее плотности вероятности $P_1(y, t)$. Имея в виду (4.4.1a) или (4.4.2a), можно сказать также, что это уравнение для величины $P_1^*(y, t)$ любого подпроцесса, который может быть выделен из $Y(t)$ наложением начального условия. Тогда все решения основного кинетического уравнения имеют физический смысл. Уравнение, одно решение которого случайно совпадает с P_1 для одного стохастического процесса, не является основным кинетическим уравнением. Только имея в виду эту интерпретацию можно безопасно использовать уравнение (5.1.5) вместо (5.1.4) **.

Основное кинетическое уравнение не только более удобно при математическом рассмотрении, чем исходное уравнение Чепмена — Колмогорова, но также имеет непосредственную физическую интерпретацию. Величины $W(y \mid y')\Delta t$ или $W_{nn'}\Delta t$ являются вероятностями перехода в течение короткого времени. Поэтому их можно вычислить для заданной системы с помощью того или иного приближенного метода, применимого при малых временах. Самый известный из них — зависящая от времени теория возмущений Дирака, приводящая к золотому правилу Ферми:

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

(символы n, n' нумеруют собственные состояния невозмущенного гамильтониана, $H'_{nn'}$ — матричный элемент возмущения в гамильтониане, а ρ — плотность невозмущенных уровней). Основное кинетическое уравнение позволяет определить эволюцию системы на больших временах. В этом подходе два временных масштаба можно рассматривать отдельно — за счет *предположения* о марковости.

Эта интерпретация основного кинетического уравнения означает, что оно играет совсем не такую роль, как уравнение Чепмена — Колмогорова, которое нелинейно и просто отражает марковский характер процесса, но не содержит информации о его специфических

---

* A. Nordsieck, W. E. Lamb, and G. E. Uhlenbeck, Physica 7, 344 (1940).

** Oppenheim and K. E. Shuler, Phys. Rev. B138, 1007 (1965); P. Hanggi and H. Thomas, Z. Phys. B26, 85 (1977). Обобщенное основное кинетическое уравнение в кн.: V. Kenkre Statistical Mechanics and Statistical Methods in Theory and Application (U. Landman ed., Plenum, New York, 1977), — является, однако, уравнением для P_1, одного выбранного процесса.

особенностях. В основном кинетическом уравнении вероятности перехода рассматриваются как заданные частным видом системы, и тогда остается линейное уравнение для вероятностей, которое определяет состояние (мезоскопическое) системы.

В качестве примера рассмотрим распадный процесс из § 4.6 в терминах основного кинетического уравнения. Вероятность распада γ за единичное время является свойством радиоактивных ядер или возбужденных атомов и в принципе может быть рассчитана путем решения уравнения Шредингера для этой системы. Чтобы найти эволюцию на больших временах набора излучателей, запишем вероятность $P(n, t)$ того, что имеется n излучателей, выживших к моменту времени t. Вероятность перехода от n' к n за короткое время Δt дается выражением

$$\begin{aligned} T_{\Delta t}(n \mid n') &= 0 && \text{для} \quad n > n', \\ &= n'\gamma\,\Delta t && \text{для} \quad n = n'-1, \\ &= O(\Delta t)^2 && \text{для} \quad n < n'-1. \end{aligned}$$

Тогда в соответствии с (5.1.1) имеем

$$W_{nn'} = \gamma n' \delta_{n,\, n'-1} \qquad (n \neq n').$$

Подстановка в (5.1.6) дает основное кинетическое уравнение

$$\dot{p}_n(t) = \gamma(n+1)\, p_{n+1}(t) - \gamma n p_n(t). \tag{5.1.7}$$

Нужно решить это уравнение с начальным условием $p_n(0) = \delta_{n,\, n_0}$. В § 4.6 было получено явное решение в дифференциальном виде, здесь же мы просто покажем, что некоторые частные результаты можно получить, не зная даже полного решения. Отметим, что оказывается очень полезным следующий прием (если он срабатывает). Его применимость ограничена одним простым частным видом так называемого «линейного» основного кинетического уравнения, определенного в § 6.1. Умножим (5.1.7) на n и выполним суммирование по n:

$$\begin{aligned} \sum_{n=0} n\dot{p}_n &= \gamma \sum_{n=0}^{\infty} n(n+1)\, p_{n+1} - \gamma \sum_{n=0}^{\infty} n^2 p_n = \\ &= \gamma \sum_{n=0}^{\infty} (n-1) n p_n - \gamma \sum_{n=0}^{\infty} n^2 p_n = -\gamma \sum_{n=0}^{\infty} n p_n. \end{aligned} \tag{5.1.8}$$

Таким образом, для среднего значения стохастической переменной $N(t)$ находим

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \langle N(t) \rangle = -\gamma \langle N(t) \rangle. \tag{5.1.9}$$

Решая это простое уравнение для $\langle N(t) \rangle$ с начальным значением $\langle N(0) \rangle = n_0$, получаем

$$\langle N(t) \rangle = n_0 \mathrm{e}^{-\gamma t}. \tag{5.1.10}$$

Этот результат совпадает с (4.6.2) (ср. с. (4.6.3)).

Упражнение. Постройте основное кинетическое уравнение для дихотомического марковского процесса (4.2.3).

Упражнение. Решите основное кинетическое уравнение и найдите таким способом (4.2.3).

Упражнение. Физически очевидно, что решение уравнения (5.1.7) с $p_n(0) = \delta_{n,\, n_0}$ должно обращаться в нуль (при всех $t \geqslant 0$) для $n > n_0$. Покажите, что это действительно следует из (5.1.7). Тогда результат не должен зависеть от того, как производится суммирование в (5.1.8): до $n = \infty$ или до $n = n_0$.

Упражнение. С помощью вычислений, аналогичных (5.1.8), найдите $\langle N(t)^2 \rangle$ и $\langle\langle N(t)^2 \rangle\rangle$ для процесса распада и сравните результаты с (4.6.9).

Упражнение. Случайное блуждание с непрерывным временем определено следующим образом. Состояниями являются все целые числа ($-\infty < n < \infty$). Частица может совершать скачки между соседними состояниями. За короткое время $\mathrm{d}t$ она с равной вероятностью $^1/_2\gamma\, \mathrm{d}t$ может совершить скачок вправо или влево. Постройте основное кинетическое уравнение для $p_n(t)$ (ср. § 6.2).

Упражнение. В популяции n бактерий каждая отдельная бактерия с вероятностью α умирает за единичное время и с вероятностью β порождает новую бактерию. Постройте основное кинетическое уравнение («процесс рождения — гибели», ср. с гл. 6).

Упражнение. Запишите основное кинетическое уравнение для процессов с независимыми приращениями, определенных в (4.4.7), и решите его. Используя это решение, покажите еще раз, что P_1 стремится к гауссову распределению.

Упражнение. Марковский процесс с факторизованной матрицей перехода $W(y \mid y') = u(y)\, v(y')$ (для $y \neq y'$) называют *процессом кенгуру*. Покажите, что такое основное кинетическое уравнение можно решить, т. е. что $P(y, t)$ можно выразить через $P(y, 0)$ с помощью интегралов. Указание. Выведите интегральное уравнение для $\sigma(t) = \int v(y)\, P(y, t)\, \mathrm{d}y$ и решите его с помощью преобразования Лапласа.

Упражнение. Найдите явное решение процесса кенгуру с $v(y) = \mathrm{const}$ и объясните результат (*процесс Кубо — Андерсена*; дихотомический марковский процесс является частным случаем).

Упражнение. Пусть $(X(t),\ Y(t))$ — марковский процесс, зависящий от двух переменных. Предположим, что его вероятности перехода за единичное время обладают следующим свойством: $\int W(x, y \mid x', y')\, \mathrm{d}y$ не зависит от y'. Покажите, что частный процесс $X(t)$, определенный в (3.4.10), тоже является марковским.

5.2. КЛАСС W-МАТРИЦ

Для многих случаев оказывается удобным использовать обозначения для дискретных состояний; обобщение на непрерывный случай с формальной точки зрения можно сделать просто и без дополнительных математических трудностей. Основное кинетическое уравнение (5.1.6) можно записать в более компактном виде, если определить следующую матрицу $\mathbf{W}$:

$$\mathbf{W}_{nn'} = W_{nn'} \text{ для } n \neq n',$$
$$\mathbf{W}_{nn} = -\sum_{n'\,(\neq n)} W_{n'n}.$$

Запишем это по-другому:

$$\mathbf{W}_{nn'} = W_{nn'} - \delta_{nn'} \left(\sum_{n''} W_{n''n} \right). \tag{5.2.1}$$

Тогда (5.1.6) принимает вид

$$\dot{p}(t) = \sum_{n'} \mathbf{W}_{nn'} p_{n'}(t), \tag{5.2.2}$$

или короче

$$\dot{p}(t) = \mathbf{W} p(t), \tag{5.2.3}$$

где p — вектор с компонентами p_n.

Формальное решение уравнения (5.2.3) с заданным начальным значением $p_n(0)$ можно записать в виде

$$p(t) = e^{t\mathbf{W}} p(0). \tag{5.2.4}$$

Это выражение для $p(t)$ иногда оказывается удобным, но не позволяет найти явного вида $p(t)$. В качестве общего метода решения уравнений типа (5.2.3) нельзя использовать методы, основанные на собственных векторах и собственных значениях матрицы $\mathbf{W}$, потому что $\mathbf{W}$ не обязана быть симметричной и не все решения могут быть получены как суперпозиция ее собственных мод (см., однако, § 5.7).

Любые общие результаты должны основываться на следующих двух свойствах матрицы $\mathbf{W}$:

$$\mathbf{W}_{nn'} \geqslant 0 \text{ для } n \neq n', \tag{5.2.5а}$$

$$\sum_{n} \mathbf{W}_{nn'} = 0 \text{ для каждого } n'. \tag{5.2.5б}$$

Эти свойства сохраняются при одновременной перестановке строк и столбцов, что эквивалентно переобозначению состояний. Но они не сохраняются при произвольном преобразовании подобия $\mathbf{W} \to S^{-1}\mathbf{W}S$. Поэтому в данной задаче такие преобразования не приносят пользы. Матрицу, обладающую свойствами (5.2.5), будем называть $\mathbf{W}$-матрицей. А теперь перечислим некоторые следствия, вытекающие из свойств (5.2.5). Наши утверждения являются строгими для конечномерных $\mathbf{W}$-матриц. Часто они оказываются применимыми также к системам, имеющим бесконечное счетное или непрерывное множество значений, но в этом случае они оказываются лишь полезной, но не всегда применимой путеводной нитью.

Соотношение (5.2.5б) означает, что у матрицы $\mathbf{W}$ есть левый собственный вектор $\psi = (1, 1, 1, \ldots)$ с нулевым собственным значением, тогда у нее есть также и правый собственный вектор φ с тем же самым собственным значением:

$$\mathbf{W}\varphi = 0.$$

Естественно, их может быть несколько. Каждый собственный вектор является не зависящим от времени решением основного кинети-

ческого уравнения. Если он нормирован, то представляет стационарное распределение вероятности системы при условии, что его компоненты φ_n неотрицательны. В следующем параграфе мы покажем, что это условие выполняется. Но сначала мы обсудим частные случаи матрицы $\mathbf{W}$, для которых можно получить больше информации об этих собственных векторах.

Матрицу $\mathbf{W}$ называют *вполне приводимой* (или *разложимой*), если с помощью соответствующей одновременной перестановки строк и столбцов ее можно привести к виду

$$\mathbf{W}=\begin{pmatrix}\mathbf{A} & 0\\ 0 & \mathbf{B}\end{pmatrix}, \tag{5.2.6}$$

где $\mathbf{A}$ и $\mathbf{B}$ — две квадратные матрицы меньшей размерности. В этом случае состояния разбиваются на две группы, переходы между которыми невозможны. Легко заметить, что $\mathbf{A}$ и $\mathbf{B}$ тоже являются $\mathbf{W}$-матрицами. Следовательно, у них тоже есть собственные правые векторы φ^A и φ^B с нулевым собственным значением. Тогда у матрицы (5.2.6) есть по крайней мере два линейно независимых собственных вектора с нулевыми собственными значениями:

$$\begin{pmatrix}\mathbf{A} & 0\\ 0 & \mathbf{B}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\varphi^A\\ 0\end{pmatrix}=0 \quad \text{и} \quad \begin{pmatrix}\mathbf{A} & 0\\ 0 & \mathbf{B}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\ \varphi^B\end{pmatrix}=0.$$

Если матрица (5.2.6) оказывается разложимой, то это означает, что имеются две невзаимодействующие системы, описывающиеся двумя основными кинетическими уравнениями с матрицами $\mathbf{A}$ и $\mathbf{B}$ соответственно. Нетривиальным примером является система, в которой при всех переходах сохраняется энергия: для каждой энергетической оболочки E имеется свое собственное кинетическое уравнение и свое собственное стационарное распределение φ^E. Стационарные решения полного основного кинетического уравнения представляют собой их линейные суперпозиции с произвольными коэффициентами π_E:

$$\varphi=\sum_E \pi_E\varphi^E.$$

Все φ, построенные таким способом при дополнительных условиях

$$\pi_E\geqslant 0 \quad \text{и} \quad \sum_E \pi_E=1,$$

представляют собой стационарные распределения полной системы. Это состояния, в которых энергия распределена по разным энергетическим оболочкам.

Матрицу $\mathbf{W}$ называют (*не вполне*) *приводимой*, если она может быть представлена в виде

$$\mathbf{W}=\begin{pmatrix}\mathbf{A} & \mathbf{D}\\ 0 & \mathbf{B}\end{pmatrix}, \tag{5.2.7}$$

где **A** и **B** — опять квадратные матрицы, но **D** — вообще говоря, нет; **A** опять является **W**-матрицей, но в общем случае суммы элементов, образующих столбцы матрицы **B**, являются отрицательными величинами. Очевидно, у матрицы (5.2.7) есть собственный вектор с нулевым собственным значением

$$\varphi = \begin{pmatrix} \varphi^A \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Чтобы придать этому утверждению физический смысл, рассмотрим основное кинетическое уравнение, соответствующее (5.2.7). Обозначив a и b два набора компонент, запишем

$$\begin{aligned} \dot{p}_a &= \sum_{a'} \mathbf{A}_{aa'} p_{a'} + \sum_{b'} \mathbf{D}_{ab'} p_{b'}, \\ \dot{p}_b &= \sum_{b'} \mathbf{B}_{bb'} p_{b'}. \end{aligned} \tag{5.2.8}$$

Последняя строка составляет замкнутую систему уравнений для p_b, т. е. для ее решения не нужно знать p_a. Но p_b оставляют свободными вероятности состояний a:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \sum_b p_b = \sum_{b'} \left(\sum_b \mathbf{B}_{bb'} \right) p_{b'} = - \sum_{b'} \left(\sum_a \mathbf{D}_{ab'} \right) p_{b'}. \tag{5.2.9}$$

Состояния b обедняются, и решение основного кинетического уравнения может быть стационарным только если все его компоненты b равны нулю. Такие состояния b называют *переходными*, в то время как множество состояний a, в которых собирается вероятность, называют *поглощающими*.

Будем называть **W**-матрицу *расщепляющейся*, если ее можно представить в виде

$$\mathbf{W} = \begin{bmatrix} \mathbf{A} & 0 & \mathbf{D} \\ 0 & \mathbf{B} & \mathbf{E} \\ 0 & 0 & \mathbf{C} \end{bmatrix}. \tag{5.2.10}$$

Здесь **A** и **B** — **W**-матрицы, **C** — квадратная матрица, и по крайней мере некоторые элементы матриц **D** и **E** не равны нулю. Расщепляющаяся матрица разложима с дополнительным свойством, заключающимся в том, что при выбрасывании столбцов и строк, соответствующих переходным состояниям, остающаяся матрица является разложимой. Если бы матрицы **D** и **E** обратились в нуль, то **W**-матрица была бы разложимой, но мы предполагаем, что этого не происходит. Имеется три набора состояний, обозначенные a, b, c. Состояния c являются переходными и выливаются в a и b. Имеется по крайней мере два линейно независимых собственных вектора с нулевыми собственными значениями:

$$\begin{bmatrix} \varphi^A \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \text{и} \quad \begin{bmatrix} 0 \\ \varphi^B \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Упражнение. Если W—2×2-матрица, то экспоненту в (5.2.4) можно вычислить непосредственно, раскладывая в ряд по степеням W. Используйте этот метод для решения основного кинетического уравнения дихотомического марковского процесса.

Упражнение. Покажите, что следующая матрица в соответствии с определением, данным в тексте, приводима:

$$\mathbf{W}=\begin{pmatrix}\mathbf{A} & 0\\ \mathbf{C} & \mathbf{B}\end{pmatrix}.$$

Упражнение. В качестве примера расщепляющегося процесса рассмотрим распад π^--мезона:

$$\pi^- \text{———}\left|\begin{array}{l}\to e^- + \nu;\\ \to \mu^- + \nu \to e^- + \nu + \nu + \bar{\nu}.\end{array}\right.$$

Определите состояния a, b, c и запишите $\mathbf{W}$-матрицу для этого процесса.

Упражнение. Если $\mathbf{W}$ имеет вид (5.2.6), (5.2.7) или (5.2.10), то все степени $\mathbf{W}^k$ $(k=0, 1, 2, \ldots)$ имеют один и тот же вид.

Упражнение. Пусть у $\mathbf{W}$-матрицы есть собственный вектор с неотрицательными компонентами, некоторые из которых равны нулю. Тогда $\mathbf{W}$-матрица приводима. Если у $\mathbf{W}$ есть вырожденное собственное значение, то у нее есть два собственных вектора с неотрицательными компонентами.

Упражнение. Пусть у $\mathbf{W}$-матрицы имеется два линейно независимых собственных вектора с положительными компонентами, а собственные значения равны нулю, тогда $\mathbf{W}$ разложима.

Упражнение. Пусть $\mathbf{W}$ имеет вид (5.2.7), а элементы матрицы $\mathbf{D}$ неотрицательны и никакие другие условия на матрицу $\mathbf{D}$ не налагаются. Тогда либо все состояния b являются переходными, либо $\mathbf{W}$ является расщепляющейся или даже разложимой. Имеется по крайней мере одно переходное состояние, если только $\mathbf{D}\neq 0$. Все состояния b являются переходными, когда у $\mathbf{D}$ имеется хотя бы один не равный нулю элемент в каждом столбце.

Упражнение. Ветвящийся процесс в § 3.6 не является марковским и поэтому не удовлетворяет основному кинетическому уравнению, если только γ не является независимой от τ. Запишите основное кинетическое уравнение для этого частного случая. Что можно сказать о переходных и поглощающих состояниях?

Упражнение. Убедитесь в том, что использование понятий «поглощающее» и «переходное» в § 4.6 не противоречит настоящим определениям.

Упражнение. $\mathbf{W}$-матрицу можно представить в виде графа, в котором вершины представляют состояния, а прямая линия проводится из одной вершины n в другую n' при $W_{n'n}>0$. Каким образом в таком графе можно изобразить переходное и поглощающее состояния?

Упражнение. Примером, в котором имеется бесконечное множество состояний и к которому неприменим анализ, проведенный в настоящем параграфе, является бесконечное случайное блуждание с непрерывным временем

$$\dot{p}_n = p_{n+1} + p_{n-1} - 2p_n. \tag{5.2.11}$$

Покажите, что в этом примере отсутствует стационарное распределение и что все состояния являются переходными (ср. с. § 6.2).

5.3. ПРЕДЕЛ БОЛЬШИХ ВРЕМЕН

Основное кинетическое уравнение обладает следующим фундаментальным свойством: при $t\to\infty$ *все решения стремятся к стационарным* или к одному из стационарных решений, когда W-матрица является расщепляющейся или разложимой. Опять-таки это утверждение является правильным в строгом смысле только в слу-

чае конечного числа дискретных состояний. Для случая, когда имеется бесконечное число состояний, тем более для непрерывного пространства состояний, бывают исключения, например случайное блуждание (5.2.11). Однако даже в этом случае это свойство является полезным наводящим соображением для физиков, которые хорошо знают, что почти все системы стремятся к равновесию. Поэтому мы даже не будем стремиться дать полное доказательство, охватывающее все возможные случаи, а ограничимся только случаем конечного пространства состояний. Имеется несколько способов доказательства теоремы, связанных со свойством (5.2.5), которое определяет класс **W**-матриц.

1. Математики вводят дискретное время, задавая конечный временный шаг Δt, и тем самым сводят процесс к марковской цепи с матрицей перехода $T_1 = \exp(\mathbf{W}\Delta t)$. Тогда теоремы Перрона и Фробениуса, упомянутые в § 4.5, дают полный ответ. Для физиков такой подход кажется довольно искусственным и к тому же переносит проблему на доказательство теорем Перрона — Фробениуса.

2. Физики строят функцию, которую они называют *энтропией* (или *H-функцией*, или *функцией Ляпунова*). Эта функция изменяется монотонно и является ограниченной, поэтому она должна стремиться к пределу. Это, конечно, является общим принципом в физике, но мы интересуемся только его приложением к основным кинетическим уравнениям, которое мы обсудим в § 5.5. Следует отметить, что это доказательство также является правильным в строгом смысле только для случая конечного числа состояний.

3. В частном случае, когда **W**-матрица симметрична и, следовательно, может быть приведена к диагональному виду, достаточно показать, что все ее собственные значения отрицательны, кроме нулевого собственного значения, относящегося к стационарному решению. Это свойство симметрии часто можно вывести из свойства детального равновесия (см. § 5.6) и соответствующего разложения по собственным функциям, данного в § 5.7. Однако свойство детального равновесия не является универсальным и существует много приложений основных кинетических уравнений с несимметричными **W**.

4. Другие доказательства даны Кирхгофом, который использовал теорию сетей *, и Ульманом, который использовал математические неравенства, включающие выпуклость **.

5. Следующее относительно простое доказательство основано на интуитивной мысли, что переходы стремятся перенести вероятность от состояний, имеющих большую равновесную долю, к состояниям с меньшей равновесной долей. Другая версия доказательства намечена в последнем упражнении § 5.9.

---

* J. Schnakenburg, Rev. Mod. Phys., 48, 571 (1976).

** A. Uhlmann, Wissens. Z. Karl—Marx—Universitat Leipzig, Mathem.—Naturw. Reihe 27, 213 (1978); A. Wehrl, Rev. Mod. Phys. 50, 221 (1978); R. Kubo. Perspectives in Statistical Physics (H. J. Raveche ed., North-Holland, Amsterdam, 1981).

Сначала докажем две леммы.

Пусть $\varphi(t)$ — любое решение основного кинетического уравнения, не обязательно нормированное или положительное. *В заданный момент* времени t положительные, отрицательные и равные нулю компоненты будем отличать, используя индексы u, v, w соответственно:

$$\varphi_u(t) > 0, \quad \varphi_v(t) < 0, \quad \varphi_w(t) = 0.$$

Пусть $U(t)$ — сумма положительных компонент:

$$U(t) = \sum_u \varphi_u(t). \tag{5.3.1}$$

Очевидно, что $U(t)$ положительна или равна нулю, если множество компонент u пустое. Наша первая лемма утверждает, что $U(t)$ *является монотонной невозрастающей функцией, зависящей от* t. Функция $U(t)$ изменяется со временем, во-первых, за счет изменения каждого члена суммы (5.3.1), а во-вторых, за счет того, что в определенные моменты времени одни члены суммы исчезают из нее, а другие — появляются в ней. В течение временнóго интервала между этими моментами времени из (5.2.5б) имеем

$$\dot{U}(t) = \sum_u \dot{\varphi}_u = \sum_u \left(\sum_{u'} \mathbf{W}_{uu'} \varphi_{u'} + \sum_{v'} \mathbf{W}_{uv'} \varphi_{v'} \right) =$$
$$= \sum_{u'} \left(-\sum_v W_{vu'} - \sum_w W_{wu'} \right) \varphi_{u'} + \sum_{v'} \left(\sum_u W_{uv'} \right) \varphi_{v'}. \tag{5.3.2}$$

Каждый член неположителен, поэтому

$$\dot{U}(t) \leqslant 0. \tag{5.3.3}$$

В тот момент, когда члены появляются или исчезают в сумме (5.3.1), функция $U(t)$ недифференцируема, но она остается непрерывной, потому что в этот момент времени появляющиеся и исчезающие члены равны нулю. Значит, $U(t)$ непрерывна всюду и удовлетворяет (5.3.3) всегда, кроме дискретного множества моментов времени; следовательно, она не может возрастать. Лемма доказана.

По аналогии с (5.3.1) определим отрицательную сумму:

$$V(t) = \sum_v \varphi_v(t). \tag{5.3.4}$$

Функция $V(t)$ не убывает, поскольку $U + V = \text{const}$. Отсюда вытекает следствие: *если начальные значения* $\varphi_n(0) \geqslant 0$ *для всех* n, то $\varphi_n(t) \geqslant 0$ *при всех* $t > 0$. Если бы основное кинетическое уравнение не имело этого свойства «сохранения положительности», то оно не могло бы правильно описывать эволюцию распределения вероятностей.

Из (5.3.3) следует, что $U(t)$ стремится к пределу $U(\infty) \geqslant 0$ и, аналогично, $V(t)$ стремится к $V(\infty)$.

Наша вторая лемма утверждает, что *если* $\mathbf{W}$*-матрица не является разложимой или расщепляющейся, то по крайней мере одно*

из этих предельных значений равно нулю, так что в конце концов все $\varphi_n(t)$ будут иметь один и тот же знак или будут равны нулю. Знак определяется начальными значениями, потому что

$$\sum_n \varphi_n(t) = \text{const} = C. \tag{5.3.5}$$

Если $C=0$, то все $\varphi_n(t)$ должны стремиться к нулю. Без потери общности мы можем положить $C \geqslant 0$ и доказать, что $V(\infty)=0$.

Для доказательства этой второй леммы отметим, что $\dot{U}(\infty)=0$. Это не противоречит (5.3.2) только тогда, когда каждый из трех членов равен нулю. Для этого имеется несколько возможностей.

1. Множество компонент u пусто, т. е. $\varphi_n(\infty) \leqslant 0$ для всех n. Так как мы положили $C \geqslant 0$, то $\varphi_n(\infty)=0$ и $U(\infty)=V(\infty)=0$.

2. Множество компонент u не пустое, но оба множества компонент v и w пустые. Тогда очевидно, что $V(\infty)=0$.

3. Ни множество компонент u, ни v не пусты, но множество w пусто. Тогда должно выполняться $W_{vu'}=W_{uv'}=0$, так что $\mathbf{W}$-матрица имеет вид

$$\begin{pmatrix} \mathbf{W}_{uu'} & 0 \\ 0 & \mathbf{W}_{vv'} \end{pmatrix}.$$

Тогда $\mathbf{W}$ разложима и, следовательно, исключается из леммы.

4. Ни одно из множеств u, v, w не пусто, тогда должно выполняться равенство $W_{vu'}=W_{wu'}=W_{uv'}=0$, так что $\mathbf{W}$-матрица имеет вид

$$\begin{pmatrix} \mathbf{W}_{uu'} & 0 & \mathbf{W}_{uw'} \\ 0 & \mathbf{W}_{vv'} & \mathbf{W}_{vw'} \\ 0 & \mathbf{W}_{wv'} & \mathbf{W}_{ww'} \end{pmatrix}.$$

Тогда $\mathbf{W}$ приводима. Записав аналог уравнения (5.3.2) для функции $\dot{V}(t)$, находим также $\mathbf{W}_{wv'}=0$, так что $\mathbf{W}$ относится к расщепляющемуся типу и также исключается из леммы.

Это завершает доказательство второй леммы. Следствием этой леммы является то, что *компоненты не зависящего от времени решения либо все неотрицательны, либо все неположительны.* Для стационарного распределения вероятности имеем, естественно, $p_n^s \geqslant 0$, потому что $C=1$. Теперь предположим, что $p_n^{(1)}(t)$ и $p_n^{(2)}(t)$ — распределения вероятностей, удовлетворяющие основному кинетическому уравнению, которое не является ни разложимым, ни расщепляющимся. Тогда $\varphi_n(t)=p_n^{(1)}(t)-p_n^{(2)}(t)$ является решением, для которого $C=0$. Тогда

$$\varphi_n(t)=p_n^{(1)}(t)-p_n^{(2)}(t) \to 0.$$

Из этого следует, что, во-первых, не может существовать более одного стационарного распределения; во-вторых, что любое другое решение стремится к стационарному. Это и есть желаемый результат.

Упражнение. Покажите для непрерывного множества состояний, что функция

$$U(t)=\int_{P(y,\,t)>0} P(y,\ t)\,\mathrm{d}y$$

также является монотонно убывающей, и докажите, что если решение было положительным, то оно и останется положительным. Почему уже нельзя утверждать (если рассуждать строго), что решение должно стремиться к стационарному распределению?

Упражнение. *Среднее время, которое система проводит в переходном состоянии* дается выражением

$$\theta_b=\int_0^\infty p_b(t)\,\mathrm{d}t.$$

Покажите, что θ_b можно найти из уравнения

$$\sum_{b'} \mathbf{B}_{bb'}\theta_{b'}=-p_b(0). \tag{5.3.6}$$

Упражнение. *Предположим, что* **W**-*матрица относится к расщепляющемуся типу* (5.2.10) и система сначала находилась в переходном состоянии c_0. Полная вероятность того, что система окажется в конце концов в одном из состояний a, составляет

$$p_A(\infty)=-\sum_{a,\,c} \mathbf{D}_{a,\,c}(\mathbf{C}^{-1})_{cc_0}.$$

Упражнение. Пусть $n=0,\ 1,\ 2,\ \ldots$ и

$$\dot{p}_0=-p_0+\sum_{\nu=1}^{\infty}\alpha_\nu p_\nu,$$

$$\dot{p}_\nu=p_{\nu-1}-(1-\alpha_\nu)\,p_\nu\ \ (\nu=1,\ 2,\ \ldots).$$

Найдите стационарное решение для случая, когда $\sum\alpha_\nu=\infty$. Покажите, что если $\sum\alpha_\nu$ сходится, то стационарных решений не существует.

5.4. ЗАМКНУТЫЕ ИЗОЛИРОВАННЫЕ ФИЗИЧЕСКИЕ СИСТЕМЫ

В этом названии слово «физический» означает, что система должна рассматриваться микроскопически в терминах уравнений Гамильтона или Шредингера. «Замкнутая» означает отсутствие какого-либо обмена с внешним миром, так что множество микроскопических переменных фиксировано. «Изолированная» означает, что она не подвергается воздействию внешних, зависящих от времени сил, так что энергия *является интегралом движения*, а траектории системы в фазовом пространстве принадлежат единственной энергетической оболочке. Кроме того, мы должны предположить, что система финитна в том смысле, что мера каждой отдельной энергетической оболочки конечна. В соответствии с равновесной статистической механикой для систем с заданным значением энергии имеется равновесное распределение (микроканонический ансамбль), которое можно найти пользуясь только лишь изучением поведения системы в фазовом пространстве *.

* В действительности, необходим добавочный критерий устойчивости, см.: M. E. Fisher, Archives Rat. Mech. Anal. 17, 377 (1964); D. Ruelle, Statistical

Когда имеется дополнительный интеграл движения, например угловой момент в цилиндрическом сосуде, энергетическая оболочка распадается на подоболочки, каждая из которых соответствует фиксированным значениям этих констант. Переходы между подоболочками невозможны. С другой стороны, эргодическая теория утверждает, что если система находится на определенной оболочке, ее движение покрывает всю оболочку при условии, что при определении этой оболочки были учтены все интегралы движения *.

Предположим теперь, что такую систему можно описать на мезоскопическом уровне с помощью основного кинетического уравнения. Это означает, что подоболочку, которой принадлежит система, тоже можно поделить на «фазовые клетки» таким образом, что эволюцию системы можно будет приближенно описать в терминах вероятностей перехода $\mathbf{W}_{nn'}$ между двумя любыми клетками n, n'. Тогда эти вероятности $\mathbf{W}_{nn'}$ обладают определенными добавочными свойствами по сравнению с (5.2.5), которые, вообще говоря, не справедливы для $\mathbf{W}$-матриц, описывающих открытые или нефизические системы, такие, как популяции. Эти свойства являются предметом настоящего и следующих двух параграфов.

Во-первых, понятно, что полная $\mathbf{W}$-матрица разбивается на отдельные блоки для отдельных подоболочек. Следовательно, мы можем рассматривать отдельную подоболочку. В соответствии с эргодическим свойством оставшийся блок $\mathbf{W}$-матрицы является неразложимым и, следовательно, имеется единственное стационарное решение p_n^s.

Далее нам известно, что p_n^s должны совпадать с равновесным распределением p_n^e, что определяется объемом фазовой клетки n:

$$\sum_{n'} W_{nn'}\, p_{n'}^e = \left(\sum_{n'} W_{n'n}\right) p_n^e. \tag{5.4.1}$$

Это соотношение между вероятностями перехода, коэффициенты p_n^e должны быть известны и определяются обычной статистической механикой **. Кроме того, по определению, p_n^e не равно нулю и, следовательно, переходные состояния отсутствуют, так что $\mathbf{W}$ для каждой подоболочки является неприводимой.

В качестве примера возьмем газ в цилиндрическом сосуде. Кроме энергии имеется еще один интеграл движения — угловой момент, направленный вдоль цилиндрической оси. Тогда $6N$-мерное фазовое пространство разбивается на подоболочки размерности $6N-2$. Выде-

---

Mechanics, Rigorous Results (Benjamin, New York, 1966). Набор точечных частиц с взаимным притяжением представляет собой пример, которому этот критерий не удовлетворяет и для которого, следовательно, не существует статистической механики.

* A. I. Khinchin, Mathematical Foundations of Statistical Mechanics (G. Gamow transl., Dover Publ., New York, 1949); R. Balescu, Equilibrium and Nonequilibrium Statistical Mechanics (Wiley—Interscience, New York, 1975) Appendix.

** Повсюду мы используем верхние индексы e для термодинамического равновесия и s для любого стационарного, т. е. не зависящего от времени решения основного кинетического уравнения.

лим небольшой объем в сосуде и обозначим $Y(t)$ находящееся в нем число молекул. В соответствии с § 3.2 $Y(t)$ является стохастической функцией с множеством возможных значений $n=0, 1, 2, \ldots, N$. Каждое значение $Y=n$ определяет фазовую клетку *. Можно ожидать, что $Y(t)$ является марковским процессом, если газ достаточно разрежен, и что p_n^e приближенно является распределением Пуассона, если выбранный нами объем намного меньше объема сосуда. И наконец, коснемся *детального равновесия*, которое мы обсудим более серьезно в § 5.6. Уравнение (5.4.1) просто устанавливает очевидный факт, что в равновесии сумма всех переходов за единичное время в любое состояние должна уравновешиваться суммой всех переходов из состояния n в другие состояния n'. Более сильная формулировка детального равновесия состоит в том, что *для каждой пары* n, n' отдельно переходы должны уравновешиваться:

$$W_{nn'}p_{n'}^e = W_{n'n}p_n^e. \tag{5.4.2}$$

Это справедливо для замкнутых изолированных конечных физических систем при определенных ограничениях, сформулированных в § 5.6.

Ввиду того что p_n^e известно из обычной статистической механики, это соотношение снова является свойством вероятностей перехода.

Свойство детального равновесия можно также применить к системам, взаимодействующим с тепловым резервуаром, с помощью простого приема, суть которого состоит в том, что такая система рассматривается как подсистема большей системы, включающей тепловой резервуар. Примеры: газ, взаимодействующий с тепловым резервуаром, набор атомов, взаимодействующих с электромагнитным полем излучения, и, наконец, система спинов, взаимодействующих с решеточными фононами. Обозначим ε_n энергии различных состояний небольшой исследуемой системы. Пусть E — фиксированное значение энергии полной системы. В термодинамическом равновесии вероятность того, что небольшая система находится в состоянии n, с точностью до нормировки равна той части объема фазового пространства полной системы, в которой малая система находится в состоянии n. Этот объем представляет собой произведение объема фазового пространства g_n малой системы и объема фазового пространства теплового резервуара с энергией $E-\varepsilon_n$. В соответствии со статистической механикой последний множитель представляет собой

$$\exp\left[\frac{1}{k}S(E-\varepsilon_n)\right] = \exp\left[\frac{1}{k}S(E) - \frac{1}{k}\frac{dS}{dE}\varepsilon_n\right] = \text{const}\cdot\exp\left[-\frac{\varepsilon_n}{kT}\right], \tag{5.4.3}$$

где k — постоянная Больцмана, S — энтропия теплового резервуара, T — его температура. Тогда *соотношение детального равновесия для*

* Их называют «z-звездами» по P. and T. Ehrenfest in: Encyklopadie der mathematischen Wissenchaften, Band 4, Nr. 32 (Teubner, Leipzig, 1912); translated by M. J. Moravcsik under the title: Conceptual Foundations of the Statistical Approach in Mechanics (Cornell University Press, Ithaca, 1959).

систем, взаимодействующих с тепловым резервуаром при температуре T, имеет вид

$$W_{nn'}g_{n'}e^{-\varepsilon_{n'}/(kT)} = W_{n'n}g_n e^{-\varepsilon_n/(kT)}. \qquad (5.4.4)$$

Отметим, что это соотношение не требует детального знания о резервуаре, а только подразумевает знание его общих термодинамических свойств *.

Примечание. Идея детального равновесия впервые возникла в кинетике химических реакций. Предположим, что в смеси химических веществ существует цикл из трех возможных реакций, например такой, что показан на рис. 9.

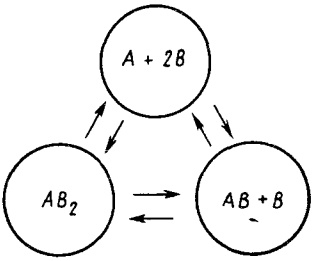

Рис. 9. Цикл из трех реакций

Уравнение (5.4.2) утверждает, что в равновесии каждая реакция идет слева направо и справа налево одинаково часто. В связи с этим утверждение может показаться интуитивно очевидным. Причина для такого ощущения состоит в том, что, наверное, можно заблокировать одну реакцию, не нарушая равновесия и скорости других реакций. И конечно же, поскольку атомы больше не могут перемещаться по кругу, а только вперед или назад, свойство детального равновесия не более чем равновесное свойство. В других приложениях кажется маловероятным, что один канал между двумя состояниями можно заблокировать не повлияв на остальные; действительно, это не может быть всегда правильным, потому что детальное равновесие (5.4.2) справедливо только при определенных ограничениях, которые будут сформулированы в § 5.6.

Упражнение. Покажите, что члены, опущенные при разложении $S(E-\varepsilon_n)$ в (5.4.3), стремятся к нулю при стремлении размеров теплового резервуара к бесконечности («термодинамический предел»).

Упражнение. Два объема заполнены газом и связаны друг с другом некоторым количеством отверстий разного размера. Что можно сказать о течении газов через эти отверстия, основываясь на соотношении детального равновесия?

Упражнение. Атом испытывает переходы между состояниями E_n вследствие поглощения и испускания фотонов. Вероятности перехода $W_{nn'}$ связаны соотношением (5.4.4). Покажите, что для атома это является гарантией иметь в состоянии равновесия распределение Больцмана.

5.5. ВОЗРАСТАНИЕ ЭНТРОПИИ

Следующие вычисления дают еще одно, более привычное физикам доказательство приближения к стационарному распределению. Кроме того, настоящее доказательство дает некоторую информацию о том, почему происходит это приближение, а именно почему неко-

* В частности, нет необходимости привлекать квантовую механику, см.: J. F. Dobson, Chem. Phys. Letters 61, 157 (1979).

торый функционал, зависящий от функции распределения, монотонно возрастает. В действительности оказывается, что таких функционалов много, и мы обсудим причины, по которым один из них играет особую роль в физике и широко известен под названием «энтропия».

Настоящее доказательство более ограничено, чем приведенное в § 5.3,— ведь мы заранее должны предположить, что существует всюду положительное стационарное решение. Известно, что для замкнутой изолированной физической системы существует стационарное решение основного кинетического уравнения, для обозначения которого мы будем использовать символ p_n^e. Однако настоящее доказательство, с одной стороны, применимо также к другим случаям, в которых нет переходных состояний, а с другой стороны, не требует предположения о детальном равновесии или каком-либо другом соотношении симметрии типа (5.4.2).

Рассмотрим основное кинетическое уравнение (5.2.2). Предположим, что существует нормированное стационарное решение p_n^e и $p_n^e > 0$. Возьмем произвольную неотрицательную выпуклую функцию $f(x)$, определенную при положительных x:

$$0 \leqslant x < \infty, \quad f(x) \geqslant 0, \quad f''(x) > 0. \tag{5.5.1}$$

Определим величину H соотношением

$$H(t) = \sum_n p_n^e f\left(\frac{p_n(t)}{p_n^e}\right) = \sum_n p_n^e f(x_n), \tag{5.5.2}$$

где x_n — сокращенное обозначение для p_n/p_n^e. Ясно, что $H(t) \geqslant 0$ и

$$\frac{dH(t)}{dt} = \sum_{nn'} f'(x_n)(W_{nn'}p_{n'} - W_{n'n}p_n) =$$

$$= \sum_{nn'} W_{nn'}p_{n'}^e \{x_{n'}f'(x_n) - x_{n'}f'(x_{n'})\}. \tag{5.5.3}$$

Теперь для произвольного набора ψ_n нетрудно убедиться в правильности тождества

$$\sum_{nn'} W_{nn'}p_n^e(\psi_n - \psi_{n'}) = 0. \tag{5.5.4}$$

Выбираем $\psi_n = f(x_n) - x_n f'(x_n)$ и прибавляем получившееся тождество к (5.5.3):

$$\frac{dH(t)}{dt} = \sum_{nn'} W_{nn'}p_{n'}^e \{(x_{n'} - x_n)f'(x_n) + f(x_n) - f(x_{n'})\}. \tag{5.5.5}$$

Как следует из рис. 10, для любой выпуклой функции f множитель { } отрицателен, если только $x_n \neq x_{n'}$. Отсюда следует, что $H(t)$ монотонно убывает.

Поскольку функция $H(t)$ убывает, но не может стать отрицательной, она должна стремиться к пределу. В этом пределе выра-

жение (5.5.5) должно обратиться в нуль *. Это возможно только тогда, когда $x_n = x_{n'}$ для всех пар состояний n, n', у которых $W_{nn'} \neq 0$. При этом подразумевается, что каждая $x_{n'}$ равна всем тем x_n, которые можно получить из нее с помощью цепочки преобразований с ненулевыми вероятностями. Тогда имеются две возможности: либо n покрывает все состояния, либо оно покрывает подмножество состояний, не связанное ненулевой вероятностью перехода с каким-либо состоянием вне этого подмножества. В первом случае $p_n(\infty)$ пропорционально p_n^e и должно быть равным ему по условию нормировки. В последнем случае W-матрица S разложима, поэтому можно просто положить, что $p_n(\infty)$ пропорционально p_n^e внутри подмножества, но в разных подмножествах константы пропорциональности могут отличаться друг от друга.

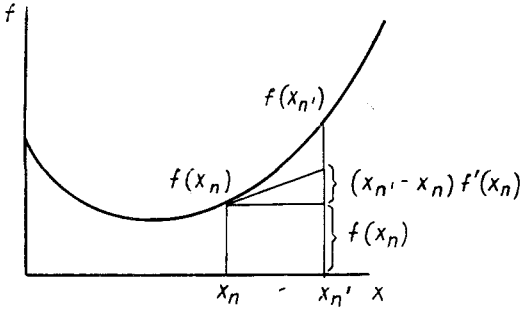

Рис. 10. Свойство выпуклых функций

Упражнение. На самом деле функцию f называют *выпуклой*, если $f''(x) > 0$, и *строго выпуклой*, если $f''(x) > 0$, как требовалось в (5.5.1). Покажите на контрпримере, что простой выпуклости недостаточно для наших целей.

Упражнение. Докажите (5.5.4).

Упражнение. Если соотношение детального равновесия (5.4.2) выполняется, то для правой части (5.5.3) можно написать

$$\frac{1}{2}\sum_{nn'} W_{nn'}\, p_{n'}^e\, (x_{n'} - x_n)\{f'(x_n) - f'(x_{n'})\}.$$

Даже не используя (5.5.4) видно, что это выражение может быть отрицательным. Сравните с (5.7.17).

Упражнение. При специальном выборе (5.5.6) находим, что (5.5.5) отрицательно, если при всех положительных x, y выполняется неравенство

$$x \log x - x \log y - x + y \geqslant 0,$$

причем равенство имеет место только при $x = y$. Докажите это так называемое *неравенство Клейна* ** непосредственно.

Для наших целей годится любая выпуклая функция $f(x)$, определенная при $x \geqslant 0$ и ограниченная снизу, например можно было бы использовать $f(x) = x^2$ или $f(x) = x^\alpha$ $(\alpha > 1)$ ***. Однако мы по привычке выберем

$$f(x) = x \log x, \quad H = \sum_n p_n \log \frac{p_n}{p_n^e}, \tag{5.5.6}$$

* Это обычный аргумент при доказательстве H-теорем, но в действительности он является строгим только если число состояний n конечно.

** O. Klein, Z. Phys., 72, 767 (1931).

*** См.: J. A. Wehrl, rev. Mod. Phys., 50, 221 (1978).

так как эта функция обладает двумя дополнительными свойствами, которые придают ей больший физический смысл.

Первое свойство состоит в том, что этот частный вид можно использовать для доказательства приближения к равновесию в разреженном газе, описываемом кинетическим уравнением Больцмана. Уравнение Больцмана нелинейно, и для доказательства того, что его решения стремятся к равновесным, нужна иная техника. Эта техника основана на выборе H в виде (5.5.6); другие выпуклые функции в этом случае использовать нельзя *. Между прочим, уравнение Больцмана *не является* основным кинетическим уравнением для плотности вероятности, а является уравнением эволюции для функции распределения частицы в одночастичном шестимерном фазовом пространстве («μ-пространстве»). Однако *линеаризованное* уравнение Больцмана имеет ту же структуру, что и основное кинетическое уравнение (ср. с. § 11.5).

Второе дополнительное свойство (5.5.6) состоит в том, что оно делает H аддитивной величиной в следующем смысле. Возьмем две независимые системы с состояниями n и m и вероятностями p_n и q_m. Их можно рассматривать как одну комбинированную систему, у которой состояния обозначены (n, m), с вероятностями $p_n q_m$. Тогда функционал H комбинированной системы является суммой функционалов отдельных систем:

$$\sum_{n,m} p_n q_m \log \frac{p_n q_m}{p_n^e q_m^e} = \sum_n p_n \log \frac{p_n}{p_n^e} + \sum_m q_m \log \frac{q_m}{q_m^e}.$$

Отсюда можно сделать вывод, что если система состоит из газа или является твердым телом, H является экстенсивной величиной.

Эти два дополнительных свойства величины H, заданные (5.5.6), совместно с ее монотонным убыванием привели к ее отождествлению с энтропией, определенной вторым законом термодинамики. Однако следует ясно понимать, что H является функционалом неравновесного распределения вероятности, в то время как энтропия определена для термодинамически равновесных состояний **. Поэтому настоящая концепция энтропии является обобщением термодинамической энтропии; обобщенная энтропия

$$S = -kH + S_0, \tag{5.5.7}$$

где k — множитель, определяющийся единицами измерений S, а S_0 — постоянный член, не зависящий от p_n. В равновесии $H = 0$, так что S_0 является термодинамической энтропией, которую можно изменить только путем внешнего воздействия. Соотношения (5.5.7) совместно с (5.5.6) просто определяют разность значений энтропии между равновесным и неравновесным состояниями.

---

* P. A. P. Moran, Proc. Camb. Philos. Soc., 57, 833 (1961).

** Или по крайней мере, локально-равновесных, см.: N. G. van Kampen, Physica, 25, 1294 (1959).

5.6. ДОКАЗАТЕЛЬСТВО СООТНОШЕНИЯ ДЕТАЛЬНОГО РАВНОВЕСИЯ

Докажем соотношение детального равновесия для классических изолированных систем *. Квантово-механическое доказательство в принципе такое же, но требует большей предварительной работы **. Как разъяснялось в § 3.2, в классической механике обозначают клетку в фазовом пространстве. Однако оказывается более удобным использовать непрерывные переменные и записать соотношение детального равновесия (5.4.2) в виде

$$W(y \mid y') P^e(y') = W(y' \mid y) P^e(y). \tag{5.6.1}$$

Здесь y обозначены значения, которые принимают макроскопические наблюдаемые величины $Y(q, p)$. Мы докажем (5.6.1) при следующих двух условиях.

1. Функция Гамильтона системы, ответственная за микроскопическое движение, является четной функцией всех импульсов p_k. Это требование исключает внешнее магнитное поле и вращение полной системы как целого.

2. Переменные Y также являются четными функциями импульса.

Если эти условия не выполнены, то, вообще говоря, доказать (5.6.1) нельзя, но тогда выполняется аналогичное соотношение, которое мы выведем позднее.

Пусть система описывается f координатами q_k и f импульсами p_k ($k = 1, 2, \ldots, f$), которые образуют $2f$-мерное фазовое пространство Г. Уравнения движения имеют вид

$$\frac{dq_k}{dt} = \frac{\partial H(q, p)}{\partial p_k}; \quad \frac{dp_k}{dt} = -\frac{\partial H(q, p)}{\partial q_k}. \tag{5.6.2}$$

Условие 1 определяет следующее свойство инвариантности. Если в (5.6.2) произвести замену

$$t = -\bar{t}, \quad q_k = \bar{q}_k, \quad p_k = -\bar{p}_k, \tag{5.6.3}$$

то уравнения в переменных $\bar{t}$, $\bar{q}_k$, $\bar{p}_k$ будут иметь тот же самый вид, что и для t, p, q. Таким образом, каждой возможной траектории в Г соответствует еще одна, полученная путем отражения величин p_k, проведенная в обратном направлении, которая также является решением (5.6.2). Сформулируем это более точно. Предположим, в некоторый момент времени наша система находится в точке (q, p) фазового пространства Г. Через некоторое время τ она будет находиться в точке (q', p'), однозначно связанной с (q, p) уравнениями движения. Тогда справедливо и то, что если стартовать из точки $(q', -p')$, то по прошествии времени τ система ока-

---

* Более геометрическое доказательство дал Вигнер, см.: E. P. Wigner J. Chem. Phys. **22**, 1912, (1954); см.: N. G. van Kampen, Fortshritte der Physin, **4**, 405 (1956). Настоящее алгебраическое доказательство аналогично приведенному в [7, pp. 93 ff].

** N. G. van Kampen, Physica, **20**, 603 (1954).

жется в точке $(q, -p)$. Это свойство уравнений движения называют *инвариантностью относительно обращения времени*. Это место является отправной точкой для доказательства соотношения детального равновесия. Введем сокращенные обозначения. Обозначим x точку (q, p) в Г-пространстве, и пусть $x^\tau = (q', p')$ — точка, в которую система переносится через время τ. Далее, $\bar{x} = (q, -p)$, так что

$$\bar{\bar{x}} = x. \tag{5.6.4}$$

Тогда инвариантность относительно обращения времени выражается соотношениями

$$(\overline{x^\tau})^\tau = \bar{x} \quad \text{или} \quad \overline{x^\tau} = (\bar{x})^{-\tau}. \tag{5.6.5}$$

Понятно, что операция, обозначенная чертой, сохраняет фазовый объем в Г:

$$d\bar{x} = dx. \tag{5.6.6}$$

Вследствие свойства 2 имеем

$$Y_{\bar{x}}(0) = Y_x(0), \tag{5.6.7}$$

отсюда следует

$$Y_{\bar{x}}(t) = Y_{\bar{x}}t(0) = Y_{\bar{x}^{-t}}(0) = Y_{x^{-t}}(0) = Y_x(-t). \tag{5.6.8}$$

Далее, поскольку равновесная функция распределения является функцией, зависящей от интегралов движения, причем она должна быть четной функцией скоростей, имеем

$$P_X^e(\bar{x}) = P_X^e(x). \tag{5.6.9}$$

После этих приготовлений запишем

$$P_2(y_1, 0; y_2, \tau) = \int \delta[y_1 - Y_x(0)]\,\delta[y_2 - Y_x(\tau)]\,P_X^e(x)\,dx =$$

(проведем замену переменных в интеграле, заменив x на $\bar{x}$)

$$= \int \delta[y_1 - Y_{\bar{x}}(0)]\,\delta[y_2 - Y_{\bar{x}}(\tau)]\,P_X^e(\bar{x})\,d\bar{x} =$$

использовав (5.6.7), (5.6.8), (5.6.9), (5.6.6), получим)

$$= \int \delta[y_1 - Y_x(0)]\,\delta[y_2 - Y_x(-\tau)]\,P_X^e(x)\,dx =$$
$$= P_2(y_1, 0; y_2, -\tau) = P_2(y_2, 0; y_1, \tau).$$

Таким образом мы нашли соотношение симметрии для P_2, которое сразу же можно перенести на соотношение для $P_{1|1}$:

$$P_{1|1}(y_2, \tau | y_1, 0)\,P^e(y_1) = P_{1|1}(y_1, \tau | y_2, 0)\,P^e(y_2). \tag{5.6.10}$$

Если переменные Y таковы, что $Y(t)$ является марковским процессом, то это соотношение можно записать в виде

$$T_\tau(y_2 | y_1)\,P^e(y_1) = T_\tau(y_1 | y_2)\,P^e(y_2) \tag{5.6.11}$$

и с определением (5.1.1) оно дает (5.6.1), что и требовалось доказать.

Теперь предположим, что условие 1 не выполнено. В частности, пусть имеется внешнее магнитное поле **B** с векторным потенциалом **A**. Тогда функция Гамильтона будет содержать $(\mathbf{p}-e\mathbf{A})^2$ вместо $\mathbf{p}^2$ и не будет сохранять свой вид при замене **p** на $-\mathbf{p}$. Однако это можно исправить, если одновременно изменять знак поля. Тогда преобразование (5.6.3) будет отображать траектории (5.6.2) с полем **B** на обратные траектории (5.6.2) с полем $-\mathbf{B}$. Как следствие этого, вместо (5.6.1) находим

$$W(y\,|\,y';\ \mathbf{B})\,P^e(y') = W(y'\,|\,y;\ -\mathbf{B})\,P^e(y). \tag{5.6.12}$$

Здесь мы предположили, что переменные Y являются четными функциями скоростей, значит, и $\mathbf{p}-e\mathbf{A}$, так что клетки фазового пространства снова отображаются на самих себя. В случае вращения системы как целого (как в центрифуге *) необходимо также обратить угловую скорость Ω. Тогда результат, записанный в дискретных обозначениях (5.4.2), имеет вид

$$W_{nn'}(B,\ \Omega)\,p^e_{n'} = W_{n'n}(-B,\ -\Omega)\,p^e_n. \tag{5.6.13}$$

С другой стороны, предположим теперь, что $H(q,\ p)$ является четной функцией p_k, но что некоторые из переменных $Y(q,\ p)$ являются нечетными функциями p_k. Четные и нечетные Y характеризуются соотношением

$$Y_+(q,\ p) = Y_+(q,\ -p);\ Y_-(q,\ p) = -Y_-(q,\ -p).$$

Например, в гидродинамике локальные плотности частиц и энергии являются четными функциями, в то время как три компоненты скорости течения — нечетными. Понятно, что равновесие не может отличаться для разных направлений времени и, следовательно,

$$P^e(y_+,\ y_-) = P^e(y_+,\ y_-) = P^e(y).$$

Те же аргументы приводят к

$$W(y_+,\ y_-\,|\,y'_+,\ y'_-)\,p^e(y') = W(y'_+,\ y'_-\,|\,y_+,\ -y_-)\,P^e(y). \tag{5.6.14}$$

Примечание. Соотношение детального равновесия (5.4.2) или (5.6.1) утверждает, что матрица **W** является виртуально симметричной и, как будет видно в следующем параграфе, это гарантирует ее приводимость к диагональному виду. Соотношение (5.6.14) также является свойством **W**, но само по себе не гарантирует диагонализуемости **W**, и мы будем называть его *расширенным соотношением детального равновесия*. Соотношения (5.6.12) и (5.6.13) не являются свойствами матрицы, но связывают вероятности перехода в одной системе с вероятностями перехода в другой. Поэтому мы не будем связывать их с названием «детальное равновесие». Расширенное свойство детального равновесия окажется важным для § 10.4.

Упражнение. Из (5.4.2) следует, что матрица

$$\mathbf{V}_{nn'} = [p^e_n]^{-1/2}\,\mathbf{W}_{nn'}\,[p^e_{n'}]^{1/2} \tag{5.6.15}$$

---

* G. J. Hooyman and S. R. de Groot, Physica 21, 73 (1955); [7, pp. 264 ff]

симметрична и может быть приведена к диагональному виду. Выведите отсюда, что **W** можно привести к диагональному виду, и выразите ее собственные функции и собственные значения через собственные функции и собственные значения матрицы **V**.

Упражнение. Найдите оператор R такой, что (5.6.14) эквивалентно утверждению о симметричности комбинаций $R\mathbf{W}R^{-1}$. Почему это нельзя использовать для диагонализации **W**-матрицы?

Упражнение. Из (5.6.3) понятно, что импульсы p_k представляют собой либо настоящие скорости, либо их линейные комбинации. Это не требуется при общем каноническом преобразовании. Покажите, что независимо от выбора переменных всегда существует автоморфизм $x \to \bar{x}$, обладающий свойствами (5.6.4)—(5.6.7), и что, следовательно, доказательство остается справедливым.

5.7. РАЗЛОЖЕНИЕ ПО СОБСТВЕННЫМ ФУНКЦИЯМ

Как уже упоминалось выше, свойства (5.2.5), характеризующие **W**-матрицу, еще не гарантируют существования матрицы S такой, что произведение $S^{-1}WS$ диагонально. Добавочное свойство детального равновесия (5.4.2) или (5.6.1) делает **W** симметричной в определенном смысле и, следовательно, диагонализируемой. В этом параграфе мы рассмотрим вытекающие отсюда следствия.

Без потери общности предположим, что **W** неразложима. Вследствие свойств симметрии (5.4.2) или (5.6.1) это означает, что она также не приводится к виду (5.2.7). Если бы некоторые из p_n^e могли обращаться в нуль, это было бы не так, но нам известно, что в замкнутой изолированной физической системе все состояния имеют ненулевую вероятность.

Уравнения для собственных функций и собственных значений имеют вид

$$\mathbf{W}\Phi_\lambda = -\lambda\Phi_\lambda. \tag{5.7.1}$$

Мы обозначили $-\lambda$ собственные значения, так как в дальнейшем будет видно, что они $\leqslant 0$. Тем же символом λ будем помечать собственные функции, однако для вырожденных собственных значений это обозначение должно быть усовершенствовано. Имеется одно собственное значение $\lambda = 0$, соответствующее $\Phi_0 = p^e$, и мы знаем, что Φ_0 положительна. В § 5.3 было доказано, что это собственное значение не вырождено. Из (5.7.1) следует, что выражение

$$p(t) = \sum_\lambda c_\lambda \Phi_\lambda e^{-\lambda t} \tag{5.7.2}$$

с произвольными константами c_λ является решением основного кинетического уравнения. В том случае, когда имеется непрерывный спектр собственных значений, сумма должна быть заменена интегралом по λ.

Предположим, что мы нашли все собственные значения и собственные векторы, удовлетворяющие (5.7.1). Возникает вопрос, является ли решение (5.7.2) полным, т. е. представляет ли оно все решения кинетического уравнения. Другими словами, можно ли найти для каж-

дого начального распределения $p(0)$ соответствующие константы c_λ такие, что

$$p(0)=\sum_\lambda c_\lambda \Phi_\lambda. \tag{5.7.3}$$

Для финитной **W**-матрицы из линейной алгебры следует, что ответ на этот вопрос должен быть положительным, если **W**-матрица симметрична. Если **W** является оператором в бесконечномерном пространстве, то математические условия усложняются, но в качестве наводящего соображения можно считать любой симметричный оператор диагонализуемым, как это обычно бывает в квантовой механике. Сейчас мы покажем, что свойство детального равновесия гарантирует симметрию оператора **W**. Будем использовать обозначения для непрерывного множества возможных значений.

В пространстве действительных функций $\Phi(y)$ определим скалярное произведение любых двух функций Φ и ψ соотношением

$$(\Phi,\ \psi)=\int \frac{\Phi(y)\psi(y)}{\Phi_0(y)}\,dy=(\psi,\ \Phi). \tag{5.7.4}$$

Функция Φ имеет норму $\sqrt{(\Phi,\ \Phi)}$. Функции, имеющие финитную форму, составляют наше гильбертово пространство. Свойство детального равновесия (5.6.1) теперь можно выразить с помощью

$$(\Phi,\ \mathbf{W}\psi)=(\psi,\ \mathbf{W}\Phi)=(\mathbf{W}\Phi,\ \psi). \tag{5.7.5}$$

Это соотношение определяет симметрию оператора **W**.

Мы приходим к заключению, что система собственных функций полна. Кроме того, отсюда следует, что собственные значения действительны и что любые два собственных вектора ортогональны в терминах скалярного произведения (5.7.4). Для дискретных собственных значений собственные векторы можно нормировать, так что

$$(\Phi_\lambda,\ \Phi_{\lambda'})=\delta_{\lambda\lambda'}. \tag{5.7.6}$$

В частности, при $\lambda=\lambda'=0$ условие нормировки дает

$$(\Phi_0,\ \Phi_0)=\int \Phi_0(y)\,dy=1. \tag{5.7.7}$$

Это условие приводит к тому, что функция $\Phi_0(y)$ оказывается не просто пропорциональной, а тождественной $p^e(y)$. Для непрерывного спектра или непрерывной части спектра (5.7.6) надо заменить на

$$(\Phi_\lambda,\ \Phi_{\lambda'})=\delta(\lambda-\lambda'). \tag{5.7.8}$$

Вследствие этой ортонормированности коэффициент c_λ в (5.7.3) можно найти с помощью обычного приема:

$$c_\lambda=(\Phi_\lambda(y),\ p(y,\ 0)). \tag{5.7.9}$$

Полнота выражается соотношением

$$\sum_\lambda \frac{\Phi_\lambda(y)\Phi_\lambda(y')}{\Phi_0(y')}=\delta(y-y'). \tag{5.7.10}$$

Решение основного кинетического уравнения с заданным начальным значением $P(y, 0)$ имеет вид

$$P(y, t) = \sum_{\lambda} \Phi_{\lambda}(y) e^{-\lambda t} \int \frac{\Phi_{\lambda}(y')}{\Phi_0(y')} P(y', 0) dy'. \qquad (5.7.11)$$

Примечание. Кроме вопроса о том, является ли набор собственных функций полным, на практике часто приходится сталкиваться со следующим вопросом. Предположим, для определенного оператора **W** имеется возможность определить множество решений (5.7.1). Необходимо узнать, представляют ли они все возможные решения. Для финитной матрицы **W** на этот вопрос можно ответить, подсчитав число найденных линейно независимых векторов Φ_{λ}. Для некоторых задач в бесконечномерном гильбертовом пространстве можно непосредственно показать, что найденные решения образуют полный набор (см., например, § 6.8). Обычно предполагают, что любой разумный систематический метод вычисления собственных функций позволяет найти все функции. Но в некоторых задачах в виде исключения появляются одна или несколько дополнительных собственных функций.

Упражнение. Сформулируйте рассмотренные выше уравнения для случая вырожденных собственных значений.

Упражнение. Покажите, что **W**-матрица

$$\mathbf{W} = \begin{bmatrix} -1 & 1 & 3 \\ 1/2 & -2 & 0 \\ 1/2 & 1 & -3 \end{bmatrix} \qquad (5.7.12)$$

не имеет полного набора собственных векторов. Тем не менее найдите $e^{t\mathbf{W}}$.

Упражнение. Покажите, что $c_0 = 1$ и (5.7.2) можно записать в виде

$$P(y, t) = p^{e}(y) + \sum_{\lambda > 0} c_{\lambda} \Phi_{\lambda}(y) e^{-\lambda t}. \qquad (5.7.13)$$

Упражнение. Покажите, что (5.7.10) подразумевает также и ортогональность.

Упражнение. Получите следующие выражения: для вероятности перехода

$$T_{\tau}(y \mid y') = \sum_{\lambda} \frac{\Phi_{\lambda}(y) \Phi_{\lambda}(y')}{\Phi_0(y')} e^{-\lambda t}, \qquad (5.7.14)$$

для равновесной автокорреляционной функции

$$\varkappa(\tau) = \sum_{\lambda \neq 0} e^{-\lambda t} \left[\int y \Phi_{\lambda}(y) dy \right]^2 \qquad (5.7.15)$$

и для спектра флуктуаций

$$S(\omega) = \frac{2}{\pi} \sum_{\lambda} \frac{\lambda}{\lambda^2 + \omega^2} \left[\int y \Phi_{\lambda}(y) dy \right]^2. \qquad (5.7.16)$$

Упражнение. Каждая $\Phi_{\lambda}(y)$, кроме $\Phi_0(y)$, при некоторых значениях y должна становиться отрицательной; следовательно, собственные функции сами по себе уже не являются плотностями вероятности. Почему это не опровергает следствия в § 5.3 и почему это не наносит никакого ущерба общему решению (5.7.2) или (5.7.14)?

Разложение по собственным функциям приводит к тому, что различные величины, имеющие отношение к стохастическим процессам, выражаются через них; примерами могут служить сотношения (5.7.13)—(5.7.16). Оно также упрощает некоторые выкладки, в частности доказательство приближения к равновесию. Действительно,

в соответствии с (5.7.13) достаточно доказать, что все λ кроме $\lambda=0$ положительны, значит, W является отрицательно полуопределенной. Для любого вектора $p_n = x_n p_n^e$ в гильбертовом пространстве в тех же обозначениях, что и в § 5.5, имеем

$$(p,\ \mathbf{W}p) = \sum_{nn'} \frac{p_n}{p_n^e} (W_{nn'} p_{n'} - W_{n'n} p_n) =$$

$$= \sum_{nn'} x_n (W_{nn'} p_{n'}^e x_{n'} - W_{n'n} p_n^e x_n) = -\frac{1}{2} \sum_{nn'} W_{nn'} p_{n'}^e (x_n - x_{n'})^2.$$

Действительно, это выражение отрицательно, если только все x_n не равны друг другу и вектор p_n не пропорционален p_n^e. Из этого вывода могло бы быть одно исключение. Когда много вероятностей $W_{nn'}$ обращается в нуль, состояния n разбиваются на две группы, не связанные друг с другом вероятностями перехода. Но в этом случае $\mathbf{W}$-матрица должна быть разложимой.

Этот результат составляет третье доказательство приближения к равновесию, но это доказательство ограничено $\mathbf{W}$-матрицами, имеющими свойство симметрии, выраженное соотношением детального равновесия. Однако оно не исключает возможности непрерывного спектра.

В качестве другого примера результата, полученного с помощью разложения по собственным функциям, рассмотрим выражение (5.7.16) для спектральной плотности флуктуаций. Немного изменив обозначения, перепишем его в виде

$$S(\omega) = \int_0^\infty \frac{g(\tau)\, d\tau}{1+\omega^2\tau^2}. \tag{5.7.17}$$

Это выражение можно интерпретировать как суперпозицию дебаевских функций релаксации $(1+\omega^2\tau^2)^{-1}$ с временами релаксации τ. Весовая функция $g(\tau)$ суперпозиции может быть непрерывной или состоять из дельта-функций, но в соответствии с (5.7.16) не принимает отрицательных значений. Следовательно, $S(\omega)$ *монотонно убывает, когда* ω *пробегает значения от* 0 до ∞.

Можно также получить асимптотическое разложение $S(\omega)$ для $\omega \to \infty$. Разложим каждый отдельный член в (5.7.16) по степени $1/\omega^2$:

$$S(\omega) = \frac{2}{\pi} \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{(-1)^\nu}{\omega^{2\nu+2}} \sum_\lambda \lambda^{2\nu+1} \left[\int y \Phi_\lambda(y)\, dy \right]^2 =$$

$$= \frac{2}{\pi} \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{(-1)^\nu}{\omega^{2\nu+2}} \sum_\lambda \left[\int y' \Phi_\lambda(y')\, dy' \right]^2 \int y (-\mathbf{W})^{2\nu+1} \Phi_\lambda(y)\, dy.$$

Определим транспонированную матрицу $\tilde{\mathbf{W}}$ соотношением $\mathbf{W}(y\,|\,y') = \tilde{\mathbf{W}}(y'\,|\,y)$, тогда

$$S(\omega) = \frac{2}{\pi} \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{(-1)^{\nu+1}}{\omega^{2\nu+2}} \sum_\lambda \int y' \Phi_\lambda(y')\, dy' \int \Phi_\lambda(y)\, \tilde{\mathbf{W}}^{2\nu+1} y\, dy.$$

Суммирование по λ можно выполнить с помощью (5.7.10):

$$S(\omega)=\frac{2}{\pi}\sum_{\nu=0}^{\infty}\left(\frac{-1}{\omega^2}\right)^{\nu+1}\iint y'\Phi_0(y')\,\delta(y-y')\,\tilde{\mathbf{W}}^{2\nu+1}y\,\mathrm{d}y=$$

$$=\frac{2}{\pi}\sum_{\nu=0}^{\infty}\left(\frac{-1}{\omega^2}\right)^{\nu+1}\langle y\mathbf{W}^{2\nu+1}y\rangle^{\mathrm{e}}. \qquad (5.7.18)$$

Это выражение является асимптотическим разложением. Отметим, что коэффициенты разложения можно находить, не решая основное кинетическое уравнение, а просто применяя оператор $\tilde{\mathbf{W}}$ конечное число раз.

Упражнение. Альтернативным определением матрицы $\mathbf{W}$ является тождество

$$\int \Phi(y)\,\mathbf{W}\psi(y)\,\mathrm{d}y=\int \psi(y)\,\tilde{\mathbf{W}}\Phi(y)\,\mathrm{d}y$$

для всех Φ, ψ. Соотношение детального равновесия выражается с помощью

$$\mathbf{W}p^{\mathrm{e}}(y)\,\psi(y)=p^{\mathrm{e}}(y)\,\tilde{\mathbf{W}}(y)\,\psi(y)$$

при всех ψ.

Упражнение. Покажите, что коэффициенты в разложении (5.7.18) можно также записать, использовав $y-\langle y\rangle$ вместо y.

Упражнение. Выведите тождество

$$S(\omega)=-\frac{2}{\pi}\,\mathrm{Re}\left\langle y\,\frac{1}{\mathbf{W}-i\omega}\,y\right\rangle^{\mathrm{e}},$$

где $(\tilde{\mathbf{W}}-i\omega)^{-1}$ — резольвента оператора, связанная с $\mathbf{W}$.

Упражнение. Пусть заряд конденсатора Q описывается основным кинетическим уравнением. Спектр флуктуаций в равновесии удовлетворяет соотношению

$$\lim_{\omega\to\infty} S_I(\omega)=-\frac{2}{\pi}\langle Q\tilde{\mathbf{W}}Q\rangle^{\mathrm{e}}.$$

Упражнение. Пусть Y — стационарный марковский процесс, который описывается основным кинетическим уравнением с оператором $\mathbf{W}$. Пусть $P_2(y_1, t_1; y_2, t_2)$ — его двухвременное распределение, $G_2(k_1, t_1; k_2, t_2)$ — его характеристическая функция. Выведите соотношение

$$G_2(k_1, t_1; k_2, t_2)=\langle \mathrm{e}^{ik_2y}\mathrm{e}^{(t_2-t_1)\tilde{\mathbf{W}}}\mathrm{e}^{ik_1y}\rangle^{\mathrm{e}}, \qquad t_2<t_1.$$

Результат не изменится, если k_1 и k_2 поменять местами. Что это означает физически?

Упражнение. Выведите (5.7.18), не используя разложения по собственным функциям. Указание: Примените последовательное интегрирование по частям к (3.3.4) и используйте (4.3.7).

5.8. МАКРОСКОПИЧЕСКОЕ УРАВНЕНИЕ

Пусть Y — физическая величина марковского типа, имеющая заданное начальное значение y_0. В качестве примеров можно представить себе ток в электрической цепи или набор чисел, представляющих количества различных молекул, участвующих в химической реакции. Основное кинетическое уравнение определяет их распреде-

ления вероятности при всех $t > 0$. Однако в обычной макроскопической физике пренебрегают флуктуациями и рассматривают Y как нестохастическую однозначную величину $\mathbf{y}$. Эволюция $\mathbf{y}(t)$ описывается детерминистическим дифференциальным уравнением для $\mathbf{y}(t)$, которое называют *феноменологическим макроскопическим уравнением*. Примерами могут служить закон Ома, уравнения для скоростей химических реакций в химической кинетике и уравнения, описывающие рост популяций. Какова логическая связь между такими макроскопическими уравнениями и основным кинетическим уравнением? Поскольку основное кинетическое уравнение определяет полное распределение вероятности, то должна быть возможность вывести из него макроскопическое уравнение как приближение, в котором флуктуациями можно пренебречь. В настоящем параграфе мы собираемся дать этот вывод качественным способом. Систематическое рассмотрение дается в § 9.3.

Для определенности рассмотрим замкнутую изолированную физическую систему. Если при $t=0$ величина Y принимает точное значение y_0, то плотность вероятности $P(y, t)$ в начальный момент времени имеет вид $\delta(y-y_0)$. При увеличении t она стремится к $P^e(y)$. Если y_0 макроскопически отличается от значения Y, это означает, что y_0 выходит далеко за пределы ширины распределения $P^e(y)$, так как макроскопически наблюдаемые значения велики по сравнению с равновесными флуктуациями. Мы также знаем из опыта, что флуктуации остаются малыми в течение всего процесса. Это означает, что для каждого t величина $P(y, t)$ является функцией, зависящей от y, имеющей форму острого пика. Положение этого пика является хорошо определенной величиной, имеющей неопределенность порядка ширины пика, которая должна быть отождествлена с макроскопическим значением $\mathbf{y}(t)$. Для определенности обычно пользуются более точным определением:

$$\mathbf{y}(t) = \langle Y \rangle_t = \int yP(y, t)\,\mathrm{d}y. \tag{5.8.1}$$

Однако следует понимать, что это не вызвано логической необходимостью: любое значение внутри пика можно было бы использовать в качестве макроскопического значения $y(t)$ *.

С увеличением t пик целиком сдвигается вдоль оси y из своего начального положения $\mathbf{y}(0) = y_0$ к своему конечному положению $\mathbf{y}(\infty) = \langle Y \rangle^e$. (Ширина только возрастает от начального нулевого значения до своего конечного значения, равного ширине P^e.) Это движение определяет эволюцию $\mathbf{y}(t)$ и, следовательно, макроскопи-

* Отождествление макроскопического значения со средним иногда обосновывается тем, что для получения результата надо много раз повторить измерения, а затем усреднить результаты этих наблюдений. Однако измерение силы тока или давления и т. д. обычно недостаточно точно для наблюдения флуктуаций и усреднение просто служит для уменьшения экспериментальных погрешностей.

ческое уравнение. Имея в виду эту картину, мы готовы вывести макроскопическое уравнение.

Прежде всего мы знаем точное тождество

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle Y\rangle_t=\int y\frac{\partial P(y,\ t)}{\partial t}\,\mathrm{d}y=$$
$$=\iint y\{W(y\,|\,y')P(y',\ t)-W(y'\,|\,y)P(y,\ t)\}\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}y'=$$
$$=\iint(y'-y)W(y'\,|\,y)P(y,\ t)\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}y'.$$

Определим моменты перехода* $a_\nu(y)$ соотношением

$$a_\nu(y)=\int(y'-y)^\nu W(y'\,|\,y)\,\mathrm{d}y'\quad(\nu=0,\ 1,\ 2,\ \ldots).\tag{5.8.2}$$

Тогда имеем точное следствие основного кинетического уравнения:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle Y\rangle_t=\int a_1(y)P(y,\ t)\,\mathrm{d}y=\langle a_1(y)\rangle_t.\tag{5.8.3}$$

Теперь если $a_1(y)$ окажется *линейной* функцией y, это уравнение будет иметь вид, совпадающий с

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle Y\rangle_t=a_1(\langle Y\rangle_t).\tag{5.8.4}$$

Следовательно, в этом случае мы находим точное макроскопическое уравнение, описывающее эволюцию величины $\mathrm{y}(t)$, определенной соотношением (5.8.1). Однако если $a_1(y)$ не является линейной функцией y, то уже нельзя больше утверждать, что (5.8.4) совпадает с (5.8.3). Но, раскладывая $a_1(y)$ вблизи $\langle Y\rangle$, получаем

$$\langle a_1(Y)\rangle=a_1(\langle Y\rangle)+{}^1/_2\langle(Y-\langle Y\rangle)^2\rangle a_1''(\langle Y\rangle)+\ldots.\tag{5.8.5}$$

Это соотношение уже не является самосогласованным уравнением, содержащим только величину $\langle Y\rangle$, так как в него входят также высшие моменты. Поэтому эволюция во времени величины $\langle Y\rangle$ уже не определяется самим средним $\langle Y\rangle$, но подвержена действию флуктуаций относительно этого среднего. Макроскопическое приближение состоит в пренебрежении этими флуктуациями и учете только первого члена в разложении (5.8.5). В этом приближении уравнение (5.8.4) справедливо, даже если функция $a_1(y)$ нелинейна. Тогда получаем макроскопическое уравнение

$$\dot{\mathrm{y}}=a_1(\mathrm{y}).\tag{5.8.6}$$

Примечание. Из нелинейного интегродифференциального уравнения для $P(y,\ t)$ мы вывели нелинейное уравнение для $\mathrm{y}(t)$; значит, существенно

---

* Сначала они были названы Мойалом производными моментами, J. E. Moyal, J. Roy. Statist. Soc. (B) 11, 150 (1949),— но это название не прижилось, так что я попробовал дать другое. Отметим, что a_0 в (5.1.3) является просто низшим моментом перехода.

линейное основное кинетическое уравнение может соответствовать физическому процессу, который в лабораторных условиях должен рассматриваться как нелинейное явление, поскольку его макроскопическое уравнение нелинейно. Этот факт не покажется парадоксальным, если иметь в виду, что разница между линейным и нелинейным случаями хорошо определена только для уравнений. Было бы ошибочно проводить различие для физических явлений, пока не выработано их математическое описание. Ньютоновские уравнения движения планет нелинейны, но уравнение Шредингера для Солнечной системы линейно.

Связь между линейным и нелинейным уравнениями не является сущностью аппроксимации. Линейное уравнение Лиувилля является грубым эквивалентом нелинейных уравнений движения молекул. В общем случае любое линейное уравнение в частных производных математически эквивалентно уравнениям для его характеристик, которые могут быть нелинейными*. Справедливо также, что вблизи равновесного значения $\mathbf{y}^e$ можно аппроксимировать нелинейное макроскопическое уравнение (5.8.6) линейным уравнением

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}[\mathbf{y}(t)-\mathbf{y}^e]=a_1'(\mathbf{y}^e)[\mathbf{y}(t)-\mathbf{y}^e]. \tag{5.8.7}$$

Однако эта линеаризация является добавочным приближением, не связанным с линейностью основного кинетического уравнения. Можно добавить, что условие приближения к равновесию требует, чтобы величина $a_1'(\mathbf{y}^e)$ была отрицательной, что приводит к тому, что различные коэффициенты переноса, такие, как омическое сопротивление цепи, оказываются положительными.

Можно также вывести приближенное уравнение для ширины распределения. Начнем с точного тождества

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle Y^2\rangle_t=\iint(y'^2-y^2)\,W(y'\mid y)\,P(y)\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}y'=$$
$$=\iint\{(y'-y)^2+2y(y'-y)\}\,W(y'\mid y)\,P(y)\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}y'=$$
$$=\langle a_2(Y)\rangle_t+2\langle Ya_1(Y)\rangle_t.$$

Тогда дисперсия $\sigma^2(t)=\langle Y^2\rangle_t-\langle Y\rangle_t^2$ удовлетворяет соотношению

$$\frac{\mathrm{d}\sigma^2}{\mathrm{d}t}=\langle a_2(Y)\rangle_t+2\langle(Y-\langle Y\rangle_t)a_1(Y)\rangle_t. \tag{5.8.8}$$

Когда a_1 и a_2 — линейные функции y, это уравнение совпадает с

$$\frac{\mathrm{d}\sigma^2}{\mathrm{d}t}=a_2(\mathbf{y}(t))+2\sigma^2a_1'(\mathbf{y}(t)), \tag{5.8.9}$$

где штрихом обозначено дифференцирование. Когда a_1 и a_2 нелинейны, последнее уравнение можно рассматривать как приближенное: оно справедливо, когда флуктуации малы. Понятно, что, для того чтобы макроскопическое приближение было истинным, необходимо, чтобы флуктуации были малы. Обосновывая, что это в самом деле так, мы до сих пор обращались лишь к собственному опыту, теперь же, используя (5.8.9), это можно связать со свойствами основного кинетического уравнения. В (5.8.9) величина $a_2>0$, по определению, $a_1'(\mathbf{y})<0$ при $\mathbf{y}=\mathbf{y}^e$ в некоторой окрестности. (Случай $a_1'(\mathbf{y}^e)=0$

* I. N. Sneddon, Elements of Partial Differential Equations (McGraw-Hill, New York, 1957).

рассмотрен в гл. 10.) Отсюда следует, что σ^2 стремится увеличиться со скоростью a_2, но эта тенденция сдерживается вторым членом. Тогда σ^2 стремится стать равной

$$a_2/(2\,|\,a_1'\,|). \tag{5.8.10}$$

Условие, при котором уравнение (5.8.6) является приближенно справедливым, состоит в малости второго члена в (5.8.5):

$$\left|\frac{a_2 a_1''}{4a_1'}\right| \ll |\,a_1\,|. \tag{5.8.11}$$

В нем утверждается, что вторые производные, ответственные за нарушение линейности, должны быть малы.

Получив уравнение (5.8.9) для дисперсии, включим в рассмотрение второй член в (5.8.5) и получим поправку к макроскопическому уравнению

$$\dot{\mathbf{y}} = a_1(\mathbf{y}) + {}^1/_2\sigma^2 a_1''(\mathbf{y}). \tag{5.8.12}$$

В гл. 9 будет показано, что это уравнение совместно с (5.8.9) в самом деле дает следующее приближение после макроскопического уравнения (5.8.6) *.

Пояснение. Макроскопическое уравнение (5.8.6) является дифференциальным уравнением для $\mathbf{y}$, которое однозначно определяет $\mathbf{y}(t)$, когда задано начальное значение $\mathbf{y}(0)$. В следующем приближении (5.8.12) эволюция $\mathbf{y}$ зависит также от дисперсии флуктуаций. Причиной этого является то, что y флуктуирует относительно $\mathbf{y}$ и вследствие этого чувствует значение a_1 не только в $\mathbf{y}$, но также и в его окрестности. Этот эффект пропорционален кривизне a_1; наклон a_1 несуществен, поскольку флуктуации в этом приближении симметричны. Однако уровень флуктуаций определяется вторым уравнением (5.8.9), которое все же содержит наклон a_1.

Тот факт, что мы теперь имеем два уравнения, а именно (5.8.12) и (5.8.9), означает, что $\mathbf{y}(t)$ уже не определяется только $\mathbf{y}(0)$, а зависит также от начального значения σ^2. Казалось бы, можно надеяться, что после короткого начального переходного времени σ^2 подстроится, быстро достигнув асимптотического значения, зависящего только от мгновенного значения $\mathbf{y}(t)$, так что после короткого перехода справедливым окажется «перенормированное» уравнение для $\mathbf{y}$. Однако это не так: временной масштаб, на котором σ^2 достигает значения (5.8.10), определяется коэффициентом a_1' в (5.8.9) и поэтому сравним с масштабом изменения самого $\mathbf{y}$ (см. (5.8.7)). Разделения масштабов не происходит, и потому нельзя выделить одно уравнение, содержащее только $\mathbf{y}$. Эта ситуация аналогична той, что встречается в кинетической теории разреженной плазмы **. В низшем порядке по плотности *** одночастичная функция распределения электронов удовлетворяет уравнению Власова. Приближение следующего порядка дается двумя связанными уравнениями для одночастичной и двухчастичной функций распределения. С другой стороны, в кинетиче-

---

* N. G. van Kampen in: Fundamental Problems in Statistical Mechanics (proc. NUFFIC Summer Course; E. G. D. Cohen ed., North-Holland, Amsterdam, 1962); R. Kubo, K. Matsuo, and K. Kitahara, J. Statist. Phys. 9, 51 (1973).

** N. Rostoker and M. N. Rosenbluth, Phys. Fluids 3, 1 (1960).

*** Или, вернее, по плазменному параметру $4\eta e^2/(kTd)$, где e — заряд электрона, а d — среднее расстояние между электронами.

ской теории газов Боголюбов * предложил приближенную схему, в которой все высшие порядки дают поправки к одночастичной функции распределения, но его схема неудачна **.

Упражнение. Найдите моменты перехода и макроскопическое уравнение для *процесса распада и процесса Пуассона.*

Упражнение. Определите моменты перехода в случаях, когда Y имеет большее число компонент. Покажите, что матрица $a_1'(\mathbf{y}^e)$ должна быть отрицательно определенной или по крайней мере полуопределенной.

Упражнение. Докажите следующую теорему ***. *Макроскопическое уравнение линейно тогда и только тогда, когда функция* $Q(y) = y - \langle y \rangle^e$ *является левым собственным вектором матрицы* $\mathbf{W}$.

Упражнение. По аналогии с (5.8.11) покажите, что, для того чтобы (5.8.12) было хорошим приближением, нужно потребовать выполнения условий

$$|a_2''| \ll |a_1'| \quad \text{и} \quad (a_1'')^2 \ll |a_1'|^3/a_2. \tag{5.8.13}$$

Упражнение. Выведите исправленное макроскопическое уравнение

$$\dot{\mathbf{y}} = a_1\left(1 - \frac{1}{2a_1'}\right) - \frac{a_2 a_1''}{4a_1'} - \frac{a_1'''}{2a_1' a_1''}\dot{\mathbf{y}}^2 + \frac{\ddot{\mathbf{y}}}{2a_1'}. \tag{5.8.14}$$

Упражнение. Нет необходимости решать (5.8.12) и (5.8.9) одновременно. Поскольку σ^2 появляется в (5.8.12) как поправка, достаточно вычислить σ^2 из (5.8.9), используя для $\mathbf{y}$ неисправленное макроскопическое значение, которое дает уравнение (5.8.6). Тогда уравнения (5.8.12) и (5.8.9) можно заменить следующей системой (Kubo et al., loc. cit.). Положите $\langle y \rangle = \mathbf{y} + u$ и решите

$$\dot{\mathbf{y}} = a_1(y); \tag{5.8.15а}$$

$$\partial_t \sigma^2 = a_2(\mathbf{y}) + 2a_1'(\mathbf{y})\,\sigma^2; \tag{5.8.15б}$$

$$\dot{u} = a_1'(\mathbf{y})\,u + {}^1/_2 a_1''(\mathbf{y})\,\sigma^2. \tag{5.8.15в}$$

Сравните с (9.4.8).

Упражнение. Покажите, что эту систему уравнений можно решить, т. е. свести к некоторому количеству интегрирований.

5.9. СОПРЯЖЕННОЕ УРАВНЕНИЕ

В дополнение к основному кинетическому уравнению иногда имеет смысл определить

$$\dot{Q} = \tilde{\mathbf{W}} Q, \tag{5.9.1}$$

где $\mathbf{W}$ — снова транспонированная или сопряженная к $\mathbf{W}$ матрица. Для дискретного множества возможных значений это можно записать в явном виде

$$\dot{q}_n = \sum_{n'} (q_{n'} - q_n)\, W_{n'n}. \tag{5.9.2}$$

---

* Боголюбов Н. Н. Проблемы динамической теории в статистической физике. М.—Л., 1946.

** E. G. D. Cohen in: Fundamental Problems in Statistical Mechanics II (Proc. Second NUFFIC Summer Course; E. G. D. Cohen ed., North-Holland, Amsterdam, 1968).

*** N. G. van Kampen in: Stochastic Processes in Chemical Physics (K. E. Shuler ed., Interscience, New York, 1969).

Формальное решение (5.9.1) имеет вид

$$Q(t) = e^{t\tilde{\mathbf{W}}} Q(0). \tag{5.9.3}$$

По-другому можно написать

$$\tilde{Q}(t) = \tilde{Q}(0)\, e^{t\mathbf{W}}, \tag{5.9.4}$$

где вектор Q теперь записан в транспонированном виде, т. е. как матрица, имеющая одну строку. Понятно, что решение этих уравнений эквивалентно решению самого основного кинетического уравнения. Важность сопряженного уравнения вытекает из следующих трех соображений.

1. Предположим, существуют множество состояний n и система, которая находится в одном из n состояний с вероятностью $p_n(t)$. Эволюция этой системы описывается основным кинетическим уравнением. Пусть Q — некоторое число или свойство, связанное с системой так, что в каждом состоянии n оно имеет значение q_n. Тогда среднее от Q в момент времени t есть $\sum_n q_n p_n(t)$. Это можно выразить через начальное распределение

$$\langle Q \rangle_t = \sum_{nn'} q_n (e^{t\mathbf{W}})_{nn'} p_{n'}(0). \tag{5.9.5}$$

В соответствии с (5.9.3) это уравнение можно интерпретировать следующим образом. Определим зависящий от времени вектор $q_n(t)$, tпоставив условие, что при $t=0$ его компоненты равны q_n, а при >0 он эволюционирует в соответствии с уравнением (5.9.1). Тогда среднее от Q в момент времени t равно среднему от $q_n(t)$ по начальному распределению:

$$\langle Q \rangle_t = \sum_n q_n p_n(t) = \sum_n q_n(t)\, p_n(0). \tag{5.9.6}$$

Таким образом, имеется формальный перенос временнóй зависимости с распределения вероятности на наблюдаемую величину, по аналогии с квантово-механическим преобразованием от представления Шредингера к представлению Гейзенберга. Соответственно можно определить зависящий от времени вектор $Q(t)$, положив

$$Q(t) = e^{t\mathbf{W}} Q, \tag{5.9.7}$$

так что $\langle Q \rangle_t = \langle Q(t) \rangle_0$.

2. Пусть $p_{n,m}(t)$ — решение основного кинетического уравнения с $p_{n,m}(0) = \delta_{n,m}$. Тогда по индексу m оно удовлетворяет сопряженному или «обратному» уравнению

$$\dot{p}_{n,m}(t) = \sum_{m'} \tilde{\mathbf{W}}_{mm'} p_{n,m'}(t) = \sum_{m'} p_{n,m'}(t)\, \mathbf{W}_{m'm}. \tag{5.9.8}$$

Доказательство очевидным образом следует из факта, что формальное решение уравнения (5.9.8) имеет вид

$$p_{n,m}(t) = (e^{t\mathbf{W}})_{n,m},$$

тождественный решению (5.9.4) основного кинетического уравнения.

3. Следующий факт легко проверить, но он достаточно важен, чтобы сформулировать его в виде теоремы. *Если* $\mathbf{W}$ *удовлетворяет соотношению детального равновесия, то каждое решение* $p_n(t)$ *основного кинетического уравнения связано с решением* $q_n(t)$ *сопряженного уравнения соотношением*

$$\frac{p_n(t)}{p_n^e} = q_n(t). \tag{5.9.9}$$

Сформулируем это по-другому: каждый правый собственный вектор φ_n связан с левым собственным вектором Ψ_n (с тем же самым собственным значением) следующим образом:

$$\frac{\varphi_n}{p_n^e} = \Psi_n. \tag{5.9.10}$$

Это полезно помнить при решении основного кинетического уравнения, потому что левые собственные векторы зачастую оказываются более простыми функциями n, чем правые. Действительно, для $\lambda = 0$ имеем $\varphi_n = p_n^e$, в то время как $\psi_n = 1$.

Однако сопряженное уравнение чаще всего используют в задачах с поглощающими границами и задачах, связанных с проблемой первого прохождения (см. § 6.10).

Упражнение. Запишите формулы этого параграфа для непрерывных многомерных переменных.

Упражнение. Убедитесь, что характеристическая функция $G(k, t)$ распределения $P_1(y, t)$ марковского процесса является величиной типа (5.9.7).

Упражнение. Выведите (5.9.8) способом, аналогичным тому, которым выводилось основное кинетическое уравнение в § 5.1. Начните вывод с уравнения Чепмена—Колмогорова (4.2.1).

Упражнение. Для марковских процессов, которые не являются стационарными или однородными, имеются прямое, или основное, кинетическое уравнение и обращенное уравнение

$$\frac{\partial P_{1|1}(y, t \mid y_0, t_0)}{\partial t} = \int \mathbf{W}_t(y \mid y') P_{1|1}(y', t \mid y_0, t_0)\, dy'; \tag{5.9.11а}$$

$$-\frac{\partial P_{1|1}(y, t \mid y_0, t_0)}{\partial t_0} = \int P_{1|1}(y, t \mid y', t_0) \mathbf{W}_{t_0}(y' \mid y_0)\, dy', \tag{5.9.11б}$$

где $\mathbf{W}_t(y \mid y')$ — зависящая от времени вероятность перехода.

Упражнение. Из (5.9.2) следует, что наибольшее из q_n убывает, а наименьшее возрастает. Покажите, что (для конечного числа состояний) $q_n(t)$ стремится к постоянному значению, которое не зависит от n. Потом с помощью (5.9.6) распространите этот результат на $p_n(t)$ и таким способом заново выведите результаты § 5.3.

ГЛАВА 6
ОДНОШАГОВЫЕ ПРОЦЕССЫ

Одношаговые процессы (или процессы рождения — гибели) являются специальным классом марковских процессов, они широко распространены и могут быть детально проанализированы.

6.1. ОПРЕДЕЛЕНИЯ; ПРОЦЕСС ПУАССОНА

Многие стохастические процессы относятся к специальному типу, называемому *процессами рождения — гибели* или процессами *генерации — рекомбинации*. Мы будем применять более свободный термин *одношаговые процессы*. Процессы такого типа определены как марковские процессы с непрерывным временем, множество возможных значений которых состоит из целых чисел n, а матрица перехода $\mathbf{W}$ допускает только переходы между соседними участками:

$$\mathbf{W}_{nn'} = r_{n'}\delta_{n,\,n'-1} + g_{n'}\delta_{n,\,n'+1} \quad (n \neq n'). \tag{6.1.1}$$

Диагональные элементы матрицы перехода имеют вид $\mathbf{W}_{nn} = -(r_n + g_n)$, а основное кинетическое уравнение записывают в виде

$$\dot{p}_n = r_{n+1}p_{n+1} + g_{n-1}p_{n-1} - (r_n + g_n)\,p_n. \tag{6.1.2}$$

Коэффициент r_n представляет собой вероятность того, что за единичное время произойдет переход из состояния n в $n-1$, в то

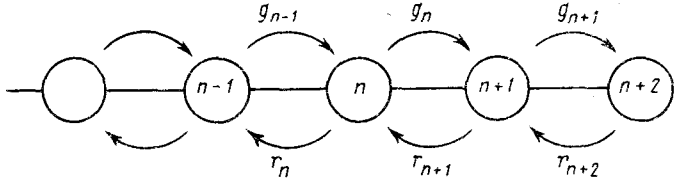

Рис. 11. Одношаговый процесс и вероятности перехода

время как g_n — вероятность перехода за то же время в состояние $n+1$ (рис. 11) *.

Одношаговые процессы имеют место тогда, когда стохастический процесс связан с поглощением и испусканием фотонов или частиц, с переходами в возбужденное состояние и обратно в атомах или ядрах или с переходами электронов в полупроводниках, с рождением или гибелью индивидуумов, с приходом и уходом покупателей. Название не предполагает, что переходы из состояния n на

* Обозначения коэффициентов r_n и g_n происходят от слов *рекомбинация* и *генерация* (recombination и generation) носителей заряда в полупроводниках; в задачах, связанных с процессами рождения и гибели, их часто обозначают μ_n и λ_n.

два и большее число шагов за время Δt запрещены, но при этом подразумевается, что вероятность таких переходов есть $O(\Delta t^2)$ или по крайней мере $O(\Delta t)$. В тех случаях, когда происходит рождение пар или множественное рождение или когда имеет место диффузия нейтронов в делящихся веществах, а в каждом акте деления выделяется несколько дополнительных нейтронов, это требование не выполняется.

Одношаговые процессы можно подразделить на следующие три подкласса по виду множества возможных значений:

а) множество возможных значений состоит из всех целых чисел, $-\infty < n < \infty$;

б) множество возможных значений является полубесконечным, скажем, $n = 0, 1, 2, \ldots$;

в) множество возможных значений конечно, $n = 0, 1, 2, \ldots, N$.

Если множество возможных значений состоит из нескольких интервалов, разделенных промежутками, то переходы через промежутки невозможны, так что процесс распадается на несколько независимых процессов, относящихся к классам б) или в).

Если точка $n = 0$ является границей, то уравнение (6.1.2) теряет смысл для $n = 0$ и должно быть заменено на

$$\dot{p}_0 = r_1 p_1 - g_0 p_0. \tag{6.1.3}$$

Иногда удобнее воспользоваться другой возможностью и объявить уравнение (6.1.2) справедливым для $n = 0$ с определением

$$r_0 = g_{-1} = 0. \tag{6.1.4}$$

Аналогично, верхняя граница N нуждается в специальном уравнении

$$p_N = g_{N-1} p_{N-1} - r_N p_N \tag{6.1.5}$$

либо в дополнительном определении

$$r_{N+1} = g_N = 0. \tag{6.1.6}$$

Другое подразделение одношаговых процессов основывается на коэффициентах r_n, g_n.

1. Коэффициенты постоянны, не зависят от n всюду, кроме, может быть, границ. Процессы такого типа мы будем называть *случайными блужданиями* (хотя этот термин часто используют для более общего случая). Такие процессы рассмотрены в следующем параграфе.

2. Коэффициенты являются линейными функциями n, но одновременно оба не равны константе. Процессы такого типа будем называть *линейными одношаговыми*, их общее решение дано в § 6.6. Отметим, что здесь должна быть по крайней мере одна граница, поскольку в противном случае могут появиться отрицательные значения вероятностей перехода.

3. Все другие случаи будем называть *нелинейными*. Они составляют предмет гл. 9. Однако нужно понимать, что основное кинетическое уравнение по определению всегда линейно относительно неизвестной p_n, а термин «нелинейный» в данном случае относится к коэффициентам. Важным примером одношагового процесса с постоянными вероятностями перехода является *процесс Пуассона*, определяемый соотношениями

$$r_n = 0, \quad g_n = q, \quad p_n(0) = \delta_{n,0}, \tag{6.1.7}$$

где q — постоянный параметр. Основное кинетическое уравнение имеет вид

$$\dot{p}_n = q(p_{n-1} - p_n). \tag{6.1.8}$$

Это случайное блуждание на множестве целых чисел $n = 0, 1, 2, \ldots$, с шагом только в правую сторону, но в случайные моменты времени. Связь с гл. 2 становится более ясной, если воспользоваться следующим альтернативным определением. Каждое случайное множество событий можно рассматривать в терминах стохастического процесса Y, если определить $Y(t)$ как число событий, происшедших между начальным временем $t = 0$ и временем t. Каждая выборочная функция состоит из единичных шагов и принимает только целочисленные значения $n = 0, 1, 2, \ldots$ (см. рис. 5). Вообще говоря, этот процесс Y — немарковский; но если события независимы (в том смысле, как и в § 2.2), то $q(t)\,\mathrm{d}t$ является вероятностью сделать шаг в течение времени между моментами t и $t + \mathrm{d}t$ независимо от того, что происходило раньше. Если q к тому же еще не зависит от времени, то Y является процессом Пуассона.

Упражнение. Найдите r_n и g_n для процесса распада из § 4.6 и определите, к какому подклассу принадлежит этот процесс.

Упражнение. Покажите, что процесс Пуассона

$$p_n(t) = \frac{(qt)^n}{n!} e^{-qt}$$

согласуется с (2.2.6). Отметим, что процесс Пуассона нестационарен, даже если случайное множество событий стационарно в соответствии с определением «стационарности» для случайных событий. Причина состоит в том, что $Y(t)$ представляет собой полное число событий, *считая с начального момента времени*.

Упражнение. Для независимых нестационарных событий в соответствии с определением (2.2.1) уравнение (6.1.8) остается справедливым, несмотря на то что q теперь зависит от времени (*зависящий от времени «дробовой шум»*). Снова найдите $p_n(t)$.

6.2. СЛУЧАЙНОЕ БЛУЖДАНИЕ С НЕПРЕРЫВНЫМ ВРЕМЕНЕМ

Рассмотрим неограниченное *симметричное* случайное блуждание: коэффициенты r_n и g_n постоянны и равны друг другу. Эту константу можно включить в определение единиц времени, так что

кинетическое уравнение, как и в (5.2.11), имеет вид

$$\dot{p} = p_{n+1} + p_{n-1} - 2p_n \quad (-\infty < n < \infty). \tag{6.2.1}$$

Это случайное блуждание отличается от случаев, рассмотренных в § 1.4 и 4.5, тем, что время изменяется непрерывно. Теперь вероятности перехода берут за единичное время. Этот простой пример зачастую оказывается достаточным для иллюстрации более сложных процессов, в частности он содержит существенные черты физического процесса диффузии *.

В качестве начального распределения возьмем

$$p_n(0) = \delta_{n,0}. \tag{6.2.2}$$

Этого достаточно, потому что из-за инвариантности относительно сдвигов по n эта формула охватывает также случай $p_n(0) = \delta_{n,m}$ для каждого m, а с помощью подходящего выбора суперпозиции этих состояний можно воспроизвести любое начальное распределение.

Существует много способов решения дифференциально-разностного уравнения (6.2.1); мы выберем метод, который можно использовать и в более общих случаях. Хорошим инструментом является производящая функция вероятности $F(z, t)$, определенная в (6.1.2):

$$F(z, t) = \sum_n z^n p_n(t), \tag{6.2.3}$$

где z — вспомогательная переменная. Поскольку $\sum_n p_n(t) = 1$ и $p_n(t) \geqslant 0$, эта функция наверняка существует при $|z| = 1$. Она обладает свойствами:

$$\begin{gathered} F(1, t) = 1, \\ F'(1, t) = \langle n(t) \rangle, \\ F''(1, t) = \langle n(t)^2 \rangle - \langle n(t) \rangle. \end{gathered} \tag{6.2.4}$$

Штрих обозначает дифференцирование по z. Часто удобнее использовать другую форму последних двух уравнений:

$$\begin{gathered} \left[\frac{\partial \log F}{\partial z} \right]_{z=1} = \langle n(t) \rangle, \\ \left[\frac{\partial^2 \log F}{\partial z^2} \right]_{z=1} = \langle n(t)^2 \rangle - \langle n(t) \rangle^2 - \langle n(t) \rangle. \end{gathered} \tag{6.2.5}$$

Упражнение. Установите соотношение между производящей функцией вероятности и характеристической функцией. Выведите тождества (6.2.4) и (6.2.5) из известных свойств последней.

---

* По поводу приложения к химическим задачам см.: W. J. Shugard and H. Reiss, J. Chem. Phys., 65, 2827 (1976).

Упражнение. Выведите для всех n

$$p_n(t) = \frac{1}{2\pi i} \oint z^{-n-1} F(z, t)\, dz. \tag{6.2.6}$$

Интеграл берется по единичной окружности.

Упражнение. Для случайного блуждания с дискретным временем рассматривались шаги в фиксированные моменты времени. Предположим теперь, что моменты времени, в которые совершаются шаги, случайно распределены по Пуассону. Покажите, что эта ситуация описывается уравнением (6.2.1) *.

Уравнение (6.2.1) теперь можно записать как уравнение для $F(z, t)$. Умножим (6.2.1) на z^n и просуммируем по всем n:

$$\frac{\partial F(z, t)}{\partial t} = \left(z + \frac{1}{z} - 2\right) F(z, t). \tag{6.2.7}$$

Это дифференциальное уравнение можно проинтегрировать. Общее решение имеет вид

$$F(z, t) = \Omega(z) \exp\left[t\left(z + \frac{1}{z} - 2\right)\right]. \tag{6.2.8}$$

Решение содержит произвольную функцию $\Omega(z)$, которая должна быть выбрана, чтобы удовлетворить начальному условию (6.2.2). Это условие в терминах F имеет вид

$$F(z, 0) = 1.$$

Подстановка в (6.2.8) дает

$$1 = F(z, 0) = \Omega(z).$$

Тогда окончательное решение для производящей функции имеет вид

$$F(z, t) = \exp\left[t\left(z + \frac{1}{z} - 2\right)\right]. \tag{6.2.9}$$

Раскладывая это выражение по степеням z, т. е.

$$F(z, t) = e^{-2t} \sum_{k, l=0}^{\infty} \frac{t^{k+l}}{k!\, l!} z^{k-l},$$

можно найти

$$p_n(t) = e^{-2t} \sum_{l} \frac{t^{2l+n}}{(l+n)!\, l!}. \tag{6.2.10}$$

Суммирование здесь производится по всем целым значениям l, для которых и l, и $n+l$ неотрицательны.

Упражнение. Часто вместо (6.2.10) удобнее использовать (6.2.9). Выведите с помощью (6.2.5) соотношения

$$\langle n(t)\rangle = 0, \quad \langle n(t)^2\rangle = 2t.$$

---

* D. Bedeaux, K. Lakatos-Lindenberg, and K. E. Shuler, J. Mathem. Phys. 12, 2116 (1971); Feller II, p. 177; Cox and Miller, p. 239.

Тогда средний квадрат расстояния, проходимого за время от 0 до t, возрастает пропорционально t, как и в случае случайного блуждания с дискретным временем. Как это можно было бы показать, не решая основного кинетического уравнения явно?

Упражнение. Покажите, что (6.2.10) можно также представить в виде

$$p_n(t) = e^{-2t} I_{|n|}(2t), \tag{6.2.11}$$

где I_n — функция Бесселя n-го порядка мнимого аргумента. Убедитесь непосредственно, что (6.2.11) удовлетворяет (6.2.1). Запишите также таким способом решение уравнения (6.2.1) с произвольным начальным значением $p_n(0)$.

Упражнение. Из известных свойств I_n следует асимптотическое выражение для больших t (более точно: $t \to \infty$, $n \to \infty$ при фиксированном значении n^2/t):

$$p_n(t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi t}} \exp\left[-n^2/(4t)\right]. \tag{6.2.12}$$

Выведите этот результат с помощью (6.2.6) и метода перевала.

Упражнение. Повторите вычисление, проведенное в тексте, используя $G(k, t)$ вместо $F(z, t)$.

Упражнение. *Асимметричное* случайное блуждание на бесконечной решетке описывается основным кинетическим уравнением

$$\dot{p}_n = \alpha p_{n+1} + \beta p_{n-1} - (\alpha + \beta)\, p_n \qquad (\alpha \neq \beta). \tag{6.2.13}$$

Оно описывает диффузию в присутствии внешней силы. Решите это уравнение с помощью преобразования

$$p_n(t) = q_n(t)\,(\beta/\alpha)^{n/2} \exp\left[-(\alpha + \beta - 2\sqrt{\alpha\beta})\, t\right].$$

(Более прямой метод будет следовать из общего рассмотрения в § 6.6.) Найдите $\langle n \rangle_t$ и $\langle\langle n^2 \rangle\rangle_t$.

Упражнение. Пусть $p_n(t)$ — решение уравнения (6.2.1) с начальным значением

$$p_n(0) = \delta_{n,m} + \delta_{n,-m-1} \qquad (m \geq 0).$$

Из-за симметрии результирующий поток вероятности между -1 и 0 должен обратиться в нуль. Следовательно, $p_n(t)$ ограничена значениями $n \geq 0$ и является случайным блужданием на полубесконечной области с отражающей границей с уравнением на границе

$$\dot{p}_0 = p_1 - p_0.$$

Упражнение. Пусть Y_0 — винеровский процесс, $Y_1, Y_2, \ldots, Y_r$ — случайные блуждания с разными длинами шагов и вероятностями перехода. Покажите, что $Y_0 + Y_1 + Y_2 + \ldots + Y_r$ является процессом с независимыми приращениями (см. (4.4.7)), и найдите их вероятности перехода.

6.3. ОБЩИЕ СВОЙСТВА ОДНОШАГОВЫХ ПРОЦЕССОВ

Можно сильно сократить запись формул, если ввести *оператор шага* **E**, *который определим по его действию на произвольную функцию* $f(n)$:

$$\mathbf{E} f(n) = f(n+1), \quad \mathbf{E}^{-1} f(n) = f(n-1). \tag{6.3.1}$$

Если n меняется от $-\infty$ до ∞, то оператор **E** можно рассматривать как настоящий оператор в функциональном пространстве, но в случаях, когда имеются одна или две границы, **E** лучше считать простым обозначением для сокращения записи. Большинство

его свойств очевидны, но мы, в частности, отметим следующее:

$$\sum_{n=0}^{N-1} g(n)\,\mathbf{E}f(n) = \sum_{n=1}^{N} f(n)\,\mathbf{E}^{-1}g(n) \tag{6.3.2}$$

для любой пары дробных функций f, g. Разные пределы суммирования в двух членах этого выражения создают неудобство, однако, к счастью, на практике эта разница часто оказывается несущественной либо потому, что пределы бесконечны (и f, и (или) g достаточно быстро обращаются в нуль на бесконечности), либо потому, что недостающие члены можно добавить к сумме, поскольку они итак равны нулю. Например, член с $n=0$ можно прибавить к правой части, когда $f(0)=0$ или когда $g(-1)$ приписано нулевое значение.

С помощью этого символа основное кинетическое уравнение для одношаговых процессов можно записать в виде

$$\dot{p}_n = (\mathbf{E}-1)\,r_n p_n + (\mathbf{E}^{-1}-1)\,g_n p_n. \tag{6.3.3}$$

Это выражение остается справедливым в граничных точках, если потребовать выполнения условий (6.1.4) и (6.1.6). В качестве примера (6.3.2) вычислим

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle n\rangle &= \sum n\,(\mathbf{E}-1)\,r_n p_n + \sum n\,(\mathbf{E}^{-1}-1)\,g_n p_n = \\ &= \sum r_n p_n\,(\mathbf{E}^{-1}-1)\,n + \sum g_n p_n\,(\mathbf{E}-1)\,n = -\langle r_n\rangle + \langle g_n\rangle.\end{aligned} \tag{6.3.4}$$

Этот результат интуитивно ясен и не отличается от (5.8.3).

Примечание. Коэффициенты r_n и g_n не могут быть отрицательны, но могут быть равны нулю. Если для некоторого k оба коэффициента r_k и g_{k-1} обращаются в нуль, то это означает, что переходы между состояниями $k-1$ и k невозможны. Следовательно, процесс распадается на два отдельных процесса. Если для некоторого k коэффициенты $r_k>0$, $g_{k-1}=0$, то переходы из k в $k-1$ возможны, но обратные переходы запрещены. Можно ожидать, что состояния $n\geqslant k$ исчерпаются и что вся вероятность сосредоточится в состояниях $n<k$. Тогда множество состояний $n<k$ является «поглощающим» в смысле, определенном в § 5.2. Действительно, в этом случае $p_n^s=0$ для $n\geqslant k$. Случай $r_k=0$, $g_{k-1}>0$, естественно, аналогичен данному.

Упражнение. Примените эти рассуждения к основному кинетическому уравнению для радиоактивного распада и найдите таким способом поглощающее состояние.

Упражнение. Напишите правую часть уравнения (6.3.3) в виде **W**-матрицы, действующей на вектор $\{p_n\}$. Покажите, что два случая, выделенные в приведенном выше примечании, соответствуют разложимой и приводимой матрицам перехода.

Упражнение. Выведите

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle n^2\rangle = 2\langle n\,(g_n - r_n)\rangle + \langle g_n + r_n\rangle. \tag{6.3.5}$$

Упражнение. Найдите дифференциальное уравнение для производящей функции $F(z,\,t)$, предположив, что r_n и g_n — многочлены по n.

Упражнение. Уравнения (6.3.4) и (6.3.5) для случайного блуждания (симметричного или несимметричного) можно решить. Найдите решения и срав-

ните их с соответствующими решениями, полученными в предыдущем параграфе.

Упражнение. Найдите также решения уравнений (6.3.4) и (6.3.5) для общего случая линейного одношагового процесса. Почему их нельзя решить в нелинейном случае?

Теперь найдем общее выражение для стационарного решения одношагового процесса. Из уравнения (6.3.3) имеем

$$0 = (\mathbf{E}-1)\, r_n p_n^s + (\mathbf{E}^{-1}-1)\, g_n p_n^s = (\mathbf{E}-1)\,\{r_n p_n^s - \mathbf{E}^{-1} g_n p_n^s\}.$$

В этом уравнении утверждается, что $\{\ \}$ не зависит от n:

$$r_n p_n^s - \mathbf{E}^{-1} g_n p_n^s = -J. \tag{6.3.6}$$

Константу мы обозначили $-J$ потому, что она представляет результирующий поток вероятности из состояния n в состояние $n-1$.

Сначала рассмотрим случай (в), т. е. $n = 0, 1, 2, \ldots, N$. Подставляя в (6.3.6) или (6.1.4), находим, что $J = 0$. Следовательно, (6.3.6) утверждает, что

$$r_n p_n^s = g_{n-1} p_{n-1}^s. \tag{6.3.7}$$

Применяя это соотношение повторно, приходим к

$$p_n^s = \frac{g_{n-1} g_{n-2} \cdots g_1 g_0}{r_n r_{n-1} \cdots r_2 r_1}\, p_0^s. \tag{6.3.8}$$

Это определяет все p_n^s через p_0^s, которая потом фиксируется условием нормировки:

$$\frac{1}{p_0} = 1 + \sum_{n=1}^{N} \frac{g_0 g_1 \cdots g_{n-1}}{r_1 r_2 \cdots r_n}. \tag{6.3.9}$$

Тот же результат (6.3.8) применим также к полубесконечной области $n = 0, 1, 2, \ldots$. Для бесконечной в обе стороны области при $n \geqslant 0$ имеем (6.3.8), а для $n \leqslant 0$ из (6.3.7) получаем

$$p_n^s = \frac{r_{n+1} r_{n+2} \cdots r_{-1} r_0}{g_n g_{n+1} \cdots g_{-2} g_{-1}}\, p_0^s. \tag{6.3.10}$$

Однако в этом случае уже нельзя доказать, что $J = 0$. Необходимо исключить возможность постоянного потока из $-\infty$ в $+\infty$, как в асимметричном случайном блуждании. Такие решения могли бы описывать, например, диффузию в открытой системе, такую, как диффузия в среде между двумя резервуарами с различными плотностями. Стационарное решение уже не единственно и зависит от текущего значения J, которое зависит от дополнительной информации, характеризующей рассматриваемую физическую задачу.

Упражнение. Найдите явное выражение для стационарного распределения в случае $r_n = \alpha n^2$, $g_n = \beta(n+1)$ с постоянным α, β (ср. с § 6.10).

Упражнение. Тот же вопрос для $r_n = \alpha n^2$, $g_n = \beta$.

Упражнение. Результат (6.3.8) молчаливо подразумевает, что все r_n отличны от нуля. Обсудите случай, когда $r_k = 0$ для некоторого k. Найдите p_n^s для этого случая.

Упражнение. Найдите стационарное распределение для асимметричного случайного обсуждения с отражающей границей, описывающегося для $n \geq 1$ уравнением (6.2.13) с $\alpha > \beta$, совместно со специальным граничным уравнением

$$\dot{p}_0 = \alpha p_1 - \beta p_0. \tag{6.3.11}$$

(Эта модель описывает диффузию тяжелых частиц в гравитационном поле или в центрифуге; ср. с § 8.3.)

Упражнение. Два объема Ω_1 и Ω_2 связаны отверстием. В них находится газ из N невзаимодействующих молекул. Основное кинетическое уравнение для числа n молекул в Ω_1 имеет вид

$$\dot{p}_n = \alpha (\mathbf{E} - 1) n p_n + \beta (\mathbf{E}^{-1} - 1)(N - n) p_n. \tag{6.3.12}$$

Найдите стационарное распределение.

Упражнение. Найдите стационарное распределение для процесса радиоактивного распада, описывающегося основным кинетическим уравнением (6.1.7).

Упражнение. Покажите, что общее решение уравнения (6.3.6) с $J \neq 0$ при $n \geq 0$ дается выражением

$$p_n^s = \frac{J}{r_n}\left[1 + \frac{g_{n-1}}{r_{n-1}} + \frac{g_{n-1}g_{n-2}}{r_{n-1}r_{n-2}} + \ldots \frac{g_{n-1}g_{n-2}\cdots g_1}{r_{n-1}r_{n-2}\cdots r_1}\right] + \\ + \text{const}\,\frac{g_{n-1}g_{n-2}\cdots g_0}{r_n r_{n-1}\cdots r_1}. \tag{6.3.13}$$

Найдите также выражение для p_n при $n < 0$.

Упражнение. В случае полубесконечного интервала стационарное распределение дается (6.3.8) и (6.3.9) с $N = \infty$. Изучите условия на r_n и g_n, при которых (6.3.9) сходится. Найдите примеры, в которых эти условия не выполняются. Каковы физические следствия нарушения сходимости?

Предположим, имеется замкнутая изолированная физическая система, неравновесное поведение которой адекватно описывается одношаговым основным кинетическим уравнением для одной переменной. Тогда, предполагая эту переменную четной функцией, мы знаем, что выполняется соотношение детального равновесия, которое для одношаговых процессов имеет вид

$$r_n p_n^e = g_{n-1} p_{n-1}^e. \tag{6.3.14}$$

Это уравнение имеет тот же вид, что и (6.3.7). Конечно, для изолированной системы стационарное решение основного кинетического уравнения p^s совпадает с термодинамически равновесным распределением p^e.

Однако для ясного понимания надо отличать логический статус (6.3.7) от (6.3.14). Уравнение (6.3.7) — это просто основное кинетическое уравнение с левой частью, положенной равной нулю; простой вид этого уравнения связан с тем, что его применимость ограничена одношаговыми процессами. Оно не имеет физического смысла и поэтому применимо как к открытым системам, так даже и к нефизическим системам, таким, как популяции. С другой стороны, уравнение (6.3.14) выражает физический принцип: когда равновесное распределение p^e рассматривается как известное из равновесной ста-

тистической механики, уравнение устанавливает связь между вероятностями перехода r_n и g_n, которая должна иметь место, если система является замкнутой и изолированной.

Упражнение. Примените соотношение детального равновесия к уравнению (6.3.12) и найдите соотношение между α и β. Покажите, что они равны, когда $\Omega_1 = \Omega_2$, и выведите следующее заключение: термодинамика запрещает существование отверстий, пропускающих в одну сторону, или зеркал, с одной стороны отражающих частицы, а с другой — пропускающих их.

Упражнение. Пусть Ω_2 и N в предыдущей модели стремятся к бесконечности при конечном значении плотности $N/\Omega_2 = \rho$. Запишите основное кинетическое уравнение и покажите, что стационарное решение является распределением Пуассона. (Можно ли было бы это узнать a priori?) О чем нам говорит соотношение детального равновесия в этом случае?

Упражнение. Для одношагового процесса **W** является триднагональной матрицей. С помощью (6.3.8) можно построить аналогичное преобразование, которое делает матрицу симметричной, как в (5.6.15). Докажите таким способом, что любой конечный одношаговый процесс имеет полную систему собственных функций и что его автокорреляционная функция состоит из суммы экспонент *.

Упражнение. Отсюда можно вывести заключение, что никакие два собственных значения не совпадают. Указание. Последовательно решая уравнения для собственного вектора, покажите, что любому собственному значению соответствует единственный собственный вектор.

6.4. ПРИМЕРЫ ЛИНЕЙНЫХ ОДНОШАГОВЫХ ПРОЦЕССОВ

Эти процессы были определены в § 6.1 как одношаговые процессы, в которых r_n и g_n — линейные функции n в случае, если они не равны константе одновременно. При этом должна быть одна граница, чтобы предотвратить появление отрицательных вероятностей перехода. Некоторые примеры мы уже сосчитали: процесс распада в § 4.6 и флуктуации плотности газа в упражнении из предыдущего параграфа. Здесь мы перечислим еще несколько примеров, предоставляя читателю возможность разобраться в деталях в качестве самостоятельного упражнения, даже если они не указаны формально как упражнения.

1. *Квантованный гармонический осциллятор*, взаимодействующий с полем излучения. Пусть $n = 0, 1, 2, \ldots$ — состояния осциллятора, обладающие энергией $h\nu(n + 1/2)$. Вероятности перехода пропорциональны матричным элементам дипольного момента, которые равны нулю всегда, за исключением переходов между соседними состояниями; следовательно, это одношаговый процесс. Матричный элемент перехода между состояниями $n - 1$ и n пропорционален n. Вероятность скачка за единичное время из $n - 1$ в n есть $g_{n-1} = \beta n$, где β — множитель, который зависит от плотности излучения ρ с частотой ν, но не зависит от n. Вероятность скачка из n в $n - 1$ есть

* Подробнее по поводу общих теорем, касающихся тридиагональных матриц, см.: L. H. Wilkinson, The Algebraic Eigenvalue Problem (Clarendon, Oxford, 1965), p. 335 f.

$r(n)=\alpha n$ с аналогичным множителем α. Основное кинетическое уравнение имеет вид

$$\dot{p}_n=\alpha(\mathbf{E}-1)np_n+\beta(\mathbf{E}^{-1}-1)(n+1)p_n. \tag{6.4.1}$$

Стационарное решение имеет вид распределения Паскаля

$$p_n^s=\mathrm{const}\,(\beta/\alpha)^n. \tag{6.4.2}$$

Пусть полная система, состоящая из гармонического осциллятора плюс поле излучения, приходит в равновесие. Тогда из равновесной статистической механики известно, что

$$p_n^e=\mathrm{const}\cdot\exp\left[-\frac{nh\nu}{kT}\right]. \tag{6.4.3}$$

Поскольку это выражение должно совпадать с (6.4.2), имеем

$$\frac{\beta}{\alpha}=\exp\left[-\frac{h\nu}{kT}\right]. \tag{6.4.4}$$

Но существует возможность продвинуться дальше. Поскольку g_n должно быть пропорционально плотности ρ имеющихся фотонов, можно написать $\beta=A\rho$, где A может зависеть от ν, но не от ρ. Поскольку излучение является спонтанным и стимулированным, можно записать $\alpha=B+C\rho$. Подстановка в (6.4.4) дает

$$\rho=\frac{B}{Ae^{h\nu/(kT)}-C}.$$

Это знаменитый эйнштейновский вывод закона Планка; для того, чтобы завершить его, надо принять во внимание, что при больших T распределение должно совпадать с законом Рэлея — Джинса *.

2. *Усиление в мазерах* **. Пусть n — число квантов в данной моде электромагнитного поля в объеме, содержащем возбужденные атомы или молекулы. Кванты уходят из системы сквозь стенки со скоростью $r_n=\alpha n$, но и возникают за счет стимулированного излучения и прямой накачки $g_n=\beta n+\gamma$. Из (6.3.4) следует, что $\langle n(t)\rangle$ возрастает при $\beta>\alpha$ экспоненциально, а при $\beta<\alpha$ стремится к

$$\langle n(\infty)\rangle=\frac{\gamma}{\alpha-\beta}.$$

Таким образом, в стационарном состоянии накачка γ усиливается множителем $(\alpha-\beta)^{-1}$. Из (6.3.5) для флуктуации в стационарном состоянии находим

$$\sigma^2(\infty)=\frac{\alpha\gamma}{(\alpha-\beta)^2}.$$

---

* A. Einstein, Physik. Zeits., 18, 121 (1917).

** K. Shimoda, H. Takahashi, and C. H. Townes, J. Phys. Soc. Japan, 12, 686 (1957).

Само стационарное распределение является отрицательным биномиальным или распределением Поля. Термодинамически равновесное распределение p^e не реализуется, поскольку система подвержена постоянной накачке.

3. *Поглощение.* Большой резервуар содержит газ, состоящий из молекул с практически постоянной плотностью ρ. Молекулы могут поглощаться на небольшой поверхности, имеющей N поглощающих участков. Если n — число поглощенных молекул, легко видеть, что $r_n = \alpha n$, $g_n = \beta(N-n)$. Основное кинетическое уравнение оказывается таким же, как (6.3.12). Значит, читатель уже знает, что стационарное решение является биномиальным распределением:

$$p_n^s = \text{const}\binom{N}{n}\left(\frac{\beta}{\alpha}\right)^n. \tag{6.4.5}$$

Из сравнения (6.4.5) с распределением p_n^e, заданным равновесной статистической механикой, следует

$$\frac{\beta}{\alpha} = \rho\,\frac{\zeta}{(2\pi mkT)^{3/2}}, \tag{6.4.6}$$

где ζ — внутренняя функция распределения поглощенной молекулы.

4. *Химические реакции* приводят к большому разнообразию основных кинетических уравнений, большая часть которых нелинейна. Общее рассмотрение дано в гл. 7. Здесь же мы возьмем простую схему реакции

$$A \underset{k'}{\overset{k}{\rightleftarrows}} X. \tag{6.4.7}$$

Здесь предполагается, что вещества A настолько много, что его количество n_A практически постоянно. Пусть n — число молекул вещества X. Это число за единичное время с вероятностью $g_n = kn_A$ увеличивается на единицу и с вероятностью $r_n = k'n$ уменьшается на единицу (k, k' — константы реакции):

$$\dot{p}_n = k'(\mathbf{E}-1)\,np_n + kn_A(\mathbf{E}^{-1}-1)\,p_n. \tag{6.4.8}$$

Стационарное решение является распределением Пуассона. Причина заключается в том, что молекулы X возникают и аннигилируют независимо друг от друга. В схеме реакции, в которой несколько молекул X реагируют совместно, они уже не являются независимыми и функция распределения отклоняется от пуассоновской (см. § 7.3).

5. *Рост популяции.* Пусть n — число индивидуумов в популяции определенного типа, такого, как бактерии. Каждый индивидуум за единичное время с вероятностью α может умереть, а с вероятностью β — породить добавочную особь, α и β считают фиксированными и независимыми от возраста индивидуума, иначе процесс не был бы марковским. Тогда $r_n = \alpha n$ и $g_n = \beta n$. Согласно (6.3.4),

имеем уравнение

$$\frac{d}{dt}\langle n\rangle = (\beta-\alpha)\langle n\rangle,$$

которое выражает *закон Мальтуса* экспоненциального роста (при $\beta > \alpha$). Согласно (6.3.5), дисперсия удовлетворяет уравнению

$$\frac{d\sigma^2}{dt} = 2(\beta-\alpha)\sigma^2 + (\beta+\alpha)\langle n\rangle \tag{6.4.9}$$

и, следовательно, также возрастает экспоненциально. Отметим, что наблюдение $\langle n\rangle$ определяет только значение $\beta-\alpha$, а наблюдение отклонений от среднего дает $\beta+\alpha$.

6. *Каскады космических лучей.* Когда электроны космического излучения попадают в поглощающий материал (например, свинец), вследствие тормозного излучения, сопровождающегося рождением пар, возникают дополнительные электроны. Пусть t — поперечная толщина, n — число электронов (положительно и отрицательно заряженных). Баба и Гейтлер * описывали этот каскад с помощью одношагового процесса с $r_n = 0$, $g_n = \beta$. Основное кинетическое уравнение совпадает с (6.1.8), но начальное значение $p_n(0) = \delta_{n,1}$, так что

$$p_n(t) = \frac{(\beta t)^{n-1}}{(n-1)!}e^{-\beta t} \qquad (n = 1, 2, 3, \ldots).$$

Средний квадрат флуктуаций $\langle n\rangle - 1$, что меньше наблюдаемого. Фурри ** улучшил модель, взяв $t_n = 0$, $g_n = \gamma n$, и нашел

$$p_n(t) = e^{-\gamma t}(1-e^{-\gamma t})^{n-1}.$$

Это распределение Паскаля с $\langle n\rangle = e^{\gamma t}$ и дисперсией $\sigma_n^2(t) = e^{\gamma t}(e^{\gamma t}-1)$. Причина, по которой флуктуации столь велики, состоит в том, что каскадный процесс не только увеличивает среднее число электронов, но увеличивает также флуктуации относительно этого среднего. В более поздних работах учитываются также поглощение электронов, их распределение по различным энергиям и фотоны как самостоятельная сущность ***.

Упражнение. Полагая, что гармонический осциллятор (см. п. 1) стартует из состояния n_0, найдите $\langle n\rangle$ и σ_n^2 как функции t и убедитесь, что они стремятся к своим равновесным значениям.

Упражнение. Запишите основное кинетическое уравнение для примера в п. 2 и используйте его для нахождения $\langle n\rangle$ и σ_n^2 как функций t.

Упражнение. Вычислите распределение p_n^e для примера в п. 3 с помощью статистической механики и покажите, что оно имеет вид (6.4.5) совместно с (6.4.6).

---

* H. J. Bhabha and W. Heitler, Proc. Roy. Soc., A 159, 432 (1937).

** W. H. Furry, Phys. Rev., 52, 569 (1937). Этот процесс получил название *процесса Фурри*.

*** [3] On the Theory of Stochastic Processes and their Application to the Theory of Cosmic Radiation (Wiley, New York, 1943); J. Nishimura in: Encyclopedia of Physics, 46/2 (S. Flugge ed., Springer, Berlin, 1967).

Упражнение. Запишите основное кинетическое уравнение для автокаталитической реакции

$$A + X \longrightarrow 2X,$$

где обратной реакцией пренебрегаем. Обсудите следствия.

Упражнение. В примере п. 5 возьмите $\beta < \alpha$ и найдите стационарное распределение.

Упражнение. Запишите основное кинетическое уравнение для модели Фурри каскадов космических лучей. Обратите внимание, оно отличается от модели роста популяции, что дает то же уравнение для $\langle n \rangle$, но другое для $\langle n^2 \rangle$.

Упражнение. Улам рассмотрел одномерное движение одной частицы, которая отскакивает вперед и назад между двумя стенками, одна из которых фиксирована, а другая осциллирует со скоростью $\pm 1/2$ (рис. 12). Скорость (ее модуль) v частицы изменяется на $v+1$ при лобовом столкновении и на $v-1$, когда частица догоняет удаляющуюся стенку. Гамерслей заменил эту динамическую задачу на стохастическую путем введения следующего анзаца (Stosszahlansatz), который физически разумен, когда фиксированная стенка находится далеко, но обходит реальную проблему: как стохастические аспекты возникают из лежащей в их основе детерминистической динамики? Вероятность того, что столкновение произойдет за время dt, равна $v dt$, и отношение встречных столкновений к столкновениям, в которых частица догоняет стенку, есть $|AC|/|BC| = (v+{}^1/_2)/(v-{}^1/_2)$. Далее, начальное значение v берется равным 1/2, так что единственно возможными значениями для v являются $1/2 + n$ (где $n = 0, 1, 2, \ldots$). Покажите, что основное кинетическое уравнение имеет вид (6.4.1) с $\alpha = \beta = 1/2$. Покажите, что средняя скорость неограниченно возрастает и ее флуктуации нарастают с равной быстротой *.

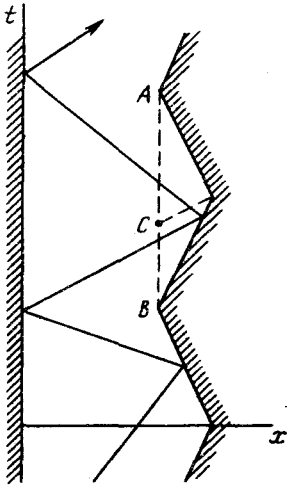

Рис. 12. Отскакивающая частица в модели Гамерслея

6.5. ЕСТЕСТВЕННЫЕ ГРАНИЧНЫЕ УСЛОВИЯ

В примерах предыдущего параграфа и в большинстве других приложений коэффициенты r_n и g_n представляют собой не наборы чисел, а задаются довольно простыми аналитическими функциями $r_{(n)}$, $g_{(n)}$, зависящими от переменной n. Если бы это было не так, то не было бы никакой надежды найти явные решения, кроме случая, когда число состояний очень мало. Однако это также предполагает, что специальные уравнения (6.1.3) и (6.1.5) на границах должны восприниматься совершенно серьезно и их нельзя включить в общее уравнение с помощью простого приема, описанного в (6.1.4) и (6.1.6), не нарушив аналитического характера. Следовательно, когда имеются

* Статьи Улама и Гамерслея опубликованы в кн.: Proceedings of the Fourth Berkeley Symposium on Mathematical Statistics and Probability, Vol. III (J. Neyman ed., University of California Press, Berkeley 1961).

две границы, основное кинетическое уравнение необходимо записывать в виде трех отдельных уравнений:

$$\dot{p}_n = r(n+1)\,p_{n+1} + g(n-1)\,p_{n-1} - \{r(n) + g(n)\}\,p_n \qquad (6.5.1)$$

для $n = 1, 2, \ldots, N-1$ и

$$\dot{p}_0 = r(1)\,p_1 - g(0)\,p_0, \qquad (6.5.2)$$

$$\dot{p}_N = g(N-1)\,p_{N-1} - r(N)\,p_N. \qquad (6.5.3)$$

Замечание. Может случиться так, что влияние границ распространяется на несколько дополнительных уравнений. Примером служит модель диффузионно контролируемой химической реакции в § 6.7. Кроме того, следует отметить, что могут встречаться «примеси», т. е. внутренние участки, на которых r_n и g_n могут отклоняться от значения, задаваемого аналитическим выражением, использованным в (6.5.1). Тогда уравнения для p_n для двух или большего количества внутренних участков должны записываться отдельно. На некоторое время мы исключим такие усложнения.

Однако существует специальный тип границы, для которого этот исключительный характер может быть сделан безвредным. Рассмотрим класс б) в § 6.1, т. е. $n = 0, 1, 2, \ldots$. Мы будем называть границу $n = 0$ «естественной», если:

1) общее уравнение (6.5.1) справедливо вплоть до $n = 1$, так что имеется одно уравнение (6.5.2) на границе;

2) кроме того, $r(0) = 0$.

В этом случае можно использовать следующий прием.

Объявляем, что уравнение (6.5.1) справедливо при всех n от $-\infty$ до $+\infty$, но будем рассматривать только такие решения этого уравнения, у которых *начальные* значения $p_n(0)$ равны нулю при $n < 0$. Понятно, что если $p_n(t)$ при $n < 0$, то оно останется нулем при всех $t > 0$, потому что условие $r(0) = 0$ гарантирует отсутствие переходов из состояния 0 в состояние -1. Следовательно, общее уравнение (6.5.1) сводится к (6.5.2) при $n = 0$. Тогда граничное условие просто ограничивает возможный выбор начальных условий. Но оно уже больше не появляется в самом уравнении, что очень сильно облегчает его решение.

Причина, по которой границы в физических задачах часто оказываются естественными, становится понятной, если рассмотреть простой пример радиоактивного распада из § 4.6. Вероятность того, что произойдет испускание, пропорциональна числу n радиоактивных ядер и, следовательно, автоматически обращается в нуль при $n = 0$. Это же справедливо, когда n — число молекул определенного сорта в химической реакции или число индивидуумов в популяции. Всегда, когда n по своей природе не может стать отрицательным, для любого разумного основного кинетического уравнения должно выполняться $r(0) = 0$. Однако это не исключает возможности того, что при малых n происходит что-нибудь особенное, нарушающее аналитический характер $r(n)$, как это имеет место в примере с диффузионно контролируемыми реакциями. Границу, которая не является естественной, мы будем называть *искусственной* (см. § 6.7).

Упражнение. Покажите, что коэффициенты в уравнении (6.5.2) и (6.5.3) нельзя изменить, не нарушив закон сохранения вероятности.

Упражнение. Предположим, что граница при $n=0$ такова, что требует двух дополнительных уравнений для p_0 и p_1. Сколько дополнительных коэффициентов появится, если вероятность должна сохраняться? Что произойдет в случае для k добавочных уравнений?

Упражнение. При каких условиях верхняя граница при $n=N$ будет естественной?

Упражнение. Убедитесь в том, что все границы в § 6.4 являются естественными, а граница, заданнная (6.3.11),— нет.

Упражнение. Используя (6.3.4), докажите, что для задач, связанных с линейными одношаговыми процессами, естественная граница обладает тем свойством, что $\langle n \rangle$ не может пересечь ее.

6.6. ЛИНЕЙНЫЙ ОДНОШАГОВЫЙ ПРОЦЕСС С ЕСТЕСТВЕННЫМИ ГРАНИЧНЫМИ УСЛОВИЯМИ

Уравнение, которое нужно решать, можно записать в виде

$$\dot{p}_n = a(\mathrm{E}-1)(r+n)\,p_n + b(\mathrm{E}^{-1}-1)(g+n)\,p_n, \tag{6.6.1}$$

с постоянными a, b, r, g. Сначала мы не будем обращать внимания на границы и рассмотрим его как разностное уравнение для $-\infty < n < \infty$ с начальным условием $p_n(0)=\delta_{nm}$. Далее мы положим $a \neq 0$, $b \neq 0$, $a \neq b$. Из общего решения, найденного таким путем, можно получить различные частные случаи, подставляя частные значения или переходя к соответствующим пределам.

Опять используем производящую функцию вероятности (6.2.3). Умножим (6.6.1) на z^n и просуммируем по всем n, в результате получим

$$\begin{aligned}\frac{\partial F(z,t)}{\partial t} &= a\sum (z^{n-1}-z^n)(r+n)\,p_n + b\sum (z^{n+1}-z^n(g+n)\,p_n = \\ &= ar\left(\frac{1}{z}-1\right)F + a(1-z)\frac{\partial F}{\partial z} + bg(z-1)F + b(z^2-z)\frac{\partial F}{\partial z} = \\ &= (1-z)(a-bz)\frac{\partial F}{\partial z} + (1-z)\left(\frac{ar}{z}-bg\right)F. \end{aligned} \tag{6.6.2}$$

Это линейное дифференциальное уравнение для F можно решить, воспользовавшись стандартным методом характеристик *. Характеристические кривые в (z, t)-плоскости определяются соотношением

$$-\mathrm{d}t = \frac{\mathrm{d}z}{(1-z)(a-bz)}.$$

Уравнения для кривых получим, проинтегрировав это соотношение (рис. 13):

$$\frac{1-z}{a-bz}\,\mathrm{e}^{(b-a)t} = C,$$

* I. N. Sneddon, Elements of Partial Differential Equations (McGraw-Hill, New York, 1957), Ch. 2.

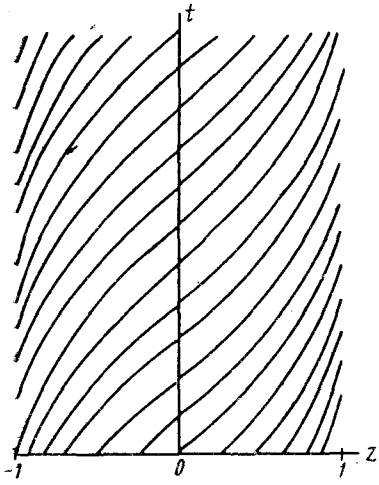

Рис. 13. Характеристические кривые уравнения (6.6.2) для $a=1$, $b=-1$

где C — постоянная интегрирования, с помощью которой различаются характеристические кривые. Изменение F вдоль каждой отдельной характеристической кривой определяется соотношением

$$-\frac{dz}{a-bz}=\frac{d\log F}{ar/z-bg},$$

которое дает

$$F(z,\ t)=z^{-r}(a-bz)^{r-g}\cdot\text{const}.$$

Константу можно выбирать по-разному для каждой характеристики, и поэтому она является произвольной функцией $\Omega(C)$. Тогда общее решение уравнения (6.6.2) принимает вид

$$F(z,\ t)=z^{-r}(a-bz)^{r-g}\Omega\times$$
$$\times\left(\frac{1-z}{a-bz}e^{(b-a)t}\right). \qquad (6.6.3)$$

Определим теперь эту функцию Ω таким образом, чтобы удовлетворить начальному условию $p_n(0)=\delta_{nm}$. Запишем это начальное условие в терминах F:

$$F(z,\ 0)=z^m.$$

Подстановка в (6.6.3) дает

$$\Omega\left(\frac{1-z}{a-bz}\right)=z^{m+r}(a-bz)^{g-r}.$$

Временно введем переменную ζ, определив ее соотношениями

$$\zeta=\frac{1-z}{a-bz},\qquad z=\frac{a\zeta-1}{b\zeta-1}.$$

Тогда наше уравнение для Ω дает

$$\Omega(\zeta)=\left(\frac{a\zeta-1}{b\zeta-1}\right)^{m+r}\left(\frac{zb-a}{b\zeta-1}\right)^{g-r}.$$

Подставляя это выражение для Ω в (6.6.3), окончательно приходим к

$$F(z,\ t)=z^m\left[\frac{a\varepsilon-b+a(1-\varepsilon)z^{-1}}{a-b}\right]^{m+r}\left[\frac{a-b\varepsilon-b(1-\varepsilon)z}{a-b}\right]^{-m-g}, \qquad (6.6.4)$$

где $\varepsilon=e^{(b-a)t}$.

Упражнение. Получите основное кинетическое уравнение для случайного блуждания как предельный случай (6.6.1) и найдите таким способом (6.2.9).

Упражнение. Убедитесь в том, что $F(1,\ t)=1$, и найдите первые два момента n как функции t. Проверьте, что они удовлетворяют уравнениям (6.3.4.) и (6.3.5).

Упражнение. Если в (6.6.1) подставить $n=-n'$, то получится другое основное кинетическое уравнение того же типа. Каковы коэффициенты a', b', r', g этого нового уравнения? Покажите, что полубесконечную область возможных значений, простирающуюся до $-\infty$, всегда можно преобразовать в область $(0, \infty)$.

Как уже упоминалось раньше, должна быть по крайней мере одна граница, чтобы предотвратить появление отрицательных значений для r_n или g_n. Без потери общности в качестве такой границы можно выбрать нижнюю границу при $n=0$. Тогда (6.6.4) имеет смысл только при $m \geqslant 0$. Однако необходимо также, чтобы это выражение не содержало отрицательных степеней z, иначе оно окажется просто решением дифференциального уравнения (6.6.1) без границ и не будет являться решением настоящего основного кинетического уравнения с границей. Это условие удовлетворяется, если $r=0$, т. е., чтобы наше решение работало, необходимо, чтобы граница была естественной. Тогда F можно записать в виде

$$F(z, t)=(a-b)^g\,[a(1-\varepsilon)+(a\varepsilon-b)\,z]^m\,(a-b\varepsilon-b\,(1-\varepsilon)\,z)^{-m-g}. \quad (6.6.5$$

Дальше необходимо выделить несколько случаев. Во-первых, предположим, что область возможных значений — это $(0, \infty)$. Тогда $g_n=b(n+g)$ должна быть неотрицательной при всех $n \geqslant 0$, что предполагает:

$$\text{либо } b>0, \quad g \geqslant 0, \tag{6.6.6}$$

$$\text{либо } b=0, \quad bg=\beta \geqslant 0. \tag{6.6.7}$$

В первом случае (6.6.5) применимо, как оно есть, а в последнем случае нужно взять предел $b \to 0$ при $bg=\beta$. В результате получим

$$F(z, t)=[1-\varepsilon+\varepsilon z]^m \exp\left[-\frac{\beta}{a}(1-\varepsilon)(1-z)\right], \tag{6.6.8}$$

где $\varepsilon=e^{-at}$.

Во-вторых, пусть область возможных значений конечна: $0 \leqslant n \leqslant N$. Тогда допустимы обе возможности (6.6.6), (6.6.7) и еще

$$b<0, \quad g \leqslant -N. \tag{6.6.9}$$

Для того чтобы функция (6.6.5) была решением, она должна быть многочленом по z степени N для каждого $m=0, 1, 2, \ldots, N$. Тогда $-g=N$, так что $g_n=b'(N-n)$ для $b'=-b>0$. Значит, верхняя граница должна также быть естественной, и F принимает вид

$$F(z, t)=(a+b')^{-N}[a(1-\varepsilon)+(a\varepsilon+b')\,z]^m \times$$
$$\times[a+b'\varepsilon+b'(1-\varepsilon)\,z]^{N-m}, \quad (6.6.10)$$

где $\varepsilon=\exp[-(a+b')\,t]$.

Систематизируем различные случаи, для которых мы нашли решение, выписав их в виде итоговой таблицы:

1) область $(-\infty, \infty)$ с постоянными коэффициентами (случайное блуждание);

2) область $(0, \infty)$ с естественной границей; следовательно, $r_n = an$, тогда как g_n дается либо выражением (6.6.6), либо выражениями (6.6.7);

3) область $(0, N)$ с двумя естественными границами $r_n = an$ и $g_n = b'(N-n)$;

4) исключительный случай, упомянутый в следующем упражнении.

Упражнение. Условие $r=0$ не единственный способ избежать появления отрицательных степеней в (6.6.5); можно потребовать $a=0$. Обсудите этот случай.

Упражнение. Покажите, что все примеры § 6.4 относятся к п. 1—4, выписанным в итоговой таблице, и решите основные кинетические уравнения.

Упражнение. Для примера 5 § 6.4 покажите, что

$$p_0(t) = \left[\frac{\alpha - \alpha e^{-(\beta-\alpha)t}}{\beta - \alpha e^{-(\beta-\alpha)t}}\right]^m.$$

Докажите, что имеется положительная вероятность этого, что популяция вымрет на ранней стадии и никогда не увеличится. Отсюда следует, что σ^2 должна быть по крайней мере порядка $\langle n \rangle^2$.

Упражнение. Для п. 2 из итоговой таблицы положите $a > b$ и перейтите к пределу $F(z, \infty)$. Что произойдет при $b > a$?

Упражнение. Предельный случай в п. 2 получается при $a=b$. Покажите, что это приводит к

$$F(z, t) = [at + (1-at)z]^m [1 + at - atz]^{-m-g}.$$

Изучите соответствующее основное кинетическое уравнение и его явное решение $p_n(t)$.

Упражнение. Найдите равновесное распределение для п. 3.

Упражнение. Долгоживущее радиоактивное вещество A распадается в B через два промежуточных короткоживущих изотопа: $A \to X \to Y \to B$. Если количество вещества A полагается постоянным, то совместное распределение чисел n, m ядер X, Y подчиняется основному кинетическому уравнению для двух переменных.

$$\dot{p}_{nm} = \alpha(\mathbf{E}_n^{-1} - 1)\, p_{nm} + \beta(\mathbf{E}_m - 1)\, m p_{nm} + \gamma(\mathbf{E}_n \mathbf{E}_m^{-1} - 1)\, n p_{nm},$$

где $\mathbf{E}_n$, $\mathbf{E}_m$ — операторы шага для n, m соответственно. Решите это уравнение с начальным условием $p_{nm}(0) = \delta_{n,0}\delta_{m,0}$ и покажите, что по прошествии достаточно большого времени $p_{r,m}$ представляет собой произведение двух распределений Пуассона.

Упражнение. В качестве обобщения предыдущего упражнения рассмотрите цепочку химических реакций, включающую r переменных:

$$B \xrightarrow{\beta} X_1, \quad X_1 \xrightarrow{\gamma_1} X_2, \quad X_2 \xrightarrow{\gamma_2} X_3, \ \ldots, \ X_{r-1} \xrightarrow{\gamma_{r-1}} X_r,$$

$$X_1 \xrightarrow{\alpha_1} A_1, \quad X_2 \xrightarrow{\alpha_2} A_2, \ \ldots, \ X_{r-1} \xrightarrow{\alpha_{r-1}} A_{r-1}, \quad X_r \xrightarrow{\alpha_r} A_r.$$

Покажите, что основное кинетическое уравнение можно в принципе решить с помощью производящей функции, зависящей от r переменных. В частности, докажите, что все решения стремятся к стационарному совместному распределению Пуассона *.

---

* Эта схема была использована Тукером как модель образования опухоли (карциномогенеза).

6.7. ИСКУССТВЕННЫЕ ГРАНИЧНЫЕ УСЛОВИЯ

Мы определим их как границы, на которых вероятность заполнения одного или большего числа участков подчиняется специальным уравнениям и не описывается теми аналитическими выражениями $r(n)$ и $g(n)$, которые применяются при других n. Многообразие возможных искусственных границ, конечно же, безгранично. Можно выделить класс резких границ, определенный таким образом, что к нему относятся такие границы, у которых специальные уравнения пишутся только для концевых участков. Другой ограниченный класс составляют *отражающие границы*, и к нему относятся такие границы, которые сохраняют полную вероятность; *поглощающими границами* являются такие, на которых вероятность обращается в нуль. Последнее определение нуждается в пояснении.

В качестве примера рассмотрим систему уравнений для p_n с $n=0, 1, 2, \ldots$:

$$\dot{p}_n = p_{n+1} + p_{n-1} - 2p_n \quad (n = 1, 2, \ldots); \tag{6.7.1а}$$

$$\dot{p}_0 = p_1 - 2p_0. \tag{6.7.1б}$$

Участок $n=0$ является резкой искусственной границей. Эти уравнения можно интерпретировать как случайное блуждание на $-\infty < n < \infty$, в котором переходы из -1 в 0 невозможны: прогулка пьяницы по лужайке с бездонной ямой на одном краю. Полная вероятность не сохраняется:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \sum_{n=0}^{\infty} p_n = -p_0. \tag{6.7.2}$$

Читателя, шокированного еретическим утверждением, что распределение вероятности не нормировано на единицу, можно успокоить двумя способами. Во-первых, можно интерпретировать p_n как плотность ансамбля независимых частиц, каждая из которых совершает случайное блуждание, пока не свалится в яму навсегда. Тогда несохранение (6.7.2) просто означает, что полное число оставшихся частиц уменьшается. Другой способ состоит в том, что всегда можно свести дополнительное состояние, которое мы будем называть потусторонним (или *лимбо-состоянием*) и помечать звездочкой. Вероятность p_* находиться в этом состоянии по определению составляет

$$p_* = 1 - \sum_{n=0}^{\infty} p_n, \tag{6.7.3}$$

и (6.7.2) удовлетворяет

$$\dot{p}_* = p_0. \tag{6.7.4}$$

Система уравнений (6.7.1), дополненная (6.7.4), дает вклад в основное кинетическое уравнение на расширенном пространстве состояний $n=*, 0, 1, 2, \ldots$, причем это уравнение сохраняет должным образом выбранную вероятность. Его **W**-матрица обладает лимбо-со-

стоянием $*$ как поглощающим состоянием — в нашем случае бездонной ямой. Введение лимбо-состояния является чисто формальным приемом, потому что система (6.7.1) сама по себе является замкнутой системой уравнений для величины p_n ($n=0, 1, 2, \ldots$). Поэтому мы все равно будем называть ее основным кинетическим уравнением, несмотря на то что ее матрица не является **W**-матрицей. Решив ее, можно потом определить $p_*(t)$, использовав (6.7.3) или (6.7.4). Отметим, что среднее время, которое блуждающая частица проживет перед тем, как попадет в лимбо-состояние, дается выражением

$$\int_0^\infty t\dot{p}_* \, dt = -\sum_{n=0}^{\infty} \int_0^\infty t\dot{p}_n \, dt = \sum_{n=0}^{\infty} \int_0^\infty p_n \, dt. \qquad (6.7.5)$$

Среднее берется по ансамблю независимых блуждающих частиц.

Перечислим теперь некоторые примеры искусственных границ. Один пример с резкой отражающей границей был сосчитан в (6.3.11).

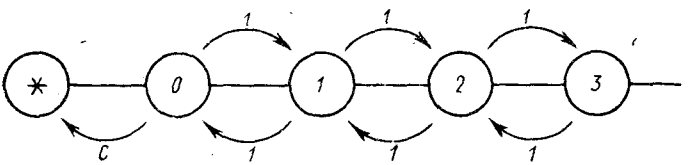

Рис. 14. Случайные блуждания с поглощающей границей

1. *Летучий газ растворен в инертном растворителе.* Молекулы газа диффундируют, пока не достигнут поверхности и не испарятся. Заменяя диффузию каждой молекулы одномерным случайным блужданием, получаем систему уравнений (рис. 14)

$$\dot{p}_n = p_{n+1} + p_{n-1} - 2p_n \quad (n=1, 2, \ldots); \qquad (6.7.6а)$$

$$\dot{p}_0 = p_1 - (1+c)\, p_0. \qquad (6.7.6б)$$

На граничном участке $n=0$ молекула имеет нормальную вероятность за единичное время вернуться на участок 1, но также вероятность c испариться за то же время. Это резкая поглощающая граница (когда $c>0$). Лимбо-состояние представляют испарившиеся молекулы. При $c=0$ граница является отражающей.

Для $c=1$ получаем (6.7.1б) как частный случай, отличающийся тем, что вероятность шага в лимбо-состоянии та же самая, что и для других шагов в левую сторону. Этот частный случай резкой поглощающей границы будем называть *полностью поглощающей* границей. Он особенно важен в связи с проблемой первого прохождения (см. § 6.10), но это отнюдь не означает, что он является единственно возможным случаем поглощающей границы.

2. *Диффузионно контролируемая химическая реакция**. Молекула A блуждает в растворе, пока не встретится с определенной молекулой B, с которой она может образовать связанное состояние, а молекула AB, естественно, может снова диссоциировать. Эту картину можно схематически представить как случайное блуждание на полурешетке $n=0, 1, 2, \ldots$, где $n=0$ представляет связанное состояние. Основное кинетическое уравнение в этом случае имеет вид

$$\dot{p}_n = p_{n+1} + p_{n-1} - 2p_n \quad (n=2, 3, \ldots), \tag{6.7.7а}$$

$$\dot{p}_1 = p_2 + \gamma p_0 - 2p_1, \tag{6.7.7б}$$

$$\dot{p}_0 = p_1 - \gamma p_0. \tag{6.7.7в}$$

Это пример нерезкой отражающей границы.

Стационарное решение имеет вид

$$p_n = \gamma p_0 \quad (\text{для } n \geqslant 1),$$

где p_0 — произвольный множитель, который нельзя найти из основного кинетического уравнения (6.7.7), но который можно использовать для нормировки распределений. Однако ясно, что его нельзя нормировать как распределение вероятности, поскольку $\sum p_n = \infty$. Физическая причина этого, конечно, состоит в том, что молекула A блуждает в бесконечном пространстве. Чтобы исправить его, нужно ввести газ, состоящий из независимых молекул A с определенной плотностью ρ. Или, более точно, ρ — это среднее число молекул A на достаточно удаленном участке $n \geqslant 1$. Эта ситуация соответствует нормировке $\gamma p_0 = \rho$. Теперь можно применить соотношение детального равновесия (5.4.2). В результате получим

$$\gamma p_0^e = p_1^e, \quad \gamma = \rho e^{-\chi/(kT)}, \tag{6.7.8}$$

где χ — энергия связи. Отметим, что для $\gamma = 0$ уравнения (6.7.7) сводятся к (6.7.1): бесконечная энергия связи превращает связанное состояние в поглощающую границу.

3. В знак уважения к тому факту, что искусственные границы очень распространены в теории массового обслуживания, мы включили один пример такого типа, несмотря на то что он далеко выходит за пределы темы, указанной в названии настоящей книги**. В телефонной сети одновременно может поддерживаться N связей; число связей в любой момент времени есть $n = 0, 1, 2, \ldots, N$. Связи устанавливаются в случайные моменты времени до тех пор, пока

---

* A. M. North, The Collision Theory of Chemical Reactions in Liquids (Methuen, London, 1964).

** D. R. Cox and W. L. Smith, Queues (Methuen, London and Wiley, New York, 1961); J. W. Cohen, The Single Server Queue (North-Holland, Amsterdam, 1969).

телефонная сеть способна поддерживать их:

$$g_n = \text{const} = \beta \quad \text{для} \quad n = 0,\ 1,\ 2,\ \ldots,\ N-1;$$
$$g_N = 0.$$

Уже установленная связь прерывается в случайный момент времени $r_n = \alpha n$. (Это довольно нереалистическое положение необходимо для того, чтобы выполнялось свойство марковости.) Основное кинетическое уравнение имеет вид

$$\dot{p}_0 = \alpha p_1 - \beta p_0, \tag{6.7.9а}$$

$$\dot{p}_n = \alpha (n+1) p_{n+1} + \beta p_{n-1} - (\alpha n + \beta) p_n \quad (n = 1,\ 2,\ \ldots,\ N-1), \tag{6.7.9б}$$

$$\dot{p}_N = \beta p_{N-1} - \alpha N p_N. \tag{6.7.9в}$$

Здесь при $n = 0$ имеет место естественная граница, а при $n = N$ — искусственная резкая отражающая граница.

Упражнение. В процессе радиоактивного распада состояние $n = 0$ является поглощающим. Покажите, что уравнения для остальных p_n $(n = 1,\ 2,\ \ldots)$ составляют основное кинетическое уравнение с поглощающей границей. Состояние $n = 0$ играет роль лимбо-состояния.

Упражнение. Для того же самого процесса распада покажите, что для любого $N \geqslant 1$ состояния $n \geqslant N$ удовлетворяют некоторому основному кинетическому уравнению с поглощающей границей. Его лимбо-состояние состоит из всех состояний с $n < N$.

Упражнение. Сосуд содержит газ неустойчивых молекул, диссоциация которых описывается процессами распада. В случайные моменты времени добавочные молекулы попадают в сосуд или рождаются в нем. Основное кинетическое уравнение имеет вид

$$\dot{p}_n = (\mathbf{E} - 1)\, n p_n + a\, (\mathbf{E}^{-1} - \mathbf{I})\, p_n \quad (n = 1,\ 2,\ \ldots), \tag{6.7.10а}$$

$$\dot{p}_0 = p_1 - a p_0. \tag{6.7.10б}$$

Является эта граница естественной или искусственной?

Упражнение. Для одношагового процесса в общем виде (6.5.1) покажите, что информация «$n = 0$ является резкой поглощающей границей» определяет уравнение для p_0 с точностью до одной положительной константы, как в (6.7.6б).

Упражнение. Для неограниченного симметричного случайного блуждания явное решение граничной задачи с поглощающими границами можно получить с помощью *принципа отражения*. Решите основное кинетическое уравнение с начальным условием $p_n(0) = \delta_{nm} - \delta_{n,-m}$. Решение $p_n(t)$ для $n > 0$ удовлетворяет

$$\dot{p}_n = p_{n+1} + p_{n-1} - 2p_n \ (n > 1), \tag{6.7.11а}$$

$$\dot{p}_1 = p_2 - 2p_1. \tag{6.7.11б}$$

Это основное кинетическое уравнение для случайного блуждания с поглощающей границей при $n = 0$.

Упражнение. Решите тем же методом основное кинетическое уравнение

$$\dot{p}_n = p_{n+1} + p_{n-1} - 2p_n \quad (n > 1), \tag{6.7.12а}$$

$$\dot{p}_1 = p_2 + 2p_0 - 2p_1, \tag{6.7.12б}$$

$$\dot{p}_0 = p_1 - 2p_0, \tag{6.7.12в}$$

которое описывает случайное блуждание с нерезкой отражающей границей *

* По поводу более сложных приложений принципа отражения см.: M. Schwarz and D. Poland, J. Chem. Phys., 63, 557 (1975).

Упражнение. Решите основное кинетическое уравнение с резкой отражающей границей

$$\dot{p}_n = p_{n+1} + p_{n-1} - 2p_n \quad (n > 0), \tag{6.7.13а}$$

$$\dot{p}_0 = p_1 - p_0. \tag{6.7.13б}$$

6.8. ИСКУССТВЕННЫЕ ГРАНИЧНЫЕ УСЛОВИЯ И НОРМАЛЬНЫЕ МОДЫ

Только некоторые задачи с искусственными границами можно рассматривать с помощью принципа отражения. В этом параграфе мы изложим метод нормальных мод, который в принципе пригоден для задач с искусственными границами всех типов. Вместо того чтобы развивать этот метод во всей полноте, мы продемонстрируем его на примере 2 из § 6.7 — на модели диффузионно контролируемых химических реакций. Для того чтобы решить систему уравнений (6.7.7), сначала нужно найти нормальные моды. Зная из § 5.7, что собственные значения действительны и неположительны, положим

$$p_n(t) = \varphi_n e^{-\lambda t}.$$

Величина φ_n должна быть собственным вектором основного кинетического уравнения (6.7.7); значит,

$$(2-\lambda)\varphi_n = \varphi_{n+1} + \varphi_{n-1} \quad (n = 2, 3, \ldots), \tag{6.8.1а}$$

$$(2-\lambda)\varphi_1 = \varphi_2 + \gamma\varphi_0, \tag{6.8.1б}$$

$$(\gamma-\lambda)\varphi_0 = \varphi_1. \tag{6.8.1в}$$

Первая строка представляет собой разностное уравнение с постоянными коэффициентами, которое можно решить стандартным способом (аналогичным введению плоских волн в дифференциальных уравнениях) с помощью анзаца $\varphi_n = z^n$, где z находится из решения следующего уравнения:

$$2 - \lambda = z + 1/z. \tag{6.8.2}$$

Это уравнение имеет два решения z_1, z_2 при $z_1 z_2 = 1$. Следовательно,

$$\varphi_n = C_1 z_1^n + C_2 z_2^n. \tag{6.8.3}$$

Для того чтобы уравнение (6.8.1а) удовлетворялось при всех указанных n, это выражение для φ_n должно быть справедливым для всех φ_n, т. е. для $n = 1, 2, 3, \ldots$. Оставшаяся величина φ_0 и константы C_1, C_2 подбирают так, чтобы удовлетворить двум другим уравнениям:

$$(2-\lambda)(C_1 z_1 + C_2 z_2) = C_1 z_1^2 + C_2 z_2^2 + \gamma\varphi_0, \tag{6.8.4а}$$

$$(\gamma-\lambda)\varphi_0 = C_1 z_1 + C_2 z_2. \tag{6.8.4б}$$

Исключая φ_0 и используя (6.8.2), получаем

$$-\frac{C_1}{C_2} = \frac{z_1 + (1-y)z_2 + y - 2}{z_2 + (1-y)z_1 + y - 2}.$$

Ограничения на допустимые значения λ получим, изучая поведение φ_n при больших n. Если два корня уравнения (6.8.2) действительны, то по крайней мере один из них должен иметь абсолютное значение, много большее единицы (исключая частные случаи $z_1 = z_2 = \pm 1$, описанные в следующем параграфе). Тогда (6.8.3) экспоненциально возрастает при больших n. *Физически* это означает, что плотность молекул A экспоненциально возрастает, что, вообще говоря, не запрещено, но не имеет отношения к диффузионно контролируемым химическим реакциям. *Математическая* причина для отбрасывания таких решений состоит в том, что оставшиеся решения образуют полную систему, т. е. их достаточно, чтобы воспроизвести любое начальное состояние, которым мы будем интересоваться.

Соответственно будем рассматривать только такие значения λ, для которых корни уравнения (6.8.2) комплексны. Поскольку они должны лежать на единичной окружности, можно положить

$$z_1 = e^{iq}, \quad z_2 = e^{-iq}, \quad 0 \leqslant q \leqslant \pi. \tag{6.8.5}$$

Следовательно,

$$\lambda = 2 - 2\cos q = 4\sin^2({}^1/_2 q). \tag{6.8.6}$$

Величина λ является действительной и $0 \leqslant \lambda \leqslant 4$. Далее, отношение

$$\frac{C_1}{C_2} = -\frac{2 - 2\cos q - \gamma + \gamma e^{-iq}}{2 - 2\cos q - \gamma + \gamma e^{iq}} \tag{6.8.7}$$

по модулю равно единице и поэтому его можно записать в виде $e^{2i\eta}$ с действительной функцией $\eta(q)$. Подстановка в (6.8.3) дает

$$\varphi_n^{(q)} = C\cos[qn + \eta(q)] \quad (n = 1,\ 2,\ 3,\ \ldots). \tag{6.8.8}$$

Это плоская волна со сдвигом фазы η, определяемым границей. Остальные компоненты для $n = 0$ получаются из (6.8.1в):

$$\varphi_0^{(q)} = -C\,\frac{\cos(q + \eta)}{2 - 2\cos q - \gamma}. \tag{6.8.9}$$

Резюме: для каждого q в интервале (6.8.5) мы нашли одну собственную функцию. Ее компоненты при $n > 0$ даются выражением (6.8.8), а компонента для $n = 0$ — выражением (6.8.9). Естественно, они определены с точностью до постоянного множителя C. Связанное с ними собственное значение определяется формулой (6.8.6).

Упражнение. Среди найденных здесь решений нет стационарного решения, упомянутого в § 6.7, хотя очевидно, что оно удовлетворяет (6.8.1). Где оно было потеряно?

Упражнение. Проверьте, что нули знаменателя в выражении (6.8.9) сокращаются с нулями числителя. Выведите альтернативное выражение

$$\varphi_0^{(q)} = \frac{C}{\gamma}\cos\eta. \tag{6.8.10}$$

Упражнение. Величина η определена с точностью до прибавления числа, кратного π. Покажите, что значение η можно сделать единственным, выбирая

$\eta(0)=0$ и делая аналитическое продолжение. Покажите, что аналитическая функция $\eta(q)$, полученная таким путем, является нечетной:

$$\eta(-q)=-\eta(q). \tag{6.8.11}$$

Упражнение. Покажите, что функция $S(q)\equiv e^{2i\eta(q)}$, определенная соотношением (6.8.7), обладает следующими свойствами, перекликающимися со свойствами S-матрицы *:

1) $S(q)^*=S(q)^{-1}=S(-q)$ для всех действительных q;

2) $S(q)$ голоморфна в верхней полуплоскости и стремится к конечному значению в пределе $\operatorname{Im} q\to\infty$.

Нам осталось показать, что найденные моды образуют полную систему. Для этого выберем нормировку $C=\sqrt{2/\pi}$ и докажем условие полноты (5.7.10). Сначала берем $m>0$, $n>0$ и доказываем, что

$$\frac{2}{\pi}\int_0^\pi \cos[qm+\eta(q)]\cos[qn+\eta(q)]\,dq=\delta_{nm}. \tag{6.8.12}$$

Используя (6.8.11), для левой части можно записать

$$\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi}\left(e^{iq(m+n)}e^{2i\eta(q)}+e^{iq(m-n)}\right)dq.$$

Второй член в подынтегральной функции есть желаемая δ_{mn}. Можно показать, что первый член обращается в нуль, если рассмотреть замкнутый контур в комплексной q-плоскости (рис. 15). Функция $e^{2i\eta(q)}$ является периодической и, согласно приведенному выше упражнению, голоморфной и ограниченной в верхней половине комплексной q-плоскости. Тогда из-за наличия множителя $e^{iq(n+m)}$ вклад от пунктирной линии (рис. 16) обращается в нуль, когда она сдвигается на бесконечность, а вклады от двух вертикальных прямых сокращаются вследствие периодичности. Это доказывает (6.8.12) для n, $m>0$.

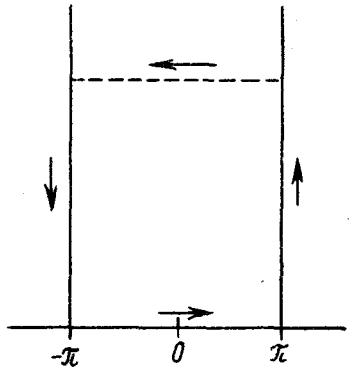

Рис. 15. Контур интегрирования в комплексной q-плоскости

Случай, когда n или m или оба они обращаются в нуль, требует отдельного доказательства. Вычисления в этом случае аналогичны вышеприведенным, и мы предоставляем их читателю.

---

* N. G. van Kampen and I. Oppenheim, J. Mathem. Phys. 13, 842 (1972). Такое использование S-матрицы для описания воздействия границы было распространено на гидродинамику Волинесом (P. G. Wolynes, Phys. Rev. A 13, 1235, 1976) и на газовую динамику Наказото (K. Nakazato, J. Phys. Soc. Japan, 43, 1154, 1977).

Теперь легко увидеть, что при $n > 0$ решение основного кинетического уравнения (6.7.7) с начальным значением $p_n(0) = \delta_{nm}$ имеет вид

$$p_n(t) = \int_0^\pi \varphi_n^{(q)} \varphi_m^{(q)} e^{-t(2-2\cos q)} \, dq. \tag{6.8.13а}$$

Это следует из общей формулы (5.7.11), поскольку в настоящем случае весовой множитель Φ_0 в знаменателе (5.7.11) постоянен при $n > 0$. Однако для $n = 0$ он равен $1/\gamma$, так что

$$p_0(t) = \gamma \int_0^\pi \varphi_0^{(q)} \varphi_m^{(q)} e^{-t(2-2\cos q)} \, dq. \tag{6.8.13б}$$

Уравнения (6.8.13) дают распределение вероятности молекулы при $t > 0$, когда известно, что она стартует из состояния m при $t = 0$. Например, если молекула в начальном состоянии находится в связанном состоянии $m = 0$, то вероятность того, что в момент времени она все еще будет (или вновь окажется) связанной, составляет

$$\gamma \int_0^\pi (\varphi_0^{(q)})^2 e^{-t(2-2\cos q)} \, dq = \frac{2}{\pi\gamma} \int_0^\pi \cos^2 \eta(q) \, e^{-4t \sin^2 \frac{1}{2} q} \, dq. \tag{6.8.14}$$

Упражнение. Найдите аналог (6.8.12) для $n = m = 0$.

Упражнение. Какова вероятность того, что молекула, находящаяся в связанном состоянии, будет находиться в нем, не покидая его в течение времени t?

Упражнение. Покажите, что в противоположность этому среднее время, соответствующее (6.8.14), бесконечно.

Упражнение. Решите граничную задачу (6.7.6) с поглощающей границей. Покажите, что для $c = 1$ решение совпадает с найденным с помощью принципа отражения (ср. с (6.7.12)).

Упражнение. Решите (6.7.13) с помощью метода, изложенного в настоящем параграфе.

Упражнение. В качестве модели диффузии в гравитационном поле возьмите асимметричное случайное блуждание (6.2.13) для $n = 0, 1, 2, \ldots$ с резкой отражающей границей.

Упражнение. Решите следующее основное кинетическое уравнение для случайного блуждания между двумя отражающими границами:

$$\begin{aligned} \dot{p}_0 &= p_2 - p_0, \\ \dot{p}_n &= p_{n+1} + p_{n-1} - 2p_n \quad (n = 1, 2, \ldots, N-1), \\ \dot{p}_N &= p_{N-1} - p_N. \end{aligned}$$

Поскольку область возможных значений теперь ограничена с двух сторон, приходим к уравнению для собственных значений q, которое можно решить. Убедитесь в том, что найдены все $N+1$ собственные функции.

6.9. НЕЛИНЕЙНЫЕ ОДНОШАГОВЫЕ ПРОЦЕССЫ

Когда функции $r(n)$ и $g(n)$ нелинейны по n, обычно невозможно * найти явное решение основного кинетического уравнения, кроме стационарного. Приближенное рассмотрение мы приведем в гл. 8, а систематический приближенный метод будет развит в гл. 9. Здесь же мы просто перечислим некоторые типичные примеры.

1. *Полупроводник с собственной проводимостью.* Валентная зона может вместить N электронов, зона проводимости — M. Когда $M \geqslant N$, может существовать $n=0, 1, 2, \ldots, N$ возбужденных электронов. Каждый из них может рекомбинировать, когда он встретит одну из n дырок; следовательно, $r(n)=\alpha n^2$. Каждый из $N-n$ оставшихся в валентной зоне электронов может совершить переход в одно из $M-n$ вакантных мест; следовательно, $g(n)=\beta(N-n)(M-n)$. Границы при $n=0$ и $n=N$ являются естественными. Основное кинетическое уравнение имеет вид

$$\dot{p}_n=\alpha(\mathbf{E}-1)n^2p_n+\beta(\mathbf{E}^{-1}-1)(N-n)(M-n)p_n. \qquad (6.9.1)$$

Стационарное решение (6.3.8) имеет вид

$$p_n^s=\mathrm{const}\binom{N}{n}\binom{M}{n}\left(\frac{\beta}{\alpha}\right)^n, \qquad (6.9.2)$$

которое является частным случаем гипергеометрического распределения. Оно совпадает с p_n^e при условии, что α и β связаны соотношением детального равновесия (6.4.4), где $h\nu$ — энергетическая щель, разностью энергий внутри каждой зоны пренебрегаем.

В случае фотопроводника β увеличивается на константу γ, пропорциональную интенсивности падающего света. Система больше не замкнута, и новая β уже не связана с α соотношением детального равновесия. Стационарное решение (6.9.2) уже больше не совпадает с термодинамически равновесным. Другое замечание состоит в том, что воздействие падающих фотонов можно представить с помощью простого добавления γ к вероятности генераций только при условии, что моменты времени, в которые фотоны попадают в фотопроводник, некоррелированы (*дробовой шум*). Когда они коррелированы, число n уже не является марковским процессом и необходимо более сложное описание (см. § 13.3).

2. *Диссоциация и рекомбинация двухатомного газа:* N_X атомов X и N_Y атомов Y образуют n молекул XY в объеме Ω. Предположим, что в этом объеме находится достаточно инертных молекул, которые сталкиваются с молекулами вещества, и вероятность диссоциации за единичное время оказывается равной $r(n)=\alpha n$. Для рекомбинации атом X должен встретиться с атомом Y; следовательно, $g(n)=\beta(N_X-n)(N_Y-n)$. При $n=0$ и при меньшем из N_X или N_Y

* То есть известные методы не работают, как это показано явно в работе: N. Dubin, A Stochastic Model for Immunological Feedback in Carcinogenesis (Lecture Notes in Biomathematics Nr. 9; Springer, Berlin, 1976).

имеются естественные границы. Тогда

$$p_n^s = \text{const} \cdot \binom{N_X}{n} \binom{N_Y}{n} n! \left(\frac{\beta}{\alpha}\right)^n. \tag{6.9.3}$$

Это распределение совпадает с p_n^e, найденным из обычной статистической механики, при условии, что

$$\frac{\beta}{\alpha} = \frac{1}{\Omega} \left(\frac{m_X + m_Y}{m_X m_Y}\right)^{3/2} (2\pi kT) \frac{\zeta_{XY}}{\zeta_X \zeta_Y},$$

где ζ обозначает внутреннюю функцию распределения.

3. *Химическая реакция.* Рассмотрим автокаталитическую реакцию

$$A + X \underset{k'}{\overset{k}{\rightleftarrows}} 2X, \tag{6.9.4}$$

где вещество A находится в таком избытке, что количество n_A можно рассматривать как постоянное. Если Ω — объем, n_A/Ω — концентрация вещества A, то мы имеем $g_n = k(n_A/\Omega)\, n$, где k — константа реакции, которую обычно вводят в химической кинетике. Аналогично,

$$r_n = (k'/\Omega)\, n\,(n-1),$$

потому что две молекулы X должны столкнуться для того, чтобы одна из них исчезла.

Основное кинетическое уравнение имеет вид

$$\dot{p}_n = \frac{k'}{\Omega} (\mathbf{E} - 1)\, n\,(n-1)\, p_n + \frac{k}{\Omega} n_A (\mathbf{E}^{-1} - 1)\, n p_n. \tag{6.9.5}$$

Его стационарное решение представляет собой равновесное распределение

$$p_n^e = \frac{1}{n!} \left(\frac{k n_A}{k'}\right)^n \exp\left[-\frac{k n_A}{k'}\right]. \tag{6.9.6}$$

Это распределение Пуассона. Его среднее

$$\langle n \rangle^e = k n_A / k'$$

совпадает с макроскопическим значением, которое дается законом действующих масс. Более общие химические реакции рассмотрены в гл. 7.

4. *Рост соперничающей популяции.* Пусть n — число индивидуумов в популяции бактерий определенного вида. Каждая особь может умереть с вероятностью α и образовать новую особь за счет деления с вероятностью β за единичное время; α и β полагают фиксированными и не зависящими от возраста особи, в противном случае процесс нельзя было бы считать марковским. Соперничество приводит к дополнительной смертности, и вероятность гибели особи $\gamma(n-1)$ пропорциональна имеющемуся количеству других особей. В макро-

скопическом уравнении для скорости можно заменить $n-1$ на n:

$$\dot{n}=(\beta-\alpha)\,n-\gamma n^2. \tag{6.9.7}$$

Это соотношение называют *уравнением Мальтуса — Верхульста*. Стохастической формулировкой этой модели является одношаговый процесс с

$$g(n)=\beta n, \quad r(n)=\alpha n+\gamma n(n-1). \tag{6.9.8}$$

Следовательно, основное кинетическое уравнение имеет вид

$$\dot{p}_n=\alpha(\mathbf{E}-1)\,np_n+\beta(\mathbf{E}^{-1}-1)\,np_n+\gamma(\mathbf{E}-1)\,n(n-1)\,p_n. \tag{6.9.9}$$

Мы продолжим изучение этого уравнения в § 11.4.

5. *Явление сверхсветимости* связано с распадом очень высоко лежащего возбужденного коллективного состояния набора атомов путем последовательного испускания фотонов. Вероятность находиться в состоянии $n=0,\ 1,\ 2,\ \ldots$ подчиняется основному кинетическому уравнению *

$$\dot{p}_n=(\mathbf{E}-1)\,r(n)\,p_n \quad (n=0,\ 1,\ 2,\ \ldots,\ N-1), \tag{6.9.10а}$$

$$\dot{p}_N=-r(N)\,p_N. \tag{6.9.10б}$$

Заметьте, что шаги происходят только в одну сторону, как в радиоактивном распаде («процесс одной только гибели»). Вследствие этого в принципе имеется возможность получить явные выражения для собственных функций и собственных значений, хотя и возникают трудности для случая, когда $r(n)$ принимает одинаковые значения в двух разных точках n.

6. «*Диод Алкемейда*» **. Модель такого диода представлена на рис. 16. Он целиком находится в тепловом равновесии, но рабочие функции W_1, W_2 обеих диодных пластин различны, в результате имеется контактная разность потенциалов V_c. Соответственно равновесный заряд на конденсаторе равен V_c/C. Пусть n — избыток электронов на левой пластине конденсатора над этим равновесным значением, а $V=-en/C$ — соответствующий избыточный потенциал. Электроны, которые перепрыгивают слева направо, встречают пороговый потенциал W_1, так что значение r_n постоянно и равно A. Величина A дается формулой Ричардсона. Электроны, перепрыгивающие справа налево, встречают потенциал $W_2+V_c+V=W_1+V$; следовательно,

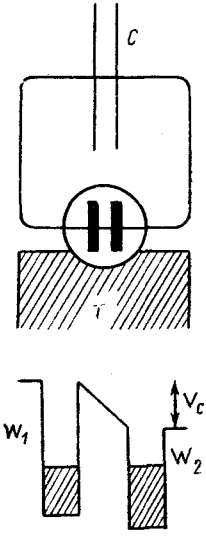

Рис. 16. Диод Алкемейда

$$r_n=A, \quad g_n=A\exp\left[-\frac{e^2}{kTC}\,n\right]. \tag{6.9.11}$$

* J. H. Weiss, J. Statist. Phys., 6, 179 (1972).
** Ibidem.

Эти соотношения остаются справедливыми при $n < 0$ при условии, что V не превышает V_c.

Примечание. Разница между линейными и нелинейными одношаговыми процессами имеет большее физическое значение, чем это следует из математического различия между линейными и нелинейными функциями $r(n)$ и $g(n)$. Во многих случаях n означает количество объектов, таких, как электроны, кванты или бактерии. Основное кинетическое уравнение для p_n линейно по n, когда эти объекты не взаимодействуют друг с другом, но следуют своей собственной случайной предыстории независимо от других. Нелинейный член в уравнении означает, что судьба каждого объекта подвержена воздействию общего количества других, в частности как это продемонстрировано выше на примере 4. Тогда линейные основные кинетические уравнения играют роль, аналогичную идеальному газу в теории газов. Этот вопрос более формально описывается в § 7.6.

Упражнение. Полупроводник n-типа, не слишком нагруженный, можно описать с помощью (6.9.1) с $M \gg N$. Перейдите к соответствующему пределу $M \to \infty$ и найдите соответствующее основное кинетическое уравнение и равновесное распределение.

Упражнение. При слабом возбуждении (низкие температуры) в (6.9.1) можно перейти к пределу $M \to \infty$, $N \to \infty$. Получающееся основное кинетическое уравнение (с новым β) имеет вид

$$\dot{p}_n = \alpha (\mathbf{E} - 1) n^2 p_n + \beta (\mathbf{E}^{-1} - 1) p_n. \tag{6.9.12}$$

Оно будет использовано в § 9.2 в качестве примера. Выведите его, найдите равновесное распределение и соотношение между α и β.

Упражнение. В примере 2 перейдите к пределу $N_Y \to \infty$. Получающееся основное кинетическое уравнение линейно и его можно решить.

Упражнение. Покажите, что среднее от (6.9.6) действительно совпадает с величиной, дающейся законом действия масс.

Упражнение. Покажите, что собственные значения (6.9.10) равны $\lambda_n = r(n)$, и найдите соответствующие собственные функции, когда вырождения не происходит. В модели Вейса $r(n) = n(N-n)$, так что собственные выражения дважды вырождены. Как можно справиться с этой трудностью?

Упражнение. Следующая модификация модели урны Эренфеста нелинейна *. Имеются две урны, каждая из которых содержит смесь черных и белых шаров. Каждую секунду я достаю одной рукой шар из одной урны, а другой рукой — шар из другой урны и перекладываю их. Запишите разностное уравнение для вероятности $p_n(t)$ получить n белых шаров в левой урне.

Упражнение. Найдите стационарное решение (6.9.9) и выведите, что всякая популяция в конце концов вымрет **. Как это можно было бы предсказать с помощью интуиции?

6.10. ПРОБЛЕМА ПЕРВОГО ПРОХОЖДЕНИЯ

Для простоты сначала рассмотрим случай неограниченного блуждания из § 6.2. Можно задаться следующим вопросом. Предположим, что частица, совершающая случайные блуждания, стартует с участка m при $t = 0$; сколько ей потребуется времени, чтобы впервые достичь заданного участка N? Естественно, это время первого прохождения будет различным для разных реализаций этого блуждания и, сле-

---

* P. S. de Laplace, Theorie analytique des probabilities (3 rd ed., Courcier, Paris, 1820), p. 292.

** M. Malek-Mansour and G. Nicolis, J. Statist. Phys., 13, 197 (1975).

довательно, является случайной переменной. Нам надо найти ее распределение вероятности, в частности среднее время первого прохождения *.

Пусть $q_n(t)$ — вероятность того, что в момент времени t блуждающая частица находится на участке n, *не побывав на участке* N. Это $q_n(t)$ можно представить как плотность ансамбля частиц, совершающих случайные блуждания, которые все стартуют из m при $t=0$ и движутся независимо, и каждый раз, когда одна из них попадает в N, она выходит из игры, т. е. не дает больше вклада в плотность q_N. Понятно, это означает, что $q(t)$ удовлетворяет основному кинетическому уравнению для случайного блуждания с поглощающей ямой на участке N. Чтобы закрепить эту мысль, возьмем $m<N$ и запишем

$$\dot{q}_n = q_{n+1} + q_{n-1} - 2q_n \quad (n \leqslant N-2), \tag{6.10.1а}$$

$$\dot{q}_{N-1} = q_{N-2} - 2q_{N-1}. \tag{6.10.1б}$$

Эти уравнения нужно решить с заданным начальным условием $q_n(0) = \delta_{n,m}$.

Тогда число блуждающих частиц, которые к моменту времени t попали на участок N, дается величиной $q_*(t)$, где

$$\dot{q}_* = q_{N-1}. \tag{6.10.2}$$

Распределение отрезков времени, характеризующих первое прохождение, дается числом, а вернее, долей частиц, совершающих случайное блуждание, которые попали на участок N за время, прошедшее между t, $t+\mathrm{d}t$. Пусть эта доля равна $f_m(t)\,\mathrm{d}t$. Тогда $f_m(t)$ как раз и есть величина (6.10.2). Тогда *проблема первого прохождения совпадает с граничной задачей* (6.10.1) с поглощающей границей. Ограничения на случайное блуждание не являются необходимыми. Для произвольной одношаговой задачи (6.1.2) проблема первого прохождения эквивалентна следующей задаче с поглощающей границей:

$$\dot{q}_n = (\mathbf{E}-1)\, r_n q_n + (\mathbf{E}^{-1}-1)\, g_n q_n \quad (n \leqslant N-2), \tag{6.10.3а}$$

$$\dot{q}_{N-1} = -r_{N-1} q_{N-1} + g_{N-2} q_{N-2} - g_{N-1} q_{N-1}. \tag{6.10.3б}$$

Решив это уравнение с начальным условием $q_n(0) = \delta_{n,m}$, получаем

$$f_m(t) = \dot{q}_*(t) = g_{N-1} q_{N-1}. \tag{6.10.4}$$

Заметим, что (6.10.3) можно интерпретировать как исходный одношаговый процесс, обрезанный на участке N с граничным усло-

---

* Это является центральной темой в теории марковских цепей, см.: J. H. B. Kemperman, The Passage Problem for a Stationary Markov Chain (University of Chicago Press, Chicago, 1961); Keilson, Markov Chain Models (Springer, New York, 1979).

вием $q_N = 0$. Полная вероятность когда-либо достичь N есть

$$\pi_{N,m} = \int_0^\infty f_m(t)\,dt = q_*(\infty) = 1 - \sum_{-\infty}^{N-1} q_n(\infty). \qquad (6.10.5)$$

Если она равна единице, то среднее время первого прохождения

$$\tau_{N,m} = \int_0^\infty t f_m(t)\,dt = \sum_{-\infty}^{N-1} \int_0^\infty q_n(t)\,dt. \qquad (6.10.6)$$

В § 11.2 будет показано, что это среднее можно найти явно, не решая полного основного кинетического уравнения. Приведем несколько примеров, приводящих к проблеме первого прохождения.

1. Диффузионно контролируемая реакция в § 6.7 в пределе $\chi = \infty$: молекула, попавшая на участок $n = 0$ исчезает навсегда.

2. Число особей n в популяции: когда $n = 0$, популяция вымирает. Аналогичные уравнения применимы к автокаталитическим реакциям, таким, как

$$A + X \rightleftarrows 2X. \qquad (6.10.7)$$

Когда число n молекул X обращается в нуль, они перестают вырабатываться.

3. Двухатомная молекула может иметь последовательность колебательных уровней $n = 0, 1, 2, \ldots, N$. Последовательные столкновения заставляют ее перескакивать с уровня на уровень, вперед и назад, но если она достигает $(N+1)$-го уровня, она диссоциирует. Эта задача изложена более подробно в § 7.5.

4. Нейрон получает последовательные случайные электрохимические импульсы, пока его потенциал не достигнет порогового значения, при котором нейрон разряжается *.

Упражнение. Запишите те же самые уравнения для случая $N > m$.

Упражнение. Резкая поглощающая граница (6.7.6) содержит один свободный параметр c, *являющийся скоростью, с которой частицы исчезают с крайнего участка*. В задачах первого прохождения этот параметр фиксирован самим уравнением. Покажите, что (6.7.6) описывает проблему первого прохождения для случайного блуждания, когда либо $c = 1$; либо $c = \infty$. Эти случаи в § 6.2 мы называли «полностью поглощающими».

Упражнение. Решите проблему первого прохождения для симметричного случайного блуждания. Покажите, что любая граница достигается с вероятностью $\pi_{N,m} = 1$, но среднее время первого прохождения бесконечно. Заметьте, что это также отвечает на вопрос, как долго азартный игрок с начальным капиталом m может подбрасывать монету, пока не разорится.

Упражнение. Решите проблему первого прохождения для асимметричного случайного блуждания.

Упражнение. Обозначьте $\mathbf{V}$ оператор правой части (6.10.3). Тогда

$$f_m(t) = g_{N-1}(e^{t\mathbf{V}})_{N-1,m}. \qquad (6.10.8)$$

---

* A. V. Holden, Models of Stochastic Activity of Neurones (Lecture Notes in Biomathematics 12, Springer, Berlin, 1976), Ch. 7.

Часто используют следующий альтернативный способ вычисления функций распределения $f_m(t)$ времени первого прохождения. Возьмите одношаговый процесс и положите $m \leqslant N$. Тогда, по определению, $f_N(t)=0$ при $t>0$. Далее, $f_{N-1}(0)=g_{N,1}$, потому что частица, стартовавшая из $N-1$ в момент $t=0$, с вероятностью $g_{N-1}\,\mathrm{d}t$ достигнет N в течение следующего отрезка времени $\mathrm{d}t$. Однако при всех других m для этого потребуются по крайней мере два шага, поэтому вероятность для них оказаться там же в течение $\mathrm{d}t$ оказывается порядка $(\mathrm{d}t)^2$ или выше. Следовательно, $f_m(0)=0$ для $m \leqslant N-2$.

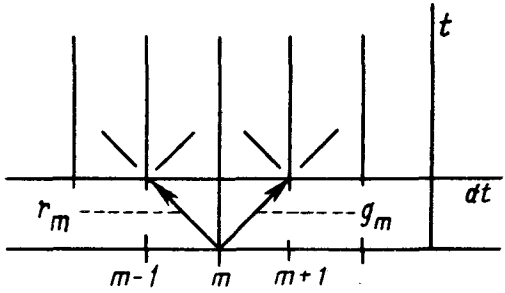

Рис. 17. Вывод обратного уравнения для распределения $f_m(t)$ времени первого прохождения

Теперь рассмотрим малый временной интервал $(0, \mathrm{d}t)$ (рис. 17). В течение этого времени точка, стартовав из m ($\leqslant N-1$), может перепрыгнуть в $m+1$ с вероятностью $g_m\,\mathrm{d}t$, в $m-1$ с вероятностью $r_m\,\mathrm{d}t$ или остаться в m с вероятностью $1-g_m\,\mathrm{d}t-r_m\,\mathrm{d}t$. Отсюда находим

$$f_m(t)=(1-g_m\,\mathrm{d}t-r_m\,\mathrm{d}t)\,f_m(t-\mathrm{d}t)+ \\ +g_m\,\mathrm{d}t\,f_{m+1}(t-\mathrm{d}t)+r_m\,\mathrm{d}t\,f_{m-1}(t-\mathrm{d}t).$$

Тогда для $m \leqslant N-1$ получаем

$$\dot{f}_m=g_m f_{m+1}+r_m f_{m-1}-(g_m+r_m)\,f_m=g_m(\mathbf{E}_m-1)\,f_m+r_m(\mathbf{E}_m^{-1}-1)\,f_m. \tag{6.10.9}$$

Это соотношение называют *обратным уравнением*. Для наших целей его нужно решить с граничным условием $f_N(t)=0$ и начальным условием $f_m(0)=g_{N-1}\delta_{m,N-1}$.

Упражнение. Покажите, что матрица в правой части уравнения (6.10.9) является транспонированной матрицей $\tilde{\mathbf{V}}$ уравнения (6.10.3) *. Тогда решение уравнения (6.10.9)

$$f_m(t)=(e^{t\tilde{\mathbf{V}}})_{m,N-1}\,g_{N-1} \tag{6.10.10}$$

идентично решению (6.10.8) уравнения (6.10.3).

Упражнение. Рассмотрите двухшаговый случайный процесс: в любой момент времени имеются вероятности сделать один шаг влево или вправо. Снова найдите уравнение для $f_m(t)$.

---

* Этот факт применил к диффузионно контролируемым реакциям Тачия: M. Tachiya, J. Chem. Phys., 69, 2375 (1978). Аналогичная задача была рассмотрена Розенстоком: H. B. Rosenstock, J. Mathem. Phys., 21, 1643 (1980).

Третий метод основан на использовании «уравнений восстановления». Пусть $p_{n,m}(t)$ — решение основного кинетического уравнения для неограниченного одношагового процесса с начальным условием $p_{n,m}(0)=\delta_{n,m}$. Пусть $q_{n,m}$ — решение с тем же начальным условием того же самого начального блуждания, но обрезанного поглощающей границей при $N>m$, а $f_m(t)\,\mathrm{d}t$ — снова вероятность первого прохождения между t и $t+\mathrm{d}t$. Установим тождество, связывающее эти три величины.

Если n — любой участок с $n\leqslant N$, то частица, стартуя из m может попасть в n либо непосредственно, т. е. без прохода через N, либо она может в некоторый момент времени, скажем между t' и $t'+\mathrm{d}t'$, сначала попасть в состояние N. В последнем случае она имеет вероятность $p_{n,N}(t-t')$ попасть затем в n. Это выражается тождеством

$$p_{n,m}(t)=q_{n,m}(t)+\int_0^t f_m(t')\,\mathrm{d}t'\,p_{n,N}(t-t'), \tag{6.10.11}$$

которое называют *уравнением восстановления* *.

В этом уравнении возьмем $n=N$. Тогда, по определению, $q_{N,m}(t)=0$, и мы получаем

$$p_{N,m}(t)=\int_0^t f_m(t')\,p_{N,N}(t-t')\,\mathrm{d}t'. \tag{6.10.12}$$

Поскольку решение начального одношагового процесса известно, это выражение является интегральным уравнением для $f_m(t)$. Его легко решить с помощью преобразования Лапласа. Полагаем

$$\int_0^\infty \mathrm{e}^{-st}p_{n,m}(t)\,\mathrm{d}t=\hat{p}_{n,m}(s), \tag{6.10.13}$$

$\hat{f}_m(s)$ определяем аналогично. Тогда (6.10.12) сводится к

$$p_{N,m}(s)=\hat{f}_m(s)\,\hat{p}_{N,N}(s),$$

а мы приходим к тождеству

$$\hat{f}_m(s)=\frac{\hat{p}_{N,m}(s)}{\hat{p}_{N,N}(s)}, \tag{6.10.14}$$

которое выражает распределение времени первого прохождения в N со стартовой точкой в m через решение начального основного кинетического уравнения для одношагового процесса.

Упражнение. Примените (6.10.14) для нахождения распределения времени первого прохождения для симметричного блуждания и сверьте полученный результат с результатом, найденным ранее в упражнении.

---

* D. R. Cox, Renewal Theory (Methuen, London, 1962).

Упражнение. Покажите, что $\hat{p}_{n,m}(s)$ удовлетворяет разностному уравнению

$$-\delta_{n,m}+s\hat{p}_{n,m}(s)=(\mathbf{E}-1)\,r_n\hat{p}_{n,m}(s)+(\mathbf{E}^{-1}-1)\,g_n\hat{p}_{n,m}(s). \qquad (6.10.15)$$

Упражнение. Выведите соотношение

$$\hat{f}(s)=\frac{\hat{p}_{N+1,m}(s)}{1+\hat{p}_{N+1,N}(s)}. \qquad (6.10.16)$$

Упражнение. Как модифицируется тождество (6.10.11), если $m<N<n$?

Упражнение. Предположим, что потенциал на мембране нейрона является одношаговым процессом со значениями $n=0, 1, 2, \ldots, N-1$, а когда достигаются значения N, нейрон разряжается и его потенциал падает до нуля. Покажите, что распределение времени разряда дается формулой

$\hat{f}(s)=\hat{p}_{N,m}(s)/\hat{p}_{N,0}(s)$.

Упражнение. Из (6.10.14) следует, что

$$\hat{f}(s)=\left(\frac{1}{s-\mathbf{W}}\right)_{N,m}\Big/\left(\frac{1}{s-\mathbf{W}}\right)_{N,N}. \qquad (6.10.17)$$

Если $\mathbf{W}$ — финитная матрица, то все, что нужно сделать,— это расписать два минора матрицы $s-\mathbf{W}$. Примените это для системы с двумя состояниями и покажите, что получающееся в результате среднее время прохождения является величиной, обратной соответствующей вероятности перехода, как этого и следовало ожидать.

Упражнение. Случайное блуждание с границей $n=0$, на которой доля α является поглощающей, описывается с помощью выражений

$$\dot{p}_n=p_{n+1}+p_{n-1}-2p_n\ (n\geqslant 2),$$
$$\dot{p}_1=p_2+(1-\alpha)\,p_0-2p_1,$$
$$\dot{p}_0=p_1-p_0.$$

Для частицы, стартующей из n_0, скорость поглощения есть $R_\alpha(t\mid n_0)=\alpha p_{0,n_0}(t)$. Проверьте уравнение восстановления

$$R_\alpha(t\mid n_0)=\alpha R_1(t\mid n_0)+(1-\alpha)\int_0^t R_\alpha(t-t'\mid 1)\,R_1(t'\mid n_0)\,dt',$$

где $R_1(t\mid n_0)$ — распределение времени первого прохождения. (Ср. J. B. Pedersen. Chem. Phys., **72**, 3904 (1980.)

ГЛАВА 7

ХИМИЧЕСКИЕ РЕАКЦИИ

Химические реакции дают широкое поле приложений для стохастических методов, некоторые из них мы уже использовали в качестве примеров. Эта глава немного отклоняется от основной линии книги, ее цель — обеспечить твердую основу таких приложений. Последние два параграфа посвящены темам, представляющим более общий интерес, однако изложенный в них материал легче сформулировать в химическом контексте.

7.1. КИНЕМАТИКА ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ

Рассмотрим замкнутый объем Ω, содержащий смесь химических веществ X_j $(j=1, 2, \ldots, J)$.

Пусть n_j — число молекул вещества X_j. Набор $\{n_j\}$ удобно представить геометрически с помощью вектора $\mathbf{n}$ в J-мерном пространстве состояний. Целые значения n_j образуют решетку. Каждый узел решетки в «октанте» неотрицательных значений соответствует состоянию смеси, и наоборот (рис. 18).

Когда происходит химическая реакция, состояние смеси изменяется. Типичная реакция определяется набором стехиометрических коэффициентов s_j, r_j в виде

$$s_1X_1+s_2X_2+\ldots\rightarrow r_1X_1+r_2X_2+\ldots. \qquad (7.1.1)$$

Обе части формулы можно записать как сумму по всем индексам j, если допускаются нулевые значения коэффициентов s_j и r_j. Если для какого-либо k выполняется условие $s_k=r_k\neq 0$, то соответствующее вещество X_k является катализатором. Если $r_k>s_k>0$, то X_k является автокатализатором. До сих пор s_j и r_j были определены с точностью до общего множителя, но теперь давайте договоримся для s_j брать то число молекул, которое действительно необходимо для вступления в реакцию при их столкновении. Реакции, которые происходят через промежуточные шаги (цепные реакции), нужно записывать как последовательность простых реакций, вызванных столкновениями молекул, а промежуточные продукты реакции следует включить как отдельные компоненты в веществе X_j. Поскольку трехчастичные столкновения редки, на практике встречаются только реакции, у которых $\sum s_j$ равна 1, или 2, или, возможно, 3, если присутствует катализатор. Но настоящее теоретическое рассмотрение не ограничено этими случаями *.

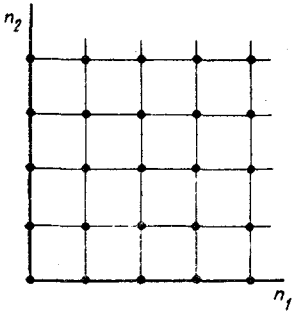

Рис. 18. Пространство состояний бинарной смеси

Каждый акт реакции типа (7.1.1) меняет состояние $\{n_j\}$ смеси на $\{n_j+r_j-s_j\}$. В геометрическом представлении это означает, что он изменяет вектор состояния $\mathbf{n}$, добавляя к нему вектор с компонентами $v_j=r_j-s_j$. Когда происходит реакция, вектор состояния пробегает последовательность узлов решетки, лежащих на прямой. Эта прямая не может простираться до бесконечности и, следовательно, должна оканчиваться на одной из границ физического октанта.

* Наше описание в значительной мере является идеализацией действительных химических реакций, как это напр. описывается в работе: J. B. Anderson, Advances in Chemical Physics, 41 (I. Prigogine and S. A. Rice eds., Wiley, New York, 1980).

С реакцией (7.1.1) связана обратная реакция

$$\sum r_j X_j \rightarrow \sum s_j X_j. \tag{7.1.2}$$

Воздействие этой реакции на вектор состояния приводит к вычитанию из него $\mathbf{v}$. Тогда, стартуя с начального состояния $\mathbf{n}^0$, обе реакции вместе приводят к тому, что вектор состояния движется по дискретной цепочке узлов решетки, лежащих на прямой между двумя границами физического октанта. Доступными точками являются

$$\mathbf{n} = \mathbf{n}^0 + \xi \mathbf{v}, \tag{7.1.3}$$

где ξ принимает все целые значения, лежащие между верхней и нижней границами.

Теперь рассмотрим другую реакцию s'_j, r'_j и будем считать, что возможна и обратная ей реакция. Становится доступной вторая цепочка узлов решетки, начинающаяся в $\mathbf{n}^0$. Совместно с предыдущей реакцией становится достижимой сеть точек, а именно

$$\mathbf{n}^0 + \xi \mathbf{v} + \xi' \mathbf{v}' \quad (\xi,\ \xi' = \ldots,\ -1,\ 0,\ 1\ \ldots). \tag{7.1.4}$$

Если таким путем учесть все возможные реакции, образуется подрешетка точек, доступных из $\mathbf{n}^0$. Однако понятно, что она не может покрывать весь октант, потому что $\sum_j n_j$ ограничена.

Если реакция происходит в замкнутом сосуде, то не существует другого способа изменения n_j. Значит, эта ограниченная подрешетка представляет собой множество доступных состояний системы. Физический октант распадается на такие подрешетки, и система не может выйти за пределы той подрешетки, которой принадлежит ее начальное состояние $\mathbf{n}^0$. В открытых системах имеются добавочные возможности изменения $\mathbf{n}$; они будут рассмотрены в § 7.3.

Существует возможность параметризовать подрешетку доступных состояний способом, указанным в (7.1.4). Каждая возможная реакция ρ обладает вектором $\mathbf{v}^{(\rho)}$. Все узлы решетки, доступные из $\mathbf{n}^0$, по построению имеют вид

$$\mathbf{n} = \mathbf{n}^0 + \sum_\rho \xi_\rho \mathbf{v}^{(\rho)}. \tag{7.1.5}$$

Каждый параметр ξ_ρ принимает целые значения $\ldots, -2, -1, 0, 1, 2, \ldots$; его называют *степенью продвижения*, потому что он показывает, как далеко продвинулась реакция *.

Значения $\{\xi_\rho\}$ ограничены требованием $\mathbf{n}_j \geqslant 0$ для всех j, но в следующем параграфе мы покажем, что это ограничение не вызывает трудностей.

---

* Это понятие было введено Де'Дондером, Th. De'Donder, L'affinite (Gauthier—Villars, Paris 1927). Предлагались и другие названия: «прогрессивная переменная» [De Groot and Mazur, p. 199], «степень распространения реакции» G. R. Gavalas, Nonlinear Differential Equations of Chemically Reacting Systems (Springer, Berlin, 1968) и «параметр реакции» [O. J. Heilmann, Kong. Danske Videnske. Selsk. Mat.—fys. Medd. 38, noll (1972)].

Сначала предположим, что представление (1.5) единственно в том смысле, что каждая доступная точка $\mathbf{n}$ для заданного $\mathbf{n}^0$ может быть представлена с помощью единственного набора значений $\{\xi_\rho\}$. В этом случае (7.1.5) отображает подрешетку доступных состояний на решетку целых значений в пространстве с координатами ξ_ρ. Каждый узел решетки в доступной части этого пространства соответствует одному и только одному состоянию смеси. Каждый акт реакции соответствует единичному шагу вдоль одной из координатных осей ξ.

К сожалению, у нас нет оснований считать соотношение (7.1.5) единственным. С таким же успехом могут образоваться два разных набора ξ_ρ, ведущие из $\mathbf{n}^0$ в одно и то же состояние $\mathbf{n}$. Это означает, что должен существовать набор целых чисел ξ_ρ, не все из которых равны нулю, таких, что

$$\sum_\rho \xi_\rho v^{(\rho)} = 0. \tag{7.1.6}$$

Если это так, то все же можно найти меньший набор векторов решетки $\mathbf{w}^{(\sigma)}$, такой, что каждая точка подрешетки доступных состояний может быть единственным образом представлена соотношением

$$\mathbf{n} = \mathbf{n}^0 + \sum_\sigma \eta_\sigma \mathbf{w}^{(\sigma)} \tag{7.1.7}$$

с целыми η_σ. Тогда каждый узел решетки в пространстве с координатами η_σ снова соответствует одному и только одному состоянию смеси. Однако если в ξ-пространстве реакции соответствуют единичным шагам, то в η-пространстве — нет. Поэтому мы практически ничего не выигрываем по сравнению с начальным представлением в пространстве состояний векторов $\mathbf{n}$.

Реакции, которые могут происходить в замкнутом сосуде, ограничены законами сохранения участвующих в них атомов. Пусть силовая α обозначает разные виды атомов. Предположим, что вещество X_j состоит из m_j^α атомов вида α, где $m_j^\alpha = 0, 1, 2, \ldots$. Тогда стехиометрические коэффициенты (7.1.1) для каждого α удовлетворяют соотношениям

$$\sum_j s_j m_j^\alpha = \sum r_j m_j^\alpha \quad \text{или} \quad \mathbf{v} \cdot \mathbf{m}^\alpha = 0.$$

Так как это выполняется для всех реакций, то подрешетка доступных состояний полностью лежит на сечении гиперплоскостью, заданной выражением

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{m}^\alpha = A^\alpha, \tag{7.1.8}$$

где A^α — полное число доступных атомов α.

Все законы сохранения (7.1.8) не должны быть независимы. Если группа разных атомов остается вместе при всех реакциях, то это приводит к единственному закону сохранения. Например, реакция

$$2NO + Cl_2 \rightleftarrows 2NOCl$$

включает в себя три вида молекул, но законы сохранения для N и O совпадают.

С другой стороны, кроме законов сохранения числа атомов могут существовать и другие законы сохранения. Например, если X_k участвует только как катализатор, то n_k сохраняется само по себе.

Все законы сохранения совместно определяют линейное подпространство узлов решетки в полном пространстве состояний. Доступное подпространство лежит в этом подпространстве и обычно совпадает с ним, но это не всегда так. Контрпримером может служить реакция

$$2X \rightleftarrows 2Y,$$

в которой две молекулы X при столкновении могут превратиться в разные модификации Y.

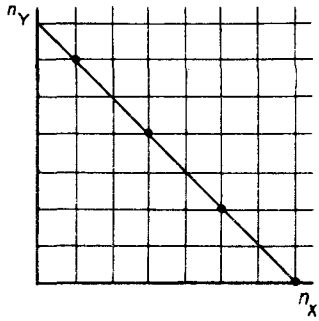

Рис. 19. Доступные состояния для реакции $2X \rightleftarrows 2Y$ при $A=7$

Закон сохранения $n_X + n_Y = A$ определяет прямую в двумерном пространстве состояний (рис. 19), но только каждый второй узел решетки доступен из заданного $\mathbf{n}^0$.

Пример. Пусть X_i — мономер, а X_j — молекула полимера, состоящая из j таких мономеров. Предположим, что полимеры, максимальная длина которых ограничена величиной J, могут объединяться и разделяться:

$$X_i + X_j \rightleftarrows X_{i+j}, \quad (i\ j \geqslant 1,\ i+j \leqslant J).$$

Имеется $[J/2](J-[J/2])$ реагирующих пар *. С другой стороны, имеется J компонент, дающих вклад в один закон сохранения:

$$\sum_{j=1}^{J} jn_j = A.$$

Решетка доступных состояний лежит на гиперплоскости размерности $(J-1)$ в J-мерном пространстве состояний. Понятно, что ξ_ρ не может быть независимым, когда

$$[J/2](J-[J/2]) > J-1 \quad \text{или} \quad J \geqslant 4.$$

В частности, для $J \geqslant 4$ возможны четыре реагирующие пары:

$$X_1 + X_1 \rightleftarrows X_2,$$
$$X_1 + X_2 \rightleftarrows X_3,$$
$$X_1 + X_3 \rightleftarrows X_4,$$
$$X_2 + X_2 \rightleftarrows X_4.$$

Предположим, что сначала имеется только вещество X, так что $n^0 = \{n^0, 0, 0, 0\}$. Тогда

$$n_1 = n_1^0 - 2\xi_1 - \xi_2 - \xi_3,$$
$$n_2 = \xi_1 - \xi_2 - \xi_4,$$
$$n_3 = \xi_2 - \xi_3,$$
$$n_4 = \xi_3 + \xi_4.$$

* $[J/2]$ — это целая часть от $J/2$, т. е. $[J/2] = J/2$, когда число J четно и $[J/2] = (J-1)/2$, когда J нечетно.

Таким образом, четыре переменные n_j определяются четырьмя ξ_ρ, но обратное неверно, поскольку n_j тождественно удовлетворяет соотношению

$$n_1+2n_2+3n_3+4n_4=n_1^0.$$

Упражнение. Обоснуйте, что в (7.1.1) нужно брать $r_i < s_i$, по крайней мере для одного i, и что, следовательно, реакция должна прекратиться на той стороне октанта, где $n_i=0$ (если только она уже не остановилась раньше на какой-либо другой стороне.)

Упражнение. Изобразите пространство состояний и решетку доступных состояний для реакции

$$H_2+I_2 \rightleftarrows 2HI. \tag{7.1.9}$$

Обозначьте на картинке законы сохранения и параметр ξ.

Упражнение. Проанализируйте тем же способом (хотя и без рисунка) схему реакции для $H_2+Br_2 \rightleftarrows 2HBr$:

$$Br_2+M \rightleftarrows 2Br+M,$$
$$Br+H_2 \rightleftarrows HBr+H,$$
$$H+Br_2 \rightleftarrows HBr+Br.$$

Символом M обозначен некоторый инертный катализатор.

Упражнение. Если X_1 участвует исключительно в качестве катализатора, то его можно исключить, рассмотрев только лишь пространство состояний X_2, X_3, ... Покажите, что это не влияет ни на ξ_ρ, ни на законы сохранения.

Упражнение. Докажите, что любую подрешетку можно представить с помощью (7.1.7) при определенном выборе $w^{(\sigma)}$. Указание. В качестве $w^{(\sigma)}$ выберите наименьший из возможных векторов решетки и покажите, что решетка, которую они генерируют, совпадает с подрешеткой.

7.2. ДИНАМИКА ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ

В химической кинетике обычно записывают уравнения для скоростей реакций в терминах плотностей или «концентраций» $c_j=n_j/\Omega$. Для скорости, с которой происходит реакция (7.1.1), следуя Вант-Хоффу, возьмем

$$k_+\prod_{j=1}^{J} c_j^{s_j}, \tag{7.2.1}$$

где k_+ — константа, включающая сечение рассеяния при столкновении с требуемой молекулой, умноженная на вероятность того, что столкновение приведет к желаемому результату реакции. Точнее, (7.2.1) представляет собой число таких столкновений за единичное время в единичном объеме, в которых $\{n_j\}\to\{n_j+r_j-s_j\}$.

Тогда уравнения для скоростей реакций имеют вид

$$\frac{dn_i}{dt}=\Omega k_+(r_j-s_i)\prod_{j=1}^{J}\left(\frac{n_j}{\Omega}\right)^{s_j}. \tag{7.2.2}$$

Примечание. Это уравнение, конечно же, не является универсальной истиной, но выполняется при следующих физических требованиях.

1. Смесь должна быть однородной, чтобы плотность в каждой точке Ω была равна n_j/Ω. Для достаточно медленных реакций однородность может

быть достигнута или аппроксимирована с помощью взбалтывания. Отклонения от однородности составляют предмет гл. 12.

2. Для того чтобы установилось распределение Максвелла по скоростям, упругие столкновения, не вызывающие реакции, должны быть достаточно частыми. В противном случае частота столкновений не могла бы быть пропорциональной произведению плотностей, а зависела бы от других деталей распределения скорости. Это требование удовлетворяется в присутствии растворителя или инертного газа и на самом деле выполняется лучше, чем этого можно было бы ожидать.

3. Предполагается также, что внутренние степени свободы молекул также находятся в тепловом равновесии при той же температуре T, что и скорости. Иначе доля столкновений, приводящих к реакции, зависела бы от деталей распределения по внутренним состояниям, а не только от концентраций. Однако долгоживущие возбужденные состояния можно учесть, перечислив их среди X_j, в качестве отдельных видов веществ *, но для этого необходимо четкое различие во временных масштабах.

4. Для того чтобы коэффициенты скорости можно было рассматривать как постоянные даже тогда, когда они сильно зависят от температуры, температура должна быть постоянной в пространстве и во времени. Эти предположения, быть может, не очень реалистичные для многих действительных химических реакций, не противоречат каким-либо физическим законам, и поэтому в определенных экспериментах их выполнение может быть аппроксимировано с любой заданной точностью. Они гарантируют, что состояние смеси полностью описывается набором чисел $\{n_j\}$.

Выражение (7.2.1) является не точным, а **средним** числом столкновений, приводящих к реакции. Их действительное число флуктуирует относительно среднего, и мы хотим узнать результирующие флуктуации величины n_j относительно макроскопических значений, определяемых выражением (2.2). Для того чтобы описать их, нужно знать совместное распределение вероятности $P(\mathbf{n}, t)$. Хотя эта величина и записана как функция от всех n_j, она определена только на подрешетке доступных состояний. По-другому ее можно представить как распределение на всем физическом октанте, которое обращается в нуль во всех точках, которые не являются доступными.

Те же самые предположения, на которых основано макроскопическое уравнение (7.2.2) (кроме небольшой, но существенной модификации), приводит к основному кинетическому уравнению для P определенного вида **. В (7.2.1) вероятность столкновения, включающего s_j молекул X_j, взята пропорциональной $n_\sigma^{s_j}$; точнее, этот множитель должен иметь вид

$$n_j(n_j-1)(n_j-2)\ldots(n_j-s_j+1)=\frac{n_j!}{(n_j-s_j)!}. \qquad (7.2.3)$$

---

* См.: J. H. Gibbs and P. D. Fleming, J. Statist. Phys. 12.375 (1975). Отметим, что понятие «основное кинетическое уравнение» в этих работах соответствует нашему «уравнению скорости реакции».

** Основополагающими работами по основным кинетическим уравнениям в химии считаются: D. A. McQuarrie, J. Appl. Prob. 4,413 (1967); E. W. Montrol in: Energetics in Metallurgical Phenomena III (Gordon and Breach, New York, 1967).

Мы будем сокращенно обозначать это выражение с помощью $((n_j))^{s_j}$. Тогда члены в основном кинетическом уравнении, соответствующие прямой (7.1.1) и обратной (7.1.2) реакциям, имеют вид

$$\dot{P}(\boldsymbol{n}, t) = k_+\Omega\left(\prod_i \mathbf{E}_i^{s_i - r_i} - 1\right)\prod_j \left\{\frac{((n_j))^{s_j}}{\Omega^{s_j}}\right\} P + \\ + k_-\Omega\left(\prod_i \mathbf{E}_i^{r_i - s_i} - 1\right)\prod_j \left\{\frac{((n_j))^{r_j}}{\Omega^{r_j}}\right\} P, \quad (7.2.4)$$

где k_- — постоянная скорость реакции для обратной реакции. Полное основное кинетическое уравнение, включающее все реакции ρ, является суммой таких членов, каждого со своими собственными s_j^ρ, r_j^ρ, k_+^ρ, k_-^ρ.

Упражнение. Определите первый момент перехода $a_1^{(j)}(\{n\})$ для n_j. Запишите макроскопическое уравнение для n_j.

Упражнение. Покажите, что границы являются естественными в смысле § 6.5, т. е. основное кинетическое уравнение обеспечивает обращение в нуль распределения вероятности P, когда одна из величин n_j становится отрицательной при условии, если такое обращение в нуль выполняется для начального P. Отметим, что замена $n_j^{s_j}$ на $((n_j))^{s_j}$ является существенной.

Упражнение. Обоснуйте (2.3) следующим образом. Пусть ω — элемент объема, имеющий диаметр порядка радиуса взаимодействия между молекулами. Вероятность того, что в ω содержится набор $\{s_j\}$ молекул, необходимых для реакции, дается выражением

$$\prod_j \binom{n_j}{s_j}\left(\frac{\omega}{\Omega}\right)^{s_j}\left(1 - \frac{\omega}{\Omega}\right)^{n_j - s_j}.$$

Для $\omega \ll \Omega$ это приводит к (7.2.3) с точностью до постоянного множителя.

Упражнение. Когда возможна только единственная реакция, основное кинетическое уравнение (7.2.4) представляет *одношаговый процесс* на цепочке узлов решетки доступных состояний. Продемонстрируйте этот факт более четко, записав основное кинетическое уравнение в терминах степени продвижения ξ.

Упражнение. Процесс, в котором два падающих протона поглощаются и порождают один испущенный фотон, описывается основным кинетическим уравнением *

$$\dot{P}(n, m, t) = \left(\mathbf{E}_n^2\mathbf{E}_m^{-1} - 1\right) n(n-1)\, mP(n, m, t).$$

Сведите это уравнение к одномерному одношаговому процессу рождения. (Сравните с наблюдением в связи с (6.9.10).)

7.3. СТАЦИОНАРНОЕ РЕШЕНИЕ

Большое каноническое распределение в идеальной смеси химических веществ дается выражением

$$P^g(\boldsymbol{n}) = \prod_j \frac{(\Omega z_j)^{n_j}}{n_j!} e^{-\Omega z_j} \quad (n_j = 0, 1, 2, \ldots), \qquad (7.3.1)$$

* H. D. Simaan, J. of Physics (London) A11, 1799 (1979)

где z_j — функция распределения одной молекулы j в единичном объеме:

$$z_j = \left(\frac{2\pi m}{\beta}\right)^{3/2} \sum_{\nu} e^{-\varepsilon\nu/(kT)}. \tag{7.3.2}$$

Суммирование проводится по всем внутренним колебательным, вращательным и электронным состояниям. В соответствии с (7.3.1) величины n_j представляют собой независимые пуассоновские переменные со средними значениями $\langle n_j \rangle = \Omega z_j$, а z_j — равновесные значения концентрации.

Можно ожидать, что P^g окажется стационарным решением нашего основного кинетического уравнения (7.2.4). Подстановка показывает, что это в самом деле так при условии, что

$$\frac{k_+}{k_-} = \prod_j z_j^{r_j - s_j}. \tag{7.3.3}$$

Использование известного равновесного распределения снова привело нас к соотношению между скоростями прямых и обратных переходов. Соотношение (7.3.3) называется *законом действующих масс*.

Однако большое каноническое распределение (7.3.1) не может правильно описать флуктуации n_j в замкнутом сосуде. Этот факт очевиден, потому что, согласно этому распределению, ненулевые вероятности приписываются каждой точке октанта. В действительности же достижимыми являются только узлы определенной подрешетки. Правильное распределение пропорционально (7.3.1) на этой подрешетке и обращается в нуль вне ее:

$$P^e(n) = C \prod_j \frac{(\Omega z_j)^{n_j}}{n_j!} e^{-\Omega z_j} \Delta(\mathbf{n}, \mathbf{n}^0). \tag{7.3.4}$$

Здесь $\Delta(\mathbf{n}, \mathbf{n}^0) = 1$, если $\mathbf{n}$ доступно из $\mathbf{n}^0$, и $\Delta(\mathbf{n}, \mathbf{n}^0) = 0$, если $\mathbf{n}$ недоступно. Для того чтобы показать, что распределение (7.3.4) действительно является решением основного кинетического уравнения, заметим, что каждый член (7.2.4) полного основного кинетического уравнения обращается в нуль при подстановке (7.3.1), а следовательно, и при подстановке (7.3.4), потому что (7.3.4) отличается от (7.3.1) только на множитель C для всех значений $\mathbf{n}$, встречающихся в основном кинетическом уравнении.

Пример. Диссоциация двухатомной молекулы:

$$X_2 \underset{k_-}{\overset{k_+}{\rightleftarrows}} 2X_1. \tag{7.3.5}$$

Предположим, что, для того чтобы сделать возможными столкновения, использовано инертное вещество. Стехиометрические коэффициенты

$$s_1 = 1; \quad s_2 = 0; \quad r_1 = 0; \quad r_2 = 2.$$

В качестве начального состояния мы выбираем $n_1=0$, $n_2=n_2^0$. Сохранение числа томов выражается равенством $n_1+2n_2=2n_2^0$. Доступные узлы решетки обозначены на рис. 20.

В равновесии вероятность того, что смесь находится в состоянии, представленном такими точками, дается формулой (7.3 4). Для значений n_2 вероятность

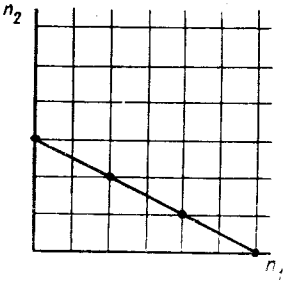

Рис. 20. Пространство состояний реакции диссоциации (7.3.5) при $n_2^0=3$

$$P^s(n_2)=C\frac{(\Omega z_2)^{n_2}(\Omega z_1)^{2n_2^0-2n_2}}{n_2!\,(2n_2^0-2n_2)!}=$$

$$=C'\frac{1}{n_2!\,(2n_2^0-2n_2)!}\left(\frac{z_2}{\Omega z_1^2}\right)^{n_2}. \qquad (7.3.6)$$

Очевидно, что это не распределение Пуассона. По-другому, в терминах степени продвижения

$$n_1=2\xi,\quad n_2=n_2^0-\xi\quad (\xi=0,\ 1,\ 2,\ \ldots,\ n_2^0),$$

имеем

$$P^s(\xi)=C''\frac{1}{(n_2^0-\xi)!\,(2\xi)!}\left(\frac{\Omega z_1^2}{z_2}\right)^{\xi}.$$

На языке § 5.2 полное основное кинетическое уравнение разложимо. Пространство состояний векторов $\mathbf{n}$ распадается на подрешетки, между которыми переходы невозможны. Для каждой подрешетки должны записываться свои отдельные основные кинетические уравнения. В соответствии с § 5.3 в каждой подрешетке вероятность стремится к единственному стационарному решению. Любое решение полного основного кинетического уравнения стремится к этому стационарному решению на каждой подрешетке, но веса, распределенные по нескольким подрешеткам, фиксированы начальным условием. Если начальное условие имеет вид $P(\mathbf{n},\ 0)=\delta(\mathbf{n},\ \mathbf{n}^0)$, то все подрешетки, отличные от доступной из $\mathbf{n}^0$, имеют нулевой вес, что выражается формулой (7.3.4). Если мы захотим описать ансамбль сосудов с различными $\mathbf{n}^0$, то веса окажутся различными и будут зависеть от начального ансамбля. В частности, для ансамбля, выбранного подходящим образом, может получиться (7.3.1), но это распределение не описывает флуктуации $\mathbf{n}$ с течением времени в одном-единственном замкнутом сосуде.

Упражнение. При таком условии для величины Δ в (7 3.4) можно записать

$$\Delta(\mathbf{n},\ \mathbf{n}^0)=\prod_{\alpha}\delta(\mathbf{n}\cdot m^{\alpha},\ \mathbf{n}^0\cdot m^{\alpha}),$$

где $\delta(\cdot,\ \cdot)$ — символ Кронекера, а α пробегает по всем законам сохранения.

Упражнение. Рассмотрим реакцию между двумя изомерами:

$$X \rightleftarrows Y.$$

Определите распределение вероятности n_1 в равновесии, включая нормировочную постоянную. Найдите также дисперсию и покажите, что она не согласуется с распределением Пуассона.

Упражнение. Из (7.3.6) получите для дисперсии

$$\frac{\langle(\Delta n_1)^2\rangle}{\langle n_1\rangle}=\left(1+16\,\frac{z_2}{z_1^2}\,\frac{n_2^0}{\Omega}\right)^{-1/2}+O(\Omega').$$

Отметим, что отклонение от Пуассона не исчезает в термодинамическом пределе.

Упражнение. Убедитесь в том, что использование $((n_j))^{s_j}$ вместо более привычной $n_j^{s_j}$ существенно в (7.2.4), так как иначе (7.3.4) не будет точным решением.

Упражнение. Проверьте, что обращение в нуль вероятности вне физического октанта $n_j \geqslant 0$ учитывается автоматически, если положить $n!=\Gamma(n+1)=\infty$ для отрицательных целых n.

Упражнение. Приведенный в тексте способ, которым было найдено стационарное решение (7.3.4), состоял в том, что мы заметили, что выражение (7.3.1) действительно удовлетворяет (7.2.4), однако это решение можно получить и систематическим способом *. Запишите (7.2.4) для стационарного решения в виде

$$0=\left(\prod_i \mathbf{E}_i^{s_i-r_i}-1\right)\left[k_+\prod_j\left\{\frac{((n_j))^{s_j}}{\Omega^{s_j}}\right\}P-k_-\left(\prod_i \mathbf{E}_i^{r_i-s_j}\right)\prod_j\left\{\frac{((n_j))^{r_j}}{\Omega^{r_j}}\right\}P\right].$$

Выведите, что $[\quad]=0$ и затем найдите P^s.

Упражнение. Метод предыдущего упражнения оказался возможным из-за того, что (7.2.4) является виртуально одношаговым основным кинетическим уравнением, как упомянуто в одном из предыдущих упражнений. Запишите уравнение через ξ и примените (6.3.8), чтобы найти стационарное решение.

7.4. ОТКРЫТЫЕ СИСТЕМЫ

Значительно большее количество явлений можно описать как стационарные состояния *открытых* химических систем, т. е. систем, в которые могут инжектироваться молекулы и из которых могут выделяться специфические молекулы. Простейшая возможность состоит в инжектировании молекул X с постоянной скоростью b. Выделение X возможно до тех пор, пока имеется некоторое количество вещества X, и скорость выделения должна обращаться в нуль, когда $n=0$ поэтому простейший вид скорости есть an. Тогда макроскопическое уравнение для n молекул вещества X имеет вид

$$\dot{n}=b-an+\ldots, \tag{7.4.1}$$

где многоточием обозначены результаты внутренних химических реакций, исследованных в предыдущих параграфах.

Однако эти макроскопические члены еще не определяют выделения на мезоскопическом уровне и механизма инжекции. Простейший случай — тот, когда молекулы инжектируются независимо в случайные моменты времени (дробовой шум) и выделяются независимо. В выражении для вероятности перехода это соответствует

* N. G. van Kampen, Phys. Letters, 59 A, 333 (1976).

членам

$$W(n/n') = b\delta_{n,\,n'+1} + an'\delta_{n,\,n'-1} + \ldots .$$

Они приводят к следующим членам в основном кинетическом уравнении:

$$\dot{p}_n(t) = b(\mathbf{E}^{-1} - 1)\,p_n + a(\mathbf{E} - 1)\,np_n + \ldots . \qquad (7.4.2)$$

Следует иметь в виду, что это отнюдь не единственный способ добавления членов в основное кинетическое уравнение, приводящих к макроскопическим членам (7.4.1). Например, молекулы могут инжектироваться в виде кластеров. Различный выбор мезоскопического описания будет сказываться на флуктуациях n. В общем случае, *когда система подвергается внешним воздействиям, вычислить флуктуации нельзя, если сила задана только макроскопически, а нужно знать еще ее стохастические свойства.*

Для химических реакций имеется удобный и естественный способ задания стохастических свойств механизма инжекции, который мы уже использовали в некоторых примерах. Можно предположить, что молекулы X образуются из вещества B, которое присутствует в больших количествах и медленно распадается в X. Тогда образование вещества происходит практически с постоянной скоростью, а обратной реакцией можно пренебречь (например, образование гелия из урана можно считать постоянным). Другими словами, систему можно описать как предельный случай закрытой неравновесной системы. В этом случае B играет роль резервуара.

Для того чтобы описать этот предельный случай более точно, рассмотрим реакцию

$$\mathrm{B} \underset{k'}{\overset{k}{\rightleftarrows}} \mathrm{X}.$$

Основное кинетическое уравнение для совместного распределения имеет вид

$$\partial_t P(n_\mathrm{X},\ n_\mathrm{B},\ t) = k(\mathbf{E}_\mathrm{B}\mathbf{E}_\mathrm{X}^{-1} - 1)\,n_\mathrm{B}P + k'(\mathbf{E}_\mathrm{B}^{-1}\mathbf{E}_\mathrm{X} - 1)\,n_\mathrm{X}P.$$

Теперь пусть $n_\mathrm{B} \to \infty$ и $k \to \infty$ при постоянном $kn_\mathrm{B} = b$. Тогда

$$k\mathbf{E}_\mathrm{B}n_\mathrm{B} = kn_\mathrm{B} + k \to b.$$

Поскольку n_B уже больше не встречается в качестве переменной, по ней можно выполнить суммирование и получить частное распределение для единственной величины

$$\sum_{n_\mathrm{B}} P(n_\mathrm{X},\ n_\mathrm{B},\ t) = P(n_\mathrm{X},\ t),$$

$$\partial_t P(n_\mathrm{X},\ t) = b(\mathbf{E}_\mathrm{X}^{-1} - 1)\,P + k'(\mathbf{E}_\mathrm{X} - 1)\,n_\mathrm{X}P.$$

И наконец, перейдя к пределу $k' \to 0$, получим первый член (7.4.2).

Член, описывающий выделение в (7.4.2), также можно получить как предельный случай реакции в замкнутом сосуде. Рассмотрим

реакцию

$$X \underset{k'}{\overset{k}{\rightleftarrows}} A$$

с основным кинетическим уравнением

$$\partial_t P(n_X, n_A, t) = k(\mathbf{E}_X \mathbf{E}_A^{-1} - 1) n_X P + k'(\mathbf{E}_X^{-1} \mathbf{E}_A - 1) n_A P.$$

Выполнив предельный переход $k' \to 0$ и просуммировав по n_A, в результате получим второй член в (7.4.2). Коэффициент k, характеризующий скорость реакции, нужно считать постоянным и равным a; тогда, поскольку в соответствии с (7.3.3) выполняется соотношение

$$k'/k = z_X/z_A \to 0,$$

внутренняя функция распределения A должна быть очень большой для того, чтобы действовать как сток.

Упражнение. Дайте несколько других примеров основных кинетических уравнений совместных с уравнением (7.4.1).

Упражнение. Запишите основное кинетическое уравнение для реакции

$$A \rightleftarrows X, \quad 2X \rightleftarrows B,$$

где A и B действуют как резервуары. Стационарное состояние обладает тем свойством, что при определенных значениях параметров результирующий перенос между A и B обращается в нуль. Покажите, что в этом случае стационарное распределение X является распределением Пуассона *.

Упражнение. Вообще, в любой открытой системе с резервуарами A, B, C, ... и реагентами X, Y, Z стационарное распределение является мультипуассоновским при условии, что в стационарном состоянии нет переноса вещества между резервуарами.

7.5. ОДНОМОЛЕКУЛЯРНЫЕ РЕАКЦИИ

Совсем другой аспект химических реакций приводит к стохастическим задачам иного типа. Рассмотрим реакцию диссоциации одной молекулы в газе:

$$XY \to X + Y. \tag{7.5.1}$$

Например, C_2H_5Cl распадается на $C_2H_4 + HCl$. Если в начальном состоянии имеется чистый газ XY, реакция может произойти только тогда, когда молекула XY сталкивается с другой, и поэтому скорость реакции сначала должна быть пропорциональна квадрату плотности. Однако эксперимент свидетельствует о том, что на самом деле скорость пропорциональна первой степени плотности, по крайней мере для не слишком малых плотностей. Следуя Ф. А. Линдеману, этот факт объясняется с помощью следующей картины **. Столкновение мо-

* Этим примечанием я обязан Ван ден Броку.

** N.B-Slater, Theory of Unimolecular Reactions (Cornell University Press, Ithaca, N. Y., 1959). См.: I. Amdur and G. G. Hammes, Chemical Kinetics (McGraw-Hill, New York, 1966); E. E. Nikitin, Theory of Thermally Unduced Gas Phase Reactions (Indian University Press, Bloomington, 1966).

лекул XY непосредственно не приводит к их диссоциации. Скорее оно приводит к переходу молекулы в возбужденное состояние $(XY)^*$, которое является метастабильным, и молекула, находящаяся в этом состоянии будучи предоставленной сама себе, в конце концов диссоциирует. Тем временем, однако, может произойти другое столкновение, которое может вернуть молекулу в основное состояние. Тогда реакцию (7.5.1) запишем в виде

$$XY \rightleftarrows (XY)^*,$$
$$(XY)^* \rightarrow X + Y. \qquad (7.5.2)$$

Когда плотность n молекул XY достаточно велика, реакция, записанная первой строкой, поддерживает запас молекул $(XY)^*$ пропорциональным n. Каждая молекула $(XY)^*$ имеет определенную вероятность распасться за единичное время в соответствии с реакцией, записанной второй строкой. Тогда вся реакция будет происходить со скоростью, пропорциональной n, а не n^2 (см. упражнение ниже).

Подход, в котором различают всего два состояния: одно устойчивое, а другое — возбужденное, — не является реалистическим. Молекула XY обладает несколькими степенями свободы, соответствующими вращательным, колебательным и электронным движениям образующих ее частей. В этом случае имеется большое количество собственных состояний $|\nu\rangle$ с энергиями E_ν ($\nu = 0, 1, 2, \ldots$). Строго говоря, при энергиях, превышающих энергию связи E_b, спектр непрерывен. Однако даже при энергиях, превышающих E_b, существуют приближенно связанные состояния $|\nu\rangle$ с приближенно определенными энергиями $E_\nu > E_b$, как это известно из теории альфа-распада Гамова *. Это означает, что они обладают очень малой вероятностью разделиться за единичное время на X и Y. И только когда энергия превышает некоторое значение E_a, называемое *энергией* активации, вероятность диссоциации становится заметной.

После каждого столкновения молекула XY остается в некотором зависящем от времени состоянии

$$|\varphi\rangle = \sum_{\nu=0}^{\infty} a_\nu |\nu\rangle.$$

Набор N независимых молекул XY можно описать с помощью матрицы плотности

$$\rho = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N} \sum_{\nu\mu} a_\nu^{(j)} a_\mu^{(j)*} |\nu\rangle\langle\mu|.$$

---

* J. M. Blatt and V. F. Weisskopf, Theoretical Nuclear Physics (Wiley, New York, 1952), p. 383 ff.

В квазиклассическом приближении предполагается, что фазовые соотношения между a_ν несущественны, так что мы не ошибемся. положив

$$\frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N} a_\nu^{(j)} a_\mu^{(j)*} = \delta_{\nu\mu} p_\nu,$$

где p_ν — вероятность того, что молекула XY находится в состоянии $|\nu\rangle$.

Для свободной молекулы вероятность p_ν постоянна во времени, если $E_\nu < E_b$, но возбужденное состояние может распадаться:

$$\dot{p}_\nu = -\Gamma_\nu p_\nu \quad (E_\nu > E_a). \tag{7.5.3а}$$

Столкновения будут изменять p_ν и, поскольку имеется определенная вероятность за единичное время испытать столкновение заданного типа, имеем основное кинетическое уравнение

$$\dot{p}_\nu = \sum_\mu (W_{\nu\mu} p_\mu - W_{\mu\nu} p_\nu). \tag{7.5.3б}$$

Как подчеркивалось в § 4.1, это справедливо только в огрубленном масштабе времени, на котором столкновения можно рассматривать как мгновенные. Объединяя (7.5.3а) и (7.5.3б), получим

$$\dot{p}_\nu = \sum_\mu W_{\nu\mu} p_\mu - \Gamma_\nu p_\nu \quad (\nu = 0, 1, 2, \ldots;\ \Gamma_\nu = 0 \text{ для } E_\nu < E_a). \tag{7.5.4}$$

Это уравнение не сохраняет вероятности. Однако сохранение вероятности можно восстановить, добавив уравнение для вероятности p_* того, что молекула диссоциирует:

$$p_* = 1 - \sum p_\nu, \quad \dot{p}_* = \sum \Gamma_\nu p_\nu. \tag{7.5.5}$$

Система уравнений (7.5.4) и (7.5.5) является сохраняющим вероятность основным кинетическим уравнением. Диссоциированное состояние $*$ является поглощающим состоянием n; следовательно, $p_*(\infty) = 1$, $p_\nu(\infty) = 0$. Химиков, однако, интересует, как быстро произойдет эта диссоциация. Предположим, удалось решить (7.5.4) с начальным условием $p_\nu(0) = \delta_{\nu 0}$, которое означает, что молекула в начальный момент времени находится в основном состоянии. Тогда вероятность того, что она диссоциирует в течение времени от t до $t + dt$, есть $p_*(t)\,dt$. Среднее время диссоциации есть (ср. с. (6.7.5))

$$\int_0^\infty t\dot{p}_*(t)\,dt. \tag{7.5.6}$$

Для того чтобы получить числовые результаты, необходимо, с одной стороны, знать $W_{\nu\mu}$ и Γ_ν, а с другой стороны, решить уравнение (7.5.4). Мы не ставим своей целью описывать различные теории и приближения, касающиеся первой задачи, но справедливости

ради отметим, что они в лучшем случае приводят к качественным результатам. Как следствие, имеется много возможностей для выбора таких выражений для $W_{\nu\mu}$ и Γ_ν, которые облегчают решение второй задачи. Мы упомянем три подхода, однако следует отметить, что они представляют больший интерес как упражнения по стохастическим процессам, чем оказываются действительно полезными для вычисления скоростей настоящих одномолекулярных реакций.

1. Монтрель и Шулер * упростили уравнение (7.5.4), выбрав для $W_{\nu\mu}$ одношаговую матрицу перехода с обрезанием на поглощающей границе, что равносильно следующему:

$$\Gamma_\nu = 0 \quad \text{для} \quad \nu = 0, 1, 2, \ldots, N-1; \; \Gamma_N > 0.$$

Затем, чтобы получить аналитическое решение, они взяли для колебаний двухатомной молекулы $W_{\nu\mu}$, принадлежащие квантованному гармоническому осциллятору, что в этом случае кажется достаточно разумным **. Тогда их основное кинетическое уравнение записывается в виде

$$\begin{gathered}\dot{p}_\nu = \alpha(\mathrm{E}-1)\nu p_\nu + \beta(\mathrm{E}^{-1}-1)(\nu+1)p_\nu \quad (\nu = 0, 1, 2, \ldots, N-1),\\ \dot{p}_N = -\alpha N p_N + \beta N p_{N-1} - \Gamma_N p_N,\\ \dot{p}_* = \Gamma_N p_N. \end{gathered} \tag{7.5.7}$$

Достаточно трудоемкое решение получается путем определения собственных значений и собственных функций, как в § 6.8, которые оказываются некими странными многочленами Готлиба. К сожалению, скорость реакции, вычисленная при различных значениях α, β, N, Γ_N, оказывается на несколько порядков величины меньше наблюдаемого значения.

2. Христиансен *** описывал диссоциацию, происходящую вследствие последовательных столкновений, с помощью уравнения диффузии в «координатах реакции» q, которые для двухатомных молекул представляют собой расстояния между двумя ядрами. Диффузия происходит в потенциальном поле $V(q)$, имеющем максимум E_a. Для того чтобы произошла диссоциация, энергия молекулы должна превысить E_a. Диффузионное приближение предполагает, что состояния расположены очень плотно и что скачки малы по сравнению с характерным радиусом изменения потенциала. Эта картина привела Крамерса **** к изучению броуновского движения в потенциальном поле, которое рассмотрено в § 8.7. С помощью длинных выкладок

---

* E. W. Montroll and K. E. Shuler, J. Chem. Phys. 26, 454 (1957); Advances in Chemical Physics, I (I. Prigogine ed., Interscience, New York, 1958), p. 361; S. K. Kim, J. Chem. Phys., 28, 1057 (1958).

** L. Landau and E. Teller, Physik. Z. Sovjetunion, 10, 34 (1936).

*** J. A. Christiansen, Z. Phys. Chemie B33, 145 (1936). Дальнейшее развитие см. в работе: A. P. Penner and W. Forst, J. Chem. Phys. 67, 5296 (1977); M. Mangel, J. Chem. Phys. 72, 6606 (1980).

**** H. A. Kramers, Physica 7, 284 (1940).

он получил выражение для времени диссоциации, составной частью которого является множитель $\exp[E_a/(kT)]$, имеющий принципиальное значение и названный *множителем Аррениуса* *.

3. Схема Монтреля — Шулера случайного блуждания в пространстве энергий привела к проблеме первого прохождения. Схема Христиансена — Крамерса случайного блуждания в координатном пространстве привела к проблеме диффузионного проникновения через потенциальный барьер. Оппенгейм, Шулер и Вейс ** заметили, что задачу проникновения можно свести также к проблеме первого прохождения. Возьмем точку снаружи потенциального барьера. Среднее время, необходимое для того, чтобы в первый раз достичь точки q, равно среднему времени проникновения через потенциальный барьер при условии, что он достаточно высок. Этот подход мы разберем в § 11.2 ***.

Упражнение. Запишите уравнения для скоростей реакций (7.5.2) и покажите, что скорость диссоциации на самом деле пропорциональна плотности XY, когда реакция, записанная второй строкой, намного медленнее той, которая записана первой.

Упражнение. Для случая двух состояний уравнение (7.5.4) можно записать в виде

$$\dot{p}_0 = -\beta p_0 + \alpha p_1, \tag{7.5.8а}$$

$$\dot{p}_1 = \beta p_0 - \alpha p_1 - \gamma p_1. \tag{7.5.8б}$$

Для среднего времени выживания найдите значение $(\alpha+\beta+\gamma)/(\beta\gamma)$. Покажите также, что p_0+p_1 убывает по экспоненциальному закону для больших t, но скорость убывания не определяется этим временем выживания, если только γ слишком мало.

Упражнение. Диссоциация и рекомбинация в присутствии инертного растворителя описывается схемой

$$X_2 + M \rightleftarrows X + X + M.$$

Если молекула X_2 обладает внутренними состояниями ν, то уравнение для скорости реакции имеет вид ****

$$\dot{c}_\nu = \sum_\mu (w_{\nu\mu} c_\mu - w_{\mu\nu} c_\nu) + u_\nu c^2 - v_\nu c_\nu,$$

где c — концентрация атомов X. Постройте основное кинетическое уравнение

---

* Другой вывод был дан в работе: R. B. Griffiths, C. Y. Wang and J. Langer, Phys. Rev. 149, 301 (1966). Вывод Крамерса применим также к одношаговым процессам, см. N. G. van Kampen in: Fundamental Problems in Statistical Mechanics, IV (Proc. 1977 Intern. Summer School in Jadwisin, Poland; E. G. D. Cohen and W. Fiszdon eds., Ars Polona, Warsaw, 1978); Suppl. Progr. Theor. Phys., 64, 389 (1978).

** I. Oppenheim, K. E. Shuler, and G. H. Weiss, Physica, 88A, 191 (1977).

*** Та же самая задача была решена в теории образования центров кристаллизации в работе: R. Becker and W. Doring, Ann. Physik 24, 719 (1935). Литературу см. в кн.: J. L. Katz and M. D. Donohue, Advances in Chemical Physics, 40 (I. Prigogine and S. A. Rice eds., Interscience, New York, 1979), p. 137.

**** Брау называет это уравнение *нелинейным основным кинетическим уравнением*: C. A. Brau, J. Chem. Phys. 47, 1153 (1976).

Упражнение. Постройте основное кинетическое уравнение для процесса ионизации многоуровневых атомов водорода в плазме протонов и электронов *

$$H+e \rightleftarrows p+2e.$$

Упражнение. Молекулы X обладают колебательными состояниями $\nu=0, 1, 2, \ldots$. Сталкиваясь, они могут обмениваться квантами колебаний в процессе **

$$X_{\nu+1}+X_{\nu-1} \rightleftarrows 2X_\nu \quad (\nu=1, 2, \ldots).$$

Постройте основное кинетическое уравнение и получите из него уравнение для скорости реакции и равновесное распределение (для фиксированного числа частиц заданной энергии).

Упражнение. Примером (7.5.4) является уравнение

$$\dot{p}_n=\alpha(\mathrm{E}-1)\,np_n+\beta(\mathrm{E}^{-1}-1)(n+1)\,p_n-(a+b_n)\,p_n \quad (0\leqslant n<\infty),$$

которое использовалось как модель диссоциации ***. Решите его с начальным условием $p_n(0)=\delta_{n,0}$ и определите зависимость диссоциации от времени. Для каких начальных условий диссоциация происходит по экспоненциальному закону?

7.6. КОЛЛЕКТИВНЫЕ СИСТЕМЫ

В качестве конкретного примера возьмем молекулы идеального газа, однако наше рассмотрение остается справедливым и в более общем случае. Рассмотрим систему, которая может находиться в различных состояниях, которые мы обозначим n. Эволюция системы описывается основным кинетическим уравнением

$$\dot{p}_n=\sum_n (W_{nn'}p_n-W_{n'n}p_n). \tag{7.6.1}$$

Мы будем называть эту систему *молекулой*, а состояние n — *уравнениями* для того, чтобы отличать их от той системы и состояний, которые мы сейчас введем.

Рассмотрим большую систему, состоящую из набора N подобных молекул, *независимых друг от друга*, каждая из которых описывается уравнением (7.6.1). Точное состояние этой коллективной системы определяется набором чисел $n_1, n_2, n_3, \ldots, n_N$, обозначающих уровни, на которых находятся несколько молекул. Вероятность того, что коллективная система находится точно в этом состоянии, представляет собой произведение вероятностей для отдельных молекул:

$$p_{n_1}p_{n_2}\cdots p_{n_N}. \tag{7.6.2}$$

Предположим теперь, что мы интересуемся вопросом о том, сколько молекул занимает каждый уровень, независимо от того, одинаковы

---

* W. L. Hogarth and D. L. S. McElwain. Proc. Roy. Soc., A345, 251 and 265 (1975); A. W. Yau and H. O. Pritchard, Proc. Roy. Soc., A 362, 113 (1978)

** T. A. Bak and P. G. Sorenson in: Stochastic Processes in Chemical Physics (Advances in Chemical Physics 15; K. E. Shuler ed., Interscience, New York, 1969).

*** K. F. Freed and D. F. Heller, J. Chem Phys., 61, 3942 (1974); V. Kenkre and V. Seshardi, Phys. Rev., A15, 197 (1977).

ли они. Таким образом, мы просто интересуемся глобальным состоянием, которое определяется набором чисел заполнения $\{N\} = N_1, N_2, \ldots, N_n, \ldots$. Вероятность того, что коллективная система находится в этом глобальном состоянии, определяется формулой

$$P(\{N\}) = \sum p_{n_1} p_{n_2} \cdots p_{n_N}, \tag{7.6.3}$$

где суммирование распространяется на все значения $n_1, n_2, \ldots, n_N$, совместимые с заданными числами заполнения.

Примечание. Следует понимать, что переход к описанию с помощью чисел заполнения является чисто алгебраической процедурой. В некотором смысле он аналогичен тому, который в квантовой механике называют вводящим в заблуждении термином «вторичное квантование».

Единственное отличие состоит в том, что здесь мы умышленно исключаем информацию о тождественности молекул, в то время как в квантово-механических приложениях (например, к фотонам или электронам) такая информация отсутствует с самого начала вследствие неразличимости частиц. Мы по-прежнему будем считать, что состояния описываются статистикой Больцмана.

Вероятность глобального состояния (7.6.3) изменяется, когда одна из молекул совершает переход с одного уровня n' на другой уровень n. Вероятность того, что одна из $N_{n'}$ молекул, находящихся на уровне n', совершает такой переход в течение времени Δt, есть $W_{nn'} N_{n'} \Delta t$.

Вероятность того, что совершает переход две или большее количество молекул, порядка $(\Delta t)^2$. Следовательно, P удовлетворяет основному кинетическому уравнению

$$\dot{P}(\{N\}, t) = \sum_{n, n'} W_{nn'} (\mathrm{E}_n^{-1} \mathrm{E}_{n'} - 1) N_{n'} P(\{N\}, t). \tag{7.6.4}$$

Это основное кинетическое уравнение однозначно определяется основным кинетическим уравнением для одной молекулы (7.6.1), потому что физика в обоих случаях одинакова. Сейчас мы покажем, что решения (7.6.4) также можно выразить через уравнения решения уравнения (7.6.1).

Достаточно показать это для решения уравнения (7.6.4) с начальным условием, в котором все N молекул находятся на одном и том же уровне m:

$$P(\{N\}, 0) = \delta(N_m, N) \prod_{n \neq m} \delta(N_n, 0), \tag{7.6.5}$$

где буквой дельта обозначены символы Кронекера. Пусть $p_{n,m}(t)$ — решение уравнения (7.6.1) с $p_{n,m}(0) = \delta(n, m)$. При $t > 0$ каждая из молекул с вероятностью $p_{n,m}(t)$ занимает уровень n. Тогда, согласно (1.3.11), вероятность того, что реализуются числа заполнения N_1, $N_2, \ldots$, дается выражением

$$P(\{N\}, t) = \binom{N}{N_1 N_2 \ldots} \{p_{1,m}(t)\}^{N_1} \{p_{2,m}(t)\}^{N_2} \cdots. \tag{7.6.6}$$

Понятно, что полиномиальный коэффициент обращается в нуль, кроме тех случаев, когда все N_n неотрицательны и сводятся к N. Это решение уравнения (7.6.4) с начальным условием (7.6.5)

Распределение (7.6.6) является многомерным обобщением биномиального распределения. Теперь рассмотрим ансамбль подобных систем, в котором полное число N не является постоянным, а распределено по Пуассону со средним значением $\langle N\rangle$. Тогда распределение вероятности в этом большом ансамбле есть

$$P^g(\{N\}, t) = \sum_{N=0}^{\infty} \frac{\langle N\rangle^N}{N!} e^{-\langle N\rangle} P(\{N\}, t) =$$
$$= \frac{\langle N_1\rangle^{N_1}}{N_1!} e^{-\langle N_1\rangle} \frac{\langle N_2\rangle^{N_2}}{N_2!} e^{-\langle N_2\rangle} \ldots,$$

где $\langle N_1\rangle = \langle N\rangle p_{1,m}(t)$ и т. д. Это выражение представляет собой произведение независимых распределений Пуассона.

Упражнение. Проверьте с помощью прямой подстановки, что (7.6.6) удовлетворяет (7.6.4).

Упражнение. Выведите из (7.6.4), что средние $\langle N_n\rangle$ удовлетворяют тому же уравнению (7.6.1):

$$d_t \langle N_n\rangle = \sum_{n'} \{W_{nn'} \langle N_{n'}\rangle - W_{n'n} \langle N_n\rangle\},$$

а следовательно,

$$\langle N_n\rangle_t / N = p_{n,m}(t). \tag{7.6.7}$$

Этот факт подтверждает, что наш набор молекул может служить ансамблем, предназначенным, согласно § 3.2, для наглядного представления вероятностей p_n.

Упражнение. Найдите решение уравнения (7.6.4), когда молекулы в начальном состоянии распределены по уровням произвольно.

Упражнение. Покажите, что уравнение (7.6.4) можно интерпретировать как основное кинетическое уравнение для соответствующим образом выбранной схемы химической реакции.

Упражнение. Предположим, мы группируем уровни в «фазовые ячейки», каждая из которых содержит один или большее число уровней. Тогда распределение вероятности чисел заполнения ячеек снова дается (7.6.6), где $p_{n,m}(t)$ — вероятность того, что молекула, стартуя с уровня m, окажется в ячейке n за время t.

Упражнение. Из уравнения (7.6.4) можно также вывести уравнения для вторых моментов. Проще всего этот результат выражается через факториальные кумулянты (1.3.13):

$$d_t [N_n N_k] = \sum_{n'} W_{nn'} [N_{n'} N_k] + \sum_{k'} W_{kk'} [N_n N_{k'}]. \tag{7.6.8}$$

Эта формула использована в гл. 12.

Возьмем частный случай, когда имеется только два уровня $n = 1, 2$. Тогда (7.6.4) сводится к уравнению

$$\dot{P}(N_1, N_2, t) = W_{12}(\mathbf{E}_1^{-1}\mathbf{E}_2 - 1) N_2 P + W_{21}(\mathbf{E}_2^{-1}\mathbf{E}_1 - 1) N_1 P.$$

Поскольку $N_2 = N - N_1$, это можно записать как

$$\dot{P}(N_1, t) = \beta(\mathbf{E}_1^{-1} - 1)(N - N_1)P + \alpha(\mathbf{E}_1 - 1)N_1\bar{P}. \qquad (7.6.9)$$

Это линейное одношаговое основное кинетическое уравнение типа, изученного в § 6.6. Следовательно, такие уравнения можно интерпретировать как уравнения, описывающие ансамбль двухуровневых систем. Каждая такая система описывается простым кинетическим уравнением:

$$\begin{aligned} \dot{p}_1 &= -\alpha p_1 + \beta p_2, \\ \dot{p}_2 &= \alpha p_1 - \beta p_2. \end{aligned} \qquad (7.6.10)$$

Поскольку решение этого основного кинетического уравнения тривиально, сразу находим решения уравнения (7.6.9) в виде (7.6.6). Это объясняет, почему мы смогли решить линейное одношаговое основное кинетическое уравнение явно (хотя и не каждое из них можно интерпретировать таким способом). С другой стороны, когда коэффициенты одношагового основного кинетического уравнения являются нелинейными функциями n (как в § 6.9), т. е. когда молекулы взаимодействия, его решение оказывается существенно более трудным делом.

Упражнение. Покажите, что решение процесса распада в § 4.6 является примером сведения основного кинетического уравнения к уравнению типа (7.6.10).

Упражнение. Квантованный гармонический осциллятор в примере 1 из § 6.4 можно рассматривать как набор фотонов, каждый из которых является либо связанным, либо свободным. Почему, несмотря на это, основное кинетическое уравнение (6.4.1) невозможно интерпретировать изложенным здесь способом?

Упражнение. Переформулируйте модель урн Эренфеста (см. (4.5.4)), заметив, что каждый шар может иметь два состояния *.

С точки зрения химика энтропия системы является *макроскопической* функцией состояния, т. е. функцией, зависящей от системы. В статистической механике энтропия является *мезоскопической* величиной, т. е. функционалом, зависящим от распределения вероятности. Но энтропия никак не может быть *микроскопической* величиной, потому что на микроскопическом уровне отсутствует необратимость **.

Мезоскопическая энтропия физической системы с состояниями, согласно (5.5.7), имеет вид

$$s(t) = -k \sum_n p_n \log \frac{p_n}{p_n^e} + s^e, \qquad (7.6.11)$$

---

* F. G. Hess, Amer., Mathem. Monthly, 61, 323 (1954).

** Этот момент был убедительно обоснован П. и Т. Эренфестами в их знаменитой статье, цитированной в § 5.4. Однако этими аргументами часто пренебрегают, что приводит к «парадоксу», когда энтропия является интегралом движения, см.: A. Wehrl, Rev. Mod. Phys., 50, 221 (1978).

где $s^e = \text{const}$ в том случае, когда система является замкнутой и изолированной. Для энтропии набора N независимых одинаковых систем формула (7.6.11) дает

$$s(t) = -k \sum_{\{N\}} P(\{N\}) \log \frac{P(\{N\})}{P^e(\{N\})} + S^e.$$

В соответствии с (7.6.3)

$$S(t) = -k \sum_{\{N\}} P(\{N\}) \log \prod_n \left(\frac{p_n}{p_n^e}\right)^{N_n} + S^e =$$

$$= -k \sum_n \langle N_n \rangle \log \frac{p_n}{p_n^e} + S^e. \qquad (7.6.12)$$

С учетом (7.6.7) это равно Ns, если не учитывать дополнительной константы. Обычно определяют еще равновесную энтропию S^e таким образом, что $S^e = Ns^e$. Но если независимые системы, образующие набор, представляют собой газы, занимающие один и тот же объем, то возможны разные способы определения S^e (парадокс Гиббса). В любом случае неравновесная часть мезоскопической энтропии набора является суммой неравновесных частей отдельных систем.

Упражнение. Объем Ω разделен на две отдельные части Ω_1, Ω_2, сообщающиеся через небольшое отверстие. Он заполнен идеальным газом; каждая молекула может находится в Ω_1 и в Ω_2 и, следовательно, имеет два «уровня». Примените (7.6.10) для нахождения решения (7.6.9) и свяжите (7.6.11) посредством (7.6.12) с термодинамической энтропией.

Упражнение. Донор окружен z участками решетки, обозначенными j, каждая из них имеет вероятность $e^{-\alpha_j}$ быть занятой акцептором. Если так, то имеется вероятность β_j за единичное время возбудить донор и перевести его в состояние акцептора. Предположим, при $t=0$ имеется N таких доноров, не зависящих друг от друга. Каково распределение вероятности числа выживших доноров в любое последующее время *?

7.7. СОСТАВНЫЕ МАРКОВСКИЕ ПРОЦЕССЫ

Следующую модель используют в самых разных приложениях, и, кроме того, она представляет общий интерес. Рассмотрим молекулу, имеющую некоторое число внутренних состояний, или «уровней» i. С каждой i она может перейти на какой-нибудь уровень j с заданной вероятностью перехода за единичное время $\gamma_{j,i}$. Далее молекула помещена в растворитель, в котором она диффундирует с коэффициентом диффузии, зависящим от ее состояния i. Вероятность найти молекулу, имеющую уровень i в момент времени t в точке пространства, с координатами $\mathbf{r}$, окруженной объемом $d^3\mathbf{r}$, есть $P_i(\mathbf{r}, t)\, d^3\mathbf{r}$. Когда молекула находится в состоянии i вероятность удовлетворяет уравнению

$$\dot{P}_i(\mathbf{r}, t) = D_i \nabla^2 P_i(\mathbf{r}, t). \qquad (7.7.1)$$

* A. Blumen and J. Manz, Chem. Phys., 71, 4694 (1979).

Эта модель использована для описания самодиффузии молекул воды в воде для объяснения данных по расстоянию нейтронов *.

Основное кинетическое уравнение для $P_i(\mathbf{r}, t)$ получается добавлением к уравнению (7.7.1) скорости изменения, вызванной переходами между уровнями:

$$\dot{P}_i(\mathbf{r}, t) = \mathrm{D}_i \nabla^2 P_i(\mathbf{r}, t) + \sum_j \{\gamma_{i,j} P_j(\mathbf{r}, t) - \gamma_{j,i} P_i(\mathbf{r}, t)\} \quad (7.7.2)$$

В этом уравнении предполагается, что за время перехода координаты $\mathbf{r}$ не изменяются и что вероятности перехода являются константами, не зависящими от $\mathbf{r}$.

Эту схему можно обобщить, заменив оператор диффузии в уравнении (7.7.1) на оператор общего вида $\mathbf{F}_i$, зависящий от i и действующий на координатные переменные. Например, физику хроматографии объясняют ** с помощью рассмотрения независимых молекул, которые могут либо находиться в жидкости ($i=1$), либо быть поглощенными на поверхности ($i=2$). Когда они находятся в жидкости, они увлекаются ее течением со скоростью $\mathbf{v}$, так что

$$\mathbf{F}_1 = -(\mathbf{v} \cdot \nabla), \quad \mathbf{F}_2 = 0 \quad (7.7.3)$$

Можно, конечно, добавить какие-нибудь тонкости, такие, как диффузия в жидкости или поглощающие участки несколько типов ***.

Поэтому полезно изучить основное кинетическое уравнение вида

$$\dot{P}_i(\mathbf{r}, t) = \mathbf{F}_i P_i(\mathbf{r}, t) + \sum_j \{\gamma_{i,j} P_j(\mathbf{r}, t) - \gamma_{j,i} P_i(\mathbf{r}, t)\}. \quad (7.7.4)$$

Решив это уравнение, мы определим вероятность найти в момент времени $t > 0$ систему в состоянии $(i, \mathbf{r})$, если при $t=0$ она была в состоянии $(i_0, \mathbf{r}_0)$. Эта задача разбивается на два последовательных шага: сначала можно определить, как молекула переходит с уровня на уровень независимо от ее положения $\mathbf{r}$, а затем добавить ее поведение в зависимости от координат $\mathbf{r}$. По этой причине мы используем название «составные марковские процессы» для любого случайного процесса, удовлетворяющего основному кинетическому уравнению (7.7.4).

Возьмем частную реализацию вышеупомянутого процесса, т. е. предположим, что известна последовательность моментов времени τ_δ, в которые происходят переходы, а также последовательность зани-

---

* K. S. Singwi and A. Sjolander, Phys. Rev., 119, 863 (1960).

** J. C. Giddings and H. Eyring, J. Physical Chem., 59, 416 (1955); J. C. Giddings, J. Chemical Phys., 26., 169 (1957).

*** Таким способом можно описать и некоторые немарковские процессы см.: G. H. Weiss. J. Statist. Phys., 8, 221 (1973); K. Lindenberg and R. I. Cukier, J. Chem. Phys., 67, 568 (1977); N. G. van Kampen, Physisica, 96 A, 435 (1979).

маемых уровней

$$0<\tau_1<\tau_2< \cdots < \tau_s<t$$
$$i_0 \quad i_1 \quad i_2 \quad \cdots \quad i_{s-1} \quad i_s. \tag{7.7.5}$$

Вероятность при этом условии иметь координаты $\mathbf{r}$ выражается формулой

$$[P_{i_s}(\mathbf{r}, t)]_{\text{усл}} = \exp[(t-\tau_s)\mathbf{F}_{i_s}]\exp[(\tau_s-\tau_{s-1})\mathbf{F}_{i_{s-1}}]\times$$
$$\times\exp[(\tau_2-\tau_1)\mathbf{F}_{i_1}]\exp[\tau_1\mathbf{F}_{i_0}]P_{i_0}(\mathbf{r}, 0). \tag{7.7.6}$$

Решение уравнения (7.7.4) получают с помощью умножения (7.7.6) на вероятность того, что имеет место реализация (7.7.5), и последующим суммированием по всем реализациям.

Для того чтобы найти эту вероятность, сначала отметим, что вероятность выживания на каком-либо уровне i хотя бы в течение времени τ, согласно (4.6.3), есть $e^{-\gamma_i\tau}$, где $\gamma_i=\sum_j \gamma_{j,i}$. Тогда вероятность того, что промежуток времени между τ и $\tau+d\tau$ происходит переход с уровня i на уровень j, имеет вид

$$\gamma_{j,i}e^{-\gamma_i\tau}d\tau.$$

Следовательно, плотность вероятности того, что реализуется (7.7.5) есть

$$\gamma_{i_1,i_0}\exp[-\gamma_{i_0}\tau_1]\gamma_{i_2,i_1}\exp[-\gamma_{i_1}(\tau_2-\tau_1)]\ldots\times$$
$$\times\gamma_{i_s,i_{s-1}}\exp[-\gamma_{i_{s-1}}(\tau_s-\tau_{s-1})]\exp[-\gamma_{i_s}(t-\tau_s)].$$

Отсюда

$$P_i(\mathbf{r}, t)=\sum_{i_0}[\delta_{ii_0}\exp[-\gamma_{i_0}t]\exp[t\mathbf{F}_{i_0}]+$$
$$+\sum_{s=1}\sum_{i_1,\ldots i_{s-1}}\int d\tau_1 d\tau_2\ldots d\tau_s\exp[-\gamma_i(t-\tau_s)]\exp[(t-\tau_s)\mathbf{F}_i]\times$$
$$\times\gamma_{i,i_{s-1}}\exp[-\gamma_{i_{s-1}}(\tau_s-\tau_{s-1})]\exp[(\tau_s-\tau_{s-1})\mathbf{F}_{i_{s-1}}]\ldots\times$$
$$\times\gamma_{i,i_0}\exp[-\gamma_{i_0}\tau_1]\exp[\tau_1\mathbf{F}_{i_0}]]P_{i_0}(\mathbf{r}, 0). \tag{7.7.7}$$

Интегрирование распространяется на все значения $\tau_1, \tau_2, \ldots, \tau_s$ с пределами, заданными (7.7.5), и $\gamma_{i,i}=0$.

Это запрещающее выражение можно записать более компактно. Рассматривая $P_i(\mathbf{r}, t)$ как компоненты вектора $P(\mathbf{r}, t)$, определяем матрицы

$$X_{ij}(t)=\gamma_{i,j}e^{-\gamma_j t+t\mathbf{F}_j},$$
$$Y_{i,j}(t)=\delta_{i,j}e^{-\gamma_j t+t\mathbf{F}_j}.$$

Тогда (7.7.7.) сводится к

$$P(\mathbf{r}, t)=\left[Y(t)+\sum_{s=1}^{\infty}\int_0^t d\tau_s\int_0^{\tau_s} d\tau_{s-1}\int_0^{\tau_{s-1}} d\tau_{s-2}\ldots\int_0^{\tau_2} d\tau_1\times\right.$$

$$\left.\times Y(t-\tau_s)X(\tau_s-\tau_{s-1})X(\tau_{s-1}-\tau_{s-2})\ldots X(\tau_1)\right]P(\mathbf{r}, 0). \quad (7.7.8)$$

Теперь введем преобразование

$$\int_0^{\infty} e^{-\lambda t}P(\mathbf{r}, t)\,dt=\hat{P}(\mathbf{r}, \lambda).$$

Тогда свертки в (7.7.8) превращаются в произведения:

$$\hat{P}(\mathbf{r}, \lambda)=\left[\hat{Y}(\lambda)+\sum_{s=1}^{\infty}\hat{Y}(\lambda)\{\hat{X}(\lambda)\}^s\right]P(\mathbf{r}, 0)=\hat{Y}(\lambda)\{1-\hat{X}(\lambda)\}^{-1}P(\mathbf{r}, 0). \quad (7.7.9)$$

Решение (7.7.4) имеет вид

$$P(\mathbf{r}, t)=\frac{1}{2\pi i}\int_{c-i\infty}^{c+i\infty} e^{t\lambda}\hat{Y}(\lambda)\{1-\hat{X}(\lambda)\}^{-1}d\lambda\cdot P(\mathbf{r}, 0), \quad (7.7.10)$$

где c выбирается правее всех сингулярностей подынтегральной функции.

Приложение. В качестве модели двухступенчатой диффузии возьмем $i=1, 2$ и $\mathbf{F}_i$, как в (7.7.1). Тогда $\gamma_{1,2}=\gamma_2$ и $\gamma_{2,1}=\gamma_1$. Для вычисления сечения рассеяния нейтронов необходимо знать плотность вероятности $G_s(\mathbf{r}, t)$ того, что молекула при $t=0$, находившаяся в точке $\mathbf{r}=0$, в момент времени t окажется в точке с координатами $\mathbf{r}$. Дифференциальное сечение рассеяния является ее преобразованием Фурье по пространству и по времени. Удобно применить преобразование Фурье по пространственным переменным непосредственно к (7.7.4), так что оба оператора $\mathbf{F}_i$ сводятся к множителям

$$\mathbf{F}_i=-D_ik^2.$$

Тогда имеем

$$\hat{X}_{ij}(\lambda)=\gamma_{i,j}\int_0^{\infty} e^{t(\mathbf{F}_j-\gamma_j-\lambda)}\,dt=\frac{\gamma_{i,j}}{\lambda+\gamma_j+D_jk^2},$$

$$\hat{Y}_{i,j}(\lambda)=\frac{\delta_{i,j}}{\lambda+\gamma_j+D_jk^2}.$$

И наконец, в качестве начального состояния берем дельта-функцию при $\mathbf{r}=0$:

$$P_i(\mathbf{k}, 0)=(2\pi)^{-3}g_i,$$

где g_i является равновесным распределением уровня i.

Подстановка в (7.7.9) дает

$$\begin{pmatrix}\hat{P}_1(k, \lambda)\\ \hat{P}_2(k, \lambda)\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\hat{Y}_{11} & 0\\ 0 & \hat{Y}_{22}\end{pmatrix}\frac{1}{1-\hat{X}_{12}\hat{X}_{21}}\begin{pmatrix}1 & -\hat{X}_{12}\\ -\hat{X}_{21} & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}g_1\\ g_2\end{pmatrix}(2\pi)^{-3}.$$

Поскольку рассеяние нейтронов не отличается для молекул, находящихся на разных уровнях, то интересно узнать плотность вероятности в пространстве $G_s(\mathbf{r}, t) = P_1(\mathbf{r}, t) + P_2(\mathbf{r}, t)$. Ее преобразование Фурье — Лапласа

$$\hat{G}_s(\mathbf{k}, \lambda) = \hat{P}_1(\mathbf{k}, \lambda) + \hat{P}_2(\mathbf{k}, \lambda) = \frac{g_1\hat{Y}_{11} + g_2\hat{Y}_{22} - g_1\hat{Y}_{22}\hat{X}_{21} - g_2\hat{Y}_{11}\hat{X}_{12}}{(2\pi)^3(1 - \hat{X}_{12}\hat{X}_{21})} =$$

$$= \frac{\lambda + g_1\gamma_2 + g_2\gamma_1 + (g_1D_2 + g_2D_1)k^2 - g_1\gamma_1 - g_2\gamma_2}{(2\pi)^3\{(\lambda + \gamma_1 + D_1k^2)(\lambda + \gamma_2 + D_2k^2) - \gamma_1\gamma_2\}}. \qquad (7.7.11)$$

Реально наблюдается величина

$$G_s(\mathbf{k}, \omega) = \hat{G}_s(\mathbf{k}, i\omega) + \hat{G}_s(\mathbf{k}, -i\omega). \qquad (7.7.12)$$

Упражнение. Докажите (7.7.12).

Упражнение. Покажите, что $g_1 = \gamma_2(\gamma_1 + \gamma_2)^{-1}$; $g_2 = \gamma_1(\gamma_1 + \gamma_2)^{-1}$.

Упражнение. Поведение $G_s(\mathbf{r}, t)$ при больших t определяется полюсом выражения (7.7.10) с наибольшей действительной частью. В связи с этим покажите, что $G_s(\mathbf{r}, t)$ при больших t удовлетворяет уравнению диффузии с перенормированным коэффициентом диффузии $D' = g_1D_1 + g_2D_2$. Насколько большим должно быть t?

Упражнение. Решите таким же способом модель хроматографии, заданную выражением (7.7.3). Покажите, что средняя дрейфовая скоростть есть $v' = g_1v$.

Упражнение. Формализм настоящего раздела можно также применять для ответа на следующий вопрос. Предположим, имеется простой марковский процесс с постоянными вероятностями перехода

$$\dot{p}_i = \sum_j (\gamma_{ij}p_j - \gamma_{ji}p_i). \qquad (7.7.13)$$

Найдите распределение вероятности времени, которое система проводит в заданном состоянии k (в течение интервала времени от 0 до t). Покажите, как характеристическая функция этого распределения получается из (7.7.10), если положить $\mathbf{F}_k = i\omega$, а все остальные $\mathbf{F}_j$ — равными нулю. Как это связано с (5.3.6)?

Упражнение. Покажите, как решение задачи в предыдущем упражнении можно использовать для того, чтобы получить решение хроматографической задачи.

Упражнение. Для процесса, определенного в связи с (2.1.8), выведите для $t_1 > 0$ формулу

$$f_1(t_1) = \frac{1}{2\pi i}\int_{-i\infty}^{i\infty} \frac{\hat{\omega}(\lambda)}{1 - \hat{\omega}(\lambda)} e^{\lambda t}\, d\lambda.$$

Покажите также что

$$f_n(t_1, t_2, \ldots, t_n) = f_1(t_1) f_1(t_2 - t_1) \ldots f_1(t_n - t_{n-1}).$$

Упражнение. Решение обычного основного кинетического уравнения для несоставных марковских процессов, таких, как (5.1.5), можно также записать как сумму по реализации. По аналогии с (7.7.10) результат имеет вид

$$P(y, t/y_0, 0) = \frac{1}{2\pi i}\int_{c-i\infty}^{c+i\infty} e^{t\lambda}\hat{Y}(\lambda)\{1 - \hat{X}(\lambda)\}^{-1}\, d\lambda.$$

Получите эту формулу непосредственно и покажите, что полюсы в ней являются собственными значениями $\mathbf{W}$. Это формулировка марковских процессов с помощью интегралов по траекториям.

Упражнение. Пусть $Y(t)$ — дискретный марковский процесс со значениями y_i и основным кинетическим уравнением (7.7.13). Пусть $G([k])$ — его производящий функционал (3.4.4). Покажите, что G можно найти, решив уравнение

$$\dot{x}_i = \sum_j (\gamma_{i,j} x_j - \gamma_{j,i} x_i) + ik(t)\, y_i x_i$$

с соответствующим начальным условием, а затем положив *

$$G([k]) = \sum_i x_i (t = \infty).$$

ГЛАВА 8

УРАВНЕНИЯ ФОККЕРА — ПЛАНКА И ЛАНЖЕВЕНА

Уравнение Фоккера — Планка является частным случаем основного кинетического уравнения и часто используется как его приближенная форма. Уравнение Ланжевена отличается от уравнения Фоккера — Планка, но математически эквивалентно ему. Оба уравнения оказываются полезными в линейных задачах, хотя для нелинейных систем их использование наталкивается на некоторые трудности.

8.1. ВВЕДЕНИЕ

Уравнение Фоккера — Планка является частным случаем основного кинетического уравнения, в котором **W** представляет собой оператор второго порядка, а именно

$$\frac{\partial P(y, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial y} A(y) P + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial y^2} B(y) P. \tag{8.1.1}$$

Область возможных значений переменной y обязательно непрерывна, и здесь мы будем считать ее бесконечной $(-\infty, +\infty)$. Коэффициенты $A(y)$ и $B(y)$ могут быть любыми действительными дифференцируемыми функциями с единственным ограничением $B(y) > 0$. Уравнение (8.1.1) можно разбить на два. Первое представляет собой уравнение непрерывности для плотности вероятности

$$\frac{\partial P(y, t)}{\partial t} = \frac{\partial J(y, t)}{\partial y}, \tag{8.1.2}$$

где $J(y, t)$ — поток вероятности. Второе уравнение является «основным»:

$$J(y, t) = A(y) P - {}^1/_2 \frac{\partial}{\partial y} B(y) P. \tag{8.1.3}$$

Уравнение Фоккера — Планка (7.1.1) называют также *уравнением Смолуховского*, *вторым уравнением Колмогорова* или *обобщенным уравнением диффузии*. Первый член в правой части уравнения (8.1.1) называется *переносным*, *конвективным* или *дрейфовым*, а второй —

* N. G. van Kampen, Phys. Letters, 76A, 104 (1980).

диффузионным или *флуктуационным*. Конечно, эти названия не должны предрешать заранее их физическую интерпретацию. Некоторые авторы различают уравнение Фоккера—Планка и основное кинетическое уравнение, употребляя последнее название только для дискретных процессов, таких, как одношаговые процессы.

Пусть для $t \geqslant t_1$ $P(y, t \mid y_1, t_1)$—такое решение уравнения (8.1.1), что при $t = t_1$ оно сводится к $\delta(y - y_1)$. В соответствии с (4.2.2) можно построить марковский процесс с вероятностью перехода $P(y_2, t_2 \mid y_1, t_1)$, у которого единовременное распределение $P_1(y_1, t_1)$ можно выбрать произвольно в один начальный момент времени t_0. Если выбрать для P_1 стационарное решение уравнения (7.1.1)

$$P^s(y) = \frac{\text{const}}{B(y)} \exp\left[2 \int_0^y \frac{A(y')}{B(y')} dy'\right], \tag{8.1.4}$$

то получающийся марковский процесс является стационарным. Для того чтобы функция P^s могла представлять распределение вероятности, она должна быть нормирована, однако это возможно только тогда, когда P^s интегрируема.

Марковские процессы, у которых основное кинетическое уравнение имеет вид (8.1.1), называют *непрерывными*, поскольку можно доказать, что их выборочные функции непрерывны (с вероятностью 1). Это название иногда приводит к неправильной мысли, что все процессы с непрерывной областью возможных значений относятся к этому типу и, следовательно, должны удовлетворять уравнению (8.1.1).

По определению, уравнение Фоккера—Планка всегда линейно по P*. Поэтому прилагательное «линейное» можно использовать в разных смыслах. Мы будем называть уравнение Фоккера—Планка (8.1.1) линейным, если A—линейная функция y и $B = \text{const}$:

$$\frac{\partial P(y, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial y}(A_0 + A_1 y) P + \frac{1}{2} B_0 \frac{\partial^2 P}{\partial y^2}. \tag{8.1.5}$$

Если $A_1 < 0$, то стационарное решение (8.1.4) гауссово. Действительно, в этом случае с помощью сдвига и изменения масштаба переменной y уравнение (8.1.5) можно свести к (4.3.20) и таким образом прийти к выводу, что *стационарный марковский процесс, определяемый линейным уравнением Фоккера—Планка, является процессом Орнштейна—Уленбека*. При $A_1 \geqslant 0$ стационарного распределения вероятности не существует.

Упражнение. Пусть $P(y, t \mid y_0, t_0)$—решение уравнения (8.1.1). Возьмем $t = t_0 + \Delta t$ и вычислим моменты величины $y - y_0 = \Delta t$ при малых Δt. Покажите, что при $\Delta t \to 0$

$$\frac{\Delta y}{\Delta t} = A(y_0); \quad \frac{\langle(\Delta y)^2\rangle}{\Delta t} = B(y_0); \quad \frac{\langle(\Delta y)^\nu\rangle}{\Delta t} = 0, \tag{8.1.6}$$

где $\nu \geqslant 3$.

---

* Уравнение Ландау в теории плазмы является нелинейным вариантом, но там P представляет собой плотность частиц, а не вероятность.

Упражнение. Найдите сингулярное ядро $\mathbf{W}(y \mid y')$, соответствующее дифференциальному оператору в уравнении (8.1.1). Вычислите его моменты переходов (5.8.2) и сравните результаты с (8.1.6).

Упражнение. Покажите, что дифференциальный оператор в (8.1.1) обладает свойствами **W**-матриц: он сохраняет вероятность и положительность. Покажите также, что при $B(y) > 0$ он неприводим и все решения стремятся к стационарному решению (8.1.4) (при условии, что решение нормируемо).

Упражнение. Покажите, что любой линейный дифференциальный оператор второго порядка, обладающий этими свойствами, перечисленными в предыдущем упражнении, должен иметь вид (8.1.1).

Упражнение. Решите уравнение (8.1.1) при $B(y)=2$, $A(y)=-y+1/y$, $y>0$, а также при $B=\text{const} \neq 2$ *.

Упражнение. Найдите явное решение уравнения (8.1.5).

Мы ввели уравнение Фоккера—Планка как частный вид основного кинетического уравнения. Однако в основном его используют для приближенного описания произвольного марковского процесса $Y(t)$, у которого отдельные переходы (скачки) невелики. В этом смысле линейное уравнение Фоккера—Планка использовалось в частных случаях Рэлеем **, Эйнштейном ***, Смолуховским **** и Фоккером *****.

Затем Планк ****** из произвольного основного кинетического уравнения вывел общее нелинейное уравнение Фоккера—Планка, предположив только, что скачки малы. И наконец, Колмогоров ******* дал математически строгий вывод этого уравнения, перейдя к пределу бесконечно малых скачков.

В качестве приближенной замены основного кинетического уравнения общего вида (5.1.5) уравнение Фоккера—Планка обладает двумя привлекательными чертами. Во-первых, оно является дифференциальным, а не дифференциально-интегральным уравнением.

Хотя его и не удается решить явно, кроме некоторых частных случаев, оно все равно проще в обращении. Вторая особенность более важна, она состоит в том, что нам не нужно знать полное ядро $W(y \mid y')$, а достаточно знания функций $A(y)$ и $B(y)$. Для любого подлинно стохастического процесса эти функции можно найти зная лишь минимум о механизме, лежащем в основе этого процесса. Сделать это можно следующим образом. Предположим, что физика некоторой системы подсказывает нам, что величина y приближенно должна быть марковским процессом. Время Δt выбираем настолько

---

* См. [6, § 4.4]. Другие решаемые уравнения Фоккера—Планка даются в работе: R. I. Cukier, K. Lakatos-Lindenberg and K. E. Shuler J. Statist. Phys. 9, 137 (1973).

** Lord Rayleigh. Phil. Mag. 32, 424 (1891)-Scientific Papers III (University Press, Cambridge, 1902), p. 473.

*** A. Einstein, Ann. Physik (4), 17, 549 (1905); 19, 371 (1906).

**** N. von Smoluchowski, Ann. Physik, (4) 21, 756 (1906); Physik. Zeits., 17, 575 and 585 (1916).

***** A. D. Fokker, Thesis (Leiden 1913); Ann. Physik (4) 43, 810 (1914).

****** M. Planck, Sitzungsber. Preuss. Akad. Wissens. (1917), p. 324-Physikalische Abhandlungen und Vortrage, II (Vieweg, Braunschweig, 1958), p. 435.

******* A. Kolmogorov, Mathem. Annalen., 104, 415 (1931).

малым, что y в течение этого времени существенно не меняется, но все же достаточно большим для того, чтобы выполнялось предположение о марковости. Вычислим для этого короткого времени среднее изменение $\langle \Delta y \rangle_y$ и его средний квадрат $\langle (\Delta y)^2 \rangle_y$ в первом порядке по Δt. Согласно уравнению (6.1.6), этого достаточно, чтобы найти $A(y)$ и $B(y)$ и отсюда получить уравнение Фоккера—Планка. При таком рассмотрении пути истинные уравнения движения можно решить только для малого времени Δt, например сделать с помощью теории возмущений. Тогда поведение системы на больших временах можно определить с помощью уравнения Фоккера—Планка. Описание системы удается разделить на описание ее поведения на коротких и на больших временах, используя предположение о марковости.

Существует и другой, более феноменологический путь определения функций A и B. Из (8.1.1) имеем

$$\partial_t \langle y \rangle = \langle A(y) \rangle. \tag{8.1.7}$$

Если пренебречь флуктуациями, то $A(\langle y \rangle) = \langle A(y) \rangle$ и для дифференциального уравнения, содержащего только величину $\langle y \rangle$, получаем

$$\partial_t \langle y \rangle = A(\langle y \rangle).$$

Это уравнение отождествляется с макроскопическим уравнением движения системы, которое предполагается известным. Таким образом, функция $A(y)$ определяется из наших сведений о макроскопическом поведении. Затем получаем $B(y)$, отождествляя (8.1.4) с равновесным распределением, которое, по крайней мере для замкнутой физической системы, известно из обычной статистической механики. Таким образом, для вывода уравнения Фоккера—Планка и, следовательно, для вычисления флуктуаций достаточно знать макроскопический закон и равновесную статистическую механику.

Эйнштейн и другие с большим успехом использовали это феноменологическое определение функций A и B (см. § 8.3), но только для линейных уравнений Фоккера—Планка. Если макроскопический закон нелинеен, то, как впервые отметил Макдональд*, возникают трудности.

Недостаток аргументов заключается в отождествлении коэффициента $A(y)$ с макроскопической зависимостью, хотя они вполне могут отличаться на член, имеющий тот же порядок величины, что и флуктуации: как только мы пренебрегаем флуктуациями, этот член в любом случае пропадает. Вследствие этого разные авторы получали разные, но одинаково правдоподобные выражения для шума в нелинейных системах. Эта трудность обусловила развитие более фундаментального подхода, излагаемого в следующей главе. Однако в настоящей главе мы ограничимся традиционным рассмотрением.

* Phil. Mag. 45, 63, and 345 (1954); Phys. Rev. 108, 541 (1957). Подробнее см. в кн.: N. G. van Kampen in: Fluctuatin Phenomena in Solids (R. E. Burgess ed., Acad. Press, New York, 1965).

Мы будем тщательно следить за тем, чтобы оставаться в пределах применимости, хотя эти пределы станут понятными лишь в следующей главе. Если у читателя возникнут какие-либо сомнения, советуем ему отложить их на потом.

В § 8.8 дано приближение Ланжевена. Математически оно эквивалентно приближению Фоккера—Планка, но используется в физике даже более широко, поскольку сформулировано на более привычном языке. Однако в нелинейных случаях оно наталкивается на те же самые и даже на некоторые дополнительные трудности; они составляют предмет § 8.9.

Упражнение. Вычислите величины (8.1.6) для случайного блуждания (6.2.1) и постройте уравнение Фоккера—Планка. Покажите, что асимптотическое распределение (6.2.12) удовлетворяет этому уравнению.

Упражнение. Тот же самый вопрос для асимметричного случайного блуждания (6.2.13).

Упражнение. В RC-цепи с неомическим сопротивлением уравнение Фоккера—Планка для напряжения U в соответствии с изложенными выше феноменологическими аргументами имеет вид

$$\frac{\partial P(V,\ t)}{\partial t}=\frac{\partial}{\partial V}\frac{V}{CR(V)}P+\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial V^2}B(V)P, \tag{8.1.8а}$$

$$B(V)=e^{CV^2/(2kT)}\left[\text{const}-2\int\limits_0^V\frac{V'}{CR(V')}e^{-CV'^2/(2kT)}\,dV'\right]. \tag{8.1.8б}$$

Смотрите, однако, обсуждение в § 8.9.

Упражнение. Примените к уравнению (8.1.1) нелинейное преобразование $\bar{y}=\Phi(y)$ и покажите, что преобразованная плотность $\bar{P}(\bar{y},\ t)$ подчиняется уравнению Фоккера—Планка с коэффициентами

$$\bar{B}(\bar{y})=\{\Phi'(y)\}^2B(y),\qquad \bar{A}(\bar{y})=\Phi'(y)A(y)+{}^1/_2\Phi''(y)B(y). \tag{8.1.9}$$

Упражнение. Критерий (5.6.1) детального равновесия нельзя применить к уравнению (8.1.1), но его эквивалентная формулировка (5.7.5) пригодна для дифференциальных операторов основного кинетического уравнения *. Покажите, что (8.1.1) удовлетворяет соотношению детального равновесия тогда и только тогда, когда

$$A(y)=\frac{1}{2P^e(y)}\frac{\partial}{\partial y}P^e(y)B(y). \tag{8.1.10}$$

В этом случае уравнение можно записать в следующем виде:

$$\frac{\partial P(y,\ t)}{\partial t}={}^1/_2\frac{\partial}{\partial y}P^e(y)B(y)\frac{\partial}{\partial y}\frac{P(y,\ t)}{P^e(y)}. \tag{8.1.11}$$

8.2. ВЫВОД УРАВНЕНИЯ ФОККЕРА — ПЛАНКА

Планк вывел уравнение Фоккера—Планка как аппроксимацию основного кинетического уравнения (5.1.5) следующим образом. Сначала выразим вероятность перехода W как функцию скачка r и

* S. R. de Groot and N. G. van Kampen, Physica, 21, 39 (1954).

начальной точки:

$$W(y \mid y') = W(y', r), \quad r = y - y'. \tag{8.2.1}$$

Тогда общий вид основного кинетического уравнения (5.1.5) таков:

$$\frac{\partial P(y, t)}{\partial t} = \int W(y-r; r) P(y-r, t)\, dr - P(y, t) \int W(y; -r)\, dr. \tag{8.2.2}$$

Основное предположение состоит в том, что имеют место только малые скачки, т. е. $W(y'; r)$ является функцией, имеющей острый пик по переменной r, но медленно меняется с изменением y, или, говоря более точно, существует некоторая величина $\delta > 0$ такая, что

$$W(y'; r) \approx 0 \quad \text{для } |r| > \delta, \tag{8.2.3а}$$

$$W(y' + \Delta y; r) \approx W(y'; r) \quad \text{для } |\Delta y| < 0. \tag{8.2.3б}$$

Второе предположение состоит в том, что интересующее нас решение $P(y, t)$ также медленно меняется с изменением y (в том же смысле, что и (8.2.3б)). Тогда можно выполнить сдвиг из y в $y-r$ в первом интеграле (8.2.2) с помощью разложения Тейлора до второго порядка:

$$\frac{\partial P(y, t)}{\partial t} = \int W(y; r) P(y, t)\, dy - \int r \frac{\partial}{\partial y} \{W(y; r) P(y; t)\}\, dr + \\ + \frac{1}{2} \int r^2 \frac{\partial^2}{\partial y^2} \{W(y; r) P(y, t)\}\, dr - P(y, t) \int W(y; -r)\, dr.$$

Отметим, что зависимость $W(y; r)$ от своего второго аргумента r полностью сохраняется; разложение по этому аргументу недопустимо, поскольку W быстро меняется по r. Первый и четвертый члены сокращаются. Другие два члена можно записать с помощью моментов перехода

$$a_\nu(y) = \int_{-\infty}^{\infty} r^\nu W(y; r)\, dr, \tag{8.2.4}$$

уже определенных в (5.8.2). Результат имеет вид

$$\frac{\partial P(y, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial y} \{a_1(y) P\} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial y^2} \{a_2(y) P\}. \tag{8.2.5}$$

Таким образом, мы вывели уравнение Фоккера—Планка (8.1.1) из основного кинетического уравнения и одновременно выразили коэффициенты через вероятности перехода W. Эти выражения с точностью до обозначений совпали с (8.1.6).

Примечание. Совсем не трудно включить все члены разложения Тейлора в (8.2.2):

$$\frac{\partial P(y, t)}{\partial t} = \sum_{\nu=1}^{\infty} \frac{(-1)^\nu}{\nu!} \left(\frac{\partial}{\partial y}\right)^\nu \{a_\nu(y) P\}. \tag{8.2.6}$$

Это так называемое *разложение Крамерса—Мойала* *. Уравнение (8.2.6) формально совпадает с основным кинетическим уравнением и поэтому не дает упрощений; подразумевается, однако, что его можно оборвать, оставив некоторое подходящее количество членов. Приближение Фоккера—Планка предполагает, что все члены после $\chi = 2$ пренебрежимы. Колмогоровское доказательство основано на предположении, что $a_\nu = 0$ для $\nu > 2$. Однако это предположение для физических систем не выполняется **. В следующей главе мы расположим основное кинетическое уравнение систематическим образом по степеням малого параметра и найдем, что не существует простого соответствия между последовательными порядками и последовательными членами разложения Крамерса—Мойала.

Упражнение. Для процесса распада, рассмотренного в § 4.6, постройте уравнение Фоккера—Планка, используя (8.1.6). Покажите, что оно правильно дает первый и второй моменты, но не для P^s.

Упражнение. Постройте уравнение Фоккера—Планка для симметричного случайного блуждания и выведите из него (6.2.12).

Упражнение. Найдите высшие a_ν для случайного блуждания и заметьте, что они не малы. Почему, несмотря на это, уравнение Фоккера—Планка дает правильный результат (6.2.12)?

Упражнение. Частица на большой скорости пересекает среду, в которой сталкивается со случайно расположенными рассеивателями, которые ее слегка отклоняют с дифференциальным сечением $\sigma(\theta)$. Найдите уравнение Фоккера—Планка для полного отклонения, предполагая его малым.

Упражнение. Выведите из (8.2.5) соотношения

$$\partial_t \langle y \rangle = \langle a_1(y) \rangle,$$
$$\partial_t \langle\langle y^2 \rangle\rangle = 2 \langle (y - \langle y \rangle) a_1(y) \rangle + \langle a_2(y) \rangle. \tag{8.2.7}$$

Покажите также, что они являются точными следствиями основного кинетического уравнения. Отметим, что аналогичные соотношения для высших моментов уже не удается правильно воспроизвести с помощью уравнения Фоккера—Планка (ср. с § 5.8).

Упражнение. Рассмотрите процесс с независимыми приращениями, определенными в (4.4.7). Его основное кинетическое уравнение решено в упражнении § 5.1. Исследуйте, как модифицируется общее решение в приближении Фоккера—Планка. Покажите, что для $P(y, t \mid y_0, t_0)$ это приближение является плохим, когда $t - t_0 < a_4/a_2^2$, из-за того, что второе предположение, приведенное выше, не выполняется.

Уравнение Фоккера—Планка станет не приближенным, а точным, если коэффициенты в W будут зависеть от параметра ε таким образом, чтобы сделанные предположения были точными в пределе $\varepsilon \to 0$ [1, p. 333]. Мы продемонстрируем этот подход на асимметричном случайном блуждании, которое описывается основным кинетическим уравнением (6.2.13) в виде

$$\dot{p}_n = \alpha (p_{n+1} - p_n) + \beta (p_{n-1} - p_n). \tag{8.2.8}$$

Сначала выберем масштаб шагов, полагая

$$\varepsilon n = x, \quad p_n(t) = \varepsilon P(x, t).$$

Это приведет к тому, что весь процесс вмещается в малый интервал x и, для того чтобы компенсировать малость шагов, нужно

* J. E. Moyal, J. Roy. Statist. Soc. (B), 11, 150 (1949).

** N. G. van Kampen in: Thermodynamics and Kinetics of Biological Systems (A. I. Zotin ed., W. de Gruyter, Berlin, 1981).

увеличивать масштаб вероятностей перехода α, β. Для того чтобы удержать период на естественных масштабах, нужно положить

$$\beta - \alpha = A/\varepsilon$$

с постоянной A, не зависящей от ε. Аналогично, для того чтобы диффузионное расплывание не обратилось в нуль, надо положить

$$\beta + \alpha = \beta/\varepsilon^2.$$

Тогда (8.2.8) принимает вид

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = \left(\frac{B}{2\varepsilon^2} - \frac{A}{2\varepsilon}\right)\left\{\varepsilon \frac{\partial P}{\partial x} + \frac{1}{2}\varepsilon^2 \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} + \ldots\right\} + \\ + \left(\frac{B}{2\varepsilon^2} + \frac{A}{2\varepsilon}\right)\left\{-\varepsilon \frac{\partial P}{\partial x} + \frac{1}{2}\varepsilon^2 \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} - \ldots\right\} = \\ = -A \frac{\partial P}{\partial x} + \frac{1}{2} B \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} + O(\varepsilon^2). \qquad (8.2.9)$$

Таким образом, мы получили уравнение Фоккера—Планка как точный результат в пределе $\varepsilon \to 0$. Однако этот вывод неудовлетворителен, потому что на практике параметр ε не стремится к нулю. Возникает вопрос: насколько хорошим приближением является приближение Фоккера—Планка для заданных α, β (или в более общем случае для заданной W)? На этот вопрос дает ответ вывод уравнения, принадлежащий Планку, или более систематический вывод, приведенный в следующей главе.

Упражнение. Проверьте, что коэффициенты в уравнении (8.2.9) действительно совпадают с коэффициентами в (8.1.6).

Упражнение. Проверьте, что коэффициенты в уравнении (8.2.9) действительно совпадают с коэффициентами в (8.1.6).

Упражнение. Покажите, что разные зависимости α и β от ε не приводят к уравнению (8.2.9).

Упражнение. Основное кинетическое уравнение для мальтузианской популяции имеет вид

$$\dot{p}_n = \alpha(\mathrm{E} - 1)\, n p_n + \beta(\mathrm{E}^{-1} - 1)\, n p_n.$$

Выведите приближение (8.2.5) непосредственно, а также с помощью соответствующего ε-предела.

8.3. БРОУНОВСКОЕ ДВИЖЕНИЕ

Физическое описание броуновской частицы дано в § 4.1. Оно привело нас к заключению, что координату броуновской частицы X можно рассматривать как марковский процесс в огрубленном масштабе времени. Частица при таком движении совершает случайные прыжки вперед и назад по оси X. Прыжки могут быть любой длины, но вероятность больших прыжков убывает. Более того, вероятность симметрична и не зависит от начальной точки. Тогда

$$a_1 = \frac{\langle \Delta X \rangle_x}{\Delta t} = 0, \qquad a_2 = \frac{\langle (\Delta X)^2 \rangle_x}{\Delta t} = \mathrm{const}.$$

Уравнение Фоккера—Планка для перехода имеет вид

$$\frac{\partial P(X,\ t)}{\partial t}=\frac{a_2}{2}\frac{\mathrm{d}^2P(X,\ t)}{\partial X^2}. \tag{8.3.1}$$

Даже не решая это уравнение можно прийти к следующему важному заключению. Оно имеет тот же самый вид, что и уравнение диффузии (4.2.8), и на самом деле является уравнением диффузии для броуновских частиц в жидкости. Следовательно, $^1/_2a_2$ тождественно совпадает с феноменологической константой D. С другой стороны, a_2 выражается через микроскопические члены с помощью (8.2.4) или (8.1.6). Это приводит к соотношению Эйнштейна

$$D=\frac{\langle(\Delta X)^2\rangle_X}{2\Delta t}, \tag{8.3.2}$$

которое связывает макроскопическую константу D с микроскопическими скачками частицы.

Рассмотрим ансамбль броуновских частиц, которые при $t=0$ все находятся в точке $t=0$. Их координаты при $t\geqslant 0$ составляют стохастический процесс $X(t)$, который предполагается марковским, а его вероятности перехода определяются уравнением (8.3.1). Это винеровский процесс, определенный в § 4.2. Их плотность при $t>0$ дается решением уравнения (8.3.1) с начальным условием $P(X,\ 0)=\delta(X)$. Эти решения описываются формулой (4.2.5):

$$P(X,\ t)=\frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}}\exp\left[-\frac{X^2}{4Dt}\right]. \tag{8.3.3}$$

Мы получили гауссиан с максимумом в начале координат и шириной, возрастающей со временем по корневому закону:

$$\sqrt{\langle X^2(t)\rangle}=\sqrt{2Dt}.$$

Теперь рассмотрим ту же самую броуновскую частицу, подвергающуюся действию добавочной постоянной силы, скажем, воздействию гравитационного поля Mg в направлении $-X$. Если мы теперь запишем трение частицы об окружающую жидкость как $M\gamma$, то получим среднюю скорость дрейфа $-g/\gamma$. Она накладывается на броуновское движение, так что теперь

$$a_1=\frac{\langle\Delta X\rangle_X}{\Delta t}=-\frac{g}{\gamma},\quad a_2=2D. \tag{8.3.4}$$

Получающееся уравнение Фоккера—Планка имеет вид

$$\frac{\partial P(X,\ t)}{\partial t}=\frac{g}{\gamma}\frac{\partial P}{\partial X}+D\frac{\partial^2P}{\partial X^2}. \tag{8.3.5}$$

Физически очевидно, что это уравнение не имеет стационарного решения, когда X изменяется от $-\infty$ до $+\infty$. Однако, если представить отражающее дно при $X=0$, уравнение нужно решать только

для области $X > 0$ с условием исчезновения потока на границе:

$$\frac{g}{\gamma} P + D \frac{dP}{dX} = 0 \quad \text{при} \quad X = 0. \tag{8.3.6}$$

Уравнение с этой модификацией уже имеет стационарное решение. Далее, из равновесной статистической механики мы знаем, что это стационарное решение не что иное, как барометрическая формула для плотности

$$P^e(X) = \text{const} \cdot \exp\left[-\frac{Mg}{kT} X\right]. \tag{8.3.7}$$

Легко убедиться, что эта функция действительно удовлетворяет (8.3.5) и (8.3.6) при условии, что

$$D = \frac{kT}{M\gamma}. \tag{8.3.8}$$

Мы получили соотношение Эйнштейна, совместно с (8.3.2) оно связывает коэффициент затухания γ со средним квадратом флуктуаций:

$$\frac{\langle(\Delta X)^2\rangle_X}{\Delta t} = \frac{2kT}{M\gamma}. \tag{8.3.9}$$

Упражнение. В выражениях (8.3.4) предполагается, что присутствие поля не влияет на a_2. Для того чтобы оправдать это предположение, сравните смещение ΔX в присутствии поля со средним смещением $\Delta_0 X$ в его отсутствие

$$\Delta X = \Delta_0 X - (g/\gamma)\,\Delta t$$

и вычислите $\langle \Delta X^2\rangle / \Delta t$.

Упражнение. Решите уравнение (8.3.5) для $-\infty < X < \infty$, если $P(X, 0)$ задано с помощью характеристической функции.

Упражнение. Решите то же самое уравнение с помощью подстановки

$$P(X, t) = R(X, t) \exp\left[-\frac{Mg}{2kT} X - \frac{Mg^2}{4\gamma kT} t\right].$$

Упражнение. Решите то же самое уравнение для $0 < X < \infty$ с граничным условием (8.3.6) и произвольным $P(X, 0)$.

Упражнение. Рассмотрите правую часть уравнения (8.3.5) как линейный оператор $\mathbf{W}$, действующий на пространство функций, определенных для $0 < X < \infty$ и удовлетворяющих (8.3.6). Проверьте, что оператор обладает свойством симметрии (5.7.5) и является отрицательно полуопределенным, а единственная собственная функция с нулевым собственным значением определяется формулой (8.3.7).

Упражнение. Поясните, почему сверхзаторможенная частица, подвергающаяся воздействию внешней силы с потенциалом $U(X)$, описывается уравнением

$$\frac{\partial P(X, t)}{\partial t} = \frac{1}{M\gamma}\left[\frac{\partial}{\partial X} U'(X) P + kT \frac{d^2P}{dX^2}\right]. \tag{8.3.10}$$

Термин «сверхзаторможенная» относится к предположению, что γ столь велико, что скорость можно взять пропорциональной силе (ср. с (8.7.1) и (10.2.4))

Упражнение. Для маятника, находящегося в потенциальном поле $U(\theta)$ и подвергающегося действию постоянного вращающего момента τ, это уравнение имеет вид

$$\frac{\partial P(\theta, t)}{\partial t} = \frac{1}{Ml^2\gamma}\left[\frac{\partial}{\partial\theta}\{U'(\theta) - \tau\} P + kT \frac{\partial^2 P}{\partial\theta}\right] \quad (0 \leqslant \theta < 2\pi). \tag{8.3.11}$$

Поскольку угол ограничен, стационарное решение не обладает нулевым потоком, как это было в случае (8.3.6), но вместо этого мы имеем условие $P(0)=P(2\pi)$. Найдите стационарное решение и соответствующий поток и выведите отсюда среднюю угловую скорость $\langle\dot{\theta}\rangle^s$.

Упражнение. Пусть $E(t)=\exp[i\omega_0 t+i\Phi(t)]$ представляет собой волну со случайной фазой Φ, вероятность которой удовлетворяет уравнению

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

Для детектора с частотой отклика ψ выходной сигнал

$$U=\left|\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\psi(\omega)\,d\omega\int_{-\infty}^{\infty}e^{-i\omega t}E(t)\,dt\right|^2.$$

Покажите, что

$$\langle U\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}|\psi(\omega)|^2\frac{D/\pi}{(\omega-\omega_0)^2+D^2}\,d\omega. \tag{8.3.12}$$

Таким образом, случайная фаза приводит к уширению лоренцевой спектральной линии.

Упражнение. Две частицы диффундируют независимо. Покажите, что расстояние между ними подчиняется уравнению диффузии с постоянной диффузии, равной сумме коэффициентов диффузии отдельных частиц *.

8.4. РЭЛЕЕВСКАЯ ЧАСТИЦА

Рэлеевская частица — это то же самое, что и броуновская частица, но рассматриваемая в более мелкой временной шкале. Временные промежутки Δt предполагаются малыми по сравнению со временем релаксации скорости, но по-прежнему большими по сравнению с длительностью отдельных столкновений с молекулами газа. Тогда в качестве стохастической функции следует рассматривать скорость, а не координату частицы. Достаточно ограничиться рассмотрением одномерного случая, что мы иногда будем подчеркивать, употребляя название *поршень Рэлея* **.

Макроскопический закон, которому подчиняется скорость V, является законом линейного затухания

$$\dot{V}=-\gamma V, \tag{8.4.1}$$

если скорость V не слишком велика. Тогда

$$a_1(V)=\frac{\langle\Delta V\rangle_V}{\Delta t}=-\gamma V.$$

Второй момент перехода должен быть положительным даже при $V=0$, и поэтому его можно считать постоянным, когда скорость V

* M. V. Smoluchowski, Z. Phys. Chemie, 92, 129 (1917).

** Обзор дан M. R. Hoare в кн.: Advances in Chemical Physics, 20 (I. Prigogine and S. A. Rice eds., Wiley—Interscience, New York, 1971. См. также: J. A. Barker, M. R. Hoare, and S. Ravel, J. of Physics (London) A14, 423 (1981); W. Driessler; J. Statist. Phys., 24, 595 (1981).

не слишком велика:

$$a_2(V) = a_{2,0} + O(V^2) \approx a_{2,0}. \tag{8.4.2}$$

Тогда уравнение Фоккера—Планка имеет вид

$$\frac{\partial P(V,t)}{\partial t} = \gamma \frac{\partial}{\partial V} VP + \frac{a_{2,0}}{2} \frac{\partial^2 P}{\partial V^2}. \tag{8.4.3}$$

Из равновесной статистической механики мы знаем, что стационарное решение должно иметь вид

$$P^{e}(V) = \left(\frac{M}{2\pi kT}\right)^{1/2} \exp\left[-\frac{M}{2kT} V^2\right], \tag{8.4.4}$$

где T — температура газа. Подстановка в уравнение (8.4.3) дает

$$\frac{a_{2,0}}{2} = \gamma \frac{kT}{M}. \tag{8.4.5}$$

В результате получаем уравнение Рэлея, описывающее плотность вероятности для скорости тяжелой частицы:

$$\frac{\partial P(V,t)}{\partial t} = \gamma \left\{\frac{\partial}{\partial V} VP + \frac{kT}{M} \frac{\partial^2 P}{\partial V^2}\right\}. \tag{8.4.6}$$

Это линейное уравнение Фоккера—Планка. С точностью до константы, которую можно устранить масштабным преобразованием, оно совпадает с уравнением (4.3.20), описывающим вероятность перехода для процесса Орнштейна—Уленбека. Стационарное решение уравнения (8.4.6) совпадает с P, заданным (4.3.10). Тогда в состоянии равновесия $V(t)$ — процесс Орнштейна—Уленбека.

Упражнение. Выведите непосредственно из уравнения (8.4.6), что для фиксированного $V(0) = V_0$ имеют место соотношения

$$\langle V(t)\rangle_{V_0} = V_0 e^{-\gamma t}, \tag{8.4.7}$$

$$\langle V(t)^2\rangle_{V_0} = V_0^2 e^{-2\gamma t} + \frac{kT}{M}(1 - e^{-2\gamma t}). \tag{8.4.8}$$

Следовательно,

$$\langle\langle V(t)\, V(t+\tau)\rangle\rangle^{e} = \frac{kT}{M} e^{-\gamma\tau}. \tag{8.4.9}$$

Упражнение. Покажите, что решение уравнения (8.4.6) с начальным условием $P(V, 0) = \delta(V - V_0)$ дается выражением

$$P(V,t) = \left[\frac{2\pi kT}{M}(1 - e^{-2\gamma t})\right]^{-1/2} \exp\left[-\frac{M}{2kT} \frac{(V - V_0 e^{-\gamma t})^2}{1 - e^{-2\gamma t}}\right]. \tag{8.4.10}$$

Упражнение. Найдите решение, предположив, что оно имеет гауссов вид $P(V, t) = \exp[-AV^2 - BV - C]$, и найдите коэффициенты A, B, C как функции времени t.

Упражнение. Решите уравнение (8.4.6) систематически преобразовав его в уравнение, описывающее характеристическую функцию $G(k, t)$ вероятности P. Это уравнение первого порядка и его можно решить с помощью метода, изложенного в § 6.6.

Упражнение. Вращение частицы, имеющей форму эллипсоида и взвешенной в жидкости, описывается макроскопическим уравнением движения

$$I_i\dot{\omega}_i=\sum_{j,k}\varepsilon_{ijk}I_j\omega_j\omega_k-C_i\omega_i,$$

где I_i — три главных момента инерции, ω_i — компоненты угловой скорости вдоль главных осей, ε_{ijk} — абсолютно антисимметричный тензор Леви — Чивита, а C_i — коэффициенты трения. Соответствующее уравнение Фоккера — Планка имеет вид *

$$\frac{\partial P(\omega,t)}{\partial t}=-\sum_i\frac{1}{I_i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\omega_i}\left\{\sum_{j,k}\varepsilon_{ijk}I_j\omega_j\omega_k-C_i\omega_i\right\}P+\sum D_i\frac{\partial^2 P}{\partial\omega_i^2}. \qquad (8.4.11)$$

Найдите соотношение между C_i и D_i.

Итак, мы описали поведение частицы в мелкомасштабной временно́й шкале. Теперь мы должны получить отсюда огрубленное описание, как это было сделано в § 8.3. Рассмотрим ансамбль одинаковых, но независимых броуновских частиц, которые при $t=0$ все находятся в точке $X=0$ со скоростями, распределенными по равновесному закону. Их скорости составляют процесс Орнштейна — Уленбека, и нам нужно изучить случайный процесс $X(t)$, определенный следующим образом:

$$X(t)=\int_0^t V(t')\,\mathrm{d}t'.$$

Как следует из этой формулы, $X(t)$ является суммой гауссовых переменных и, следовательно, процесс $X(t)$ тоже гауссов. Он имеет среднее значение, равное нулю, потому что

$$\langle X(t)\rangle=\int_0^t\langle V(t')\rangle\,\mathrm{d}t'=0.$$

Средние берутся по ансамблю, определенному выше. Теперь нам нужно вычислить среднее

$$\langle X(t_1)\,X(t_2)\rangle=\int_0^{t_1}\mathrm{d}t'\int_0^{t_2}\mathrm{d}t''\langle V(t')\,V(t'')\rangle=$$

$$=\langle V^2\rangle\int_0^{t_1}\mathrm{d}t'\int_0^{t_2}\mathrm{d}t''\,\mathrm{e}^{-\gamma|t'-t''|}.$$

Интеграл берется элементарно. Поскольку левая часть, по определению, симметрична по t_1, t_2, достаточно вычислить ее для $0\leqslant t_1\leqslant t_2$. В результате получим

$$\langle X(t_1)\,X(t_2)\rangle=\frac{kT}{M}\left[\frac{2}{\gamma}t_1-\frac{1}{\gamma^2}+\frac{1}{\gamma^2}\left\{\mathrm{e}^{-\gamma t_1}+\mathrm{e}^{-\gamma t_2}-\mathrm{e}^{-\gamma(t_2-t_1)}\right\}\right]. \qquad (8.4.12)$$

---

* P. S. Hubbard, Phys. Rev., A15, 329 (1977); G. W. Ford, J. T. Lewis, and J. McConnel. Phys. Rev., A19, 907 (1979); G. Wyllie, Physics Reports, 61, 327 (1980).

Теперь процесс $X(t)$ полностью определен, поскольку он гауссов, а его первые два момента известны. Однако он не совпадает с винеровским процессом, определенным (8.3.1), потому что его автокорреляционная функция сложнее, чем (4.2.7а). Действительно, $X(t)$ даже не марковский процесс, из-за того что он все еще описывается в мелкомасштабной временно́й шкале, относящейся к рэлеевской частице. В крупномасштабной временно́й шкале допускаются только разности времен, значительно превышающие время затухания скорости $1/\gamma$:

$$t_1 \gg 1/\gamma, \quad t_2 - t_1 \gg 1/\gamma.$$

В этом приближении (8.4.12) сводится к (4.2.7а) и $X(t)$ становится неотличимым от решения (8.3.1). Отметим, что значение константы a_2 в (8.3.1) нам удалось найти здесь без привлечения дополнительных сложностей, включая гравитационное поле.

Упражнение. Возьмите ансамбль рэлеевских частиц, находящихся в момент $t=0$ в начале координат и имеющих максвелловское распределение скоростей. Покажите, что

$$\lim_{t \to \infty} \frac{\langle X(t)^2 \rangle}{t} = 2D. \tag{8.4.13}$$

(В кинетической теории это выражение часто используют в качестве определения коэффициента диффузии, несмотря на очевидный факт, что, строго говоря, для конечного сосуда предел обращается в ноль.)

Упражнение. Постройте уравнение для $P(V, t)$ в присутствии постоянной силы и выведите из него (8.3.5).

Упражнение. Вероятность перехода за единичное время для скорости поршня Рэлея в газе дается выражением

$$W(V' \mid V) = \nu A \left(\frac{M+m}{2m}\right)^2 \mid V' - V \mid F\left(\frac{M+m}{2m} V' - \frac{M-m}{2m} V\right), \tag{8.4.14}$$

где M — масса поршня, A — его сечение, m — масса молекулы газа, ν — плотность числа молекул, F — распределение скорости молекул *.

Упражнение. Вычислите из (8.4.14) моменты перехода, взяв в качестве F распределение Максвелла. Покажите, что (8.4.1) и (8.4.2) справедливы, когда скорость V мала по сравнению со средней скоростью молекул газа и, следовательно, ее можно использовать для описания равновесных флуктуаций, если $M \gg m$.

Упражнение. Сформулируйте процесс, описанный V и X, рэлеевской частицы, как составной марковский процесс в смысле § 8.7.

8.5. ПРИЛОЖЕНИЕ К ОДНОШАГОВЫМ ПРОЦЕССАМ

Предположим, что мы столкнулись с задачей, связанной с одношаговыми процессами, в которой коэффициенты r_n и g_n нелинейны, но могут быть представлены гладкими функциями $r(n)$, $g(n)$. Термин «гладкие» означает, что функции $r(n)$ и $g(n)$ не только непре-

* Различные аспекты соответствующего основного кинетического уравнения изучены в работах: C. T. J. Alkemade, N. G. van Kampen, and D. K. C. MacDonald, Proc. Roy. Soc. A271, 449 (1963); M. R. Hoare and C. H. Kaplinsky, Physica, 81A, 349 (1975).

рывны и достаточное число раз дифференцируемы, но также что они мало меняются между точками n и $n+1$. Предположим далее, что мы интересуемся решениями $P_n(t)$, которые также можно представить гладкими функциями $P(n, t)$. Тогда имеет смысл аппроксимировать задачу с помощью такого описания, в котором n рассматривается как непрерывная переменная. Более того, поскольку изменение n на отдельном шаге мало по сравнению с другими длинами, встречающимися в задаче, можно ожидать, что основное кинетическое уравнение можно аппроксимировать уравнением Фоккера — Планка. Общая схема, изложенная в § 8.2, дает два коэффициента, но здесь мы будем использовать другой способ вывода, специально приспособленный для одношаговых процессов.

Основное кинетическое уравнение, которое нам нужно решить, имеет вид

$$\dot{P}(n, t) = (\mathbf{E}-1)\, r(n)\, P(n, t) + (\mathbf{E}^{-1}-1)\, g(n)\, P(n, t). \quad (8.5.1)$$

Поскольку оператор шага $\mathbf{E}$ здесь действует на гладкие функции, его можно заменить рядом Тейлора:

$$\mathbf{E} = 1 + \frac{\partial}{\partial n} + \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial n^2} + \frac{1}{3!}\frac{\partial^3}{\partial n^3} + \ldots . \quad (8.5.2)$$

Тогда, опуская все производные, порядок которых больше двух, получаем

$$\dot{P}(n, t) = \frac{\partial}{\partial n}\{r(n) - g(n)\}\, P + \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial n^2}\{r(n) + g(n)\}\, P. \quad (8.5.3)$$

Это приближение Фоккера — Планка для одношаговых процессов.

В качестве примера возьмем подход Бюргесса к флуктуации в полупроводниках *. Пусть n — число носителей заряда в зоне проводимости, $g(n)$ и $r(n)$ — соответственно вероятности генерации и рекомбинации за единичное время. Нет необходимости задавать их явно, а достаточно лишь знать, что $r(n)$ монотонно возрастает, а $g(n)$ убывает с изменением n, как это следует из физических соображений. Вообще говоря, получить точное решение уравнения (8.5.3) не представляется возможным, да, наверное, этого и не следует делать, потому что оно все равно не имело бы большого физического смысла из-за тех приближений, которые мы уже сделали, чтобы получить (8.5.3). Однако следующие ограниченные выводы все же оказываются правильными, что будет показано в § 9.3 и 9.4.

Макроскопическое уравнение, связанное с (8.5.3) имеет вид

$$\dot{\mathbf{n}} = -r(n) + g(\mathbf{n}). \quad (8.5.4)$$

---

* R. E. Burgess, Proc. Phys. Soc. London, B68, 661 (1955); B69, 1020 (1956); A. van der Ziel, Noise (Prentice, Englewood Cliffs, N. Y., 1954).

Тогда стационарное значение $\mathbf{n}$ определяется соотношением

$$r(\mathbf{n}^s) = g(\mathbf{n}^s). \tag{8.5.5}$$

Это уравнение имеет одно решение (рис. 21). Мы хотим исследовать флуктуации в стационарном состоянии. Для этого положим $n = \mathbf{n}^s + x$ и подставим его в (8.5.3). Разложив коэффициенты по x и оставив только низшие неисчезающие члены, получим

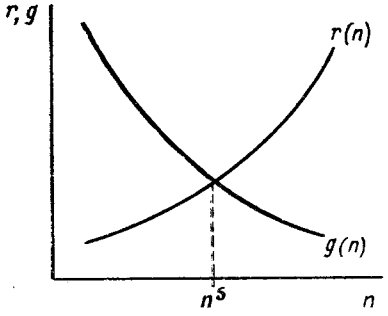

Рис. 21. Стационарное состояние возникает как равновесие между генерацией и рекомбинацией

$$\frac{\partial P(x,\ t)}{\partial t} = \{r'(\mathbf{n}^s) - g'(\mathbf{n}^s)\}\frac{\partial}{\partial x}xP + \frac{r(\mathbf{n}^s) + g(\mathbf{n}^s)}{2}\frac{\partial^2 P}{\partial x^2}. \tag{8.5.6}$$

Таким образом, наше дополнительное приближение для окрестности $\mathbf{n}^s$ приводит к линейному уравнению Фоккера—Планка, имеющему такой же вид, как и (4.3.20) и (8.4.6). Следовательно, флуктуации в стационарном состоянии опять оказываются процессом Орнштейна—Уленбека. В § 10.4 будет показано, что приближение (8.5.6) является непротиворечивым *.

Упражнение. Выведите из уравнения (8.5.6) соотношения

$$\langle x^2\rangle^s = \langle\langle n^2\rangle\rangle^s = \frac{1}{2}\frac{r(\mathbf{n}^s) + g(\mathbf{n}^s)}{r'(\mathbf{n}^s) - g'(\mathbf{n}^s)}, \tag{8.5.7}$$

$$\langle\langle n(t)\, n(t+\tau)\rangle\rangle^s = \langle\langle n^2\rangle\rangle^s\, e^{-\tau/\tau_0}, \tag{8.5.8}$$

$$1/\tau_0 = r'(\mathbf{n}^s) - g'(\mathbf{n}^s), \tag{8.5.9}$$

$$S_n(\omega) = \frac{2}{\pi}\langle\langle n^2\rangle\rangle^s \frac{\tau_0}{1 + \omega^2\tau_0^2}. \tag{8.5.10}$$

Упражнение. Покажите, что те же результаты получаются простой линеаризацией $r(n)$ и $g(n)$ вблизи $\mathbf{n}^s$.

Упражнение. Покажите, что результаты (8.5.5) и (8.5.7) согласуются с явным выражением (4.3.8) для $P^s(n)$.

Упражнение. Используя (8.5.2), запишите разложение Крамерса—Мойала для одношаговых процессов.

Упражнение. Получите уравнение Фоккера—Планка для задачи о популяции (6.10.7) и используйте его для нахождения $\langle n\rangle^s$ и $\langle\langle n^2\rangle\rangle^s$.

Упражнение. Сделайте то же для (6.9.12).

До сих пор приближение Фоккера—Планка формулировалось только для случаев, в которых границы отсутствовали или находились так далеко, что не нужно было о них беспокоиться. Теперь поставим вопрос о том, каким образом границы с определенными

* Численное сравнение проведено в работе: C. F. Clement and M. N. Wood, Proc. Roy. Soc. London A371, 553 (1980).

физическими свойствами преобразуются в граничные условия для дифференциального уравнения. В случае отражающей границы ответ ясен: поток вероятности (8.1.3) должен обращаться в нуль, как в (8.3.6):

$$a_1(y)P(y,\ t)-\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial y}a_2(y)P(y,\ t)=0 \text{ на границе.} \qquad (8.5.11)$$

Однако в случае поглощающей границы ответ не очевиден. Его можно найти, используя связь с одношаговыми процессами.

Возьмем одношаговый процесс с аналитическими $r(n)$, $g(n)$, но с поглощающей границей при $n=0$. Как отмечалось в § 6.7, это еще не позволяет однозначно определять, как $r(n)$ и $g(n)$ отличаются от аналитических выражений $r(n)$ и $g(n)$ вблизи границы. Даже если граница разная, в тех случаях, когда может измениться только r_1, требование того, что граница является поглощающей, означает просто $r_1>0$. Граница поглощает постольку, поскольку имеется вероятность перехода из крайнего состояния в лимбо-состояние.

В качестве частного случая можно выбрать $r_1=r(1)$. Это полностью поглощающая граница, относящаяся к задачам первого прохождения (см. § 6.10). Здесь мы используем условие такого типа и поэтому в качестве отправной точки возьмем основное кинетическое уравнение в виде

$$\dot{p}_n=r(n+1)p_{n+1}+g(n-1)p_{n-1}-\{r(n)+g(n)\}p_n \quad (n>1), \qquad (8.5.12а)$$

$$\dot{p}_1=r(2)p_2-\{r(1)+g(1)\}p_1. \qquad (8.5.12б)$$

Сразу же ясно, что (8.5.12б) можно подставить в (8.5.12а), если определить p_0. (Это просто формальный прием, а p_0 не совпадает с вероятностью p_*, приписываемой лимбо-состоянию.) Используя это определение, мы можем объявить (8.5.12а) справедливым для всех $n\geqslant 1$ с дополнительным условием $p_0=0$.

Если теперь аппроксимировать (8.5.12а) дифференциальным уравнением, в качестве граничного условия для $P(x,\ t)$ нужно выбрать $P(0,\ t)=0$. Хотя мы пришли к этому заключению, использовав поглощающую границу специального вида, можно показать, что оно оказывается общим: в случае непрерывного описания все возможные поглощающие границы приводят к одному и тому же граничному условию * $P(0,\ t)=0$.

Упражнение. Убедитесь в том, что в задаче с граничным условием (8.5.11) полная вероятность сохраняется.

Упражнение. *Сформулируйте задачу первого прохождения для процесса, описывающегося уравнением Фоккера—Планка, и найдите выражение для распределения вероятности времени первого прохождения, аналогичное (6.10.1).*

Упражнение. Сформулируйте непрерывный предел (6.10.11).

---

* N. G. van Kampen and I. Oppenheim, J. Mathem. Phys., 13, 842 (1972).

8.6. ЛИНЕЙНОЕ УРАВНЕНИЕ ФОККЕРА — ПЛАНКА В СЛУЧАЕ МНОГИХ ПЕРЕМЕННЫХ

Обобщение линейного уравнения Фоккера—Планка на случай, когда существует r переменных y_i, имеет вид

$$\frac{\partial P(y,\ t)}{\partial t} = -\sum_{i,j} A_{ij} \frac{\partial}{\partial y_i} y_j P + \frac{1}{2} \sum_{i,j} B_{ij} \frac{\partial^2 P}{\partial y_i \partial y_j}, \tag{8.6.1}$$

где A_{ij} и B_{ij}—матричные коэффициенты; матрица B_{ij} симметрична, а A_{ij}, вообще говоря, нет. Целью настоящего параграфа является решение этого уравнения с начальным условием

$$P(y,\ 0) = \prod_i \delta(y_i - y_{i0}) \equiv \delta(y - y_0). \tag{8.6.2}$$

Для того чтобы его можно было использовать и дальше, мы предположим даже, что A_{ij} и B_{ij} могут зависеть от времени.

Сначала обычным путем получим соотношение для средних величин:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \langle y_i \rangle = \sum_j A_{ij}(t) \langle y_j \rangle, \quad \langle y_i \rangle_0 = y_{i0}. \tag{8.6.3а}$$

В матричных обозначениях, когда y—вектор с компонентами y_i, имеем

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \langle y \rangle = A(t) \langle y \rangle, \quad \langle y \rangle_0 = y_0. \tag{8.6.3б}$$

Вопрос о том, можно ли решить это уравнение явно, имеет положительный или отрицательный ответ в зависимости от вида матрицы $A(t)$, но в любом случае решение имеет вид

$$\langle y \rangle_t = Y(t)\, y_0, \tag{8.6.4}$$

где $Y(t)$—*матрица эволюции*, или *пропагатор*, определенный матричным уравнением

$$\dot{Y}(t) = A(t)\, Y(t), \quad Y(0) = 1. \tag{8.6.5}$$

Далее рассмотрим вторые моменты $\langle y_i;\ y_j \rangle$. Умножая (8.6.1) на $y_i y_j$, получаем

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \langle y_i y_j \rangle = \sum_k A_{ik} \langle y_k y_j \rangle + \sum_k A_{jk} \langle y_i y_k \rangle + B_{ij}. \tag{8.6.6а}$$

С помощью (8.6.3) легко заметить, что это уравнение сохраняет свой вид, если моменты $\langle y_i y_j \rangle$ заменить на ковариации

$$\langle\langle y_i y_j \rangle\rangle = \langle y_i y_j \rangle - \langle y_i \rangle \langle y_j \rangle = \Xi_{ij}.$$

Тогда матрица Ξ удовлетворяет уравнению

$$\dot{\Xi} = A\Xi + \Xi\tilde{A} + B, \tag{8.6.6б}$$

где $\tilde{A}$ — транспонированная матрица A. Покажем, что это уравнение можно решить с помощью $Y(t)$.

Преобразуем Ξ в «представление взаимодействия» с помощью соотношения

$$\Xi(t) = Y(t)\,\Xi'(t)\,\tilde{Y}(t).$$

Подставляя это в (8.6.6 б) и используя прямое и транспонированное соотношение (8.6.5), получаем

$$\dot{\Xi}' = Y^{-1}B\tilde{Y}^{-1}.$$

Интегрирование дает

$$\Xi'(t) - \Xi'(0) = \int_0^t Y^{-1}(t')\,B(t')\,\tilde{Y}^{-1}(t')\,\mathrm{d}t'.$$

Выполняя обратное преобразование, получаем

$$\Xi(t) = Y(t)\,\Xi(0)\,\tilde{Y}(t) + \int_0^t Y(t)\,Y(t')^{-1}B(t')\,\tilde{Y}(t')^{-1}\tilde{Y}(t)\,\mathrm{d}t'. \quad (8.6.7)$$

С начальным условием (8.6.2) имеем $\Xi(0) = 0$.

Очень часто достаточно знать лишь первый и второй моменты. Теперь мы сделаем последний шаг, чтобы получить решение уравнения (8.6.1) с условием (8.6.2). Мы утверждаем, что решение — это просто распределение Гаусса, определенное только что вычисленными моментами:

$$P(y,\ t) = (2\pi)^{-\frac{1}{2}r}\left(\mathrm{Det}\,\Xi^{-1/2}\exp\left[-\frac{1}{2}(\tilde{y} - \langle\tilde{y}\rangle)\,\Xi^{-1}(y - \langle y\rangle)\right]\right. . \quad (8.6.8)$$

Для того чтобы проверить эту догадку *, используем сокращенное, но очевидное обозначение. Подстановка (8.6.8) в правую часть (8.6.1) дает

$$\tilde{\partial}\left\{-Ay + \frac{1}{2}B\partial\right\}P = \tilde{\partial}\left\{-Ay - \frac{1}{2}B\Xi^{-1}(y - \langle y\rangle)\right\}P =$$
$$= \left\{-\mathrm{Tr}\,A - \frac{1}{2}\mathrm{Tr}\,(B\Xi^{-1})\right\}P + (\tilde{y} - \langle\tilde{y}\rangle)\,\Xi^{-1}\times$$
$$\times\left\{Ay + \frac{1}{2}B\Xi^{-1}(y - \langle y\rangle)\right\}P. \quad (8.6.9)$$

Левая часть превращается в

$$\left(-\frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\log\mathrm{Det}\,\Xi\right)P - \frac{1}{2}(\tilde{y} - \langle\tilde{y}\rangle)\frac{\mathrm{d}\Xi^{-1}}{\mathrm{d}t}(y - \langle y\rangle)\,P + (\tilde{y} - \langle y\rangle)\,P +$$
$$+ (\tilde{y} - \langle\tilde{y}\rangle)\,\Xi^{-1}\frac{\mathrm{d}\langle y\rangle}{\mathrm{d}t}P. \quad (8.6.10)$$

---

* Систематическое решение дано в работе: M. Lax, Rev. Mod. Phys., 32, 25 (1960). См. также упражнения в конце параграфа.

Используя тождество Вронского и (8.6.6 б), первый член можно привести к виду

$$\frac{d}{dt}\log\operatorname{Det}\Xi=\operatorname{Tr}\Xi^{-1}\dot{\Xi}=\operatorname{Tr}\Xi^{-1}A\Xi+\operatorname{Tr}\tilde{A}+\operatorname{Tr}\Xi^{-1}B=$$
$$=2\operatorname{Tr}A+\operatorname{Tr}\Xi^{-1}B.$$

Во втором числе (8.6.10) используем тот факт, что

$$\frac{d\Xi^{-1}}{dt}=-\Xi^{-1}\frac{d\Xi}{dt}\Xi^{-1}=\Xi^{-1}A\Xi^{-1}-\Xi^{-1}B\Xi^{-1}.$$

Третий член с помощью (8.6.3) записывается в виде

$$(\tilde{y}-\langle\tilde{y}\rangle)\,\Xi^{-1}A\,\langle y\rangle.$$

Собирая все три члена, находим, что они дают (8.6.9), что и требовалось доказать.

Упражнение. Найдите решение одномерного, зависящего от времени уравнения Фоккера—Планка

$$\frac{\partial P(y,\ t)}{\partial t}=-A(t)\frac{\partial}{\partial y}yP+\frac{1}{2}B(t)\frac{\partial^2 P}{\partial y^2}. \tag{8.6.11}$$

Упражнение. Броуновская частица в гармоническом потенциале описывается двумерным уравнением (см. следующий параграф)

$$\frac{\partial P(x,\ v,\ t)}{\partial t}=-v\frac{\partial P}{\partial x}+x\frac{\partial P}{\partial v}+\gamma\left(\frac{\partial}{\partial v}vP+\frac{\partial^2 P}{\partial v^2}\right). \tag{8.6.12}$$

Найдите $P(x,\ v,\ t)$ с начальным условием $P(x,\ v,\ 0)=\delta(x-x_0)\,\delta(v-v_0)$.

Упражнение. Матрица Ξ по определению симметрична и положительно определена (или по крайней мере полуопределена). Покажите, что Ξ' обладает такими же свойствами. Покажите также, что уравнение (8.6.7) гарантирует выполнение этих свойств для $\Xi(t)$, если известно, что и $\Xi(0)$ обладает ими.

Упражнение. *Предположим, что A не зависит от времени и обладает тем свойством, что все решения уравнения (8.6.3) стремятся к нулю при t, стремящемся к бесконечности. Предположим также, что $B(t)$ стремится к пределу. Покажите, что*

$$\Xi(\infty)=\int_0^\infty Y(\tau)\,B(\infty)\,Y(\tau)\,d\tau. \tag{8.6.13}$$

Упражнение. *Когда A и B не зависят от времени, уравнение можно записать в более явном виде. В частности, после замены переменных его можно привести к виду, в котором матрица B диагональна. Получите эти уравнения и найдите условие существования $\Xi(\infty)$.*

Упражнение. При условиях, сформулированных в предыдущем упражнении, существует $P^s(y)$. В тепловом равновесии оно совпадает с $P^e(y)$, а корреляционная матрица $\Xi(\infty)=\Xi^e$ известна из равновесной статистической механики. Это позволяет выразить матрицу коэффициентов диффузии B через матрицу коэффициентов переноса A:

$$B=-A\Xi^e-\Xi^e\tilde{A}.$$

Упражнение. Решите уравнение

$$\frac{\partial P(y,\ t)}{\partial t}=-\sum_i c_i(t)\frac{\partial P}{\partial y_i}+\frac{1}{2}\sum_{i,\,j}B_{ij}(t)\frac{\partial^2 P}{\partial y_i\,\partial y_j}. \tag{8.6.14}$$

Упражнение. Наиболее общий вид линейного уравнения Фоккера—Планка—это

$$\frac{\partial P(x,\ t)}{\partial t}=-\sum_i c_i\frac{\partial P}{\partial x_i}-\sum_{i,\ j}A_{ij}\frac{\partial}{\partial x_i}x_jP+\frac{1}{2}\sum_{i,\ j}B_{ij}\frac{\partial^2 P}{\partial x_i\,\partial x_j} \qquad (8.6.15)$$

с зависящими от времени коэффициентами $c_i(t)$, $A_{ij}(t)$, $B_{ij}(t)$. Решите это уравнение путем сведения его к (8.6.1) с помощью подстановки $x_i=y_i+u_i(t)$, где u_i—решение уравнения

$$\dot{u}=A(t)\,u+c(t).$$

Упражнение. Пусть $P(x,\ t)$—заданное r-мерное, зависящее от времени распределение Гаусса

$$P(x,\ t)=(2\pi)^{-\frac{1}{2}r}(\mathrm{Det}\,M)^{1/2}\exp\left[-\frac{1}{2}\sum_{i,\ j}M_{ij}(x_i-\mu_i)(x_i-\mu_j)\right]$$

с заданными μ_i и симметричной положительно определенной $M_{ij}(t)$. Покажите, что оно удовлетворяет уравнению вида (8.6.15), и определите B_{ij}, A_{ij}, c_i. Последние две величины не единственны; действительно, можно взять $A_{ij}=0$.

Упражнение. Из предыдущего упражнения следует, что условная вероятность $P(x,\ t\mid x_0,\ t_0)$ удовлетворяет уравнению вида (8.6.15) даже тогда, когда гауссов процесс не является марковским. Однако это уравнение не является основным кинетическим уравнением, что подтверждается тем фактом, что его коэффициенты зависят от t_0 (сравните с предостережением в § 5.1). Найдите эту зависимость в уравнениях Фоккера—Планка, выведенных в работе: S. A. Adelman, J. Chem. Phys. **64**, 124 (1976).

Упражнение. Цепочка N ротаторов взаимодействует гармонически посредством потенциала

$$U(\theta_1,\ \theta_2,\ \ldots,\ \theta_N)=\frac{k}{2}\sum_{j=1}^{N}(\theta_{j+1}-\theta_j)^2 \quad (\theta_{N+1}\equiv\theta_1).$$

Они сильно затухают, подвергаются броуновскому движению и действию внешнего крутящего момента

$$\frac{\partial P}{\partial t}=\frac{1}{Ml^2\gamma}\sum_{j=1}^{N}\left[\frac{\partial}{\partial\theta_j}\left(\frac{\partial U}{\partial\theta_j}-\tau\right)P+kT\frac{\partial^2 P}{\partial\theta_j^2}\right] \qquad (8.6.16)$$

(ср. с (8.3.11)). Найдите стационарное решение и выведите из него среднюю скорость, с которой вращается вся цепочка. Найдите также решение, зависящее от времени, с начальным условием $P(\theta,\ 0)=\delta(\theta)$. О нелинейной модификации этой задачи смотрите работу: S. E. Trullinger et al. Phys. Rev. Letters, **40**, 206 (1978).

8.7. УРАВНЕНИЕ КРАМЕРСА

Рассмотрим броуновскую частицу, подвергающуюся воздействию силы, зависящей от координат $F(x)$. Запишем очевидное обобщение уравнения Фоккера—Планка * (8.3.5):

$$\frac{\partial P(X,\ t)}{\partial t}=-\frac{\partial}{\partial X}\frac{F(X)}{M\gamma}P+D\frac{\partial^2 P}{\partial X^2}. \qquad (8.7.1)$$

* Примеры мы уже перечислили в (8.3.10) и (8.6.16), см. также (10.2.4).

Мы будем называть это уравнение «квазилинейным» уравнением Фоккера — Планка * для того, чтобы подчеркнуть, что оно имеет вид (8.1.1) с постоянным B, но нелинейным A.

Понятно, что это уравнение может быть правильным только тогда, когда $F(X)$ изменяется настолько медленно, что его можно считать постоянным на расстояниях, характерных для затухания скорости. С другой стороны, уравнение Рэлея (8.4.6) содержит только скорость и не может содержать пространственные неоднородности. Тогда, если F меняется недостаточно медленно для того, чтобы выполнялось (8.7.1), частицу необходимо описывать совместным распределением вероятности $P(X, V, t)$, для которой мы получим двумерное уравнение Фоккера — Планка.

Для того чтобы найти коэффициенты при производных первого порядка, заметим, что

$$\langle \Delta X \rangle_{X,V} = V\,\Delta t; \quad \langle \Delta V \rangle_{X,V} = \left\{ \frac{F(X)}{M} - \gamma V \right\} \Delta t. \tag{8.7.2}$$

Имеется три производных второго порядка с коэффициентами

$$\frac{\langle (\Delta X)^2 \rangle_{X,V}}{\Delta t} = V^2\,\Delta t \to 0, \tag{8.7.3а}$$

$$\frac{\langle \Delta X\,\Delta V \rangle_{X,V}}{\Delta t} = V \left\{ \frac{F(X)}{M} - \gamma V \right\} \Delta t \to 0, \tag{8.7.3б}$$

$$\frac{\langle (\Delta V)^2 \rangle_{X,V}}{\Delta t} = \gamma \frac{kT}{M}. \tag{8.7.3в}$$

Последний взят равным коэффициенту в (8.4.6), потому что внешняя сила не влияет на столкновения с молекулами газа.

Таким образом мы находим *уравнение Крамерса*:

$$\frac{\partial P(X, V, t)}{\partial t} + V \frac{\partial P}{\partial X} + \frac{F(X)}{M} \frac{\partial P}{\partial V} = \gamma \left\{ \frac{\partial}{\partial V} VP + \frac{kT}{M} \frac{\partial^2 P}{\partial V^2} \right\}. \tag{8.7.4}$$

Это двумерное квазилинейное уравнение Фоккера — Планка.

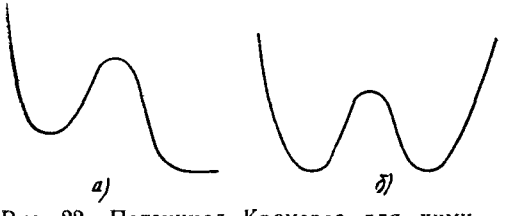

Рис. 22. Потенциал Крамерса для химической реакции (*а*); потенциал Бринкмана с двумя ямами (*б*)

Историческая справка. Уравнение (8.7.4) было получено Клейном **. Крамерс использовал его для химических реакций (см. § 7.5). Для этих целей он ввел силу $F(X)$, потенциал которой имел примерно такой же вид, как показан на рис. 22, *а*. В этом случае возникает вопрос: какие частицы из потенциальной ямы могут преодолеть потенциальный барьер? Бринкман *** для описания химической реакции, которая может идти двумя путями, рассмотрел потенциал с двумя ямами, наподобие того, что изображен на рис. 22, *б*.

* По аналогии с термином «квазилинейный», который используют для дифференциальных уравнений в частных производных.

** O. Klein, Arkiv Mat. Astr. Fys., 16, no. 5 (1922).

*** H. C. Brinkman, Physica, 22, 29 and 149 (1956).

К сожалению, такие потенциалы обоих типов, для которых удалось бы решить (8.7.4), неизвестны. Поэтому Крамерс исследовал два предельных случая: малые и большие значения γ. Здесь мы остановимся на последнем случае *.

Естественно, в результате этого приближения получаем (8.7.1). Крамерс действительно вывел (8.7.1) из (8.7.4), но его $P(X, V, t)$ не вполне совпадает с частным распределением, полученным интегрированием $P(X, V, t)$ по всем V. Это место критиковал Бринкман, который с помощью другого метода получил (8.7.1) для частного распределения. Мы воспользуемся другим методом, который приводит к систематическому разложению по степеням.

Позднее уравнения Фоккера—Планка в потенциале с двумя ямами стали очень популярными в связи с описанием фазовых переходов. В частности, на этой основе были широко изучены переходы в стационарных неравновесных состояниях открытых систем, например в лазерах и туннельных диодах (см. § 11.6 и 11.9).

Теперь мы приближенно решим уравнение Крамерса (8.7.4) для больших γ с помощью систематического разложения по степеням γ^{-1}. Непосредственное применение теории возмущений в этом случае невозможно, потому что производная по времени оказывается в числе малых членов. Это обстоятельство приводит нашу задачу к проблеме сингулярной теории возмущений, но в этом случае можно получить решение способом, предложенным Гильбертом, а также Чепменом и Энскогом для уравнения Больцмана **.

Чтобы упростить уравнения, исключим коэффициент kT/M масштабным преобразователем переменных:

$$V = v\sqrt{kT/M}, \quad X = x\sqrt{kT/M}, \quad F(X) = f(x)\sqrt{MkT}.$$

Тогда уравнение можно записать в виде

$$\frac{\partial}{\partial v}\left(vP + \frac{\partial P}{\partial v}\right) = \frac{1}{\gamma}\left(\frac{\partial}{\partial t} + v\frac{\partial}{\partial x} + f(x)\frac{\partial}{\partial v}\right)P. \tag{8.7.5}$$

Его можно решить, полагая

$$P(x, v, t) = P^{(0)} + \gamma^{-1}P^{(1)} + \gamma^{-2}P^{(2)} + \ldots$$

и удовлетворяя уравнение для каждого порядка по параметру γ^{-1}.

Члены порядка j^0 имеют вид

$$\frac{\partial}{\partial v}\left(vP^{(0)} + \frac{\partial P^{(0)}}{\partial v}\right) = 0. \tag{8.7.6}$$

Это уравнение можно решить, полагая

$$P^{(0)}(x, v, t) = e^{-1/2\, v^2}\varphi(x, t) \tag{8.7.7}$$

с произвольной функцией $\varphi(x, t)$.

---

* Случай малых γ исследован в работах: H. Risken and H. D. Vollmer, Z. Phys. B33, 297 and B35, 177 (1979). Случай произвольного j рассмотрен в работе: H. Risken, H. D. Vollmer, and H. Denk, Phys. Letters, 78A, 22 (1980).

** S. Chapman and T. G. Cowling, The Mathematical Theory of Non-Uniform Cases (University Press, Cambridge, 1939). Для настоящего приложения см. также: U. M. Titulaer, Physica, 91A, 321 (1978); 100A, 234 and 251 (1980). Другие методы обсуждаются в работе: Das, Physica 98A, 528 (1979).

Члены порядка j^{-1} дают

$$\left\{\frac{\partial}{\partial v} v+\frac{\partial^2}{\partial v^2}\right\} P^{(1)}=\left(\frac{\partial \varphi}{\partial t}+v \frac{\partial \varphi}{\partial x}-v f \varphi\right) e^{-1/2 v^2}. \tag{8.7.8}$$

Это уравнение надо решить относительно $P^{(1)}$. Однако оператор $\{\ \}$, действующий на $P^{(1)}$, нельзя обратить, потому что его собственное значение равно нулю. Соответствующий левый собственный вектор является константой и действительно, интегрируя (8.7.8) по v, получаем

$$0=\frac{\partial \varphi}{\partial t}.$$

Тогда условие разрешимости (8.7.8) отиосительно $P^{(1)}$ равносильно ограничению на оставшуюся до настоящего времени произвольной функцию φ. Это ограничение состоит в том, что φ и, следовательно, $P^{(0)}$ не должны зависеть от времени.

Удовлетворив условие разрешимости, мы можем теперь приступить к определению $P^{(1)}$ из уравнения

$$\frac{\partial}{\partial v}\left(v+\frac{\partial}{\partial v}\right) P^{(1)}=\left(\frac{d \varphi}{d x}-f \varphi\right) v e^{-1/2 v^2}.$$

Легко видеть, что оно удовлетворяется, если

$$P^{(1)}(x, v, t)=v\left(f \varphi-\frac{d \varphi}{d x}\right) e^{-1/2 v^2}+\psi(x, t) e^{-1/2 v^2} \tag{8.7.9}$$

с произвольной функцией $\psi(x, t)$.

Члены порядка γ^{-2} с учетом (8.7.9) дают

$$\left\{\frac{\partial}{\partial v} v+\frac{\partial^2}{\partial v^2}\right\} P^{(2)}=v^2 \frac{d}{d x}\left(f \varphi-\frac{d \varphi}{d x}\right) e^{-1/2 v^2}+$$
$$+(1-v^2) f\left(f \varphi-\frac{d \varphi}{d x}\right) e^{-1/2 v^2}+\left(\frac{\partial \psi}{\partial t}+v \frac{\partial \psi}{\partial x}-v f \psi\right) e^{-1/2 v^2}. \tag{8.7.10}$$

Интегрирование по v опять приводит к условию разрешимости:

$$\frac{d}{d x}\left(f \varphi-\frac{d \varphi}{d x}\right)+\frac{\partial \psi}{\partial t}=0. \tag{8.7.11}$$

В этом месте мы прервемся и обобщим результат:

$$P(x, v, t)=e^{-1/2 v^2}\left[\varphi(x)+\gamma^{-1} v\left(f \varphi-\frac{d \varphi}{d x}\right)+\gamma^{-1} \psi(x, t)+O \gamma^{-2}\right], \tag{8.7.12}$$

где ψ удовлетворяет (8.7.11). Мы интересуемся распределением по x и поэтому интегрируем по v:

$$P(x, t)=\sqrt{2 \pi}\left[\varphi(x)+\gamma^{-1} \psi(x, t)+O \gamma^{-2}\right]. \tag{8.7.13}$$

Уравнение (8.7.11) теперь приходит к виду

$$\frac{\partial P(x,\ t)}{\partial t}+\gamma^{-1}\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}fP-\frac{\mathrm{d}^2P}{\mathrm{d}x^2}\right)=O\gamma^{-2}. \qquad (8.7.14)$$

Возвращаясь к первоначальным переменным, получаем уравнение, тождественно совпадающее с (8.7.1).

Упражнение. Решите уравнение Крамерса для случая, когда функция F постоянна.

Упражнение. Почему условие справедливости (8.7.1) есть $|F'|\ll M\gamma^2$? Объясните это!

Упражнение. Выражение (8.7.7) не единственное решение уравнения (8.7.6), так же как (8.7.9) не единственное решение уравнения (8.7.8). Найдите остальные решения и покажите, что они недопустимы.

Упражнение. Уравнение (8.7.4) можно решить явно для частного случая гармонического потенциала $F(x)=-a^2x$. Результат содержится в (8.6.12), но явный вывод требует некоторого числа элементарных интегрирований. Определив $P(x,\ v,\ t)$, можно найти частное распределение $P(x,\ t)$ и убедиться в том, что оно удовлетворяет уравнению (8.7.1) при больших γ. (Есть и более прямой путь, когда сначала из общего выражения (8.6.12) находят частное распределение, а затем приводят его к нужному виду необходимым числом интегрирований.)

Упражнение. Покажите, что уравнение (8.7.14) остается справедливым и в следующем порядке.

Упражнение. Сведите (8.7.1) к задаче на собственные значения, полагая $P(x,\ t)=\varphi_n(X)\,\mathrm{e}^{-\lambda_n t}$. С другой стороны, рассмотрите уравнение Шредингера:

$$\varphi''(X)+\{E-V(X)\}\,\varphi(X)=0.$$

Если Ψ_0 — основное состояние, положите в (8.7.1)

$$\frac{F(X)}{M\gamma}=2D\frac{\varphi_0'(X)}{\varphi_0(X)}.$$

Обе задачи эквивалентны, поэтому *

$$\varphi_n(X)=\varphi_0(X)\,\varphi_n(X),\quad \lambda_n=(E_n-E_0)\,D. \qquad (8.7.15)$$

8.8. МЕТОД ЛАНЖЕВЕНА

Альтернативное рассмотрение броуновского движения было предпринято Ланжевеном **. Частица подчиняется уравнению движения

$$\dot{V}=-\gamma V+L(t). \qquad (8.8.1)$$

Правая часть представляет собой силу, действующую со стороны жидкости (и для удобства деленную на массу частицы M). В связи с этим сделаем три физически различных предположения:

1. Сила состоит из линейного по V члена, представляющего затухание плюс член $L(t)$, не зависящий от состояния V частицы.

2. Член, описывающий затухание, является также средней силой, причем

$$\langle L(t)\rangle=0. \qquad (8.8.2)$$

---

* H. Risken and H. D. Vollmer, Z. Phys., 204, 240 (1967).

** P. Langevin, Compes Rendus de l'Academie des Sciences (Paris), 146, 530 (1908). Вычисление, приведенное здесь, основано на работе: G. E. Uhlenbeck and L. S. Ornstein, Phys. Rev., 36, 823 (1930), reprinted in Wax.

Среднее берется по ансамблю многих систем, каждая из которых состоит из частицы, погруженной в окружающую ее жидкость. На практике это означает усреднение по большому числу броуновских частиц, находящихся в одной и той же жидкости, либо усреднение по последовательным наблюдениям одной и той же частицы при условии, что они достаточно отделены, чтобы не влиять друг на друга.

3. Сила L считается быстро меняющейся во времени, что описывается выражением

$$\langle L(t)\,L(t')\rangle = \Gamma\delta(t-t'), \tag{8.8.3}$$

где $\Gamma = \mathrm{const}$. Смысл этого выражения состоит в том, что каждое соударение является практически мгновенным и что последовательные соударения не коррелируют друг с другом.

Член, описывающий силу и обладающий свойствами 1—3, называют *силой Ланжевена*, а выражение (8.8.1) — *уравнением Ланжевена*. Мы специально включаем в это название свойства (8.8.2) и (8.8.3), потому что уравнение (8.8.1) без какой-либо конкретизации $L(t)$ информации не содержит.

Отметим, что (8.8.2) и (8.8.3) не полностью определяют стохастический процесс $L(t)$, а задают только первые два его момента. Полную спецификацию мы дадим в ближайшее время, но для следующего вычисления она пока не нужна.

Уравнение Ланжевена представляет собой простой пример стохастического дифференциального уравнения, т. е. дифференциального уравнения, у которого коэффициенты являются случайными процессами с заданными стохастическими свойствами. Оно определяет $V(t)$ как стохастический процесс при условии, что задано также начальное условие. Рассмотрим равновесный ансамбль, состоящий из газа, каждая реализация которого содержит один экземпляр броуновской частицы с начальной скоростью $V(0) = V_0$. Для каждой реализации скорость при $t > 0$ находят, решая уравнения (8.8.1):

$$V(t) = V_0 e^{-\gamma t} + e^{-\lambda t}\int_0^t e^{\gamma t'} L(t')\,dt'. \tag{8.8.4}$$

Усредняя по ансамблю и используя (8.8.2), получаем

$$\langle V(t)\rangle_{V_0} = V_0 e^{-\gamma t}. \tag{8.8.5}$$

Далее, возводя в квадрат (8.8.4), получаем

$$\langle\{V(t)\}^2\rangle_{V_0} = V_0^2 e^{-2\gamma t} + e^{-2\gamma t}\int_0^t dt'\int_0^t dt''\, e^{+\gamma(t'+t'')}\langle L(t')\,L(t'')\rangle =$$

$$= V_0^2 e^{-2\gamma t} + \frac{\Gamma}{2\gamma}(1 - e^{-2\gamma t}). \tag{8.8.6}$$

Теперь мы можем определить неизвестную до сих пор константу Г, используя тот факт, что при $t \gg 1/\gamma$ влияние начальной скорости исчезает, а среднеквадратичное значение скорости должно быть равно термодинамически равновесному значению:

$$\langle \{V(\infty)\}^2 \rangle_{V_0} = \frac{\Gamma}{2\gamma} = \frac{kT}{M}. \tag{8.8.7}$$

Это соотношение связывает константу Г, которая является мерой величины флуктуирующего члена в уравнении (8.8.1), с константой γ.

Это соотношение является простейшим видом *общей флуктуационно-диссипативной теоремы*. Так же как и соотношения Эйнштейна, оно получается сопоставлением зависящих от времени флуктуаций, заданных уравнением с равновесным значением, известным из статистической динамики. Физическая же картина такова: случайные скачки, описывающиеся силой Ланжевена в (8.8.1), приводят к тому, что V размывается по всей области своих значений, в то время как член, описывающий затухание, подавляет V и стремится обратить его в нуль. Равновесное распределение V возникает как результат действия этих двух противоположных тенденций.

Для того чтобы установить связь с приближением Фоккера — Планка, возьмем в (8.8.5) для t малое время $\Delta t \ll \gamma^{-1}$. Тогда из соотношения (8.8.5) получим

$$\langle \Delta V \rangle_{V_0} \equiv \langle V(t) \rangle_{V_0} - V_0 = -\gamma V_0 \Delta t + O(\Delta t)^2.$$

Аналогично из (8.8.6) получаем

$$\langle (\Delta V)^2 \rangle_{V_0} \equiv \Gamma \Delta t + O(\Delta t)^2.$$

В соответствии с (8.1.6) эти два результата позволяют дописать уравнение Фоккера — Планка для распределения вероятности

$$\frac{\partial P(V, t)}{\partial t} = \gamma \frac{\partial}{\partial V} VP + \frac{\Gamma}{2} \frac{\partial^2 R}{\partial V^2}, \tag{8.8.8}$$

которое с учетом (8.8.7) совпадает с уравнением Рэлея (8.4.6).

Упражнение. С помощью (8.8.4) вычислите

$$\langle V(t_1) V(t_2) \rangle.$$

Упражнение. Покажите, что $\langle V(t) \rangle$ и $\langle \{V(t)\}^2 \rangle$, вычисленные из (8.8.8), совпадают с (8.8.5) и (8.8.6).

Упражнение. Рассмотрите гармонически связанную частицу:

$$\ddot{X} + \gamma X + X = L(t). \tag{8.8.9}$$

Найдите $\langle X(t) \rangle$ и $\langle \{X(t)\}^2 \rangle$ для заданных $X(0)$, $\dot{X}(0)$. Покажите, что для $t \gg \gamma^{-1}$ значения $\langle \{X(t)\}^2 \rangle$ совпадают со значениями, дающимися статистической механикой, если Г и γ связаны соотношением (8.8.7).

Упражнение. Допустим, переменные u_ν удовлетворяют многомерному уравнению Ланжевена:

$$\dot{u}_\nu = \sum_\mu A_{\nu\mu} u_\mu + L_\nu(t),$$

где $A_{\nu\mu}$ — постоянная матрица, а $L_\nu(t)$ — случайные силы, обладающие свойствами

$$\langle L_\nu(t)\rangle = 0, \quad \langle L_\nu(t) L_\mu(t')\rangle = \Gamma_{\nu\mu}\delta(t-t').$$

Постройте соответствующее уравнение Фоккера—Планка.

Упражнение. Скорость заряженной частицы в постоянном магнитном и случайном электрическом полях описывается уравнением

$$\dot{\mathbf{v}} = \mathbf{v}\wedge\mathbf{B} - \beta\mathbf{v} + E(t),$$

где $\langle E_i(t) E_j(t')\rangle = C\delta_{ij}\delta(t-t')$. Найдите равновесное значение ее среднеквадратичной скорости и средний квадрат смещения *.

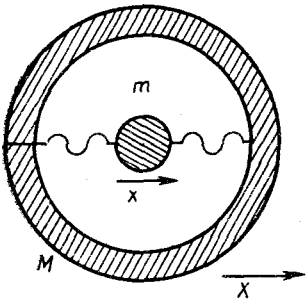

Рис. 23. Упрощенная модель блуждающего осциллятора

Упражнение. Полимер в растворе описывается уравнением **

$$\dot{x}_n = x_{n+1} + x_{n-1} - 2x_n + L_n(t),$$
$$\langle L_n(t) L_{n'}(t')\rangle = \Gamma\delta_{nn'}\delta(t-t').$$

Решите это уравнение и найдите значение $\langle\{x_n(t) - x_{n'}(0)\}^2\rangle$ в равновесии.

Упражнение. Рассмотрите следующую упрощенную версию модели блуждающего осциллятора ***. Тело движется в жидкости, а внутри него имеется затухающий осциллятор (рис. 23). Уравнения движения имеют вид

$$m\ddot{x} + \beta(\dot{x} + \dot{X}) + a^2(x - X) = K(t),$$
$$M\ddot{X} + \beta(\dot{X} - \dot{x}) + \gamma\dot{X} + a^2(X - x) = -K(t) + L(t),$$

где K и L — независимые силы Ланжевена. Постройте уравнение Фоккера—Планка. Найдите константы Γ для K и L.

Упражнение. Дельта-функции в природе не встречаются. В любых физических приложениях $L(t)$ обладает автокорреляционным временем $\tau_c > 0$. Для броуновской частицы τ_c по крайней мере того же порядка, что и длительность отдельного столкновения. Поэтому более физично записать вместо дельта-функции в (8.8.3) некоторую функцию $\varphi(t-t')$, имеющую форму острого пика с шириной τ_c. Покажите, что это приводит к тем же самым результатам при условии, что $\gamma\tau_c \ll 1$.

Уравнение Фоккера—Планка (8.8.8) дает те же значения для первых двух моментов V, что и уравнение Ланжевена (8.8.1) с условиями (8.8.2) и (8.8.3). Тем не менее нельзя утверждать, что они эквивалентны, потому что высшие моменты не согласуются. Хотя уравнение Фоккера—Планка дает определенные выражения для них, уравнение Ланжевена — пока нет, потому что высшие моменты $L(t)$ еще не определены. Поэтому обычно три приведенных выше предположения дополняют еще одним.

4. Все нечетные моменты L обращаются в нуль, а четные задаются тем же правилом (1.6.11), которое связывает моменты распределения Гаусса. Например,

$$\langle L(t_1) L(t_2) L(t_3) L(t_4)\rangle = \langle L(t_1) L(t_2)\rangle\langle L(t_3) L(t_4)\rangle + \ldots =$$
$$= \Gamma^2\{\delta(t_1-t_2)\delta(t_3-t_4) + \delta(t_1-t_3)\delta(t_2-t_4) + \delta(t_1-t_4)\delta(t_2-t_3)\}.$$

---

* B. Korsunoglu, Annals Phys., 17, 259 (1962).

** G. Ronca, J. Chem. Phys., 67, 4965 (1977).

*** N. E. Hill, Proc. Phys. Soc. (London), 82, 723 (1963); J. H. Calderwood and W. T. Coffey, Proc. Roy. Soc. A356, 269 (1977).

Альтернативой этому можно поставить условие, что все высшие кумулянты обращаются в нуль. Это полностью определяет стохастические свойства $L(t)$ в терминах единственного масштабного параметра Γ. Процесс $L(t)$, определенный таким образом, называют *гауссовым белым шумом*. С математической точки зрения такой стохастический процесс в действительности не существует, так же как дельта-функция не является функцией. Но и в физике он в действительности никогда не встречается, но является моделью быстро флуктуирующей силы.

Теперь мы можем показать эквивалентность уравнения Фоккера—Планка уравнению Ланжевена, дополненному предположением 4 следующим образом. В соответствии с (8.8.4) значения $V(t)$ являются линейной комбинацией значений, которые L принимает во все предыдущие моменты времени t' $(0 \leqslant t' \leqslant t)$. Поскольку совместное распределение величин $L(t')$ является гауссовым, то и $V(t)$ является гауссовым. По этой же причине совместное распределение $V(t_1)$, $V(t_2)$, ... является гауссовым. Тогда процесс $V(t)$, определенный уравнением (8.8.1) с начальным значением $V(0)$, является гауссовым. С другой стороны, мы знаем, что решение уравнения (8.8.4) с этим начальным значением гауссово. Далее, коэффициенты уравнения (8.8.8) мы выбрали так, чтобы первый и второй моменты обоих гауссианов совпадали. Следовательно, гауссианы тождественно совпадают, что и требовалось доказать.

Упражнение. Постройте уравнение Фоккера—Планка, эквивалентное (8.8.9).

Упражнение. Покажите, что свойство $L(t)$ быть гауссовым белым шумом выражается следующим тождеством для его характеристического функционала:

$$\left\langle \exp\left[i \int k(t) L(t)\, dt \right] \right\rangle = \exp\left[-\frac{1}{2} \Gamma \int \{k(t)\}^2\, dt \right]. \tag{8.8.10}$$

Упражнение. Подставьте (8.8.4) в характеристический функционал $V(t)$ и потом используйте (8.8.10). В результате должно получиться явное выражение для характеристического функционала $V(t)$ и, следовательно, для всех его моментов. Докажите таким способом эквивалентность процессу Орнштейна—Уленбека, следующую из (8.8.8).

Упражнение. Докажите, что

$$W(t) = \int_0^t L(t')\, dt'$$

является винеровским процессом. Тогда уравнение Ланжевена (8.8.1) можно также записать в виде

$$dV = -\gamma V\, dt + \Gamma^{1/2}\, dW(t),$$

где W — нормированный винеровский процесс. В этой формулировке несуществующий процесс $L(t)$ заменяется на дифференциал процесса, который существует, но не является дифференцируемым.

Упражнение. Рассмотрите стохастический процесс, образованный следующим образом. Пусть

$$Y(t) = Y_+(t) - Y_-(t), \tag{8.8.11}$$

где Y_+, Y_- — две независимые реализации одного и того же процесса Кэмпбелла с гауссовой ψ (ср. с (3.1.10)). Покажите, что в соответствующем

пределе моменты $Y(t)$ стремятся к соответствующим моментам $L(t)$. Тогда $L(t)$ можно представить как плотную последовательность малых положительных и отрицательных импульсов.

Упражнение. Стержневидная молекула вращается в плоскости и подвергается воздействию силы Ланжевена со стороны ее окружения:

$$\ddot{\varphi}+\gamma\dot{\varphi}=L(t).$$

Найдите величину $\langle\cos\varphi(t_1)\cos\varphi(t_2)\rangle^s$, которая является автокорреляционной функцией x-компоненты дипольного момента молекулы. Указание. Используйте (4.3.16) *.

Упражнение. Процесс Орнштейна—Уленбека (4.3.10) и (4.3.11) удовлетворяет *обобщенному уравнению Ланжевена с ядром, обладающим памятью*:

$$\dot{y}(t)=-(1-2\alpha)\,y(t)+2\alpha(1-\alpha)\int\limits_{-\infty}^{t}e^{-\alpha(t-t')}\,y(t')\,dt'+f(t),$$

где $f(t)$—гауссов белый шум. Тогда из такого уравнения нельзя сделать вывод, что y не может быть марковским процессом, несмотря на интеграл по предыстории. Указание. Найдите с помощью преобразователя Фурье характеристический функционал стохастической функции $f(t)$, определенной этим уравнением.

Теперь рассмотрим уравнение Ланжевена:

$$\dot{y}=A(y)+L(t). \tag{8.8.12}$$

Будем считать $A(y)$ нелинейной функцией, но уравнение назовем *квазилинейным*, чтобы подчеркнуть тот факт, что коэффициент $L(t)$ по-прежнему постоянен. Хотя его общее решение нельзя выписать явно, все же можно показать, что оно эквивалентно квазилинейному уравнению Фоккера—Планка:

$$\frac{\partial P(y,t)}{\partial t}=-\frac{\partial}{\partial y}A(y)\,P+\frac{\Gamma}{2}\frac{\partial^2 P}{\partial y^2}. \tag{8.8.13}$$

Во-первых, понятно, что для каждой выборочной функции L уравнения (8.8.12) однозначно определяет $y(t)$, когда задано значение $y(0)$. Поскольку значения L в различные моменты времени стохастически независимы, y—марковский процесс. Тогда он описывается основным кинетическим уравнением, которое можно записать в форме уравнения Крамерса—Мойала (8.2.6). Вычислим последовательные коэффициенты (8.2.4).

Следующее соотношение является точным следствием уравнения (8.8.12):

$$\Delta y=\int\limits_{t}^{t+\Delta t}A(y(t'))\,dt'+\int\limits_{t}^{t+\Delta t}L(t')\,dt'.$$

Тогда среднее с фиксированным $y(t)$ имеет вид

$$\langle\Delta y\rangle=A(y(t))\,\Delta t+O(\Delta t)^2.$$

---

* См. также работу: W. T. Coffey and A. Moria, J. of Physics (London), **D** 9, L 17 (1976).

Это дает первый коэффициент в (8.8.13). Далее,

$$\langle(\Delta y)^2\rangle = \left\langle\left\{\int_t^{t+\Delta t} \dot{A}(y(t'))^2\,dt'\right\}^2\right\rangle + 2\int_t^{t+\Delta t} dt' \int_t^{t+\Delta t} dt'' \langle A(y(t'))\,L(t'')\rangle +$$
$$+ \int_t^{t+\Delta t} dt' \int_t^{t+\Delta t} dt'' \langle L(t')\,L(t'')\rangle.$$

Первая строка имеет порядок $(\Delta t)^2$ и поэтому не дает вклада в a_2. Последняя строка, как прежде, равна $\Gamma\Delta t$ и согласуется с (8.8.13). Во второй строке разложим $A(y(t'))$:

$$2A(y(t))\,\Delta t \int_t^{t+\Delta t} dt'' \langle L(t'')\rangle +$$
$$+ 2A'(y(t)) \int_t^{t+\Delta t} dt' \int_t^{t+\Delta t} dt'' \langle\{y(t')-y(t)\}\,L(t'')\rangle + \ldots \qquad (8.8.14)$$

Первый член обращается в нуль, а второй есть $O(\Delta t)$, потому что имеется двойной интеграл, а $\{y(t')-y(t)\}$ не содержит дельта-функций. Аналогичные аргументы позволяют заметить, что высшие члены в (8.8.14) есть $O(\Delta t)$, а также что $\langle(\Delta y)^\nu\rangle = O(\Delta t)$ для $\nu > 2$. Это доказывает эквивалентность уравнений (8.8.12) и (8.8.13).

И наконец, можно надеяться показать, что истинно нелинейное уравнение Ланжевена

$$\dot{y} = A(y) + C(y)\,L(t) \qquad (8.8.15)$$

эквивалентно уравнению *

$$\frac{\partial P(y,t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial y} A(y)\,P + \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial y^2} C(y^2)\,P. \qquad (8.8.16)$$

Однако *уравнение* (8.8.15) *в том виде, в котором оно записано, не имеет смысла*. Для того чтобы увидеть это интуитивно, вспомним, что $L(t)$ можно представить как случайную последовательность дельта-функций (ср. с (8.8.11)). В соответствии с (8.8.15) каждая дельта-функция в $L(t)$ приводит к скачку $y(t)$. Тогда значение y в момент времени, когда «срабатывает» дельта-функция, является неопределенным, а следовательно, значение $C(y)$ не определено. Из уравнения не видно, какие значения y мы должны представлять: перед скачком, после скачка или, быть может, их среднее значение.

Ито** построил математическую интерпретацию уравнения (8.8.15),

---

* Поскольку мы ввели функцию $C(y)$, величина Γ может быть включена в нее. Тогда без потери общности мы полагаем $\Gamma = 1$ в настоящем обсуждении.

** K. Ito, Proc. Imp. Acad. Tokyo, 20, 519 (1944); Mem. Amer. Mathem. Soc., 4, 51 (1951). В математической литературе уравнение (8.8.15) называют *уравнением Ито*.

которая эквивалентна требованию, что в $C(y)$ нужно подставлять значения y перед скачком. Это значит, что уравнение (8.8.15) нужно понимать следующим образом:

$$y(t+\Delta t)-y(t)=A(y(t))\,\Delta t+C(y(t))\int_t^{t+\Delta t} L(t')\,dt'. \qquad (8.8.17)$$

Значит, можно доказать *, что уравнение (8.8.15), дополненное этим правилом интерпретации, эквивалентно уравнению (8.3.16). С другой стороны, Стратонович ** интерпретирует (8.8.15) следующим образом:

$$y(t+\Delta t)-y(t)=A(y(t))\,\Delta t+C\left(\frac{y(t)+y(t+\Delta t)}{2}\right)\int_t^{t+\Delta t} L(t')\,dt'. \qquad (8.8.18)$$

Это делает (8.8.15) эквивалентным следующему уравнению:

$$\frac{\partial P(y,t)}{\partial t}=-\frac{\partial}{\partial y}A(y)P+\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial y}C(y)\frac{\partial}{\partial y}C(y)P. \qquad (8.8.19)$$

Вывод, который должен сделать физик, таков: если, размышляя, он придет к убеждению, что ситуацию следует описывать уравнением (8.8.15), то обязательно сделает логическую ошибку, исключением окажется лишь случай, когда рассмотрение подскажет ему еще и правильную интерпретацию. И никакой физической проницательности не хватит для того, чтобы оправдать бессмысленную строку символов.

Примечание. На первый взгляд (8.8.15) можно свести к (8.8.12) путем деления на $C(y)$ и введения новой переменной $\bar{y}=\int dy\,C(y)$. Если затем записать соответствующее уравнение Фоккера—Планка (8.8.13) для y и вновь преобразовать его к старой переменной y, то можно прийти к (8.8.19). Однако это нельзя рассматривать как доказательство того, что прав Стратонович, а не Ито, потому что (8.8.15) по-прежнему не имеет смысла без дополнительного правила интерпретации. Допустимость или недопустимость привычных правил вычислений зависит от этого правила. Ито умышленно запрещает такие нелинейные преобразования y и определяет другие законы преобразований ***. Они приводятся ниже в (8.8.21).

Можно сделать еще один вывод. Предположим, $L(t)$ в (8.8.15) заменено на стохастическую функцию $\xi(t)$, которая не является настоящим белым шумом, не обладает положительным малым автокорреляционным време-

---

* J. L. Doob, Stochastic Processes (Wiley, New York, 1953).

** R. L. Stratonovich, SIAM J. Control, 4, 362 (1966); Stratonovich I. Ch. 4, Section 8. По поводу настоящего обсуждения см. также работы: A. H. Gray and T. K. Caughey, J. Math. and Phys., 4, 288 (1965); R. E. Mortensen, J. Statist. Phys., 1, 271 (1969); N. G. van Kampen, J. Statist. Phys., 24, 175 (1981). Та же самая дилемма возникала в квантовой механике: M. Blume, J. Mathem. Phys., 19, 2004 (1978); H. Gzyl, J. Mathem. Phys., 20, 1714 (1979).

*** K. Ito, Nagoya Mathem. J. L., 35 (1950) and 3, 55 (1951); Arnold, Stochastische Differentialgleichungen (Oldenburg, Munich, 1973).

нем τ_c. Тогда уравнение является хорошо определенным стохастическим дифференциальным уравнением в смысле положений гл. 14. В этом случае можно применять любые нелинейные преобразования с использованием обычных правил вычислений и, в частности, преобразовывать его к величине $\bar{y}$, определенной выше, с тем чтобы получить аналог (8.8.12):

$$\dot{\bar{y}} = \bar{A}(y) + \xi(t).$$

Теперь $\xi(t)$ можно изменить таким образом, что $\tau_c \to 0$, и получить уравнение Фоккера—Планка (8.8.13) для $\bar{P}(\bar{y}, t)$. Выполняя обратное преобразование, приходим к (8.8.19). Это доказывает, что интерпретация Стратоновича уравнения (8.8.15) дает правильный предел для нулевого времени автокорреляции при условии, что предельный переход для $\xi(t)$ имеет смысл фиксированных значениях $A(y)$ и $C(y)$. Это утверждение подтверждается явным вычислением в упражнении к § 14.4.

Упражнение. Запишите уравнение Ланжевена, соответствующее уравнению Фоккера—Планка (8.7.1) для диффузии в силовом поле.

Упражнение. Запишите уравнение Крамерса (8.7.4) в форме Ланжевена.

Упражнение. Запишите (8.4.11) как многомерное уравнение Ланжевена и примените флуктуационно-диссипативную теорему для получения матрицы Γ_{ij}.

Упражнение. Трудность с интерпретацией уравнения (8.8.15) возникает из-за сингулярной природы $L(t)$. Покажите, что между (8.8.7) и (8.8.18) нет разницы, если функция $L(t)$ ограничена. Однако в этом случае (8.8.3), конечно же, не справедливо, а $\bar{y}(t)$ не может быть марковским процессом.

Упражнение. Ито нашел для последнего члена в (8.8.15), что $\langle C(y) L(t) = 0$, но, согласно Стратоновичу, $\langle C(y) L(t) \rangle = {}^1/_2 \langle C(y) C'(y) \rangle$.

Упражнение. При преобразовании $\bar{y} = \varphi(y)$ коэффициенты в (8.8.19) преобразуются в

$$\bar{A}(\bar{y}) = A(y) \frac{\partial \varphi}{\partial y}, \quad \bar{C}(\bar{y}) = C(y) \frac{\partial \varphi}{\partial y}. \tag{8.8.20}$$

Если формально применить то же самое преобразование к не имеющему смысла уравнению (8.8.15), то получится то же самое. Следовательно, связь между (8.8.15) и (8.8.19) инвариантна относительно нелинейных преобразований.

Упражнение. То же самое преобразование, примененное к (8.8.16), дает (ср. с (8.1.9))

$$\bar{A}(\bar{y}) = A(y) \frac{\partial \varphi}{\partial y} + \frac{1}{2} C(y)^2 \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2}, \quad \bar{C}(\bar{y}) = C(y) \frac{\partial \varphi}{\partial y}. \tag{8.8.21}$$

Тогда в интерпретации Ито уравнения (8.8.15) именно эти преобразования являются правильными формулами преобразований коэффициентов, а не преобразования (8.8.20), как это можно было бы ожидать при наивном рассмотрении.

Упражнение. Любое уравнение вида (8.8.15) с предписанием Ито эквивалентно другому уравнению такого же вида с предписанием Стратоновича. Найдите связь между коэффициентами в обоих уравнениях. Разность между их коэффициентами A иногда называют *ложным дрейфом*, но он, конечно, не имеет физического смысла.

Упражнение. Многомерная версия (8.8.15)

$$\dot{y}_\nu = A_\nu(y) + C_\nu(y) L(t),$$

является объектом такой же критики, если только не выполняется условие

$$\sum_\mu c_\mu(y) \frac{\partial C_\nu(y)}{\partial y_\mu} = 0.$$

Найдите также соответствующее условие для

$$\dot{y}_\nu = A_\nu(y) + \sum_j C_{\nu,j}(y) L_j(t),$$

где $L_j(t)$ — взаимно независимые процессы Ланжевена.

8.9. КАК ПРИМЕНЯТЬ МЕТОД ЛАНЖЕВЕНА

Способ, которым Ланжевен ввел флуктуации в уравнение движения броуновской частицы, оказался очень успешным, но его нельзя распространить на нелинейные системы. В настоящем параграфе мы проанализируем трудности, к которым приводит такое обобщение. Мы хотим предостеречь читателя от весьма запутанной литературы, которую они породили, и убедить его в необходимости иметь твердо обоснованную отправную точку.

Прежде всего необходимо различать *внешний* и *внутренний шумы* *. Внешним шумом называют флуктуации, возникающие в детерминистической системе под воздействием случайной силы, стохастические свойства которой считаются известными. Стохастические задачи, возникающие в технике, относятся к такому типу (например, случайная нагрузка на мост или передача случайного сигнала через нелинейное устройство). Такие случаи описываются стохастическими дифференциальными уравнениями в гл. 14 и представляют задачи скорее математические, чем физические.

Так как флуктуирующая сила никогда не бывает настоящим белым шумом, то дилемма Ито—Стратоновича не возникает и тогда можно применять примечание, приведенное в конце § 8.8. В настоящем параграфе мы не будем рассматривать внешний шум.

Внутренний шум обусловлен тем, что сама система состоит из дискретных частиц. Он является неотъемлемым свойством самого механизма эволюции состояния системы и не может быть отделен от ее уравнения движения. Все наши примеры, относящиеся к химическим реакциям, испусканию и поглощению излучения, росту популяции и т. д., относятся к такому типу. Именно здесь возникают трудности, которые мы попытаемся проанализировать.

Броуновская частица вместе с окружающей ее жидкостью является замкнутой физической системой с внутренним шумом. Однако Ланжевен рассматривал частицу как механическую систему, подвергающуюся воздействию силы, действующей со стороны жидкости. Эту силу можно разделить на детерминистическую часть, вызывающую затухание, которую можно включить в механическое уравнение движения частицы, и случайную силу, которую он рассматривал как внешнюю, в частности это означало, что ее зависимость от времени считалась известной. Из физических соображений понятно, что эти свойства не меняются, если на частицу действуют дополнитель-

---

* H. Mori, Prog. Theor. Phys., 53, 1617 (1975).

ные силы, такие, как гравитация в (8.3.5) или даже нелинейность, как в (8.3.10); для таких случаев можно обосновать (8.3.12) *.

Однако в недавние годы для описания флуктуаций в разнообразных физических системах использовали точно такие или аналогичные им уравнения, хотя источник шума в них был внутренним и физических оснований для разделения уравнения на механическую часть и случайный член с известными свойствами не было. В качестве примеров можно привести электронные устройства **, процессы релаксации ***, гидродинамику ****, диффузию *****, электромагнитное поле в веществе ******, уравнение Больцмана *******, лазеры (см. § 11.9), динамику вблизи критической точки и гравитационное поле во Вселенной ********.

Стратегия использования приближения Ланжевена в этих примерах такова. Предположим, имеется система, эволюция которой описывается феноменологически следующим детерминистическим дифференциальным уравнением:

$$\dot{y} = A(y). \tag{8.9.1}$$

Обычно y — это конечный или бесконечный набор макроскопических переменных. Мы же рассмотрим случай, когда y является одной переменной. Предположим, нам известно, что по некоторым причинам в системе должны быть флуктуации относительно этого макроскопического значения. Тогда (8.9.1) нужно дополнить членом

---

* В частности, ангармонический броуновский асциллятор подробно изучен в работах: J. B. Morton and S. Corrsin, J. Mathem. Phys., 10, 361 (1969); K. S. J. Nordholm and R. Zwanzig, J. Statist. Phys., 11., 143 (1974); R. F. Rodriguez and N. G. van Kampen, Physica, 85A, 347 (1976); M. F. Dimentberg, Intern. J. Nonlinear Mech., 11, 83 (1976); R. C. Desai and R. Zwanzig, J. Statist. Phys., 19., 1 (1978).

** A. van der Ziel, Noise (Prentice, Englewood Cliffs, N. Y., 1954); K. M. van Vliet, J. Mathem. Phys., 12, 1981 and 1998 (1971).

*** L. Onsager and S. Machlup, Phys. Rev., 91, 1505 and 1512 (1953); R. F. Fox and G. E. Uhlenbeck, Phys. Fluids, 13, 1893 (1970).

**** L. D. Landau and E. M. Lifshits, Fluid Mechanics (Pergamon, Oxford, 1959); Mechanics, New Concepts, New Problems, New Application) Proc. 6th IUPAP Conf. on Statistical Mechanics; S. A. Rice et al. eds., University of Chicago Press, Chicago, 1972); E. H. Hauge and H. Martin-Lof, J. Statist. Phys. 7, 259 (1973); V. I. Klyatskin and V. I. Tatarski, Sov. Phys. Usp. 16, 494 (1974); Y. Kuramoto, Prog. Theor. Phys. 53, 589 (1975).

***** D. Bedeaux and P. Mazur, Physica 73, 431 (1974).

****** L. D. Landau and E. M. Lifshitz, Electrodynamics in Continuous Media (Pergamon, Oxford, 1960).

******* A. A. Abrikosov and I. M. Khalatnikov, Sov. Phys. JETP 34, 135 (1958); M. Bixon and R. Zwanzig, Phys. Rev. 187, 267 (1969); R. F. Fox and G. E. Uhlenbeck, Phys. Fluids 13, 2881 (1970).

******** S. K. Ma, Modern Theory of Critical Phenomena (Benjamin, Reading, Mass, 1976) Ch. XIII; M. H. Ernst in: Fundamental Problems in Statistical Mechanics IV (Proc. Intern. Summer School in Jadwisin, Poland; E. G. D. Cohen and W. Fiszdon eds., Ars Polona, Warsawa, 1978).

Ланжевена

$$\dot{y} = A(y) + L(t) \tag{8.9.2}$$

и сделать относительно $L(t)$ соответствующие предположения 1—4 из предыдущего параграфа. Получилось уравнение (8.8.12), которое эквивалентно (8.8.13).

Здесь возникает первая трудность. При усреднении уравнения (8.9.2) обнаруживается, что величина $\langle y \rangle$ не удовлетворяет феноменологическому уравнению (8.9.1), которое служило нам отправной точкой, а описывается уравнением

$$\partial_t \langle y \rangle = \langle A(y) \rangle + {}^1/_2 \langle (y - \langle y \rangle)^2 \rangle A''(\langle y \rangle) + \ldots .$$

Отсюда следует, что $\langle y \rangle$ не удовлетворяет вообще никакому дифференциальному уравнению, а «зацепляется» за высшие моменты. Это наводит на мысль, что следует ввести их равновесные значения:

$$\partial_t \langle y \rangle = A(\langle y \rangle) + {}^1/_2 \langle (y - \langle y \rangle^e)^2 \rangle^e A''(\langle y \rangle) + \ldots . \tag{8.9.3}$$

Это предположение в данном случае действительно дает уравнение только для величины $\langle y \rangle$, хотя понятно, что оно не справедливо вдали от равновесия. Но даже вблизи равновесия оно не решает трудности, потому что если даже $\langle y \rangle$ удовлетворяет (8.9.3), то у нас уже нет оснований отождествить $A(y)$ в этом уравнении с $A(y)$ в феноменологическом уравнении (8.9.1). С равной правдоподобностью в (8.9.2) и (8.9.3) можно было бы взять немного другое $A(y)$, выбранное так, чтобы его полная правая часть в (8.9.3) совпадала с феноменологическим значением $A(y)$ в (8.9.1).

Это открывает основное направление в приложениях приближения Ланжевена к системам с внутренним шумом, обладающим нелинейным феноменологическим законом. Феноменологическое уравнение (8.9.10) справедливо только в таком приближении, когда флуктуациями можно пренебречь. Это подразумевает, что функция $A(y)$ определяется феноменологически с некоторой долей неопределенности порядка размера флуктуаций. Если бы удалось вывести определенный вид $A(y)$ из теории или из эксперимента, в котором флуктуациями пренебрегалось, то это не могло бы служить достаточным основанием для того, чтобы постулировать, что именно этот вид $A(y)$ следует использовать в (8.9.2). Между ними может быть небольшое расхождение, значение которого совпадает с значением флуктуаций. На это можно не обращать внимания в макроскопическом законе, но в уравнении для самих флуктуаций такой реакцией пренебречь нельзя. Расхождение между (8.9.1) и (8.9.3) относится как раз к такому типу.

Возвращаясь к нашему описанию приближения Ланжевена, отметим, что оно не всегда приводит к квазилинейному уравнению Ланжевена. Физическое рассмотрение часто подсказывает, что значения флуктуаций должны зависеть от значения y. Например, если y — анодный ток в вакуумной трубке, то можно ожидать, что флуктуации числа электронов, попадающих на анод, окажутся порядка корня

квадратного от общего количества, т. е. они будут пропорциональны $\sqrt{y}$. Для того чтобы это было допустимо, умножим $L(t)$ на зависящий от y коэффициент:

$$\dot{y} = A(y) + C(y)\,L(t). \tag{8.9.4}$$

Это уравнение совпадает с (8.8.15) и, следовательно, не является настоящим уравнением, пока мы не добавим правило интерпретации: либо правило Ито, либо Стратоновича. Результаты оказываются разными, а значит, возникает ощущение, что дилемма Ито—Стратоновича имеет физический смысл. Однако, согласно последнему упражнению § 8.8, эту разницу можно скомпенсировать изменением $A(y)$, которое, естественно, имеет тот же порядок, что и значение флуктуаций. Как мы видим, приближение Ланжевена дает возможность определить $A(y)$ в (8.9.4). Следовательно, с этой доли неопределенности и противоречие Ито—Стратоновича является артефактом, связанным с неточностью при идентификации $A(y)$ с феноменологической функцией, использованной в (8.9.1).

И наконец, возникает вопрос: как мы должны находить $C(y)$? В случае внешнего шума это просто отклик системы на приложенную силу, который определяется механикой системы. Для внутреннего шума общий метод нахождения $C(y)$ отсутствует *. Однако для систем, настолько близких к равновесным, что их можно рассматривать как линейные, C является постоянной (равной $\sqrt{\Gamma}$) и может быть найдена, если известно P^e. Вне этой линейной области тот же прием, что применялся в (8.1.8), позволяет отождествить P^e с (8.1.4). Однако из-за неопределенности в выборе $A(y)$ полученный результат не заслуживает доверия. Действительно, как будет видно в следующей главе, уравнение (8.1.4) с $A(y)$, *взятым из феноменологического уравнения* (8.9.1), *неверно, когда выходит за границы применимости приближения Фоккера—Планка*. Следовательно, уравнение (8.1.8) также неверно. Это была первичная трудность, подмеченная Макдональдом и продемонстрированная на следующем парадоксе.

Вывод состоит в том, что феноменологический подход непригоден при работе с шумом в нелинейных системах. *Невозможно постулировать нелинейное уравнение Ланжевена или Фоккера—Планка, а затем пытаться однозначно определить его коэффициенты из макроскопических данных* **. Для того чтобы вывести уравнения для флуктуаций, нужно исходить из более подробного описания порождающего их механизма. С другой стороны, вывод из *микроскопических* уравнений с помощью техники проецирования *** является просто алгеб-

---

* Эта трудность продемонстрирована на примере дробового шума в токе, поддерживаемом в вакуумных трубках и полупроводниках.

** Этот вывод был продемонстрирован явно на модели обобщенной рэлеевской частицы в работе: C. T. J. Alkemade, N. G. van Kampen, D. K. C. MacDonald, Proc. Roy. Soc. (London) A271, 449 (1963).

*** S. Nakajima, Prog. Theor. Phys. 20, 948 (1958); R. Zwanzig, J. Chem. Phys 33, 1338 (1960); H. Mori, Prog. Theor. Phys. 33, 423 (1965).

раическим преобразованием этих уравнений и не дает ответа на вопрос, когда и почему выполняются предположения о стохастичности. Наш генеральный план состоит в том, что в следующей главе мы, исходя из *мезоскопического* описания в рамках основного кинетического уравнения, справедливость которого основывается на физическом описании системы, выведем и макроскопический закон, и описание флуктуаций.

Парадокс Бриллюэна *. Вольт-амперная характеристика металлооксидного выпрямителя или *p-n*-перехода имеет вид

$$I = A\left\{\exp\left[\frac{eV}{kT}\right]-1\right\}.$$

Простой моделью является диодная цепь на рис. 16 с двумя металлическими пластинами, рабочие функции которых приведены на рисунке. Все устройство находится в термодинамическом равновесии при температуре t (*диод Алкемейда* **). Заряд Q конденсатора описывается феноменологическим уравнением

$$\dot{Q} = -A\left\{\exp\left[\frac{eQ}{kTC}\right]-1\right\}.$$

Если к этому уравнению добавить член Ланжевена, описывающий шум, возникающий в выпрямителе для среднего заряда $\langle Q\rangle$, то получим

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle Q\rangle = -A\left\{\left\langle\exp\left[\frac{eQ}{kTC}\right]\right\rangle-1\right\} = A\left\{\frac{e}{kTC}\langle Q\rangle+\frac{1}{2}\left(\frac{e}{kTC}\right)^2\langle Q^2\rangle+\ldots\right\}.$$

Отсюда следует, что в равновесии

$$\langle Q\rangle^{\mathrm{e}} = -\frac{1}{2}\frac{e}{kTC}\langle Q^2\rangle^{\mathrm{e}} = -\frac{1}{2}e.$$

Тогда диод в термодинамическом равновесии поддерживает заряд и, следовательно, напряжение на конденсаторе: выпрямитель выпрямляет свои собственные флуктуации!

Как бы ни был мал эффект, он нарушает второй закон термодинамики ***. Массив, состоящий из 10^{12} диодов, был бы способен питать маяк ****. Разрешение этого парадокса состоит в том, что необходимо учитывать контактную разность потенциалов на металлических пластинах. Даже этот пример показывает, насколько опасно добавлять член Ланжевена в нелинейные феноменологические уравнения *****.

Упражнение. Примените приближение Ланжевена для нахождения флуктуаций тока в линейной *RC*-цепи.

Упражнение. Затухание броуновской частицы в жидкости описывается в терминах ее энергии следующим уравнением:

$$\dot{E} = -2\gamma E.$$

Найдите уравнения Ланжевена, которые правильно описывают флуктуации в интерпретациях Стратоновича и Ито соответственно.

Упражнение. Покажите, что парадокс Бриллюэна остается в силе, если использовать приближение Фоккера—Планка.

---

* L. Brillouin, Phys. Rev., 78, 627 (1950).
** C. T. J. Alkemade, Physica 24, 1029 (1958).
*** A. Marek, Physica, 25, 1358 (1959).
**** R. McFee, Amer. J. Phys., 39, 814 (1971).
***** Именно эта модель точно решена в работе: J. Mathem, Phys., 2, 592 (1961).

Упражнение. Опишите радиоактивный распад уравнением Ланжевена

$$\dot{n} = -n + C(n)\,L(t). \tag{8.9.5}$$

Покажите, что правильные значения среднего и дисперсии можно получить, полагая $\Gamma\{C(n)\}^2 = n$ и придерживаясь интерпретации Ито. Покажите также, что высшие моменты получаются неправильными.

Упражнение. Запишите (8.9.5) в виде $\dot{n} + n = f(t)$, тем самым определив стохастический процесс f. Используя результаты параграфа § 4.6 можно найти свойства процесса f. Из формулы

$$n(t) - n_0 e^{-t} \int_0^t e^{t'} f(t')\,dt'$$

получаем немедленно $\langle f(t)\rangle = 0$, что после возведения в квадрат дает

$$\langle f(t_1)\,f(t_2)\rangle = n_0 e^{-t_1}\delta(t_1 - t_2).$$

Если θ—ступенчатая функция Хевисайда, покажите, что

$$\langle f(t_1)\,f(t_2)\,f(t_3)\rangle = -n_0 e^{-t_1}\delta(t_1 - t_2)\,\delta(t_1 - t_3) + n_0 e^{-t_1}\delta(t_1 - t_2)\,\theta(t_1 - t_3) + \\ + n_0 e^{-t_1}\delta(t_1 - t_3)\,\theta(t_1 - t_2) + n_0 e^{-t_2}\delta(t_2 - t_3)\,\theta(t_3 - t_1).$$

Каким образом можно догадаться a priori, что f не может быть гауссовым процессом?

ГЛАВА 9

РАЗЛОЖЕНИЕ ОСНОВНОГО КИНЕТИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ

Для основных кинетических уравнений, которые нельзя решить точно, вместо интуитивных приближений Фоккера—Планка и Ланжевена необходимо иметь систематический приближенный метод. Такой метод—степенное разложение по параметру Ω—мы рассмотрим в этой главе. Этот метод позволяет также понять, каким образом макроскопическое уравнение получается из стохастического описания в терминах основного кинетического уравнения.

9.1. ВВОДНЫЕ РАССУЖДЕНИЯ

Основное кинетическое уравнение удается решить явно только в исключительных случаях. Например, мы видели, что одношаговое кинетическое уравнение можно решить тогда, когда вероятности шагов r_n и g_n постоянны или линейны по n, в других же случаях получить решение не удается. Поэтому очень важными оказываются приближенные методы, наиболее хорошо известным из которых является приближение Фоккера—Планка. В литературе предлагались многие другие методы, которые в основном содержали рецепты, предназначенные для частного рассматриваемого случая и касающиеся обрезания высших моментов по флуктуациям. Эти методы зачастую в большей степени определялись не общей логикой, а потребностями и вкусами автора. В результате они приводили к ненадежным и противоречивым результатам, упомянутым в § 8.1. Однако все они

имели общее положение, смысл которого состоит в том, что флуктуации малы.

Такую ситуацию можно исправить только с помощью систематического приближенного метода в виде разложения по степеням малого параметра. Только в этом случае мы получим объективную меру значимости нескольких членов. Поэтому нашей первой задачей является выбор подходящего параметра разложения. Таким параметром должен быть какой-либо параметр, встречающийся в основном кинетическом уравнении, т. е. содержащийся в вероятности W перехода. Далее, этот параметр должен отвечать за значение флуктуаций и, следовательно, за значение скачков. Обозначим этот параметр Ω и выберем его таким образом, что при больших Ω скачки сравнительно малы. Во многих случаях Ω — это просто размер системы.

Перед тем как формулировать метод разложения, его полезно сначала продемонстрировать на простом примере. Рассмотрим объем Ω, в котором происходит следующая химическая реакция:

$$A \xrightarrow{k} X, \quad 2X \xrightarrow{k'} B. \tag{9.1.1}$$

Концентрация φ_A молекул A опять берется константой и считается настолько большой, что обратной реакцией можно пренебречь. Иначе говоря, можно представить себе, что A постоянно пополняется, а B расходуется. Поэтому схема реакции (9.1.1) описывает *открытую* систему (см. § 7.4). Уравнение, характеризующее скорость химической реакции для концентрации φ вещества X, записывают в виде

$$\dot{\varphi} = k\varphi_A - 2k'\varphi^2. \tag{9.1.2}$$

Рассмотрим теперь реакцию мезоскопически. Основное кинетическое уравнение, согласно (7.2.4), запишем в виде

$$\dot{p}_n = k\varphi_A\Omega(\mathbf{E}^{-1} - 1)\, p_n + (k'/\Omega)(\mathbf{E}^2 - 1)\, n(n-1)\, p_n. \tag{9.1.3}$$

Это уравнение нелинейно и его нельзя решить явно методами § 6.6, поэтому мы получим приближенное решение для больших Ω. Отметим, что степени Ω в коэффициентах записаны явно с тем, чтобы константы $k\varphi_A$ и k' не зависели от Ω. Для удобства выберем единицы, в которых $k' = {}^1/_2$ и $k\varphi_A = 1$:

$$\dot{p}_n = \Omega(\mathbf{E}^{-1} - 1)\, p_n + (2\Omega)^{-1}(\mathbf{E}^2 - 1)\, n(n-1)\, p_n. \tag{9.1.4}$$

Можно ожидать, что p_n будет иметь острый максимум вблизи макроскопического значения $n = \Omega\varphi(t)$, заданного (9.1.2), с шириной порядка $n^{1/2} \sim \Omega^{1/2}$.

С учетом этой догадки полагаем

$$n = \Omega\varphi(t) + \Omega^{1/2}\xi, \tag{9.1.5}$$

где $\varphi(t)$ — решение уравнения (9.1.2), а ξ — новая переменная, заменяющая n. Соответственно распределение p_n запишем теперь как

функцию ξ:

$$p_n(t) = \Pi(\xi, t). \tag{9.1.6}$$

Оператор $\mathbf{E}$ изменяет n на $n+1$ и, следовательно, ξ на $\xi + \Omega^{-1/2}$, так что

$$\mathbf{E} = 1 + \Omega^{-1/2} \frac{\partial}{\partial \xi} + {}^1/_2 \Omega^{-1} \frac{\partial^2}{\partial \xi^2}. \tag{9.1.7}$$

Производная по времени в уравнении (9.1.4) берется при постоянном n, значит, в плоскости ξ, t она берется вдоль направления, заданного уравнением

$$d\xi/dt = -\Omega^{1/2}\, d\varphi\, dt,$$

тогда

$$\dot{p}_n = \frac{d\Pi}{dt} - \Omega^{1/2} \frac{d\varphi}{dt} \frac{d\Pi}{d\xi}. \tag{9.1.8}$$

Следовательно, основное кинетическое уравнение (9.1.4) в новых переменных принимает вид

$$\frac{\partial \Pi}{\partial t} - \Omega^{1/2} \frac{d\varphi}{dt} \frac{\partial \Pi}{\partial \xi} = \Omega \left[-\Omega^{-1/2} - \frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{1}{2} \Omega \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} - \ldots \right] \Pi +$$
$$+ \frac{1}{2} \Omega^{-1} \left[2\Omega^{-1/2} \frac{\partial}{\partial \xi} + 2\Omega^{-1} \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + \ldots \right] (\Omega\varphi + \Omega^{1/2}\xi)(\Omega\varphi + \Omega^{1/2}\xi - 1)\Pi. \tag{9.1.9}$$

Теперь нам надо собрать несколько степеней Ω. Во-первых, имеется несколько больших членов, пропорциональных $\Omega^{1/2}$, которые могут свести на нет разложение Π по степеням $\Omega^{-1/2}$. Однако каждый из них содержит Π только в виде множителя $d\Pi/d\xi$. В результате они сокращаются, если

$$-\frac{d\varphi}{dt} = -1 + \varphi^2. \tag{9.1.10}$$

Это макроскопическое уравнение (9.1.2), и оно удовлетворяется поскольку с самого начала мы поставили условие, что в качестве функции φ берется макроскопическое решение.

Теперь соберем члены порядка Ω^0 в (9.1.9):

$$\frac{\partial \Pi}{\partial t} = 2\varphi \frac{\partial}{\partial \xi} \xi \Pi + \frac{1}{2} (1 + 2\varphi^2) \frac{\partial^2 \Pi}{\partial \xi^2}. \tag{9.1.11}$$

Это линейное уравнение Фоккера—Планка, коэффициенты которого зависят от t посредством $\varphi(t)$. Оно было решено в § 8.6, и результат состоял в том, что Π оказалось гауссовым. Следовательно, достаточно определить первый и второй моменты ξ, которые в любом случае содержат наиболее важную информацию. С помощью обычного приема из (9.1.11) получаем

$$\partial_t \langle \xi^2 \rangle = -2\varphi \langle \xi \rangle, \tag{9.1.12а}$$
$$\partial_t \langle \xi^2 \rangle = -4\varphi \langle \xi^2 \rangle + 1 + 2\varphi^2. \tag{9.1.12б}$$

Таким образом, мы нашли распределение флуктуаций вблизи макроскопического значения. Вычисления были проведены с точностью до порядка $\Omega^{1/2}$ по отношению к макроскопическому значению n. Это приближение будем называть *приближением линейного шума*. В этом порядке по Ω шум является гауссовым даже для зависящих от времени состояний вдали от равновесия. Высшие поправки вычисляются в § 9.6. Эти поправки модифицируют гауссов характер шума. Однако они имеют порядок Ω^{-1} по отношению к n, что эквивалентно примерно одной молекуле.

В частности, давайте возьмем для φ стационарное решение уравнения (9.1.10): $\varphi = \varphi^s = 1$. Тогда (9.1.11) сводится к не зависящему от времени уравнению Фоккера—Планка, решением которого является процесс Орнштейна—Уленбека.

Из (9.1.12б) непосредственно находим

$$\langle\langle n^2\rangle\rangle^s = \Omega\,\langle\xi^2\rangle^s = {}^3/_4\Omega = {}^3/_4\,\langle n\rangle^s. \tag{9.1.13}$$

Множитель $^3/_4$ показывает, что стационарное распределение является более узким, чем распределение Пуассона с тем же самым средним значением. Этот факт породил некоторую дискуссию *, но может быть объяснен следующим образом. Молекулы X образуются независимо друг от друга, но аннигилируют парами, поэтому они не являются статистически независимыми. Если в некоторый момент времени окажется, что количество вещества X превышает среднее значение, скорость их аннигиляции также увеличится по двум причинам. Во-первых, будет больше кандидатов для аннигиляции, что является естественной причиной для возвращения к среднему даже в линейных процессах **.

Во-вторых, вероятность аннигиляции для каждой молекулы окажется также больше среднего значения, потому что имеется большое число партнеров, которые могут послужить ей парой. Этот дополнительный эффект увеличивает тенденцию возвращения к среднему и тем самым уменьшает вероятность больших флуктуаций. Аналогичные аргументы применимы также и в тех случаях, когда число молекул меньше среднего значения.

Упражнение. Функция П, определенная (9.1.6), не является плотностью вероятности ξ, но отличается от нее на нормировочный множитель. Найдите этот множитель и убедитесь в том, что он не входит в основное кинетическое уравнение, поэтому при написании (9.1.12) ошибки допущено не было.

Упражнение. Если $u = n/\Omega$ — полная плотность или концентрация вещества X, покажите, что

$$\partial_t\,\langle u\rangle = 1 - \langle u\rangle^2 + O\,(\Omega^{-1}), \tag{9.1.14а}$$

$$\partial_t\,\langle\langle u^2\rangle\rangle = -\,4\,\langle u\rangle\,\langle\langle u^2\rangle\rangle + 1 + \langle u\rangle + O\,(\Omega^{-1/2}). \tag{9.1.14б}$$

---

* G. Nicolis and P. Prigogine, Proc. Nat'l Acad. Sci. USA 68, 2102 (1971); A. Nitzan and J. Ross, J. Statist. Phys. 10, 379 (1974); G. Nicolis P. Allen and A. Van Nypelseer, Prog. Theor. Phys. 52, 1481 (1974); N. Saito, J. Chem. Phys. 61, 3644 (1974).

** Этот эффект был продемонстрирован на модели урн Эренфеста (4.5.4).

Упражнение. Покажите, что для реакции $A \to pX$, $qX \to B$ с произвольными (положительными) целыми p, q имеет место соотношение

$$\langle\langle n^2\rangle\rangle^s = \frac{p+q}{2q}\langle n\rangle^s.$$

При $p=q$ результат окажется таким же, как и для распределения Пуассона. Проверьте, что в этом случае p_n действительно является распределением Пуассона, даже когда процессы рождения и аннигиляции X не являются независимыми.

Упражнение. Покажите, что точное стационарное решение (9.1.3) дается выражением

$$p_n^s = C\frac{\gamma^n}{n!} I_{n-1}(2\gamma), \tag{9.1.15}$$

где I_{n-1} обозначена модифицированная функция Бесселя, а

$$\gamma^2 = kn_A\Omega/k'; \quad C^{-1} = \sqrt{2} I_1(2\gamma\sqrt{2}).$$

Упражнение. Выведите (9.1.13) из (9.1.15).

Упражнение. Найдите $\langle\langle n^2\rangle\rangle^s$ для реакции

$$A \to pX, \quad qX \to B + rX,$$

где $p \geqslant 1$, $q > r \geqslant 0$, и объясните результат качественно.

9.2. ОБЩАЯ ФОРМУЛИРОВКА МЕТОДА РАЗЛОЖЕНИЯ

Флуктуации вызываются дискретной природой вещества. Плотность газа флуктуирует потому, что газ состоит из молекул. Флуктуации в химических реакциях возникают потому, что реакция происходит, когда сталкиваются отдельные молекулы. Флуктуации электрического тока обусловлены тем, что ток — это движение электронов, радиоактивный распад флуктуирует благодаря тому, что он связан с отдельными ядрами. Между прочим, это объясняет, почему формулы для флуктуаций в физических системах всегда содержат атомные константы, такие, как число Авогадро, масса молекулы или заряд электрона.

С другой стороны, макроскопическое поведение определяется сразу всеми частицами, поэтому можно ожидать, что в большой системе флуктуации будут сравнительно не важны. Действительно, мы это широко проиллюстрировали на примерах линейных систем, рассматривавшихся ранее. На примере этих систем можно было бы подметить качественное соображение, что в наборе из N частиц флуктуации имеют порядок $N^{1/2}$, а следовательно, их воздействие на макроскопические свойства имеет порядок $N^{-1/2}$. Тогда ясно, что размер системы является параметром, характеризующим меру относительной важности флуктуаций Ω. Поэтому мы введем параметр, характеризующий размер системы. Точное определение Ω зависит от конкретной системы, но у него есть общие свойства, которые мы сейчас сформулируем.

Наличие параметра Ω дает возможность различать два масштаба. Один масштаб определяется размерами скачков (мы его будем обозначать переменной X). Когда величина Ω изменяется, значение скачков, выраженное в единицах X, остается тем же самым. Другой

масштаб — это масштаб измерения макроскопических свойств системы. Обозначим его $x = X/\Omega$. Тогда можно ожидать, что вероятность того, что переход произойдет, зависит от x, т. е. при изменении Ω вероятность остается той же самой функцией величины x. Если Ω — это объем системы, то отличие между X и x как бы характеризуют разницу соответственно между экстенсивной и интенсивной переменными. Сейчас мы выразим эту мысль на формальном языке.

В общем виде основного кинетического уравнения (5.1.5) в качестве переменной y можно взять X или x, здесь мы выбираем первое. Отметим также явную зависимость от

$$\dot{P}(X\quad) = \int \{W_\Omega(X \mid X') P(X', t) - W_\Omega(X' \mid X) \times P(X, t)\} \, dX'. \quad (9.2.1)$$

По аналогии (9.2.1) мы запишем W как функцию начальной точки и длины скачка $r = X - X'$:

$$W_\Omega(X \mid X') = W_\Omega(X'; X - X') = W_\Omega(X'; r).$$

Зависимость от r описывает относительную вероятность скачков различной длины, в то время как зависимость от X' определяет полную вероятность перехода. Мысль, высказанная выше, выражается равенством

$$W_\Omega(X'; X - X') = \Phi\left(\frac{X'}{\Omega}; X - X'\right) = \Phi(x'; r). \quad (9.2.2)$$

Эта формула означает, конечно же, что Φ является функцией двух переменных $x' = X'/\Omega$ и r и не содержит параметра Ω каким-либо другим образом. Отметим, что

$$W_\Omega(X' \mid X) = \Phi(x; -r).$$

Строгое условие (9.2.2) можно ослабить. Во-первых, понятно, что можно дописать произвольный (положительный) множитель $f(\Omega)$, поскольку его всегда можно включить в масштаб времени. Это означает, что большие системы могут эволюционировать медленнее малых. Во-вторых, поскольку мы собираемся раскладывать по параметру Ω^{-1}, то появление высших порядков по Ω^{-1} в (9.2.2) не принесет никакого вреда. Тогда вместо (9.2.2) наши предположения относительно $W_\Omega(X \mid X')$ можно записать в следующем виде:

$$W_\Omega(X \mid X') = f(\Omega) \left\{\Phi_0\left(\frac{X'}{\Omega}; r\right) + \Omega^{-1}\Phi_1\left(\frac{X'}{\Omega}; r\right) + \Omega^{-2}\Phi_2 + \ldots\right\}. \quad (9.2.3)$$

Понятно, что это предположение применимо почти ко всем случаям, встречающимся на практике. Поэтому будем ссылаться на него как на каноническую форму. Когда W не имеет такого *канонического вида*, метод разложения неприменим. Подстановка (9.2.3)

в основное кинетическое уравнение дает

$$\frac{\partial P(X,t)}{\partial t}=f(\Omega)\int\left\{\Phi_0\left(\frac{X-r}{\Omega};\ r\right)+\right.$$

$$\left.+\Omega^{-1}\Phi_1\left(\frac{X-r}{\Omega};\ r\right)+\ldots\right\}P(X-r,\ t)\,dr-$$

$$-f(\Omega)\int\left\{\Phi_0\left(\frac{X}{\Omega};\ -r\right)+\Omega^{-1}\Phi_1\left(\frac{X}{\Omega};\ r\right)+\ldots\right\}dr\cdot P(X,\ t). \quad (9.2.4)$$

Пример. Для рэлеевской частицы скорость V, описывающаяся основным кинетическим уравнением с $W(V\mid V')$, дается (8.4.14). Скачки в V обусловлены столкновениями молекул газа и поэтому имеют порядок $(m/M)_v$, где v — скорость, характеризующая распределение скорости F. Эти параметры можно сделать малыми, выбирая большое M, соответственно берем $\Omega=M/m$. Переменная, в единицах которой значения скачков не меняются,—это импульс $P=MV$. Наша переменная — X, тогда как mV можно рассматривать как интенсивную переменную x. Вероятность перехода имеет вид

$$W(X\mid X')=\frac{\nu A}{M}\left(\frac{M+m}{2m}\right)^2\frac{|X-X'|}{M}F\left(\frac{M+m}{2mM}X-\frac{M-m}{2mM}X'\right), \quad (9.2.5)$$

$$W(X';\ r)=\nu A\left(\frac{M+m}{2mM}\right)^2|r|F\left(\frac{X'}{M}+\frac{M+m}{2mM}r\right)=$$

$$=\frac{\nu A}{4m^2}(1+\Omega^{-1})^2|r|F\left(\frac{X'}{m\Omega}+\frac{1}{2}(1+\Omega^{-1})\frac{r}{m}\right).$$

Это соотношение имеет вид (9.2.3), если в нем взять $f(\Omega)=1$:

$$\Phi_0(x;\ r)=\frac{\nu A}{4m^2}|r|F\left(\frac{x}{m}+\frac{r}{2m}\right)$$

и т. д. *

Упражнение. Для одношагового процесса условие (9.2.3) того, что вероятность порядка имеет канонический вид, выражается соотношениями

$$r_n=f(\Omega)\left[\rho_0\left(\frac{n}{\Omega}\right)+\Omega^{-1}\rho_1\left(\frac{n}{\Omega}+\ldots\right)\right], \quad (9.2.6а)$$

$$g_n=f(\Omega)\left[\gamma_0\left(\frac{n}{\Omega}\right)+\Omega^{-1}\gamma_1\left(\frac{n}{\Omega}\right)+\ldots\right], \quad (9.2.6б)$$

где ρ_0, ρ_1, ... и γ_0, γ_1 — *функции, зависящие от* n/Ω *и не содержащие параметр* Ω *никаким другим образом.*

Упражнение. Убедитесь, что (5.1.7) и (6.9.5) имеют канонический вид (9.2.6).

Упражнение. Относительно основного кинетического уравнения (6.9.1) поясните, почему N и M пропорциональны Ω, а α, β — пропорциональны Ω^{-1}:

$$\dot{p}_n=\Omega a(\mathrm{E}-1)\left(\frac{n}{\Omega}\right)^2p_n+\Omega b(\mathrm{E}^{-1}-1)\left(\nu-\frac{n}{\Omega}\right)\left(\mu-\frac{n}{\Omega}\right)p_n. \quad (9.2.7)$$

Проверьте, что это соотношение имеет канонический вид (9.2.6).

Упражнение. Покажите тем же самым способом, что примеры 2, 3, 4 из § 6.9 имеют канонический вид.

Упражнение. Покажите, что основное кинетическое уравнение, определенное в (6.9.11), обладает канонической формой с $\Omega=C$ или, более изящно, $\Omega=CkT/e^2$.

---

* Эта задача рассмотрена в работах: Can. J. Phys. 39, 551 (1961) и в R. F. Fox and M. Kac, Biosystems 8, 197 (1977).

Упражнение. Рассмотрите пример с рэлеевской частицей, выбирая $\Omega = (M+m)/(2m)$. При этом выборе $\Phi_1 = \Phi_2 = \ldots = 0$.

Для того чтобы продвинуться более в систематическом разложении $1/\Omega$, надо предугадать, каким образом решение $P(X, t)$ будет зависеть от Ω. Начальное условие имеет вид

$$P(X, 0) = \delta(X - X_0), \tag{9.2.8}$$

где, вообще говоря, X_0 имеет порядок Ω. Можно ожидать, что с течением времени $P(X, t)$ будет иметь острый пик, находящийся при-

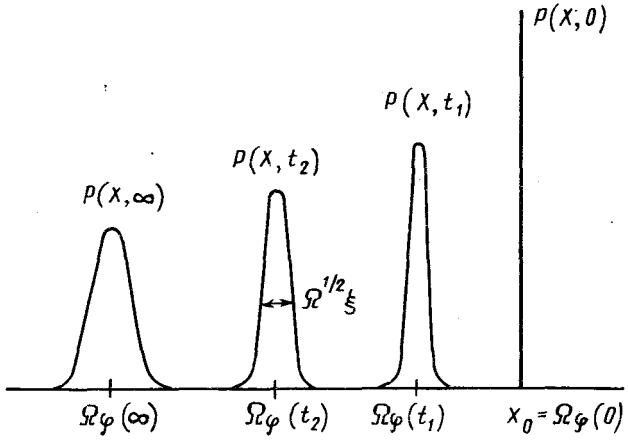

Рис. 24. Эволюция плотности вероятности

мерно в том же месте, порядка Ω (в масштабе X), в то время как ширина этого пика окажется порядка $\Omega^{1/2}$ (рис. 24). Чтобы записать это формально, полагаем

$$X = \Omega\Phi(t) + \Omega^{1/2}\xi. \tag{9.2.9}$$

Первый член в этом выражении является макроскопическим.

Функция $\varphi(t)$ должна подбираться таким образом, чтобы следовать движению пика во времени. Тогда можно ожидать, что $P(X, t)$, если его записать как функцию ξ, не будет зависеть от Ω, а если и будет, то только в высших приближениях. Обоснование этого анализа мы дадим a posteriori, после того как наш прогноз подтвердится.

Уравнение (9.2.9) представляет собой зависящее от времени преобразование от переменной X к новой переменной ξ, включающее пока не определенную функцию φt. Функция $P(X, t)$ преобразуется в функцию $\Pi(\xi, t)$, зависящую от ξ согласно

$$P(X, t) = P(\Omega\varphi(t) + \Omega^{1/2}\xi, t) = \Pi(\xi, t). \tag{9.2.10}$$

Производные преобразуются согласно соотношениям (9.1.8):

$$\frac{\partial^\nu \Pi}{\partial \xi^\nu} = \Omega^{\frac{1}{2}\nu} \frac{\partial^\nu P}{\partial X^\nu},$$

$$\frac{\partial \Pi}{\partial t} = \frac{\partial P}{\partial t} + \Omega \frac{d\varphi}{dt} \frac{\partial P}{\partial X} = \frac{\partial P}{\partial t} + \Omega^{1/2} \frac{d\varphi}{dt} \frac{\partial \Pi}{\partial \xi}.$$

Основное кинетическое уравнение (9.2.4) выражается через новые переменные следующим образом:

$$\frac{\partial \Pi(\xi, t)}{\partial t} - \Omega^{1/2} \frac{d\varphi}{dt} \frac{\partial \Pi}{\partial \xi} =$$
$$= f(\Omega) \int \Phi_0 (\varphi(t) + \Omega^{-1/2}(\xi - \Omega^{-1/2} r);\ r) \Pi(\xi - \Omega^{-1/2} r,\ t)\, dr +$$
$$+ \Omega^{-1} f(\Omega) \int \Phi_1 (\varphi(t) + \Omega^{-1/2}(\xi - \Omega^{-1/2} r);\ r) \Pi(\xi - \Omega^{-1/2} r, t)\, dr + \ldots -$$
$$- f(\Omega) \int \Phi_0 (\varphi(t) + \Omega^{-1/2}\xi;\ -r)\, dr \cdot \Pi(\xi,\ t) -$$
$$- \Omega^{-1} f(\Omega) \int \Phi_1 (\varphi(t) + \Omega^{-1/2}\xi;\ -r)\, dr \cdot \Pi(\xi,\ t) - \ldots \quad (9.2.11)$$

Теперь мы готовы повторить разложение, проделанное в § 8.2, но сейчас мы знаем порядок величины всех членов, измеренный в порядке параметра $\Omega^{-1/2}$. В первых двух членах правой части ξ сдвинута на $-\Omega^{-1/2}$. Используя разложение Тейлора, чтобы учесть эту сдвижку, замечаем, что низшие члены сокращаются с двумя последними строчками и результат принимает вид

$$\frac{\partial \Pi(\xi, t)}{\partial t} - \Omega^{1/2} \frac{d\varphi}{dt} \frac{\partial \Pi}{\partial \xi} =$$
$$= -\Omega^{-1/2} f(\Omega) \frac{\partial}{\partial \xi} \int r \Phi_0 (\varphi(t) + \Omega^{-1/2}\xi,\ r)\, dr \cdot \Pi(\xi,\ t) +$$
$$+ \frac{1}{2} \Omega^{-1} f(\Omega) \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} \int r^2 \varphi_0 (\varphi(t) + \Omega^{-1/2}\xi,\ r)\, dr \cdot \Pi(\xi,\ t) -$$
$$- \frac{1}{3!} \Omega^{-3/2} f(\Omega) \frac{\partial^3}{\partial \xi^3} \int r^3 \Phi_0 (\varphi(t) + \Omega^{-1/2}\xi,\ r)\, dr \cdot \Pi(\xi,\ t) -$$
$$- \Omega^{-3/2} f(\Omega) \frac{\partial}{\partial \xi} \int r \Phi_1 (\varphi(t) + \Omega^{-1/2}\xi,\ r \cdot \Pi(\xi,\ t) + O(\Omega^{-2}). \quad (9.2.12)$$

Чтобы упростить это выражение, по аналогии с (5.8.2) определим

$$\alpha_{\nu,\lambda}(X) = \int r^\nu \varphi_\lambda (x;\ r)\, dr \quad (9.2.13)$$

и изменим масштаб времени, положив

$$\Omega^{-1} f(\Omega)\, t = \tau. \quad (9.2.14)$$

Тогда уравнение принимает вид

$$\frac{\partial \Pi(\xi,\tau)}{\partial \tau} - \Omega^{1/2}\frac{d\varphi}{d\tau}\frac{\partial \Pi}{\partial \xi} = -\Omega^{1/2}\frac{\partial}{\partial \xi}\alpha_{1,0}(\varphi(\tau)+\Omega^{-1/2}\xi)\Pi + \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial \xi^2}\alpha_{2,0}(\varphi(\tau)+\Omega^{-1/2}\xi)\Pi - \frac{1}{3!}\Omega^{-1/2}\frac{\partial^3}{\partial \xi^3}\alpha_{3,0}(\varphi(\tau)+\Omega^{-1/2}\xi)\Pi - \Omega^{-1/2}\frac{\partial}{\partial \xi}\alpha_{1,1}(\varphi(\tau)+\Omega^{-1/2}\xi)\Pi + O(\Omega^{-1}). \quad (9.2.15)$$

Разложение моментов перехода дает окончательно:

$$\frac{\partial \Pi(\xi,\tau)}{\partial \tau} - \Omega^{1/2}\frac{d\varphi}{d\tau}\frac{\partial \Pi}{\partial \xi} = -\Omega^{1/2}\alpha_{1,0}(\varphi)\frac{\partial \Pi}{\partial \xi} - \alpha'_{1,0}(\varphi)\frac{\partial}{\partial \xi}\xi\Pi - \frac{1}{2}\Omega^{-1/2}\alpha''_{1,0}(\varphi)\frac{\partial}{\partial \xi}\xi^2\Pi + \frac{1}{2}\alpha_{2,0}(\varphi)\frac{\partial^2 \Pi}{\partial \xi^2} + \frac{1}{2}\Omega^{-1/2}\alpha'_{2,0}(\varphi)\frac{\partial^2}{\partial \xi^2}\xi\Pi - \frac{1}{3!}\Omega^{-1/2}\alpha_{3,0}(\varphi)\frac{\partial^3 \Pi}{\partial \xi_3} - \Omega^{-1/2}\alpha_{1,1}(\varphi)\frac{\partial \Pi}{\partial \xi} + O(\Omega^{-1}), \quad (9.2.16)$$

где φ обозначено $\varphi(\tau)$, а штрихи означают производные. Это систематическое разложение основного кинетического уравнения, которое будет служить нам отправной точкой в следующих параграфах.

Упражнение. *Соотношение между старым моментом перехода* a_ν *и новым* α_ν, λ *имеет вид*

$$a_\nu(X) = f(\Omega)\left[\alpha_{\nu,0}\left(\frac{X}{\Omega}\right) + \frac{1}{\Omega}\alpha_{\nu,1}\left(\frac{X}{\Omega}\right) + \ldots\right]. \quad (9.2.17)$$

Упражнение. Альтернативный способ вывода (9.2.16) состоит в том, что можно стартовать с разложения Крамерса — Мойала (8.2.6) и выполнить преобразование (9.2.9), (9.2.10). Покажите, что в результате получится то же самое.

Упражнение. Используя (9.2.5), найдите для рэлеевской частицы коэффициенты α в уравнении (9.2.16).

Упражнение. *Зависимость (9.9.12) от* Ω *можно продемонстрировать, записав*

$$\dot{p}_n = \frac{a}{\Omega}(\mathbf{E}-1)\,n^2 p_n + b\Omega(\mathbf{E}^{-1}-1)\,p_n. \quad (9.2.18)$$

Покажите, что точное стационарное решение для больших Ω имеет вид

$$\langle\langle n^2\rangle\rangle^s = \frac{1}{2}\langle n\rangle^s = \frac{1}{2}\Omega\sqrt{b/a} \quad (9.2.19)$$

и согласуется со стационарным решением (9.2.16) для этого случая.

9.3. ПРИРОДА МАКРОСКОПИЧЕСКОГО ЗАКОНА

На первый взгляд, (9.2.16) — неподходящее разложение для больших Ω, потому что оно содержит два члена порядка $\Omega^{1/2}$. Это может означать, что наш анзац (9.2.9) ошибочен *.

* Это также означает, что мы столкнулись с проблемой сингулярного возмущения: производная по времени не входит в число наибольших членов. Это объясняет, почему прямое вычисление по теории возмущений неприменимо в данном случае и должно быть заменено более изощренными приемами, описанными в этом параграфе.

Однако при последующем размышлении можно заметить, что оба эти члена включают П только посредством множителя $\partial\Pi/\partial\xi$, поэтому можно устроить так, что они сократятся, если выбрать такое φ, что

$$\frac{d\varphi}{d\tau} = \alpha_{1,0}(\varphi). \tag{9.3.1}$$

Поскольку нашей целью является решить основное кинетическое уравнение с начальным условием, в котором X_0 порядка Ω, начальное значение φ следует выбрать в виде

$$\varphi(0) = X_0/\Omega = x_0. \tag{9.3.2}$$

Функцию φ, заданную (9.3.1) и (9.3.2), следует использовать в преобразовании (9.2.9), как будет показано в следующем параграфе. Она определяет макроскопическую часть X таким образом, что флуктуации относительно нее имеют порядок $\Omega^{1/2}$.

Тогда (9.3.1) является макроскопическим уравнением.

Примечание. Уравнение (9.3.1) не полностью совпадает с (5.8.6), которое мы раньше называли макроскопическим уравнением, поскольку оно также содержит члены порядка Ω^{-1}. Возникает вопрос: какое же из этих уравнений правильно, так как члены порядка Ω^{-1} (и даже порядка $\Omega^{-1/2}$) могут переходить из макроскопической части (9.3.2) во флуктуационную часть? И если что сформулировать по-другому, положение пика $P(X, t)$ нельзя определить точнее его ширины, которая имеет порядок $\Omega^{1/2}$. Конечно же, можно договориться *определять* положение как $\langle X \rangle$ или по максимуму пика. Однако для этого нет логической необходимости и в случае нелинейных процессов это к тому же и затруднительно. И все же практика дает формуле (9.3.1) некоторое преимущество перед формулой (5.8.6). Так, например, в случае химической реакции Ω — объем, а уравнения, описывающие скорость химической реакции, применимы в случае бесконечного объема и не содержат членов порядка Ω^{-1}. В случае рэлеевской частицы можно было бы попытаться включить высшие по m/M члены в макроскопический закон затухания, но их физическая значимость сомнительна, поскольку они много меньше всегда присутствующих флуктуаций.

Стационарные решения дифференциального уравнения (9.3.1) являются корнями уравнения

$$\alpha_{1,0}(\varphi) = 0. \tag{9.3.3}$$

Их может быть любое число. *Из того факта, что основное кинетическое уравнение* (если только оно не является разложимым или расщепляющимся) *имеет единственное стационарное решение* P_2^s, *нельзя сделать выводы о том, что макроскопическое уравнение не может иметь более одного стационарного макроскопического состояния*, как это было видно в § 11.1.

Может существовать несколько типов нулей $\alpha_{1,0}$. Лучше всего изобразить их на фазовой плоскости, где по осям откладывают $\dot{\varphi} = \alpha_1(\varphi)$ и φ (рис. 25). Хотя время и не представлено на рисунке, мы знаем, что φ должно увеличиваться в точках выше оси φ и уменьшаться в точках, лежащих ниже ее, как показано стрелками. Из рис. 25, *а* понятно, что стационарное решение φ^s, у которого $\alpha_1'(\varphi^s) < 0$,

приближается всеми решениями в его окрестности и поэтому является устойчивым *. Стационарное решение типа изображенного на рис. 25, *б* является чисто неустойчивым. Кривые другого типа встречаются, когда $\alpha'_{1,0}(\varphi^s)=0$ (см., например, рис. 25, *в*).

Для настоящего обсуждения допустим, что (9.3.1) имеет только одно решение, которое является устойчивым. На самом деле мы

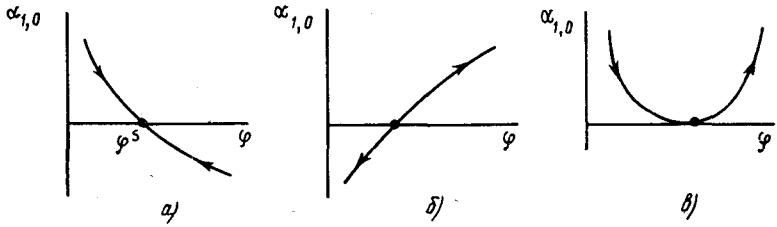

Рис. 25. Устойчивое стационарное решение макроскопического уравнения (*а*); неустойчивое стационарное решение (*б*); еще один вид неустойчивости (*в*)

делаем более сильное предположение, что имеется положительная константа h такая, что

$$\alpha'_{1,0}(\varphi)\leqslant -h<0 \quad \text{для всех } \varphi. \tag{9.3.4}$$

Тогда все решения уравнения (9.3.1) стремятся к φ^s по крайней мере так же быстро, как с $e^{-h\tau}$ (рис. 26). В гл. 10 и 11 будут рассмотрены случаи, когда условие (9.3.4) не выполнено.

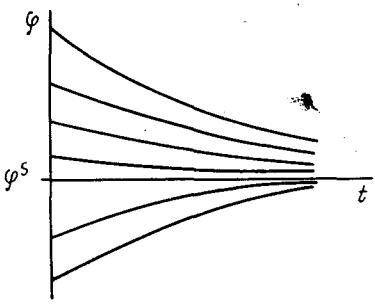

Рис. 26. Близкие решения стремятся к устойчивому (асимптотически) решению

Нам понадобится еще одна концепция из теории дифференциальных уравнений. Предположим, мы имеем решение $\varphi(\tau)$ уравнения (9.3.1), заданное некоторым начальным значением $\varphi(0)$. Рассмотрим второе решение с начальным значением $\varphi(0)+\delta\varphi(0)$, где $\delta\varphi(0)$ мало. Разность $\delta\varphi(\tau)$ между двумя решениями может быть описана в первом порядке по

$$\frac{d}{d\tau}\delta\varphi=\alpha'_1(\varphi(\tau))\,\delta\varphi. \tag{9.3.5}$$

Это линейное уравнение для $\delta\varphi$ можно легко решить, когда $\varphi(\tau)$ известно. Его называют *линеаризованным* или *уравнением для вариаций*, связанным с (9.3.1). Когда оказывается, что решение уравнения

* До тех пор, пока мы это не оговорим иначе, понятие «устойчивость» будем использовать в значении, которое технически называется «асимптотическая устойчивость» в смысле Ляпунова» (см., например: J. La Salle and S. Lefshetz, Stability by Liapunov's Direct Method (Acad. Press, New York, 1961).

(9.3.5) стремится к нулю при $\tau \to \infty$, отсюда следует, что это частное решение $\varphi(\tau)$ уравнения (9.3.1) устойчиво относительно малых возмущений или «локально устойчиво». Понятно, что (9.3.5) не содержит информации относительно глобальной устойчивости, т. е. из него нельзя сделать выводов о воздействии больших возмущений. Из локальной устойчивости можно только вывести тот факт, что $\varphi(\tau)$ имеет определенную «притягивающую область» и любое решение, начинающееся внутри этой области, должно стремиться к $\varphi(t)$ при больших τ. Однако в этой главе мы постулируем условие (9.3.4), которое гарантирует глобальную устойчивость.

Упражнение. Выведите (5.8.6) из (9.2.16).

Упражнение. Найдите оба варианта (9.3.1) и (5.8.6) макроскопического уравнения, относящегося к основному кинематическому уравнению (6.9.5). Убедитесь в том, что первое из них дает правильное уравнение для скорости реакции.

Упражнение. Оба варианта (9.3.1) и (5.8.5) макроскопического затухания для рэлеевской частицы в предыдущем параграфе совпадают, если выбрать $\Omega=(M+m)/(2m)$, и не совпадают, если $\Omega=M/m$. В последнем случае найдите разность между $\alpha_1(V)$ и $\alpha_{1,0}(V)$.

Упражнение. Покажите, что (9.3.4) гарантируют глобальную устойчивость всех решений уравнения (9.3.1). Постройте пример, когда все решения глобально устойчивы, а условие (9.3.4) не выполняется.

Упражнение. Покажите, что автокаталитическая химическая реакция *

$$A+2X=3X, \qquad X \rightleftarrows B \tag{9.3.6}$$

обладает по крайней мере одним макроскопическим устойчивым состоянием.

Упражнение. Покажите, что (6.9.7) имеет одно неустойчивое решение. Все другие решения локально устойчивы, но не глобально.

Упражнение. Определите некоторую «потенциальную функцию» $V(x)$, полагая $\alpha_1(\varphi)=-V'(\varphi)$. Условие (9.3.4) для $\varphi \neq \varphi^s$ предполагает

$$V(\varphi) > V(\varphi^s) \quad \text{и} \quad \partial_t V(\varphi) < 0.$$

Покажите, что $V(\varphi)$ является функцией Ляпунова **, которую можно использовать для доказательства глобальной устойчивости.

Упражнение. Функция V удовлетворяет даже более сильному условию *** $V''(\varphi) > 0$. Эти свойства V совместно означают выполнение (9.3.4).

Упражнение. Для одношагового процесса макроскопического уравнения в обозначениях (9.2.6) имеет вид

$$\dot{\varphi}=\gamma_0(\varphi)-\rho_0(\varphi). \tag{9.3.7}$$

9.4. ПРИБЛИЖЕНИЕ ЛИНЕЙНОГО ШУМА

Позаботившись о членах порядка $\Omega^{1/2}$ в уравнении (9.2.16), мы получим уравнение для $\Pi(\xi, \tau)$, являющееся корректным разложением по $\Omega^{-1/2}$. Члены порядка Ω^0 имеют вид

$$\frac{\partial \Pi(\xi, \tau)}{\partial \tau} = -\alpha'_{1,0}(\varphi)\frac{\partial}{\partial \xi}\xi\Pi + \frac{1}{2}\alpha_{2,0}(\varphi)\frac{\partial^2 \Pi}{\partial \xi^2}. \tag{9.4.1}$$

---

* F. Schlogl, Z. Phys. 253, 147 (1972). H. K. Janssen, Z. Phys. 270, 67 (1974); I. Matheson., D. F. Walls and C. W. Gardiner, J. Statist. Phys. 12, 21 (1975).

** La Salle and Lefshetz, Loc. cit.

*** F. Schlogl, Z. Phys. 343, 303 (1971).

Это линейное уравнение Фоккера—Планка, коэффициенты которого зависят от времени через φ. Это приближение мы назвали в § 9.1 «приближением линейного шума». Решение уравнения (9.4.1), как было показано в § 8.6 гауссово*, поэтому достаточно определить первый и второй моменты ξ. Умножая (9.4.1) на ξ и ξ^2 соответственно, получаем

$$\partial_\tau \langle \xi \rangle = \alpha^1_{1,0}(\varphi) \langle \xi \rangle, \tag{9.4.2а}$$

$$\partial_\tau \langle \xi^2 \rangle = 2\alpha'_{1,0}(\varphi) \langle \xi^2 \rangle + \alpha_{2,0}(\varphi). \tag{9.4.2б}$$

Отметим, что дисперсия удовлетворяет тому же самому уравнению, что и

$$\partial_\tau \langle\langle \xi^2 \rangle\rangle = 2\alpha'_{1,0}(\varphi) \langle\langle \xi^2 \rangle\rangle + \alpha_{2,0}(\varphi). \tag{9.4.2в}$$

Эти уравнения определяют оба момента при условии, что известны их начальные значения. Мы ставили себе целью решить основное кинетическое уравнение с начальным распределением в виде дельта-функции (9.2.8) и x_0 взяли в качестве начального значения макроскопической части (см. (9.3.2)).

Понятно, что начальные флуктуации равны нулю:

$$\langle \xi \rangle_0 = \langle \xi^2 \rangle_0 = \langle\langle \xi^2 \rangle\rangle_0 = 0. \tag{9.4.3}$$

Резюме. Итак, мы достигли поставленной цели — решить основное кинетическое уравнение с начальным условием (9.2.1). Мы получили решение в приближении линейного шума с помощью следующих трех шагов.

1. Решаем макроскопическое уравнение (9.3.1) с начальным условием (9.3.2), обозначаем решение $\varphi(\tau/x_0)$.

2. Подставляем найденное $\varphi(\tau/x_0)$ в (9.4.2) и решаем уравнения (9.4.2) с начальными условиями (9.4.3).

3. Используем полученные результаты для нахождения среднего и дисперсии первоначальной переменной X:

$$\langle X \rangle_\tau = \Omega\varphi(\tau \mid x_0) + \Omega^{1/2} \langle \xi \rangle_\tau, \tag{9.4.4а}$$

$$\langle\langle X^2 \rangle\rangle_\tau = \Omega \langle\langle \xi^2 \rangle\rangle_\tau. \tag{9.4.4б}$$

Для $P(X, t)$ берем гауссово распределение с этими средним и дисперсией.

Несколько пояснений позволяют прояснить ситуацию.

а. Из (9.4.4а), (9.3.1). (9.4.2а) получаем

$$\partial_\tau \langle x \rangle = \alpha_{1,0}(\langle x \rangle) + O(\Omega^{-1}). \tag{9.4.5}$$

Таким образом, *в приближении линейного шума среднее описывается макроскопическим законом.*

---

* Приближение линейного шума можно было бы также назвать гауссовым, однако следует понимать, что в Ω-разложении гауссов характер выводится, а не постулируется.

б. Уравнения (9.3.1) и (9.4.2) можно решить, т. е. искать их решения с помощью некоторого количества интегрирований, как это уже упоминалось ранее в связи с (5.8.15). (Однако это утверждение уже не справедливо, если имеется большее число переменных.)

в. Нет необходимости выбирать начальное значение φ, совпадающее с положением начального дельта-пика x_0. Допускается расхождение порядка $\Omega^{-1/2}$, поскольку его можно учесть в качестве начального значения ξ. Тогда уравнения (9.4.2) нужно решать с этим новым φ и новыми начальными значениями $\langle\xi\rangle$ и $\langle\xi^2\rangle$, хотя, конечно же, $\langle\langle\xi^2\rangle\rangle$ остается равной нулю.

г. Эта свобода особенно полезна при вычислении автокорреляционной функции флуктуаций в стационарном состоянии, т. е.

$$\langle\langle x(0)\,x(t)\rangle\rangle^s = \langle\{x_0 - x^s\}\,\{\langle x(t)\rangle x_0 - x^s\}\rangle^s. \tag{9.4.6}$$

Для того чтобы вычислить в этом выражении условное среднее $\langle x(t)\rangle_{x_0}$, нет необходимости реализовывать общую схему и решать (9.3.1) с начальным условием $\varphi(0) = x_0$. Вместо этого можно взять $\varphi = \varphi^s$ и решить (9.4.2а) с начальным значением

$$\Omega^{-1/2}\langle\xi\rangle_0 = x_0 - x^s.$$

Это возможно, потому что значение x_0, удовлетворяющее (9.4.6), отличается от x^s на величину порядка $\Omega^{-1/2}$. Для $t \geqslant 0$, согласно (9.4.2), в результате получаем

$$\langle\langle x(0)\,x(t)\rangle\rangle^s = \Omega^{-1}\langle\xi(0)\,\xi(t)\rangle^s = \Omega^{-1}\langle\xi(0)^2\rangle^s \exp\left[-\alpha'_{1,0}|(\varphi^s)|\,\tau\right] =$$
$$= \frac{1}{\Omega}\,\frac{\alpha_{2,0}(\varphi^s)}{2\,|\alpha'_{1,0}(\varphi^s)|}\exp\left[-|\alpha'_{1,0}(\varphi^s)|\,\tau\right]. \tag{9.4.7}$$

Мы получим общую формулу для автокорреляционной функции флуктуаций (в приближении линейного шума) для устойчивого стационарного состояния. Отсюда следует, что **можно выписать спектр флуктуаций для произвольной системы, не решая никаких специальных уравнений.** Этот факт является основой обычной теории шума.

д. Обоснование a posteriori анзаца (9.2.9) состоит в том, что получающееся в результате уравнение (9.4.1), как нетрудно заметить, не содержит Ω, так что нужные нам флуктуации имеют порядок, постулированный в (9.2.9). Однако, если флуктуации нарастают во времени, результат будет применим только в течение ограниченного времени до тех пор, пока флуктуации будут иметь тот же самый порядок величины, что и макроскопическая часть, несмотря на то что они умножаются на множитель $\Omega^{1/2}$, а не Ω. Однако наше условие (9.3.4), гарантирующее устойчивость макроскопических решений, обеспечивает также ограниченность решений (9.4.2).

е. На рис. 27 дается качественное объяснение того факта, что флуктуации не нарастают, когда макроскопические решения устойчивы. Макроскопические решения сходятся. Вследствие флуктуации

система может перескочить с одной кривой на соседнюю, но с течением времени этот эффект сведется на нет, поскольку расстояние между кривыми стремится к нулю.

В устойчивом стационарном состоянии, или в равновесии, значения флуктуаций являются результатом конкуренции между скачками и макроскопическим возвращением к равновесию. Оба эффекта представлены первым и вторым членами в правой части уравнения (9.4.26) соответственно. Это является основанием соотношения Эйнштейна (8.3.9) и флуктуационно-диссипативной теоремы.

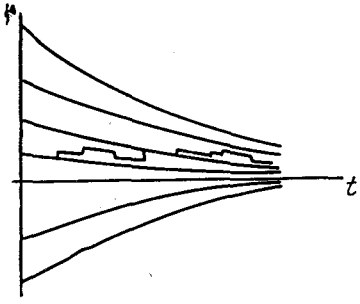

Рис. 27. Сходимость макроскопических решений предотвращает нарастание флуктуаций

Уравнение (9.4.2а) для среднего уменьшения начальной флуктуации совпадает с уравнением для вариаций (9.3.5), связанным с макроскопическим уравнением. В линейном приближении вблизи равновесия это означает, что регресс флуктуаций описывается макроскопическим законом. Это предположение использовал Онзагер в своем выводе отношений взаимности *. Тогда (9.4.2а) является обобщением предположения Онзагера на не зависящие от времени состояния нелинейных устойчивых систем.

ж. Из условия (9.3.4) следует, что имеется одно φ^s, которое глобально устойчиво, т. е. все другие решения стремятся к нему. Некоторые макроскопические законы обладают локально устойчивым φ^s, т. е. решение (9.3.3) обладает ограниченной притягивающей областью, так что решения только в этой области стремятся к φ^s (рис. 28). Внутри этой области на достаточном удалении от ее границы по-прежнему можно использовать Ω разложение для нахождения флуктуаций, в частности флуктуаций относительно φ^s.

Однако имеется малая вероятность того, что флуктуация выведет систему из притягивающей области и система никогда не возвратится к состоянию φ^s. Вероятность такого события обычно порядка $e^{-\Omega}$ и, следовательно, обычно очень мала, за исключением окрестности границы притягивающей области. Понятно, что такой член никогда нельзя найти с помощью разложения по степеням $\Omega^{-1/2}$, для этого нужны совершенно иные методы (см. гл. 11). Это очевидное ограничение послужило причиной чрезмерных опасений относительно справедливости Ω-разложений ** и даже самого основного кинетического уравнения ***.

---

* L. Onsager, Phys. Rev. 37, 405 and 38, 2265 (1931); H. B. G. Casimir, Rev. Mod. Phys. 17, 343 (1945); De Groot and Mazur.

** W. Horsthemke and L. Brening, Z. Phys. 27, 341 (1971); W. Horsthemke, M. Malek-Mansour and L. Brening, Z. Phys. B28, 135 (1977).

*** M. Malek-Mansour and G. Nicolis, J. Statist. Phys. 13, 197 (1975).

з. Корректность макроскопического закона (9.3.1) была доказана строго в следующем смысле*. Выберем временной интервал $(0, T)$ с допустимой ошибкой $\delta > 0$. Тогда вероятность того, что для всех $t \in (0, T)$ истинное значение x отличается от $\varphi(t)$ не более чем на δ, стремится к 1 при $\Omega \to \infty$. Было также доказано**, что ошибка стремится к распределению Гаусса, как это дается приближением линейного шума. Отметим, однако, что здесь *T фиксируется до того, как Ω устремляется к бесконечности*, а это означает, что ничего

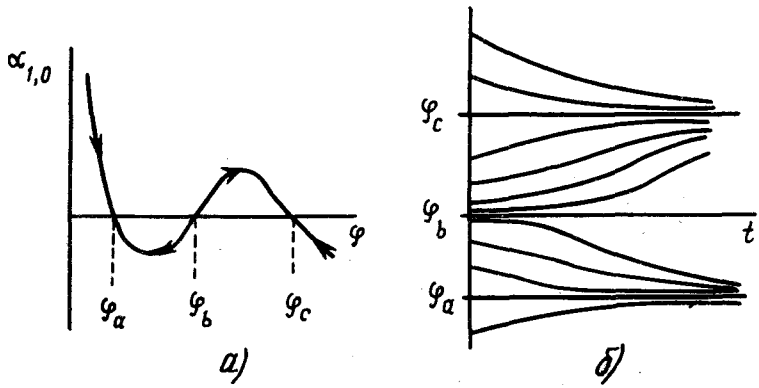

Рис. 28. Два локально устойчивых стационарных решения, разделенных неустойчивым решением (a). Все решения, за исключением самого решения φ_b, стремятся либо к φ_a, либо к φ_c

нельзя сказать о поведении на больших временах. Тогда доказательства в равной степени применимы и к неустойчивым случаям, рассматриваемым в следующих двух главах, но в этом случае они просто описывают начальный переходный период (10.1.3), а не то поведение, которым мы действительно интересуемся.

и. В нашу картину не входят ни нелинейное уравнение Фоккера—Планка в виде (8.1.1), ни нелинейное уравнение Ланжевена (8.8.15), а поэтому не возникает дилеммы Ито—Стратоновича. Нелинейное уравнение Фоккера—Планка появляется в следующей главе, когда условие устойчивости (9.3.4) уже не выполняется.

Однако даже в настоящем случае можно было бы записать нелинейное уравнение Фоккера—Планка и соответствующее уравнение Ланжевена, которые *в части, касающейся приближений линейного шума, привели бы к тем же самым результатам, что и найденные здесь* ***.

---

* T. G. Kurtz, J. Appl. Prob. 7, 49 (1970).

** T. G. Kurtz, J. Appl. Prob. 8, 344 (1977). T. G. J. Kurtz, J. Chem. Phys. 57, 2976 (1972).

*** Z. A. Akcasu, J. Statist Phys. 16, 33 (1977); N. G. van Kampen, Statist. Phys. to be published (1981).

И все же любые другие содержащиеся в них черты, выходящие за рамки этого приближения, были бы неправильными. Например, для такого уравнения Фоккера—Планка нельзя было бы сделать вывода о том, что оно обладает стационарным распределением (8.1.4).

Упражнение. Запишите приближение линейного шума для решения $P(X, t)$ с начальным значением (9.2.8) явно в терминах φ и решение (9.4.2).

Упражнение. Убедитесь в том, что в приближение *линейного шума в устойчивом стационарном состоянии всегда приводит к процессу* Орнштейна — Уленбека.

Упражнение. Примените к (9.2.18) Ω-разложение и выведите соотношения

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\langle n\rangle}{\Omega}=b-a\left(\frac{\langle n\rangle}{\Omega}\right)^2+O(\Omega'),$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\langle\langle n^2\rangle\rangle}{\Omega}=-4a\frac{\langle n\rangle}{\Omega}\frac{\langle\langle n^2\rangle\rangle}{\Omega}+a\left(\frac{\langle n\rangle}{\Omega}\right)^2+b+O(\Omega^{-1/2}),$$

$$\langle\langle n(0)\,n\langle t\rangle\rangle^s=\frac{1}{2}\langle n\rangle^s\exp\left[-2\sqrt{abt}\right].$$

Отметим, что a и b нельзя определить экспериментально, измеряя лишь $\langle n\rangle^s$ и $\langle\langle n^2\rangle\rangle^s$, для этого нужно получить еще спектр флуктуаций.

Упражнение. Решите (9.4.2) явно.

Упражнение. Покажите, что члены Φ_1, Φ_2 ... в (9.2.4) не дают вклада в приближение линейного шума. Тогда различие между (9.3.1) и (5.8.6) в этом приближении несущественно.

Упражнение. Для того чтобы решить основное кинетическое уравнение с начальным условием (9.2.8), в качестве начального значения возьмите $\varphi(0)=x_0-c\Omega^{-1/2}$. Покажите, что получающееся в результате значение $\langle x\rangle_t$ будет таким же самым, как если бы мы взяли $\varphi(0)=x_0$.

Упражнение. Распространение эпидемии в популяции из отдельных Ω-индивидуумов, n из которых инфицированы, а $\Omega-n$ нет, в простейшем случае можно описать с помощью условий $r(n)=0$ (не излеченные) и $g(n)=\beta n\times\times(1-n/\Omega)$. Найдите $\langle n\rangle$ и $\langle\langle n^2\rangle\rangle$ как функции времени.

Упражнение. Докажите, что (5.8.12) и (5.8.9) либо (5.8.15) образуют согласованное приближение. Действительно,

$$\dot{\mathbf{y}}=a_1(\mathbf{y})+\frac{1}{2}\sigma_y^2a_1''(\mathbf{y})+O(\Omega^{-1/2}), \tag{9.4.8а}$$

$$\mathrm{d}_t\sigma_y^2=2a_1'(\mathbf{y})\,\sigma_y^2+a_2(\mathbf{y})+O(\Omega^{1/2}). \tag{9.4.8б}$$

Упражнение. Убедитесь в том, что (9.5.6) — это не что иное, как приближение линейного шума для (8.5.1).

9.5. РАЗЛОЖЕНИЕ ОСНОВНОГО КИНЕТИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ В СЛУЧАЕ МНОГИХ ПЕРЕМЕННЫХ

В том случае, когда имеется не одна, а несколько флуктуирующих величин, способ, которым можно провести Ω-разложение, во многом совпадает с одномерным случаем. Основное различие состоит в том, что макроскопические уравнения в том случае более сложны и обычно их не удается решить явно в квадратурах. Вместо того чтобы дать общую формулировку, мы лучше продемонстрируем многомерное Ω-разложение на конкретном примере.

Рассмотрим следующую химическую реакцию в открытой системе, включающую два реагента X и Y:

$$\begin{aligned} A &\xrightarrow{\alpha} X, \\ 2X &\xrightarrow{\gamma} Y, \\ Y &\xrightarrow{\beta} B. \end{aligned} \tag{9.5.1}$$

Первая строка описывает производство атомов X из заданного резервуара A с постоянной скоростью $\alpha\Omega$. Вторая строка описывает объединение атомов X в молекулы Y за единичное время $\gamma n_X^2/\Omega$. Третья строка описывает потерю молекул Y с вероятностью βn_Y вследствие дальнейшей реакции или какого-нибудь другого механизма. Макроскопические уравнения имеют вид

$$\dot{\mathbf{n}}_X = \alpha\Omega - 2(\gamma/\Omega)\,\mathbf{n}_X^2, \tag{9.5.2а}$$

$$\dot{\mathbf{n}}_Y = (\gamma/\Omega)\,\mathbf{n}_X^2 - \beta\mathbf{n}_Y. \tag{9.5.2б}$$

Мы интересуемся флуктуациями относительно этих макроскопических значений и поэтому введем совместное распределение вероятностей $P(n_X, n_Y, t)$, удовлетворяющее основному кинетическому уравнению

$$\dot{P} = \alpha\Omega(\mathbf{E}_X^{-1} - 1)P + (\gamma/\Omega)(\mathbf{E}_X^2\mathbf{E}_Y^{-1} - 1)\,n_X^2 P + \beta(\mathbf{F}_Y - 1)\,n_Y P, \tag{9.5.3}$$

где $\mathbf{E}_X$ и $\mathbf{E}_Y$ — операторы шага, действующие на n_X и n_Y. Тот факт, что уравнение нелинейно, вынуждает нас применить Ω-разложение.

Преобразование (9.2.9) записывается теперь следующим образом:

$$\begin{aligned} n_X &= \Omega\varphi(t) + \Omega^{1/2}\xi, \\ n_Y &= \Omega\psi(t) + \Omega^{1/2}\eta, \\ P(n_X, n_Y, t) &= \Pi(\xi, \eta, t). \end{aligned}$$

Подстановка в основное кинетическое уравнение в требуемом порядке по теории возмущений дает

$$\begin{aligned} \frac{\partial\Pi}{\partial t} - \Omega^{1/2}\frac{d\varphi}{dt}\frac{\partial\Pi}{\partial\xi} - \Omega^{1/2}\frac{d\Psi}{dt}\frac{\partial\Pi}{\partial\eta} = \alpha\Omega\left\{-\Omega^{-1/2}\frac{\partial}{\partial\xi} + \frac{1}{2}\Omega^{-1}\frac{\partial^2}{\partial\xi^2}\right\}\Pi + \\ + \frac{\gamma}{\Omega}\left\{\Omega^{-1/2}\left(2\frac{\partial}{\partial\xi} - \frac{\partial}{\partial\eta}\right) + \frac{1}{2}\Omega^{-1}\left(2\frac{\partial}{\partial\xi} - \frac{\partial}{\partial\eta}\right)^2\right\}(\Omega\varphi + \Omega^{1/2}\xi)^2\Pi + \\ + \beta\left\{\Omega^{-1/2}\frac{\partial}{\partial\eta} + \frac{1}{2}\Omega^{-1}\frac{\partial^2}{\partial\eta^2}\right\}(\Omega\psi + \Omega^{1/2}\eta)\Pi. \end{aligned} \tag{9.5.4}$$

И снова мы можем рассмотреть последовательные степени по Ω отдельно.

Все члены порядка $\Omega^{1/2}$ оказываются пропорциональными либо $\partial\Pi/\partial\xi$, либо $\partial\Pi/\partial\eta$. Условия обращения в нуль для членов каждого

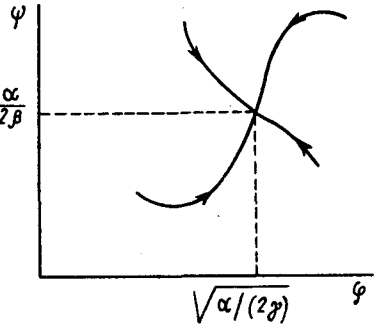

Рис. 29. Фазовые кривые системы уравнения (9.5.5)

вида запишем следующим образом:

$$-\dot{\varphi} = -\alpha + 2\gamma\varphi^2, \quad (9.5.5а)$$

$$-\dot{\psi} = -\gamma\varphi^2 + \beta\psi. \quad (9.5.5б)$$

Эти уравнения представляют собой макроскопические уравнения (9.5.2). Их можно решить явно, и, как нетрудно заметить, все решения стремятся к

$$\varphi^s = \sqrt{\alpha/(2\gamma)}, \quad \psi^s = \alpha/(2\beta). \quad (9.5.6)$$

Кривые, изображающие решения в (φ, ψ)-плоскости, изображены на рис. 29. Очевидно, что решения стремятся к стационарной точке, так что они глобально устойчивы.

Члены порядка Ω^0 в (9.5.4) дают

$$\frac{\partial \Pi}{\partial t} = 2\gamma\varphi\left(2\frac{\partial}{\partial \xi} - \frac{\partial}{\partial \eta}\right)\xi\Pi + \beta\frac{\partial}{\partial \eta}\eta\Pi + \frac{1}{2}\alpha\frac{\partial^2 \Pi}{\partial \xi^2} + \\ + \frac{1}{2}\gamma\varphi^2\left(2\frac{\partial}{\partial \xi} - \frac{\partial}{\partial \eta}\right)^2\Pi + \frac{1}{2}\beta\psi\frac{\partial^2 \Pi}{\partial \eta^2}. \quad (9.5.7)$$

Это многомерное линейное уравнение Фоккера—Планка типа решенного в § 8.6. С его помощью найдем моменты ξ и η:

$$\partial_t \langle \xi \rangle = -4\gamma\varphi \langle \xi \rangle, \quad (9.5.8а)$$

$$\partial_t \langle \eta \rangle = 2\gamma\varphi \langle \xi \rangle - \beta \langle \eta \rangle. \quad (9.5.8б)$$

Эти уравнения также совпадают с уравнениями для вариаций, связанными с макроскопическими уравнениями (9.5.5).

Имеется три момента второй степени. Они удовлетворяют трем связанным уравнениям:

$$\partial_t \langle \xi^2 \rangle = -8\gamma\varphi \langle \xi^2 \rangle + \alpha + 4\gamma\varphi^2, \quad (9.5.9а)$$

$$\partial_t \langle \eta^2 \rangle = 4\gamma\varphi \langle \xi\eta \rangle - 2\beta \langle \eta^2 \rangle + \gamma\varphi^2 + \beta\psi, \quad (9.5.9б)$$

$$\partial_t \langle \xi\eta \rangle = -4\gamma\varphi \langle \xi\eta \rangle - 2\gamma\varphi \langle \xi^2 \rangle - \beta \langle \xi\eta \rangle - 2\gamma\varphi^2. \quad (9.5.9в)$$

Эти уравнения определяют дисперсии и ковариацию флуктуаций величин n_X и n_Y относительно их макроскопических значений, задаваемых решением (9.5.5). Однако вместо того, чтобы изучить зависящее от времени состояние, в общем случае мы лучше сосредоточимся на стационарном состоянии.

Для того чтобы найти флуктуации в стационарном состоянии, нужно подставить в качестве φ и Ψ их стационарные значения (9.5.6). Для простоты, воспользовавшись свободой в выборе единиц времени, положим $\sqrt{2\alpha\gamma} = 1$. Тогда уравнения (9.5.8) для первых моментов

принимают вид

$$\partial_t \langle \xi \rangle = -2 \langle \xi \rangle, \tag{9.5.10а}$$

$$\partial_t \langle \eta \rangle = \langle \xi \rangle - \beta \langle \eta \rangle. \tag{9.5.10б}$$

Уравнения для вторых моментов удобно записать в матричном виде

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} = \begin{pmatrix} \langle \xi^2 \rangle \\ \langle \eta^2 \rangle \\ \langle \xi\eta \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -4 & 0 & 0 \\ 0 & -2\beta & 2 \\ 1 & 0 & -2-\beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle \xi^2 \rangle \\ \langle \eta^2 \rangle \\ \langle \xi\eta \rangle \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 3\alpha \\ \alpha \\ -\alpha \end{pmatrix}. \tag{9.5.11}$$

Первый вывод, который можно сделать из этих уравнений, состоит в следующем:

$$\langle \xi^2 \rangle^s = \frac{3}{4}\alpha, \quad \langle \eta^2 \rangle^s = \frac{3+2\beta}{4\beta(2+\beta)}\alpha, \qquad \langle \xi\eta \rangle^s = \frac{-\alpha}{4(2+\beta)}. \tag{9.5.12}$$

Если переписать эти соотношения в исходных величинах, получим:

$$\langle\langle n_X^2 \rangle\rangle^s = \frac{3}{4}\langle n_X \rangle^s, \tag{9.5.13а}$$

$$\langle\langle n_Y^2 \rangle\rangle^s = \frac{3+2\beta}{4+2\beta}\langle n_Y \rangle^s, \tag{9.5.13б}$$

$$\langle\langle n_X n_Y \rangle\rangle^s = -\frac{1}{4(2+\beta)}\langle n_X \rangle^s. \tag{9.5.13в}$$

Первая строка показывает, что флуктуации X те же самые, что в реакции (9.1.1) (ср. с (21.13)). Это можно было предвидеть, потому что в отношении X настоящая схема реакции та же самая.

Третья строка указывает на существование отрицательной корреляции между X и Y, это является очевидным следствием того факта, что каждый раз, когда объединяются два атома X, величина n_X убывает, а n_Y — нарастает, и, наконец, (9.5.13б) показывает, что дисперсия n_Y имеет промежуточное значение, лежащее между значением, принадлежащим распределению Пуассона, и значением, принадлежащим n_X.

В качестве второго следствия уравнения для моментов получим автокорреляционную матрицу. Используя (9.5.10а) и (9.5.12), находим сначала

$$\langle \xi(0)\,\xi(t) \rangle^s = \langle \xi^2 \rangle^s \mathrm{e}^{-2t} = \frac{3}{4}\alpha \mathrm{e}^{-2t},$$

$$\langle \eta(0)\,\xi(t) \rangle^s = \langle \eta\xi \rangle^s \mathrm{e}^{-2t} = -\frac{\alpha}{4(2+\beta)}\mathrm{e}^{-2t}.$$

Затем запишем решение (9.5.10б):

$$\langle \eta \rangle_t = \langle \eta \rangle_0 \mathrm{e}^{-\beta t} + \langle \xi \rangle_0 \frac{\mathrm{e}^{-2t} - \mathrm{e}^{-\beta t}}{\beta - 2},$$

что приводит к

$$\langle \eta(0)\,\eta(t)\rangle^s = \frac{(3+2\beta)\,\alpha}{4\beta\,(2+\beta)}\,e^{-\beta t} - \frac{\alpha}{4\,(2+\beta)}\,\frac{e^{-2t}-e^{-\beta t}}{\beta-2},$$

$$\langle \xi(0)\,\eta(t)\rangle^s = \frac{-\alpha}{4\,(2+\beta)}\,e^{-\beta t} + \frac{3}{4}\,\alpha\,\frac{e^{-2t}-e^{-\beta t}}{\beta-2}.$$

Эти корреляции содержат два времени релаксации. Первое из них равно 1/2 и связано со скоростью исчезновения молекул X. Второе равно $1/\beta$ и связано со скоростью исчезновения молекул Y.

Упражнение. Постройте фазовые кривые (рис. 29) и изобразите в (φ, ψ)-плоскости кривые, на которых $\dot{\varphi}=0$ и $\dot{\psi}=0$, обозначив на них направления решений в четырех частях плоскостей.

Упражнение. Найдите аналитическое выражение для фазовых кривых уравнений (9.5.5).

Упражнение. Для решения уравнений (9.5.11) требуется диагонализация 3×3-матрицы (что в этом примере оказалось тривиальным), однако собственные значения всегда можно найти из уравнений (9.5.10). Как?

Упражнение. Исследуйте частный случай $\beta=2$. В частности, найдите спектральную плотность флуктуаций величины n_Y.

Упражнение. Проделайте такие же вычисления для химической реакции

$$A \longrightarrow X, \quad X \longrightarrow Y, \quad X+Y \longrightarrow B.$$

Упражнение. Сделайте это для реакции *

$$A \longrightarrow X, \quad X+Y \longrightarrow 2Y, \quad Y \longrightarrow B.$$

Упражнение. Популяция поражена эпидемией. Имеется m здоровых индивидуумов и n больных. Уравнения, описывающие скорости, имеют вид $\dot{m}=\beta\Omega-\gamma mn/\Omega$, $\dot{n}=\gamma mn/\Omega-\alpha n$. Интерпретируйте эти уравнения. Постройте основное кинетическое уравнение. Найдите дисперсии и ковариации в стационарном состоянии **.

Упражнение. Те же самые вопросы для популяции из m самцов и самок, описываемых макроскопическими уравнениями

$$\dot{m}=\beta n-\alpha m-\gamma m\,(m+n)/\Omega,$$
$$\dot{n}=\beta n-\alpha n-\gamma n\,(m+n)/\Omega.$$

Упражнение. Для двойной автокаталитической реакции с двумя переменными

$$A+X \longrightarrow X+Y, \quad X+Y \longrightarrow Y$$

уравнения, зависящие от времени, можно решить явно.

9.6. ВЫСШИЕ ПОРЯДКИ

В этом параграфе мы рассмотрим высшие порядки, выходящие за рамки приближения линейного шума. Они добавляют к флуктуациям члены порядка Ω^{-1} относительно макроскопических величин, т. е. порядка отдельной частицы. Они также модифицируют макроскопическое уравнение, добавляя в него члены, имеющие тот же

* R. F. Fox, Proc. Nat'l Acad. Sci. USA 76, 2114 (1979).

** Макроскопические решения проанализированы в работах: H. W. Hethcote in: Mathematical Problems in Biology (Lecture Notes in Biomathematics 2; P. van den Driessche ed., Springer, Berlin, 1974).

порядок, как и те, что мы несколько преждевременно использовали в (5.8.12) и (9.4.8).

Очевидно, что эти эффекты не важны для большинства практических задач с шумом, но в двух случаях ими пренебречь нельзя. Во-первых, они дают нам информацию о том, насколько нелинейные члены в макроскопическом уравнении влияют на равновесные флуктуации, в частности они позволяют сделать вывод о том, насколько кривизна вольт-амперных характеристик электронных устройств влияет на имеющийся в них шум. Во-вторых, они оказываются существенными, когда наблюдаются одночастичные события, например ток, связанный с рекомбинацией в фотопроводниках (см. § 8.1). Если читатель не интересуется этой темой, мы рекомендуем ему пропустить настоящий параграф, потому что имеющиеся здесь выкладки достаточно сложны.

Рассмотрим уравнение (9.2.16) для эволюции $\Pi(\xi, \tau)$. О членах порядка $\Omega^{1/2}$ мы позаботились в § 9.3, потребовав, чтобы φ удовлетворяло уравнению (9.3.1). Члены порядка Ω^0 были учтены в (9.4.1), а сейчас мы добавим высшие порядки, записав явно члены порядка Ω^{-1}:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \Pi}{\partial \tau} = -\frac{\partial}{\partial \xi}\Big[\alpha'_{1,0}\xi + \frac{1}{2}\Omega^{-1/2}\alpha''_{1,0}\xi^2 + \frac{1}{3!}\Omega^{-1}\alpha'''_{1,0}\xi^3 + \ldots + \\ + \Omega^{-1/2}\alpha_{1,1} + \Omega^{-1}\alpha'_{1,1}\xi + \ldots\Big]\Pi + \\ + \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial \xi^2}\left[\alpha_{2,0} + \Omega^{-1/2}\alpha'_{2,0}\xi + \frac{1}{2}\Omega^{-1}\alpha''_{2,0}\xi^2 + \ldots + \Omega^{-1}\alpha_{2,1} + \ldots\right]\Pi - \\ - \frac{1}{3!}\frac{\partial^3}{\partial \xi^3}\left[\Omega^{-1/2}\alpha_{3,0} + \Omega^{-1}\alpha'_{3,0}\xi + \ldots\right]\Pi + \\ + \frac{1}{4!}\frac{\partial^4}{\partial \xi^4}\left[\Omega^{-1}\alpha_{4,0} + \ldots\right]\Pi. \qquad (9.6.1)\end{aligned}$$

Все коэффициенты являются функциями, зависящими от $\varphi(\tau)$, а штрихами обозначены производные от функций по своим аргументам.

В то время как приближение линейного шума приводит к линейному уравнению Фоккера—Планка (9.4.1), высшие степени по $\Omega^{-1/2}$, как мы сейчас увидим, ведут к следующим трем модификациям.

1. Они добавляют более высокие степени к коэффициентам, так что утверждение о том, что первый коэффициент линеен, а второй постоянен, уже становится несправедливым.

2. В то же время они добавляют старшие производные, поэтому уже нельзя записать уравнения Фоккера—Планка, в котором сохранена полная функциональная зависимость от α_1 и α_2, но отброшены высшие производные.

3. Высшие порядки в моментах перехода, т. е. $\alpha_{1,1}$, $\alpha_{1,2}$, ..., $\alpha_{2,1}$ ..., связанные с Φ_1, Φ_2, ..., входят последовательно. В частности, $\alpha_{1,1}$ добавляет к первому коэффициенту член, не зависящий

от ξ. Этого усложнения можно было бы избежать, если бы мы не раскладывали Φ, а записали повсюду вместо $\alpha_{\nu,0}$ полный момент перехода α_ν. Но это было бы равносильно учету более высоких порядков до $\Omega^{-1/2}$, чем того требует условие совместности с другими приближениями, в частности это означало бы использование (5.8.6) вместо (9.3.1) (ср. с примечанием в § 9.3).

Примечание. Исходное основное кинетическое уравнение, которое мы сейчас аппроксимируем, обладает такими свойствами: оно сохраняет положительность и все его решения стремятся к стационарным. Уравнение Фоккера—Планка второго порядка также обладает этими свойствами, однако, добавляя высшие производные, мы их утрачиваем. Предположим, мы удержали в (9.6.1) члены до порядка Ω^{-1} включительно, т. е. опустим все члены, обозначенные точками. Получившееся в результате дифференциальное уравнение четвертого порядка уже не обладает указанными двумя существенными свойствами*. Это означает, что (9.6.1) неверно или бесполезно—просто из этого уравнения мы не должны делать выводов, включающих степени параметра $\Omega^{-1/2}$ более высокие, чем то подразумевает правильное использование уравнения (9.6.1)**.

Наиболее безопасным способом избежать этих трудностей можно написав уравнение моментов так, как это будет показано ниже.

Члены, записанные явно в (9.6.1), достаточны для вычисления $\langle\xi\rangle$ и $\langle\xi^2\rangle$ с точностью до Ω^{-1}. С этой целью из (9.6.1) выводим

$$\partial_t\langle\xi\rangle = \alpha'_{1,0}\langle\xi\rangle + \frac{1}{2}\Omega^{-1/2}\alpha''_{1,0}\langle\xi^2\rangle + \frac{1}{3!}\Omega^{-1}\alpha'''_{1,0}\langle\xi^3\rangle + \\ + \Omega^{-1/2}\alpha_{1,1} + \Omega^{-1}\alpha'_{1,1}\langle\xi\rangle + O(\Omega^{-3/2}), \quad (9.6.2а)$$

$$\partial_t\langle\xi^2\rangle = 2\alpha'_{1,0}\langle\xi^2\rangle + \Omega^{-1/2}\alpha''_{1,0}\langle\xi^3\rangle + \frac{1}{3}\Omega^{-1}\alpha'''_{1,0}\langle\xi^4\rangle + \\ + 2\Omega^{-1/2}\alpha_{1,1}\langle\xi\rangle + 2\Omega^{-1}\alpha'_{1,1}\langle\xi^2\rangle + \alpha_{2,0} + \Omega^{-1/2}\alpha'_{2,0}\langle\xi\rangle + \\ + \frac{1}{2}\Omega^{-1}\alpha''_{2,0}\langle\xi^2\rangle + \Omega^{-1}\alpha_{2,1} + O(\Omega^{-3/2}). \quad (9.6.2б)$$

Поскольку в правой части появляются третий и четвертый моменты, мы должны записать для них уравнения с требуемой точностью:

$$\partial_t\langle\xi^3\rangle = 3\alpha'_{1,0}\langle\xi^3\rangle + \frac{3}{2}\Omega^{-1/2}\alpha''_{1,0}\langle\xi^4\rangle + 3\Omega^{-1/2}\alpha_{1,1}\langle\xi^2\rangle + \\ + 3\alpha_{2,0}\langle\xi\rangle + \Omega^{-1/2}\alpha_{2,0}\langle\xi^2\rangle + \Omega^{-1/2}\alpha_{3,0} + O(\Omega^{-1}), \quad (9.6.2в)$$

$$\partial_t\langle\xi^4\rangle = 4\alpha'_{1,0}\langle\xi^4\rangle + 6\alpha_{2,0}\langle\xi^2\rangle + O(\Omega^{-1/2}). \quad (9.6.2г)$$

Отметим, что если опустить члены порядка $\Omega^{-3/2}$ в $\langle\xi\rangle$ и $\langle\xi^2\rangle$, то это приведет к автоматическому обрыву иерархической цепочки уравнений для моментов. Стратегия решения этих уравнений ясна. Сначала решаем (9.6.2а) и (9.6.2б) в низшем порядке, т. е. опуская

---

* Тот факт, что не существует дифференциального уравнения порядка более высокого порядка, чем уравнение Фоккера—Планка, способного описать эволюцию плотности вероятности, был строго доказан в работе: R. F. Pawula, Phys. Rev. 162, 186 (1967).

** Численно это было показано в работе: H. Risken and H. D. Vollmer, Z. Phys. B35, 313 (1979).

все члены порядка $\Omega^{1/2}$ и выше. Получившееся значение $\langle\xi^2\rangle$ можно подставить в (9.6.2а), чтобы определить $\langle\xi^4\rangle$ с точностью до $\Omega^{-1/2}$, и в (9.6.2), чтобы определить $\langle\xi^4\rangle$ в низшем приближении.

Эти два результата позволяют решить уравнение (9.6.2в) и определить $\langle\xi^3\rangle$ с точностью до $\Omega^{-1/2}$. Полученная таким образом информация позволит определить члены в правой части (9.6.2а) и (9.6.2б) с точностью до Ω^{-1}, затем с такой же точностью можно будет найти $\langle\xi\rangle$ и $\langle\xi^2\rangle$.

Для того чтобы определить флуктуации относительно нестационарного состояния, нужно проделать гигантскую работу, однако ее объем становится разумным в случае стационарных флуктуаций, когда все коэффициенты α — константы. В качестве приложения вычислим автокорреляционную функцию флуктуаций в стационарном состоянии полупроводника, описывающегося (9.2.18). Макроскопическое уравнение имеет вид $\dot{\varphi}=b-a\varphi^2$ и обладает стационарным решением $\varphi^s=\sqrt{b/a}$.

Скачкообразные моменты имеют вид

$$\alpha_\nu(\varphi)=\alpha_{\nu,0}(\varphi)=b+(-1)^\nu a\varphi^2.$$

Уравнение (9.6.1) можно легко выписать для $\varphi=\varphi^s$. Чтобы записать его в более компактном виде, изменим масштаб переменных:

$$2t\sqrt{ab}=\theta;\quad (a/b)^{1/4}\xi=\eta;\quad (a/b)^{1/4}\Omega^{-1/2}=\varepsilon. \tag{9.6.3}$$

Тогда уравнение (9.6.1) принимает вид

$$\frac{\partial\Pi}{\partial\theta}=\frac{\partial}{\partial\eta}\left(\eta+\frac{1}{2}\varepsilon\eta^2\right)\Pi+\frac{1\partial^2}{2\partial\eta^2}\left(1+\varepsilon\eta+\frac{1}{2}\varepsilon^2\eta^2\right)\Pi+ \\ +\frac{1}{3}\varepsilon^2\frac{\partial^3}{\partial\eta^3}\eta\Pi+\frac{1}{24}\varepsilon^2\frac{\partial^4\Pi}{\partial\eta^4}. \tag{9.6.4}$$

Уравнения для моментов имеют вид

$$\partial_\theta\langle\eta\rangle=-\langle\eta\rangle-\frac{1}{2}\varepsilon\langle\eta^2\rangle+O(\varepsilon^3), \tag{9.6.5а}$$

$$\partial_\theta\langle\eta^2\rangle=-2\langle\eta^2\rangle-\varepsilon\langle\eta^3\rangle+1+\varepsilon\langle\eta\rangle+\frac{1}{2}\varepsilon^2\langle\eta\rangle+O(\varepsilon^3), \tag{9.6.5б}$$

$$\partial_\theta\langle\eta^3\rangle=-3\langle\eta^3\rangle-\frac{3}{2}\varepsilon\langle\eta^4\rangle+3\langle\eta\rangle+3\varepsilon\langle\eta^2\rangle+O(\varepsilon^2), \tag{9.6.5в}$$

$$\partial_\theta\langle\eta^4\rangle=-4\langle\eta^4\rangle+6\langle\eta^2\rangle+O(\varepsilon). \tag{9.6.5г}$$

Отсюда, полагая левую часть равной нулю, получаем

$$\langle\eta^4\rangle^s=\frac{3}{2}\langle\eta^2\rangle^s=\frac{3}{4}+O(\varepsilon), \tag{9.6.6а}$$

$$\langle\eta^3\rangle^s=-\frac{1}{8}\varepsilon+O(\varepsilon^2), \tag{9.6.6б}$$

$$\langle\eta^2\rangle^s=\frac{1}{2}-\frac{1}{16}\varepsilon^2+O(\varepsilon^3), \tag{9.6.6в}$$

$$\langle\eta\rangle^s=-\frac{1}{4}\varepsilon+O(\varepsilon^3). \tag{9.6.6г}$$

Затем для заданного начального значения η_0 такого, что

$$\langle\eta\rangle_0=\eta_0,\ \langle\eta^2\rangle_0=\eta_0^2,\ \langle\eta^3\rangle_0=\eta_0^3,\ \langle\eta^4\rangle_0=\eta_0^4,$$

описанным выше способом решаем уравнения, зависящие от времени. Получающееся значение $\langle\eta(\theta)\rangle_{\eta_0}$ с точностью до ε^2 используют совместно с (9.6.6в) для пострсения автокорреляционной функции:

$$\langle\langle\eta_0\langle\eta(\theta)\rangle_{\eta_0}\rangle\rangle^s={}^1/_2(1-{}^1/_2\varepsilon^2)\,e^{-(1-{}^1/_4\varepsilon^2)\theta}+{}^1/_8\varepsilon^2e^{-(2+\varepsilon^2)\theta}. \quad (9.6.7)$$

Коэффициенты и показатели степеней верны с точностью до порядка $\varepsilon^2\sim\Omega^{-1}$.

Выводы. 1. Из (9.6.6г) следует, что в этом порядке *средние значения уже не совпадают со своим макроскопическим значением*, даже в стационарном состоянии:

$$\langle n\rangle^s=\Omega\varphi^s+\Omega^{1/2}\langle\xi\rangle^s=\Omega\sqrt{b/a}-\frac{1}{4}.$$

Однако разница составляет всего $^1/_4$ электрона.

2. Из (9.6.7) следует, что члены порядка Ω^{-1} понижают скорость распада основного члена, а также модифицируют его коэффициент. Однако и вовсе поразительным оказывается появление другого экспоненциального члена, который распадается примерно вдвое быстрее. Таким образом, *нелинейность приводит к дополнительному дебаевскому члену в спектре флуктуаций*, который в принципе можно наблюдать. Высшие порядки приводят к последовательности таких членов.

3. *Микроскопическое* рассмотрение нелинейных флуктуаций приводит также к другому выводу, а именно что нелинейность совсем не влияет на спектр флуктуаций *. Правда, настоящее мезоскопическое рассмотрение основано на предположении, что применимо основное кинетическое уравнение относительно обоснованности микроскопического рассмотрения **.

Поэтому было бы интересно провести *experimentum crucis*.

Упражнение. Покажите, что $\partial_t P(x,t)=a\partial^4xP$ не стремится к стационарному решению при $a>0$ и не сохраняет положительности, когда $a<0$. Распространите этот вывод на дифференциальные уравнения с постоянными коэффициентами в общем виде.

Упражнение. Пусть $\dot{P}=\mathbf{W}P$ — основное кинетическое уравнение, сохраняющее положительность. Предположим, что $\mathbf{W}=\mathbf{W}_0+\varepsilon\mathbf{W}_1+\varepsilon^2\mathbf{W}_2+\ldots$, $\mathbf{W}_0$, где также сохраняет положительность, а $\mathbf{W}_0+\varepsilon\mathbf{W}_1$ не сохраняет. Покажите, что это можно было бы исправить, включив в иных отношениях неправильные старшие порядки следующим образом ***. Положите $\mathbf{W}=\mathbf{V}^2$ и $\mathbf{V}=\mathbf{V}_0+\varepsilon\mathbf{U}_1$, так что $(\mathbf{V}_0+\varepsilon\mathbf{U}_1)^2$ совпадает с $\mathbf{W}_0+\varepsilon\mathbf{W}_1$ в отношении членов порядка ε.

Упражнение. На первый взгляд третья и четвертая производные в (9.6.1) не подходят для вычисления первого и второго моментов ξ. Тем не менее,

---

* W. Bernard and H. B. Callen, Rev. Mod. Phys. 31, 1017 (1959); Phys. Rev. 118, 1466 (1960).

** N. G. van Kampen, Physica Norvegica 5, 279 (1971).

*** A. Siegel, J. Mathem. Phys. 1, 378 (1960).

почему ими нельзя пренебречь при вычислении автокорреляционной функции такой, как (9.6.7)?

Упражнение. Для (9.1.4) вычислите

$$\langle n\rangle^s = \Omega + \frac{1}{8} + \frac{3}{128}\Omega^{-1} + O(\Omega^{-2}),$$

$$\langle\langle n^2\rangle\rangle^s = \frac{3}{4}\Omega + \frac{5}{64} + O(\Omega^{-1}).$$

Упражнение. Выведите (9.4.8) с помощью непосредственного разложения до требуемого порядка по $\Omega^{-1/2}$, не прибегая к приемам, использованным в § 5.8.

ГЛАВА 10
ПРОЦЕССЫ ДИФФУЗИОННОГО ТИПА

Нами было показано, что в низшем порядке Ω-разложение приводит к микроскопическому уравнению, а в следующем порядке — к приближению линейного шума при условии, что выполняется условие устойчивости (9.3.4). Мы уже столкнулись с одним случаем, в котором это условие нарушается, когда $\alpha_{1,0}(\varphi) \equiv 0$. В этом случае Ω-разложение принимает совершенно иной вид и в низшем приближении дает нелинейное уравнение Фоккера—Планка.

10.1. ОСНОВНОЕ КИНЕТИЧЕСКОЕ УРАВНЕНИЕ ДИФФУЗИОННОГО ТИПА

Важный подкласс основных кинетических уравнений, нарушающих условие устойчивости (9.3.4), составляют такие уравнения, для которых

$$\alpha_{1,1}(\varphi) \equiv 0. \tag{10.1.1}$$

Согласно микроскопическому уравнению (9.4.1), это означает, что $\varphi(\tau) = \mathrm{const} \equiv \varphi(0)$. Небольшие отклонения $\delta\varphi(0)$ от начального значения приводят к таким $\delta\varphi(\tau)$, которые остаются постоянными, вместо того чтобы стремиться к нулю. Таким образом, макроскопические уравнения неустойчивы * и можно ожидать нарастания флуктуаций. Действительно, согласно (9.4.2), их дисперсия линейно возрастает, как в броуновском движении:

$$\langle\xi^2\rangle = \alpha_{2,0}(\varphi)\,\tau. \tag{10.1.2}$$

Если начальное распределение представляет собой дельта-пик, флуктуации приобретают тот же порядок величины, что и макроскопическая часть по прошествии времени порядка

$$\tau \sim \Omega/\alpha_{2,0}(\varphi). \tag{10.1.3}$$

* По классификации Ляпунова такие решения называют «устойчивыми, но не асимптотически устойчивыми». В теории флуктуаций более естественно классифицировать такие случаи как устойчивые в соответствии со сноской в § 9.3.

После этого переходного периода Ω-разложение, которое мы применяли до сих пор, нарушается и выполнить разделение (9.2.9) на макроскопическую часть и малые флуктуации становится невозможным.

С другой стороны, *по истечении* переходного периода (10.1.3) можно расчитывать на то, что удастся применить приближенный метод, основанный на том соображении, что P является медленно меняющейся функцией X с шириной порядка Ω. Тогда в качестве новой переменной выбирают интенсивную величину $x = X/\Omega$ и основное кинетическое уравнение (9.2.4) записывают в терминах этой переменной:

$$\frac{\partial P(x,\ t)}{\partial t} = f(\Omega) \int \left\{ \Phi_0\left(x - \frac{r}{\Omega};\ r\right) + \frac{1}{\Omega}\Phi_1\left(x - \frac{r}{\Omega};\ r\right) + \right.$$
$$\left. + \ldots \right\} P\left(x - \frac{r}{\Omega},\ t\right) \mathrm{d}r -$$
$$- f(\Omega) \int \left\{ \Phi_0(x;\ -r) + \frac{1}{\Omega}\Phi_1(x;\ -r) + \ldots \right\} \mathrm{d}r \cdot P(x,\ t).$$

Раскладывая по Ω^{-1} и учитывая (9.2.13) и (10.1.1), получаем

$$\frac{\partial P(x,\ t)}{\partial t} = \Omega^{-2} f(\Omega) \left[-\frac{\partial}{\partial x}\alpha_{1,1}(x) P + \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x}\alpha_{2,0}(x) P \right] +$$
$$+ \Omega^{-3} f(\Omega) \left[\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\alpha_{2,1}(x) P - \frac{1}{3!}\frac{\partial^3}{\partial x^3}\alpha_{3,0}(x) P - \frac{\partial}{\partial x}\alpha_{2,1}(x) P \right] +$$
$$+ f(\Omega)\, O(\Omega^{-4}). \qquad (10.1.4)$$

Сравнение с (9.2.16) показывает, что существует коренное различие. Основной член (9.2.16) отсутствует, и поэтому из (10.1.4) нельзя выделить уравнения для макроскопической части X. Другими словами, система уже не подвергается влиянию или смещению, вынуждающему ее эволюционировать в данном, а не в каком-либо другом направлении. Оставшаяся эволюция P является просто результатом воздействия одних флуктуаций. Соответственно временной масштаб изменений умножается на Ω^{-1} и эволюция происходит медленнее, чем в предыдущем случае (см. (9.2.14)). Поскольку P не является флуктуацией, обладающей острым пиком, коэффициенты $\alpha(x)$ нельзя разложить вблизи какого-либо центрального значения φ и в уравнении они остаются нелинейными флуктуациями. Первая строка (10.1.4) содержит основные члены, ее называют диффузным приближением:

$$\frac{\partial P(x,\ \tau)}{\partial \tau} = -\frac{\partial}{\partial x}\alpha_{1,1}(x) P + \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\alpha_{2,0}(x) P, \qquad (10.1.5)$$

где в отличие от (9.2.14) новая временная переменная

$$\tau = \Omega^{-2} f(\Omega)\, t. \qquad (10.1.6)$$

Диффузионное приближение (10.1.5) представляет собой нелинейное уравнение Фоккера—Планка (8.2.5). Действительно, теперь мы обо-

сновали выводы, приведенные в § 8.2, показав, что оно действительно является первым членом систематического разложения по Ω^{-1} *для основных кинетических уравнений, обладающих свойством* (10.1.1). И оно справедливо только тогда, когда оба коэффициента

$$\langle \Delta x \rangle_x / \Delta t \quad \text{и} \quad \langle (\Delta x)^2 \rangle_x / \Delta t$$

имеют один и тот же порядок величины по Ω. При обычном выводе уравнения Фоккера—Планка это условие принимается как предел малых скачков и подразумевается либо молчаливо *, либо явно **. Оно также подразумевается в условиях, на которых основано доказательство Колмогорова.

Резюме. Специальный класс основных кинетических уравнений, характеризуемых условием (10.1.1), будем называть *основными кинетическими уравнениями диффузного типа.* Для таких основных кинетических уравнений Ω-разложение приводит к нелинейному уравнению Фоккера—Планка (10.1.5), а не к макроскопическому закону с линейным шумом, как это было в предыдущей главе для основных кинетических уравнений вида (9.3.4). Определение обоих типов заранее предполагает, что вероятности перехода имеют канонический вид (10.2.3) и не отличаются для дискретной и непрерывной областей возможных значений стохастической переменной; Ω-разложение однозначно приводит к хорошо определенному уравнению (10.1.5) и поэтому избавляет от трудностей интерпретации уравнения Ито, упомянутых в § 8.8 и 8.9.

Традиционный вывод уравнения Фоккера—Планка (10.1.5) или (8.1.1) основывается на математическом доказательстве Колмогорова, в котором предполагается, что имеется бесконечно много бесконечно малых скачков. Однако в природе все скачки имеют некоторый конечный размер **. Следовательно, **W** не бывает дифференциальным оператором, а всегда имеет вид типа (5.1.1). Обычно **W** содержит подходящий параметр разложения и имеет канонический вид (9.2.3). Если оказывается, что выполняется равенство (10.1.1), то разложение в нижнем приближении приводит к нелинейному уравнению Фоккера—Планка (10.1.5). Уравнениям Фоккера—Планка и Ланжевена нельзя приписать более фундаментального смысла, чем тот, который приписывается ему настоящим приближением.

Пример. Рассмотрим симметричное случайное блуждание с непрерывным временем:

$$\dot{p}_n = p_{n+1} + p_{n-1} - 2p_n.$$

Мы хотим учесть возможность уменьшения длины шага и поэтому вводим «макроскопическую» переменную $x = n/\Omega$ с измененным масштабом. Плот-

---

* Как в § 8.2 или в цитированной выше работе М. Планка.

** См. [1, с. 323].

*** N. G. van Kampen in: Thermodynamics and Kinetics of Biological Processes (A. I. Zotin ed., de Gruyter, Berlin, 1981).

ность вероятности $P(x, t)$ удовлетворяет уравнению

$$\dot{P}(x, t) = P\left(x + \frac{1}{\Omega}, t\right) + P\left(x - \frac{1}{\Omega}, t\right) - 2P(x, t). \qquad (10.1.7)$$

Соответственно

$$W(x, r) = \delta\left(r - \frac{1}{\Omega}\right) + \delta\left(r + \frac{1}{\Omega}\right)$$

имеет канонический вид (9.2.2). Далее

$$\alpha_1(x) = 0, \quad \alpha_2(x) = \frac{2}{\Omega^2}.$$

Тогда основное кинетическое уравнение относится к диффузионному типу, а низший порядок по $1/\Omega$ дается (10.1.5) с $\tau = \Omega^{-2}t$:

$$\frac{\partial P(x, \tau)}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 P}{\partial x^2}. \qquad (10.1.8)$$

Неудивительно, что получилось уравнение диффузии, ведь физически диффузия — это не что иное, как случайное блуждание с малыми шагами, хотя и не обязательно одинаковой длины, как в этой простой модели.

Упражнение. Для одношагового процесса вероятность скачка которого имеет вид (9.2.6), условие (10.1.1) дает

$$\rho_0 \equiv \gamma_0. \qquad (10.1.9)$$

Упражнение. Проверьте, что первая строка уравнения (10.1.4) действительно совпадает с (8.2.5), убедившись в том, что имеют место соотношения

$$\frac{\langle \Delta x \rangle_x}{\Delta t} = \Omega^{-2} f(\Omega)\, \alpha_{1,1}(x), \quad \frac{\langle (\Delta x)^2 \rangle_x}{\Delta t} = \Omega^{-2} f(\Omega)\, \alpha_{2,0}(x).$$

Упражнение. Покажите, что (10.1.8) согласуется с (1.4.8).

Упражнение. Асимметричное случайное блуждание (8.2.8) не удовлетворяет ни (9.3.4), ни (10.1.1), но может быть сведено к виду (10.1.1). Покажите, что результат совпадает с тем, что рассмотрено в § 8.2.

Упражнение. Такой же способ сведения можно использовать всегда, когда $\alpha_{1,0} = \text{const}$.

10.2. ДИФФУЗИЯ ВО ВНЕШНЕМ ПОЛЕ

Предположим, что частица движется в одном направлении в периодическом потенциальном поле $V(X)$, минимумы которого разделены острыми максимумами (рис. 30). Минимумы являются участками, на

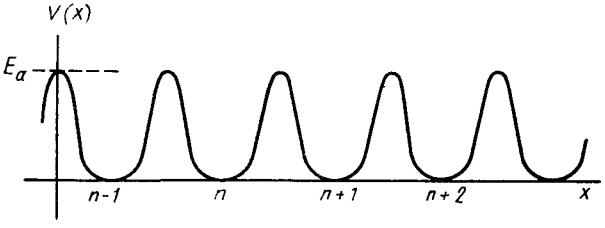

Рис. 30. Периодический потенциал $V(x)$ с острыми максимумами

которых частица остается достаточно долго, совершая случайные скачки на соседние участки. Вероятность скачка за единичное время

для этого одношагового процесса есть $r_n = g_n = A$, где A включает в себя множитель Аррениуса $\exp(-\beta E_a)$ (см. § 7.5). Это и есть пример из предыдущего параграфа *.

Предположим, что теперь вводится дополнительный внешний потенциал $U(x)$, изменяющийся на макроскопическом масштабе и поэтому являющийся функцией x. Число участников, приходящихся на макроскопическую единичную длину, является нашим параметром Ω. Наличие $U(x)$ изменяет высоту потенциальных барьеров (измеренную от дна впадины). Новые вероятности скачков определяются выражениями

$$g_n = A \exp\left[-\beta\left\{U\left(\frac{n+1/2}{\Omega}\right) - U\left(\frac{n}{\Omega}\right)\right\}\right], \qquad (10.2.1а)$$

$$r_n = A \exp\left[-\beta\left\{U\left(\frac{n-1/2}{\Omega}\right) - U\left(\frac{n}{\Omega}\right)\right\}\right]. \qquad (10.2.1б)$$

Матрица вероятностей перехода

$$W_{nn'} = A\delta_{n,\,n'+1}\left\{1 - \frac{\beta}{2\Omega}U'\left(\frac{n}{\Omega}\right) + \ldots\right\} + \\ + A\delta_{n,\,n'+1}\left\{1 + \frac{\beta}{2\Omega}U'\left(\frac{n}{\Omega}\right) + \ldots\right\}. \qquad (10.2.2)$$

Она имеет канонический вид (9.2.3) с

$$\Phi_0(x;\ r) = A(\delta_{r,\,1} + \delta_{r,\,-1})$$

$$\Phi_1(x;\ r) = \frac{1}{2}\beta A U'(x)(-\delta_{r,\,1} + \delta_{r,\,-1}).$$

Отсюда получаем

$$\alpha_{1,0} = 0, \quad \alpha_{2,0} = 2A, \quad \alpha_{1,1} = -\beta A U'(x). \qquad (10.2.3)$$

В этом случае уравнение относится к диффузному типу и в низшем приближении имеет вид (10.1.5):

$$\frac{\partial P(x,\ t)}{\partial \tau} = \frac{\partial}{\partial x}U'(x)P + \theta\frac{\partial^2 P}{\partial x^2}, \qquad (10.2.4)$$

где $\tau = \beta A t/\Omega^2$ и $\theta = kT$. Это уравнение диффузии во внешнем поле **.

В качестве модификации этой модели рассмотрим потенциал $V(X)$ с острым минимумом, разделенным плоскими максимумами (рис. 31). Предположим теперь, что добавляется внешний потенциал $U(x)$, являющийся возрастающей функцией x. Легко видеть, что это оставляет r_n практически равным A, но изменяет g_n на

$$g_n = A \exp\left[-\beta\left\{U\left(\frac{n+1}{\Omega}\right) - U\left(\frac{n}{\Omega}\right)\right\}\right] = A\{1 - \Omega^{-1}\beta U'(x)\}. \qquad (10.2.5)$$

---

* Относительно связи с экспериментом см. работу: P. A. Egelstaff, Advances in Physics 11, 203 (1962).

** Оно применялось к диффузионно контролируемым реакциям и закалке в работе: E. W. Montroll, J. Chem. Phys. 14, 202 (1946).

Следовательно, (10.2.3) остается справедливым, значит, справедливо и окончательное уравнение (10.2.4). Таким образом, результат оказывается нечувствительным к точному виду V при условии, что потенциал обладает ямами, в которых частица остается достаточно

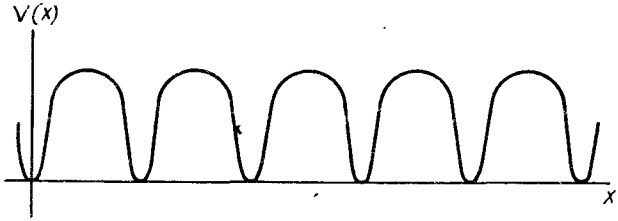

Рис. 31. Периодический потенциал $V(x)$ с плоскими максимумами

долго, и из-за случайных взаимодействий корреляция между последовательными скачками успевает исчезнуть.

Упражнение. Уравнение (10.2.4) для вероятности одной частицы можно интерпретировать как уравнение диффузии для независимых частиц. Покажите, что равновесное распределение и постоянная диффузии согласуются с выражениями, которые можно было бы вывести непосредственно из модели без промежуточных вычислений.

Упражнение. Стационарное решение уравнения (10.2.4) имеет вид

$$P^s(x) = \text{const} \cdot \exp\left[-U(x)/\theta\right]. \tag{10.2.6}$$

С помощью этого решения уравнение (10.2.4) можно записать в виде

$$\frac{\partial P(x,\ t)}{\partial t} = \theta \frac{\partial}{\partial x} P^s(x) \frac{\partial}{\partial x} \frac{P(x,\ t)}{P^s(x)}. \tag{10.2.7}$$

Упражнение. Определите гильбертово пространство со скалярным произведением

$$(P_1 P_2) = \int P_1 P_2 \, dx / P^s,$$

как в таком же (5.7.4). Покажите, что в этом пространстве (10.2.4) является самосопряженным, и выведите, что все решения стремятся к P^s.

Упражнение. Обе модели (10.2.1) и (10.2.5) удовлетворяют соотношению детального равновесия. Какой наиболее общий вид r_n и g_n допускается соотношением детального равновесия?

Упражнение. Маятник, описывающийся уравнением $M\ddot{x} = -\sin x$, находится в воздухе, который вызывает затухание и флуктуации. Покажите, что эта система описывается двумерным нелинейным уравнением Фоккера—Планка

$$\frac{\partial P(x,\ v,\ t)}{\partial t} = -v \frac{\partial P}{\partial x} + \frac{\sin x}{M} \frac{\partial P}{\partial v} + \gamma \left(\frac{\partial}{\partial v} vP + \frac{kT}{M} \frac{\partial^2 P}{\partial v^2} \right). \tag{10.2.8}$$

Какая величина может послужить нам в качестве параметра Ω?

Упражнение. Решите двумерное обобщение (10.2.4) с электростатическим потенциалом $U = -2q \log r$. Найдите физическую интерпретацию тому факту, что не существует P^e.

Примечание. Модель диффузии в настоящем разделе приводит к нелинейному $\alpha_1(x)$, но второй коэффициент α_2 остается постоянным. Такие уравнения Фоккера—Планка в § 8.7 мы называли квазилинейными. Причина, по которой в этом примере уравнения оказались квазилинейными, связана с нелинейностью, обусловленной наличием внешнего потенциала $U(x)$, который изменяет вероят-

ности скачков, но сам по себе не является источником флуктуаций. Когда бы в системе ни появилась нелинейность, обусловленная механическими причинами, она, как правило, не влияет на коэффициент (в этом приближении). Другими примерами являются (8.3.10), (8.3.11) и (10.2.8). Уравнения «обобщенной гидродинамики», т. е. гидродинамики с флуктуациями, также относят к такому типу, хотя обычно их записывают в форме Ланжевена *. Нелинейность этих уравнений связана с чисто механическим или даже скорее кинематическим членом $(\mathbf{v}\cdot\nabla)\mathbf{v}$.

10.3. ДИФФУЗИЯ В НЕОДНОРОДНОЙ СРЕДЕ

В качестве примера, в котором второй коэффициент α_2 не является постоянным, рассмотрим диффузию в среде, в которой коэффициент диффузии зависит от координат. Есть два правдоподобных пути для эвристического обобщения обычного уравнения диффузии. В одномерном случае, когда имеется только координата x, можно записать либо

$$\frac{\partial P(x,\ t)}{\partial t}=\frac{\partial^2}{\partial x^2}D(x)P, \tag{10.3.1}$$

либо

$$\frac{\partial P(x,\ t)}{\partial t}=\frac{\partial}{\partial x}D(x)\frac{\partial P}{\partial x}. \tag{10.3.2}$$

Эти уравнения отличаются друг от друга членом

$$\frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{\mathrm{d}D(x)}{\mathrm{d}x}P\right], \tag{10.3.3}$$

который имеет вид переноса (иногда его называют «ложным течением» **). Выражение (10.3.2) кажется все же более привлекательным, потому что его можно записать в виде

$$\frac{\partial P}{\partial t}=\frac{\partial J}{\partial x},\quad J=-D\frac{\partial P}{\partial x}. \tag{10.3.4}$$

Однако это не является решающим аргументом. Для того чтобы определить, какая из этих записей правильна, мы должны начать с точной модели и произвести разложение по Ω. Оно действительно приводит к (10.3.2), но из этого еще нельзя сделать вывода, что такой выбор всегда является правильным. В других случаях (например, при диффузии горячих электронов в пространстве скоростей ***) правильный выбор сделать заранее нельзя, не прибегая к исследованию механизма, лежащего в основе диффузии.

---

* L. D. Landau and E. M. Lifshitz, Fluid Mechanics (Pergamon, Oxford, 1959). Ch. 17; R. D. Mountain, Advances in Molecular Relaxation Processes 9, 255 (1977).

** Здесь опять возникает дилемма Ито—Стратоновича из § 8.8.

*** P. J. Price in: Fluctuation Phenomena in Solids (R. E. Burgess ed., Acad. Press, New York 1965); S. V. Gantsevich, V. L. Gurevich, and R. Katilius, Rivista Nuovo Cimento 2, 1 (1979).

В нашей модели мы предполагаем, что диффузия связана со следующим механизмом. Частица с координатой x' считается захваченной до тех пор, пока из-за какого-либо воздействия не начнет двигаться вправо или влево. Обозначим соответственно $\beta(x')$ и $\alpha(x')$ вероятности того, что такие события произойдут за единичное время. Частица движётся до тех пор, пока не попадет в следующую ловушку. Пусть вероятность захвата частицы в точке с координатой, лежащей между x и $x+\mathrm{d}x$, есть $\Omega_\gamma(x)\,\mathrm{d}x$. Функции α, β, γ изменяются на макроскопическом масштабе, но с увеличением Ω плотность ловушек возрастает, так что размер скачков уменьшается. С помощью тех же рассуждений, какие мы проводили в § 6.6 для вероятности того, что частица, стартуя из точки x', окажется захваченной между x и $x+\mathrm{d}x$, считая, что $x>x'$, получаем

$$\Omega_\gamma(x)\,\mathrm{d}x\cdot\exp\left[-\Omega\int\limits_{x'}^{x}\gamma(x'')\,\mathrm{d}x''\right].$$

В масштабе значений скачка $X=\Omega x$ для $X>X'$ имеем

$$W(X\mid X')=\Omega\beta(x')\,\gamma(x)\exp\left[-\Omega\int\limits_{x'}^{x}\gamma(x'')\,\mathrm{d}x''\right]. \qquad (10.3.5а)$$

Аналогично, для $X<X'$ получаем

$$W(X\mid X')=\Omega\alpha(x')\,\gamma(x)\exp\left[-\Omega\int\limits_{x}^{x'}\gamma(x'')\,\mathrm{d}x''\right]. \qquad (10.3.5б)$$

Значения α и β можно определить, обратившись к соотношению детального равновесия. Подставляя (10.3.5) в (5.6.1), получаем

$$\beta(x')\,\gamma(x)\,P^{\mathrm{e}}(x')=\alpha(x)\,\gamma(x')\,P^{\mathrm{e}}(x).$$

Следовательно, величина

$$\frac{\alpha(x)}{\gamma(x)}P^{\mathrm{e}}(x)=\frac{\beta(x')}{\gamma(x')}P^{\mathrm{e}}(x')$$

не должна зависеть от x. В отсутствие внешнего поля $P^{\mathrm{e}}(x)$ постоянно и, следовательно, с точностью до множителя, определяющего масштаб времени,

$$\alpha(x)=\beta(x)=\gamma(x). \qquad (10.3.6)$$

Подставляя это тождество в (10.3.5а), для $r>0$ получаем

$$W(X';\ r)=\Omega\gamma(x')\,\gamma\left(x'+\frac{r}{\Omega}\right)\exp\left[-\int\limits_{X'}^{X'+r}\gamma\left(\frac{X''}{\Omega}\right)\mathrm{d}X''\right]=$$

$$=\Omega\{\gamma(x')\}^2\,\mathrm{e}^{-r\gamma(x')}+\left[\gamma(x')\,\gamma'(x')\,r-\frac{1}{2}\{\gamma(x')\}^2\times\right.$$

$$\left.\times\gamma'(x')\,r^2\right]\mathrm{e}^{-r\gamma(x')}+O(\Omega^{-1}). \qquad (10.3.7)$$

Аналогичное выражение получается для $r < 0$. Таким образом, приходим к выводу, что W имеет канонический вид (9.2.3) с $f(\Omega) = \Omega$ и

$$\Phi_0(x;\ r) = \{\gamma(x)\}^2 e^{\mp r\gamma(x)}, \tag{10.3.8а}$$

$$\Phi_1(x;\ r) = \left[\gamma(x)\gamma'(x) r \mp \frac{1}{2}\{\gamma(x)\}^2 \gamma'(x) r^2\right] e^{\mp r\gamma(x)}. \tag{10.3.8б}$$

Два знака относятся к $r > 0$ и $r < 0$ соответственно.

Теперь легко получить

$$\alpha_{1,0}(x) = 0;\ \alpha_{1,1}(x) = -2\frac{\gamma'(x)}{\{\gamma(x)\}^2};\quad \alpha_{2,0}(x) = \frac{4}{\gamma(x)}. \tag{10.3.9}$$

Отсюда следует, что основное кинетическое уравнение относится к диффузионному типу, так что выполняется приближение Фоккера — Планка (10.1.5):

$$\frac{\partial P(x,\ t)}{\partial t} = \frac{2}{\Omega}\left[\frac{\partial}{\partial x}\frac{\gamma'(x)}{\{\gamma(x)\}^2}P + \frac{\partial^2}{\partial x^2}\frac{P}{\gamma(x)}\right]. \tag{10.3.10}$$

Таким образом, мы получили нелинейное уравнение Фоккера — Планка.

Далее уравнение (10.3.10) можно записать в виде

$$\frac{\partial P(x,\ t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\frac{2}{\Omega\gamma(x)}\frac{\partial P}{\partial x}. \tag{10.3.11}$$

Это уравнение имеет вид (10.3.2) с $D(x) = 2/(\Omega\gamma(x))$. В уравнении, записанном в таком виде, переносной член отдельно не выписан, однако перенос по-прежнему есть, о чем свидетельствует

$$\frac{\langle\Delta x\rangle_x}{\Delta t} = -\frac{2}{\Omega}\frac{\gamma'(x)}{\{\gamma(x)\}^2}.$$

Упражнение. Запишите (10.3.11), (10.3.2), (10.3.3) в трех измерениях и учтите анизотропную диффузию, взяв D в тензорном виде.

Упражнение. Покажите, что любое уравнение Фоккера—Планка, обладающее постоянным равновесным распределением, можно записать в виде (10.3.2).

Упражнение. Если в приведенной выше модели не постулировать никакого частного вида P^e, то вместо (10.3.11) получится

$$\frac{\partial P(x,\ t)}{\partial t} = \frac{2}{\Omega}\frac{\partial}{\partial x}\frac{P^e(x)}{\gamma(x)}\frac{\partial}{\partial x}\frac{P(x,\ t)}{P^e(x)}. \tag{10.3.12}$$

Упражнение. Включите в настоящую модель внешнее поле, как в (10.2.4).

Упражнение. Найдите следующий порядок после (10.3.10).

Упражнение. Запишите явное выражение для основного кинетического уравнения, согласующегося с (10.3.7). Выведите из него точное уравнение

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \frac{2}{\Omega}\frac{\partial}{\partial x}\frac{1}{\gamma}\frac{\partial P}{\partial x} + \frac{1}{\Omega^2}\frac{\partial}{\partial x}\frac{1}{\gamma}\frac{\partial}{\partial x}\frac{1}{\gamma}\frac{\partial P}{\partial t}. \tag{10.3.13}$$

Используйте это соотношение для нахождения следующего порядка после (10.3.10) и проверьте таким путем результат, полученный в предыдущем упражнении.

10.4. УРАВНЕНИЕ ДИФФУЗИИ В СЛУЧАЕ МНОГИХ ПЕРЕМЕННЫХ

Наиболее общий вид нелинейного уравнения Фоккера—Планка в случае r переменных x_i $(i=1, 2, \ldots, r)$ таков:

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x_i} A_i(x) P + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} B_{ij}(x) P. \qquad (10.4.1)$$

Здесь x обозначен набор $\{x_i\}$, а суммирование подразумевается по всем повторяющимся индексам. Матрица $B_{ij}(x)$ симметрична и положительно определена *. По-другому это можно записать следующим образом:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -\frac{\partial J_i}{\partial x_i}, \; J_i = A_i(x) P - \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_i} B_{ij}(x) P, \qquad (10.4.2)$$

где $J_i(x, t)$ — поток вероятности в r-мерном пространстве.

Стационарное решение найдем из уравнения

$$0 = -\frac{\partial}{\partial x_i} A_i P + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x_i \, \mathrm{d} x_j} B_{ij} P \equiv -\frac{\partial J_i}{\partial x_i}. \qquad (10.4.3)$$

Физически очевидно, что, для того чтобы P было стационарно, дивергенция J должна обращаться в нуль. Однако отсюда нельзя сделать вывод, что стационарное состояние содержит замкнутое течение с ненулевым ротором. Тогда в отличие от одномерного случая не всегда удается найти даже стационарное решение уравнения (10.4.1) **.

Подобной трудности не возникает в случае замкнутых изолированных физических систем, потому что из обычной статистической механики известно, что для таких систем существуют стационарные решения, соответствующие термодинамически равновесному распределению $P^{\mathrm{e}}(x)$. Это предполагает наличие некоторых сведений относительно A_i и B_{ij}, однако информация будет еще более полной, если известно, что выполняют соотношения детального равновесия (5.6.1) или расширенного детального развития (5.6.14). Поэтому в дальнейшем будем исходить из следующих предположений.

1. Физическая система является замкнутой и изолированной, и ее равновесное распределение известно.

2. Такая система допускает марковское описание в терминах r-переменных x_i, которые, следовательно, удовлетворяют основному кинетическому уравнению.

3. Это уравнение содержит подходящий параметр разложения Ω и относится к диффузионному типу, так что при $\Omega \to \infty$ выполняется (10.4.1).

4. Внешнее магнитное поле и глобальное вращение отсутствуют, и каждая x_i является либо четной, либо нечетной.

---

* Это значит, что все ее собственные значения положительны. Далее нам встретятся примеры, в которых B_{ij} будет полуопределенной, т. е. ее собственные значения будут положительны или равны нулю.

** K. Tomita and H. Tomita, Prog. Theor. Phys. 51, 1731 (1974); 53, 1546 (1975).

Примеры. Броуновская частица совместно с окружающей ее жидкостью является замкнутой изолированной системой. Переменными x_i являются три ее координаты, а параметром Ω — ее масса; $P^e(x)$ постоянно. Уравнение (10.4.1) в этом случае является трехмерным аналогом (8.3.1): $A_i=0$ и B_{ij} постоянна.

Рэлеевская частица имеет три нечетные переменные, а именно компоненты скорости $\mathbf{V}$, и $P^e(\mathbf{V})=C\exp[-M\mathbf{V}^2/(kT)]$. Уравнение (10.4.1) является трехмерным аналогом (8.4.6).

Уравнение Крамерса (8.7.4) имеет вид (10.4.1) с двумя переменными, нелинейной $A_i(x)$ и постоянной, полуопределенной матрицей B_{ij}, а распределение P^e имеет вид

$$P^e(X, V)=C\exp[\{-{}^1/_2 MV^2-\Phi(X)\}/(kT)], \tag{10.4.4}$$

где $\Phi(X)$ — потенциал силы $F(X)$.

Частица диффундирует в трехмерной неоднородной анизотропной среде с внешней силой с потенциалом $U(\mathbf{r})$. Такая частица описывается обобщением уравнения (10.3.2):

$$\frac{\mathrm{d}P(\mathbf{r}, t)}{\mathrm{d}t}=\nabla\cdot\{\mu\cdot(\nabla U)P\}+\nabla\cdot D\cdot\nabla P, \tag{10.4.5}$$

где $\mu(\mathbf{r})$ — тензор подвижности, $D(\mathbf{r})$ — тензор диффузии. Соотношения Онзагера [7] утверждают, что D симметричен и определяется выражением $P^e=C\exp[-U/(kT)]$.

Для того чтобы применить (5.6.14) к (10.4.1), сначала запишем его в более подходящем виде*. Для каждого x_i определим $\varepsilon_1=\pm 1$ соответственно для четных и нечетных x_i, а εx обозначим набор $\{\varepsilon_i x_i\}$. Тогда $P^e(\varepsilon x)=P^e(x)$, а (5.6.14) принимает вид

$$\mathbf{W}(x\,|\,x')P^e(x')=\mathbf{W}(\varepsilon x'\,|\,\varepsilon x)P^e(x).$$

По аналогии с (5.7.5) это можно записать в виде тождества

$$\int\frac{P_2(\varepsilon x)}{P^e(x)}\mathbf{W}P_1(x)\,\mathrm{d}x=\int\frac{P_1(\varepsilon x)}{P^e(x)}\mathbf{W}P_2(x)\,\mathrm{d}x \tag{10.4.6}$$

для всех функций P_1, P_2.

Далее, для того чтобы упростить выкладки, запишем (10.4.1) в альтернативном виде, уже встречающемся в (8.1.11):

$$\frac{\partial P}{\partial t}=-\frac{\partial}{\partial x_i}F_iP+\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial x_i}P^eB_{ij}\frac{\partial}{\partial x_j}\frac{P}{P^e}, \tag{10.4.7}$$

где

$$F_i=A_i-\frac{1}{2P^e}\frac{\partial}{\partial x_j}(B_{ij}P^e). \tag{10.4.8}$$

В левую часть (10.4.6) подставляем оператор $\mathbf{W}$, определенный в (10.4.7):

$$-\int\frac{P_2(\varepsilon x)}{P^e(x)}\frac{\partial}{\partial x_i}F_i(x)P_1(x)\,\mathrm{d}x+\frac{1}{2}\int\frac{P_2(\varepsilon x)}{P^e(x)}\frac{\partial}{\partial x_i}P^e(x)B_{ij}(x)\frac{\partial}{\partial x_j}\frac{P_1(x)}{P^e(x)}\,\mathrm{d}x=$$
$$=\int F_i(\varepsilon x)P_1(\varepsilon x))\frac{\partial}{\partial\varepsilon_i x_i}\frac{P_2(x)}{P^e(x)}\,\mathrm{d}x+$$
$$+\frac{1}{2}\int\frac{P_1(\varepsilon x)}{P^e(x)}\frac{\partial}{\partial\varepsilon_j x_j}P^e(x)B_{ij}(\varepsilon x)\frac{\partial}{\partial\varepsilon_i x_i}\frac{P_2(x)}{P^e(x)}\,\mathrm{d}x.$$

---

* S. R. de Groot and N. G. van Kampen, Physica 21, 39 (1954).

Для того чтобы это соотношение было равно правой части (10.4.6) для любого P_1 надо потребовать

$$\varepsilon_i F_i(\varepsilon x)\frac{\partial}{\partial x_i}\frac{P_2(x)}{P^e(x)}+\frac{\varepsilon_i\varepsilon_j}{2P^e(x)}\frac{\partial}{\partial x_i}P^e(x)B_{ij}(\varepsilon x)\frac{\partial}{\partial x_j}\frac{P_2(x)}{P^e(x)}=$$
$$=-\frac{1}{P^e(x)}\frac{\partial}{\partial x_i}F_i(x)P_2(x)+\frac{1}{2P^e(x)}\frac{\partial}{\partial x_i}P^e(x)B_{ij}(x)\frac{\partial}{\partial x_j}\frac{P_2(x)}{P^e(x)}.$$

Для того чтобы это было справедливо для любого P_2, прежде всего необходимо, чтобы члены, включающие вторые производные от P_2, были одинаковы в обеих частях:

$$\varepsilon_i\varepsilon_j B_{ij}(\varepsilon x)=B_{ij}(x). \tag{10.4.9}$$

Остается уравнение

$$\varepsilon_i F_i(\varepsilon x)\frac{\partial P_2}{\partial x_i}-\frac{\varepsilon_i F_i(\varepsilon x)}{P^e}\frac{\partial P^e}{\partial x_i}P_2=-F_i(x)\frac{\partial P_2}{\partial x_i}-P_2\frac{\partial F_i}{\partial x_i}.$$

Отсюда следует, что

$$\varepsilon_i F_i(\varepsilon x)=-F_i(x), \tag{10.4.10}$$

$$\varepsilon_i F_i(\varepsilon x)\frac{\partial\log P^e}{\partial x_i}=\frac{\partial F_i}{\partial x_i}. \tag{10.4.11}$$

Из этих двух уравнений, в частности, получаем

$$\frac{\partial}{\partial x_i}F_i(x)P^e(x)=0. \tag{10.4.12}$$

Полученные результаты приводят к следующей физической интерпретации двух членов в (10.4.7). Первый член является оператором Лиувилля, относящимся к детерминистическому уравнению

$$\dot{\mathbf{x}}=F_i(\mathbf{x}). \tag{10.4.13}$$

Согласно (10.4.10), это уравнение инвариантно относительно обращения времени:

$$-\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_i\mathbf{x}_i)=F_i(\varepsilon\mathbf{x}).$$

Согласно (10.4.12), оно само по себе сохраняет равновесное распределение P^e. Второй член в (10.4.7) также сохраняет P^e, но меняет знак при обращении времени:

$$-\frac{\partial P(\varepsilon x)}{\partial t}=-\frac{1}{2}\frac{\partial}{d\varepsilon_i x_i}P^e(\varepsilon x)B_{ij}(\varepsilon x)\frac{\partial}{\partial\varepsilon_j x_j}\frac{P(\varepsilon x)}{P^e(\varepsilon x)}. \tag{10.4.14}$$

Таким образом, из двух членов в (10.4.7) один является обратимым, а другой — чисто необратимым.

Другими словами, можно сказать, что (10.4.7) разделяет полный дифференциальный оператор **W** на антисимметричную и симметричную части в смысле скалярного произведения (5.7.4). Вследствие этого пер-

вый член не дает вклада в следующее выражение:

$$\frac{d}{dt}\frac{1}{2}\int\frac{\{P(x,t)\}^2}{P^e(x)}\,dx=\int\frac{P(x,t)}{P^e(x)}\mathbf{W}P(x,t)\,dx=$$
$$=-\frac{1}{2}\int P^e B_{ij}\left(\frac{\partial}{\partial x_i}\frac{P}{P^e}\right)\left(\frac{\partial}{\partial x_j}\frac{P}{P^e}\right)dx. \qquad (10.4.15)$$

Поскольку B_{ij} положительно определена, это выражение отрицательно, если только P не равно P^e. Следовательно, за приближение к равновесию отвечает только лишь необратимый член. В таком случае наше разделение членов в (10.4.7) на соответственно механический и диссипативный оправдано.

Упражнение. Покажите, что (10.4.5) имеет вид (10.4.1) с

$$B_{ij}=2D_{ij},\quad A_i=-\mu_{ij}\frac{dU}{dx_j}+\frac{dD_{ij}}{dx_j}.$$

Как модифицируются эти уравнения, когда D несимметричен в смысле (10.4.9) (например, в магнитном поле)?

Упражнение. Покажите, что справедливо обратное, а именно (10.4.9), (10.4.10) и (10.4.12) совместно гарантируют выполнение (10.4.6).

Упражнение. Разделение $\mathbf{W}$ на обратимый и чисто необратимый члены, конечно же, однозначно. Покажите, что тот же самый результат можно получить, начиная непосредственно с (10.4.1) и не выписывая заранее окончательный вид (10.4.7).

Упражнение. Докажите, что первый член в (10.4.7) не дает вклада в (10.4.15).

Упражнение. Покажите, что вместо квадратичной формы в (10.4.15) можно использовать $\int P\log(P/P^e)\,dx$.

Упражнение. Согласно (10.4.7), поток вероятности (10.4.2) разделяется на механическую и диссипативную части, которые являются соответственно нечетной и четной по отношению к обращению времени. В равновесии же диссипативная часть равна нулю.

Упражнение. Запишите уравнение Крамерса (8.7.4) в виде (10.4.7). То же самое сделайте и для уравнения (8.4.11).

Упражнение. Запишите уравнение диффузии (10.4.5) в виде (10.4.7) и выведите соотношение

$$D_{ij}(x)=kT\mu_{ij}(x). \qquad (10.4.16)$$

Упражнение. Во всех этих примерах $P^e(x)=C\exp[-U(x)/\theta]$, где $\theta=kT$. Уравнение (10.4.7) можно записать в двух эквивалентных видах:

$$\frac{dP}{dt}=-\frac{d}{dx_i}\left\{F_i-\frac{1}{2\theta}B_{ij}\frac{dU}{dx_j}\right\}P+\frac{1}{2}\frac{d}{dx_i}B_{ij}\frac{dP}{dx_j}, \qquad (10.4.17)$$

$$\frac{dP}{dt}=-\frac{d}{dx_i}\left\{F_i-\frac{1}{2\theta}B_{ij}\frac{dU}{dx_j}+\frac{1}{2}\frac{dB_{ij}}{dx_j}\right\}P+\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx_i\,dx_j}B_{ij}P. \qquad (10.4.18)$$

Упражнение. Преобразуйте (10.4.1) к новым переменным $\overline{x}_k=\varphi_k(x)$. Новое уравнение имеет тот же самый вид с новыми коэффициентами

$$\overline{A}_k=A_i\frac{\partial\varphi_k}{\partial x_i}+\frac{1}{2}B_{ij}\frac{d^2\varphi_k}{dx_i\,dx_j},\quad \overline{B}_{k,l}=B_{ij}\frac{d\varphi_k}{dx_i}\frac{d\varphi_l}{dx_j}.$$

Указание. Во избежание лишних вычислений используйте сопряженное уравнение.

Упражнение. Если B_{ij} положительно определена, то имеется симметричная матрица h_{in}, такая, что $(B^{-1})_{ij}=h_{ni}h_{nj}$. Если h_{in} удовлетворяет условию

интегрируемости

$$\frac{dh_{in}}{dx_m}=\frac{dh_{im}}{dx_n}.$$

то можно ввести новые переменные с помощью соотношения $d\bar{x}_k=h_{kn}\,dx_n$, такие, что $\bar{B}_{kl}=\delta_{kl}$. Для интегрируемости необходимо и достаточно, чтобы существовала функция $\Phi(x)$, такая что * $h_{in}=d^2\Phi/(dx_i\,dx_n)$.

Упражнение. Условие того, что это преобразование делает $\bar{A}_k$ линейным, есть

$$(h^{-1})_{ni}\frac{d}{dx_i}\{h_{jm}A_j\}=\text{постоянной матрице.}$$

Это необходимое и достаточное условие того, что (10.4.1) можно преобразовать в линейное уравнение Фоккера—Планка.

10.5. ПРЕДЕЛ НУЛЕВЫХ ФЛУКТУАЦИЙ

Основные кинетические уравнения, относящиеся к диффузионному типу, характеризуются свойством, состоящим в том, что низкий неисчезающий член в их Ω-разложении является не детерминистическим макроскопическим уравнением, а уравнением Фоккера—Планка. Можно задаться вопросом: можно ли получить приближенное детерминистическое уравнение, несмотря на то что Ω уже не может служить параметром разложения? Наивный прием, состоящий в выбрасывании из уравнения Фоккера—Планка члена, содержащего вторые производные, конечно же, оказывается ошибочным: результат зависит от того, какой из эквивалентных видов (10.4.1), (10.4.7), (10.4.17), (10.4.18) мы выберем для того, чтобы изуродовать уравнение таким образом.

Единственный путь для получения хорошо определенного и физически значимого приближения вновь состоит в том, что нужно выполнить разложение по степеням физического параметра. Если мы хотим, чтобы низший порядок был детерминистическим, то параметр разложения должен быть таким, чтобы распределение сводилось к узкому пику при малых его значениях. Понятно, что параметр $\theta=kT$ для этого подходит, потому что при низких температурах флуктуации малы. Мы покажем, что метод получения Ω-разложения, использованный в гл. 9, можно приспособить для получения разложения уравнения Фоккера—Планка по степеням $\theta^{1/2}$. Сперва мы продемонстрируем этот метод на одномерном квазилинейном уравнении (10.2.4).

Сначала возьмем $\theta=0$; тогда (10.2.4) сводится к

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t}=\frac{\partial}{\partial x}U'(x)P. \tag{10.5.1}$$

Это уравнение Лиувилля для

$$\dot{x}=-U'(x). \tag{10.5.2}$$

* M. San Miguel, Z. Phys. B33, 307 (1979).

Мы получили *детерминистическое уравнение, справедливое в пределе низких температур*. Его не надо путать с макроскопическим уравнением, которое является детерминистическим уравнением, возникающим в пределе $\Omega \to \infty$ для систем недиффузионного типа.

Далее, пусть $\mathbf{x}(t)$ — решение уравнения (10.5.2). Определим новую переменную ξ:

$$x = \mathbf{x}(t) + \theta^{1/2}\xi, \quad P(x, t) = \Pi(\xi, t). \tag{10.5.3}$$

Преобразование (10.2.4) к новым переменным дает

$$\frac{\partial \Pi}{\partial t} - \theta^{-1/2}\frac{dx}{dt}\frac{\partial \Pi}{\partial \xi} = \theta^{-1/2}\frac{\partial}{\partial \xi}U'(\mathbf{x}(t) + \theta^{1/2}\xi)\Pi + \frac{\partial^2 \Pi}{\partial \xi^2}.$$

Члены порядка $\theta^{-1/2}$ сокращаются и у нас остается

$$\frac{\partial \Pi}{\partial t} = U''(\mathbf{x}(t))\frac{\partial}{\partial \xi}\xi\Pi + \frac{\partial^2 \Pi}{\partial \xi^2}, \tag{10.5.4}$$

не считая членов порядка $\theta^{1/2}$ и выше. Мы опять получили линейное уравнение Фоккера—Планка с зависящим от времени коэффициентом для флуктуаций относительно детерминистического решения при условии, что они малы. Условие состоит в том, что температура должна быть низкой, а детерминистическое решение — устойчивым:

$$U''(\mathbf{x}(t)) > 0. \tag{10.5.5}$$

Можно также получить последующие, более высокие порядки *.

Примечание. Свойства уравнения (10.2.4) для малых θ и для общего основного кинетического уравнения при больших Ω оказываются очень схожими. К обоим случаям применимы многие схожие идеи и методы. На разницу же между этими двумя случаями зачастую не обращают внимания. А ведь кроме разного физического значения между ними существует важное математическое различие.

В случае квазилинейного уравнения Фоккера—Планка (10.2.4) свободная энергия U, определенная в терминах стационарного решения в (10.2.6), совпадает с потенциалом в детерминистическом уравнении (10.5.2). В тех случаях, когда нужно построить зависящее от времени решение для систем, в которых известны лишь равновесные распределения, это тождество используют в качестве доказательства. Однако мы сейчас покажем, что *оно выполняется только для систем диффузионного типа, обладающих квазилинейным* (*т. е. в виде* (10.2.4)), *уравнением Фоккера—Планка*.

Сначала грубое приближение. Возьмем одношаговый процесс с коэффициентами генерации $g(n)$ и рекомбинации $r(n)$ такой же, как в (6.5.1). Его макроскопическое уравнение

$$\dot{\mathbf{n}} = g(\mathbf{n}) - r(\mathbf{n})$$

можно записать как $\dot{\mathbf{n}} = -V'(\mathbf{n})$ с

$$V(n) = \sum_{\nu=1}^{n}\{r(\nu) - g(\nu)\} + \text{const}. \tag{10.5.6}$$

---

* R. F. Rodriguez and N. G. van Kampen, Physica 85A, 347 (1976). Другой путь получения эквивалентных результатов описан в работе: D. Ludwig, SIAM Review 17, 605 (1975).

С другой стороны, его стационарное распределение (6.3.8) можно записать как $P_n^s = \exp[-U(n)/\theta]$ с произвольной константой θ и

$$U(n)/\theta = \sum_{\nu=1}^{n} \{\log r(\nu) - \log g(\nu-1)\} + \text{const}. \tag{10.5.7}$$

Понятно, что *потенциал V для движения не совпадает со свободной энергией U.*

Для того чтобы сделать это приближение более точным, подставляем вместо g и r их Ω-разложение (9.2.6). Тогда (10.5.6) дает

$$V(\varphi) = \int^{\varphi} [\rho_0(\varphi') - \gamma_0(\varphi') + \Omega^{-1}\{\rho_1(\varphi') - \gamma_1(\varphi')\} + \ldots]\,\Omega\, d\varphi'. \tag{10.5.8}$$

С другой стороны, (10.5.7) дает

$$U(\varphi)/\theta = \int^{\varphi} \{\log[\rho_0(\varphi') + \Omega^{-1}\rho_1(\varphi')] - \log[\gamma_0(\varphi') + \Omega^{-1}\gamma_1(\varphi')]\}\,\Omega\, d\varphi'. \tag{10.5.9}$$

Основные кинетические уравнения диффузионного типа характеризуются соотношением $\gamma_0 = \rho_0$. В этом случае (10.5.8) и (10.5.9) сводятся к

$$V\varphi = \int^{\varphi} \{\rho_1(\varphi') - \gamma_1(\varphi')\}\, d\varphi',$$

$$U(\varphi)/\theta = \int^{\varphi} \frac{\rho_1(\varphi') - \gamma_1(\varphi')}{\rho_0(\varphi')}\, d\varphi'.$$

Если вдобавок $\rho_0 = \text{const}$, то можно выбрать $\theta = \rho_0 = \gamma_0$ и оба потенциала совпадут. Это дополнительное требование означает, что в (10.1.5) коэффициент

$$\alpha_{2,0}(x) = {}^1/_2\{\rho_0(x) + \gamma_0(x)\} = \theta$$

постоянен, что свидетельствует о том, что уравнение Фоккера—Планка имеет квазилинейный вид (10.2.4).

Упражнение. Детерминистическое уравнение, полученное путем примитивного отбрасывания второго члена из уравнения Фоккера—Планка, неинвариантно относительно нелинейных преобразований x.

Упражнение. Любое нелинейное уравнение Фоккера—Планка (10.1.5) можно преобразовать в квазилинейное при помощи подходящего преобразования x.

Упражнение. Вращательное броуновское движение диполя во внешнем, зависящем от времени поле описывается уравнением *

$$\frac{\partial f(\theta, t)}{\partial t} = \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left[-F(\theta, t) f + \sin\theta \frac{\partial f}{\partial\theta}\right], \tag{10.5.10}$$

где $0 \leqslant \theta \leqslant \pi$. Преобразуйте это уравнение в квазилинейное уравнение Фоккера—Планка.

Упражнение. Покажите, что минимумы и максимумы функций U и V совпадают.

Упражнение. Выведите (в низшем порядке по Ω) для одношагового процесса выражения

$$\exp\left[-\frac{1}{\theta}\frac{dU}{dn}\right] = 1 - \frac{1}{r(n)}\frac{dV}{dn}, \tag{10.5.11а}$$

$$\exp\left[\frac{1}{\theta}\frac{dU}{dn}\right] = 1 + \frac{1}{g(n)}\frac{dV}{dn}. \tag{10.5.11б}$$

Каково соотношение между U и V в случае уравнения типа (10.1.5)?

---

* P. Debye, Polar Molecules (Dover Publ., New York, 1945), p. 83; [7, p. 234]; W. T. Coffey and B. V. Paranjape, Proc. Roy. Irish Acad. A. 78, 17 (1978).

Упражнение. Идентификация U и V неинвариантна относительно нелинейных преобразований x.

Теперь мы применим температурное разложение к многомерному уравнению Фоккера—Планка (10.4.1) и (10.4.7) *. Сначала температурную зависимость надо задать явно. В принципе для этого нужно уточнить определение нашей системы. Но во всех наших примерах F_i не зависит от θ, а B_{ij} — пропорционально ему: $B_{ij}(x) = \theta b_{ij}(x)$. Тогда удобно начать с (10.4.17):

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x_i}\left\{F_i - \frac{1}{2} b_{ij} \frac{\partial U}{\partial x_j}\right\} P + \frac{\theta}{2} \frac{\partial}{\partial x_i} b_{ij} \frac{\partial P}{\partial x_j}. \qquad (10.5.12)$$

Предел $\theta \to 0$ дает детерминистическое уравнение

$$\dot{\mathbf{x}} = F_i(\mathbf{x}) - \frac{1}{2} b_{ij}(\mathbf{x}) \frac{\partial U(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}_j}. \qquad (10.5.13)$$

Первый член представляет собой обратимую механическую силу, а второй — затухание. Эта сила, вызывающая затухание, является частью необратимого члена в (10.4.7), которая выживает в пределе $\theta = 0$. Другая часть, представленная последним членом в (10.5.12), приводит к флуктуациям. Как следствие этой общей причины и затухания, флуктуации описываются одними и теми же коэффициентами $b_{ij}(x)$. *Этот факт составляет обобщение флуктуационно-диссипативной теоремы на нелинейные системы диффузионного типа. Тот факт, что матрица $b_{ij}(x)$ симметрична, является обобщением соотношений взаимности Онзагера на такие системы.*

Предостережение. Мысль об использовании нелинейного уравнения Фоккера—Планка в качестве общего подхода для описания флуктуирующих систем привлекала многих авторов **. Соотношение детального равновесия в своей расширенной форме сослужило полезную службу, но связь с детерминистическим уравнением приводила к затруднениям. Поэтому полезно еще раз подчеркнуть следующие три предостережения.

1. Нелинейное уравнение Фоккера—Планка применимо к системам диффузионного типа, определенным (10.1.1). Для систем, подобных тем, что рассмотрены в гл. 9, оно обычно неприменимо, в лучшем случае его удается построить в качестве приближения с ограниченной применимостью (см. комментарий 10 из § 9.4).

2. Даже для систем диффузионного типа уравнение Фоккера—Планка является просто низшим членом разложения по Ω.

3. *Это уравнение можно связать с детерминистическим уравнением только посредством разложения некоторых других параметров*, что позволяет выделить флуктуации путем разделения масштабов. Наш выбор $\theta = kT$ выглядит естественно, однако он не является единственным, возможны и другие пути. Недавно было предложено разложение по постоянной Больцмана *** k. Формально оно

---

* Я благодарю Гардинера за полезное обсуждение этого вопроса.

** M. S. Green, J. Chem. Phys. 20, 1281 (1952); N. C. van Kampen, Physica 23, 707 and 816 (1957); U. Uhlhorn, Arkiv for Fysik 17, 361 (1960); R. Graham, in: Ergebn. exakten Naturw. 66 (Springer, Berlin, 1973); H. Hasegawa, Prog. Theor. Phys. 55, 90 (1976).

*** H. Grabert and M. S. Green, Phys. Rev. A19, 1747 (1979); H. Grabert, R. Graham, and M. S. Green, Phys. Rev. A21, 2136 (1980).

должно привести к тем же результатам, что и разложение по T, при условии, что в коэффициентах, где встречается постоянная k, она нигде не образует комбинации с T.

Упражнение. Покажите, что затухание в (10.5.3) приводит к убыванию свободной энергии.

Упражнение. Покажите, что (10.5.3) дает верные детерминистические законы, относящиеся к (8.7.4) и (8.4.11).

Упражнение. Убедитесь в том, что (10.4.5) в детерминистическом пределе дает

$$\dot{\mathbf{x}}_i = -\mu_{ij}(\mathbf{x})\{\mathrm{d}U/\mathrm{d}\mathbf{x}_j\}$$

с симметричной матрицей μ_{ij} (ср. с (10.4.16)).

Упражнение. Найдите следующий порядок в разложении (10.5.12), полагая $x_i = \mathbf{x}_i(t) + 0^{1/2}\xi_i$, и получите по аналогии с (10.5.4) уравнение

$$\frac{\partial \Pi}{\partial t} = \left\{\frac{\partial F_i(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}_k} + \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_k} b_{ij}(\mathbf{x})\frac{\partial U(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}_j}\right\}\frac{\partial}{\partial \xi_i}\xi_k \Pi + \frac{1}{2} b_{ij}(\mathbf{x})\frac{\partial^2 \Pi}{\partial \xi_i\, \mathrm{d}\xi_j}. \quad (10.5.14)$$

Согласно § 8.6, решением является гауссиан.

Упражнение. Сформулируйте соотношения Онзагера для нелинейных систем.

Упражнение. Иногда $P^{\mathrm{e}}(x)$ содержит дополнительный множитель $w(x)$, связанный с фазовым пространством, так что его зависимость от θ дается выражением

$$P^{\mathrm{e}}(x) = w(x)\exp(-U(x)/\theta).$$

Покажите, что это не влияет на результат (10.5.13).

ГЛАВА 11
НЕУСТОЙЧИВЫЕ СИСТЕМЫ

В предыдущей главе рассматривался один частный случай, в котором не выполнялось основное условие устойчивости (9.3.4). Теперь мы посмотрим, что бывает в тех случаях, когда это условие грубо нарушается. Приведенные здесь примеры — это только выборка из большого числа возможностей, подобранная так, чтобы выделить то новое, что возникает в таких случаях. Исчерпывающего рассмотрения всех типов неустойчивости до настоящего времени не сделано.

11.1. БИСТАБИЛЬНЫЕ СИСТЕМЫ

Для того чтобы облегчить обсуждение, сузим понятие «состояние», определив следующие три значения этого слова. Будем называть участком любое значение стохастической переменной X или n. Макросостоянием назовем любое значение макроскопической переменной φ. Зависящее от времени макросостояние является решением уравнения (9.3.1), а стационарное макросостояние — решением (9.3.3). И наконец, *мезосостоянием* будем называть любое распределение вероятности P. Зависящее от времени мезосостояние является решением основного кинетического уравнения, стационарное мезосостояние — это не зависящее от времени решение $P^s(X)$.

Вначале предположим, что выполняются условия устойчивости (9.3.4). Тогда существует только одно макросостояние φ^s. Оно свя-

зано со стационарным мезосостоянием $P^s(X)$ в том смысле, что последнее является острым пиком относительно $\Omega\varphi^s$ и в пределе $\Omega \to \infty$ стремится к дельта-функции от $\Omega\varphi^s$. Далее, благодаря (9.3.4) любое зависящее от времени макросостояние $\varphi(t)$ удается связать с зависящим от времени мезостатическим состоянием $P(X, t)$, составляющим острый пик вблизи $\varphi(t)$ и движущимся вместе с ним. Эта связь неоднозначна и точно не определена: каждому $\varphi(t)$ соответствуют много $P(x, t)$, обладающих такими свойствами, и мы не можем точно определить, насколько острым должен быть этот пик. Мы только можем сказать, что его ширина не должна превышать величины порядка $\Omega^{1/2}$. До сих пор мы рассматривали только такие мезосостояния. Однако существует и много других, например таких, которые не состоят из единственного острого пика и которые поэтому нельзя связать ни с одним макросостоянием φ. Скорее они описывают распределение вероятности по набору макросостояний. Возьмем, например, макросостояние

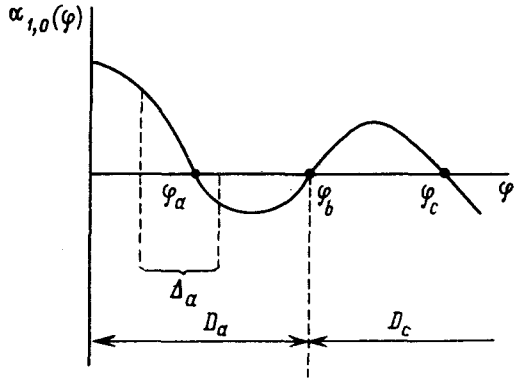

Рис. 32. Уравнение для макроскопической скорости в бистабильных системах. На рисунке показаны также области притяжения

$$P(X) = \pi_1\delta(X - X_1) + \pi_2\delta(X - X_2) \qquad (11.1.1)$$

с двумя постоянными $X_1 \neq X_2$ и двумя положительными коэффициентами $\pi_1 + \pi_2 = 1$. Это макросостояние связано с двумя макросостояниями $\varphi_1 = X_1/\Omega$ и $\varphi_2 = X_2/\Omega$ таким образом, что система имеет вероятность π_1 находиться в макросостоянии φ_1 и π_2 находиться в состоянии φ_2. Аналогичным путем любое плоское распределение $P(X)$ можно представить как сумму острых пиков, каждый из которых представляет собой мезосостояние, связанное с макросостоянием. И опять это разложение не единственно, потому что форма и ширина отдельных пиков могут изменяться в некоторых пределах. Все это контролируется условием (9.3.4), которое гарантирует, что острая функция $P(X, t)$ остается острым пиком.

Рассмотрим случай, когда $\alpha_{1,0}(\varphi)$ имеет вид, изображенный на рис. 32.

Имеется три стационарных макросостояния φ_a, φ_b, φ_c, из которых φ_a и φ_c локально устойчивы, а φ_b неустойчиво. Даже с точки зрения чистой макроскопики состояние φ_b нельзя рассматривать как реализуемое, потому что система, находясь в φ_b, из-за малейшего

внешнего возмущения скатится либо в φ_a, либо в φ_c. Системы, обладающие макроскопическими характеристиками, подобными тем, что показаны на рис. 32, называют *бистабильными*. Примеров таких систем много. В литературе чаще всего упоминают пример с лазером (см. § 11.9), туннельным диодом Исаки * и химической реакцией Шлегла (9.3.6). Макроскопическое уравнение для скорости реакции имеет вид

$$\dot{\varphi} = k_1\varphi_A\varphi^2 - k_1'\varphi^3 - k_2\varphi + k_2'\varphi_B, \qquad (11.1.2)$$

где φ_A, φ_B — постоянные концентрации A и B. Правая часть этого уравнения есть $\alpha_{1,0}(\varphi)$, при определенных значениях констант она имеет вид, изображенный на рис. 32 **.

Теперь рассмотрим бистабильный случай на мезоскопическом уровне. Вначале рассмотрим локально устойчивое решение φ_a на рис. 32. Поскольку $\alpha_{1,0}'(\varphi_a) < 0$, имеется область Δ_a вблизи φ_a, в которой выполняется (9.3.4). Любое макросостояние $\varphi(t)$, начинающееся в $\varphi(0)$, будет стремиться к φ_a внутри области Δ_a. Мезосостояние $P(X, t)$, связанное с ним соотношением $P(X, 0) = \delta[X - \Omega\varphi(0)]$, будет оставаться острым пиком при условии, что Ω достаточно велико. Тогда эволюцию $P(X, t)$ по-прежнему можно приближенно описать с помощью Ω-разложения, при этом сохраняется тесная связь между макро- и мезосостояниями.

Действительно, из рис. 32 видно, что имеется большая область притяжения D_a, такая, что каждое решение $\varphi(t)$ с принадлежащим $\varphi(0)$ стремится к φ_a. Два макросостояния, начинающихся в двух соседних точках D_a и Δ_a, сначала удаляются друг от друга, а затем начинают приближаться до тех пор, пока оба не окажутся в φ_a. Это видно из рис. 28, *б*, а также из уравнения для вариаций (9.3.5). Соответственно флуктуации относительно такого $\varphi(t)$ сначала нарастают ***, а затем снова убывают. В таком случае их все чаще можно описать с помощью Ω-разложения, а это значит, что связь между макросостояниями и соответствующим образом выбранными мезосостояниями сохраняется.

По-прежнему это описание не совсем корректно, потому что даже тогда, когда система находится на участке внутри Δ_a, все же существует вероятность (хотя и малая) гигантской флуктуации, которая перебросит систему через φ_b в область D_c. В этом случае она начнет движение к соседнему φ_c и будет двигаться до тех пор, пока ана-

---

* L. Esaki, Science 183, 1149 (1974); A. van der Ziel, Solid State Physical Electronics (Erd Ed., Prentice Hall, Englewood Cliffs, N. Y., 1976).

** Другие химические неустойчивости рассмотрены в кн.: A. Nitzan, P. Ortoleva, J. Deutch, and J. Ross, J. Chem. Phys. 61, 1056 (1974); R. M. Noyes, J. Chem. Phys. 64, 1266 (1976). Advances in Chemical Physics 43 (I. Prigogine and S. A. Rice eds., Wiley, New York, 1980) and F. Schlogl, Physics Reports 62, 267 (1980).

*** Это так называемая **теорема об усилении флуктуаций**, доказанная Сузуки, M. Suzuki, Prog. Theor. Phys. 56, 77 (1976).

логичная гигантская флуктуация не перебросит ее обратно в D_a. Мезосостояние, представленное пиком вероятности Δ_a, не может существовать вечно: его вероятность медленно убывает в пользу пика вблизи φ_c. Хотя φ_a является устойчивым решением макроскопического уравнения, связанное с ним мезосостояние, строго говоря, оказывается неустойчивым, а просто долгоживущим, и поэтому его следует называть *метастабильным*.

Действительно, в термодинамике метастабильное состояние (например, пересыщенный пар) существует потому, что оно является устойчивым по отношению к малым флуктуациям, но сравнительно маловероятная гигантская флуктуация может перевести его в другое макроскопическое состояние.

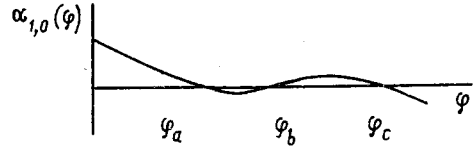

Рис. 33. Бистабильная система вблизи критической точки

Пока мы молчаливо подразумевали, что на самом деле гигантские флуктуации через φ_b редки. Это дает возможность различать два масштаба времени. Мелкомасштабное время определяется скоростью, при которой внутри Δ_a устанавливается равновесие (см. рис. 28, *б*).

Крупномасштабное время — это время, в течение которого происходит гигантская флуктуация. Оба масштаба четко разделяются, когда метастабильное стационарное распределение вблизи φ_a является узким по сравнению с расстоянием до φ_b.

Грубой мерой вероятности гигантской флуктуации является высота настоящего стационарного распределения P^s в φ_b. Точная формула для нее выводится в следующем параграфе. Для систем макроскопического размера это «время перехода» запросто может оказаться в несколько раз превышающим возраст Вселенной. Однако для отдельных молекул оно определяется множителем Аррениуса. Для систем, в которых области устойчивости и неустойчивости смазаны, как на рис. 33, трудно провести различие между двумя масштабами времени и такое разделение теряет свое значение. Это критическая область, ее мы обсудим в § 11.5.

Примечание. Подобную картину можно представить себе как случайное блуждание или диффузию в потенциале $V(x)$, определенном соотношением

$$V'(\varphi) = -\alpha_{1,0}(\varphi).$$

Потенциалы, соответствующие устойчивой, бистабильной или критической ситуации, изображены на рис. 34. Гигантскую флуктуацию можно представить себе как диффузию через потенциальный барьер. Однако эта наглядная картина не позволяет учесть разницу между V и U, о которых упоминалось в § 10.5 (см., в частности, (10.5.11)). Такая картина, например, наводит на мысль, что $P^s = \exp(-V/\theta)$, а это приводит к ошибочной идее, что φ_a и φ_c равновероятны, если $V(\varphi_a) = V(\varphi_c)$, но не тогда, когда $U(\varphi_a) = U(\varphi_c)$. В действительности картина справедлива только тогда, когда мы имеем дело с настоящей диффузией во внешнем поле с постоянным коэффициентом диффузии θ, описываемой (10.2.4).

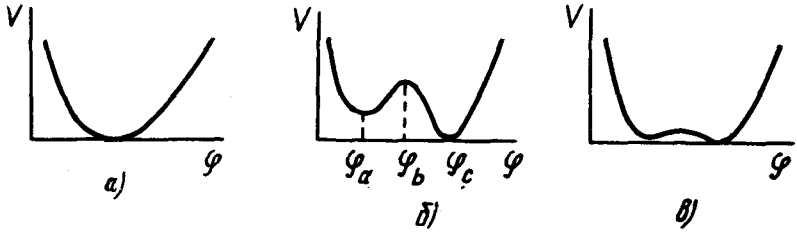

Рис. 34. Потенциал, при котором система имеет глобальную устойчивость (*а*); потенциал, при котором система бистабильна (*б*); потенциал для случая, изображенного на рис. 33, (*в*)

Вернемся к бистабильному случаю с хорошо разделяющимися масштабами времени и предположим, что система в начальный момент времени находится на участке вблизи границы D_a, т. е. вблизи макроскопически неустойчивой точки φ_b. Тогда на начальной стадии флуктуации через φ_b не являются невероятными. Это значит, что имеется непренебрежимая вероятность того, что система не будет придерживаться макроскопической траектории, ведущей в φ_a, а окажется вместо этого в φ_c. Тогда *вблизи точки макроскопической неустойчивости флуктуации приводят к макроскопическому эффекту.* Следовательно, уже нельзя разделить макроскопическую часть и флуктуирующий член, как мы это делали в (9.2.9), и флуктуации нельзя рассматривать как малое возмущение. Но все же, несмотря на это, можно вычислить «вероятность разделения», как показано в § 11.3.

Из всего сказанного можно сделать вывод, что мезосостояния, связанного со стационарным макросостоянием φ_b, не существует. Любое распределение вероятности в начальный момент времени, имеющее острый пик вблизи φ_b, эволюционирует во времени и не остается локализованным. Эволюция происходит в три стадии.

СТАДИЯ I. Распределение быстро расширяется, но флуктуации через φ_b еще невозможны.

СТАДИЯ II. Формируются два пика, разделенные впадиной вблизи φ_b. Обмена вероятностями через φ_b практически не происходит, и сосредоточенная в обоих пиках полная вероятность

$$\pi_a = \int_{-\infty}^{b} P(x,\ t)\,\mathrm{d}x, \quad \pi_c = \int_{b}^{\infty} P(x,\ t)\,\mathrm{d}x \tag{11.1.3}$$

практически не зависит от времени. Эти вероятности, конечно, определяются начальным распределением. Пики эволюционируют независимо, сначала расширяясь, а потом снова сужаясь по мере приближения к области, где кривые, изображенные на рис. 28, *б*, снова сходятся.

СТАДИЯ III. Пики обрели свою локальную равновесную форму вблизи φ_a и φ_c. Мезосостояние соответствует не одному макросостоя-

нию, а является суперпозицией двух, подобно (11.1.1). Это мезосостояние метастабильно, потому что на очень большом масштабе времени флуктуации через φ_b переносят вероятность между обоими пиками. Тогда π_a и π_c медленно изменяются в соответствии с уравнением

$$\dot{\pi}_a = -\dot{\pi}_c = -\frac{\pi_a}{\tau_{ca}} + \frac{\pi_c}{\tau_{ac}}. \tag{11.1.4}$$

Константа $1/\tau_{ac}$ является вероятностью того, что за единичное время система, находясь вблизи φ_c, в результате флуктуаций через φ_b попадает в область Δ_a в окрестности φ_a. В конце концов π_a и π_c достигнут своих стационарных значений, определяемых соотношением между π_a^s и π_c^s:

$$\pi_a^s/\tau_{ca} = \pi_c^s/\tau_{ac}. \tag{11.1.5}$$

Пример. Рассмотрим набор N диполей, каждый из которых может быть направлен либо вверх, либо вниз. Намагниченность пропорциональна $2n$, т. е. числу спинов, направленных вверх, минус число спинов, направленных вниз. Теория среднего поля Вейса дает (для четного числа N)

$$P_n^e = \text{const} \binom{N}{\frac{1}{2}N + n} \exp\left[\frac{2K}{N} n^2\right], \tag{11.1.6}$$

где K/N — постоянная ферромагнитного взаимодействия. Предполагается *, что n может совершить скачок на одну единицу с вероятностями за единичное время

$$g(n) = \left(\frac{1}{2}N - n\right) \exp\left[\frac{2K}{N} n\right] \quad (n \to n+1), \tag{11.1.7а}$$

$$r(n) = \left(\frac{1}{2}N + n\right) \exp\left[-\frac{2K}{N} n\right] \quad (n \to n-1). \tag{11.1.7б}$$

Число N служит параметром Ω, а макроскопическое уравнение для $n/N = \varphi$ имеет вид

$$\dot{\varphi} = \alpha_1(\varphi) = \left(\frac{1}{2} - \varphi\right) e^{2K\varphi} - \left(\frac{1}{2} + \varphi\right) e^{-2K\varphi}.$$

Ниже температуры Кюри, $K > 1$, имеется два устойчивых макросостояния $\pm\varphi_a$ и одно неустойчивое $\varphi = 0$. Если система при $t = 0$ находится в состоянии $\varphi = 0$, то с течением времени она под влиянием либо внешних возмущений, либо внутренних флуктуаций начинает двигаться к φ_a либо к $-\varphi_a$. Это называется нарушением симметрии: хотя и уравнение, и начальные данные симметричны, а несимметрично конечное макросостояние. С другой стороны, мезосостояние $P_n(t)$, определяемое начальным условием $P_n(0) = \delta_n 0$, симметрично при всех $t > 0$.

Примечание. Неустойчивость и бистабильность определяются как свойства макроскопического уравнения. Влияние флуктуаций сводится просто к тому, что они заставляют систему сделать выбор между той или иной макроскопически устойчивой точкой. Аналогично, неустойчивости Тейлора и ячейки Бенара являются следствиями макроскопических уравнений гидродинамики **.

---

* R. J. Glauber, J. Mathem. Phys. 4, 294 (1963); Th. W. Ruijgrok and J. A. Tjon, Physika 65, 539 (1973).

** S. Chandrasekhar, Hydrodynamic and Hydromagnetic Stability (Clarendon, Oxford, 1961); C. Normand, Y. Pomeau, and M. G. Velarde, Rev. Mod. Phys. 49,

Флуктуации просто делают выбор между двумя разными, но равновероятными макросостояниями и в наших примерах определяют положение вихрей или ячеек в пространстве (на практике над ними часто одерживают верх посторонние факторы, такие, как присутствие границ). Утверждения, что флуктуации сдвигают или разрушают бистабильность, неверны, потому что в любом случае на мезоскопическом уровне нет четкой границы между устойчивыми и неустойчивыми системами.

Вся информация. описывающая эволюцию системы, содержится, конечно, в основном кинетическом уравнении, но его редко удается решить явно *. Для бистабильных систем не существует удовлетворительной приближенной схемы, потому что макроскопическое поведение и флуктуации тесно переплетаются. Однако для поведения одношаговых систем, даже не решая основного кинетического уравнения, можно установить следующие три характерные черты.

1. Окончательное стационарное распределение можно найти явно из (6.3.8) **, и поэтому ответить на все вопросы, касающиеся стационарного мезосостояния. В частности, можно найти вероятности π_a^s, π_c^s обнаружить систему вблизи φ_a или φ_c, если ее возраст достаточен для установления равновесия между ними, т. е. это можно сделать по прошествии времени достаточно большого по сравнению с τ_{ca} и τ_{ac}.

2. Времена переходов τ_{ca}, τ_{ac} мы найдем в следующем параграфе.

3. Вероятности разделения π_a, π_c, встречающиеся на второй стадии, мы найдем в § 11.3 как функции начального положения системы.

Вообще говоря, явные выражения удается найти только для одношаговых процессов, и то только в одномерном случае. Для получения таких приближений предлагались разные методы ***. В следующей главе эти методы будут применены a fortiori к системам, которые непрерывно распределены в пространстве, так что стохастические переменные являются функциями координат. Неустойчивости в таких системах изучались в связи с фазовыми переходами в химических реакциях и популяциях, но здесь мы их рассматривать не будем ****.

Упражнение. Покажите, что произвольное, медленно меняющееся распределение P можно записать как суперпозицию гауссианов с одинаковыми дисперсиями.

Упражнение. С помощью (6.3.8) убедитесь в том, что для одношагового процесса (9.1.3) P^s имеет максимумы вблизи φ_a и φ_c и минимумы вблизи φ_b. Получите формулу для относительной величины максимумов.

Упражнение. При известном P отношение τ_{ca}/τ_{ac} фиксировано. Почему это не является примером детального равновесия? Значения τ_{ca} и τ_{ac} нельзя получить из P^s, потому что они имеют размерность времени.

Упражнение. Предположим $\alpha_{1,0}(\varphi)$ обладает A устойчивыми нулями, которые разделены $A-1$ неустойчивыми. Запишите уравнения, соответствующие (11.1.4) и (11.1.5).

---

581 (1977); E. L. Koschmieder in: Advances in Chemical Physics 26 (I. Prigogine and S. A. Rice eds., Wiley, New York, 1974) and in: Order and Fluctuations in Equilibrium and Nonequilibrium Statistical Mechanics (17th Intern. Solvay Conf.; G. Nicolis et. al. eds., Wiley, New York, 1981).

* Числовые вычисления приведены в работах: S. Grossman and R. Schranner, Z. Phys. B30, 325 (1978); W. Ebeling and L. Schimansky-Geier, Physica 98A, 587 (1979).

** Относительно приложений см. работы: K. J. McNeil and D. F. Walls, J. Statist. Phys. 10, 439 (1974); G. Nicolis and J. Turner, Physica 89 A, 326 (1977).

*** M. Mangel and D. Ludwig, SIAM J. Appl. Math. 33, 256 (1979); M. Mangel, idem 36, 544 (1979).

**** Stochastic Nonlinear Systems in Physics, Chemistry and Biology (L. Arnold and R. Lefever eds., Springer, Berlin, 1981).

Упражнение. Запишите точное стационарное решение для реакции Шлегла (9.3.6) и аппроксимируйте его для больших Ω с помощью интеграла, как в (10.5.9). Сравните результат с ошибочным выражением $\exp[-V/\theta]$.

Упражнение. Для бистабильной системы «относительная устойчивость» * обоих метастабильных мезосостояний при φ_a и при φ_c дается выражением

$$\frac{\pi_a^s}{\pi_c^s}=\left[\frac{U''(\varphi_c)}{U''(\varphi_a)}\right]^{1/2}\exp\left[-\frac{\Omega}{\theta}\{U(\varphi_a)-U(\varphi_c)\}\right].$$

Вычислите это выражение для реакции Шлегла, опуская члены порядка Ω^{-1}.

11.2. ВРЕМЯ ПЕРЕХОДА

Рассмотрим бистабильный одношаговый процесс, у которого $\alpha_{1,0}(\varphi)$ имеет вид, изображенный на рис. 32. Предположим, что система в начальном состоянии находится на одном из участков вблизи φ_a. Какова вероятность того, что за единичное время система попадает на один из участков в окрестности φ_c? Ответ не зависит от точного выбора начального участка, потому что система пробегает все участки в окрестности φ_a за время, намного меньшее того, которое мы хотим определить. В равной мере ответ не зависит и от точного выбора конечного участка. Однако с точностью до этой небольшой неопределенности мы имеем хорошо определенное время перехода τ_{ca}. Для удобства выберем начальный участок в точке φ_a, а конечный — в φ_c.

Задача, таким образом, сведена к проблеме первого прохождения или равносильной ей задаче с начальными данными с поглощающей границей в точке φ_c. Эта задача была решена в § 6.10 в том смысле, что распределение времени первого прохождения было выражено через решения основного кинетического уравнения с помощью соотношения (4.10.14). Однако настоящая задача имеет дополнительные особенности, связанные с тем, что основное кинетическое уравнение обладает нормированным стационарным решением p^s. Это означает, что время первого прохождения конечно. Такой вывод можно легко пояснить. Действительно, все участки посещаются за время, необходимое $p(t)$ для того, чтобы приобрести свой предельный вид p^s.

Поскольку наша система является бистабильной, среднее время первого прохождения из точки φ_a в φ_c совпадает с τ_{ca}. Для того чтобы показать это, рассмотрим уравнение (11.1.4), с помощью которого определяются τ_{ca} и τ_{ac}. Первый член в правой части описывает убывание π_a, обусловленное переходами из a в c. Второй член описывает переходы из c в a. Последние теперь исключены с помощью поглощающей границы в точке φ_c. В присутствии этой границы (11.1.4) сводится к

$$\dot{\pi}_a=-\pi_a/\tau_{ca}.$$

Следовательно, среднее время жизни, предшествующее поглощению,

* I. Procaccia and J. Ross, J. Chem. Phys. 67, 5558 and 5565 (1977).

дается выражением

$$\int_0^\infty t\,\dot{\pi}_a(t)\,\mathrm{d}t = \tau_{ca}.$$

Сейчас мы выведем явное выражение для τ_{ca}, используя результаты § 6.10. Наша система бистабильна, как в § 11.1, и мы дополнительно предположим, что она обладает нормированным стационарным решением p_n^s, так что каждое решение $p_{n,m}(t)$ стремится к p_n^s. Тогда преобразование Лапласа можно записать в виде

$$\hat{p}_{n,m}(s) = \int_0^\infty \{p_{n,m}(t) - p_n^s\}\,\mathrm{e}^{-st}\,\mathrm{d}t + \frac{1}{s}\,p_n^s.$$

При $t=\infty$ значение $\{\}$ обращается в нуль; следовательно, при s, стремящемся к нулю, интеграл остается конечным или по крайней мере стремится к бесконечности медленнее, чем $1/s$. Тогда

$$\hat{p}_{n,m}(s) = \frac{1}{s}\,p_n^s + \psi_{n,m}(s), \tag{11.2.1}$$

где $\psi_{n,m}(s) = O(s^{-1})$. Далее, из (6.10.14) следует, что распределение первого времени прохождения из точки φ_a в точку φ_c, которое мы обозначаем $f(t)$, обладает свойством

$$\int_0^\infty f(t)\,\mathrm{d}t = \hat{f}(0) = \lim_{s=0} \frac{s^{-1}p_c^s + \psi_{c,a}(s)}{s^{-1}p_c^s + \psi_{c,c}(s)} = 1. \tag{11.2.2}$$

Согласно (6.10.5), это означает, что система обладает единичной вероятностью рано или поздно достичь состояния c, как это уже упоминалось выше. В качестве побочного результата из (11.2.1) следует соотношение

$$\sum_n \psi_{n,m}(s) = 0, \tag{11.2.3}$$

что мы сейчас используем. Уравнение (11.2.2) утверждает, что f действительно является плотностью вероятности времени первого прохождения. Его среднее значение

$$\tau_{ca} = \int_0^\infty t f(t)\,\mathrm{d}t = -\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s}\hat{f}(s)\right]_{s=0} = -\hat{f}'(0). \tag{11.2.4}$$

Оно может быть бесконечным, но если ψ имеет конечную производную при $s=0$, то оно конечно. В этом случае, подставляя (11.2.1) в (6.10.14), дифференцируя по s и переходя к пределу $s \to 0$, получаем

$$\tau_{ca} = \frac{\psi_{c,c}(0) - \psi_{c,a}(0)}{p_c^s}. \tag{11.2.5}$$

Сейчас мы покажем, что это выражение можно вычислить явно, не решая полного основного кинетического уравнения. Для того чтобы найти $\psi_{n,m}(s)$, подставим (11.2.1) в преобразование Лапласа от основного кинетического уравнения (6.10.15):

$$-\delta_{nm}+p_n^s+s\psi_{n,m}(s)=\mathbf{W}\psi_{n,m}(s)=(\mathbf{E}-1)\,r_n\psi_{n,m}(s)+$$
$$+(\mathbf{E}^{-1}-1)\,g_n\psi_{n,m}(s).$$

Теперь, приравняв $s=0$, получим

$$-\delta_{nm}+p_n^s=\mathbf{W}\psi_{n,m}(0). \qquad (11.2.6)$$

Однако нам нужно знать величину $\psi_{n,c}(0)-\psi_{n,a}(0)\equiv x_n$, которая удовлетворяет соотношению

$$-\delta_{n,c}+\delta_{n,a}=\mathbf{W}\chi_n. \qquad (11.2.7)$$

Теперь задача сведена к обращению оператора $\mathbf{W}$ вместо его диагонализации.

Для того чтобы решить это уравнение, распишем его подробно:

$$0=(\mathbf{E}-1)\,r_n\chi_n+(\mathbf{E}^{-1}-1)\,g_n\chi_n \qquad (n\neq a,\ c), \qquad (11.2.8а)$$
$$1=r_{a+1}\chi_{a+1}+g_{a-1}\chi_{a-1}-(r_a+g_a)\,\chi_a, \qquad (11.2.8б)$$
$$-1=r_{c+1}\chi_{c+1}+g_{c-1}\chi_{c-1}-(r_c+g_c)\,\chi_c. \qquad (11.2.8в)$$

Первая строка, как обычно, дает

$$r_n\chi_n-g_{n-1}\chi_{n-1}=-J.$$

Это соотношение должно удовлетворяться для $-\infty<n\leqslant a$, для $a+1\leqslant n\leqslant b$ и для $b+1\leqslant n<\infty$, но константы J в каждом из этих трех интервалов могут быть разными. Ясно, однако, что в обоих наружных интервалах должно выполняться условие $J=0$, потому что χ_n обращается в нуль на бесконечности. Тогда

$$\chi_n=Ap_n^s \quad \text{для} \quad n\leqslant a, \qquad (11.2.9а)$$
$$\chi_n=Bp_n^s \quad \text{для} \quad n\geqslant c. \qquad (11.2.9б)$$

Отметим, что эти значения χ_n должны существовать при $n=a$ и $n=c$ для того, чтобы удовлетворялось уравнение (11.2.8а). Однако для внутренней области константа J не обязана обращаться в нуль. Далее, (11.2.8б) дает

$$1=(r_{a+1}\chi_{a+1}-g_a\chi_a)-(r_a\chi_a-g_{a-1}\chi_{a-1})=-J+0;$$

следовательно, оно удовлетворяется, если взять $J=-1$. То же самое значение J удовлетворяет (11.1.8в).

Тогда χ_n для $a\leqslant n\leqslant c$ определяется выражениями (6.3.13) и и (11.2.9):

$$\chi_n=\frac{1}{r_n}\left\{1+\frac{g_{n-1}}{r_{n-1}}+\frac{g_{n-1}g_{n-2}}{r_{n-1}r_{n-2}}+\ldots\right.$$
$$\left.\ldots+\frac{g_{n-1}\cdots g_{a+1}}{r_{n-1}\cdots r_{a+1}}\right\}+\frac{g_{n-1}g_{n-2}\cdots g_a}{r_nr_{n-1}\cdots r_{a+1}}AP_a^s. \qquad (11.2.10)$$

Для $n=c$ это выражение связывается со значением, определяемым (11.2.9б), что приводит к связи между A и B:

$$Bp_c^s=\frac{1}{r_c}\left\{1+\frac{g_{c-1}}{r_{c-1}}+\ldots+\frac{g_{c-1}\cdots g_{a+1}}{r_{c-1}\cdots r_{a+1}}\right\}+Ap_c^s.$$

Собирая результаты, получаем

$$\chi_n=\begin{cases} Ap_n^s & (n\leqslant a),\\ Ap_n^s+\frac{1}{r_n}\left\{1+\frac{g_{n-1}}{r_{n-1}}+\ldots+\frac{g_{n-1}\cdots g_{a+1}}{r_{n-1}\cdots r_{n+1}}\right\} & (a+1\leqslant n\leqslant c),\\ Ap_n^s+\frac{1}{r_c}\left\{1+\frac{g_{c-1}}{r_{c-1}}+\ldots+\frac{g_{c-1}\cdots g_{a+1}}{r_{c-1}\cdots r_{a+1}}\right\}\frac{p_n^s}{p_c^s} & (c+1\leqslant n).\end{cases}$$

Используя (6.3.8), это выражение можно переписать как

$$\chi_n=Ap_n^s+\begin{cases} 0 & (n\leqslant a), & (11.2.11а)\\ p_n^s\sum\limits_{\nu=a+1}^{n}\frac{1}{r_\nu p_\nu^s} & (a+1\leqslant n\leqslant c), & (11.2.11б)\\ p_n^s\sum\limits_{\nu=a+1}^{c}\frac{1}{r_\nu p_\nu^s} & (c+1\leqslant n). & (11.2.11в)\end{cases}$$

Окончательно константа A определяется требованием (11.2.3):

$$A=-\sum_{n=a+1}^{c}p_n^s\sum_{\nu=\alpha+1}^{n}\frac{1}{r_\nu p_\nu^s}-\sum_{n=c+1}^{\infty}p_n^s\sum_{\nu=a+1}^{c}\frac{1}{r_\nu p_\nu^s}. \qquad (11.2.12)$$

Для среднего времени прохождения нужно знать только значения χ_n при $n=c$:

$$\tau_{ca}=A+\sum_{\nu=a+1}^{c}\frac{1}{r_\nu p_\nu^s}=\sum_{n=-\infty}^{a}p_n^s\sum_{\nu=a+1}^{c}\frac{1}{r_\nu p_\nu^s}+\sum_{n=a+1}^{c-1}p_n^s\sum_{\nu=n+1}^{c}\frac{1}{r_\nu p_\nu^s}. \qquad (11.2.13)$$

Это и есть искомое явное выражение для времени перехода *.

Упражнение. Выведите из (11.2.13) иное выражение:

$$\tau_{ca}=\sum_{\nu=a+1}^{c}\frac{1}{r_\nu p_\nu^s}\sum_{-\infty}^{\nu-1}p_n^s. \qquad (11.2.14)$$

Упражнение. Покажите, что (11.2.13) практически совпадает с

$$\tau_{ca}=\left\{\sum_{-\infty}^{c}p_n^s\right\}\left\{\sum_{a}^{b}\frac{1}{r_\nu p_\nu^s}\right\}=\pi_a^s\sum_{a}^{c}\frac{1}{r_\nu p_\nu^s}, \qquad (11.2.15)$$

и выведите отсюда, что (11.1.5) удовлетворяется.

---

* G. H. Weiss, J. Statist. Phys. 24, 587 (1981).

Упражнение. Для того чтобы вывести (11.2.5), нет необходимости требовать существования $\psi'_{n,m}(0)$. Каково должно быть точное требование?

Упражнение. Выведите (11.2.6) непосредственно, т. е. не прибегая к использованию преобразования Лапласа, но интегрируя основное кинетическое уравнение по t.

Упражнение. Решение уравнения (11.2.7) равносильно нахождению $\mathbf{W}^{-1}$. Поскольку, однако, $\mathbf{W}$ имеет нулевое собственное значение, левая часть (11.2.7) должна удовлетворять дополнительному условию. Покажите, что это условие действительно удовлетворяется, а если нет, то какое место в наших вычислениях становится ошибочным?

Упражнение. Рассмотрите диффузионно контролируемую химическую реакцию (6.7.7). При $t=0$ молекула находится в связанном состоянии. Каково среднее время, в течение которого она достигает заданного участка $N>0$?

Упражнение. Второй множитель в (11.2.15) определяется в основном членами вблизи $\nu=b$. Они содержат величину $(p_b^s)^{-1}$, которая является множителем Аррениуса, упомянутым в § 7.5. В теории одномолекулярных реакций этот множитель подсказал идею «переходных комплексов», т. е. воображаемых промежуточных молекул, соответствующих неустойчивому состоянию b. При таком подходе считается, что реакция перехода из a в c происходит в две стадии. На первом шаге $a \longrightarrow b$, а затем $b \longrightarrow c$. Первый шаг целиком определяет скорость. Это привело некоторых авторов к созданию поглощающего барьера в b. Покажите, однако, что τ_{ba} составляет примерно половину τ_{ca}.

Упражнение. Найдите формулу для дисперсии времени первого прохождения *.

Упражнение. Рассмотрите одношаговый процесс с естественными границами при $n=0$ и $n=N$. Найдите выражение для среднего времени возвращения в состояние $n=0$. Это значит, что система стартует из $n=0$ и мы хотим дать среднее время, за которое произойдет первый переход из $n=1$ в $n=0$. Получите результат для аналога (4.5.4), но с непрерывным временем:

$$\dot{p}_n=(\mathbf{E}-1)(n/N)\,p_n+(\mathbf{E}^{-1}-1)(1-n/N)\,p_n.$$

Отметим, что это задача, обратная нахождению p_0^s **.

11.3. ВЕРОЯТНОСТЬ РАСЩЕПЛЕНИЯ

Вновь рассмотрим бистабильный одношаговый процесс, показанный на рис. 32. Предположим, что система в начальном состоянии находится на участке m между a и c; в основном мы будем интересоваться случаем, когда участок m расположен вблизи b. Какова вероятность того, что она будет захвачена D_a или D_c соответственно?

Этот вопрос, естественно, относится к быстрой эволюции, поскольку на больших масштабах времени между обеими областями существует обмен, который описывается формулой (11.1.4). На поставленный вопрос можно ответить, поместив в точках φ_a и φ_c поглощающие границы. Уравнение для вероятности $q_n(t)$ обнаружить систему на участке n имеет вид

$$\dot{q}=(\mathbf{E}-1)\,r_nq_n+(\mathbf{E}^{-1}-1)\,g_nq_n \quad (a+2\leqslant n\leqslant c-2), \tag{11.3.1а}$$

$$\dot{q}_{a+1}=r_{a+2}q_{a+2}-(r_{a+1}+g_{a+1})\,q_{a+1}, \tag{11.3.1б}$$

$$\dot{q}_{c-1}=q_{c-2}q_{c-2}-(r_{c-1}+q_{c-1})\,q_{c-1}. \tag{11.3.1в}$$

---

* В работе: D. T. Gillespie, Physica 101 A, 535 (1980),— приведены также числовые вычисления для реакции Шлегла.

** M. Kac, loc. cit.

Начальное условие есть $q_n(0)=\delta_{n,m}$. Сюда можно добавить a и c, как лимбо-состояния с вероятностями

$$\dot{q}_a = r_{a+1}q_{a+1}, \quad \dot{q}_c = r_{c-1}q_{c-1}. \tag{11.3.2}$$

Тогда вероятность a первого достижения для исходного одношагового процесса дается выражением

$$\pi_a = q_a(\infty) = r_{a+1}\int_a^\infty q_{a+1}(t)\,\mathrm{d}t. \tag{11.3.3}$$

Обозначим $\mathbf{V}$ оператор в правой части (11.3.1). Тогда формальное решение (11.3.1) с начальным условием $q_n(0)=\delta_{n,m}$ имеет вид

$$q_n(t) = (\mathrm{e}^{t\mathbf{V}})_{n,m}. \tag{11.3.4}$$

Из-за наличия поглощающих границ все собственные значения $\mathbf{V}$ отрицательны, а $q_n(t)$ экспоненциально стремится к нулю при t, стремящемся к бесконечности. Тогда интеграл в (11.3.3) дает

$$\int_0^\infty q_{a+1}(t)\,\mathrm{d}t = \left\{\int_0^\infty \mathrm{e}^{t\mathbf{V}}\,\mathrm{d}t\right\}_{a+1,\,m} = -(\mathbf{V}^{-1})_{a+1,\,m}. \tag{11.3.5}$$

Вероятность разделения можно найти теперь не решая основного кинетического уравнения: нужно просто вычислить оператор, обратный * к $\mathbf{V}$, т. е. нужно определить вектор q^f из уравнения

$$\sum_{n'=a+1}^{c-1} \mathbf{V}_{nn'}q^f_{n'} = -\delta_{n,m}. \tag{11.3.6}$$

Это решение можно интерпретировать как стационарное состояние, в котором постоянный единичный источник, находящийся на участке m, порождает стационарное течение в направлении поглощающих границ. Для того чтобы решить (11.3.6), рассмотрим области по обе стороны m отдельно. При $n\neq m$ из уравнения (11.3.6) следует, что q^f_n должно удовлетворять (11.3.1а) с нулем в левой части уравнения. Тогда

$$r_nq^f_n - g_{n-1}q^f_{n-1} = -J_a \qquad (a+2\leqslant n\leqslant m), \tag{11.3.7а}$$
$$r_nq^f_n - g_{n-1}q^f_{n-1} = -J_c \qquad (m+1\leqslant n\leqslant c-1). \tag{11.3.7б}$$

Поскольку J_a и J_c — постоянные потоки вероятности в каждой области, можно ожидать, что $J_a<0$, $J_c>0$. Подставляя $n=a+2$ в (11.3.7а), комбинируя результат с (11.3.1б) и используя (11.3.3) и (11.3.5), получаем

$$-J_a = r_{a+1}q^f_{a+1} = \pi_a.$$

---

* Этот прием уже использовался ранее, см.: L. Onsager, Phys. Rev. 54, 554 (1938).

Аналогично находим $J_c = \pi_c$. Для того чтобы найти q_n^f, решим (3.7) последовательными шагами. Для $a+1 \leqslant n \leqslant m$ в результате получаем

$$q_n^f = -J_a \left[\frac{1}{r_n} + \frac{g_{n-1}}{r_n r_{n-1}} + \frac{g_{n-1} g_{n-2}}{r_n r_{n-1} r_{n-2}} + \ldots + \frac{g_{n-1} g_{n-2} \cdots g_{a+1}}{r_n r_{n-1} \cdots r_{a+1}} \right]. \tag{11.3.8а}$$

Для $m \leqslant n \leqslant c-1$

$$q_n^f = J_c \left[\frac{1}{g_n} + \frac{r_{n+1}}{g_n g_{n+1}} + \frac{r_{n+1} r_{n+2}}{g_n g_{n+1} g_{n+2}} + \ldots + \frac{r_{n+1} r_{n+2} \cdots r_{c-1}}{g_n g_{n+1} \cdots g_{c-1}} \right]. \tag{11.3.8б}$$

И наконец, эти отдельные решения нужно сшить в точке m. Для того чтобы (11.3.8а) и (11.3.8б) имели одно и то же значение, для q_m^f должно выполняться условие

$$-\frac{J_c}{J_a} = \frac{\sum\limits_{\nu=a+1}^{m} \frac{g_{m-1} g_{m-2} \cdots g_\nu}{r_m r_{m-1} \cdots r_\nu}}{\sum\limits_{\nu=m}^{c-1} \frac{r_{m+1} r_{m+2} \cdots r_\nu}{g_m g_{m+1} \cdots g_\nu}} = \frac{\sum\limits_{\nu=a+1}^{m} p_m^s / (r_\nu p_\nu^s)}{\sum\limits_{\nu=m}^{c-1} p_m^s / (r_{\nu+1} p_{\nu+1}^s)}. \tag{11.3.9}$$

Кроме того, при $n = m$ должно выполняться (11.3.6):

$$r_{m+1} q_{m+1}^f + g_{m-1} g_{m-1}^f - (r_m + g_m) q_m^f = -1.$$

Из (11.3.7) видно, что это соотношение означает просто $J_c - J_a = 1$, т. е.

$$\pi_c + \pi_a = 1. \tag{11.3.10}$$

Это подтверждает, что частица должна попасть либо в a, либо в c. Следовательно, вероятность того, что она не окажется ни в одном из этих состояний, равна нулю.

Поэтому окончательный результат таков:

$$\pi_a = -J_a = \left(1 - \frac{J_c}{J_a}\right)^{-1} = \sum_{\nu=m+1}^{c} \frac{1}{r_\nu p_\nu^s} \Big/ \sum_{\nu=a+1}^{c} \frac{1}{r_\nu p_\nu^s}. \tag{11.3.11}$$

Примечание. Метод, использованный здесь, несколько отличается от примененного в предыдущем параграфе. Отличие связано с тем, что в предыдущем параграфе можно было применять формулу (6.10.14), описывающую время первого прохождения. Однако аналогичную формулу можно вывести и для настоящего случая. По аналогии с (6.10.11) запишем уравнение обновления:

$$\hat{p}_{n,m}(s) = \hat{q}_{n,m}(s) + \hat{f}_a(s)\, \hat{p}_{n,a}(s) + \hat{f}_c(s)\, \hat{p}_{n,c}(s),$$

где $\hat{f}_a$ и $\hat{f}_c$ — преобразования Лапласа от распределений времен первого прохождения через a и c. Отсюда следует, что

$$\hat{p}_{a,m}(s) = \hat{f}_a(s)\, \hat{p}_{a,a}(s) + \hat{f}_c(s)\, \hat{p}_{a,c}(s), \tag{11.3.12а}$$

$$\hat{p}_{c,m}(s) = \hat{f}_a(s)\, \hat{p}_{c,a}(s) + \hat{f}_c(s)\, \hat{p}_{c,c}(s). \tag{11.3.12б}$$

Эти два уравнения оказываются аналогом (6.10.14). Переходя к пределу $s \to 0$, получим $\hat{f}_a(0) + \hat{f}_c(0) = 1$, что совпадает с (11.3.10). Следующий порядок по s

дает отдельно $\hat{f}_a(0)$ и $\hat{f}_c(0)$. Мы предоставляем читателю провести эти выкладки и получить те же самые результаты, что и в тексте.

Упражнение. Убедитесь в том, что матрица (11.3.1) совместно с (11.3.2) является расщепляющейся **W**-матрицей.

Упражнение. В качестве модификации диффузионно контролируемой реакции (6.7.7) рассмотрите случайное блуждание на участках $n=1, 2, \ldots, N-1$ со связанным состоянием на каждом из концов $n=0, N$. Если частица в начальном состоянии находится на участке m, то какова вероятность попасть в связанное состояние на каждом из концов? Эта задача совпадает с задачей о вероятности выигрыша одного из двух игроков, подбрасывающих монету, когда каждый из них имеет ограниченный капитал, но неограниченное время.

Упражнение. Третий метод получения (11.3.11) аналогичен (5.9.8). Рассмотрите π_a и π_c как функции начального положения m и покажите *, что

$$\pi_c(m)=\frac{g_m}{g_m+r_m}\pi_c(m+1)+\frac{r_m}{g_m+r_m}\pi_c(m-1). \tag{11.3.13}$$

Это уравнение содержит транспонированную матрицу **W** и его следует решить с условием $\pi_c(m)=1$, $\pi_c(0)=0$.

Упражнение. Покажите, что для времен t, малых по сравнению со временем перехода, выполняется следующее тождество:

$$\pi_c(m)=\sum_n p_{n,m}(t)\,\pi_c(n).$$

Продифференцируйте его по времени и выведите таким путем (11.3.13).

Упражнение. Среднее время жизни тех частиц, которые попадают в a, составляет $\hat{f}_a'(0)/\hat{f}_a(0)$. Покажите, что эту величину также можно найти не решая основного кинетического уравнения.

Упражнение. Частица описывается одношаговым процессом на $-\infty<n<\infty$ с начальным положением $n=0$. Будем интересоваться вероятностью Z обнаружить частицу внутри интервала $0<N<n<M$, но нас также интересуют вероятности *последнего* прохода частицы через границы N или M, обозначенные Z^- и Z^+ соответственно. Такие задачи возникают при изучении воздействий флуктуаций тока на устройство с гистерезисом. Покажите, что эта ситуация описывается следующей системой уравнений:

$$Z^+=\sum_{N+1}^{M-1}p_n^+,\qquad Z^-=\sum_{N+1}^{M-1}p_n^-;$$

$$\dot{p}_n^+=(\mathbf{E}-1)\,r_np_n^++(\mathbf{E}^{-1}-1)\,g_np_n^++\delta_{nM}g_{M-1}p_{M-1}^-\quad(n>N+1),$$

$$\dot{p}_{N+1}^+=r_{N+2}p_{N+2}^+-(r_{N+1}+g_{N+1})\,p_{N+1}^+,$$

$$\dot{p}_n^-=(\mathbf{E}-1)\,r_np_n^-+(\mathbf{E}^{-1}-1)\,g_np_n^-+\delta_{nN}r_{N+1}p_{N+1}^+\quad(n<M-1),$$

$$\dot{p}_{M-1}^-=g_{M-2}p_{M-1}^-(r_{M-1}+g_{M-1})\,p_{M-1}^-.$$

11.4. ПРОБЛЕМА МАЛЬТУСА — ФЕРХЮЛЬСТА

Эта модель роста популяции уже упоминалась в § 6.9. Она служит еще одним примером того, что может случиться, когда нарушено условие (9.3.4). Сначала перепишем основное кинетическое уравнение (6.9.9) таким образом, чтобы выделить зависимость от полной

* I. Oppenheim, K. E. Shuler and G. H. Weiss, Physica 88 A, 191 (1977).

территории, занимаемой популяцией, или от полного количества Ω:

$$\dot{p}_n = \alpha(\mathrm{E}-1)np_n + \beta(\mathrm{E}^{-1}-1)np_n + \frac{\gamma}{\Omega}(\mathrm{E}-1)n(n-1)p_n. \quad (11.4.1)$$

Это отдельная система уравнений для $n \geqslant 1$. После ее решения получаем p_0 из соотношения

$$\dot{p}_0 = \alpha p_1. \quad (11.4.2)$$

Макроскопическое уравнение для плотности φ, как легко видеть, имеет вид (ср. с (6.9.7))

$$\dot{\varphi} = (\beta-\alpha)\varphi - \gamma\varphi^2. \quad (11.4.3)$$

Оно обладает одним устойчивым стационарным решением $\varphi_a = (\beta-\alpha)/\gamma$, соответствующим популяции макроскопического размера

$$n^s = \Omega\varphi_a = \Omega\frac{\beta-\alpha}{\gamma}. \quad (11.4.4)$$

Кроме того, имеется неустойчивое стационарное решение $\varphi_b = 0$. Все остальные решения стремятся к φ_a. Однако φ_a не является глобально устойчивым, потому что имеется одно решение $\varphi = \varphi_b$, которое не стремится к φ_a. Действительно, условие (9.3.4) не выполняется.

Мезоскопически нужно решить (11.4.1) с начальным условием $p_n(0) = \delta_{n,m}$. Если начальная популяция m-го порядка, можно использовать Ω-разложение. В результате, конечно, получается, что $p_n(t)$ представляет собой пик шириной порядка $\Omega^{1/2}$, положение которого определяется уравнением (11.4.3). Для больших t распределение p_n превращается в стационарное распределение Гаусса относительно (11.4.4).

С другой стороны, из (11.4.2) следует, что $n=0$ является поглощающим участком, поэтому уравнение (11.4.1) может иметь только одно стационарное решение $p_n^s = \delta_{n,0}$. Все другие решения основного кинетического уравнения стремятся к нему. Это означает, что с вероятностью единица популяции в конце концов вымрет! Симметрия моментов разрешает этот парадокс. Мезосостояние, связанное со стационарным микросостоянием (11.4.4), не является устойчивым, но оно метастабильно. В то время как численность популяции колеблется относительно значения (4.4), всегда существует вероятность, хотя и малая, того, что произойдет флуктуация, которая приведет популяцию к состоянию $n=0$, в котором она останется навсегда. На очень большом масштабе времени эта вероятность возрастает до единицы, так что действительно $p_n(t) \to \delta_{n,0}$, хотя и очень медленно; Ω-разложение описывает эволюцию на меньших временны́х масштабах, потому что в нем пренебрегается малой вероятностью этой большой флуктуации, поскольку члены типа $\mathrm{e}^{-c\Omega}$ не появляются в разложении.

Первый вопрос: как долго может просуществовать метастабильное мезосостояние? Или, формулируя это по-другому, можно поставить

задачу о вычислении вероятности за единичное время $1/\tau_{ba}$ того, что стационарная популяция вымрет в результате флуктуации.

Метод аналогичен изложенному в § 11.2, однако имеется разница, связанная с тем фактом, что в данном случае основное кинетическое уравнение имеет поглощающую границу. Поэтому помещать такую границу в φ_b нет необходимости, поскольку она уже существует. Достаточно взять начальную популяцию n^s и вычислить среднее время первого прохождения к границе $n=0$:

$$\tau_{ba}=\int_0^\infty t\dot{p}_0(t)\,\mathrm{d}t=\sum_{n=1}^{\infty}\int_0^\infty p_n(t)\,\mathrm{d}t. \tag{11.4.5}$$

С другой стороны, результат (11.2.13) нельзя использовать без модификации, потому что p_n^s обращается в нуль при $n>0$. Поэтому вычисления необходимо проделать заново.

Интегралы по времени в (11.4.5)—мы обозначим их $\bar{p}_n$—существуют для каждого $n>1$. Чтобы найти их, проинтегрируем (11.4.1) от $t=0$ до $t=\infty$:

$$-\delta_{n,a}=\alpha(\mathbf{E}-1)\,n\bar{p}_n+\beta(\mathbf{E}^{-1}-1)\,n\bar{p}_n+\frac{\gamma}{\Omega}(\mathbf{E}-1)\,n(n-1)\,\bar{p}_n. \tag{11.4.6}$$

Таким образом, задача снова сводится к нахождению оператора, обратного к $\mathbf{W}$, а не его полного спектрального разрешения.

Для того чтобы решить (11.4.6), введём удобные обозначения

$$r_n=\alpha_n+\frac{\gamma}{\Omega}n(n-1),\quad g_n=\beta n, \tag{11.4.7}$$

$$c_n=\frac{r_1r_2\cdots r_n}{g_1g_2\cdots g_n},\quad c_0=1. \tag{11.4.8}$$

Тогда для $n>a$ имеем

$$r_n\bar{p}_n-g_{n-1}\bar{p}_{n-1}=0 \tag{11.4.9}$$

и, следовательно,

$$\bar{p}_n=\frac{g_{n-1}g_{n-2}\cdots g_a}{r_nr_{n-1}\cdots r_{a+1}}\bar{p}_a=\frac{g_ac_a}{g_nc_n}\bar{p}_a\qquad(n>a).$$

Для $1\leqslant n\leqslant a$ имеем

$$r_n\bar{p}_n-g_{n-1}\bar{p}_{n-1}=-J,$$

тогда уравнение (11.4.6) для $n=a$ дает $-J=1$. Далее для $n=1$ имеем $\bar{p}_1=1/r_1$, потому что $g_0=0$. Следовательно,

$$\bar{p}_n=\frac{1}{r_n}\left[1+\frac{g_{n-1}}{r_{n-1}}+\frac{g_{n-1}g_{n-2}}{r_{n-1}r_{n-2}}+\ldots+\frac{g_{n-1}g_{n-2}\cdots g_1}{r_{n-1}r_{n-2}\cdots r_1}\right]=$$
$$=\frac{1}{g_nc_n}[c_{n-1}+c_{n-2}+\ldots+c_0]\qquad(1\leqslant n\leqslant a). \tag{11.4.10}$$

Подстановка (11.4.9) и (11.4.10) в (11.4.5) дает окончательный результат:

$$\tau_{ba}=\sum_{n=1}^{a}\frac{1}{g_n c_n}\sum_{\nu=0}^{n-1}c_\nu+\sum_{n=a+1}^{\infty}\frac{1}{g_n c_n}\sum_{\nu=0}^{a-1}c_\nu. \qquad (11.4.11)$$

Второй вопрос состоит в том, какова вероятность выживания для малой популяции. Как уже упоминалось, Ω-разложение можно использовать в тех случаях, когда начальная популяция порядка Ω. В этом разложении пренебрегается возможность флуктуации, приводящей к значению $n=0$, что является очень хорошим приближением для популяции макроскопического размера. Предположим, однако, что начальная популяция состоит из малого числа индивидуумов. Тогда Ω-разложение бесполезно и вероятность вымирания на начальной стадии не является пренебрежимой.

Чтобы вычислить ее, сформулируем нашу задачу как задачу о вероятности разделения: либо популяция вымрет в течение начальной стадии, либо она выживет и достигнет макроскопического размера. Тогда мы поместим границу при некотором макроскопическом значении $n=a$, для которого можно взять $\Omega\varphi^s$, и будем искать вероятности π_a и π_b того, что n достигнет в первый раз a или 0. Ответ дается (11.3.11), или в наших теперешних обозначениях

$$\frac{\pi_a}{\pi_b}=\sum_{\nu=1}^{m}c_{\nu-1}\Big/\sum_{\nu=m}^{a-1}c_\nu. \qquad (11.4.12)$$

Упражнение. Покажите, что вероятность того, что единственная бактерия породит макроскопическую популяцию, есть

$$\pi_a(1)=1-\frac{\alpha}{\beta}-\frac{\gamma}{\Omega}\frac{1}{\beta-\alpha}+O(\Omega^{-2}).$$

Упражнение. Подставьте (11.4.7) в (11.4.12) и покажите, что (11.4.12) нечувствительно к точному выбору a при условии, что a — порядка Ω и не должно быть намного больше, чем $\Omega\varphi^s$.

Упражнение. Найдите стационарное решение (11.4.1) (в котором постоянный поток вероятности из бесконечности компенсирует потери в p_0).

Упражнение. Если в течение одного поколения случится так, что будут рождаться только мужские особи, вид прекратит свое существование. Оцените вероятности того, что это случится с homo sapiens в течение ближайших 6000 лет. Сравните результат с вероятностью того, что вид не переживет своей начальной стадии, как, например, в случае, если бы Адам и Ева имели только сыновей.

11.5. КРИТИЧЕСКИЕ ФЛУКТУАЦИИ

Пусть φ_c — стационарное макросостояние, $\alpha_{1,0}(\varphi_c)=0$. Мы видели, что φ_c по крайней мере локально устойчиво, если $\alpha'_{1,0}(\varphi_c)<0$, и неустойчиво, если $\alpha'_{1,0}(\varphi_c)>0$. Если $\alpha'_{1,0}(\varphi_c)=0$, то, вообще говоря, оно может быть неустойчиво, но может быть и устойчиво. Напри-

мер, если в φ_c

$$\alpha_{1,0} = \alpha'_{1,0} = \alpha''_{1,0} = 0, \text{ то } \alpha'''_{1,0} < 0. \tag{11.5.1}$$

Тот факт, что такое φ_c устойчиво, сразу виден из рис. 35. Это ясно также из сравнения с рис. 32, если понимать, что данную ситуацию можно рассматривать как предельный случай, в котором все три стационарных состояния φ_a, φ_b, φ_c совпадают.

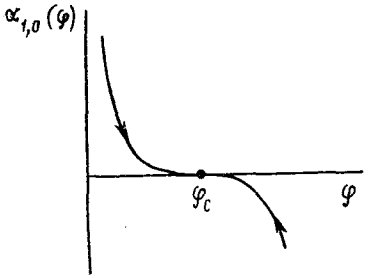

Рис. 35. Макроскопическая скорость в критической точке

Таким образом, название *критическая точка* подходит к макросостоянию, обладающему свойствами (11.5.1). Многие его особенности имеют общие черты с критическими точками в равновесной статистической механике.

Устойчивость критической точки φ_c намного слабее, чем у обычных устойчивых точек φ_a и φ_c, показанных на рис. 32. Этого нельзя обнаружить из уравнения для вариации (9.3.5), а нужно включить высшие порядки $\delta\varphi$. Действительно, для $\varphi - \varphi_c = \delta\varphi$, согласно (11.5.1), имеем

$$\frac{d}{dt}\delta\varphi = -\frac{1}{6}\,|\alpha'''_{1,0}(\varphi_c)|\,(\delta\varphi)^3 + O(\delta\varphi^4).$$

Когда начальное значение $\delta\varphi$ достаточно мало и равно $\delta\varphi_0$ при $t = t_0$, а последним членом можно пренебречь, имеем решение

$$\delta\varphi = \frac{\delta\varphi_0}{\sqrt{1 + \frac{1}{3}\,|\alpha'''_{1,0}(\varphi_c)|\,(t - t_0)}}. \tag{11.5.2}$$

Отсюда следует, что $\delta\varphi$ действительно стремится к нулю, но только не экспоненциально, а как $t^{-1/2}$. *Это критическое замедление макроскопического приближения к равновесию.*

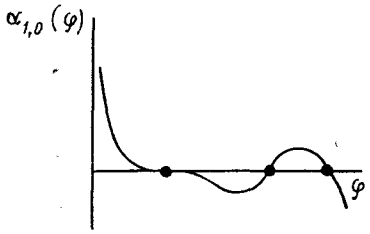

Рис. 36. Макроскопическая скорость в метастабильной критической точке

Мы хотим вычислить флуктуации относительно φ_c, т. е. мы хотим вычислить мезосостояние, связанное с макросостоянием φ_c. В ситуации, изображенной на рис. 35, это мезосостояние совпадает со стационарным решением P^s основного кинетического уравнения, потому что φ_c является единственным стационарным макросостоянием (если бы были другие, как на рис. 36, то φ_c было бы метастабильным и P^s имело бы другой максимум или, возможно, всюду было бы равно нулю, как в задаче с популяцией из предыдущего параграфа). И все же, несмотря на это, мы применим Ω-разложение, которое не отличается для устойчивого и метастабильного мезосостояний.

Разложение (9.2.6) больше не проходит в качестве отправной точки, потому что, согласно (11.5.1), члены, записанные в первой строке слагаемого в правой части, все равны нулю. И только член $\alpha'''_{1,0}$, не вписанный и имеющий порядок Ω^{-1}, не равен нулю. Но этот член несет ответственность за ограничение флуктуации, которые вызываются членами, выписанными во второй строке. Наш вывод состоит в том, что флуктуации будут пропорциональны высшим степеням Ω, что отличается от предсказания (9.2.9). *Это и есть эффект усиления флуктуаций вблизи критической точки, как в критической опалесценции.*

Мы тоже теперь попробуем вместо (9.2.9) записать

$$x = \Omega\varphi_c + \Omega^{\mu\xi}. \tag{11.5.3}$$

Константа μ пока не определена и является варьируемым параметром, однако она ограничена условием $\mu < 1$. Преобразованное основное кинетическое уравнение имеет вид

$$\frac{\partial\Pi}{\partial\tau} = -\Omega^{1-\mu}\frac{\partial}{\partial\xi}\alpha_{1,0}(\varphi_c+\Omega^{\mu-1}\xi)\Pi + \frac{1}{2}\Omega^{1-2\mu}\frac{\partial^2}{\partial\xi^2}\alpha_{2,0}(\varphi_c+\Omega^{\mu-1}\xi)\Pi + \ldots =$$
$$= -\frac{1}{3!}\Omega^{2\mu-2}\alpha'''_{1,0}(\varphi_c)\frac{\partial}{\partial\xi}\xi^3\Pi + \frac{1}{2}\Omega^{1-2\mu}\alpha_{2,0}(\varphi_c)\frac{\partial^2}{\partial\xi^2}\Pi + \ldots. \tag{11.5.4}$$

Понятно, что, для того чтобы член, порождающий флуктуацию, выписанный во второй строке, и ограничивающий член, выписанный в первой строке, имели одинаковый порядок величины *, нужно взять $\mu = 3/4$.

В результате опять получается уравнение Фоккера—Планка, но теперь уже нелинейное:

$$\frac{\partial\Pi}{\partial\tau} = \Omega^{-1/2}\left[\frac{1}{6}\left|\alpha'''_{1,0}(\varphi_c)\right|\frac{\partial}{\partial\xi}\xi^3\Pi + \frac{1}{2}\alpha_{2,0}(\varphi_c)\frac{d^2\Pi}{d\xi^2}\right]. \tag{11.5.5}$$

Таким образом, мы получили, что вблизи критической точки флуктуации имеют порядок $\Omega^{3/4}$, а не $\Omega^{1/2}$. Кроме того, множитель $\Omega^{-1/2}$ показывает, что их время релаксации увеличивается на величину порядка $\Omega^{1/2}$. Далее, их распределение Π не является гауссовым.

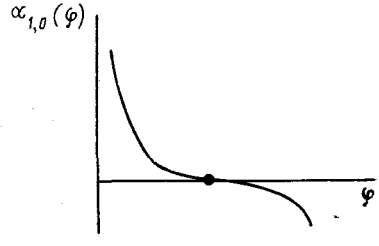

Рис. 37. Макроскопическая скорость в области немного выше критической точки

Это разложение по степеням $\Omega^{-3/4}$ справедливо только *в самой критической точке*. Если изменить параметр так, чтобы получилась ситуация, изображенная на рис. 37, т. е. оказаться слегка «выше критической точки», то исходное разложение по параметру $\Omega^{-1/2}$ нужно использовать независимо от того, насколько близко мы подходим к критической точке.

* R. Kubo, K. Matsuo and K. Kitahara, J. Statist. Phys. 9,51 (1973); [8].

По мере приближения к критической точке разложение по параметру $\Omega^{-1/2}$ становится менее полезным, поскольку, для того чтобы обеспечить малость высших членов, нужны все большие и большие значения, но формально оно является правильным асимптотическим разложением.

Тот факт, что асимптотическое разложение в критической точке меняется скачком, называют *явлением Стокса**. Для получения разложения, пригодного как в самой критической точке, так и в ее окрестности, необходимы другие методы**.

Упражнение. Покажите, что стационарное решение с $\alpha_{1,0}(\varphi)=0$, $\alpha'_{1,0}(\varphi)=0$, $\alpha''_{1,0}(\varphi)\neq 0$ неустойчиво.

Упражнение. Проверьте, что члены, опущенные в (11.5.4), имеют более высокий порядок, чем удержанные.

Упражнение. Найдите стационарное решение (11.5.5) и убедитесь, что оно не гауссово.

Упражнение. Повторите рассуждение для случая, когда все производные от $\alpha_{1,0}$ вплоть до $\alpha^{(a)}_{1,0}(\varphi_c)$ обращаются в нуль.

Упражнение. Найдите равновесные флуктуации в критической точке для реакции Шлегла (9.3.6).

11.6. ДИФФУЗИЯ В ПОТЕНЦИАЛЕ С ДВУМЯ ЯМАМИ

В этом разделе мы рассмотрим другой вид бистабильности, аналогичный, но не тождественный тому, который рассматривался до сих пор в связи с одношаговыми процессами. Возьмем квазилинейное уравнение Фоккера—Планка (10.2.4) для диффузии во внешнем потенциале $U(x)$:

$$\frac{\partial P(x,\ t)}{\partial t}=\frac{\partial}{\partial x}U'(x)P+\theta\frac{\partial^2 P}{\partial x^2}. \qquad (11.6.1)$$

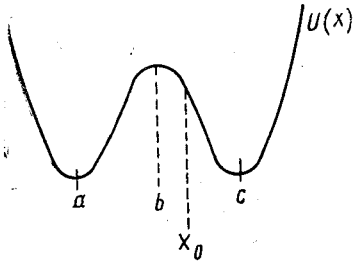

Рис. 38. Симметричный бистабильный потенциал

Предположим, что $U(x)$—бистабильный потенциал, имеющий вид, изображенный на рис. 38. Для некоторых частных видов $U(x)$ это уравнение было решено явно***. Однако в общем случае явные решения, за исключением стационарного, неизвестны.

Для начала можно применить такое же разложение, как в гл. 9, но параметром разложения, как в § 10.5, будет служить θ, а не Ω^{-1}. Вместо макроскопического уравнения мы получим теперь *низкотемпературное детерминистическое уравнение*:

$$\dot{x}=-U'(\mathbf{x}). \qquad (11.6.2)$$

* P. M. Morse and H. Feshbach, Methods of Theoretical Physics I (McGraw-Hill, New York, 1953), p. 609.

** H. Dekker, Physica 103A, 55 and 80 (1980).

*** N. G. van Kampen, J. Statist. Phys. 17, 71 (1977); H. Brand and A. Schenzle, Phys. Lett. 68A, 427 (1978); M. Morsch, H. Risken and H. D. Vollmer, Z. Phys. B32, 245 (1979); M. Razavy, Phys. Lett. 72A, 89 (1979).

Это приближение является хорошим, когда выполняется условие устойчивости $U''(x) > 0$, но в окрестности неустойчивой точки b на рис. 38 это уже не так. Вблизи этой точки решения уравнения (11.6.2) теряют физический смысл, потому что их уже нельзя отличить от флуктуации, как мы это видели в § 11.1. В этом случае решения уравнения (11.6.1) с начальным условием $\delta(x-x_0)$ при x_0, близких к b, нельзя получить как решения (11.6.2) плюс малые флуктуации. Однако явные выражения для времен перехода τ_{ca} и τ_{ac}, а также для вероятностей разделения $\pi_a(x_0)$ и $\pi_c(x_0)$* можно получить с помощью того же примера, что использован в § 11.2 и 11.3.

И опять τ_{ca} можно отождествить со средним временем первого прохождения частицы, первоначально находящейся в a, а затем диффундирующей в c. Соответственно мы ставим поглощающую границу в c и записываем преобразование Лапласа от уравнения (11.6.1):

$$-\delta(x-x_0)+s\hat{P}(x,\ s\,|\,x_0)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left\{U'(x)+\theta\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right\}\hat{P}(x,\ s\,|\,x_0). \qquad (11.6.3)$$

Полагаем $\hat{P}(x,\ s\,|\,x_0)=s^{-1}\hat{P}^s(x)+\psi(x,\ s\,|\,x_0)$ и используем уравнение обновления для того, чтобы получить аналог (6.10.14). В результате получаем

$$\tau_{ca}=-f'(0)=\frac{\psi(c,\ 0\,|\,c)-\psi(c,\ 0\,|\,a)}{P^s(c)}. \qquad (11.6.4)$$

При $s=0$ уравнение (11.6.3) можно решить явно. Подставив результат в (11.6.4), по аналогии с (11.2.14) получим

$$\tau_{ca}=\frac{1}{\theta}\int\limits_a^c\frac{\mathrm{d}x}{P^s(x)}\int\limits_{-\infty}^x P^s(x')\,\mathrm{d}x'. \qquad (11.6.5)$$

Точно так же, повторив вычисления § 11.3, по аналогии с (11.3.11) для вероятности разделения в уравнении диффузии (11.6.1) получим

$$\pi_a(x_0)=\int\limits_{x_0}^c\frac{\mathrm{d}x}{P^s(x)}\Big/\int\limits_a^c\frac{\mathrm{d}x}{P^s(x)}=\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\int\limits_b^{x_0}\mathrm{e}^{U(x)/\theta}\,\mathrm{d}x\Big/\int\limits_b^c\mathrm{e}^{U(x)/\theta}\,\mathrm{d}x. \qquad (11.6.6)$$

Упражнение. Получите (11.6.5), не применяя преобразования Лапласа, а путем непосредственного интегрирования основного кинетического уравнения по t от нуля до бесконечности, как при вычислении вероятности разделения в § 11.3.

Упражнение. Покажите, что (11.6.5) практически дает

$$\tau_{ca}=\frac{\pi_a^s}{\theta}\int\limits_a^c\frac{\mathrm{d}x}{P^s(x)} \qquad (11.6.7)$$

и, следовательно, (11.1.5) удовлетворяется.

---

* Аналогичные задачи в случае большего числа измерений изучены в работе: Z. Schuss, Theory and Applications of Stochastic Differential Equations (Wiley, New York, 1980).

Упражнение. Предположим, что $U(x)$ имеет последовательность минимумов* $a, b, c, \ldots$, но $U(\pm\infty)=+\infty$, что обеспечивает нормировку $P^s(x)$ Время перехода τ_{cb} нельзя отождествить со средним временем первого прохождения из b в c. Однако можно найти все времена переходов с помощью (11.1.5):

$$\frac{\tau_{cb}}{\pi_b^s}=\frac{1}{\theta}\int_b^c \frac{dx}{P^s(x)}. \tag{11.6.8}$$

Упражнение. В потенциале из предыдущего упражнения можно также вычислить τ_{cb}, поместив отражающую границу между a и b, а затем вычислив время первого прохождения из b в c. Покажите, что в результате снова получится (11.6.8).

Упражнение. Пусть U имеет три минимума: a, b, c. Предположим также, что барьер между b и c намного выше барьера между a и b. Тогда

$$\dot{\pi}_c=-\frac{\pi_c}{\tau_{bc}}+\frac{\pi_a+\pi_b}{\tau},$$

$$\tau=\tau_{cb}\tau_{ba}\left(\frac{1}{\tau_{ab}}+\frac{1}{\tau_{ba}}\right).$$

Упражнение. Молекула A диффундирует в растворе, содержащем одну заданную молекулу B. Когда A попадает на сферу радиуса b вокруг B, происходит реакция, в результате которой молекула исчезает. Покажите, что, когда A в начальном положении находится на расстоянии r_0, вероятность того, что она прореагирует, а не уйдет в бесконечность, есть b/r_0.

Другой путь анализа (11.6.1) состоит в сведении его к задаче на собственные значения, как в § 5.7. Положим

$$P(x,\ t)=\Phi(x)\,e^{-\lambda t},$$

$$\theta\frac{d^2\Phi}{dx^2}+\frac{d}{dx}U'(x)\Phi(x)=-\lambda\Phi(x). \tag{11.6.9}$$

Собственными значениями являются такие значения $-\lambda$, для которых соответствующее значение обладает конечной нормой в смысле скалярного произведения (5.7.4):

$$(\Phi,\Phi)=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\Phi(x)^2}{P^s(x)}\,dx<\infty.$$

Одно собственное значение есть $\lambda_0=0$ с $\Phi_0(x)=P^s(x)$. Все другие собственные значения $-\lambda_n$ $(n=1,\ 2,\ 3,\ \ldots)$ действительно отрицательны и невырождены, а соответствующим образом нормированные собственные функции $\Phi_n(x)$ удовлетворяют условию

$$(\Phi_n,\ \Phi_n)=\delta_{n,m}\ (n,\ m=0,\ 1,\ 2,\ \ldots).$$

Решение уравнения (11.6.1) имеет вид

$$P(x,\ t\,|\,x_0,\ 0)=P^s(x)+\sum_{n=1}^{\infty}\frac{\Phi_n(x_0)}{P^s(x_0)}\Phi_n(x)\,e^{-\lambda_n t}. \tag{11.6.10}$$

---

* Такие потенциалы изучались в связи с переходами спираль—клубок в гетерополимерах: De Gennes P. G., J. Statist. Phys. 12, 463 (1975).

Эти утверждения справедливы для любого $U(x)$, достаточно быстро стремящегося к бесконечности при $|x| \to \infty$.

Для симметричного бистабильного потенциала U, изображенного на рис. 38, из квантовой механики хорошо известна следующая дополнительная информация. Основное состояние Φ_0 симметрично, имеет два горба вблизи a и c, очень близко к нулю в b. Следующая собственная функция Φ_1 антисимметрична, равна нулю в точке b, имеет практически те же самые горбы, что и Φ_0, но только один из них с отрицательным знаком, скажем, горб вблизи a. Ее собственное значение λ_1 очень близко к основному уровню $\lambda_0 = 0$. Вторая собственная функция Φ_2 симметрична и имеет два нуля; λ_2 много больше, чем λ_1. Следовательно, для $t \gg \lambda_2^{-1}$ точная формула (11.6.10) приближенно может быть записана в виде

$$P(x,\ t \mid x_0,\ 0) \approx P^s(x) + \frac{\Phi_1(x_0)}{P^s(x_0)} \Phi_1(x) e^{-\lambda_1 t}.$$

Из этой формулы, во-первых, следует, что

$$\pi_+(x_0) = \int_b^\infty P(x,\ t \mid x_0,\ 0)\, dx = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \frac{\Phi_1(x_0)}{P^s(x_0)},$$

а во-вторых, что $\tau_{ac} = 1/\lambda_1$. К сожалению, имеется несколько усложнений в связи с тем, что (11.6.9) немного отличается от уравнения Шредингера. Его можно преобразовать в него, полагая, как в (8.7.15), что

$$\Phi(x) = \varphi(x) \exp[-U(x)/(2\theta)].$$

Тогда (11.6.9) превращается в

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} + \frac{1}{\theta}\{\lambda - V(x)\}\varphi = 0,$$

$$V(x) = \frac{1}{4\theta}\left(\frac{dU}{dx}\right)^2 - \frac{1}{2}\frac{d^2U}{dx^2}.$$

Отсюда видно, что связь между U и потенциалом V в уравнении Шредингера не является простой, в частности оказывается, что бистабильный U может привести к потенциалу V с тремя минимумами. Утверждения относительно собственных значений остаются в силе, однако не столь очевидны, как это предполагалось выше. Тем не менее таким путем можно получить явные значения для $\lambda_+(x_0)$ и для τ_{ac}. Несимметричные потенциалы также можно исследовать с помощью разложения по собственным функциям *.

---

* H. Tomita, A. Ito and H. Kidachi, Prog. Theor. Phys. 56, 786 (1976); K. Matsuo, J. Statist. Phys. 16, 169 (1977); R. S. Larson and M. D. Kostin, J. Chem. Phys. 69, 4821 (1978); B. Caroli, C. Caroli and B. Roulet, J. Statist. Phys. 21, 415 (1979).

Упражнение. Покажите, что спектр собственных значений для уравнения (11.6.9) действительно является дискретным, если $U_x \sim |x|^\alpha$ при $|x| \to \infty$, где $\alpha > 1$.

Упражнение. Обоснуйте утверждение, что $\tau_{ac} = 1/\lambda_1$.

Упражнение. Потенциал $U(x) = -\frac{1}{2}ax^2 + \frac{1}{4}x^4$ является бистабильным, когда $a > 0$. Покажите, что соответствующий потенциал $V(x)$ также бистабилен, когда $a^2 < 6\theta$, но имеет три минимума, когда $a^2 > 6\theta$.

Упражнение. Время, за которое частица достигает точки c, стартуя из x_0, предлагалось в качестве соответствующего параметра для изучения диффузии в бистабильном потенциале *. Покажите, что его среднее значение и дисперсию можно найти точно, выразив их через интегралы от P^s.

11.7. ПАРАБОЛИЧЕСКОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ

Вычисления, проделанные в предыдущем параграфе, и даже сами определения времени перехода и вероятности разделения предполагают, что высота потенциального барьера достаточно велика, так что P^s очень мала в неустойчивой точке. Точнее, время перехода τ_{ca} должно быть значительно больше времени, необходимого для установления локального равновесия в каждой отдельной яме. Так ли это в действительности, зависит от функции U и от значения θ. Для любого фиксированного бистабильного U этого можно добиться всегда, выбирая малое θ. Однако в этом пределе возможны и другие упрощения.

Рассмотрим выражение (11.6.7) для τ_{ca}. Оно представляет собой интеграл от положительной функции с пиком при $x = b$, который становится очень острым при малых θ. В окрестности этого пика имеем

$$P_x^s = \frac{1}{Z} e^{-U(x)/\theta} = \frac{1}{z} \exp\left[-\frac{U(b)}{\theta} + \frac{|U''(b)}{2\theta}(x-b)^2\right]$$

с нормирующим множителем

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-U(x)/\theta}\, dx. \tag{11.7.1}$$

Тогда для (11.6.7) получаем

$$\tau_{ca} = \frac{\pi_a^s}{\theta} Z e^{U(b)/\theta} \sqrt{\frac{2\pi\theta}{|U''(b)|}} \{1 + O(\theta)\}. \tag{11.7.2}$$

Подынтегральное выражение в (11.7.1) имеет два пика в точках a и c; следовательно,

$$Z = e^{-U(a)/\theta} \sqrt{\frac{2\pi\theta}{U''(a)}} + e^{-U(c)/\theta} \sqrt{\frac{2\pi\theta}{U''(c)}}. \tag{11.7.3}$$

Если $U(c) > U(a)$, второй член экспоненциально мал по сравнению с первым и по сравнению с поправками, имеющими относительный порядок θ. Этими поправками мы пренебрегли в первом

* F. T. Arecchi and A. Politi, Phys. Letters 77A, 312 (1980).

члене. Значит, удерживая оба члена, мы нарушаем условие совместности, если только $U(a)$ не равно $U(c)$. Поэтому мы предположим, что выполняется условие $U(a)=U(c)$, и для удобства возьмем симметричную функцию $U(x)$, чтобы оба члена в (11.7.3) оказались равными, тогда (11.7.2) дает

$$\tau_{ca}=\frac{2\pi}{\sqrt{U''(a)|U''(b)|}}\exp\left[\frac{U(b)-U(a)}{\theta}\right]. \qquad (11.7.4)$$

Мы видим, что получился множитель Аррениуса, но множитель, стоящий перед ним, также получен явно и выражается через потенциал.

Аналогичные приближения можно применить к (11.6.6) и в результате получить

$$\pi_a(x_0)=\frac{1}{2}-\sqrt{\frac{|U''(b)|}{2\pi\theta}}\int_b^{x_0}\exp\left[-\frac{U(b)-U(x)}{\theta}\right]dx. \qquad (11.7.5)$$

Если $|x_0|$ мало, то это сводится к

$$\pi_a(x_0)=\frac{1}{2}-\sqrt{\frac{|U''(b)|}{2\pi\theta}}\int_b^{x_0}\exp\left[-\frac{1}{2\theta}|U''(b)|(x-b)^2\right]dx=$$

$$=\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\operatorname{erf}\left[\sqrt{\frac{|U''(b)|}{2\theta}}(x_0-b)\right]. \qquad (11.7.6)$$

Упражнение. Два члена в (11.7.3) представляют собой $Z\pi_a^s$ и $Z\pi_c^s$ соответственно. Найдите физическую интерпретацию их отношения π_a^s/π_c^s для случая, когда $U(a)\neq U(c)$.

Упражнение. Для симметричного потенциала при $x_0>b$ имеем

$$\lim_{t\to\infty}\lim_{\theta\to 0}P(x,\ t\,|\,x_0,\ 0)=\delta(x-c),$$

$$\lim_{\theta\to 0}\lim_{t\to\infty}P(x,\ t\,|\,x_0,\ 0)=\frac{1}{2}\delta(x-a)+\frac{1}{2}\delta(x-c).$$

Запишите аналогичные формулы для асимметричного U.

Упражнение. Примените приближенный метод изложенный в тексте непосредственно к (11.6.5), а не к (11.6.7), и получите таким способом результат (11.7.4).

Упражнение. При определении τ_{ca}, с самого начала предполагается, что оно значительно превосходит время, необходимое для установления локального равновесия в каждой яме, которое можно взять равным $[U''(a)]^{-1}$. Тогда (11.7.4) предполагает θ настолько малым, что

$$\exp\left[\frac{U(b)-U(a)}{\theta}\right]\gg\left[\frac{|U''(b)|}{U''(a)}\right]^{1/2}\sim 1.$$

Таким образом, множитель Аррениуса имеет смысл только тогда, когда он велик.

Эти вычисления применимы в пределе $\theta\to 0$, когда $U(x)$ фиксировано. Чтобы понять, дают ли эти вычисления достаточно хорошее приближение при любом заданном значении θ, не равном нулю, нужно глубже разобраться в этом вопросе.

Рассмотрим приближение (11.7.4) для времени перехода. В это выражение входят только некоторые характеристики функции $U(x)$, такие, как высота потенциального барьера и вторые производные в точках минимума и максимума. Это означает, что вблизи этих точек потенциал аппроксимируется параболой, что равносильно линеаризации функции $U'(x)$ в (11.6.1). Мы будем называть это *параболическим приближением* (а не линеаризацией, потому что это больше соответствует сути дела).

Пусть l_a — характерный размер области вблизи точки a, в которой функцию $U(a)$ можно заменить параболой. В большинстве случаев можно взять меньшее из значений

$$\begin{aligned} &l_a \sim |U''(a)/U'''(a)| \quad \text{или} \\ &l_a \sim |U''(a)/U^{\mathrm{IV}}(a)|^{1/2}. \end{aligned} \tag{11.7.7}$$

Тогда выражение (11.7.3) справедливо, если выполняется условие

$$U''(a)\, l_a^2 > \theta. \tag{11.7.8}$$

Пусть l_b — аналогичный характерный размер окрестности b; тогда условие справедливости (11.7.4) требует выполнения неравенства

$$|U''(b)|\, l_b^2 > \theta. \tag{11.7.9}$$

Итак, мы выписали два условия, выполнение которых необходимо для того, чтобы выражение (11.6.7) аппроксимировать формулой (11.7.4).

Выражение (11.7.5) также включает приближение, основанное на условии (11.7.9). В (11.7.6) интеграл, встретившийся в (11.7.5), вновь преобразуется с использованием параболического приближения для U. Это оправдано, когда

$$x_0 - b < l_b. \tag{11.7.10}$$

Однако (11.7.6) можно использовать даже тогда, когда все $x_0 > b$, потому что для $x_0 - b > l_b$ это то же самое условие.

Неравенство (11.7.9) показывает, что $\pi_a(x_0)$ все равно оказывается практически равным нулю независимо от того, используется ли выражение (11.7.5) или (11.7.6).

Итак, мы приходим к выводу, что *параболическое приближение для U можно применять для вероятности разделения, когда выполняется* (11.7.9), *и для вероятности перехода, когда выполняются условия* (11.7.8) *и* (11.7.9).

Сузуки* предложил более формальный путь для введения параболического приближения. Мы даем упрощенную версию. Сделаем замену переменной в (11.6.1), подставив в нее $y = \theta^{-1/2}(x - b)$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(y,\ t)}{\partial t} &= \theta^{-1/2} \frac{\partial}{\partial y} U'(b + \theta^{1/2} y)\, P + \frac{\partial^2 P}{\partial y^2} = \\ &= U''(b) \frac{\partial}{\partial y} yP + \frac{\partial^2 P}{\partial y^2} + \frac{1}{6} \theta U^{\mathrm{IV}}(b) \frac{\partial}{\partial y} y^3 P \ldots . \end{aligned} \tag{11.7.11}$$

* M. Suzuki, J. Statist. Phys. 16, 11 and 477 (1977); F. Haake, Phys. Rev. Letters 41, 1685 (1978); B. Caroli and B. Roulet, Physica 101A, 581 (1980).

В нулевом порядке получается линейное уравнение Фоккера — Планка, решение которого имеет вид

$$P(y,\ t\,|\,y_0,\ 0)=[2\pi(e^{2ut}-1)]^{-1/2}\exp\left[-\frac{(y-y_0e^{ut})^2}{2(e^{2ut}-1)}\right],\quad (11.7.12)$$

где $u\equiv|U''(b)|$. Это распределение Гаусса, центральная точка y_0e^{ut} которого быстро удаляется от неустойчивой точки, а ширина $(e^{2ut}-1)^{1/2}$ быстро возрастает. Это приближение остается справедливым до тех пор, пока распределение не достигнет нелинейной области

$$y_0e^{ut}+(e^{2ut}-1)^{1/2}<l_b\theta^{-1/2}.\quad (11.7.13)$$

Так как θ предполагается малым, то это довольно слабое ограничение на время t, в течение которого (11.7.12) остается справедливым.

Причина, по которой оказалось возможным простое разложение по θ, состоит в том, что мы неявно положили $x_0-b=\theta^{1/2}y_0$, отсюда, следует, что эта величина меняется как $\theta^{1/2}$, а не остается фиксированной. Как мы видели, предел $\theta\to 0$ для (11.6.1) с фиксированным значением x_0 приводит просто к детерминистическому уравнению без флуктуаций, способных перебросить систему через потенциальный максимум. В пределе Сузуки этой трудности удается избежать, если позволить x_0 двигаться по направлению к этому максимуму с одновременным уменьшением флуктуаций. В этом смысле (11.7.12) является систематическим нулевым приближением решения (11.6.1) для начального периода, определяемого (11.7.13). Причина, по которой этот период возрастает с убыванием θ, состоит в том, что начальная точка x_0 оказывается ближе к неустойчивости так что, для того чтобы выйти за пределы l_b и попасть нелинейную область, требуется большее время.

Для того чтобы полностью определить, как эволюционирует плотность вероятности для начального периода, можно использовать параболическое приближение, а затем применить Ω-разложение отдельно для каждой ямы. Для того чтобы это было возможно, должно существовать время t_s достаточно малое для того, чтобы при $t<t_s$, выполнялось (11.7.12), но достаточно большое, чтобы поток вероятности через потенциальный барьер был пренебрежимо мал при $t>t_s$.

Первое условие выражается соотношением (11.7.13), или огрубленно

$$(y_0+1)\,e^{ut_s}<l_b\theta^{-1/2}.\quad (11.7.14)$$

Второе условие дает

$$\left[\frac{\partial P}{\partial y}\right]_{y=0}\approx\frac{y_0}{\sqrt{2\pi}}e^{-2ut_s}e-y_0^2/2\ll 1.\quad (11.7.15)$$

Однако мы не хотим, чтобы y_0 оказалось настолько большим, чтобы этот поток вероятности обратился в нуль даже при $t=0$, и поэтому

полагаем $y_0 \sim 1$. Тогда условие (11.7.15) равносильно требованию $e^{-ut_s} \ll 1$. Это согласуется с (11.7.14) при условии, что $\theta^{1/2} \ll l_b$. В пределе $\theta \to 0$, когда y_0 фиксировано, это условие, естественно, удовлетворяется.

Упражнение. Когда выражения (11.7.7) дают плохую оценку для l_a?

Упражнение. При $x_0 - b > l_b$ выведите приближенное выражение

$$\pi_a(x_0) = \frac{1}{|U'(x_0)|} \sqrt{\frac{\theta}{2\pi} |U''(b)|} \exp\left[-\frac{U(b) - U(x_0)}{\theta}\right].$$

11.8. ПРЕДЕЛЬНЫЕ ЦИКЛЫ И ФЛУКТУАЦИИ

В § 9.5 было показано, что Ω-разложение в равной степени применимо к основным кинетическим уравнениям и в случае многих переменных при условии, что макроскопические уравнения имеют единственное глобально устойчивое стационарное решение. Единственное отличие от случая, когда имеется одна переменная, состоит в том, что общего метода решения макроскопических уравнений не существует. Однако в неустойчивых ситуациях возникает дополнительное отличие, состоящее в том, что может быть гораздо больше неустойчивостей, чем в случае одной переменной. Возникает и новое явление: система двух нелинейных макроскопических уравнений может обладать *предельным циклом* (рис. 39).

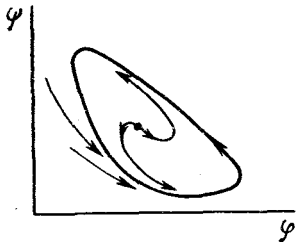

Рис. 39. Предельный цикл, окружающий неустойчивую точку

Когда кривая, изображающая решение на фазовой плоскости, замкнута, она представляет периодическое решение или, скорее, семейство периодических решений с различными фазами. Такая замкнутая кривая решения является предельным циклом, если все другие кривые решения (по крайней мере внутри некоторой притягивающей области) стремятся к ней. Это означает, что все решения дифференциальных уравнений (внутри этой области) в конце концов становятся периодическими, причем период и амплитуда, определяемые уравнением, у них одинаковы, в то время как фаза зависит от начальных условий частного решения. Другими словами, предельный цикл представляет собой асимптотически устойчивую орбиту в фазовом пространстве, соответствующие ему периодические решения называют *орбитально устойчивыми*. Они не являются асимптотически устойчивыми в обычном смысле, поскольку разность фаз между ними никогда не исчезает.

Ван-дер-Поль построил классический пример дифференциального уравнения, обладающего предельным циклом, как модель, описывающую колебания, производимые генератором частот. Наиболее извест-

ным примером из химии является реакция Жаботинского*. Многие периодические явления, известные в биологии, вероятно, также можно описать аналогичным способом**.

Еще одним примером вымышленной химической реакции с двумя компонентами X и Y, обладающей предельным циклом, является «Брюсселятор»***:

$$\begin{aligned} &A \to X, \quad B + X \to Y + D, \\ &2X + Y \to 3X, \quad X \to E. \end{aligned} \tag{11.8.1}$$

«Брюсселятор» описывает открытую систему с переносом из A в E и из B в D. Эта модель отчасти нереалистична, поскольку она включает в себя реакцию, которая происходит только тогда, когда сталкиваются три молекулы. Другой моделью, лишенной этого недостатка, является «Орегонатор»****, который, однако, сложнее, поскольку в реакции участвуют три вещества: X, Y, Z. Однако это неизбежно, поскольку можно доказать, что в системах, включающих лишь два реагента, способных вступать только в бимолекулярные реакции, предельных циклов не существует*****.

Основное кинетическое уравнение с двумя переменными, описывающее реакцию (11.8.1) в соответствующих единицах, записывается в виде

$$\begin{aligned} \dot{p}_{nm} = \Omega\alpha(\mathbf{E}_n^{-1} - 1)\, p_{nm} + \beta(\mathbf{E}_n\mathbf{E}_m^{-1} - 1)\, np_{nm} + \\ + \Omega^{-2}(\mathbf{E}_n^{-1}\mathbf{E}_m - 1)\, n^2 m p_{nm} + (\mathbf{E}_n - 1)\, np_{nm}. \end{aligned} \tag{11.8.2}$$

Полагая, как в § 9.5,

$$n = \Omega\varphi(t) + \Omega^{1/2}\xi, \quad m = \Omega\psi(t) + \Omega^{1/2}\eta,$$

получаем макроскопические уравнения для скоростей реакции в терминах концентраций φ, ψ:

$$\dot{\varphi} = \alpha + \varphi^2\psi - \beta\varphi - \varphi, \tag{11.8.3а}$$

$$\dot{\psi} = \beta\varphi - \varphi^2\psi. \tag{11.8.3б}$$

Должны существовать также две переменные интегрирования, но одна из них просто является сдвигом по t и определяет фазу. Кривые решения в (φ, ψ)-плоскости представляют собой однопараметри-

---

* J. J. Tyson, The Belousov-Zhabotinskii Reaction (Lecture Notes in Biomathematics 10; Springer, Berlin, 1976).

** G. Nicolis and I. Prigogine, Self-Organization in Non-Equilibrium Systems (Wiley-Interscience, New York, 1977).

*** Glansdorf and I. Prigigine, Structure, Stability and Fluctuations (Wiley-Interscience, London, 1971).

**** R. J. Field and R. M. Noyes, J. Chem. Phys. 60, 1877 (1974); J. J. Tyson, loc. cit.

***** P. Hanusse, Comptes Rendus Paris. C274, 1245 (1972); J. Tyson and J. Light, J. Chem. Phys. 59, 4164 (1973).

ческое семейство. Тщательное изучение* показало, что в определенной области значений α и β имеется одна замкнутая кривая, являющаяся предельным циклом.

Эти свойства макроскопических уравнений влияют на флуктуации относительно периодических решений. Такое влияние можно вычислить более подробно**, дело затрудняет лишь отсутствие явных решений (11.8.3). Здесь мы просто наметим качественное описание.

Рассмотрим решение основного кинетического уравнения, которое при $t=0$ представляет собой дельта-пик, расположенный в некоторой точке (φ_0, ψ_0) на макроскопическом предельном цикле. Форма распределения вероятности (в приближении линейного шума) описывается уравнением

$$\frac{\partial \Pi(\xi, \eta, t)}{\partial t} = (-2\varphi\psi + \beta + 1)\frac{\partial}{\partial \xi}\xi\Pi - \varphi^2 \frac{\partial}{\partial \xi}\eta\Pi + \\ + (-\beta + 2\varphi\psi)\frac{\partial}{\partial \eta}\xi\Pi + \varphi^2\frac{\partial}{\partial \eta}\eta\Pi + \\ + \frac{\alpha+\varphi}{2}\frac{\partial^2\Pi}{\partial \xi^2} + \frac{\beta\varphi+\varphi^2\psi}{2}\left(\frac{\partial}{\partial \xi} - \frac{\partial}{\partial \eta}\right)^2\Pi, \quad (11.8.4)$$

где $(\varphi, \psi$ — зависящее от времени периодическое решение с начальными значениями φ_0, ψ_0. Члены в последней строке определяют тенденцию к уширению Π. Если бы уравнения (11.8.3) были асимптотически устойчивы, эта тенденция сдерживалась бы первыми производными, потому что асимптотическая устойчивость означает, что все отклонения стремятся к нулю. В этом случае флуктуации оставались бы малыми, как в § 9.5. В случае же предельного цикла, с которым мы сейчас столкнулись, это сдерживание будет работать только против флуктуаций, перпендикулярных ему, поскольку все макроскопические решения возвращаются на предельный цикл.

Однако флуктуация в направлении вдоль предельного цикла не имеет тенденции к возвращению. Она только меняет фазу, а система не обладает противодействующим механизмом, который возвращал бы фазу к начальному значению. Следующая флуктуация может уменьшить это отклонение, но с таким же успехом может и увеличить его. В результате Π расширяется в направлении предельного цикла, так же как расширяется плотность вероятности броуновской частицы в одномерном случае. Следовательно, ширина вдоль предельного цикла возрастает пропорционально $\sqrt{t}$.

В результате этого приближение линейного шума и даже само Ω разложение нарушаются при $t \sim \Omega$. Теперь интуиция подсказывает нам дальнейший ход событий. Плотность вероятности будет продолжать расширяться, пока не покроет весь предельный цикл, в то же время она останется узкой в перпендикулярном направлении. Получившееся в результате распределение $P(n, m, \infty) = P^s(n, m)$ будет иметь вид кратера с горным хребтом на месте макроскопического

* R. Lefever and G. Nicolis, J. Theor. Biol. 30, 267 (1971);
** K. Tomita, T. Ohta and H. Tomita, Prog. Theor. Phys. 52, 1744 (1974); [8].

предельного цикла. Это означает полную потерю информации о начальной фазе. В генераторах частот этот фазовый сдвиг приводит к уширению диапазона генерируемых частот. Все это следует из отсутствия асимптотической устойчивости для возмущений, параллельных предельному циклу.

Упражнение. Проверьте вышеупомянутую оценку $t \sim \Omega$ для времени, по прошествии которого флуктуации перестают быть малыми.

Упражнение. Найдите стационарное решение (11.8.3) и покажите, что оно неустойчиво, когда $\beta > \alpha^2 + 1$.

Упражнение. Докажите, что внутри предельного цикла должна быть устойчивая стационарная точка.

Упражнение. Возьмем в (11.8.3) частные значения $\alpha = 1$, $\beta = 3$. Докажите, что имеется предельный цикл. Для доказательства воспользуйтесь следующим методом *. Имеется одно неустойчивое стационарное решение. Оно окружено контуром, через который все решения попадают во внутреннюю область. Этот контур образован осью и прямыми $y = 5{,}84 + x$, $y = 7{,}84 - x$.

Упражнение. Из (11.8.4) найдите $\langle \xi^2 \rangle$, $\langle \xi n \rangle$, $\langle \eta^2 \rangle$. Они удовлетворяют (8.6.6). Как отражается на уравнении тот факт, что моменты не ограничены?

11.9. ЛАЗЕР КАК ДИФФУЗИОННАЯ СИСТЕМА

Квантовая механика играет важную роль в микроскопическом описании большинства физических систем. При мезоскопическом описании мы также много раз обращались к ней. В большинстве случаев квантовая механика была нужна для определения множества состояний. В качестве примера можно указать теорию одномолекулярных реакций, обсуждавшихся в § 7.5, или лазеры из § 6.4. Кроме того, квантовая механика оказывается полезной, если мы интересуемся истинными значениями вероятностей перехода (например, гармонический осциллятор из § 6.4).

Квантовая механика оказывается на вторых ролях в связи с тем, что мезоскопическое описание является огрубленным. Каждое мезоскопическое состояние состоит из такого большого количества квантово-механических состояний, что перекрестные корреляции между амплитудами вероятностей этих состояний разрушаются и остаются только сами вероятности. Естественно, это оказывается правильным только в специфическом представлении. До сих пор правильное представление, в котором перекрестные корреляции являются действительно пренебрежимыми, было довольно очевидным и выбиралось неявно. В упомянутых примерах эти представления определялись числом фотонов, колебательными состояниями молекулы или гармонического осциллятора.

Теория лазеров не является исключением из общей схемы, но выбор соответствующего представления требует более тонкого подхода. Нельзя описывать лазер как полость, содержащую фотоны, которые испускаются и поглощаются с определенной вероятностью. Акты испускания и поглощения фотонов не являются случайными событиями, потому что нельзя пренебречь фазовыми соотношениями

* J. J. Tyson, loc. cit.

с полем. Следовательно, задача состоит в том, чтобы найти такое представление, в котором фазовыми корреляциями между квантовомеханическими состояниями можно пренебречь. Это представление может служить основой для мезоскопического описания. Подробное рассмотрение этого вопроса выходит за пределы данной книги, и поэтому мы просто воспроизведем окончательный вид стохастического уравнения *, известный из литературы.

Рассмотрим электромагнитное поле в среде, состоящей из двухуровневых атомов, которые вследствие внешнего воздействия переводятся в возбужденное состояние, или, как говорят в таких случаях, *накачиваются*. Будем исходить из классических уравнений для поля E в среде с плотностью поляризации P. Это позволит учесть фазовые соотношения между атомами и полями. В некотором приближении для комплексной амплитуды E_ω каждой моды ** имеем

$$\partial_t E_\omega = \frac{i\omega}{2} P_\omega.$$

Если бы атомы были гармоническими осцилляторами, то P_ω было бы пропорционально E_ω, как в теории Максвелла—Лоренца. Однако, для двухуровневых атомов это соотношение нелинейно:

$$P_\omega = \alpha_\omega E_\omega - \beta_\omega E^2 E_\omega + \ldots .$$

Здесь E^2 — полное поле, но мы пока ограничимся рассмотрением единственной моды, так что $E^2 = |E_\omega|^2$. Тогда получим уравнение движения для единственной неизвестной величины E_ω:

$$\partial_t E_\omega = a_\omega E_\omega - b_\omega |E_\omega|^2 E_\omega. \qquad (11.9.1)$$

В общем случае a_ω — комплексная величина, но если ω попадает в резонанс с расстоянием между уровнями, она действительна. Мы ограничимся этим случаем и поэтому опустим индекс ω. Тогда a пропорциональна скорости накачки, а коэффициент b является положительной постоянной величиной ***.

До сих пор вывод из микроскопических уравнений был достаточно прямолинейным. Однако теперь следует учесть, что имеются потери вследствие утечки излучения через концевые зеркала, а также вследствие спонтанного излучения атомов в другие моды. Кроме того, существует шум, обусловленный случайностью излучения. Эти эффекты в данном случае учитывают, добавляя член,

---

* M. Lax in: Statistical Physics. Phase Transitions and Superfluids (1966 Brandeis University Summer Institute in Theoretical Physics; M. Chretien, E. P. Gross and S. Deser eds., Gordon and Breach, New York, 1968); H. Haken in: Encyclopaedia of Physics 25/2c (Springer, Berlin, 1970); M. Sargent, M. O. Scully and W. E. Lamb, Laser Physics (Addison-Wesley, Reading, Mass., 1974); H. Haken, Synergetics (Springer, Berlin, 1976 and 1978).

** Sargent, Scully and Lamb. loc. cit., p. 100, equation (11).

*** В присутствии поглотителя b может стать отрицательным в соответствии с результатами работы: M. Sargent and C. Cantrell, Optics Comm. 15, 13 (1975).

описывающий затухание, и случайную силу:

$$\partial_t E = (a-c)E - b|E|^2 E + L(t). \qquad (11.9.2)$$

Здесь $L(t)$ — комплексный процесс Ланжевена:

$$\langle L(t)\rangle = 0, \quad \langle L(t)L(t')\rangle = 0, \quad \langle L(t)L(t')^*\rangle = \Gamma\delta(t-t').$$

Следует подчеркнуть, что этот способ подключения флуктуаций, хотя является удобным и позволяет заменить точное описание источников шума (ср. с § 8.8), не имеет серьезного обоснования. Такой подход может дать качественное понимание влияния шума на уравнения, описывающие лазер, но не позволяет описать его настоящего механизма. Например, флуктуации в накачке должны привести к случайности в коэффициенте a, но не описываются аддитивным членом. Однако, поскольку уравнение (11.9.2) широко изучено, оно с успехом может служить примером стохастического процесса *.

В приближении детерминированного процесса, полученном пренебрежением $L(t)$, можно показать, что при $a < c$ (скорость накачки меньше потерь) поле стремится к нулю. В стационарном состоянии имеется только поле, вызванное флуктуирующим членом. При больших скоростях накачки ($a > c$) поле возрастает до стационарного значения

$$|E|^2 = \frac{a-c}{b}. \qquad (11.9.3)$$

Это решение устойчиво относительно амплитуды: любые малые отклонения от (11.9.3) экспоненциально малы. Однако оно не может быть глобально устойчивым, потому что имеется другое стационарное, хотя и неустойчивое решение, а именно $E = 0$. Однако (11.9.3) неустойчиво по отношению к фазе (см. упражнение ниже).

Согласно § 8.8, для (11.9.2) можно записать уравнения Фоккера — Планка. Поскольку (11.9.2) на самом деле является системой двух уравнений для действительной и мнимой частей E', E'' поля E, мы получили уравнение для распределения вероятности, зависящего от $P(E', E'', t)\,\mathrm{d}E'\,\mathrm{d}E''$. Однако $P(E', E'', t)$ удобнее записать как функцию, зависящую от E, E^*. Но это та же самая плотность вероятности в плоскости E', E'', хотя часто пишут $\mathrm{d}E\,\mathrm{d}E^*$ для $\mathrm{d}E'\,\mathrm{d}E''$. Тогда уравнение Фоккера — Планка, соответствующее (11.9.3), имеет вид **

$$\frac{\partial \Pi(E, E^*, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial E}(a-c-b|E|^2)EP - \\ -\frac{\partial}{\partial E^*}(a-c-b|E|^2)E^*P + \Gamma\frac{\partial^2 P}{\partial E\,\mathrm{d}E^*}. \qquad (11.9.4)$$

---

* Более сложное рассмотрение дается в работе: K. Heep and E. H. Lieb, Annals Phys. 76, 360 (1973); см. также: P. A. Martin, Modeles en mecanique statistique des processus irreversibles (lecture Notes in Physics 103; Springer, Berlin, 1979). Ch. IV.

** H. Risken, Z. Phys. 186, 85 (1965) and 191, 302 (1966).

Упражнение. Тот факт, что при $a > c$ напряженность поля принимает конечное значение (11.9.3), называют насыщением. Почему в линейных уравнениях насыщение невозможно?

Упражнение. Выведите из (11.9.2) детерминистическое уравнение для напряженности поля $s = |E|^2$ и покажите, что для $a < c$ стационарное решение $s = 0$ глобально устойчиво. Для $a > c$ это решение неустойчиво, но тогда (11.9.3) локально устойчиво.

Упражнение. Выведите (11.9.4), показав, что первые два момента распределения согласуются с полученными из (11.9.2).

Упражнение. Найдите стационарное решение уравнения (11.9.4). Почему нельзя найти Г с помощью одной из разновидностей флуктуационно-диссипативной теоремы?

Упражнение. Докажите, что все решения (11.9.4) приближаются к стационарному решению.

Упражнение. Введите полярные координаты в (E', E'')-плоскости, полагая $E = \sqrt{s}e^{i\varphi}$, и преобразуйте (11.9.4) к виду

$$\frac{\partial P(s, \varphi, t)}{\partial t} = -2\frac{\partial}{\partial s}(a - c - bs)\, sP + \Gamma\left\{\frac{\partial}{\partial s} s \frac{\partial P}{\partial s} + \frac{1}{4s}\frac{\partial^2 P}{\partial \varphi^2}\right\}. \quad (11.9.5)$$

Упражнение. Из (11.9.5) выведите детерминистическое уравнение для s. Согласуется ли оно с уравнением, выведенным выше? Это пример трудностей, возникающих при бездумном использовании уравнений Ланжевена (см. § 8.9).

Нелинейное уравнение Фоккера—Планка (11.9.4) или (11.9.5) содержит всю информацию относительно одночастотного лазера и флуктуаций в рамках настоящей модели. К сожалению, его нельзя решить явно, но можно сделать некоторые выводы, изучая различные предельные случаи. При этом, однако, следует помнить, что настоящая модель не была выведена как систематическое приближение для настоящих уравнений движения, описывающих лазер, и поэтому некоторые детали могут оказаться неточными.

Флуктуации не связаны с тепловым движением, а вызываются случайным характером процесса излучения. Поэтому температура не подходит в качестве параметра разложения в отличие от случая, рассмотренного в § 10.5. Тогда, чтобы получить детерминистическое уравнение, положим $\Gamma = 0$ и будем считать, что Γ может изменяться независимо от a, b, c. Детерминистическое уравнение, которое мы получим в результате, будет таким же, как и полученное из (11.9.2) при $L = 0$:

$$\dot{s} = 2(a - c)s - 2bs^2 = -\frac{dV(s)}{ds}, \quad (11.9.6)$$

$$V(s) = -(a - c)s^2 + \frac{2}{3}bs^3. \quad (11.9.7)$$

Это уравнение описывает движение заторможенной частицы в потенциале V (рис. 40).

Мы видим, что имеется одно стационарное состояние ниже порога накачки, которое становится неустойчивым выше порога, когда появляется другое устойчивое состояние, а именно $s = (a - c)/b$, согласно (11.9.3).

Теперь возьмем $\Gamma > 0$. Стационарное решение (11.9.5) можно найти явно:

$$P^s(s) = \text{const} \cdot \exp\left[\frac{2}{\Gamma}\left\{(a-c)s - \frac{1}{2}bs^2\right\}\right]. \qquad (11.9.8)$$

При $a < c$ его максимум расположен при $s = 0$. Значения $P^s(0)$ являются устойчивым стационарным решением (11.9.1) и (11.9.6.) При $a > c$ его максимум расположен при $d = (a-c)/b$ *. На самом деле P^s представляет собой распределение в (E', E'')-плоскости, которое оказывается независимым от угла φ. Его максимум является горным кольцом, имеющим вид кратера, что означает, что фаза полностью не определена.

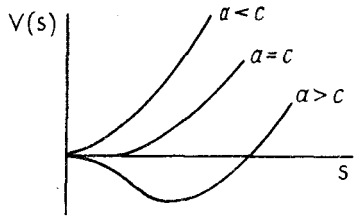

Рис. 40. Схематический вид потенциала (11.9.7)

Скорость, с которой s приближается к d, можно найти из (11.9.6), она приблизительно равна $\tau_s^{-1} \approx 2(a-c)$. Время, необходимое для того чтобы решение φ распространилось по всему горному хребту, приблизительно равно $\tau_\varphi - \pi^2(2d/\Gamma)$. При малых Γ это время значительно превосходит τ_s, тогда поле E сначала достигает своей стационарной амплитуды, а затем уже фаза решения распространяется по всему горному хребту. Эта неопределенность фазы увеличивает ширину линии испускаемого излучения лазера (ср. с (8.3.12)):

$$\Delta\omega \sim \frac{1}{\tau\varphi} \sim \frac{\Gamma}{|E|^2}. \qquad (11.9.9)$$

Хотя в этом случае предельный цикл отсутствует, распространение фазы во многом сходно с процессом, описанным в предыдущем параграфе.

Упражнение. Почему свободная энергия в (11.9.8) не является той же самой функцией, что и потенциал V (11.9.7)? (Ср. с § 10.5.)

Упражнение. В стационарном распределении (11.9.8) среднее $\langle s \rangle$ отличается от наиболее вероятного значения d на очень малую величину порядка $\Gamma^{1/2} \exp[-bd^2/\Gamma]$. Но средняя амплитуда меньше, чем $\sqrt{d}$, на величину $[\Gamma/(16b)]\, d^{-3/2}$. Сравните это с дискуссией по поводу парадокса Бриллюэна в § 8.9.

Упражнение. В области намного ниже порога можно пренебречь нелинейными членами в (11.9.2) и (11.9.4). В этом случае E является процессом Орнштейна — Уленбека

$$\langle E(t_1) E^*(t_2) \rangle^s = \frac{\Gamma}{2(c-a)} e^{-(c-a)|t_1 - t_2|}$$

---

* Это то же самое d, которое использовал Рискин в цитированной выше работе. Его W, r, β, q, a соответствуют нашим P, $\sqrt{s}$, b, $\Gamma/4$, $2(c-a)/\sqrt{b\Gamma}$ соответственно. См. также более позднюю работу: H. Risken and H. D. Vollmer, Z. Phys. B39, 89 (1980).

при условии, что $c-a \gg \sqrt{b\Gamma}$. Автокорреляция напряженности дается квадратом этого выражения:

$$\langle\langle |E(t_1)|^2 |E(t_2)|^2 \rangle\rangle^s = \frac{\Gamma^2}{4(c-a)^2} e^{-2(c-a)|t_1-t_2|}.$$

Упражнение. В области намного выше порога $(a-c \gg \sqrt{b\Gamma})$, для того чтобы приближенно описать флуктуации относительно стационарного решения для лазера, уравнение (11.9.5) можно линеаризовать, полагая $s=d+\sigma$:

$$\frac{\partial P(\sigma, \varphi, t)}{\partial t} = 2bd \frac{\partial}{\partial \sigma} \sigma P + \Gamma d \frac{\partial^2 P}{\partial \sigma^2} + \frac{\Gamma}{4d} \frac{\partial^2 P}{\partial \varphi^2}. \qquad (11.9.10)$$

Покажите, что в этом случае

$$\langle E(t_1) E^*(t_2) \rangle^s = e^{-[\Gamma/(4d)]|t_1-t_2|} \left\{ d - \frac{\Gamma}{8bd} \left(1 - e^{-2bd|t_1-t_2|}\right) \right\},$$

$$\langle\langle |E(t_1)|^2 |E(t_2)|^2 \rangle\rangle^s = \frac{\Gamma}{2b} e^{-2bd|t_1-t_2|}.$$

Проверьте оценку (11.9.9).

Упражнение. В одночастотном лазере для числа фотонов n можно вывести основное кинетическое уравнение:

$$\dot{p}_n = (\mathbf{E}^{-1} - 1) \frac{A(n+1)}{1+B(n+1)} p_n + C(\mathbf{E} - 1) n p_n. \qquad (11.9.11)$$

Если пренебречь рассуждениями гл. 9 и использовать некоторые упрощения, это уравнение можно заменить на

$$\dot{p}_n = -\frac{\partial}{\partial n} \{An(1-Bn) - Cn\} p_n + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial n^2} \{An(1-Bn) + Cn\} p_n.$$

Покажите, что в этом случае результаты выше и ниже порога аналогичны найденным выше, но теперь Γ может иметь два различных значения.

Упражнение. Если Ω — размер лазера, то коэффициент в (11.9.11) оказывается пропорциональным $1/\Omega$. Получите те же самые результаты, что и в предыдущем упражнении, но только систематическим образом с помощью Ω — разложения.

ГЛАВА 12

ФЛУКТУАЦИИ В НЕПРЕРЫВНЫХ СИСТЕМАХ

До сих пор случайные переменные представляли собой полное число молекул, электронов, индивидумов и т. д., имеющихся в некоторой системе. Для того чтобы описать локальные флуктуации, необходимо ввести пространственную плотность как случайный объект. Вместо того чтобы иметь дело с одной или несколькими случайными переменными, мы сталкиваемся с необходимостью ввести бесконечное множество переменных.

12.1. ВВЕДЕНИЕ

При изучении химических реакций мы пока что всегда описывали состояние смеси с помощью полного числа молекул различных типов. Это предполагает, что смесь однородна и остается од-

нородной даже тогда, когда полные числа молекул каждого сорта флуктуируют. Любая флуктуация полного числа должна иметь время, для того чтобы распространиться по объему Ω, перед тем как она исчезнет. Это значит, что имеется некоторое среднее время, в течение которого возникшая в каком-либо месте молекула движется через объем, перед тем как снова аннигилирует вследствие другой реакции. Если только реакции не происходят слишком быстро, такая картина получается в результате перемешивания, при благоприятных же обстоятельствах бывает достаточно одной диффузии. Аналогичное рассуждение оказывается применимым и к полупроводникам, популяциям и т. д.

Предположим, однако, что в некоторой системе отсутствует перемешивание и диффузия оказывается недостаточной. Тогда флуктуация, возникнув в одной точке, исчезнет до того, как она сможет достигнуть отдаленных областей данного объема. В этом случае мы имеем дело с локальным явлением, для его описания требуется большее число переменных, а именно плотности каждой компоненты в различных точках пространства. Это можно сделать следующим образом. Для простоты предположим, что имеется только один сорт частиц, как, например, в реакции (см. § 9.1) и в примерах § 6.9.

Разобьем полный объем Ω на ячейки Δ и обозначим n_λ количество частиц в ячейке λ. Ячейки должны быть такими малыми, чтобы внутри каждой из них выполнялось упомянутое выше условие однородности. Пусть $P(\{n_\lambda\}, t)$ — совместное распределение вероятности всех n_λ. В момент времени $t+\mathrm{d}t$ оно может измениться под действием двух разных процессов. Во-первых, n_λ внутри каждой отдельной ячейки λ может измениться из-за случайного рождения или аннигиляции частицы.

В основном кинетическом уравнении для $P(\{n_\lambda\}, t)$ это дает соответствующий член. Для каждой отдельной ячейки (например, в частном случае реакции (9.1.1)) в соответствии с (9.1.4) получаем

$$\dot{P}(\{n_\lambda\}, t) = \Delta \sum_\lambda (\mathbf{E}_\lambda - 1) P + (2\Delta)^{-1} \sum_\lambda (\mathbf{E}_\lambda^2 - 1) n_\lambda (n_\lambda - 1) P. \qquad (12.1.1)$$

Во-вторых, P изменяется потому, что в течение времени $\mathrm{d}t$ частица может переместиться из ячейки λ в ячейку μ (не обязательно соседнюю). Вероятность того, что частица из ячейки λ переместится в ячейку μ, пропорциональна Δ и $\mathrm{d}t$, поэтому мы обозначим ее $w_{\mu\lambda}\Delta\,\mathrm{d}t$. Соответствующий вклад в основное кинетическое уравнение составит

$$\dot{P}(\{n_\lambda\}, t) = \Delta \sum_{\lambda,\,\mu} w_{\mu\lambda} (\mathbf{E}_\mu^{-1}\mathbf{E}_\lambda - 1) n_\lambda P. \qquad (12.1.2)$$

Полное изменение P является суммой обоих вкладов. Получающееся в результате основное кинетическое уравнение содержит всю информацию, необходимую для вычисления локальных флуктуаций

в химически реагирующих системах, оно действительно было использовано для этой цели *.

Искусственное разбиение пространства на дискретные области является, однако, довольно неуклюжей процедурой. В частности, вследствие этого разбиения появляется большое число констант $\omega_{\mu\lambda}$, которые проявляются в качестве коэффициента диффузии D Эта трудность усугубляется, если возникает необходимость учитывать свободный разлет частиц в пространстве, как это имеет место для нейтронов в реакторе (см. § 12.4). Тогда возникает желание переписать (12.1.1) и (12.1.2) в таком виде, в котором пространственные координаты встречаются в качестве непрерывно изменяющихся параметров, а не дискретных индексов λ.

С этой целью мы заменим множество чисел n_λ функцией $u(\mathbf{r})$, выражающей плотность частиц. Таким образом,

$$u(\mathbf{r}) = n_\lambda/\Delta, \tag{12.1.3}$$

где $\mathbf{r}$ — координаты ячейки λ в пространстве (например координаты ее центра **). Тогда совместное распределение $P(\{n_\lambda\}\, t)$ превращается в вероятность в пространстве функций $P([u(\mathbf{r})], t)$ и является функционалом, зависящим от $u(\mathbf{r})$, а суммирование по всем n_λ превращается в интегрирование по пространству функций $u(\mathbf{r})$.

Действительно, формально это можно сделать и получить правильные результаты для моментов и корреляционных функций. Однако более прямой и математически более безопасный путь состоит в том, чтобы из дискретной формулировки сначала вывести уравнения для моментов основного кинетического уравнения, а уже затем записать их как непрерывные функции пространственных координат. Этот так называемый *метод составных моментов* описывается в следующих двух параграфах.

Примечание. Плотность вероятности в функциональном пространстве и интегрирование по всем функциям математически не определены. Это связано с тем, что мы небрежно ввели огромное количество очень быстро меняющихся функций $u(\mathbf{r})$. Они не имеют физического смысла, потому что (12.1.3) определяет $u(\mathbf{r})$ как интерполяцию чисел на решетке. Следовательно, задача состоит в том, чтобы найти математически согласованный и физически удовлетворительный метод ограничения функционального пространства на достаточно гладкие функции. Однако эту задачу решать не нужно, потому что получающиеся в результате уравнения для моментов приводят к правильным результатам.

Упражнение. Запишите основное кинетическое уравнение для локального распределения носителей зарядов в полупроводнике из § 6.9, предполагая, что они переносятся в результате процесса диффузии.

---

* G. Nicolis and I. Prigogine, Proc. Nat'l Acad. Sci. USA 68, 2102 (1971); C. W. Gardiner, K. J. McNeil, D. F. Walls and J. S. Matheson, J. Statist. Phys. 14, 307 (1976); C. van den Broeck, W. Horsthemke and M. Malek-Mansour, Physica 89 A, 339 (1977); M. DelleDonne and P. Ortoleva, J. Statist. Phys. 18, 319 (1978).

** Из-за бедности алфавита для обозначения плотности я вынужден использовать непривычный символ u.

Упражнение. Критерием достаточности диффузии для поддержания однородности служит соотношение

$$D\tau \gg l^2, \tag{12.1.4}$$

где τ — среднее время жизни частицы, а l — диаметр сосуда.

12.2. ДИФФУЗИОННЫЙ ШУМ

Сначала рассмотрим диффузионную часть (12.2) основного кинетического уравнения для $P(\{n_\lambda\}, t)$. В предыдущей главе были получены различные диффузионные уравнения для одночастичной вероятности $P(\mathbf{r}, t)$. Уравнение (12.2) описывает набор независимых частиц. Переход от одночастичного к многочастичному описанию представлен в § 7.6.

Сопоставление (12.1.2) и (12.6.4) для среднего значения дает

$$\partial_t \langle n_\alpha \rangle = \Delta \sum_\lambda \{w_{\alpha\lambda} \langle n_\lambda \rangle - w_{\lambda\alpha} \langle n_\alpha \rangle\} = \Delta \sum_\lambda \mathbf{w}_{\alpha\lambda} \langle n_\lambda \rangle. \tag{12.2.1}$$

Флуктуации описываются выражением (7.6.8) в терминах факториальных кумулянтов:

$$\partial_t [n_\alpha n_\beta] = \Delta \sum_\lambda \mathbf{w}_{\alpha\lambda} [n_\alpha n_\beta] + \Delta \sum_\lambda w_{\beta\lambda} [n_\alpha n_\lambda]. \tag{12.2.2}$$

Напомним, что в соответствии с определением (1.3.12)

$$[n_\alpha n_\beta] = \langle n_\alpha n_\beta \rangle - \langle n_\alpha \rangle \langle n_\beta \rangle - \delta_{\alpha\beta} \langle n_\alpha \rangle. \tag{12.2.3}$$

Перепишем эти уравнения в непрерывных обозначениях. Используем (12.1.3) и заменим $w_{\alpha\lambda}$ на $w(\mathbf{r}/\mathbf{r}')$. Суммирование вместе с множителем Δ становится интегрированием, тогда (12.2.1) принимает вид

$$\partial_t \langle u(\mathbf{r}) \rangle = \int \mathbf{w}(\mathbf{r}/\mathbf{r}') \langle u(\mathbf{r}') \rangle \, d\mathbf{r}'. \tag{12.2.4}$$

Чтобы переписать (12.2.2) таким же способом, мы должны сначала определить факториальный кумулянт в непрерывном случае. Разделим (12.2.3) на Δ^2 и заменим α, β на $\mathbf{r}_1$, $\mathbf{r}_2$:

$$[u(\mathbf{r}_1) u(\mathbf{r}_2)] = \langle u(\mathbf{r}_1) u(\mathbf{r}_2) \rangle - \langle u(\mathbf{r}_1) \rangle \langle u(\mathbf{r}_2) \rangle - \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \langle u(\mathbf{r}_1) \rangle. \tag{12.2.5}$$

Здесь мы использовали тот факт, что

$$\frac{\delta_{\alpha\beta}}{\Delta} \to \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2). \tag{12.2.6}$$

Для факториального кумулянта плотности (12.2.5) из (12.2.2) получаем уравнение

$$\partial_t [u(\mathbf{r}_1) u(\mathbf{r}_2)] = \int w(\mathbf{r}_1/\mathbf{r}') [u(\mathbf{r}') u(\mathbf{r}_2)] \, d\mathbf{r}' + \\ + \int \mathbf{w}(\mathbf{r}_2/\mathbf{r}') [u(\mathbf{r}_1) u(\mathbf{r}')] \, d\mathbf{r}'. \tag{12.2.7}$$

Все это справедливо независимо от того, какой вид имеют вероятности перехода $\mathbf{w}_{\mu\lambda}$ или $\mathbf{w}(\mathbf{r}/\mathbf{r}')$. Если они изотропны, а скачки малы

по сравнению с характерным масштабом $u(\boldsymbol{r})$, оператор w можно заменить его диффузионным приближением:

$$\mathbf{w} \to D\nabla^2.$$

В результате (12.2.4) превращается в уравнение диффузии

$$\partial_t \langle u(\boldsymbol{r})\rangle = D\nabla^2 \langle u(\boldsymbol{r})\rangle. \tag{12.2.8}$$

Это уравнение описывает среднюю плотность. Флуктуации описываются уравнением

$$\partial_t [u(\mathbf{r}_1)\, u(\mathbf{r}_2)] = D(\nabla_1^2 + \nabla_2^2)[u(\mathbf{r}_1)\, u(\mathbf{r}_2)], \tag{12.2.9}$$

которое легко получить из (12.2.7).

Упражнение. Выведите (12.2.1) и (12.2.2) непосредственно из (12.1.2).

Упражнение. Обоснуйте (12.2.6), показав, что для произвольных гладко меняющихся наборов $\{n_\alpha\}$, $\{m_\alpha\}$ имеет место соотношение

$$\sum_{\alpha\beta} n_\alpha (\delta_{\alpha\beta}/\Delta)\, m_\beta = \iint u(\mathbf{r})\, \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\, v(\mathbf{r}')\, d\mathbf{r}\, d\mathbf{r}',$$

где u и v — плотности, соответствующие n и m.

Упражнение. Выведите из (12.2.9) соотношение для ковариации плотности:

$$\{\partial_t - D\nabla_1^2 - D\nabla_2^2\} \langle\langle u(\mathbf{r}_1)\, u(\mathbf{r}_2)\rangle\rangle = 2D\nabla_1 \cdot \nabla_2 \{\delta(\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2) \langle u(\mathbf{r}_1)\rangle\}. \tag{12.2.10}$$

Упражнение. Для электронов в полупроводнике, помещенном в постоянном поле F, в соответствующих единицах имеем

$$\partial_t \langle u(\mathbf{r})\rangle = -\mathbf{F}\times\nabla(u(\mathbf{r})) + D\nabla^2 \langle u(\mathbf{r})\rangle, \tag{12.2.11а}$$

$$\{\partial_t + \mathbf{F}\times(\nabla_1 + \nabla_2) - D(\nabla_1^2 + \nabla_2^2)\} \langle\langle u(\mathbf{r}_1)\, u(\mathbf{r}_2)\rangle\rangle = 2D\nabla_1 \times \nabla_2 \{\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \langle u(\mathbf{r}_1)\rangle\}. \tag{12.2.11б}$$

Упражнение. Флуктуации плотности при диффузии впервые были вычислены Ван Влиетом* с использованием следующего подхода, похожего на приближение Ланжевена. Предполагается, что плотность u и ток $\mathbf{J}$ удовлетворяют уравнениям

$$\partial_t u = -\nabla\times\mathbf{J}, \quad \mathbf{J} = \mathbf{F}u - D\nabla u + \mathbf{L}(\mathbf{r}, t);$$
$$\langle \mathbf{L}(\mathbf{r}, t)\rangle = 0,$$
$$\langle \mathbf{L}_i(\mathbf{r}, t)\, L_j(\mathbf{r}', t')\rangle = 2D\delta_{ij}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\, \delta(t-t') \langle u(\mathbf{r}, t)\rangle. \tag{12.2.12}$$

Покажите, что формально это приводит к тому же самому результату (12.2.11). Отметим, однако, что $\mathbf{L}$ не является настоящей силой Ланжевена, потому что ее стохастические свойства зависят от частного решения (12.2.11а).

Упражнение. Для одномерной диффузии в неоднородной среде, описывающейся (10.3.2), покажите, что

$$\{\partial_t - \nabla_1 D(x_1)\, \nabla_1 - \nabla_2 D(x_2)\, \nabla_2\} \langle\langle u(x_1)\, u(x_2)\rangle\rangle = 2\nabla_1\nabla_2 D(x_1) \langle u(x_1)\rangle\, \delta(x_1 - x_2).$$

Соответствующий член Ланжевена получается заменой (12.2.12) на

$$\langle L(x, t)\, L(x', t')\rangle = 2D(x)\, \delta(x-x')\, \delta(t-t') \langle u(x, t)\rangle.$$

---

* K. M. van Vliet, J. Mathem. Phys. 12, 1981 en 1998 (1971).

12.3. МЕТОД СОСТАВНЫХ МОМЕНТОВ

Теперь рассмотрим флуктуации, возникающие в химических реакциях. Возьмем пример более простой, чем (12.1.1), а именно реакцию (6.4.7). Описывающее ее основное кинетическое уравнение (6.4.8), применимое к отдельным ячейкам, немного изменив обозначения, можно записать в виде

$$\dot{P}(\{n_\lambda\},\ t) = a\sum_\lambda (\mathbf{E}_\lambda - 1)\, n_\lambda P + b\Delta \sum_\lambda (\mathbf{E}_\lambda^{-1} - 1)\, P. \qquad (12.3.1)$$

Если читатель выполнил упражнение, то ему не составит труда вывести соотношения:

$$\partial_t \langle n_\alpha \rangle = b\Delta - a\langle n_\alpha \rangle, \qquad (12.3.2а)$$

$$\partial_t (n_\alpha n_\beta) = -2a\,[n_\alpha n_\beta]. \qquad (12.3.2б)$$

Разделив эти соотношения Δ и использовав непрерывные обозначения, получим

$$\partial_t \langle u(\mathbf{r}) \rangle = b - a\langle u(\mathbf{r}) \rangle, \qquad (12.3.3а)$$

$$\partial_t [u(\mathbf{r}_1)\, u(\mathbf{r}_2)] = -2a\,[u(\mathbf{r}_1)\, u(\mathbf{r}_2)]. \qquad (12.3.3б)$$

Воздействие реакции диффузии можно объединить, если заметить, что моменты изменяются со временем за счет обоих механизмов. Тогда для реакции в присутствии диффузии из (12.3.3а) и (12.2.8) получаем

$$\partial_t \langle u(\mathbf{r}) \rangle = b - a\langle u(\mathbf{r}) \rangle + D\nabla^2 \langle u(\mathbf{r}) \rangle, \qquad (12.3.4а)$$

а из (12.3.3б) и (12.2.9) следует

$$\partial_t [u(\mathbf{r}_1)\, u(\mathbf{r}_2)] = \{D(\nabla_1^2 + \nabla_2^2) - 2a\}\,[u(\mathbf{r}_1)\, u(\mathbf{r}_2)]. \qquad (12.3.4б)$$

Используемый метод называют *методом составных моментов*. В таком подходе удается избежать явного использования вероятности в функциональном пространстве. Аналогичные уравнения можно записать для высших моментов.

В качестве приложения этих уравнений изучим флуктуации в равновесии. Из (12.3.4а) получаем равновесное решение:

$$\langle u \rangle^{\mathrm{e}} = b/a. \qquad (12.3.5)$$

Из (12.3.4) для $[u(\mathbf{r}_1)\, u(\mathbf{r}_2)]^{\mathrm{e}} \equiv g(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)$ получаем

$$\{2D\nabla^2 - 2a\}\, g(r) = 0.$$

Поскольку флуктуации не могут возрастать экспоненциально, для больших r решение имеет вид

$$g(r) = A\,\frac{\mathrm{e}^{-\varkappa r}}{r}, \quad \varkappa^2 = a/D.$$

Для ковариации флуктуаций имеем

$$\langle\langle u(\mathbf{r}_1)\, u(\mathbf{r}_2) \rangle\rangle^{\mathrm{e}} = \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)\, \langle u(\mathbf{r}_1 \rangle^{\mathrm{e}} + g(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|).$$

Интеграл от нее по переменной $\mathbf{r}_1$ или $\mathbf{r}_2$ должен обращаться в нуль. Из этого условия находим значение A. Результат имеет вид

$$\langle\langle u(\mathbf{r}_1)\, u(\mathbf{r}_2)\rangle\rangle^e = \frac{a}{b}\left\{\delta(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2) - \frac{\varkappa^2}{4\pi}\,\frac{e^{-\varkappa|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2|}}{|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2|}\right\}. \qquad (12.3.6)$$

Теперь рассмотрим корреляцию равновесных флуктуаций в двух разных точках пространства и в два различные момента времени:

$$\langle\langle u(\mathbf{r}_1,\ t_1)\, u(\mathbf{r}_2,\ t_2)\rangle\rangle^e \equiv G(\mathbf{r}_2-\mathbf{r}_1,\ t_2-t_1). \qquad (12.3.7)$$

Возьмем $t_2 > t_1$ и вычислим из (12.3.4а) среднюю плотность $\langle u(\mathbf{r}_2, t_2)$ при условии, что и $u(\mathbf{r}_1,\ t_1)$ задано:

$$\langle u(\mathbf{r}_2,\ t_2)\rangle_{\text{cond}} = \langle u\rangle^e + e^{-a(t_2-t_1)}\,[4\pi D(t_2-t_1)]^{-3/2}\times$$
$$\times\int \exp\left[-\frac{(\mathbf{r}_2-\mathbf{r}')^2}{4D(t_2-t_1)}\right]\{u(\mathbf{r}',\ t_1)-\langle u\rangle^e\}\,d\mathbf{r}'.$$

Умножим на $u(\mathbf{r}_1,\ t_1)-\langle u\rangle^e$ и усредним произведение по значениям $u(\mathbf{r}_1,\ t)$, считая их равновесными и используя (12.3.6). В результате для $t > 0$ получим

$$G(\mathbf{r},\ t) = \frac{b}{a}\,e^{-at}\,(4\pi Dt)^{-3/2}\left\{e^{-[r^2/(4Dt)]} - \right.$$
$$\left. -\frac{\varkappa^2}{4\pi}\int e^{-[(r-r')^2/(4Dt)]}\,\frac{e^{-\varkappa r^1}}{r'}\,d^3\mathbf{r}^1\right\}. \qquad (12.3.8)$$

Упражнение. Проверьте (12.3.2б).

Упражнение. Пусть V_1 и V_2 — две области пространства, которые могут перекрываться. Пусть $N(V_1)$, $N(V_2)$ — количество частиц в каждой из них. Вычислите $\langle\langle N(V_1)\, N(V_2)\rangle\rangle^e$.

Упражнение. Для эксперимента с рассеянием нужно знать преобразование Фурье от (12.3.8):

$$S(k,\ \omega) = \frac{2\langle u\rangle^e}{(2\pi)^2}\,\frac{Dk^2}{(a+Dk^2)^2+\omega^2}. \qquad (12.3.9)$$

Упражнение. Таким же способом изучите реакцию

$$B \longrightarrow 2X, \quad X \longrightarrow A.$$

Упражнение. Решите (12.3.4) в зависящем от времени случае, определив начальное условие $u(\mathbf{r},\ 0) = 0$.

Упражнение. Решите (12.3.4) с $u(\mathbf{r},\ 0) = \delta(\mathbf{r})$ и получите

$$\langle\langle u(\mathbf{r}_1)\, u(\mathbf{r}_2)\rangle\rangle_t = \delta(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)\,\langle u(\mathbf{r}_1)\rangle_t + \frac{e^{-2at}}{(4\pi Dt)^{3/2}}\exp\left[-\frac{\mathbf{r}^2+\mathbf{r}'^2}{4Dt}\right].$$

Выведите отсюда результат для любого заданного $u(\mathbf{r},\ 0)$.

Упражнение. Рассмотрите флуктуации плотности радиоактивного вещества, растворенного в жидкости и подвергающегося воздействию диффузии. Если при $t = 0$ плотность в точности равна, то

$$\langle\langle u(\mathbf{r}_1)\, u(\mathbf{r}_2)\rangle\rangle_t = u_0\left\{\delta(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)\,e^{-at} - \frac{e^{-2at}}{(8\pi Dt)^{3/2}}\exp\left[-\frac{(\mathbf{r}_1-\mathbf{r})^2}{8Dt}\right]\right\}.$$

Тот факт, что часть основного кинетического уравнения (12.3.1) оказалась линейной, существенно упростил рассмотрение вышепри-

веденного примера. Теперь снова рассмотрим реакцию, изучавшуюся в § 9.1 для случая полного перемешивания. Чтобы получить уравнение для первого и второго моментов, нужно применить Ω-разложение к каждой отдельной ячейке, т. е. нужно разложить основное кинетическое уравнение (12.1.1) для случая многих переменных по степеням $\Delta^{-1/2}$. Это накладывает дополнительное условие на размер ячейки, состоящее в том, что Δ должно быть достаточно большим, чтобы содержать много частиц. Мы предлагаем читателям самостоятельно провести вычисления и приведем лишь результат:

$$\partial_t \langle n_\alpha \rangle = \Delta - \Delta^{-1} \langle n_\alpha \rangle^2, \tag{12.3.10а}$$

$$\partial_t \langle\langle n_\alpha n_\beta \rangle\rangle = -2\Delta^{-1} (\langle n_\alpha \rangle + \langle n_\beta \rangle) \langle\langle n_\alpha n_\beta \rangle\rangle + \\ + \delta_{\alpha\beta} \{\Delta + 2\Delta^{-1} \langle n_\alpha \rangle^2\}. \tag{12.3.10б}$$

Проделав эту подготовительную работу, перейдем к непрерывному описанию, разделив уравнения на Δ и Δ^2 соответственно. Запишем их в терминах плотности $u(\mathbf{r})$:

$$\partial_t \langle u(\mathbf{r}) \rangle = 1 - \langle u(\mathbf{r}) \rangle^2, \tag{12.3.11а}$$

$$\partial_t \langle\langle u(\mathbf{r}_1) u(\mathbf{r}_2) \rangle\rangle = -2 \{\langle u(\mathbf{r}_1) \rangle + \langle u(\mathbf{r}_2) \rangle\} \langle\langle u(\mathbf{r}_1) u(\mathbf{r}_2) \rangle\rangle + \\ + \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \{1 + 2\langle u(\mathbf{r}) \rangle^2\}. \tag{12.3.11б}$$

Для факториального кумулянта последнее уравнение дает

$$\partial_t [u(\mathbf{r}_1) u(\mathbf{r}_2)] = -2 \{\langle u(\mathbf{r}_1) \rangle + \langle u(\mathbf{r}_2) \rangle\} \cdot \\ [u(\mathbf{r}_1) u(\mathbf{r}_2) - \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \langle u(\mathbf{r}_1) \rangle^2. \tag{12.3.11в}$$

Теперь можно добавить воздействие диффузии:

$$\partial_t \langle u(\mathbf{r}) \rangle = 1 - \langle u(\mathbf{r}) \rangle^2 + D\nabla^2 \langle u(\mathbf{r}) \rangle, \tag{12.3.12а}$$

$$\partial_t [u(\mathbf{r}_1) u(\mathbf{r}_2)] = -2 \{\langle u(\mathbf{r}_1) \rangle + \langle u(\mathbf{r}_2) \rangle\} [u(\mathbf{r}_1) u(\mathbf{r}_2)] - \\ - \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \langle u(\mathbf{r}_1) \rangle^2 + D(\nabla_1^2 + \nabla_2^2) u(\mathbf{r}_1) u(\mathbf{r}_2)]. \tag{12.3.12б}$$

Эти уравнения описывают локальные флуктуации в химической реакции.

Давайте воспользуемся этими уравнениями для того, чтобы найти флуктуации в равновесии, считая полный объем бесконечным. В соответствии с (12.3.12а) макросостояние соответствует (в наших единицах) $\langle u(\mathbf{r}) \rangle^e = 1$. Тогда (12.3.12б) сводится к

$$D(\nabla_1^2 + \nabla_2^2) [u(\mathbf{r}_1) u(\mathbf{r}_2)]^e = 4 [u(\mathbf{r}_1) u(\mathbf{r}_2)^e + \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2). \tag{12.3.13}$$

Поскольку величина $[u(\mathbf{r}_1) u(\mathbf{r}_2)]^e$ должна быть функцией, зависящей только от $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$, и не может экспоненциально возрастать, единственно возможным решением является

$$[u(\mathbf{r}_1) u(\mathbf{r}_2)]^e = -\frac{1}{8\pi D} \frac{e^{-(2/D)^{1/2} |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}.$$

Для ковариации это дает в первоначальных единицах (9.1.3) следующее выражение:

$$\langle\langle u(\mathbf{r}_1)\, u(\mathbf{r}_2)\rangle\rangle^{\mathrm{e}} = \langle u\rangle^{\mathrm{e}} \left\{ \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) - \frac{\varkappa^2}{16\pi} \frac{e^{-\varkappa|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \right\}, \qquad (12.3.14)$$

где

$$\langle u\rangle^{\mathrm{e}} = \sqrt{k\varphi_A/(2k')} \quad \text{и} \quad \varkappa^2 = 2\sqrt{2kk'\varphi_A/D}.$$

В соответствии с (9.1.3) вероятность того, что за единичное время молекула X исчезнет (в равновесии), есть $2k'\langle n\rangle^{\mathrm{e}}\Omega = \sqrt{2kk'\varphi_A}$, а ее среднее время жизни является обратной к этому величиной. Понятно, что $\varkappa^{-1}$ является мерой расстояния, на которое диффундирует молекула за свое время жизни. Выделим в бесконечном объеме область V, линейные размеры которой велики по сравнению с $\varkappa^{-1}$. Дисперсия числа N_V молекул X в объеме V получается путем интегрирования (12.3.14). Результат имеет вид *

$$\langle\langle N_V\rangle\rangle^{\mathrm{e}} = \langle N_V\rangle^{\mathrm{e}} \left(1 - \frac{1}{4}\right) = \frac{3}{4}\langle N_V\rangle^{\mathrm{e}}. \qquad (12.3.15)$$

Этот результат совпадает с (9.1.3), полученным для случая с тщательным перемешиванием. Причина состоит в том, что объем V слишком велик для того, чтобы диффузия могла установить материальный обмен с окружающей объем средой.

С другой стороны, когда объем V мал по сравнению с $\varkappa^{-1}$, диффузия оказывается существенной, но ее воздействие зависит, конечно, от формы объема V. И все же можно оценить интеграл (12.3.14):

$$\langle\langle N_V^2\rangle\rangle^{\mathrm{e}} = \langle u\rangle^{\mathrm{e}} \left\{ V - \frac{\varkappa^2}{16\pi} \cdot \frac{V^2}{l} \right\}, \qquad (12.3.16)$$

где l — размер порядка диаметра области V. В пределе малого объема V это выражение стремится к $\langle N_V\rangle^{\mathrm{e}}$, как в распределении Пуассона. Причина состоит в том, что влияние флуктуаций, вызванных диффузией, превосходит воздействие химической реакции **.

Окончательно, если реакция происходит в конечном объеме Ω, нужно решать уравнение (12.3.13) в этом объеме с граничным условием, состоящим в том, что нормальные производные от u обращаются в нуль на стенках. Если диаметр Ω мал по сравнению с $\varkappa^{-1}$, то решение имеет вид

$$[u(\mathbf{r}_1 u(\mathbf{r}_2)]^{\mathrm{e}} = -\frac{1}{4}\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2). \qquad (12.3.17)$$

Отсюда снова получаем (9.1.13).

---

* Y. Kuramoto, Prog. Theor. Phys. 49, 1782 (1973); A. Nitzan and J. Ross, J. Statist. Phys. 10, 379 (1974).

** Эта разница между большим и малым объемами была отмечена в работе: Y. Kuramoto, Prog. Theor. Phys. 52, 711 (1974). Я предлагаю называть $\varkappa^{-1}$ радиусом Курамото. См. также: L. Brenig and C. van den Broeck, Phys. Rev. A21, 1039 (1980).

Упражнение. Выведите (12.3.10).

Упражнение. Для Фурье—преобразования (11.3.14) получите выражение

$$\int \langle\langle u(\mathbf{r}_1)\, u(\mathbf{r}_2)\rangle\rangle^e e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)}\, d(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2) = \langle u\rangle^e \frac{3+4k^2/\varkappa^2}{4+4k^2/\varkappa^2},$$

которое является формулой, выведенной Курамото. Отсюда легко получить оба предельных случая.

Упражнение. Решите (12.3.13) в конечном кубе и получите (12.3.7) в пределе $D \longrightarrow 0$.

12.4. ФЛУКТУАЦИИ ПЛОТНОСТИ В ФАЗОВОМ ПРОСТРАНСТВЕ

До сих пор мы рассматриваем перенос частиц только за счет диффузии. Как упоминалось в § 12.1, непрерывное описание не является строго необходимым, потому что процесс диффузии можно описать как скачки между ячейками и таким образом включить ее в основное кинетическое уравнение для многих переменных. Теперь рассмотрим частицы, которые свободно движутся и которые в этом случае можно описывать не только координатами $\mathbf{r}$, но и скоростями $\mathbf{v}$. Ячейки Δ являются шестимерными ячейками в одночастичном фазовом пространстве. До тех пор, пока не происходит реакции, скорость $\mathbf{v}$ постоянна, а координата $\mathbf{r}$ непрерывно изменяется. В результате распределение вероятности изменяется таким образом, что его нельзя описать последовательностью скачков, а нужно использовать дифференциальный оператор. Таким образом, мы приходим к необходимости непрерывного описания. Но и в этом случае можно воспользоваться методом составных моментов.

Мы продемонстрируем метод на следующем конкретном, быть может в чем-то тривиальном, примере. Сгусток частиц свободно движется в пространстве, но каждая частица может исчезнуть с вероятностью a. Это может произойти вследствие спонтанного распада или столкновения, в результате которого произойдет реакция. Для того чтобы учесть последнюю возможность, предположим, что a может зависеть от $\mathbf{v}$. Разделим $(\mathbf{r}, \mathbf{v})$-пространство на ячейки Δ и обозначим n_λ число частиц в ячейке λ. Совместное распределение вероятности $P(\{n_\lambda\}, t)$ может изменяться вследствие распада и вследствие движения частиц. Распад описывается формулой

$$\dot{P} = \sum_\lambda a_\lambda (\mathbf{E}_\lambda - 1)\, n_\lambda P. \tag{12.4.1}$$

Из нее следуют соотношения для моментов:

$$\partial_t \langle n_\alpha\rangle = -a_\alpha \langle n_\alpha\rangle, \tag{12.4.2а}$$

$$\partial_t \langle\langle n_\alpha n_\beta\rangle\rangle = -(a_\alpha + a_\beta)\, \langle\langle n_\alpha n_\beta\rangle\rangle + \delta_{\alpha\beta} a_\alpha \langle n_\alpha\rangle, \tag{12.4.2б}$$

$$\partial_t [n_\alpha n_\beta] = -(a_\alpha + a_\beta)\, [n_\alpha n_\beta]. \tag{12.4.2в}$$

При непрерывном описании

$$\partial_t \langle u(\mathbf{r}, \mathbf{v})\rangle = -a(\mathbf{v}) \langle u(\mathbf{r}, \mathbf{v})\rangle, \tag{12.4.3а}$$

$$d_t [u(\mathbf{r}_1, \mathbf{v}_1)\, u(\mathbf{r}_2, \mathbf{v}_2)] = -\{a(v_1) + a(v_2)\}\, u(\mathbf{r}_1, \mathbf{v}_1)\, u(\mathbf{r}_2, \mathbf{v}_2)]. \tag{12.4.3б}$$

Отметим, что в этом случае $\delta_{\alpha\beta}/\Delta \longrightarrow \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)\, \delta(\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2)$.

Теперь легко добавить члены следующим образом:

$$\partial_t \langle u(\mathbf{r}, \mathbf{v})\rangle = -a(v)\, u(\mathbf{r}, \mathbf{v})\rangle - \mathbf{v}\cdot\nabla \langle u(\mathbf{r}, \mathbf{v})\rangle, \qquad (12.4.4а)$$

$$\partial_t [u(\mathbf{r}_1, \mathbf{v}_1)\, u(\mathbf{r}_2, \mathbf{v}_2)] = -\{a(v_1) + a(v_2) + \mathbf{v}_1\cdot\nabla_1 + \mathbf{v}_2\cdot\nabla_2\}\, [u(\mathbf{r}_1, \mathbf{v}_1)\, u(\mathbf{r}_2, \mathbf{v}_2)]. \qquad (12.4.4б)$$

В случае диффузии, для того чтобы учесть случайный характер диффузии, было существенным добавить адеквативные члены к факториальному кумулянту, а не к дисперсии, но в настоящем случае это не имеет значения. Мы используем факториальные кумулянты только потому, что с ними уравнения получаются проще. Эти уравнения легко решить.

Предположим, что начальная плотность задана и имеет вид $u_0(\mathbf{r}, \mathbf{v})$. Тогда (12.4.4) дает

$$\langle u(\mathbf{r}, \mathbf{v})\rangle_t = e^{-a(v)t} u_0(\mathbf{r} - \mathbf{v}t, \mathbf{v}), \qquad (12.4.5а)$$

$$[u(\mathbf{r}_1, \mathbf{v}_1)\, u(\mathbf{r}_2, \mathbf{v}_2)]_t = e^{-\{a(v_1)+a(v_2)\}t} \times [u(\mathbf{r}_1 - \mathbf{v}_1 t, \mathbf{v}_1)\, u(\mathbf{r}_2 - \mathbf{v}_2 t, \mathbf{v}_2)]_0 = -e^{-2a(v_1)t}\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)\,\delta(\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2)\, u_0(\mathbf{r}_1 - \mathbf{v}_1 t, \mathbf{v}_1). \qquad (12.4.5б)$$

Соответственно

$$\langle\langle u(\mathbf{r}_1, \mathbf{v}_1)\, u(\mathbf{r}_2, \mathbf{v}_2)\rangle\rangle_t = \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)\,\delta(\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2)\,\{1 - e^{-a(v_1)t}\}\,\langle u(\mathbf{r}_1, \mathbf{v}_1)\rangle_t \qquad (12.4.6)$$

и по аналогии с (12.3.8) для $t_2 \geqslant t_1$ находим

$$\langle\langle u(\mathbf{r}_1, \mathbf{v}_1, t_1)\, u(\mathbf{r}_2, \mathbf{v}_2, t_2)\rangle\rangle = \delta\{\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 + \mathbf{v}_1(t_2 - t_1)\}\,\delta(\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2) \times e^{-a(v_1)t_2}\{1 - e^{-a(v_1)t_1}\}\, u_0(\mathbf{r}_1 - \mathbf{v}_1 t_1, \mathbf{v}_1). \qquad (12.4.7)$$

Естественно, не существует никакого равновесного состояния, кроме тождественного нулю.

Следующий пример менее тривиален, но, к сожалению, уравнения для флуктуаций слишком сложны, чтобы их можно было вычислить детально. Рассмотрим полупроводник, в котором носители заряда находятся в состояниях, описывающихся в псевдомоментах $\mathbf{k}$, которые в данном случае совпадают со скоростью. Они производятся в единичном объеме со скоростью b_k или рекомбинируют со скоростью $a_k w$, где w — пространственная плотность вакантных доноров. Разделим координатное пространство на ячейки Δ, пронумерованные числами λ. Импульсное пространство состоит из дискретных уравнений $\mathbf{k}$. Совместное распределение вероятности числа m_λ вакантных доноров и числа $n_{\lambda k}$ носителей заряда описывается уравнением

$$\dot{P}(\{n_{\lambda\mathbf{k}}\}, \{m_\lambda\}, t) = \Delta \sum_{\lambda\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}} (\mathbf{E}_{m\lambda}\mathbf{E}_{n_{\lambda\mathbf{k}}}^{-1} - 1)\, P + \Delta^{-1} \sum_{\lambda\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} (\mathbf{E}_{m_\lambda}^{-1}\mathbf{E}_{n_{\lambda\mathbf{k}}} - 1)\, m_\lambda\, n_{\lambda\mathbf{k}} P. \qquad (12.4.8)$$

Для первых моментов отсюда можно вывести соотношение

$$\partial_t \langle m_\alpha \rangle = -\Delta \sum_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}} + \Delta^{-1} \langle m_\alpha \rangle \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} \langle n_{\alpha\mathbf{k}} \rangle + O(\Delta^0),$$

$$\partial_t \langle n_{\alpha\mathbf{k}} \rangle = \Delta b_{\mathbf{k}} - \Delta^{-1} a_{\mathbf{k}} \langle m_\alpha \rangle \langle n_{\alpha\mathbf{k}} \rangle + O(\Delta^0).$$

Координатное пространство можно сделать непрерывным, если ввести плотности $w(\mathbf{r})$ и $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$:

$$\partial_t \langle w(\mathbf{r}) \rangle = -\sum_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}} + \langle w(\mathbf{r}) \rangle \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} \langle u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \rangle, \tag{12.4.9а}$$

$$\partial_t \langle u_{\mathbf{k}}(r) \rangle = b_{\mathbf{k}} - a_{\mathbf{k}} \langle w(\mathbf{r}) \rangle \langle u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \rangle. \tag{12.4.9б}$$

Для того чтобы перейти к непрерывному описанию u, в $\mathbf{k}$-пространстве предположим, что в ячейке фазового пространства $d^3\mathbf{k}$ имеется $\rho(\mathbf{k})\, d^3\mathbf{k}$ уровней. Число носителей заряда в такой ячейке есть $u(\mathbf{r}, \mathbf{k})\, d^3\mathbf{k}$. Тогда (12.4.9) принимает вид

$$\partial_t \langle w(\mathbf{r}) \rangle = -\int b_{\mathbf{k}} \rho(k)\, d^3\mathbf{k} + \langle w(\mathbf{r}) \rangle \int a_{\mathbf{k}} \langle u(r, \mathbf{k}) \rangle\, d^3\mathbf{k}, \tag{12.4.10а}$$

$$\partial_t \langle u(\mathbf{r}, \mathbf{k}) \rangle = b_{\mathbf{k}} \rho(k) - a_k \langle w(\mathbf{r}) \rangle \langle u(\mathbf{r}, \mathbf{k}) \rangle. \tag{12.4.10б}$$

Теперь легко добавить члены, описывающие движение в пространстве под влиянием приближенной силы $\mathbf{F}$. Естественно, (12.4.10а) не меняется, потому что доноры фиксированы, а (12.4.10б) принимает вид

$$\partial_t \langle u(\mathbf{r}, \mathbf{k}) \rangle = b_{\mathbf{k}} \rho(k) - a_k \langle w(\mathbf{r}) \rangle \langle u(\mathbf{r}, \mathbf{k}) \rangle - \\ - (\mathbf{k} \cdot \nabla) \langle u(\mathbf{r}, \mathbf{k}) \rangle - (\mathbf{F} \cdot \nabla_{\mathbf{k}}) \langle u(\mathbf{r}, \mathbf{k}) \rangle. \tag{12.4.11}$$

Это и есть макроскопические уравнения, которые можно было бы вывести непосредственно из макроскопической картины. Для того чтобы определить также и флуктуации, нужно (12.4.8) систематически разложить по параметру $\Delta^{-1/2}$, найти уравнения для вторых моментов в приближении линейного шума и дополнить их потоковыми членами. Однако, поскольку в нашем случае имеется два случайных поля $u(\mathbf{r}, \mathbf{k})$ и $\dot{w}(\mathbf{r})$, уравнения усложняются, и поэтому мы здесь их подробно не рассматриваем.

Упражнение. Упростите модель полупроводника, полагая для вероятности рекомбинации $a_k w = c_k$ независимо от доноров. Найдите для этой минерализованной модели функцию $G(\mathbf{r}, t)$, определенную в (12.3.7).

Упражнение. Найдите стационарное решение уравнений (12.4.10а) и (12.4.11) в одномерном случае:

$$\langle w(x) \rangle^s = w = \text{const},$$

$$\langle u(x, k) \rangle^s = \frac{1}{F} \int_{-\infty}^{k} b_{k'} \rho(k')\, dk' \exp\left[-\frac{w}{F} \int_{k'}^{k} a_{k''}\, dk'' \right] \tag{12.4.12}$$

(предполагается, что $b_k \rho(k)$ стремится к нулю при больших $|k|$, но для a_k это уже не так). Как найти w?

Упражнение. Найдите также стационарное решение уравнения (12.4.11) в трехмерном случае.

Упражнение. Из (12.4.12) для малых F выверите соотношение

$$\langle u(x, k)\rangle^s = \frac{b_k\rho(k)}{\omega a_k} - \frac{F}{\omega^2 a_k}\frac{d}{dk}\frac{b_k\rho(k)}{a_k} + O(F^2).$$

Получите из этого выражения формулу для линейной части проводимости:

$$\sigma = e^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{b_k\rho(k)}{a_k}\left(\frac{d}{dk}\frac{k}{a(k)}\right) dk \Big/ \int_{-\infty}^{\infty} \frac{b_k\rho(k)}{a_k}\, dk.$$

Упражнение. Нейтроны в ядерном реакторе ведут себя как свободные частицы до тех пор, пока они не поглощаются, не рассеиваются или не вызывают деления и, следовательно, воспроизводства большего числа нейтронов. Основное кинетическое уравнение для совместного распределения вероятности чисел заполнения n_λ ячеек фазового пространства λ имеет вид

$$\dot{P}(\{n\}, t) = \sum_{\lambda}\sum_{m=0}^{\infty}\sum_{\{\mu\}} q_m(\mu_1, \mu_2, \ldots, \mu_m \mid \lambda)\left\{E_{\mu_1}^{-1}E_{\mu_2}^{-1}\ldots E_{\mu_m}^{-1}E_\lambda - 1\right\} n_\lambda P.$$

Функция $q_0(\lambda)$ описывает поглощение, $q_1(\mu \mid \lambda)$ — рассеяние, q_m $(m > 1)$ — деление. Выведите уравнения для первого и второго моментов, преобразуйте их к непрерывным обозначениям и добавьте члены, описывающие перенос. В результате получится уравнение переноса нейтронов, включающее флуктуации *.

12.5. ФЛУКТУАЦИИ И УРАВНЕНИЕ БОЛЬЦМАНА

В этом параграфе содержится уже достаточно сложное приложение метода составных моментов. Этот метод применяется к знаменитому уравнению Больцмана **

$$\frac{\partial f(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1)}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}_1}{m}\cdot\frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}_1} + \mathbf{F}(\mathbf{r}_1)\cdot\frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}_1} =$$
$$= \int w(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2 \mid \mathbf{p}_3, \mathbf{p}_4)\, b(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_3)\, f(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_4)\, d^3\mathbf{p}_3\, d^3\mathbf{p}_4\, d^3\mathbf{p}_2 -$$
$$- f(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1)\int w(\mathbf{p}_3, \mathbf{p}_4 \mid \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2)\, f(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_2)\, d^3\mathbf{p}_2\, d^3\mathbf{p}_3\, d^3\mathbf{p}_4. \qquad (12.5.1)$$

Здесь $f(\mathbf{r}, \mathbf{p})\, d^3\mathbf{r}\, d^3\mathbf{p}$ обычно определяется как число молекул в ячейке $d^3\mathbf{r}\, d^3\mathbf{p}$ одночастичного фазового пространства (μ-пространства) при условии, что ячейка достаточно велика, чтобы в ней содержалось много молекул, $\mathbf{F}$ — внешняя сила, зависящая от пространственных координат и действующая на все частицы. Это уравнение основывается на столкновительном члене специального вида Stosszahlansatz, что соответствует следующему предположению. Число столкновений в единичном объеме за единичное время, в течение которого две молекулы с импульсами $\mathbf{p}_1$, $\mathbf{p}_2$ (в пределах $d^3\mathbf{p}_1$, $d^3\mathbf{p}_2$) сталкиваются

* Относительно различных подходов и литературы см.: J. Lewins, Proc. Roy. Soc. A 362, 537 (1978).

** L. Boltzmann, Vorlesungen uber Gastheorie I (J. A. Barth, Leipzig, 1896); S. Chapman and T. G. Cowling, The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases (University Press, Cambridge, 1939); C. Cercignani, Theory and Application of the Boltzman Equation (Scottish Acad. Press, Edinburgh, 1975); P. Resibois and M. de Leener, Classical Kinetic Theory of Fluids (Wiley, New York, 1977).

и разлетаются с импульсами $\mathbf{p}_3$, $\mathbf{p}_4$ (в пределах $d^3\mathbf{p}_3$, $d^3\mathbf{p}_4$), пропорционально произведению

$$f(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1)\, d^3\mathbf{p}_1 \cdot f(\mathbf{r}_2, \mathbf{p}_2)\, d^3\mathbf{p}_2$$

чисел подходящих молекул. Коэффициент пропорциональности w сохраняет импульс и энергию:

$$w(\mathbf{p}_3, \mathbf{p}_4 | \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) = \sigma\delta(\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_3 - \mathbf{p}_4)\, \delta\left(\frac{p_1 + p_2^2 - p_3^2 - p_4^2}{2m}\right),$$

где σ — дифференциальное сечение рассеяния, которое зависит только от $|\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2| = |\mathbf{p}_3 - \mathbf{p}_4|$ и от $(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2)\cdot(\mathbf{p}_3 - \mathbf{p}_4)$.

Точное значение числа молекул в ячейке не может быть равным $f(\mathbf{r}, \mathbf{p})\, d^3\mathbf{r}\, d^3\mathbf{p}$, потому что оно целое. Это число флуктуирует относительно значения, дающегося уравнением Больцмана вследствие случайного характера столкновений, и только их вероятность описывается использованным столкновительным членом. Наша цель — вычислить эти флуктуации. Если f слабо отличается от равновесного распределения, уравнение Больцмана можно заменить его линеаризованной версией. Тогда становится возможным подключить флуктуации, добавив член Ланжевена, значение которого определяется с помощью флуктуационно-диссипативной теоремы*. Однако, как показано в § 8.9, приближения Ланжевена неприменимо вне линейной области. Поэтому мы стартуем с основного кинетического уравнения и используем Ω-разложение. Вся процедура состоит из четырех шагов.

На *первом шаге* построим основное кинетическое уравнение, описывающее воздействие случайных столкновений. Разобьем координатное пространство на ячейки Δ', пометив их числами λ', μ' и т. д., а импульсное пространство — на ячейки Δ'' с лотками λ'', μ'', ... Тем самым мы разбили одночастичное фазовое пространство на ячейки $\Delta = \Delta'\Delta''$ с метками $\lambda = (\lambda', \lambda'')$. Пусть n_λ обозначает число молекул в ячейке λ и $P(\{n\}, t)$ — совместное распределение вероятности всех чисел заполнения. Столкновение переводит две молекулы из ячеек ρ, σ в ячейки λ, μ, где, конечно, $\rho' = \sigma' = \lambda' = \mu'$.

Выбранная нами гипотеза о столкновительном члене означает, что вероятность таких столкновений, отнесенная к единице времени, есть $w_{\lambda\mu\rho\sigma} n_\rho n_\sigma$. Тогда основное кинетическое уравнение имеет вид**

$$\dot{P}(\{n\}, t) = \sum_{\lambda\mu\rho\sigma} w_{\lambda\mu\rho\sigma} (\mathbf{E}_\lambda^{-1}\mathbf{E}_\mu^{-1}\mathbf{E}_\rho\mathbf{E}_\sigma - 1)\, n_\rho n_\sigma P. \qquad (12.5.2)$$

---

* A. A. Abrikosov and I. M. Khalatnikov, Sov. Phys. JETP 34, 135 (1958); M. Bixon and R. Zwanzig, Phys. Rev. 187, 267 (1969); R. F. Fox and G. E. Uhlenbeck, Phys. Fluids 13, 1893 and 2881 (1970).

** A. J. F. Siegert, Phys. Pev. 76, 1708 (1949); H. K. Janssen, Z. Phys. 258, 243 (1973).

Чтобы найти связь между $w_{\lambda\mu\rho\sigma}$ и $w(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2 | \mathbf{p}_3, \mathbf{p}_4)$, из (12.5.2) выделим макроскопическое уравнение

$$\dot{n}_\alpha = \sum_{\lambda\mu\rho\sigma} w_{\lambda\mu\rho\sigma} (\delta_{\alpha\lambda} + \delta_{\alpha\mu} - \delta_{\alpha\rho} - \delta_{\alpha\sigma}) n_\rho n_\sigma = \\ = 2 \sum_{\mu\rho\sigma} w_{\alpha\mu\rho\sigma} n_\rho n_\sigma - 2n_\alpha \sum_{\lambda\mu\sigma} w_{\lambda\mu\alpha\sigma} n_\sigma.$$

С другой стороны, первый член в столкновительной части уравнения Больцмана можно записать в виде

$$\int w(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2 | \mathbf{p}_3, \mathbf{p}_4) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_3) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_4) \times \\ \times f(\mathbf{r}_3, \mathbf{p}_3) f(\mathbf{r}_4, \mathbf{p}_4) \, d\mathbf{r}_2 \, d\mathbf{p}_2 \, d\mathbf{r}_3 \, d\mathbf{p}_3 \, d\mathbf{r}_4 \, d\mathbf{p}_4.$$

Поскольку $n = f\Delta'\Delta''$, можно сравнить оба первых члена; с помощью (12.2.6) находим:

$$2w_{\lambda\mu\rho\sigma} = \Delta^2 w(\mathbf{p}_{\lambda''}, \mathbf{p}_{\mu''} | \mathbf{p}_{\rho''}, \mathbf{p}_{\sigma''}) \frac{\delta\lambda'\mu'}{\Delta'} \frac{\delta\lambda'\rho'}{\Delta'} \frac{\delta\lambda'\sigma'}{\Delta'}.$$

Второй шаг состоит в разложении основного кинетического уравнения по параметру* $\Delta^{-1/2}$. Как обычно, полагаем $n_\lambda = \Delta\varphi_\lambda + \Delta^{1/2}\xi_\lambda$, тогда наибольшие члены дает макроскопическое уравнение

$$\dot{\varphi}_\alpha = \Delta \sum_{\lambda\mu\rho\sigma} w_{\lambda\mu\rho\sigma} (\delta_{\alpha\lambda} + \delta_{\alpha\mu} - \delta_{\alpha\rho} - \delta_{\alpha\sigma}) \varphi_\rho \varphi_\sigma, \qquad (12.5.3)$$

которое является нелинейным уравнением Больцмана. Удобно ввести следующие обозначения:

$$w_{\lambda\mu\rho\sigma} (\delta_{\alpha\lambda} + \delta_{\alpha\mu} - \delta_{\alpha\mu} - \delta_{\alpha\rho} - \delta_{\alpha\sigma}) = W(\alpha | \lambda\mu\rho\sigma).$$

В следующем порядке по параметру $\Delta^{-1/2}$ для распределения $\Pi(\{\xi_\lambda\}, t)$ получаем линейное уравнение Фоккера—Планка в случае многих переменных:

$$\frac{\partial \Pi}{\partial t} = 2\Delta \sum_{\lambda\mu\rho\sigma} w_{\lambda\mu\rho\sigma} \left(-\frac{\partial}{\partial \xi_\lambda} - \frac{\partial}{\partial \xi_\mu} + \frac{\partial}{\partial \xi_\sigma} + \frac{\partial}{\partial \xi_\sigma} \right) \varphi_\beta \xi_\sigma \Pi + \\ + \Delta \sum_{\lambda\mu\rho\sigma} w_{\lambda\mu\rho\sigma} \varphi_\rho \varphi_\sigma \left(-\frac{\partial}{\partial \xi_\lambda} - \frac{\partial}{\partial \xi_\mu} + \frac{\partial}{\partial \xi_\rho} + \frac{\partial}{\partial \xi_\sigma} \right)^2 \Pi. \quad (12.5.4)$$

Отсюда для первых моментов получаем

$$\partial_t \langle \xi_\alpha \rangle = 2\Delta \sum_{\lambda\mu\rho\sigma} W(\alpha | \lambda\mu\rho\sigma) \varphi_\rho \langle \xi_\sigma \rangle. \qquad (12.5.5)$$

Это уравнение Больцмана (12.5.3), линеаризованное вблизи макроскопического решения φ. Отсюда видно, что среднее $\langle n_\alpha \rangle = \Delta\varphi_\alpha +$

---

* N. G. van Kampen, Phys. Letters 50A, 237 (1974); J. Logan and M. Kac, Phys. Rev. A13, 458 (1976); M. Kac and J. Logan in: Studies in Statistical Mechanics VII. Fluctuation Phenomena (E. W. Montroll and J. L. Lebowitz eds., North-Holland, Amsterdam, 1979).

$+\Delta^{1/2}\langle\xi_\alpha\rangle$ удовлетворяет нелинейному уравнению Больцмана не только в приближении, соответствующем параметру Δ, но и $\Delta^{1/2}$.

Для вторых моментов из (12.5.4) получаем

$$\partial_t\langle\xi_\alpha\xi_\beta\rangle = 2\Delta\sum W(\alpha\,|\,\lambda\mu\rho\sigma)\,\varphi_\rho\langle\xi_\sigma\xi_\beta\rangle + \\ + 2\Delta\sum W(\beta\,|\,\lambda\mu\rho\sigma)\,\varphi_\rho\langle\xi_\alpha\xi_\sigma\rangle + 2\Delta\sum W(\alpha\,|\,\lambda\mu\rho\sigma)\,\varphi_\rho\varphi_\sigma(\delta_{\beta\lambda}-\delta_{\beta\rho}) + \\ + 2\Delta\sum W(\beta\,|\,\lambda\mu\rho\sigma)\,\varphi_\rho\varphi_\sigma(\delta_{\alpha\lambda}-\delta_{\alpha\rho}).$$

Последние две строки содержат много членов, но их можно упростить, если ввести факториальные кумулянты:

$$[n_\alpha n_\beta] = \Delta\langle\langle\xi_\alpha\xi_\beta\rangle\rangle + \delta_{\alpha\beta}\Delta\varphi_\alpha.$$

После достаточно длинных вычислений приходим к выражению

$$\partial_t[n_\alpha n_\beta] = 2\Delta\sum_{\lambda\mu\rho\sigma} W(\alpha\,|\,\lambda\mu\rho\sigma)\,\varphi_\rho[n_\sigma n_\beta] + 2\Delta\sum_{\lambda\mu\rho\sigma} W(\beta\,|\,\lambda\mu\rho\sigma)\,\varphi_\rho[n_\alpha n_\sigma] + \\ + 2\Delta^2\sum_{\rho\sigma}(w_{\alpha\beta\rho\sigma}\varphi_\rho\varphi_\sigma - w_{\rho\sigma\alpha\beta}\varphi_\alpha\varphi_\beta). \quad (12.5.6)$$

На *третьем шаге* запишем эти уравнения в непрерывных обозначениях. Каждый индекс заменяется шестью параметрами $\mathbf{r}$, $\mathbf{p}$, тогда

$$w_{\lambda\mu\rho\sigma} \to \Delta^2 w(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2\,|\,\mathbf{p}_3, \mathbf{p}_4)\,\delta(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)\,\delta(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_3)\,\delta(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_4),$$

$$W(\alpha\,|\,\lambda\mu\rho\sigma) \to \Delta^3 w(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2\,|\,\mathbf{p}_3, \mathbf{p}_4)\,\delta(\mathbf{r}_0-\mathbf{r}_1)\,\delta(\mathbf{r}_0-\mathbf{r}_2)\,\delta(\mathbf{r}_0-\mathbf{r}_3)\times \\ \times\delta(\mathbf{r}_0-\mathbf{r}_4)\times\{\delta(\mathbf{p}_0-\mathbf{p}_1)+\delta(\mathbf{p}_0-\mathbf{p}_2)-\delta(\mathbf{p}_0-\mathbf{p}_3)-\delta(\mathbf{p}_0-\mathbf{p}_4)\},$$

теперь (12.5.3) совместно с (12.5.5) дает

$$\partial_t\langle u(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1)\rangle = 2\int w(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2\,|\,\mathbf{p}_3, \mathbf{p}_4)\langle u(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_3)\rangle\langle u(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_4)\rangle\,d\mathbf{p}_2\,d\mathbf{p}_3\,d\mathbf{p}_4 - \\ - 2\int w(\mathbf{p}_3\,\mathbf{p}_4\,|\,\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2)\langle u(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1)\rangle\langle u(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_2)\rangle\,d\mathbf{p}_2\,d\mathbf{p}_3\,d\mathbf{p}_4. \quad (12.5.7)$$

На последнем *четвертом шаге* дополним правую часть потоковыми членами, включая внешнюю силу $\mathbf{F}(\mathbf{r})$, а именно

$$-\frac{\mathbf{p}}{m}\cdot\frac{\partial}{\partial\mathbf{r}}\langle u(\mathbf{r}, \mathbf{p})\rangle - \mathbf{F}\cdot\frac{\partial}{\partial\mathbf{p}}\langle u(\mathbf{r}, \mathbf{p})\rangle. \quad (12.5.8)$$

Таким образом, мы получили полное уравнение Больцмана для величины $\langle u(\mathbf{r}, \mathbf{p})\rangle$. Аналогично, из (12.5.6) получаем

$$d_t[u(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1)\,u(\mathbf{r}_2, \mathbf{p}_2)] = \\ = 4\int w(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_4\,|\,\mathbf{p}_5, \mathbf{p}_6)\langle u(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_5\rangle[u(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_6)\,u(\mathbf{r}_2, \mathbf{p}_2)]\,d\mathbf{p}_4\,d\mathbf{p}_5\,d\mathbf{p}_6 - \\ - 2\int w(\mathbf{p}_3, \mathbf{p}_4\,|\,\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_6)\langle u(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1)\rangle[u(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_6)\,u(\mathbf{r}_2, \mathbf{p}_2)]\,d\mathbf{p}_3\,d\mathbf{p}_4\,d\mathbf{p}_6 - \\ - 2\int w(\mathbf{p}_3, \mathbf{p}_4\,|\,\mathbf{p}_5, \mathbf{p}_1)\langle u(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_5)\rangle\,d\mathbf{p}_3\,d\mathbf{p}_4\,d\mathbf{p}_5\,[u(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1)\,u(\mathbf{r}_2, \mathbf{p}_2)] + \\ + 4\int w(\mathbf{p}_2, \mathbf{p}_4\,|\,\mathbf{p}_5, \mathbf{p}_6)\langle u(\mathbf{r}_2, \mathbf{p}_5)\rangle[u(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1)\,u(\mathbf{r}_2, \mathbf{p}_6)]\,d\mathbf{p}_4\,d\mathbf{p}_5\,d\mathbf{p}_6 -$$

$$-2\int w(\mathbf{p}_3,\ \mathbf{p}_4\,|\,\mathbf{p}_5,\ \mathbf{p}_6)\langle u(\mathbf{r}_2,\ \mathbf{p}_2)\rangle\,[u(\mathbf{r}_1,\ \mathbf{p}_1)\,u(\mathbf{r}_2,\ \mathbf{p}_6)]\,d\mathbf{p}_3\,d\mathbf{p}_4\,d\mathbf{p}_6 -$$

$$-2\int w(\mathbf{p}_3,\ \mathbf{p}_4)\,|\,\mathbf{p}_5,\ \mathbf{p}_1)\langle u(\mathbf{r}_1,\ \mathbf{p}_5)\rangle\,d\mathbf{p}_3\,d\mathbf{p}_4\,d\mathbf{p}_5\,[u(\mathbf{r}_1,\ \mathbf{p}_1)\,u(\mathbf{r}_2,\ \mathbf{p}_2)]+$$

$$+2\delta(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)\int w(\mathbf{p}_1,\ \mathbf{p}_2\,|\,\mathbf{p}_3,\ \mathbf{p}_4)\langle u(\mathbf{r}_1,\ \mathbf{p}_3)\rangle\langle u(\mathbf{r}_1,\ \mathbf{p}_4)\rangle\,d\mathbf{p}_3\,d\mathbf{p}_4 -$$

$$-2\delta(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)\int w(\mathbf{p}_3,\ \mathbf{p}_4\,|\,\mathbf{p}_1,\ \mathbf{p}_2)\,d\mathbf{p}_3\,d\mathbf{p}_4\times\langle u(\mathbf{r}_1,\ \mathbf{p}_1)\rangle\langle u(\mathbf{r}_1,\ \mathbf{p}_2)\rangle +$$

$$+\left\{-\frac{\mathbf{p}_1}{m}\times\frac{\partial}{\partial\mathbf{r}_1}-\frac{\mathbf{p}_2}{m}\times\frac{\partial}{\partial\mathbf{r}_2}-\mathbf{F}(\mathbf{r}_1)\times\frac{\partial}{\partial\mathbf{p}_1}-\mathbf{F}(\mathbf{r}_2)\times\frac{\partial}{\partial\mathbf{p}_2}\right\}\times$$

$$\times[u(\mathbf{r}_1,\ \mathbf{p}_1)\,u(\mathbf{r}_2,\ \mathbf{p}_2)]. \quad (12.5.9)$$

Это уравнение определяет (в приближении линейного шума) флуктуации относительно решения уравнения Больцмана $\langle u(\mathbf{r},\ \mathbf{p})\rangle$.

Уравнение не так страшно, как кажется на первый взгляд. Первые три строки представляют собой линеаризованный оператор Больцмана, действующий на множитель $u(\mathbf{r}_1,\ \mathbf{p}_1)$ в факториальном кумулянте. Следующие три строки — это тот же оператор, только действующий на множитель $u(\mathbf{r}_2,\ \mathbf{p}_2)$. Седьмая и восьмая строки представляют собой источники флуктуаций, а записанные в восьмой строке потоковые члены добавлены к обоим множителям. Это уравнение имеет общий вид (8.6.6б), когда A совпадает с линеаризованным оператором Больцмана, включая токовый член.

Теперь мы используем уравнение (12.5.9) для того, чтобы вычислить флуктуации в равновесии*. Соответственно полагаем $\mathbf{F}=0$ и

$$\langle u(\mathbf{r},\ \mathbf{p})\rangle^{\mathrm{e}}=\frac{N}{\Omega}\,(2\pi mkT)^{-3/2}\exp\left[-\frac{\mathbf{p}^2}{2mkT}\right]=\frac{N}{\Omega}\,\psi_0(p).$$

В этом случае седьмая и восьмая строки обращаются в нуль (см. упражнение ниже). Кроме того, факториальные кумулянты не зависят от времени, и мы запишем их как матрицу Θ:

$$[u(\mathbf{r}_1,\ \mathbf{p}_1)\,u(\mathbf{r}_2,\ \mathbf{p}_2)]=(\mathbf{r}_1,\ \mathbf{p}_1\,|\,\Theta\,|\,\mathbf{r}_2,\ \mathbf{p}_2).$$

Тогда (12.5.9) сводится к матричному уравнению

$$0=A\Theta+\Theta\tilde{A}, \quad (12.5.10)$$

где A — линеаризованный оператор Больцмана Λ плюс токовый член:

$$(\mathbf{r}_1,\ \mathbf{p}_1\,|\,A\,|\,\mathbf{r}_2,\ \mathbf{p}_2)=\delta(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)\,(\mathbf{p}_1\,|\,\Lambda\,|\,\mathbf{p}_2)+\delta(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)\,\delta(\mathbf{p}_1,\ \mathbf{p}_2)\,\frac{\mathbf{p}_1}{m}\times\frac{\partial}{\partial\mathbf{r}_1},$$

$$(\mathbf{p}_1\,|\,\Lambda\,|\,\mathbf{p}_2)=4\int w(\mathbf{p}_1,\ \mathbf{p}'\,|\,\mathbf{p}'',\ \mathbf{p}_2)\langle u(\mathbf{p}'')\rangle^{\mathrm{e}}\,d\mathbf{p}'\,d\mathbf{p}''-$$

$$-2\int w(\mathbf{p}',\ \mathbf{p}''\,|\,\mathbf{p}_1,\ \mathbf{p}_2)\,d\mathbf{p}'\,d\mathbf{p}''\langle u(\mathbf{p}_1)\rangle^{\mathrm{e}}.$$

---

* Флуктуации в неравновесном электронном газе изучались в работе: S. V. Gantsevich, V. L. Gurevich and R. Katilius, Rivista Nuovo Cimento 2, 1 (1979), а флуктуации в неравновесных жидкостях в работах: D. Ronis, I. Procaccia and I. Oppenheim, Phys. Rev. A19, 1324 (1979); T. Kirkpatrick, E. G. D. Cohen and J. R. Dorfman, Phys. Rev. Letters 44, 472 (1980).

Оператор Λ действует только на зависимость от $\mathbf{p}$, имеет нулевое собственное значение и пять собственных функций

$$\psi_0(p), \quad \mathbf{p}\psi_0(p), \quad p^2\psi_0(p), \tag{12.5.11}$$

которые мы будем обозначать соответственно

$$\psi_j(p) = Q_j(\mathbf{p})\,\psi_0(\mathbf{p}) \quad (j = 0, \ldots, 4).$$

Все другие собственные значения отрицательны. Можно показать, что эти ψ_j также являются единственными собственными флуктуациями A с нулевым собственным значением; все другие собственные значения A имеют отрицательную действительную часть (см. упражнение). Из (12.5.10) следует, что матрица Θ должна иметь вид

$$(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1 | \Theta | \mathbf{r}_2, \mathbf{p}_2) = \sum_{i,j}^{5} \theta_{ij}\psi_i(\mathbf{p}_1)\,\psi_j(\mathbf{p}_2). \tag{12.5.12}$$

Чтобы определить коэффициенты θ_{ij}, воспользуемся законами сохранения полного числа частиц, полного импульса и полной энергии. Они дают пять тождеств ($k = 0, \ldots, 4$):

$$\int [u(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1)\,u(\mathbf{r}_2, \mathbf{p}_2)]^e\, Q_k(\mathbf{p}_2)\,d\mathbf{r}_2\,d\mathbf{p}_2 = -Q_k(\mathbf{p}_1)\,\langle u(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1)\rangle^e.$$

Подставляя (12.5.12) и выполняя интегрирование, получаем

$$\sum_{ij} \theta_{ij} Q_i(\mathbf{p}_1)\,B_{jk} = -(N/\Omega^2)\,Q_k(\mathbf{p}_1),$$

где

$$B_{jk} = \int Q_j(\mathbf{p}_2)\,Q_k(\mathbf{p}_2)\,\psi_0(\mathbf{p}_2)\,d\mathbf{p}_2$$

— матрица, имеющая вид

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 3mkT \\ 0 & mkT & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & mkT & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & mkT & 0 \\ 3mkt & 0 & 0 & 0 & 15\,(mkT)^2 \end{bmatrix}.$$

Тогда $\theta_{ij} = -(N/\Omega^2)(B^{-1})_{ij}$ и после некоторых преобразований для матрицы ковариаций плотности получаем выражение

$$\langle\langle u(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1)\,u(\mathbf{r}_2, \mathbf{p}_2)\rangle\rangle^e = \frac{N}{\Omega}\Big[\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)\,\delta(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2)\,\psi_0(\mathbf{p}_1) -$$

$$- \Omega^{-1}\psi_0(\mathbf{p}_1)\,\psi_0(\mathbf{p}_2)\left\{\frac{5}{2} - \frac{(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2)^2}{2mkT} + \frac{\mathbf{p}_1^2\mathbf{p}_2^2}{6\,(mkT)^2}\right\}\Big]. \tag{12.5.13}$$

Выводы. 1. В литературе функцию f, описываемую уравнением Больцмана, определяют по-разному: как число, среднее число, вероятное число или наиболее вероятное число молекул в единичной фазовой ячейке всего пространства. В нашем рассмотрении, бази-

рующемся на основном кинетическом уравнении, она возникает как макроскопическое значение такого числа, полученного в пределе нулевых флуктуаций. Более того, вплоть до порядка Δ^{-1} флуктуации симметричны, так что f совпадает со средним значением. Но его нельзя назвать «наиболее вероятным числом», потому что оно не целое.

2. Хотя основное кинетическое уравнение более информативно, чем уравнение Больцмана, его физические предпосылки те же самые. Основным моментом является предположение о характере столкновений (stosszahlansatz), которое также ответственно за свойство марковости.

3. Первый член в (12.5.3) — пуассоновский. Второй член попросту означает, что если происходят флуктуации в одной точке пространства, то избыток молекул, импульса или энергии должен выйти из остающегося объема Ω.

Для больших Ω, несмотря на то что молекулы взаимодействуют, эта поправка обращается в нуль и корреляция является чисто пуассоновской.

Упражнение. Покажите, что для твердых сфер массой m и диаметром d

$$w(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2 \mid \mathbf{p}_3, \mathbf{p}_4) = \frac{d^2}{m^2}\,\delta(\mathbf{p}_1+\mathbf{p}_2-\mathbf{p}_3-\mathbf{p}_4)\,\delta\left(\frac{\mathbf{p}_1^2+\mathbf{p}_2^2-\mathbf{p}_3^2-\mathbf{p}_4^2}{2m}\right). \quad (12.5.14)$$

Указание. Начните с выражения

$$\frac{|\mathbf{p}_3-\mathbf{p}_4|}{m}\,d^2\int \delta\,[\mathbf{p}_3+\mathbf{n}\,\{\mathbf{n}\times(\mathbf{p}_4-\mathbf{p}_3)\}-\mathbf{p}_1]\,\delta\,[\mathbf{p}_4-\mathbf{n}\,\{\mathbf{n}\times(\mathbf{p}_4-\mathbf{p}_3)\}-\mathbf{p}_2]\,d^2\mathbf{n},$$

где $\mathbf{n}$ — единичный вектор, направленный из центра сферы 2 в точку контакта, а интегрирование ведется по полусфере $(\mathbf{p}_4-\mathbf{p}_3)\cdot\mathbf{n} > 0$.

Упражнение. Для более общего взаимодействия между молекулами константа d^2/m^2 в (12.5.14) становится функцией, зависящей от $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3, \mathbf{p}_4$, а именно дифференциальным сечением рассеяния *.

Упражнение. Покажите, что в равновесии последние три строки в (12.5.9) обращаются в нуль при условии, что $w(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2/\mathbf{p}_3, \mathbf{p}_4) = w(\mathbf{p}_3, \mathbf{p}_4/\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2)$. Это соотношение означает, что каждому столкновению соответствует обратное или восстанавливающее столкновение с равным сечением рассеяния **.

Упражнение. Докажите следующую лемму: если H — положительно полуопределенная симметричная матрица, а F — антисимметричная матрица, если собственные значения матрицы $A = H + F$ обладают неотрицательной действительной частью. Более того, если действительная часть равна нулю, соответствующий собственный вектор является собственным вектором матриц H и F по отдельности. Используйте эту лемму, чтобы показать, что (12.5.12) является решением уравнения (12.5.10).

Упражнение. Как вычислить функцию G, определенную в (12.3.7) для больцмановского случая?

Упражнение. Примените такой же метод к газу Лоренца (хотя в данном случае a priori ясно, что, согласно § 7.6, флуктуации являются пуассоновскими).

---

* P. Resibois and M. de Leener loc. cit., p. 89.

** H. Huang, Statistical Mechanics (Wiley, New York, 1963). Подробное, но недостаточно удовлетворительное обсуждение случая, когда такая симметрия не имеет места, приведено в кн.: R. C. Tolman, Statistical Mechanics (Clarendon, Oxford, 1938).

Упражнение. Рассмотрите идеальный Ферми-газ, частицы которого могут совершать переходы между уровнями вследствие взаимодействия с некоторым тепловым резервуаром. Подразделите уровни в ячейках, обозначенных метками μ, ν, ..., каждая из которых содержит N уровней, и обозначьте $n_\mu (=0, 1, \ldots, N)$ соответствующие числа заполнения. Частица в ячейке μ обладает вероятностью $w_{\nu\mu}$, отнесенной к единичному времени, совершить переход в ν, когда ячейка ν пуста. Тогда распределение вероятности описывается уравнением

$$P(\{n\}) = \sum_{\mu,\nu} w_{\nu\mu} (\mathbf{E}_\mu \mathbf{E}_\nu^{-1} - 1) n_\mu \frac{N - n_\nu}{N} P.$$

Положите $n_\mu = N\varphi_\mu + N^{1/2}\xi_\mu$ и разложите по $N^{-1/2}$. В результате получится макроскопическое уравнение

$$\dot{\varphi}_\nu = \sum_\mu \{w_{\nu\mu}\varphi_\mu (1 - \varphi_\nu) - w_{\mu\nu}\varphi_\nu (1 - \varphi_\mu)\}.$$

Поскольку $\varphi_\mu^e = \{\exp[\varepsilon_\mu/(kT)] - 1\}^{-1}$, соотношение детального равновесия принимает вид

$$w_{\nu\mu} \exp[-\varepsilon_\mu/(kT)] = w_{\nu\mu} \exp[-\varepsilon_\nu/(kT)].$$

Найдите уравнение для корреляции $\langle \xi_\mu \xi_\nu \rangle$ в равновесии и проверьте, что оно удовлетворяется при

$$\langle\langle n_\mu n_\nu \rangle\rangle^e = N\delta_{\mu\nu} \frac{e^{\varepsilon\nu/(kT)}}{(e^{\varepsilon\nu/(kT)} + 1)^2} = -kT \frac{\partial}{\partial\varepsilon_\mu} \langle n_\nu \rangle^e.$$

Примечание. В последние годы большое внимание привлекли неравновесные стационарные процессы, которые являются неустойчивыми и протяженными в пространстве. Они могут приводить к существованию разных фаз, так что нарушается трансляционная симметрия. Они получили название «диссипативных структур», а первыми примерами явились ячейки Бенара и реакция Жаботинского, но они также встречаются в биологии и метеорологии.

Существование таких структур является свойством макроскопических уравнений. Однако они возникают только в теории флуктуаций, поскольку в точке неустойчивости флуктуация дорастает до очень большого значения.

В момент написания этих строк не существует достаточно удовлетворительной математической теории таких явлений.

ГЛАВА 13
СТАТИСТИКА СКАЧКООБРАЗНЫХ СОБЫТИЙ

Многие из рассмотренных нами примеров были связаны со статистикой величин, изменяющихся вследствие случайно приходящихся скачков. В этой главе мы исследуем статистику моментов времени, в которые происходят эти скачки.

13.1. ОСНОВНЫЕ ФОРМУЛЫ И ПРОСТОЙ ПРИМЕР

Рассмотрим одношаговый процесс, в котором за единичное время частицы могут рождаться и рекомбинировать с вероятностями $g(n)$ и $r(n)$. Каждое рождение или рекомбинация является событием во времени, и мы будем интересоваться их статистикой. В качестве

примера можно привести фотопроводник, где рекомбинация происходит при испускании фотона, который можно зарегистрировать. Мы сосредоточимся на событиях рекомбинации, но акты рождения можно рассмотреть таким же образом. Чтобы описать статистику этих событий, применим функции f, введенные в § 2.3.

Предположим, что имеется одношаговый процесс и решение уравнения (6.1.2) известно. Это решение мы обозначим* $p(n, t)$. Какова вероятность $f_1(t_1)\,\mathrm{d}t_1$ того, что произойдет событие рекомбинации в течение интервала времени между t_1 и $t_1+\mathrm{d}t_1$? В случае n_1 частиц, подходящих в момент времени t_1, вероятность рекомбинации есть $r(n_1)\,\mathrm{d}t_1$. Полная вероятность события получается умножением этой величины на вероятность $p(n_1, t_1)$ иметь n_1 частиц в момент времени t_1 и суммированием по всем n_1:

$$f_1(t_1)=\sum_{n_1=1}^{\infty} r(n_1)\,p(n_1, t_1). \tag{13.1.1}$$

Рассмотрим теперь вероятность $f_2, (t_1, t_2)\,\mathrm{d}t_1\,\mathrm{d}t_2$ получить одно событие в течение промежутка времени t_1, $t_1+\mathrm{d}t_1$ и другое — в течение t_2, $t_2+\mathrm{d}t_2$. Без потери общности можно положить $t_2>t_1$. Вероятность первого события есть (13.1.1). После этого события у нас остается n_1-1 подходящих частиц. Следовательно, вероятность иметь n_2 частиц в момент времени t_2 дается вероятностью перехода $p(n_2, t_2\,|\,n_1-1, t_1)$, определяемой уравнениями

$$\frac{\mathrm{d}p(n_2, t_2\,|\,n_1-1, t_1)}{\mathrm{d}t_2}=\sum_{n'} W_{n_2n'}\,p(n', t_2-1, t_1), \tag{13.1.2а}$$

$$p(n_2, t_1\,|\,n_1-1, t_1)=\delta(n_2, n_1-1). \tag{13.1.2б}$$

Тогда вероятность получить оба события составляет

$$f_2(t_1, t_2)=\sum_{n_1, n_2} r(n_2)\,p(n_2, t_2\,|\,n_1-1, t_1)\,r(n_1)\,p(n_1, t_1). \tag{13.1.3}$$

Простейшим примером является процесс распада, рассмотренный в § 4.6, но в этом случае результат тривиален, поскольку события распада по определению независимы. Подобное замечание справедливо для всех линейных процессов (см. § 7.6). Во избежание сложностей, присущих нелинейным процессам, мы рассмотрим здесь пример, который является линейным, но не одношаговым процессом. Однако рекомбинация происходит в один шаг, так что формулы (13.1.1) и (13.1.3) остаются справедливыми.

Рассмотрим химическую реакцию

$$\mathrm{B}\rightarrow 2\mathrm{X},\quad \mathrm{X}\rightarrow \mathrm{A}, \tag{13.1.4}$$

основное кинетическое уравнение для которой есть

$$\dot{p}(n, t)=\alpha(\mathbf{E}-1)\,np+\beta\Omega(\mathbf{E}^{-2}-1)\,p. \tag{13.1.5}$$

* В этой главе мы записываем индекс n в круглых скобках — исключительно для того, чтобы сделать более удобным набор текста в типографии.

Вероятность рекомбинации $r(n) = \alpha n$, тогда, согласно (13.1.1), отсюда следует, что

$$f_1(t_1) = \alpha \langle n(t_1) \rangle. \tag{13.1.6}$$

Далее (13.1.3) сводится к выражению, которое мы запишем в сокращенных обозначениях:

$$f_2(t_1, t_2) = \alpha^2 \langle\langle n(t_2) \mid n_1(t_1) - 1 \rangle n_1(t_1) \rangle, \tag{13.1.7}$$

где $\langle n \mid m \rangle$ обозначает условное среднее от n. Эти величины мы вычислим для стационарного состояния.

Упрощающей особенностью такого линейного примера является тот факт, что f_1 и f_2 включают в себя только низкие моменты n, которые можно получить не решая (13.1.2) явно. Если начальное условие имеет вид $p(n, 0) = \delta(n, n_0)$, легко находим

$$\langle n(t) \rangle = n_0 e^{-\alpha t} + 2(\beta\Omega/\alpha)(1 - e^{-\alpha t}), \tag{13.1.8а}$$

$$\langle n \rangle^s = 2(\beta\Omega/\alpha), \tag{13.1.8б}$$

$$\langle n^2 \rangle^s = 3(\beta\Omega/\alpha) + 4(\beta\Omega/\alpha)^2. \tag{13.1.8в}$$

Тогда в стационарном состоянии имеем соотношение

$$f_1(t_1) = 2\beta\Omega, \tag{13.1.9}$$

которое просто означает, что плотность событий рекомбинации является постоянной величиной, равной скорости образования молекул.

Далее из (13.1.8а) получаем

$$\langle n(t_2) \mid n(t_1) - 1 \rangle = \{n(t_1) - 1\} e^{-\alpha(t_2 - t_1)} + 2(\beta\Omega/\alpha)\{1 - e^{-\alpha(t_2 - t_1)}\}$$

Умножая это выражение на $n(t_1)$ и усредняя по стационарному распределению, получаем

$$f_2(t_1, t_2) = 4(\beta\Omega/\alpha)^2 + (\beta\Omega/\alpha) e^{-\alpha(t_2 - t_1)}.$$

Значение этого результата легче понять, если выразить его через корреляционную функцию:

$$g_2(t_1, t_2) = {}^1/_2 \langle n \rangle^s e^{-\alpha(t_2 - t_1)}. \tag{13.1.10}$$

Примечание. Схема реакции (13.1.4) соответствует реакции перехода

$$B \longrightarrow 2A. \tag{13.1.11}$$

с одним промежуточным продуктом реакции. Полная скорость в соответствии с (13.1.9) равна $2\beta\Omega$. Возникает вопрос: зависят ли флуктуации в этой суммарной реакции от того факта, что она проходит через промежуточное состояние? Для того чтобы ответить на этот вопрос, нужно различать короткие времена порядка времени жизни α^{-1} вещества X и большие времена, на которых адекватно описывается реакция (13.1.11). На коротких временах флуктуации в реакции (13.1.11) рассматривать нельзя, потому что исчезновение одной молекулы B не совпадает с появлением двух молекул A. Действительно, исчезновение молекул B является процессом Пуассона, в то время как появление двух молекул A — нет в соответствии с (13.1.10). На больших временах корреляция (13.1.10) не видна, и тогда (13.1.11) практически является процес-

сом Пуассона, как это было бы, если бы реакция проходила без промежуточного состояния X.

Упражнение. Вычисление (13.1.6) и (13.1.7) для процесса радиоактивного распада.

Упражнение. Найдите статистику события рекомбинаций для химической реакции

$$B \to qX, \quad X \to A \quad (q = 2, 3, 4, \ldots).$$

Как можно понять, что корреляция становится все более положительной с увеличением q?

Упражнение. Пусть $\mathbf{R}$ — диагональная матрица с диагональными элементами $r(n)$. Тогда (13.1.3) можно записать как скалярное произведение, типа (5.7.4):

$$f_2(t_1, t_2) = (p^s, \mathbf{R}e^{(t_2 - t_1)}\mathbf{W}\mathbf{E}\mathbf{R}p(t_1)).$$

Упражнение. Запишите общую формулу для функций f_n, справедливую для процессов рекомбинации и генерации, выразив ее через одношаговый процесс.

Упражнение. Вычислите $f_3(t_1, t_2, t_3)$ для событий рекомбинации в реакции (13.1.4).

13.2. СКАЧКООБРАЗНЫЕ СОБЫТИЯ В НЕЛИНЕЙНЫХ СИСТЕМАХ

Хотя в примере, рассмотренном в предыдущем параграфе, основное кинетическое уравнение получилось линейным, тождества (13.1.1) и (13.1.3) являются общими и их можно получить решив уравнение (13.1.2). Для нелинейных систем это можно сделать с помощью Ω-разложения. Оказывается, однако, что, для того чтобы найти корреляцию между скачкообразными событиями, нужно выйти за пределы линейного шума. К сожалению, это сильно усложняет вычисления *. Здесь мы рассмотрим пример, который построен максимально простым способом.

Рассмотрим следующую схему химической реакции:

$$B \to X, \quad X \to A, \quad 2X \to C.$$

Основное кинетическое уравнение в этом случае нелинейно:

$$\dot{p}(n, t) = \alpha(\mathbf{E} - 1)np + \beta\Omega(\mathbf{E}^{-1} - 1)p + (^1/_2\,\gamma/\Omega)(\mathbf{E}^2 - 1)n(n-1)p. \tag{13.2.1}$$

Как и раньше, будем интересоваться статистикой событий $X \to A$ во времени, так что (13.1.6) и (13.1.7) применимы. Чтобы упростить запись, выберем единицы, в которых $\alpha = \gamma = 1$, и снова рассмотрим только стационарное состояние; Ω-разложение для (13.1.6) имеет вид

$$f_1(t_1) = \Omega\varphi + \Omega^{1/2}\langle\xi\rangle^s,$$

где φ обозначено стационарное значение. Уравнение (13.1.7) принимает вид

$$f_2(t_1, t_2) = \Omega^2\varphi^2 + \Omega^{3/2}\varphi\langle\xi\rangle^s + \Omega^{3/2}\langle\{\langle\xi(t_2)\,|\,\xi(t_1) - \Omega^{-1/2}\rangle\}\rangle^s + \\ + \Omega\langle\langle\xi(t_2)\,|\,\xi(t_1) - \Omega^{-1/2}\rangle\,\xi(t_1)\rangle^s.$$

Корреляция выражается с помощью следующего выражения (в уп-

* См. пример в [8, гл. XII].

рощенных обозначениях):

$$g_2(t_1, t_2) = \Omega^{3/2}\{\langle(\langle\xi_2 \mid \xi_1 - \Omega^{-1/2}\rangle)\rangle^s - \langle\xi\rangle^s\} + \\ + \Omega\{\langle\langle\xi_2 \mid \xi_1 - \Omega^{-1/2}\rangle\,\xi_1\rangle^s - (\langle\xi\rangle^s)^2\}. \quad (13.2.2)$$

Понятно, что в порядке $\Omega^{3/2}$ вклада не возникает, поэтому множитель $\{\}$ в первой строке необходимо вычислить до порядка $\Omega^{-1/2}$. Мы только наметим вычисления.

Стандартный метод разложения дает макроскопическое уравнение, из которого для стационарного φ находим

$$\beta = \varphi + \varphi^2. \quad (13.2.3)$$

Теперь надо записать уравнение для П, включающее члены порядка $\Omega^{-1/2}$. Из него находим

$$\partial_t\langle\xi\rangle = -(1+2\varphi)\langle\xi\rangle + \Omega^{-1/2}\varphi - \Omega^{-1/2}\langle\xi^2\rangle + O(\Omega^{-1}), \quad (13.2.4а)$$

$$\partial_t\langle\xi^2\rangle = -2(1+2\varphi)\langle\xi^2\rangle + \beta + \varphi + 2\varphi^2 + O(\Omega^{-1/2}). \quad (13.2.4б)$$

Из последнего уравнения с начальным значением ξ_0 получаем

$$\langle\xi^2\rangle_t = \xi_0^2 e^{-2\tau} + \sigma^2(1 - e^{-2\tau}) + O(\Omega^{-1/2}),$$

где использованы обозначения

$$\tau = (1+2\varphi)\,t,$$

$$\sigma^2 = \frac{\beta + \varphi + 2\varphi^2}{2(1+2\varphi)} = \frac{2\varphi + 3\varphi^2}{2+4\varphi}.$$

После того как $\langle\xi^2\rangle_t$ найдено с точностью до требуемого порядка, для (13.2.4а) получаем

$$\langle\xi\rangle_t = \xi_0 e^{-\tau} + \frac{\Omega^{-1/2}}{1+2\varphi}(1 - e^{-\tau})\{\varphi - \sigma^2 + (\sigma^2 - \xi_0^2)\,e^{-\tau}\}. \quad (13.2.5)$$

Отсюда следует, в частности, что

$$\langle\xi\rangle^s = \Omega^{-1/2}\frac{\varphi - \sigma^2}{1+2\varphi} + O(\Omega^{-1}).$$

Теперь в (13.2.5) положим $\xi_0 = \xi_1 - \Omega^{-1/2}$ и усреднением по ξ_1

$$\langle(\langle\xi_2 \mid \xi_1 - \Omega^{-1/2}\rangle)\rangle^s = \Omega^{-1/2}\left(\frac{\varphi - \sigma^2}{1+2\varphi} - e^{-\tau}\right) + O(\Omega^{-1}),$$

где $\tau = (1+2\varphi)(t_2 - t_1)$. Таким же способом получаем

$$\langle\langle\xi_2 \mid \xi_1 - \Omega^{-1/2}\rangle\,\xi_1\rangle^s = \sigma^2 e^{-\tau} + O(\Omega^{-1/2}).$$

Подстановка в (13.2.2) дает

$$g_2(t_1, t_2) = \Omega(\sigma^2 - 1)\,e^{-\tau} = \Omega\frac{3\varphi^2 - 2\varphi - 2}{1+2\varphi}\,e^{-(1+2\varphi)|t_1 - t_2|}.$$

Упражнение. Для одношагового процесса с постоянной скоростью генерации g,

но произвольным $r(n)$ уравнение (13.1.3) в стационарном режиме сводится к

$$f(t_1, t_2) = \sum_{n_1, n_2} r(n_2)\, p(n_2, t_2 \mid n_1 - 1, t)\, gp^s(n_1 - 1) = g^2.$$

Покажите, что такое сведение применимо также к высшим f_n, поэтому в этом случае события рекомбинации являются пуассоновскими, так же как и события генерации *.

Упражнение. Покажите, что для реакции

$$B \longrightarrow qX, \quad qX \longrightarrow A$$

события рекомбинации являются пуассоновскими.

13.3. ФОТОЭФФЕКТ: ФЛУКТУАЦИИ ЧИСЛА ПАДАЮЩИХ ФОТОНОВ

Следующая задача в некотором смысле является обратной по отношению к тем, что рассмотрены в предыдущих двух параграфах. Возьмем фотопроводник, в котором электроны возбуждены в проводящую область с помощью пучка фотонов. Моменты времени, в которые падающие фотоны попадают в фотопроводник, образуют множество случайных событий, описывающееся функциями распределения f_n или корреляционными функциями g_m. Если они независимы (процесс Пуассона или дробовой шум), вероятность возбуждения электронов за единичное время получается постоянной и тогда применима формула (6.9.1). Для любого другого стохастического распределения событий, состоящих в попадании фотонов, последовательные возбуждения уже не являются независимыми и, следовательно, число возбужденных электронов не является марковским процессом и не описывается основным кинетическим уравнением. Задача состоит в том, чтобы определить, каким образом статистика падающего потока фотонов влияет на статистику числа носителей заряда. Статистические свойства потока фотонов предполагаются известными, и мы будем считать, что они обладают свойством кластеризации, т. е. их корреляционные функции g_m описываются (2.5.8). После первой попытки ** задача была решена Убинком *** в виде систематического разложения. В соответствии с нашей общей стратегией продемонстрируем этот метод на простом примере.

Рассмотрим набор N независимых атомов, каждый из которых может находиться в своем основном состоянии или на одном из возбужденных уровней. Возбужденные атомы за единичное время могут совершить обратный переход с вероятностью α, но возбуждение может произойти только вследствие попадания фотона. Каждый фотон обладает вероятностью β возбудить атом. Мы предполагаем, что число n возбужденных атомов много меньше, чем N, тогда эту вероятность можно считать не зависящей от n.

---

* Этот ответ на вопрос, поставленный в [8], сообщил мне Гардинер [C. W. Gardiner].

** J. G. Cook, J. Blok and N. G. van Kampen, Physica 35, 241 (1967).

*** J. T. Ubbink, Physica 52, 253 (1971).

Пусть фотоны попадают в моменты времени $\tau_1, \tau_2, \ldots$. В течение времени между двумя событиями распределение вероятности $p(t)$ описывается формулой

$$\dot{p} = \alpha(\mathbf{E} - 1)np = \mathbf{W}p. \tag{13.3.1}$$

В каждый момент времени τ, когда происходит попадание фотона, вероятность изменяется скачком:

$$p(\tau + 0) = p(\tau - 0) + \beta(\mathbf{E}^{-1} - 1)p(\tau - 0) = (1 + B)p(\tau - 0). \tag{13.3.2}$$

Предположим, прерыватель пучка открыт при $t = 0$ и пропускает фотоны. Предположим, также, что $p(0)$ известно; мы хотим вычислить $p(t)$. Если s фотонов попадают в интервал между 0 и t в моменты времени

$$0 < \tau_1 < \tau_2 < \ldots < \tau_s < t, \tag{13.3.3}$$

то распределение, подобное (7.7.6), имеет вид

$$[p(t)]_{\text{cond}} = e^{(t-\tau_s)\mathbf{W}}(1 + B)e^{(\tau_s - \tau_{s-1})\mathbf{W}}(1 + B)\ldots(1 + B)e^{\tau_1\mathbf{W}}p(0). \tag{13.3.4}$$

Введем разновидность представления взаимодействия, полагая

$$e^{-\tau\mathbf{W}}\mathbf{B}e^{\tau\mathbf{W}} = \bar{\mathbf{B}}(\tau). \tag{13.3.5}$$

Тогда условная вероятность, зависящая от истории фотонов (13.3.3),

$$[p(t)]_{\text{cond}} = e^{t\mathbf{W}}\{1 + \bar{\mathbf{B}}(\tau_s)\}\{1 + \bar{\mathbf{B}}(\tau_{s-1})\}\ldots\{1 + \bar{\mathbf{B}}(\tau_1)\}p(0).$$

Усреднив это выражение по истории фотонов, получим окончательное распределение:

$$p(t) = e^{t\mathbf{W}}\langle\{1 + \bar{\mathbf{B}}(\tau_s)\}\{1 + \bar{\mathbf{B}}(\tau_{s-1})\}\ldots\{1 + \bar{\mathbf{B}}(\tau_1)\}\rangle p(0). \tag{13.3.6}$$

Среднее значение, которое встречается в этой формуле, имеет тот же вид, что и среднее в (2.3.6), но $\mathbf{B}$ являются операторами, которые не коммутируют. Чтобы обойти эту трудность, введем символ временного упорядочения $\ulcorner \ldots \urcorner$, который ставит условие, что все операторы внутри этих символов должны браться в хронологическом порядке, т. е. в соответствии с убыванием временных аргументов. Поскольку это требование мы сформулировали в виде условия, можно свободно обращаться с операторами, так как, если бы они коммутировали, только в окончательной формуле их нужно снова расположить в хронологическом порядке. Тогда (13.3.6) можно преобразовать в соответствии с (2.5.7):

$$p(t) = e^{t\mathbf{W}}\langle\ulcorner\prod_{\sigma=1}^{s}\{1 + \bar{\mathbf{B}}(\tau_\sigma)\}\urcorner\rangle p(0) = e^{t\mathbf{W}}\ulcorner\langle\prod_{\sigma=1}^{s}\{1 + \bar{\mathbf{B}}(\tau_\sigma)\}\rangle\urcorner p(0) =$$

$$= e^{t\mathbf{W}}\ulcorner\exp\left\{\int_0^t g_1(t_1)\bar{\mathbf{B}}(t_1)\,dt_1 + \right.$$

$$\left. + \frac{1}{2}\int_0^t\int_0^t g_2(t_1, t_2)\bar{\mathbf{B}}(t_1)\bar{\mathbf{B}}(t_2)\,dt_1\,dt_2 + \ldots\right\}\urcorner p(0). \tag{13.3.7}$$

Эта формула является точной, но не такой простой, какой кажется с виду. Временно́е упорядочение подразумевает, что экспоненты должны быть разложены в ряды и что в каждом члене такого ряда операторы **B** должны быть записаны в хронологическом порядке. Это означает, что многократные интегралы должны быть разбиты на многочисленные члены для различных частей области интегрирования. Однако, перед тем как выполнить эти действия, некоторые свойства временного упорядочения мы перечислим в виде упражнений *.

Упражнение. Пусть $A(t)$ — зависящая от времени матрица. Запишите явно первые пять членов выражения

$$\ulcorner \exp \int_0^t A(t')\,dt' \urcorner. \tag{13.3.8}$$

Упражнение. Пусть $y(t)$ — вектор, описывающийся уравнением

$$\dot{y}(t) = A(t)\,y(t). \tag{13.3.9а}$$

Покажите, что решения этого уравнения можно записать в виде

$$y(t) = \ulcorner \exp \int_0^t A(t')\,dt' \urcorner y(0). \tag{13.3.9б}$$

Указание. Решите (13.3.9а) итерациями. Тогда (13.3.9б) является формальным выражением для эволюционной матрицы, определенной в (8.6.4).

Упражнение. Докажите, для $0 < t_1 < t$ следующее тождество:

$$\left[\exp \int_0^t A(t')\,dt'\right] = \left[\exp \int_{t_1}^t A(t')\,dt'\right] \cdot \left[\exp \int_0^{t_1} A(t')\,dt'\right].$$

Указание. Либо используйте результат (13.3.9), либо разложите в ряд.

Упражнение. Докажите, что

$$\left[\exp \int_0^t A(t')\,dt'\right]^{-1} = \left[\exp - \int_0^t A(t')\,dt'\right],$$

где символом $\lfloor \ldots \rfloor$ обозначено антихронологическое упорядочение, означающее, что операторы в более поздние моменты времени стоят справа.

Упражнение. Докажите **, что

$$\left[\exp \int_0^t \{A(t') + B(t')\}\,dt'\right] = \left[\exp \int_0^t A(t')\,dt'\right] \cdot \left[\exp \int_0^t \overline{B}(t')\,dt'\right], \tag{13.3.10}$$

где $\overline{B}(t)$ — представление взаимодействия для оператора $B(t)$:

$$\overline{B}(t) = \left[\exp \int_0^t A(t')\,dt'\right]^{-1} B(t) \left[\exp \int_0^t A(t')\,dt'\right].$$

---

* Общее рассмотрение таких тождеств см. в работе: R. Kubo, J. Phys. Soc. Japan 17, 1100 (1962).

** R. P. Feynman, Phys. Rev. 84, 108 (1951).

Начнем с того, что возьмем в показателе степени (13.3.7) только первый член. Это равносильно тому, что мы отбросим в показателе экспоненты все члены, содержащие β^2 и более высокие степени по β. В то же время опустим все корреляционные функции g_2, g_3, ... и будем рассматривать падающие фотоны так, если бы они не были скоррелированными. Изувеченное таким образом выражение (13.3.7) принимает вид

$$p(t) = e^{t\mathbf{W}}\left[\exp\int_0^t g_1(t_1)\,\overline{B}(t_1)\,dt_1\right]p(0).$$

В соответствии с (13.3.9) приходим к

$$\frac{d}{dt}e^{-t\mathbf{W}}p(t) = g_1(t)\,\overline{\mathbf{B}}(t)\,e^{-t\mathbf{W}}p(t).$$

Тогда, имея в виду (13.3.5), запишем

$$\dot{p}(t) = \{\mathbf{W} + g_1(t)\,\mathbf{B}\}\,p(t) = \alpha(\mathbf{E}-1)\,np + g_1(t)\,\beta(\mathbf{E}^{-1}-1)\,p. \qquad (13.3.11)$$

Тот факт, что p удовлетворяет этому основному кинетическому уравнению, не является удивительным, потому что в этом порядке фотоны рассматривались как некоррелированные и, следовательно, просто порождали вероятность генерации $g_1(t)\beta$ за единичное время.

Упражнение. Найдите $\langle n\rangle_t$ и $\langle n^2\rangle_t$ из (13.3.11) с заданным начальным значением $n(0)$. В частности, для $\alpha t \gg 1$

$$\langle\langle n^2\rangle\rangle_t = \beta\int_0^\infty e^{-\alpha\tau}g_1(t-\tau)\,d\tau.$$

Упражнение. Из (13.3.11) найдите автокорреляционную функцию $\langle\langle n(t_1)\,n(t_2)\rangle\rangle$, если задано начальное условие $n(0)$.

Упражнение. Решите (13.3.11) явно с помощью производящей функции p.

13.4. ФОТОЭФФЕКТ (ПРОДОЛЖЕНИЕ)

Следующее приближение включает зависимость от корреляционной функции g_2. Для простоты предположим, что пучок фотонов стационарен, так что g_1 не зависит от t. Член $g_1\mathbf{B}$ в (13.3.11) нельзя рассматривать как малое возмущение, потому что он ответствен за поддержание стационарного состояния. Поэтому в качестве невозмущенного уравнения надо взять

$$\dot{p}(t) = \{\mathbf{W} + g_1\mathbf{B}\}\,p(t) = \mathbf{W}^*p(t). \qquad (13.4.1)$$

Возникает вопрос: как перегруппировать члены в (13.3.7) таким образом, чтобы член, содержащий g_2, появился как поправка к (13.4.1)? Это можно сделать, используя (13.3.10), но более прямой метод состоит в следующем.

Начнем с уравнения (13.3.4), в которое, однако, еще не введено представление взаимодействия (13.3.5). Это уравнение также можно

записать в сжатой форме, если использовать временно́е упорядочение. Это можно сделать с помощью следующего приема. Хотя $\mathbf{W}$ не зависит от времени, запишем $\mathbf{W}(t)$, где аргумент служит просто для обозначения положения в хронологическом порядке. Аналогично запишем $\mathbf{B}(t)$ для постоянного оператора $\mathbf{B}$. Тогда (13.3.4) совпадет с

$$[p(t)]_{\text{cond}} = \left[\exp\left\{ \int_0^t \mathbf{W}(t_1)\,dt_1 \right\} \prod_{\sigma=1}^{s} \{1 + \mathbf{B}(\tau_\sigma)\} \right] p(0).$$

Временно́е упорядочение относится и к t_1, и к τ_σ.

Усреднение по истории (13.3.3) можно выполнить так, как если бы операторы коммутировали:

$$p(t) = \left[\exp\left\{ \int_0^t \mathbf{W}(t_1)\,dt_1 \right\} \prod_{\sigma=1}^{s} \{1 + \mathbf{B}(\tau_\sigma)\} \right] p(0)$$

$$\left[\exp\left\{ \int_0^t [\mathbf{W}(t_1) + g_1 \mathbf{B}(t_1)]\,dt_1 + \right.\right.$$

$$\left.\left. + \frac{1}{2} \int_0^t \int_0^t g_2(t_1, t_2)\,\mathbf{B}(t_1)\,\mathbf{B}(t_2)\,dt_1\,dt_2 + \ldots \right\} \right] p(0). \qquad (13.4.2)$$

Оператор [ ] равен $\mathbf{W}^*(t_1)$, заданному в (13.4.1), и может быть получен с помощью тождества (13.3.10):

$$p(t) = e^{t\mathbf{W}^*} \left[\exp\left\{ \frac{1}{2} \int_0^t \int_0^t g_2(t_1, t_2)\,\mathbf{B}^*(t_1)\,\mathbf{B}^*(t_2)\,dt_1\,dt_2 \right\} \right] p(0). \qquad (13.4.3)$$

Здесь $\mathbf{B}^*(t)$ — другое представление взаимодействия, основанное на $\mathbf{W}^*$ вместо $\mathbf{W}$:

$$\mathbf{B}^*(t) = e^{-t\mathbf{W}^*} \mathbf{B} e^{t\mathbf{W}^*}. \qquad (13.4.4)$$

В *показателе степени* (13.4.3) опущены члены с теми степенями β, которые выше, чем β^2. Другие приближения не делались, но опять из-за временно́го упорядочения, однако, формула (13.4.3) не так проста, как выглядит.

Временно́е упорядочение будет частично выполнено, если заменить (13.4.3) на

$$p(t) = e^{t\mathbf{W}^*} \exp\left\{ \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2\, g_2(t_1, t_2)\,\mathbf{B}^*(t_1)\,\mathbf{B}^*(t_2) \right\} p(0). \qquad (13.4.5)$$

Ниже мы покажем, что остающаяся ошибка имеет более высокий порядок, но сначала исследуем (13.4.5). Эта формула представляет собой выражение для $p(t)$, которое в нашем случае можно вычислить явно, потому что (13.4.1) можно решить и найти $e^{t\mathbf{W}^*}$.

По-другому результат (13.4.5) можно выразить в виде дифференциального уравнения. Дифференцируя $e^{-t\mathbf{W}^*}p(t)$, получаем

$$\dot{p}(t) = \left\{\mathbf{W}^* + \int_0^t dt' g_2(t, t')\, \mathbf{B}e^{(t-t')\mathbf{W}^*}\, \mathbf{B}e^{(t'-t)\mathbf{W}^*}\right\} p(t) =$$

$$= \left\{\mathbf{W}^* + \int_0^t g_2(\tau)\, \mathbf{B}e^{-\tau\mathbf{W}^*}\, \mathbf{B}e^{\tau\mathbf{W}^*}\, dt\right\} p(t). \quad (13.4.6)$$

Здесь оператор { } еще содержит время t, истекшее с начального момента. Это отражает особую роль начального момента времени, потому что вероятность в начальный момент времени задана. Однако, поскольку мы предположили, что выполняется свойство кластеризации, $g_2(\tau)$ обращается в нуль при большем τ; предположим, в частности, что существует некоторое τ_c такое, что $g_2(\tau) \approx 0$ для $\tau > \tau_c$. Далее, понятно, что, поскольку $t > \tau_c$ в (13.4.6), верхний предел интегрирования можно заменить на ∞. Вследствие этого $p(t)$ подчиняется дифференциальному уравнению с постоянными коэффициентами:

$$\dot{p}(t) = \mathbf{K}p(t), \quad (13.4.7а)$$

где $\mathbf{K}$ — перенормированная матрица перехода:

$$\mathbf{K} = \mathbf{W}^* + \int_0^\infty g_2(\tau)\, \mathbf{B}e^{\tau\mathbf{W}^*}\, \mathbf{B}e^{-\tau\mathbf{W}^*}\, d\tau. \quad (13.4.7б)$$

Это окончательный результат. Высшие приближения, включающие g_3, g_4, ..., не меняют (13.4.7а), а просто добавляют новые члены к (13.4.7б).

Упражнение. Выведите (13.4.6) из (13.4.5).

Упражнение. *Докажите, что (13.4.6) сохраняет полную вероятность.*

Упражнение. В настоящем примере интеграл в (13.4.7б) оказался очень простым. Сначала докажите коммутационное тождество $[\mathbf{B}, \mathbf{W}^*] = \alpha\mathbf{B}$ и затем выведите из него $\mathbf{B}^*(t) = e^{\alpha t}\mathbf{B}$. В результате получится

$$\mathbf{K} = \mathbf{W}^* + \left\{\int_0^\infty e^{-\alpha\tau} g_2(\tau)\, d\tau\right\} \mathbf{B}^2.$$

Упражнение. Решите уравнение (13.4.7а) с таким $\mathbf{K}$.

Упражнение. Поскольку в этой модели операторы $\mathbf{B}^*(t)$ при различных t коммутируют, временнóе упорядочение в (13.4.3) можно опустить. Тогда так же можно использовать высшие члены и построить соответствующее уравнение (13.4.7а) для всех порядков. Оказывается, что его даже можно решить. Покажите таким способом: если $p(0) = \delta(n, n_0)$, то k-й момент $\langle n^k \rangle_t$ не зависит от корреляционных функций g_m с $m > k$.

Нам необходимо еще исследовать приближения, которые мы сделали в процессе вывода (13.4.7).

а. Типичный интеграл, изображенный точками в (13.4.2) и опущенный в (13.4.3), имеет вид

$$\int_0^t \ldots \int^t g_m(t_1, t_2, \ldots, t_m)\, \mathbf{B}(t_1)\, \mathbf{B}(t_2) \ldots \mathbf{B}(t_m)\, dt_1\, dt_2 \ldots dt_m. \quad (13.4.8)$$

Интегрирование проводится по m-мерному кубу объемом t^m; но благодаря свойству кластеризации подынтегральная функция обращается в нуль, если только все переменные t не отстоят друг от друга дальше, чем на расстояние порядка τ_c. Область, где это свойство выполняется, представляет собой окрестность диагонали куба, и ее объем примерно равен $t\tau_c^{m-1}$. Тогда (13.4.8) имеет порядок

$$\beta^m t \tau_c^{m-1} = (\beta t)(\beta\tau_c)^{m-1}. \quad (13.4.9)$$

На самом деле в хронологически упорядоченных экспонентах (13.4.2) интеграл (13.4.8) в таком виде не встречается, а разбивается на части и входит в комбинации с множителем $\mathbf{B}$, возникающим в другом месте, но все равно его вклад не превышает порядка (13.4.9). Следовательно, члены, опущенные в (13.4.3), являются поправками к коэффициенту при t в показателе степени, которые имеют более высокий порядок по $\beta\tau_c$.

б. При замене (13.4.3) на (13.4.5) были совершены ошибки в упорядочении, простейшая из которых состоит в пренебрежении временным упорядочением в члене

$$\frac{1}{2!} \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \int_0^t dt_1' \int_0^{t_1'} dt_2' g_2(t_1, t_2)\, g_2(t_1', t_2') \left[\mathbf{B}^*(t_1)\, \mathbf{B}^*(t_2)\, \mathbf{B}^*(t_1')\, \mathbf{B}(t_2') \right].$$

Разница возникает из той части четырехмерной области интегрирования, где пáры t_1, t_2 переплетаются с пáрами t_1', t_2' и где ни один из множителей g_2 не обращается в нуль. Объем этой части есть $t\tau_c^5$, и, следовательно, ошибка имеет порядок величины $(\beta t)(\beta\tau_c)^3$. Поскольку эта величина линейна по t, ее можно сравнить с вкладом от

$$\int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2\, g_2(t_1, t_2)\, \mathbf{B}^*(t_1)\, \mathbf{B}^*(t_2),$$

который имеет порядок $(\beta t)(\beta\tau_c)$. Следовательно, ошибка имеет относительный порядок величины $(\beta\tau_c)^2$. Этот вывод остается справедливым для высших членов в разложении экспоненты в (13.4.3).

в. Уравнение (13.4.7) выведено при произвольном $p(0)$, но при этом предполагалось, что затвор был открыт при $t=0$. Начальный момент времени играет особую роль, потому что это единственный момент времени, в который переменная n и падающие фотоны статистически независимы. При любом $t_0 > 0$ это уже не так: большое значение n показывает, что много фотонов попали в образец за

последнее время и через корреляции фотонов. Это влияет на вероятность попадания фотонов в момент времени t_0. Это также влияет на вероятность попадания фотонов в ближайшем будущем после t_0, что и становится причиной, по которой n не является марковским процессом. Отсюда ясно, почему мы должны взять в качестве начального момента времени момент, в который затвор был открыт.

В уравнении (13.4.7) начальный момент времени уже не упоминается, и поэтому оно применимо ко всем распределениям независимо от времени открытия затвора при условии, что с этого момента прошло больше времени, чем τ_c. Эта оговорка означает, что (13.4.7) не является основным кинетическим уравнением (см. предостережение в § 5.1). Однако его можно приближенно рассматривать как основное кинетическое уравнение, *если p слабо меняется за время τ_c*.

Это ограничение можно смягчить с помощью следующего рассмотрения. Запишем оператор $\mathbf{K}$ в (14.4.7б) как $\mathbf{K} = \mathbf{W}^* + \mathbf{K}_1$. Тогда (13.4.7а) является представлением взаимодействия

$$\dot{p}^* = \mathbf{K}_1^* p^*, \tag{13.4.10}$$

где $p^* = e^{-t\mathbf{W}^*}$ и $\mathbf{K}_1^*$ — представление взаимодействия (13.4.4) оператора $\mathbf{K}_1$. Это приближенно является основным кинетическим уравнением, *если изменение p^* за время τ_c невелико*.

Это ослабленное ограничение можно сформулировать количественно. Величина $\mathbf{K}_1$, заданная интегралом (13.4.7б), определяется множителем β^2, умноженным на интеграл от g_2, что дает τ_c. Тогда $\mathbf{K}_1 \sim \beta^2\tau_c$ и изменение p^* за время τ_c — порядка $(\beta\tau_c)^2$. В таком случае (13.4.10) и, следовательно, (13.4.7а) представляет собой приближенное основное кинетическое уравнение при условии, что

$$\beta\tau_c \ll 1. \tag{13.4.11}$$

Но приближения **а** и **б**, сделанные выше, также основываются на этом условии, и, следовательно, *это есть полное условие справедливости* (13.4.7) *как основного кинетического уравнения*. Параметр $\beta\tau_c$ является мерой воздействия внешнего влияния в течение одного корреляционного времени. Этот параметр называют *числом Кубо*.

ГЛАВА 14

СТОХАСТИЧЕСКИЕ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ

Когда система подвергается воздействию флуктуирующих *внешних* сил, описывающие ее уравнения движения представляют собой дифференциальные уравнения со случайными коэффициентами. В некоторых случаях эти уравнения можно решить точно или приближенно. В частности, когда флуктуации являются слабыми и быстрыми, можно получить явные уравнения. В пределе это приводит к соответствующим дельта-коррелированным случайным членам.

14.1. ОПРЕДЕЛЕНИЯ

Стохастическое дифференциальное уравнение — это дифференциальное уравнение, коэффициенты которого являются случайными числами или случайными функциями независимых переменных. Так же как и у обычных дифференциальных уравнений, коэффициенты считаются заданными, т. е. их стохастические свойства определены заранее и не зависят от решения, которое нужно найти. Следовательно, *стохастические дифференциальные уравнения описывают системы с флуктуациями, вызванными внешним воздействием.* Примеры: броуновская частица и описывающее ее уравнение Ланжевена; любая небольшая система, взаимодействующая с большим резервуаром (при условии, что малая система существенно не влияет на резервуар); электромагнитные волны в турбулентной атмосфере; рост популяции в флуктуирующем климате. В противоположность этому почти во всех примерах из предыдущих глав источник шума был *внутренним*, т. е. присущим самой природе системы.

Общий вид стохастического дифференциального уравнения

$$\dot{u} = F(u,\ t;\ Y(t)); \tag{14.1.1}$$

где u и F могут быть векторами, а $Y(t)$ обозначает одну или несколько случайных функций, стохастические свойства которых известны. Это уравнение совместно с начальным условием $u(t_0) = a$ для каждой частной реализации $y(t)$ определяет функцию $U(t;\ [y],\ a]$, которая является функционалом $y(t)$, т. е. она зависит от всех значений $y(t')$ при $0 \leqslant t' \leqslant t$. Ансамбль решений $U(t;\ [y],\ a]$ для всех возможных $y(t')$ составляет стохастический процесс. Решить уравнение (14.1.1) означает найти стохастические свойства этого процесса*.

Иногда начальное значение a также является случайной величиной (или вектором). Получающийся в результате стохастический процесс $U(t;\ [y],\ a]$ тогда является функцией случайной переменной a, функционалом, зависящим от функции y. Поскольку это является тривиальным обобщением задачи с фиксированным начальным значением a, нет необходимости рассматривать случайные начальные значения отдельно. Уравнение Ланжевена (8.8.1) и более общее уравнение Ито (8.8.15) представляют собой примеры стохастических дифференциальных уравнений. Действительно, в большей части математической литературы название «стохастическое дифференциальное уравнение» ограничивается именно этими случаями**.

---

* H. Bunke, Gewohnliche Differentialgleichungen mit zufalligen Parametern (Akademie-Verlag, Berlin, 1972).

** I. I. Gikhman and A. V. Skorohod, Stochastic Differential Equations (Springer, Berlin, 1972); L. Arnold, Stochastische Differentialgleichungen (Olbenbourg, Munich, 1973); T. T. Soong, Random Differential Equations in Science and Engenieering (Acad. Press, New York, 1973); A. Friedman, Stochastic Differential Equations and Applications, volumes (Acad. Press, New York, 1975 and 1976).

Это подчеркивание роли уравнения Ито может увести нас в неверном направлении, поскольку гауссов белый шум $L(t)$ нельзя рассматривать как настоящий случайный процесс — возникают трудности, упомянутые в гл. 8. Эти трудности имеют искусственную природу, они исчезают, если принять во внимание, что случайная сила в физике никогда не является настоящим белым шумом, а в лучшем случае имеет очень малое автокорреляционное время *. Следовательно, лучше начать с изучения более широкого класса стохастически дифференциальных уравнений (14.1.1), а затем перейти к рассмотрению приближений, справедливых для малых времен автокорреляции в качестве частного случая. Мы это сделаем в § 14.2—14.5, но случай больших времен автокорреляций также представляет интерес и будет рассмотрен в § 14.6. Другим примером стохастического дифференциального уравнения (14.1.1) является

$$\dot{u} = -i\omega(t)\,u, \tag{14.1.2}$$

где u — комплексная величина, а $\omega(t)$ — случайная функция от времени. Этот пример удается решить явно, и его используют для иллюстрации парамагнитного резонанса ** и уширения линий ***. Отметим, что (14.1.2) отличается от уравнения Ланжевена именно тем, что случайный коэффициент *умножается* на u. Важным примером того, что уравнение не может быть решено явно, является соотношение

$$\ddot{x} + \omega^2(t)\,x = 0. \tag{14.1.3}$$

Это уравнение описывает гармонический осциллятор, частота которого является случайной функцией времени.

Мы пришли к следующей классификации по трем категориям.

I. Линейные дифференциальные уравнения, в которых только неоднородный член является случайной функцией, как в уравнении Ланжевена. Такие уравнения были названы *аддитивными*, и в принципе их можно решить.

II. Линейные дифференциальные уравнения, в которых один или несколько коэффициентов при u являются случайными функциями. Они получили название *мультипликативных* **** и могут быть решены только в частных случаях, однако в § 14.2 и 14.3 мы приведем довольно общий приближенный метод их решения *****.

III. Нелинейные уравнения; различия между аддитивными или мультипликативными уравнениями становятся спорными, но в § 14.4 мы их преобразуем к линейным мультипликативным уравнениям.

---

* Более подробное обсуждение см: N. G. van Kampen, J. Statist. Phys. **24**, 175 (1981).

** P. W. Anderson and P. R. Weiss, Rev. Mod. Phys. **25**, 269 (1953).

*** R. Kubo in: Fluctuation, Relaxation and Resonance in Magnetic Systems (D. ter Haar ed., Oliver and Boyd, Edinburgh, 1961).

**** R. F. Fox, J. Mathem. Phys. **13**, 1196 (1972).

***** Обсуждение и литературу см. в работах: A. Brissaud and U. Frisch, J. Mathem. Phys. **15**, 524 (1974); V. I. Klyatskin and V. I. Tatarskii, Sov. Phys. Usp. **16**, 494 (1974); N. G. van Kampen, Physics Reports **24C**, 171 (1976).

Имеются и другие категории, такие, как стохастические дифференциальные уравнения в частных производных, задачи на собственные значения * и со случайными границами **, но эти случаи мы здесь рассматривать не будем.

Примечание. Подчеркнем следующее отличие от обычных нестохастических дифференциальных уравнений. Все решения *нестохастического* уравнения получаются наложением начального условия $u(t_0)=a$ в произвольный момент времени t_0, а затем рассмотрением всех возможных значений a. Однако для *стохастического* дифференциального уравнения таким способом можно получить только подкласс всех решений, а именно те решения, для которых оказывается, что они не имеют дисперсий в этот частный момент времени t_0.

Чтобы быть более точными, рассмотрим множество S всех стохастических функций $U(t)$, удовлетворяющих (14.1.1). Подмножество $S_0(a)\subset S$ состоит из таких функций, которые также удовлетворяют соотношению $U(t_0)=a$. Пусть S_0 — объединение всех $S_0(a)$, получающихся при всех возможных значениях a. Тогда $S_0\subset S$ — множество всех стохастических функций, удовлетворяющих (14.1.1) и имеющих нулевую дисперсию при t_0. Теперь возьмем $t_1\neq t_0$ и построим соответствующее S_1. Для нестохастических уравнений $S_1=S_0=S$, но в стохастическом случае $S_1\neq S_0$. В общем случае S_0 и S_1 даже не пересекаются, $S_0\cap S_1=0$.

Отметим, что мы говорим о стохастических процессах U, а не об их отдельных реализациях. Каждая отдельная реализация u процесса $U\in S_0$ является решением уравнения $\dot{u}=F(u,\ t;\ y(t))$ при некотором $y(t)$ и, следовательно, также является некоторой реализацией одного из процессов U в S_1.

Упражнение. Решите (8.8.1), когда $L(t)$ — произвольная случайная функция, стохастические свойства которой задаются ее производящим функционалом.

Упражнение. Рассмотрим аддитивное уравнение

$$\ddot{u}+u=F(t),$$

где $F(t)$ — случайная сила, заданная своим производящим функционалом. Найдите производящий функционал решения $u(t)$, определяющийся начальными значениями $u(0)=a$, $\dot{u}(0)=b$.

Упражнение. Решите то же самое уравнение с начальными условиями $u(t_0)=\alpha$, $\dot{u}(t_0)=\beta$, где $t_0\neq 0$. Покажите, что ни одно из этих решений не совпадает с каким-либо решением, найденным в предыдущем упражнении, если только F не является нестохастической функцией.

Упражнение. Решите мультипликативное уравнение (14.1.2).

Упражнение. Выведите для магнитного дипольного момента S в магнитном поле B уравнение $\dot{S}=-gB\wedge S$. Если направление B фиксировано, но напряженность является случайной величиной, то это уравнение можно записать в виде (14.1.2).

Упражнение. Покажите, что плоская монохроматическая электромагнитная волна, распространяющаяся в направлении x в среде, диэлектрическая проницаемость которой зависит от x, описывается уравнением вида (14.1.3).

Упражнение. Все решения в S получаются из начального значения a при t_0, если предположить, что a — случайная величина.

---

* W. E. Boyce in: Probabilistic Methods in Applied Mathematics 1 (A. T. Bharucha-Reid ed., Acad. Press, New York, 1968); W. Puckert and J. vom Scheidt, Reports Mathem. Phys. 15, 206 (1979).

** F. G. Bass and I. M. Fuks, Wave Scattering from Statistically Rough Surfaces (Pergamon, Oxford, 1979).

14.2. ЭВРИСТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ МУЛЬТИПЛИКАТИВНЫХ УРАВНЕНИЙ

Рассмотрим линейное уравнение вида

$$\dot{u} = A(t)\,u = \{A_0 + \alpha A_1(t)\}\,u, \tag{14.2.1}$$

где u — вектор, A_0 — постоянная матрица, $A_1(t)$ — *случайная матрица*, α — параметр, измеряющий значение флуктуаций в коэффициентах. Далее будем считать, что $A_1(t)$ обладает конечным временем автокорреляции τ_c, если для любых двух моментов времени t_1, t_2, связанных между собой соотношением $|t_1 - t_2| > \tau_c$, все матричные элементы $A_1(t_1)$ можно рассматривать как стохастически не зависящие от соответствующих $A_1(t_2)$. Величина $\alpha\tau_c$ является числом Кибо, введенным (13.4.11), и опять считается малой. В результате мы получим приближенное решение уравнения (14.2.1) в виде разложения в ряд по степеням параметра $\alpha\tau_c$. Соответствующий вывод будет проделан в следующем параграфе. В настоящем разделе мы используем более простой метод, который, однако, проще в обращении и который можно применять и к более сложным случаям *. Удобно, хотя, строго говоря, в этом и нет необходимости, предположить, что $A_1(t)$ является *стационарным* матричным процессом. Тогда $\langle A_1(t)\rangle$ не зависит от времени и его можно включить в A_0, положив

$$\begin{aligned} A_0' &= A_0 + \alpha\langle A_1(t)\rangle, \\ \alpha A_1'(t) &= \alpha\{A_1(t) - \langle A_1(t)\rangle\}, \end{aligned} \tag{14.2.2}$$

так что $\langle A_1'(t)\rangle = 0$. Предположим, что это проделано, и в дальнейшем штрихи будем опускать. Получающееся в результате разложение по α относится только к α, стоящему перед $A'(t)$. Таким образом, мы рассмотрим (14.2.1) только в том случае, когда $\langle A_1(t)\rangle = 0$.

Переходя в представление взаимодействия, исключим A_0:

$$u(t) = e^{tA_0} v(t), \tag{14.2.3а}$$

$$\dot{v} = \alpha e^{-tA_0} A_1(t)\, e^{tA_0} v \equiv \alpha V(t)\, v. \tag{14.2.3б}$$

Решение с точностью до второго порядка по $v(0) = u(0) = a$ имеет вид

$$v(t) = a + \alpha\int_0^t dt_1 V(t_1)\,a + \alpha^2\int_0^t dt_1\int_0^{t_1} dt_2 V(t_1)\,V(t_2)\,a + \ldots. \tag{14.2.4}$$

Теперь возьмем среднее с фиксированным a.

$$\langle v(t)\rangle = a + \alpha^2\int_0^t dt_1\int_0^{t_1} dt_2 \langle V(t_1)\,V(t_2)\rangle\, a. \tag{14.2.5}$$

---

* В частности, в квантовой механике, см.: A. G. Pedfield, IBM J. Research Devel. 1, 19 (1957), Advances in Magnetic Resonance 1 (J. S. Waugh ed., Acad. Press, New York, 1965); C. P. Slichter, Principles of Magnetic Resonance (Harper and Row, New York, 1963).

Приближение второго порядка можно использовать до тех пор, пока члены более высоких порядков малы. Поскольку каждый последний член включает на одно интегрирование по времени больше, это ограничение равносильно $\alpha t \ll 1$. С другой стороны, мы хотим использовать его на временах, значительно превосходящих $\alpha\tau_c$; следовательно, мы должны предположить $\alpha\tau_c \ll 1$. Тогда для $t \ll \alpha^{-1}$ находим

$$\langle v(t)\rangle = a + \alpha^2 \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} d\tau \langle V(t_1) V(t_1 - \tau)\rangle a.$$

Когда $t_1 > \tau_c$, верхний предел интегрирования t_1 в интеграле по τ можно заменить на ∞, поскольку в любом случае подынтегральная функция в этой области обращается в нуль. Хотя t_1 пробегает значения от 0 до t, в большей части интервала $t_1 > \tau_c$. Тогда для $\tau_c \ll t \ll \alpha^{-1}$ приближенно имеем

$$\langle v(t)\rangle = a + \alpha^2 \int_0^t dt_1 \int_0^{\infty} d\tau \langle V(t_1) V(t_1 - \tau)\rangle a.$$

Это выражение, однако, также является решением с точностью до порядка α^2 линейного дифференциального уравнения

$$\partial_t \langle v(t)\rangle = \alpha^2 \left[\int_0^{\infty} \langle V(t) V(t-\tau)\rangle d\tau \right] \langle v(t)\rangle. \qquad (14.2.6)$$

Таким образом, приходим к выводу, что это уравнение описывает эволюцию величины $\langle v(t)\rangle$. В первоначальном представлении его можно записать в виде

$$\partial_t \langle u(t)\rangle = \left[A_0 + \alpha^2 \int_0^{\infty} \langle A_1(t) e^{\tau A_0} A_1(t-\tau)\rangle e^{-\tau A_0} d\tau \right] \langle u(t)\rangle. \qquad (14.2.7)$$

Следует помнить, однако, что наш вывод справедлив только в течение времени $\Delta t \ll \alpha^{-1}$ после начального момента времени $t_0 = 0$. Начальный момент времени выделен потому, что в это время значение u было равно нестохастическому вектору a. Легко видеть, что результат равным образом справедлив и тогда, когда начальное значение стохастично при условии, что оно статистически не зависит от A_1. Этот факт позволяет нам применить то же самое уравнение (14.2.7) и для следующего интервала Δt, потому что значения A_1 в следующем интервале не скоррелированы со значениями в предыдущем интервале в силу малости τ_c. Даже если допустить, что имеется некоторое перекрытие на границе между этими интервалами, это может привести лишь к небольшой ошибке, поскольку такое перекрытие не может превышать величину порядка τ_c, что составляет лишь малую часть полного интервала Δt. Тогда (14.2.7) приближенно справедливо при всех временах при условии, что

$\alpha\tau_c \ll 1$. Таким образом, *среднее $u(t)$ само подчиняется нестохастическому дифференциальному уравнению* (14.2.7).

Предположим теперь, что не только $\alpha\tau_c \ll 1$, но и

$$\tau_c |A_0| \ll 1. \tag{14.2.8}$$

Это дополнительное условие означает, что свободное движение u является медленным по сравнению с флуктуациями в A_1. Тогда (14.2.7) сводится к

$$\partial_t \langle u(t)\rangle = \left[A_0 + \alpha^2 \int_0^\infty \langle A_1(t) A_1(t-\tau)\rangle \, d\tau \right] \langle u(t)\rangle. \tag{14.2.9}$$

Поскольку A_1 предполагается стационарным, интеграл не зависит от времени. Следовательно, воздействие флуктуаций сводится к перенормировке A_0 путем добавления к нему постоянного члена порядка α^2. Добавочный член представляет собой проинтегрированную корреляционную функцию процесса A_1. В частности, если имеется бездиссипативная система, описывающаяся величиной A_0, этот добавочный член, обусловленный флуктуациями, обычно является диссипативным. Эта связь диссипации и автокорреляционной функции флуктуаций является аналогом соотношения Грина—Кубо в многочастичных системах *, но не идентично ему, потому что там флуктуации являются внутренними, а не добавляются в виде отдельного члена, как в (14.2.1).

Упражнение. Примените результат к гармоническому осциллятору (14.1.3) с частотой $\omega^2(t) = \omega_0^2\{1+\alpha\xi(t)\}$, где $\xi(t)$ — стационарный случайный процесс с нулевым средним значением и временем автокорреляции τ_c. Ответ имеет вид

$$\frac{d^2\langle x\rangle}{dt^2} + \frac{1}{2}\alpha^2\omega_0^2 c_2 \frac{d\langle x\rangle}{dt} + \omega_0^2\left(1 - \frac{1}{2}\alpha^2\omega_0 c_1\right)\langle x\rangle = 0, \tag{14.2.10}$$

$$c_1 = \int_0^\infty \langle \xi(t)\,\xi(t-\tau)\rangle \sin 2\omega_0\tau \, d\tau,$$

$$c_2 = \int_0^\infty \langle \xi(t)\,\xi(t-\tau)\rangle (1-\cos 2\omega_0\tau)\, d\tau.$$

Упражнение. Постоянные c_1 и c_2 в (14.2.10) зависят от случайного члена при удвоенной частоте свободного осциллятора. Выразите их через спектральную плотность ξ.

Упражнение. Примените результат (14.2.10) к плоской электромагнитной волне в среде, в которой диэлектрическая проницаемость является случайной функцией x. Каким образом волна может затухать, если среда не получает энергии?

---

* M. S. Green, J. Chem. Phys. 20, 1281 (1952); R. Kubo, Can. J. Phys. 34, 1274 (1956) and in: Statistical Mechanics of Equilibrium and Non-Equilibrium (Proc. Intern. Symp. on Statistical Mechanics and Thermodynamics held at Achen; J. Meixner ed., North-Holland, Amsterdam, 1965).

Упражнение. Когда A_0 также является функцией t (хотя и не стохастической), можно использовать тот же самый метод, если по-другому определить представление взаимодействия.

Упражнение. При выводе (14.2.7) мы предполагаем, что $\langle A_1(t)\rangle = 0$. Если это не так, то вместо (14.2.7) получим

$$\partial_t \langle u(t)\rangle = \left[A_0 + \alpha \langle A_1(t)\rangle + \alpha^2 \int \langle\langle A_1(t)\, e^{\tau A_0} A_1(t-\tau)\rangle\rangle\, e^{-\tau A_0}\, d\tau \right] \langle u(t)\rangle. \tag{14.2.11}$$

Упражнение. Удерживая тот же порядок по $\alpha\tau_c$, можно улучшить (14.2.9), если учесть следующий порядок $\tau_c\,|A_0|$. Добавочный член включает в себя коммутатор

$$\alpha^2 \int_0^\infty \langle A_1(t)\,[A_0,\ A_1(t-\tau)]\rangle\, \tau\, d\tau. \tag{14.2.12}$$

Упражнение. Найдите уравнение для $\langle u(t)\rangle$, если $u(t)$ удовлетворяет уравнению

$$\dot{u} = A(t)\, u + f(t), \tag{14.2.13}$$

где f — случайный вектор, статистически не зависящий от $A(t)$.

14.3 РАЗЛОЖЕНИЕ ПО КУМУЛЯНТАМ

Для читателей, неудовлетворенных недостаточной общностью приближений, использованных в предыдущем параграфе, мы дадим более систематический вывод тех же самых результатов. Этот подход также открывает путь к высшим приближениям, хотя мы и не воспользуемся им*.

Вновь рассмотрим линейное стохастическое дифференциальное уравнение (14.2.1). Теперь нет необходимости предполагать ни стационарности $A_1(t)$, ни исключать его среднего значения, как это делалось в (14.2.2). Преобразуем (14.2.1) к представлению взаимодействия (14.2.3). Согласно (13.3.9), формальное решение можно записать с помощью упорядоченной по времени экспоненты:

$$v(t) = \left[\exp\left\{ \alpha \int_0^t V(t')\, dt' \right\} \right] a. \tag{14.3.1}$$

Это просто сокращенная запись того же самого разложения, первые два члена которого выписаны в (14.2.4). Теперь снова возьмем среднее при фиксированном a. Среднее, конечно же, коммутирует с упорядочением по времени, так что

$$\langle v(t)\rangle = \left[\left\langle \exp\left\{ \alpha \int_0^t V(t')\, dt' \right\} \right\rangle \right] a.$$

---

* Высшие порядки рассматриваются в работах: R. C. Bourret, Can. J. Phys. 40, 782 (1962); J. B. Keller, Proc. Symp. Appl. Math. 16 (Amer. Mathem. Soc., Providence 1964) p. 84; N. G. van Kampen, Physica 74, 215 and 239 (1974); R. H. Terwiel, Physica 74, 248 (1974).

Поскольку операторы внутри $\lceil\ \rceil$ можно рассматривать как коммутирующие, можно использовать тождество (3.4.6) для кумулянтов:

$$\langle v(t)\rangle = \left\lceil \exp\left\{\alpha \int_0^t dt_1 \langle V(t_1)\rangle + \frac{\alpha^2}{2}\int_0^t dt_1\, dt_2 \langle\langle V(t_1) V(t_2)\rangle\rangle + \ldots + \right.\right.$$

$$\left.\left. + \frac{\alpha^m}{m!}\int_0^t dt_1\, dt_2 \ldots dt_m \langle\langle V(t_1) V(t_2) \ldots V(t_m)\rangle\rangle + \ldots\right\}\right\rceil a. \quad (14.3.2)$$

Разница с рядом (14.2.4) состоит в том, что теперь в экспоненте появилось разложение по α. Естественно, нужно помнить, что это не является настоящей экспонентой, потому что упорядочение по времени можно выполнить только после разложения экспоненты, что приведет нас обратно к (2.4.1). Однако следующая оценка остается справедливой. Предположение, что $A_1(t)$ и, следовательно, $V(t)$ обладают временем корреляции τ_c, подразумевает, что каждый кумулянт обращается в нуль, если только временные точки в нем не попадают внутрь области порядка τ_c. Тогда полный вклад в m-кратный интеграл в (14.3.2) возникает из области порядка $t\tau_c^{m-1}$. Соответственно m-й член в экспоненте имеет порядок

$$(\alpha t)(\alpha\tau_c)^{m-1}.$$

Тогда (14.3.2) представляет собой разложение по степеням $(\alpha\tau_c)$, каждый член которого приблизительно линеен по t. В этом состоит преимущество разложения по кумулянтам по сравнению с рядом (14.2.4), который является разложением по последовательным степеням αt, и, следовательно, ограничен малыми временами.

Упорядочение по времени в (14.3.2) можно частично учесть, если переписать интегралы в следующем виде:

$$\langle v(t)\rangle = \left\lceil \exp\left\{\sum_{m=1}^{m} \alpha^m \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \ldots \right.\right.$$

$$\left.\left. \ldots \int_0^{t_{m-1}} dt_m \langle\langle V(t_1) V(t_2) \ldots V(t_m)\rangle\rangle\right\}\right\rceil a. \quad (14.3.3)$$

Если оборвать этот ряд после члена $m=1$, получим

$$\langle v(t)\rangle = \left\lceil \exp\left\{\alpha \int_0^t dt_1 \langle V(t_1)\rangle\right\}\right\rceil a.$$

Это низшее приближение; все члены порядка $\alpha\tau_c$ или выше в экспоненте опущены. Оно эквивалентно дифференциальному уравнению

$$\partial_t \langle v(t)\rangle = \alpha \langle V(t)\rangle \langle v(t)\rangle. \quad (14.3.4)$$

Теперь оборвем разложение члена после $m=2$:

$$\langle v(t)\rangle = \left[\exp\left\{\alpha\int_0^t \langle V(t_1)\,\mathrm{d}t_1\rangle + \alpha^2\int_0^t \mathrm{d}t_2\,\langle\langle V(t_1)\,V(t_2)\rangle\rangle\right\}\right] a. \quad (14.3.5)$$

Здесь включены члены порядка $(\alpha t)(\alpha\tau_c)$ в экспоненте и опущены члены порядка $(\alpha t)(\alpha\tau_c)^2$. Если положить

$$\int_0^{t_1} \mathrm{d}t_2\,\langle\langle V(t_1)\,V(t_2)\rangle\rangle = K(t_1),$$

то уравнение принимает вид

$$\langle v(t)\rangle = \left[\exp\int_0^t \{\alpha\langle V(t')\rangle + \alpha^2 K(t')\}\,\mathrm{d}t'\right] a. \quad (14.3.6)$$

Это выражение является решением дифференциального уравнения

$$\partial_t\langle v(t)\rangle = \{\alpha\langle V(t)\rangle + \alpha^2 K(t)\}\,\langle v(t)\rangle. \quad (14.3.7)$$

Хотя (14.3.6) не является вполне правильным, мы сейчас докажем, что ошибка имеет более высокий порядок по $\alpha\tau_c$. Тогда мы можем предположить, что (14.3.7) справедливо в требуемом порядке. В первоначальном представлении это означает, что

$$\partial_t\langle u(t)\rangle = \left[A_0 + \alpha\langle A_1(t)\rangle + \right.$$
$$\left. + \alpha^2\int_0^t \langle\langle A_1(t)\,\mathrm{e}^{\tau A_0} A_1(t-\tau)\rangle\rangle\,\mathrm{e}^{-\tau A_0}\,\mathrm{d}\tau + O(a^3\tau_c^2)\right]\langle u(t)\rangle. \quad (14.3.8)$$

Верхний предел интегрирования все еще напоминает о выделенной роли начального времени, но его можно заменить бесконечностью, поскольку $t > \tau_c$. Таким образом, мы подтвердили результаты (14.2.7) и (14.2.11).

Причина, по которой уравнение (4.3.6) не является вполне правильным, состоит в следующем. Символ временнóго упорядочения в (14.3.5) указывает на то, что после разложения экспоненты все множители V должны быть перегруппированы в хронологическом порядке. Однако временнóе упорядочение в (14.3.6) просто расставляет множители $\langle V\rangle$ и K, при этом K рассматривается как неделимая величина. (Иначе это выражение было бы не эквивалентно (14.3.7).) Это приводит к неправильному представлению тех членов в (14.3.5), в которых встречаются оба множителя $\langle V(t')\rangle$ и $\langle\langle V(t_1)\,V(t_2)\rangle\rangle$ и, кроме того, $t_1 > t' > t^2$. Простейшим примером

такого члена в (14.3.5) является

$$\alpha^3\left[\int_0^t dt' \langle V(t')\rangle \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \langle\langle V(t_1) V(t_2)\rangle\rangle\right] =$$

$$= \alpha^3 \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \left\{\int_{t_1}^t dt' \langle V(t')\rangle \langle\langle V(t_1) V(t_2)\rangle\rangle + \right.$$

$$\left. + \int_0^{t_2} dt' \langle\langle V(t_1) V(t_2)\rangle\rangle \langle V(t')\rangle + \int_{t_2}^{t_1} dt' \langle\langle V(t_1) \langle V(t')\rangle V(t_2)\rangle\rangle\right\}. \quad (14.3.9)$$

(Естественно, множитель $\langle\langle V(t')\rangle$ не участвует в усреднении $\langle\langle\ \rangle\rangle$.) Но соответствующий член в (14.3.6) имеет вид

$$\alpha^3 \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \left\{\int_{t_1}^t dt' \langle V(t')\rangle \langle\langle V(t_1) V(t_2)\rangle\rangle + \right.$$

$$\left. + \int_0^{t_1} dt' \langle\langle V(t_1) V(t_2)\rangle\rangle \langle V(t')\rangle\right\}. \quad (14.3.10)$$

Разность между (14.3.9) и (14.3.10) составляет

$$\alpha^3 \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \int_{t_2}^{t_1} dt' \langle\langle V(t_1) [\langle V(t')\rangle, V(t_2)]\rangle\rangle, \quad (14.3.11)$$

где символ [,] служит для обозначения коммутатора. Вся область интегрирования имеет порядок t^3, но ненулевой вклад дает только подобласть порядка $t\tau_c^2$. Следовательно, ошибка имеет порядок величины $(\alpha t)(\alpha\tau_c)^2$, т. е. она того же порядка, что и уже опущенные члены в (14.3.5). Такие же аргументы применимы и к другим членам в разложении (14.3.5): ошибка, сделанная при записи (14.3.6), всегда ограничена долей (τ_c/t) полной области и, следовательно, на один порядок по параметру $\alpha\tau_c$ выше, чем другие члены, содержащие ту же степень t. Это доказывает, что (14.3.7) справедливо в том порядке, который мы предположили раньше.

Предел белого шума. В (14.2.7) второй член в [ ] — порядка $\alpha^2\tau_c$, если A_1 порядка единицы. Мы сейчас показали, что высшие поправки порядка $\alpha^2\tau_c(\alpha\tau_c)^m$, $m=1,2$. Тогда (14.2.7) становится точным в формальном пределе

$$\tau_c \to, \quad \alpha \to \infty \ (\alpha^2\tau_c \text{ фиксировано}). \quad (14.3.12)$$

Естественно, это одновременно сводится к (14.2.9). Для того чтобы реализовать этот предел, нужно рассмотреть последовательность случайных матричных функций $A_1(t)$ порядка единицы, но с убывающим τ_c. Такую последовательность мы построим для скалярных функций способом, указанным в (8.8.11).

Возьмем большой временной интервал $(0, T)$ и предположим, что точки времени τ_σ распределены в нем по Пуассону с плотностью ν, предположим также, что имеется набор независимых случайных коэффициентов c_σ с одинаковым распределением. Рассмотрим процесс

$$Y(t) = \alpha \sum_{\sigma=1}^{s} c_\sigma \psi\left(\frac{t-\tau_\sigma}{\tau_c}\right),$$

где $\psi \geqslant 0$ — заданная функция с конечным носителем (или, по крайней мере, быстро убывающая функция). Мы вычислим производящий функционал:

$$G([k]) = \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(\nu T)^s}{s!} e^{-\nu T} \times$$
$$\times \int_0^T \frac{d\tau_1}{T} \ldots \int_0^T \frac{d\tau_s}{T} \left\langle \exp\left[i\alpha \sum_{\sigma=1}^{s} c_\sigma \int k(t)\, \psi\left(\frac{t-\tau_\sigma}{\tau_c}\right) dt \right] \right\rangle,$$

где $\langle\,\rangle$ означает среднее по c_σ. Поскольку они независимы, среднее факторизуется на s отдельных средних и можно выполнить суммирование по s:

$$G([k]) = \exp\left[\nu \int_0^T d\tau \left\{ \left\langle \exp i\alpha c \int k(t)\, \psi\left(\frac{t-\tau}{\tau_c}\right) \right\rangle - 1 \right\} \right] =$$
$$= \exp\left[\nu \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(i\alpha)^m}{m!} \langle c^m \rangle \int_0^T d\tau \int k(t_1) \ldots k(t_m)\, \psi\left(\frac{t_1-\tau}{\tau_c}\right) \ldots \right.$$
$$\left. \ldots \psi\left(\frac{t_m-\tau}{\tau_c}\right) dt_1 \ldots dt_m \right].$$

Пусть теперь τ_c стремится к нулю, так что множители $\psi((t-\tau)/\tau_c)$ сжимаются в дельта-пики. Пусть α в то же время стремится к бесконечности и плотность ν тоже стремится к бесконечности, как $\nu = \mu\tau_c^{-1}$ с фиксированным μ. В результате получим

$$\log G([k]) = \frac{\mu}{\tau_c} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(i\alpha)^m}{m!} \langle c^m \rangle \int_0^T k(\tau)^m\, d\tau \left\{ \tau_c \int \psi(\theta)\, d\theta \right\}^m.$$

Полагая, что $\langle c \rangle = 0$, в пределе (14.3.12) получаем

$$\log G([k]) = -\frac{1}{2} \Gamma \int k(\tau)^2\, d\tau.$$

В этом пределе уравнение (14.2.9) является точным. Согласно (8.8.10), это также является пределом, в котором J становится гауссовым белым шумом.

Упражнение. Предположим, что матрицы $A_1(t)$ при всех t коммутируют друг с другом и с A_0. Тогда временное упорядочение можно опустить и (14.3.3) можно вычислить. Покажите, что результат будет таким же, как и тот, что найден более непосредственно путем диагонализации матрицы $A(t)$ в (14.2.1).

Упражнение. Частым, но не необычным видом $A_1(t)$ является $\xi(t)B$ с постоянной матрицей B и скалярной случайной функцией ξ. Если, кроме того, выполняется (14.2.8), то снова можно записать (14.2.3) без упорядочения по времени. Запишите получающееся в результате дифференциальное уравнение для $\langle u(t)\rangle$ во всех порядках по $\alpha\tau_c$.

Упражнение. Выведите выражение для $G([k])$ с помощью (2.5.7), тем самым избежав введения T. Указание. Ср. с (2.3.8).

Упражнение. Для скалярной функции $A_1(t)$ выразите автокорреляционный интеграл, встречающийся в (14.2.9), через параметры, использованные выше для построения $J(t)$.

Упражнение. Сформулируйте предел белого шума для случайного матричного процесса $\alpha A_1(t)$.

Упражнение. Рассмотрите процесс, полученный в пределе $\tau_c \to 0$, $\alpha\tau_c$ фиксирован, ν фиксирована *.

Упражнение. Когда A и B — две случайные статистически зависимые матрицы, имеет место тождество

$$\langle e^A B\rangle = \langle e^A\rangle \left\{\langle B\rangle + \langle\langle AB\rangle\rangle + \frac{1}{2!}\langle\langle A^2B\rangle\rangle + \frac{1}{3!}\langle\langle A^3B\rangle\rangle \ldots\right\}$$

Следствием этой формулы является следующее соотношение для случайного вектора f:

$$\langle e^A f\rangle = \langle e^A\rangle\left\{\langle f\rangle + \langle\langle Af\rangle\rangle + \frac{1}{2}\langle\langle A^2 f\rangle\rangle + \ldots\right\}. \qquad (14.3.13)$$

Этот же метод можно использовать для нахождения высших моментов компонентов u. Пусть $u = \{u_\nu\}$ — действительный компонентный вектор, описывающийся уравнением (14.2.1):

$$\partial_t u_\nu = \sum_{\lambda=1}^{n} A_{\nu\lambda}(t)\, u_\lambda \quad (\lambda = 1,\ 2,\ \ldots\ n).$$

Тогда произведения $u_\nu u_\mu$ также описываются линейным стохастическим дифференциальным уравнением

$$\partial_t(u_\nu u_\mu) = \sum_\lambda A_{\nu\lambda}(u_\lambda u_\mu) + \sum_\lambda A_{\mu\lambda}(u_\nu u_\lambda) \equiv \sum_{\lambda\rho} A_{\nu\mu;\,\lambda\rho}(u_\lambda u_\rho),$$

$$\mathcal{A}_{\nu\mu;\,\lambda\rho}(t) = A_{\nu\lambda}(t)\,\delta_{\mu\rho} + A_{\mu\rho}(t)\,\delta_{\nu\lambda}. \qquad (14.3.14а)$$

Тогда их средние удовлетворяют уравнению, аналогичному (14.2.11). Чтобы записать его явно, рассмотрим $^1/_2 n(n+1) = N$ произведений $u_\nu u_\mu$ как компоненты одного вектора $\mathcal{U}_a$, так что (14.3.14а) принимает вид

$$\partial_t \mathcal{U}_a = \sum_{b=1}^{N} \mathcal{A}_{ab}(t)\,\mathcal{U}_b \quad (a = 1,\ 2,\ \ldots,\ N). \qquad (14.3.14б)$$

---

* B. J. West, K. Lindenberg and V. Seshadri, Physica 102A, 470 (1980); N. G. van Kampen, Idem p. 489.

Тогда $\mathcal{A}(t)=\mathcal{A}_0+\alpha\mathcal{A}_1(t)$ и

$$\partial_t\langle\mathcal{U}_a\rangle=\left[\mathcal{A}_0+\alpha\langle\mathcal{A}_1(t)\rangle+\alpha^2\int_0^\infty\langle\langle\mathcal{A}_1(t)e^{\tau\mathcal{A}_0}\mathcal{A}_1(t-\tau)\rangle\rangle e^{-\tau\mathcal{A}_0}\,d\tau\right]\langle\mathcal{U}_a\rangle.$$

Если u — комплексный вектор, можно, конечно, сначала свести его к предыдущему случаю, записав $2n$ уравнений для его действительной и мнимой частей. Однако обычно представляют интерес только величины $u_\nu u_\mu^*$; они удовлетворяют системе n^2 линейных уравнений, из которых можно найти n^2 приближенных уравнений для $\langle u_\nu u_\mu^*\rangle$. Результат называют *уравнением Рэдфильда*.

Упражнение. Гармонический осциллятор (14.1.3) с частотой $\omega^2(t)=\omega_0^2\{1+\alpha\xi(t)\}$.

Найдите уравнение для $\langle x^2\rangle$, $\langle\dot{x}^2\rangle$, $\langle x\dot{x}\rangle$. Покажите, что средняя энергия возрастает экспоненциально. Тогда *случайным образом возмущенный осциллятор является энергетически неустойчивым, хотя его средняя амплитуда, вообще говоря, стремится к нулю согласно* (14.2.10).

Упражнение. Двухуровневый атом находится в случайном поле, действующим на его дипольный момент, так что его гамильтониан имеет вид

$$\mathcal{H}=\begin{pmatrix}E_1 & 0\\ 0 & E_2\end{pmatrix}-\alpha\xi(t)\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}. \tag{14.3.15}$$

Найдите уравнение для его средней матрицы плотности и покажите, что при $t\to\infty$ оба уровня равно заполнены. Таким образом, температура стремится к бесконечности из-за того, что в (14.3.15) не было включено затухание, обусловленное спонтанным излучением.

Упражнение. Для такого же двухуровневого атома покажите, что автокорреляционная функция дипольного момента p (вторая из двух матриц в (14.3.15)) имеет вид

$$\langle\mathrm{Tr}\,p(t)\,p(0)\,\rho^s\rangle=\frac{1}{2}e^{-2at}\left(\cos wt-3\frac{a}{w}\sin wt\right),$$

где

$$a+ib=\alpha^2\int_0^\infty\langle\xi(t)\,\xi(t-\tau)\rangle\,e^{-i(E_2-E_1)\tau}\,d\tau,$$

$$w=\sqrt{(E_2-E_1-2b)^2-4(a^2+b^2)}.$$

Упражнение. Критерий того, что энергия осциллятора, описывающегося уравнением

$$\ddot{x}+2\gamma\dot{x}+\omega_0^2\{1+\alpha\xi(t)\}x=0, \tag{14.3.16}$$

стремится к нулю, есть

$$\langle\gamma\rangle\frac{1}{2}\alpha^2\omega_0^2\int_0^\infty\langle\xi(t)\,\xi(t-\tau)\rangle\cos 2\omega_0\tau\,d\tau,$$

с точностью до порядка α^2.

14.4. ТРИ КРИТИЧЕСКИХ ЗАМЕЧАНИЯ

В этом параграфе мы тщательно изучим некоторые методы, встречающиеся в литературе, и сравним их с работой, проделанной в предыдущих параграфах. *Первое замечание* касается небольшого изме-

нения аргумента в § 14.2, что привело нас к (14.2.7). Из (14.2.3б) для $v(t)$ с $v(0)=a$ легко находим

$$v(t)=a+\alpha\int_0^t \mathrm{d}t_1 V(t_1)\,a+\alpha^2\int_0^t \mathrm{d}t_1\int_0^{t_1}\mathrm{d}t_2 V(t_1)\,V(t_2)\,v(t_2).$$

В отличие от (14.2.4) это соотношение точное, но оно не решает 14.2.3б), поскольку содержит неизвестную величину $v(t)$ в правой (части. Если взять среднее, то получим выражение $\langle v(t)\rangle$ через другую неизвестную величину $\langle V(t_1)\,V(t_2)\,v(t_2)\rangle$. Однако если теперь предположить, что это среднее можно разбить на $\langle V(t_1)\,V(t_2)\rangle\langle v(t_2)\rangle$, то в результате получим уравнение, содержащее только* $\langle v(t)\rangle$:

$$\langle v(t)\rangle=a+\alpha\int_0^t \mathrm{d}t_1\langle V(t_1)\rangle\,a+\alpha^2\int_0^t \mathrm{d}t_1\int_0^{t_1}\mathrm{d}t_2\langle V(t_1)\,V(t_2)\rangle\langle v(t_2)\rangle.$$

Для простоты опять положим $\langle V(t)\rangle=0$. Тогда, дифференцируя, получаем интегродифференциальное уравнение, в котором начальное значение a уже не возникает:

$$\partial_t\langle v(t)\rangle=\alpha^2\int_0^t \mathrm{d}t'\langle V(t)\,V(t')\rangle\langle v(t')\rangle. \qquad (14.4.1)$$

Этот результат отличается от (14.2.6) тем, что скорость изменения $\langle v(t)\rangle$ выражается не через мгновенное значение $\langle v(t)\rangle$, но через интеграл по предшествующим значениям $\langle v(t')\rangle$. И только если мы делаем дополнительное приближение, предполагая, что $\langle v(t)\rangle$ изменяется настолько медленно, что интеграл от $\langle v(t')\rangle$ можно заменить на $\langle v(t)\rangle$, выражение (14.4.1) сводится к (14.2.6). Однако это различие только кажущееся. Сначала можно показать, что сведение среднего $\langle VVv\rangle$ к $\langle VV\rangle\langle v\rangle$ справедливо только тогда, когда можно пренебречь членами относительного порядка $\alpha\tau_c$. С другой стороны, поскольку интеграл по t' в (14.4.1) фактически распространяется только на интервал $(t-\tau_c,\ t)$, уравнение дает $\partial_t\langle v\rangle\sim\sim\alpha^2\tau_c\langle v\rangle$. Тогда, меняя $\langle v(t')\rangle$ на $\langle v(t)\rangle$, заменяем интеграл величиной порядка

$$^1/_2\tau_c^2\,|\,\partial_t\langle v\rangle\,|\sim\alpha^2\tau_c^3\langle v\rangle,$$

т. е. величиной, имеющей относительный порядок $(\alpha\tau_c)^2$. Эта разница пренебрежима по сравнению с уже допущенными ошибками. Следовательно, *интегральное уравнение* (14.4.1) *не точнее дифференциального уравнения* (14.2.6).

Упражнение. Для случая, когда $\langle A_1(t)\rangle$ не обращается в нуль, выведите

$$\partial_t\langle u(t)\rangle=\{A_0+\alpha\langle A_1(t)\rangle\}\langle u(t)\rangle+$$
$$+\alpha^2\int_0^t \mathrm{d}\tau\langle\langle A_1(t)\,\mathrm{e}^{\tau A_0}A_1(t-\tau)\rangle\rangle\langle u(t-\tau)\rangle. \qquad (14.4.2)$$

---

* R. C. Bourret, Nuovo Cimento 26, 1 (1962).

Покажите, что это выражение точнее, чем (14.2.11).

Упражнение. Уравнение для монохроматической волны в трехмерной среде со случайным показателем преломления имеет вид *

$$\nabla^2\varphi(\mathbf{r})+\{k^2+\xi(\mathbf{r})\}\varphi(\mathbf{r})=0.$$

Выведите для $\langle\varphi(\mathbf{r})\rangle$ интегральное уравнение

$$(\nabla^2+k^2)\langle\varphi(\mathbf{r})=-\int\frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{4\pi|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\langle\xi(\mathbf{r})\,\xi(\mathbf{r}')\rangle\langle\varphi(\mathbf{r}')\,d\mathbf{r}'. \qquad (14.4.3)$$

При каких условиях оно справедливо?

Упражнение. Покажите, что при определенных условиях это интегральное уравнение сводится к волновому уравнению с перенормированным волновым числом

$$\nabla^2\langle\varphi\rangle+\langle k^2+\beta+i\gamma)\langle\varphi\rangle=0,$$

где $\gamma>0$, и оно вызывает затухание, когда переходит диссипируемая энергия.

Второе замечание мы сформулируем как предостережение, касающееся обманчиво простого вывода уравнения, описывающего только среднюю величину $\langle u(t)\rangle$ из линейного стохастического уравнения (14.2.1). Пусть задано начальное значение $u(t_0)$. Тогда для каждой отдельной реализации $A(t)$ имеется решение $u(t)$, которое можно записать в виде

$$u(t)=Y(t\,|\,t_0)\,u(t_0). \qquad (14.4.4)$$

Мы знаем, что оператор эволюции можно записать в виде

$$Y(t\,|\,t_0)=\left[\exp\int_0^t A(t')\,dt'\right],$$

но такое представление здесь не нужно. Принимая во внимание все реализации $A(t)$, легко понять, что $Y(t\,|\,t_0)$ — стохастическая матрица. Из (14.4.4) получаем

$$\langle u(t)\rangle=\langle Y(t\,|\,t_0)\rangle\,u(t_0),$$
$$\partial_t\langle u(t)\rangle=\langle\dot{Y}(t\,|\,t_0)\rangle\,u(t_0).$$

Здесь точка означает дифференцирование по переменной t. Исключая $u(t_0)$, получаем

$$\partial_t\langle u(t)\rangle=\langle\dot{Y}(t\,|\,t_0)\rangle\langle Y(t\,|\,t_0)\rangle^{-1}\langle u(t)\rangle=R(t\,|\,t_0)\langle u(t)\rangle. \qquad (14.4.5)$$

Видно, что $\langle u(t)\rangle$ удовлетворяет обычному дифференциальному уравнению, математически точному с неслучайным матричным коэффициентом R. Возникает вопрос: не было ли наше усердие § 14.2 и 14.3 излишним?

---

* Из обширной литературы на отд. тему мы выбрали: V. I. Tatarski, Wave Propagation in a Turbulent Medium (McGraw-Hill, New York, 1961); U. Frish in: Probalistic Methods in Applied Mathematics 1 (A. T. Bharucha-Reid ed., Acad. Press, New York, 1968); D. Dence and J. E. Spence in: Idem, Vol. 3 (1973); V. I. Klyatskin and V. I. Tatarski: Sov. Phys. Usp. 16, 494 (1974).

Нет, поскольку имеется фундаментальное различие между (14.4.5) и (14.2.11), которое проявляется в присутствии t_0 в (14.4.5). Даже если исключить начальное значение $u(t_0)$, начальное время t_0 по-прежнему играет особую роль, потому что это тот момент времени, в который u статистически не зависит от A. Вспоминая примечание в § 14.1, можно сказать что (14.4.5) применима к множеству S_0, в то время как (14.2.11)—ко всему S.

Результат § 14.3 состоит в том, что уравнение для всех $U \in S$ действительно существует при условии, что $\alpha\tau_c \ll 1$. Оно описывает режим, в котором флуктуации определяются лишь флуктуациями $A(t)$ и уже не зависят от начальных условий. В этом режиме u движется в окружении облака флуктуаций примерно как элементарная частица, окруженная шубой виртуальных частиц. В результате u по-прежнему удовлетворяет уравнению движения, не содержащему начальных данных, но с модифицированными или перенормированными из-за присутствия флуктуаций коэффициентами. Конечно же, это справедливо только приближенно и лишь по прошествии определенного времени, по крайней мере не меньшего, чем τ_c от начального момента времени t_0. Иначе говоря, вывод § 14.3 состоит в том, что, если $\alpha\tau_c \ll 1$, то оператор $R(t \mid t_0)$ в (14.4.5) перестает зависеть от t_0 при $t - t_0 > \tau_c$ и в этом случае дается величиной, заключенной в [ ] в (14.2.11). Можно добавить, что, после того как этот факт установлен, задним числом можно утверждать, что (14.4.5) можно использовать для нахождения высших членов.

Упражнение. Пусть u—единственная комплексная переменная, удовлетворяющая уравнению $\dot{u} = -i(\omega_0 + \alpha\omega_1)u$, где ω_0—константа, а ω_1—случайная величина, не зависящая от времени. (Тогда $\tau_c = \infty$, см. § 14.6.) Найдите $R(t \mid t_0)$ явно, предполагая, что ω_1 гауссово. Покажите, что оно никогда не становится не зависящей от t_0 и что не существует дифференциального уравнения движения, содержащего только $\langle u \rangle$.

Третье замечание касается проекционной техники* получения уравнения для среднего. Пусть u—стохастический процесс, определенный соотношением (14.2.1) совместно с начальным условием $u(t_0) = a$. Чтобы облегчить обсуждение, будем считать, что a может быть случайным. Пусть $\mathscr{P}$—проекционный оператор, определенный в примечании к параграфу 1.4. Этот оператор проектирует стохастические величины на их средние. Пусть $\mathscr{L} = 1 - \mathscr{P}$, так что

$$\mathscr{P}u = \langle u \rangle, \quad \mathscr{L}u = u - \langle u \rangle. \tag{14.4.6}$$

Тогда (14.2.1) можно записать как два связанных уравнения для $\mathscr{P}u$ и $\mathscr{L}u$:

$$\partial_t \mathscr{P}u = \mathscr{P}A\mathscr{P}u + \mathscr{P}A\mathscr{L}u, \tag{14.4.7а}$$

$$\partial_t \mathscr{L}u = \mathscr{L}A\mathscr{P}u + \mathscr{L}A\mathscr{L}u. \tag{14.4.7б}$$

---

* S. Nakajima, Prog. Theor. Phys. 20, 948 (1958); R. Zwanzig, J. Chem. Phys. 33, 1338 (1960).

Решая уравнение (14.4.7б), можно выразить $\mathscr{L}u$ через $\mathscr{P}u$:

$$\mathscr{L}u(t) = e^{(t-t_0)\mathscr{L}A\mathscr{L}}\mathscr{L}u(t_0) + \int_{t_0}^{t} e^{(t-t')\mathscr{L}A\mathscr{L}}\mathscr{L}A\mathscr{P}u(t')\,dt'.$$

Подстановка в (14.4.7а) дает интегральное уравнение для $\mathscr{P}u$:

$$\partial_t\langle u(t)\rangle = \mathscr{P}A\mathscr{P}\langle u(t)\rangle + \int_{t_0}^{t}\mathscr{P}A\mathscr{L}e^{(t-t')\mathscr{L}A\mathscr{L}}\mathscr{L}A\mathscr{P}\langle u(t')\rangle\,dt' + \\ + \mathscr{P}A\mathscr{L}e^{(t-t_0)\mathscr{L}A\mathscr{L}}\mathscr{L}a. \qquad (14.4.8)$$

Опять-таки это уравнение является точным, но не отражает сути дела. Оно содержит начальное время t_0 и начальное значение a. Если выбрать a нестохастическим, последний член обращается в нуль, но тогда уравнение применимо только к S_0. Считая, что a может быть случайной величиной, (14.4.8) можно делать применимым к любой частной функции $u \in S_1$, если для a взять правильное распределение u в момент t_0, однако это распределение нельзя определить не решив исходного уравнения (по крайней мере между t_1 и t_0). Действительно, (14.4.8) — это просто алгебраическое преобразование (14.2.1), поэтому оно содержит в точности ту же самую информацию и решить его отнюдь не проще. Это не есть желаемое уравнение только для $\langle u\rangle$, справедливое при всех начальных условиях. Однако работа, проделанная в § 14.3, дает основание сделать вывод, что если $\alpha\tau_c \ll 1$, то последний член в (14.4.8) практически равен нулю при $t - t_0 > \tau_c$, так что остается интегральное уравнение, содержащее только $\langle u\rangle$. Но в соответствии с первым замечанием (см. выше) интегрирование по предшествующему времени является фиктивным и это уравнение можно заменить дифференциальным уравнением (14.2.11).

Упражнение. Предположим, что $A = A_0 + \alpha A_1$. Тогда для любого стохастического вектора u имеют место соотношения:

$$\begin{aligned}
\mathscr{P}A\mathscr{P}u &= \{A_0 + \alpha\langle A_1\rangle\}\langle u\rangle,\\
\mathscr{P}A\mathscr{L}u &= \alpha\langle\{A_1 - \langle A_1\rangle\}u\rangle,\\
\mathscr{L}A\mathscr{P}u &= \alpha\{A_1 - \langle A_1\rangle\}\langle u\rangle,\\
\mathscr{L}A\mathscr{L}u &= A_0\{u - \langle u\rangle\} + O(\alpha).
\end{aligned}$$

С помощью этих тождеств покажите, что (11.4.8) совпадает с уравнением (14.4.2).

Упражнение. Те же самые приемы проектирования можно применить к нестохастическому уравнению $\dot{u} = Au$, когда $\mathscr{P}$ — проекционный оператор в пространстве векторов u. (Этот прием часто используют для того, чтобы исключить некоторые нежелательные компоненты u, которые мы считаем не относящимися к сути дела, хотя их начальные значения не равны нулю, как в последнем члене (14.4.8).) Постройте таким образом уравнение для координат гармонического осциллятора после исключения его импульса с помощью проецирования.

14.5. НЕЛИНЕЙНЫЕ СТОХАСТИЧЕСКИЕ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ

Рассмотрев в предыдущих двух параграфах линейные стохастические дифференциальные уравнения, вернемся теперь к общему случаю (14.1.1). Его, так же как и обычные дифференциальные уравнения, можно преобразовать в линейное уравнение, если перейти к связанному с ним уравнению Лиувилля. Для того чтобы сделать это, мы временно возьмем одну реализацию $y(t)$ процесса $Y(t)$ и рассмотрим нестохастическое уравнение

$$\dot{u}_\nu = F_\nu(u,\ t;\ y(t)). \tag{14.5.1}$$

Оно описывает поток в u-пространстве, плотность которого изменяется в соответствии с уравнением

$$\frac{\partial \rho(u,\ t)}{\partial t} = -\sum_\nu \frac{\partial}{\partial u_\nu}\{F_\nu(u,\ t;\ y(t)\rho\}. \tag{14.5.2}$$

Это обычное гидродинамическое уравнение непрерывности $\dot{\rho} = -\operatorname{div}\rho\mathbf{v}$, записанное для произвольного числа измерений. Хорошо знакомое уравнение Лиувилля в статистической механике является частным случаем, в котором поток является несжимаемым, т. е. дивергенция $\sum \partial F_\nu/\mathrm{d}u_\nu$ обращается в нуль и тогда множитель F_ν в уравнении (14.5.2) можно записать перед $\partial/\partial u_\nu$. Однако Лиувилль не вводил такого ограничения в своей работе.

Если теперь предположить, что $y(t)$ пробегает по всем реализациям процесса $Y(t)$ с соответствующими вероятностями, уравнение (14.5.2) становится линейным стохастическим дифференциальным уравнением для $\rho(u, t)$. Общий вид уравнения (14.5.2) совпадает с (14.2.11), если рассматривать ρ как аналог u в (14.2.1) и представить вектор u как аналог ненаписанной метки ν в (14.2.1). Линейный оператор $\sum(\partial/\partial u_\nu)F_\nu \ldots$ является аналогом матрицы A. Следовательно, для того чтобы получить приближенное уравнение для среднего $\langle\rho(u,\ t)\rangle$ при заданном $\rho(u,\ 0)$, формально можно применить тот же самый метод. Предположим, что это сделано, тогда возникает вопрос: что нам скажет результат о решении исходного уравнения (14.5.1)? Ответ на этот вопрос дает следующая лемма.

Предположим, мы решили (14.5.1) с начальным условием $u_\nu(0) = a_\nu$, где a — заданный вектор. Пусть $P(u,\ t)$ — получающееся в результате распределение вероятности u при $t \geqslant 0$. С другой стороны, пусть (14.5.2) решено с начальным условием

$$\rho(u,\ 0) = \delta(u-a) = \prod_\nu \delta(u_\nu - a_\nu).$$

Тогда имеем

$$\langle\rho(u,\ t)\rangle = P(u,\ t). \tag{14.5.3}$$

Для того чтобы доказать эту лемму, заметим, что (14.5.1) для каждого $y(t)$ определяет преобразование начального значения a

в значение u в момент времени t, которое мы обозначим a^t. Если теперь допустимы все значения $y(t)$, то, согласно (1.5.2), имеем

$$P(u,\ t) = \langle \delta(u - a^t) \rangle. \tag{14.5.4}$$

С другой стороны, для каждого $y(t)$ плотность потока в u-пространстве удовлетворяет соотношению

$$\rho(a^t,\ t)\, \mathrm{d}a^t = \rho(a,\ 0)\, \mathrm{d}a. \tag{14.5.5}$$

Отсюда следует

$$\rho(u,\ t) = \rho(u^{-t},\ 0) \frac{\mathrm{d}(u^{-t})}{\mathrm{d}(u)} = \delta(u^{-t} - a) \frac{\mathrm{d}(u^{-t})}{\mathrm{d}(u)}. \tag{14.5.6}$$

Здесь $\mathrm{d}(u^{-t})/\mathrm{d}(u)$ — якобиан преобразования. Согласно свойству преобразования дельта функций, (14.5.6) равно $\delta(u - a^t)$. Теперь возьмем среднее по всем $y(t)$; в результате получится (14.5.3), что и требовалось доказать.

Итак, сформулируем стратегию решения нелинейного стохастического дифференциального уравнения (14.5.1). Сначала приводим его к эквивалентному линейному виду (14.5.2). Затем применяем метод, сформулированный в предыдущих параграфах, для того чтобы найти приближенное дифференциальное уравнение для среднего $\langle \rho(u,\ t) \rangle$ при условии, что число Кубо мало. В результате получается уравнение для распределения вероятности $P(u,\ t)$ в виде

$$\dot{P}(u,\ t) = \mathbf{K} P(u,\ t) \tag{14.5.7}$$

с оператором $\mathbf{K}$, действующим на зависимость от u. Таким образом, в этом приближении P описывается основным кинетическим требованием, $\mathbf{K}$ получается как разложение в степенной ряд по числу Кубо, но члена порядка $\alpha^2 \tau_c$ обычно оказывается достаточно. Тот же самый метод можно применять, если F само оказалось линейным, как в (14.2.1), когда мы хотим узнать полное распределение вероятности u, а не его среднее значение.

Приложение. Рассмотрим следующую задачу, связанную с нагревом плазмы *.

Заряженная частица движется в одном измерении в электрическом поле E:

$$\dot{x} = v, \quad \dot{v} = \alpha E(x,\ t);$$

$E(x,\ t)$ является случайным процессом, стационарным в пространстве и времени с нулевым средним временем автокорреляции τ_c. Плотность ансамбля таких частиц удовлетворяет уравнению (14.5.2):

$$\frac{\partial \rho(x,\ v,\ t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} v\rho - \alpha \frac{\partial}{\partial v} E(x,\ t)\, \rho = \{A_0 + \alpha A_1(t)\}\, \rho.$$

---

* P. A. Sturrock, Phys. Rev. 114, 186 (1966); D. E. Hall and P. A. Sturrock Phys. Fluids 10, 2620 (1967); M. B. Silevitch and K. I. Golden, J. Statist. Phys., 65 (1973).

Для того чтобы применить (14.2.7), мы должны определить оператор $e^{\tau A_0}$. Пусть $f(x, v)$ — произвольная функция, тогда

$$e^{\tau A_0} f(x, v) = \exp\left[-\tau v \frac{\partial}{\partial x}\right] f(x, v) = f(x - \tau v, v).$$

Следовательно, величина $e^{-\tau A_0}\langle u(t)\rangle$, встречающаяся в (14.2.7), превращается в $P(x + \tau v, v)$. Нужно подействовать на нее оператором $A_1(t - \tau)$:

$$-\frac{\partial}{\partial v} E(x, t - \tau) P(x + \tau v, v) = -E(x, t - \tau)\left(\frac{\partial P}{\partial v} + \tau \frac{\partial P}{\partial x}\right)(x + \tau v, v).$$

Затем $e^{\tau A_0}$ сдвигает аргумент x обратно:

$$e^{\tau A_0} A_1(t - \tau) e^{-\tau A_0} P(x, v) = -E(x - \tau v, t - \tau)\left(\frac{\partial P}{\partial v} + \tau \frac{\partial P}{\partial x}\right)(x, v).$$

После этого нужно подействовать оператором A_1 еще раз, и тогда (14.2.7) в нашем случае приобретает окончательный вид

$$\frac{\partial P(x, v, t)}{\partial t} = -v \frac{\partial P}{\partial x} + \alpha^2 \frac{\partial}{\partial v} \times$$
$$\times \int_0^\infty \langle E(x, t) E(x - \tau v, t - \tau)\rangle \left(\frac{\partial P}{\partial v} + \tau \frac{\partial P}{\partial x}\right) d\tau,$$

или

$$\frac{\partial P}{\partial t} + v \frac{\partial P}{\partial x} = \alpha^2 \frac{\partial}{\partial v} c_0(v) \frac{\partial P}{\partial v} + \alpha^2 \frac{\partial}{\partial v} c_1(v) \frac{dP}{\partial x},$$

$$c_0(v) = \int_0^\infty \langle E(x, t) E(x - \tau v, t - \tau)\rangle d\tau,$$

$$c_1(v) = \int_0^\infty \tau \langle E(x, t) E(x - \tau v, t - \tau)\rangle d\tau. \qquad (14.5.8)$$

Неудивительно, что автокорреляционная функция включает в себя поле, возмущенное частицей, в то время как частица движется с невозмущенной скоростью v.

Упражнение. Выведите (14.5.2) из (14.5.5).

Упражнение. Выведите из (14.5.8) уравнение для распределения скорости, которое соответствовало бы нагреву плазмы.

Упражнение. Популяция растет со скоростью, описывающейся флуктуирующим коэффициентом

$$\dot{u} = \{1 + \alpha\xi(t)\} u.$$

Примените тот же метод, для того чтобы получить распределение вероятности в момент времени t с точностью до второго порядка по α. Сравните результат с точным решением.

Можно вывести общие формулы для более общих случаев, но они достаточно сложны *. Поэтому мы ограничиваемся случаями, в кото-

* N. G. van Kampen. Physics Reports 24, C, 171 (1976). Приложение к броуновскому движению спинов рассматривается в работе: R. Kubo and N. Hashitsume, Suppl. Prog. Theor. Phys. 46, 210 (1970).

рых не только $\alpha\tau_c$ мало, но и τ_c мало по сравнению с характерным временем невозмущенного движения. Точнее говоря, положим

$$F(u, t) = F_0(u) + \alpha F_1(u, t)$$

со случайным F_1 и по аналогии с (14.2.8) предположим, что

$$\tau_c |F_0(u)| \ll 1.$$

Тогда можно использовать (14.2.9) с (14.2.7).

Приложение. Частица движется в одном измерении под воздействием силы $K(x)$, силы трения $-\beta\dot{x}$ и случайной силы $\alpha\xi(t)$:

$$\ddot{x} + \beta\dot{x} = K(x) + \alpha\xi(t).$$

Если бы ξ было белым шумом, то это была бы модель Крамерса (см. § 8.7). но мы только предполагаем, что ξ имеет малое время корреляции τ_c.

Уравнение Лиувилля имеет вид

$$\frac{\partial\rho(x, v, t)}{\partial t} = -v\frac{\partial\rho}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial v}\{K(x) - \beta v + \alpha\xi(t)\}\rho = \{A_0 + \alpha A_1(t)\}\rho.$$

Теперь уравнение (14.2.9) принимает вид

$$\frac{\partial P(x, v, t)}{\partial t} = -v\frac{\partial P}{\partial x} - K(x)\frac{\partial P}{\partial v} + \beta\frac{\partial}{\partial v}vP + \alpha^2\int_0^\infty \langle\xi(t)\xi(t-\tau)\rangle\, d\tau\frac{\partial^2 P}{\partial v^2}.$$

Таким образом, мы вывели уравнение Крамерса (8.7.4) как приближение для малого времени корреляции τ_c, которое становится точным в пределе (14.3.12). Из нашего вывода видно, что коэффициент при флуктуационном члене является интегралом от автокорреляционной функции случайной силы.

Упражнение. Покажите, что в этом случае поправка (14.2.12) имеет вид

$$-\alpha^2\beta c_1\frac{\partial^2 P}{\partial v^2} + \alpha^2 c_1\frac{\partial^2 P}{\partial x\,\partial v},$$

$$c_1 = \int_0^\infty \langle\xi(t)\xi(t-\tau)\rangle\,\tau d\tau.$$

Упражнение. Для следующего уравнения Мальтуса — Верхюльста со случайным коэффициентом

$$\dot{u} = u - \{1 + \alpha\xi(t)\}u^2,$$

получите основное кинетическое уравнение для $P(u, t)$ и покажите *, что

$$P^s(u) = \frac{1}{u^2}\exp\left[\frac{1}{\alpha^2 c_0}\left(\frac{1}{u} - \frac{1}{2}u^2\right)\right].$$

Получите тот же самый результат с помощью преобразования уравнения к линейному для u^{-1}.

---

* O. J. Heilman and N. G. van Kampen, Physico 93A, 476 (1978).

Упражнение. Исследуйте таким же способом уравнение

$$\dot{u}=\{1+\alpha\xi(t)\}u-\{1+\beta\eta(t)\}u^2$$

с двумя случайными членами, не обязательно некоррелированными.

Упражнение. Рассмотрите однокомпонентное уравнение

$$\dot{y}=A(y)+C(y)\xi(t).$$

Его вид совпадает с нелинейным уравнением Ланжевена или уравнением Ито (8.8.15), но считается, что ξ обладает малым, но не нулевым временем корреляции τ_c. Покажите, что соответствующее основное кинетическое уравнение (14.5.7) в пределе $\tau_c \to 0$ переходит в уравнение Стратоновича (8.8.19), а не в уравнение Ито (8.8.16). Это подтверждается явным вычислением в примечании в конце § 8.8, но наше утверждение применимо только к внешнему шуму *.

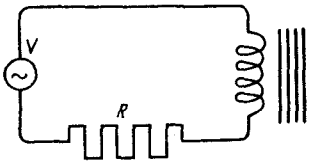

Рис. 41. Нелинейная цепь с генератором случайного потенциала

Упражнение. В цепи, изображенной на рис. 41, поток в сердечнике является нелинейной функцией $\Phi(J)$ тока J. Генератор производит э. д. с.

$$V(t)=V_0(t)+\alpha V_1(t),$$

где $V_1(t)$ — случайная величина с нулевым средним. В пределе (11.3.12) плотность вероятности тока описывается уравнением Фоккера — Планка

$$\frac{\partial P(I,t)}{\partial t}=\frac{\partial}{\partial I}\left\{\frac{RI-V(t)}{\Phi'(I)}+\alpha^2 c_0\frac{\Phi''(I)}{\Phi'(I)^2}\right\}P+\alpha^2 c_0\frac{\partial^2}{\partial I^2}\frac{P}{\Phi'(I)^2},$$

где

$$c_0=\int_0^\infty \langle V(t)V(t-\tau)\rangle\,d\tau.$$

14.6. БОЛЬШИЕ ВРЕМЕНА КОРРЕЛЯЦИИ

В предшествующих параграфах мы рассматривали малые времена корреляции или, точнее говоря, случаи, в которых $\alpha\tau_c \ll 1$. В этом случае существует общий приближенный метод, дающий определенные и физически полезные результаты. В пределе (14.3.12) выживают только первый член разложения и результат получается таким же, как и при обычных вычислениях в случае белого шума. В § 14.2 мы выяснили причину существования такого общего метода: воздействие флуктурирующего члена в течение времени τ_c мало, и его можно вычислить с помощью теории возмущений, затем описать поведение на больших временах, складывая все эти независимые вклады.

Этот метод становится непременимым, когда автокорреляционное время случайных коэффициентов в $F(u, t; Y)$ велико, т. е. когда $\alpha\tau_c \geqslant 1$. В этом случае не существует общего метода, но для определенных классов уравнений можно разработать частные методы.

---

* Различные выводы даются в [6, Section IV.8].

Они позволяют изучить поведение системы при больших временах автокорреляции.

Первый класс обладает бесконечным τ_c: коэффициенты в (14.1.1) являются случайными постоянными X, а не случайными функциями $Y(t)$. В этом случае может оказаться, что уравнение можно решить для каждого частного значения x из множества возможных значений X. Допустим, что такое решение $U(t;\ x,\ a)$ с начальным значением a известно. Тогда плотность вероятности u в момент времени t

$$P_U(u,\ t) = \int \delta[u - U(t;\ x,\ a)]\, P_X(x)\, \mathrm{d}x.$$

Известная и только частично решенная задача такого типа — это линейная цепочка гармонически ограниченных частиц, у которых массы и упругость пружинок — случайные величины *. Тесно примыкает к этой задаче проблема нахождения распределения собственных значений случайной матрицы **. Как будет показано в упражнении, начальный момент времени $t=0$ из результата не исчезает. Это связано с тем, что система обладает бесконечной памятью и никогда не забывает, что в этот частный момент времени величина u была фиксирована и не зависела от значений коэффициентов. Поэтому нет никакой надежды на то, что u хотя бы приближенно будет марковским процессом, не говоря уже о том, что $\langle u \rangle$ удовлетворяет такому не зависящему от времени дифференциальному уравнению, как (14.2.7).

Второй класс можно проиллюстрировать уравнением для одной переменной:

$$\dot{u} = -A(t)\,u = -\{A_0 + \alpha\xi(t)\}\,u, \quad u(0) = a,$$

где A_0 — положительная константа, $\xi(t)$ — случайный процесс с большим временем корреляции τ_c, α — малый параметр. Положим $u = u_0 + \alpha u_1 + \alpha^2 u_2 + \ldots$ и применим теорию возмущений. С точностью до второго порядка получим

$$u(t) = \mathrm{e}^{-A_0 t}\left[1 - \alpha\int_0^t \xi(t_1)\,\mathrm{d}t_1 + \alpha^2 \int_0^t \mathrm{d}t_1 \int_0^{t_1} \mathrm{d}t_2\, \xi(t_1)\,\xi(t_2)\right] a.$$

Возьмем среднее и предположим для удобства $\langle \xi(t) \rangle = 0$:

$$\langle u(t) \rangle = \mathrm{e}^{-A_0 t}\left[1 + \alpha^2 \int_0^t \mathrm{d}t_1 \int_0^{t_1} \mathrm{d}t_2 \langle \xi(t_1)\,\xi(t_2) \rangle\right] a. \qquad (14.6.1)$$

---

* См. работы: F. J. Dyson and others reprinted in: E. H. Lieb and D. C. Mattis, Mathematical Physics in One Dimension (Acad. Press, New York, 1966); более позднее развитие дано в работе: J. L. van Hammen and R. G. Palmer, J. Phys. (London) A12, 563 (1979).

** C. E. Porter, Statistical Theory of Spectra: Fluctuations (Acad. Press, New York, 1965); M. L. Mehta, Random Matrices (Acad. Press, New York, 1967); M. Carmeli, J. Statist. Phys. 10, 259 (1974).

Эта формула совпадает с (14.2.4), но из-за того, что время корреляции τ_c велико, мы не можем продвинуться дальше старым способом. Однако если A_0 велико, то все решение быстро стремится к нулю и этого достаточно, чтобы полученное по теории возмущений решение было применимо в течение времени, большого по сравнению с A_0^{-1}. Тогда условие справедливости (14.6.1) имеет вид

$$\alpha/A_0 \ll 1.$$

Упражнение. Рассмотрите уравнение $\dot{u} = -i\omega u$, в котором случайная константа ω распределена вблизи своего среднего значения ω_0 согласно:
1) распределению Лоренца,
2) распределению Гаусса,
3) экспоненциально.
Найдите распределение $P(u, t \mid a, 0)$ величины u в момент времени t при фиксированном начальном значении a.

Упражнение. Найдите распределение $P(x, \dot{x}, t \mid a, b, 0)$ для уравнения $\ddot{x} + \omega^2 x = 0$ с таким же ω, как и в предыдущем упражнении.

Упражнение. Вычислите (14.6.1), когда $\xi(t)$ — процесс Орнштейна — Уленбека.

Упражнение. Запишите обобщение формулы (14.6.1) для многокомпонентного уравнения (14.2.1). Каковы условия его справедливости?

Упражнение. Сформулируйте аналогичный метод и условие его справедливости для нелинейных уравнений.

Третий класс уравнений, в котором можно исследовать влияние произвольных времен корреляции, представляет большой интерес. Этот класс состоит из уравнений (14.1.1), в которых $Y(t)$ является марковским процессом. Пусть $\Pi(y, t \mid y_0, t_0)$ — плотность вероятности перехода для этого марковского процесса, а основное кинетическое уравнение для него имеет вид

$$\dot{\Pi} = \mathbf{W}\Pi \tag{14.6.2}$$

Сделаем одно важное замечание: *процесс, описывающийся совместными переменными* (u, y), *снова является марковским.*

Пусть $\mathcal{P}(u, y, t)$ — плотность вероятности этого совместного процесса. За короткое время Δt она изменяется на $\mathcal{P}(u, y, t + \Delta t)$, причем это изменение связано с двумя отдельными причинами, которые в первом порядке по Δt являются аддитивными. Во-первых, u изменяется согласно (14.5.2) из-за того, что $\mathcal{P}$ меняется согласно (14.1.1). Во-вторых, y может совершить скачок за время Δt, что приведет к изменению $\mathcal{P}$ согласно (14.6.2). Тогда

$$\frac{\partial \mathcal{P}(u, y, t)}{\partial t} = -\sum_{\nu} \frac{\partial}{\partial u_\nu} F_\nu(u, t, y)\mathcal{P} + \mathbf{W}\mathcal{P}. \tag{14.6.3}$$

Это основное кинетическое уравнение объединенного процесса *.

---

* Это уравнение под названием «стохастическое уравнение Лиувилля» было введено Кибо в работе: R. Kubo. J. Mathem. Phys. 4, 174 (1963). Прилагательное «стохастическое» в данном контексте используется в смысле «связанное со стохастическими уравнениями» в противоположность нашему пониманию этого слова как синонима «случайный», что отражено в названии этой главы.

Решение уравнения (14.6.3) с начальными значениями u_0, y_0 при t_0 дает вероятность перехода $\mathcal{P}(u, t, y|u_0, t_0, y_0)$ объединенного марковского процесса. Если его проинтегрировать по y, то получим плотность вероятности для одного u при условии, что начальные значения u_0, y_0 в момент времени t_0 заданы. В большинстве случаев представляет интерес не частное значение y_0, а среднее по всем возможным y_0:

$$P(u, t|u_0, 0) = \int dy \int \Pi_1(y_0, t_0)\, dy_0\, \mathcal{P}(u, y, t|u_0, y_0, t_0),$$

где Π_1 — распределение y в момент времени t, т. е, функция $P_1(y, t)$, если использовать стандартные обозначения § 3.4. Согласно этому уравнению нужно только решить (14.6.3) с начальным условием

$$\mathcal{P}(u, y, t_0) = \delta(u - u_0)\, \Pi_1(y_0, t_0).$$

Обычно $Y(t)$ является стационарным процессом, так что Π_1 является $\Pi^s(y)$.

К сожалению, уравнение (14.6.3) удается решить только в редких случаях. Но ситуация является более благоприятной, если F_ν линейно по u и не зависит явно от времени, в этом случае уравнение (14.1.1) имеет вид

$$\dot{u}_\nu = \sum_\mu A_{\nu\mu}(Y(t))\, u_\mu. \tag{14.6.4}$$

Тогда (14.6.3) превращается в

$$\frac{\partial \mathcal{P}(u, y, t)}{\partial t} = -\sum_{\nu, \mu} A_{\nu\mu}(y) \frac{\partial}{\partial u_\nu} u_\mu \mathcal{P} + \mathbf{W}\mathcal{P}. \tag{14.6.5}$$

Теперь определим частное среднее:

$$m_\nu(y, t) = \int u_\nu \mathcal{P}(u, y, t)\, du. \tag{14.6.6}$$

Умножая (14.6.5) на u_ν и выполняя интегрирование, получаем

$$\frac{\partial m_\nu(y, t)}{\partial t} = \sum_\mu A_{\nu\mu}(y)\, m_\mu + \mathbf{W} m_\nu. \tag{14.6.7}$$

Эти связанные уравнения нужно решить с начальными значениями

$$m_\nu(y, 0) = u_{0\nu} \Pi_1(y, 0). \tag{14.6.8}$$

Эта задача проще, чем исходная (14.6.5), но ее решение, конечно, может дать только среднее:

$$\langle m_\nu(t) \rangle = \int m_\nu(y, t)\, dy.$$

Пример. Кибо построил следующий пример, для того чтобы продемонстрировать сужения и расширения линии вследствие случайных

возмущений *. В уравнении (14.1.2) предположим, что $\omega = \omega_0 + \alpha\xi(t)$, где ω_0 и α — константы, а $\xi(t)$ — дихотомический марковский процесс (4.2.3). Поскольку ξ может принимать только два значения, введем сокращенное обозначение

$$\mathcal{P}(x, \pm 1, t) = \mathcal{P}_{\pm}(x, t)$$

и запишем (14.6.6) как два связанных уравнения:

$$\frac{\partial \mathcal{P}_+}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}(\omega_0^2 + \alpha)\, x\mathcal{P}_+ - \gamma\mathcal{P}_+ + \gamma\mathcal{P}_-,$$
$$\frac{\partial \mathcal{P}_-}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}(\omega_0^2 - \alpha)\, x\mathcal{P}_- - \gamma\mathcal{P}_- + \gamma\mathcal{P}_+.$$

Уравнение (14.6.7) для частных средних получают умножением любого из уравнений на x и последующем интегрированием:

$$\dot{m} = (\omega_0^2 + \alpha)\, m_+ - \gamma m_+ + \gamma m_-,$$
$$\dot{m}_- = (\omega_0^2 - \alpha)\, m_- - \gamma m_- + \gamma m_+. \qquad (14.6.9)$$

Начальное условие (14.6.8) сводится к $m_{\pm}(0) = {}^1/_2 a$, а соответствующее решение для $\langle u(t)\rangle = m_+(t) + m_-(t)$ имеет вид

$$\langle u(t)\rangle = a e^{-(i\omega_0 + \gamma)t} \left\{ \cos\left(t\sqrt{(\alpha^2 - \gamma^2)}\right) + \frac{\gamma}{\sqrt{\alpha^2 - \gamma^2}} \sin\left(t\sqrt{\alpha^2 - \gamma^2}\right) \right\}. \qquad (14.6.10)$$

Этот результат показывает, что средние значения медленных возмущений, т. е. таких, у которых $\gamma \ll \alpha$, ведут себя как суперпозиции двух гармонических осцилляторов с частотами, близкими к $\omega_0 \pm \alpha$, каждый из которых слегка затухает. В терминах Фурье-образов это равносильно двум отдельным «лоренцианам». Когда γ возрастает, оба пика уширяются и сливаются в одну широкую линию. С другой стороны, для быстрых возмущений, когда $\gamma \gg \alpha$, из (14.6.9) в первом порядке по γ^{-1} получаем

$$\langle u(t)\rangle = a \exp\left[i\omega_0 t - \frac{\alpha^2}{\gamma} t \right].$$

Это выражение представляет собой единственный лоренцевский пик вблизи ω_0. Этот пример показывает, как более быстрые возмущения могут приводить к сужению линии **.

Упражнение. Выразите иерархию распределений P_n процесса u и через решение $\mathcal{P}(u, y, t \mid u_0, y_0, t_0)$ уравнения (14.6.3), доказав тем самым, что процесс полностью определяется (14.6.3).

---

* R. Kubo in: Stochastic Processes in Chemical Physics (Advances in Chemical Physics 15; K. E. Shuler ed., Interscience, New York, 1969). Also P. W. Anderson, J. Phys. Soc. Japan 9, 316 (1954); R. Kubo, J. Phys. Soc. Japan 9, 935 (1954).

** Дальнейшую литературу о влиянии стохастических возмущений на ширину линий можно найти в работе: G. S. Agarwal, Z. Phys. B33, 111 (1979).

Упражнение. В примере Кубо ширина линии выражается через нормированную «функцию ширины линии» *:

$$I(w-w_0)=\frac{1}{2\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\frac{\langle u^*(0)\,u(t)\rangle^s}{\langle u^*(0)\,u(0)\rangle^s}\,e^{-i\omega t}\,dt.$$

Вычислите эту величину и подтвердите приведенные выше утверждения.

Упражнение. Как и в (14.1.2), возьмите $\omega=\omega_0+\alpha\xi$, но предположите теперь, что ξ — процесс Орнштейна — Уленбека. Покажите, что в соответствующих единицах

$$\langle u^*(0)\,u(t)\rangle=\exp\left[-(e^{-t}-1+t)\right].$$

Упражнение. В случайном осцилляторе (14.8.3) возьмите $\omega(t)^2=\omega_0^2(1+\alpha\xi)$, где $\xi(t)$ — дихотомический марковский процесс **. В этом случае будет четыре уравнения (14.6.7) для $\langle x\rangle_+$, $\langle x\rangle_-$, $\langle \dot{x}\rangle_+$, $\langle \dot{x}\rangle_-$. Четыре собственных значения дают частоты в усредненном процессе $\langle x(t)\rangle$. Для малых γ получите два малых распределения Лоренца вблизи частот $\omega_0\sqrt{1\pm\alpha}$, а для больших γ — одно распределение Лоренца вблизи ω_0.

Упражнение. Уравнения выживания дефектного гена *** можно преобразовать к виду

$$\dot{u}=(a+b\xi)\,u+c$$

с постоянными a, b, c и дихотомическим марковским процессом ξ. Поскольку настоящее число выживающих генов есть $u/(1+u)$, нам незачем знать $\langle u\rangle$. Найдите распределение вероятности как функцию времени t в частном случае $c=0$.

Упражнение. Для дихотомического марковского процесса $Y(t)$ производящая функция его интеграла есть

$$G(\alpha,\ t)=\left\langle \exp\left[\alpha\int\limits_0^t Y(t')\,dt'\right]\right\rangle.$$

Покажите, что она удовлетворяет уравнениям (14.6.9) с $\omega_0=0$, а ее явное значение можно получить (из (14.6.10) ****.

Упражнение. Жгутиковая бактерия передвигается в химическом градиенте с постоянной скоростью вдоль оси x. В случайные моменты времени она останавливается и с равной вероятностью продолжает движение либо в направлении $+x$, либо в направлении $-x$. Однако вероятность остановки за единичное время зависит от направления движения, так что она в конечном счете влияет на результирующее смещение $X(t)$. Найдите характеристическую функцию величины $X(t)$, а также ее среднее значение и дисперсию *****.

---

* P. C. Martin, Measurements and Cerrelation (Gordon and Breach, New York, 1968).

** R. C. Bourret, U. Frisch and A. Pouquet, Physica 65, 303 (1973); N. G. van Kampen, Physica 70, 222 (1973).

*** H. Falk and W. J. Ventevogel, Physica 95A, 191 (1979).

**** Это неявно использовалось в работе: P. Hu and S. R. Hartmann, Phys. Rev. B9, 1 (1974), для изучения воздействия магнитного поля на систему спинов.

***** H. C. Berg, Scientific American 233, 2—36 (August 1975); Nossal R. J. and G. H. Weiss, J. Statist. Phys. 10, 245 (1974).

Упражнение. Запишите и решите уравнение Фоккера—Планка, связанное с

$$\frac{\partial x}{\partial t} = -\alpha \tanh x - \frac{\beta}{\cosh x} Y(t),$$

где $Y(t)$ — процесс Орнштейна—Уленбека *.

Упражнение. Возьмите в (14.3.16) $\xi(t)$ в виде дихотомического марковского процесса и найдите точное условие того, что энергия стремится к нулю **.

14.7. НЕОДНОРОДНОЕ ЛИНЕЙНОЕ УРАВНЕНИЕ

В этом последнем параграфе мы рассмотрим систему линейных уравнений

$$\dot{u} = A(t)\,u + f(t), \tag{14.7.1}$$

где $A(t)$ — заданная случайная n-матрица, а $f(t)$ — заданный случайный n-компонентный вектор. Будем считать, что времена корреляции $A(t)$ и $f(t)$ малы. Если к тому же $A(t)$ и $f(t)$ статистически независимы друг от друга, уравнение (14.7.1) можно исследовать с помощью методов, развитых в § 14.2 и § 14.3 (ср. с (14.2.13)). Если они не являются независимыми, то (14.7.1) можно рассматривать как частный случай нелинейного уравнения общего вида, изученного в § 14.5. Однако в следующем подходе используется линейность (14.7.1) при непосредственном выводе уравнения для среднего $\langle u(t)\rangle$ в случае, когда $A(t)$ и $f(t)$ коррелируют друг с другом.

Явное решение (14.7.1) с начальным условием $u(0) = a$ имеет вид

$$u(t) = \left[\exp\int_0^t A(t')\,\mathrm{d}t'\right] a + \int_0^t \left[\exp\int_{t'}^t A(t'')\,\mathrm{d}t''\right] f(t')\,\mathrm{d}t'. \tag{14.7.2}$$

Множитель $f(t')$ можно записать внутри символов упорядочения по времени, поскольку $t' < t''$. Тогда можно выполнить усреднение по обоим случайным процессам A и f:

$$\langle u(t)\rangle = \left[\left\langle \exp\int_0^t A(t')\,\mathrm{d}t'\right\rangle\right] a + \int_0^t \left[\left\langle \exp\left\{\int_{t'}^t A(t'')\,\mathrm{d}t''\right\} f(t')\right\rangle\right] \mathrm{d}t''.$$

В первом члене можно использовать обычное разложение по кумулянтам, а во втором — тождество (14.3.13):

$$\langle u(t)\rangle = \left[\exp\left\{\int_0^t \mathrm{d}t_1 \langle A(t_1)\rangle + \frac{1}{2}\int_0^t \mathrm{d}t_1 \int_0^t \mathrm{d}t_2 \langle\langle A(t_1)\,A(t_2)\rangle\rangle + \ldots\right\}\right] a +$$
$$+ \int_0^t \mathrm{d}t' \left[\exp\left\{\int_0^t \mathrm{d}t_1 \langle A(t_1)\rangle + \ldots\right\} \times\right.$$
$$\left.\times \left\{\langle f(t')\rangle + \int_{t'}^t \langle\langle A(t''')\,f(t')\rangle\rangle\,\mathrm{d}t' + \ldots\right\}\right]. \tag{14.7.3}$$

---

* M. O. Hongler, Helv. Phys. Acta 52, 280 (1979).

** Bourret, Frisch and Pouquet, loc. cit.

Для того чтобы превратить это в систематическое разложение, нужно ввести параметр разложения.

Предположим снова, что $A(t)$ можно представить в виде $A_0 + \alpha A_1(t)$, и перейдем к представлению взаимодействия (14.2.3). Нет необходимости оценивать величину f, но для удобства мы будем считать, что она имеет тот же порядок величины α. Соответственно для ее представления взаимодействия полагаем

$$e^{-tA_0} f(t) = \alpha g(t).$$

Обе величины $A_1(t)$ и $f(t)$ будем считать стационарными, а их времена корреляции — конечными, большее из них обозначим τ_c. В окончательных выражениях для простоты положим $\langle A_1(t)\rangle = 0$ и $\langle f(t)\rangle = 0$. Тогда (14.7.3) принимает вид

$$\langle v(t)\rangle = \left[\exp\left\{\frac{\alpha^2}{2}\int_0^t \langle V(t_1)V(t_2)\rangle\, dt_1\, dt_2\right\}\right] a + \int_0^t dt' \left[\exp\left\{\frac{\alpha^2}{2}\int_{t'}^t \langle V(t_1)V(t_2)\rangle\, dt_1\, dt_2\right\} \times \left\{\alpha^2 \int_{t'}^t \langle V(t'')g(t')\rangle\, dt'' + \ldots\right\}\right].$$

В том выражении мы уже опустили высшие кумулянты V, поскольку очевидно, что они дают вклад и более высокие порядки по параметру $\alpha\tau_c$.

Если теперь преобразовать двойные интегралы в экспонентах, как это мы сделали в (14.3.3), и пренебречь оставшимся упорядочением по времени, то можно взять производную по времени. Полагая $t \gg \tau_c$, в результате получаем

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle v(t)\rangle = \left[\alpha^2 \int_0^\infty \langle V(t)V(t-\tau)\rangle\, d\tau\right]\langle v(t)\rangle + \int_0^t dt' \exp\left\{\alpha^2 \int_{t'}^t dt_1 \int_0^\infty \langle V(t_1)V(t-\tau)\rangle\, d\tau\right\}\{\alpha^2\langle V(t)g(t')\rangle + \ldots\}.$$

Первая строка представляет собой знакомый результат для однородного случая. Вторая строка, очевидно, имеет порядок $\alpha^2\tau_c$, а в этом порядке экспоненту можно опустить. Тогда

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle v(t)\rangle = \left[\alpha^2 \int_0^\infty \langle V(t)V(t-\tau)\rangle\, d\tau\right]\langle v(t)\rangle + \alpha^2 \int_0^\infty \langle V(t)g(t-\tau)\rangle\, d\tau + O(\alpha^3\tau_c^2).$$

В первоначальном представлении это выражение имеет вид

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle u(t)\rangle = \left[A_0 + \alpha^2 \int_0^{\infty} \langle A_1(t)\, e^{\tau A_0} A_1(t-\tau)\rangle\, e^{-\tau A_0} d\tau\right]\langle u(t)\rangle + \\ + \alpha \int_0^{\infty} \langle A_1(t)\, e^{\tau A_0} f(t-\tau)\rangle\, d\tau. \qquad (14.7.4)$$

В этом случае*, как и в § 14.3, можно убедиться в том, что упорядочение по времени просто добавляет поправки более высокой степени по параметру $\alpha\tau_c$.

Упражнение. Пусть u — комплексная скалярная функция, удовлетворяющая уравнению

$$\dot{u} = -i\omega_0 \{1 + \alpha\xi(t)\} u + f(t),$$

где ξ и f обладают свойствами, перечисленными в тексте. Найдите уравнение для $\langle u(t)\rangle$.

Упражнение. Если не делать упрощающего предположения о равенстве нулю средних $\langle A_1(t)\rangle = \langle f(t)\rangle = 0$, то результат должен иметь вид

$$\partial_t \langle u(t)\rangle = \left[A_0 + \alpha\langle A_1(t)\rangle + \alpha^2 \int_0^{\infty} \langle\langle A_1(t)\, e^{\tau A_0} A_1(t-\tau)\rangle\rangle\, e^{-\tau A_0} d\tau\right]\langle u(t)\rangle + \\ + \langle f(t)\rangle + \alpha \int_0^{\infty} \langle\langle A_1(t)\, e^{\tau A_0} f(t-\tau)\rangle\rangle\, d\tau. \qquad (14.7.5)$$

Упражнение. Покажите, что в пределе белого шума (14.3.2) этот результат сводится к точной формуле

$$\partial_t \langle u(t)\rangle = \left[A_0 + \alpha\langle A_1(t)\rangle + \alpha^2 \int_0^{\infty} \langle\langle A_1(t)\, A_1(t-\tau)\rangle\rangle\, d\tau\right]\langle u(t)\rangle + \\ + \langle f(t)\rangle + \alpha \int_0^{\infty} \langle\langle A_1(t)\, f(t-\tau)\rangle\rangle\, d\tau.$$

---

* Более общий случай и члены более высокого порядка рассмотрены в работе: J. B. T. M. Roerdink, Physica.

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие редактора 5
Предисловие автора 8

Глава 1. **Стохастические переменные** 11

1.1. Определения 11
1.2. Средние 14
1.3. Распределения для многих переменных 19
1.4. Сложение стохастических переменных 23
1.5. Преобразование переменных 26
1.6. Распределение Гаусса 30
1.7. Центральная предельная теорема 33

Глава 2. **Случайные события** 37

2.1. Определения 38
2.2 Распределение Пуассона 41
2.3. Еще один способ описания случайных событий 43
2.4. Формула обращения 47
2.5. Корреляционная функция 51
2.6. Время ожидания 54

Глава 3. **Стохастические процессы** 57

3.1. Определения 57
3.2. Стохастические процессы в физике 60
3.3. Преобразование Фурье стационарных процессов 64
3.4. Иерархия функций распределения 67
3.5. Колебания струны и случайные поля 71
3.6. Ветвящиеся процессы 75

Глава 4. **Марковские процессы** 78

4.1. Свойство марковости 78
4.2. Уравнение Чепмена — Колмогорова 84
4.3. Стационарные марковские процессы 87
4.4. Выделение подансамбля 92
4.5. Марковские цепи 95
4.6. Процессы распада 98

Глава 5. **Основное кинетическое уравнение** 100

5.1. Вывод *основного кинетического уравнения* 100
5.2. Класс **W**-матриц 104
5.3. Предел больших времен 108
5.4. Замкнутые изолированные физические системы 112
5.5. Возрастание энтропии 115
5.6. Доказательство соотношения детального равновесия 119
5.7. Разложение по собственным функциям 122
5.8. Макроскопическое уравнение 126
5.9. Сопряженное уравнение 131

Глава 6. **Одношаговые процессы** 134

6.1. Определения; процесс Пуассона 134
6.2. Случайное блуждание с непрерывным временем 136
6.3. Общие свойства одношаговых процессов 139
6.4. Примеры линейных одношаговых процессов 143
6.5. Естественные граничные условия 147
6.6. Линейный одношаговый процесс с естественными граничными условиями 149
6.7. Искусственные граничные условия 153
6.8. Искусственные граничные условия и нормальные моды 157
6.9. Нелинейные одношаговые процессы 161
6.10. Проблема первого прохождения 164

Глава 7. **Химические реакции** 169

7.1. Кинематика химических реакций 170
7.2. Динамика химических реакций 174
7.3. Стационарное решение 176
7.4. Открытые системы 179
7.5. Одномолекулярные реакции 181
7.6. Коллективные системы 186
7.7. Составные марковские процессы 190

Глава 8. **Уравнения Фоккера — Планка и Ланжевена** 195

8.1. Введение 195
8.2. Вывод уравнения Фоккера — Планка 199
8.3. Броуновское движение 202
8.4. Рэлеевская частица 205
8.5. Приложение к одношаговым процессам 208
8.6. Линейное уравнение Фоккера — Планка в случае многих переменных 212
8.7. Уравнение Крамерса 215
8.8. Метод Ланжевена 219
8.9. Как применять метод Ланжевена 228

Глава 9. **Разложение основного кинетического уравнения** 233

9.1. Вводные рассуждения 233
9.2. Общая формулировка метода разложения 237
9.3. Природа макроскопического закона 242
9.4. Приближение линейного шума 245
9.5. Разложение основного кинетического уравнения в случае многих переменных 250
9.6. Высшие порядки 254

Глава 10. **Процессы диффузионного типа** 259

10.1. Основное кинетическое уравнение диффузионного типа 259
10.2. Диффузия во внешнем поле 262
10.3. Диффузия в неоднородной среде 265
10.4. Уравнение диффузии в случае многих переменных 268
10.5. Предел нулевых флуктуаций 272

Глава 11. **Неустойчивые системы** 276

11.1. Бистабильные системы 276
11.2. Время перехода 283
11.3. Вероятность расщепления 287
11.4. Проблема Мальтуса — Ферхюльста 290
11.5. Критические флуктуации 293
11.6. Диффузия в потенциале с двумя ямами 296
11.7. Параболическое приближение 300
11.8. Предельные циклы и флуктуации 304
11.9. Лазер как диффузионная система 307

Глава 12. **Флуктуации в непрерывных системах** 312

12.1. Введение 312
12.2. Диффузионный шум 315
12.3. Метод составных моментов 317
12.4. Флуктуации плотности в фазовом пространстве 321
12.5. Флуктуации и уравнение Больцмана 324

Глава 13. **Статистика скачкообразных событий** 331

13.1. Основные формулы и простой пример 331
13.2. Скачкообразные события в нелинейных системах 334
13.3. Фотоэффект: флуктуации числа падающих фотонов 336
13.4. Фотоэффект (продолжение) 339

Глава 14. **Стохастические дифференциальные уравнения** 343

14.1. Определения 344
14.2. Эвристический анализ мультипликативных уравнений 347
14.3. Разложение по кумулянтам 350
14.4. Три критических замечания 356
14.5. Нелинейные стохастические дифференциальные уравнения 361
14.6. Большие времена корреляции 365
14.7. Неоднородное линейное уравнение 371

Ван Кампен Н. Г.

СТОХАСТИЧЕСКИЕ ПРОЦЕССЫ В ФИЗИКЕ И ХИМИИ