

Флуктуационные процессы. Конспект лекций.

О.А. Чичигина

Содержание

- 1** Флуктуации физических параметров — 2
- 2** Дискретные марковские процессы — 8
- 3** Температура и энтропия — 17
- 4** Второе начало термодинамики в обобщенной формулировке — 26
- 5** Пуассоновский процесс — 36
- 6** Случайные импульсные процессы и точечные структуры — 42
- 7** Корреляционные свойства импульсных процессов и точечных структур — 53
- 8** Динамический хаос — 66
- 9** Генераторы случайных чисел — 77
- 10** Математические бильярды — 82
- 11** Случайные блуждания — 89
- 12** Стохастические дифференциальные уравнения (СДУ) с белым шумом и Уравнения Фоккера-Планка (УФП) — 96
- 13** СДУ и УФП с коррелированным шумом — 106
- 14** Современные направления исследования флуктуаций — 111

1 Флуктуации физических параметров

...вероятность есть истина, однако познанная с помощью недостаточных оснований; следовательно, это --- познание, хотя недостаточное, но тем не менее оно не вводит в заблуждение...

И. Кант

Флуктуациями называются отклонения величины от среднего значения, причем чаще всего они носят случайный характер или кажутся нам такими. Флуктуациями так же называют нарушения некоторой закономерности. В термодинамике, например, равновесные внутренние термодинамические параметры представляют собой, как известно, средние значения соответствующих динамических величин, зависящих от координат и импульсов всех частиц системы. Хаотическое движение частиц приводит к отклонению параметров от их средних значений.

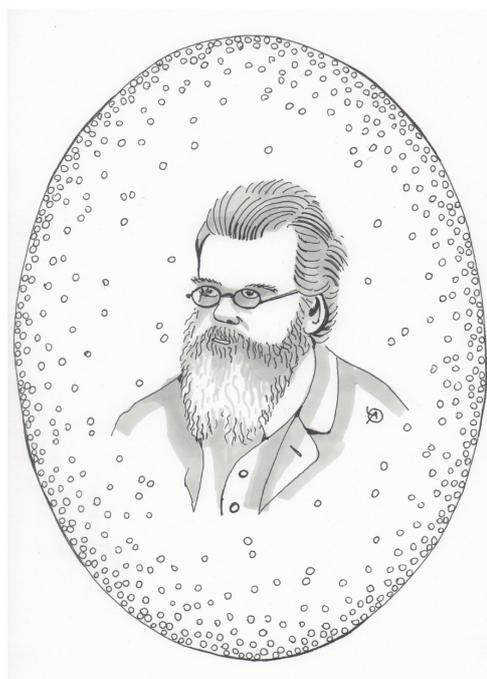


Рис. 1: Найдите распределение Максвелла в Максвелле (слева). Найдите Больцмана в распределении Больцмана (справа).

Для описания случайной величины мы вводим распределение вероятностей, которое изображается гистограммой или графиком плотности вероятности. Больше всего, обычно, помнят распределения Максвелла и Больцмана. Можно заметить, что чем меньше система, тем больше она флуктуирует. На вопросы: подчинялся ли сам Максвелл распределению Максвелла? И подчинялся ли Больцман распределению Больцмана? Можно дать положительный ответ. Просто скорость теплового движе-

ния Максвелла очень мала, потому что велика его масса по сравнению с молекулярными масштабами. Точно так же средняя высота, на которой можно наблюдать Больцмана в поле силы тяжести, мала, опять же, из-за его массы.

Есть распределения, которые используются чаще всего. Рассмотрим два списка физических величин:

1 координата, заряд, ток, потенциал поля, работа, фаза, деформация, гамильтониан

2 температура, число частиц, интенсивность, объем, амплитуда, длина свободного пробега

Эти списки отличаются тем, что в первом собраны величины, которые могут быть отрицательными, а во втором — нет. Для первых чаще всего выбирают Гауссовское распределение, а для вторых — Гамма-распределение: Гамма-распределение выглядит следующим образом

$$w(x) = \frac{x^{n-1}}{\Gamma(n)\alpha^n} \exp\left(-\frac{x}{\alpha}\right) \theta(x), \quad (1)$$

где $\Gamma(n) = (n-1)!$ — гамма-функция. Это распределение для суммы из n независимых случайных величин, распределенных с экспоненциальным распределением.

Вспомним основные характеристики случайных величин на примере нескольких задач связанных с гамма-распределением.

1.1 Характеристическая функция гамма-распределения с показателем формы n и показателем масштаба α

Характеристическая функция определяется как Фурье-образ плотности вероятности

$$C(u) = \langle e^{iux} \rangle = \frac{1}{\Gamma(n)\alpha^n} \int_0^\infty x^{n-1} \exp\left(-x\left(\frac{1}{\alpha} - iu\right)\right) dx.$$

Заменяя переменную $y = x\left(\frac{1}{\alpha} - iu\right)$, получаем

$$C(u) = \frac{1}{\Gamma(n)\alpha^n \left(\frac{1}{\alpha} - iu\right)^n} \int_0^\infty y^{n-1} \exp(-y) dy.$$

В получившемся интеграле можно узнать интегральное представление гамма-функции или начать интегрировать по частям. При каждом шаге интегрирования будет появляться умножение на $n - 1$, потом на $n - 2$,

и так далее. Окончательно получаем

$$C(u) = \frac{1}{(1 - iu\alpha)^n}. \quad (2)$$

Пользуясь известной формулой

$$m_r = i^{-r} \frac{d^r}{du^r} C(u) \Big|_{u=0},$$

можем найти моменты

$$m_1 = n\alpha, \quad m_2 = n(n+1)\alpha^2, \quad m_3 = n(n+1)(n+2)\alpha^3. \quad (3)$$

Характеристическая функция (2) записывается, как характеристическая функция экспоненциального распределения в n -ой степени.

$$C(u) = \prod_{m=1}^n C(u_m) = C(u_m)^n.$$

Характеристическую функцию экспоненциального распределения легко найти, учитывая, что экспоненциальное распределение является частным случаем гамма-распределения при $n = 1$, т.е., $C(u_m) = (1 - iu\alpha)^{-1}$. Это означает, что гамма-распределение (5) описывает сумму n независимых экспоненциально распределенных случайных величин с матожиданием α , то есть является бесконечно-делимым распределением. Например, это может быть интервал времени между n независимыми событиями. Кроме того, матожидание $\langle x \rangle$ и дисперсия σ_x^2 могут быть сразу получены как $\langle x \rangle = n\langle x_m \rangle = n\alpha$ и $\sigma_x^2 = n\sigma_{x_m}^2 = n\alpha^2$.

1.2 Кумулянты гамма-распределения и условия предельного перехода от гамма-распределения к гауссовскому

По определению кумулянтами называются коэффициенты в разложении логарифма характеристической функции случайной величины в ряд Маклорена. Они определяются следующим образом

$$\kappa_m = i^{-m} \frac{d^m}{du^m} \ln C(u) \Big|_{u=0}$$

Характеристическую функцию гамма-распределения (2) подставляем и преобразовываем с учетом того, что производная от константы зануляется,

$$\kappa_m = -ni^{-m} \frac{d^m}{du^m} \ln(1 - iu\alpha) \Big|_{u=0} = -ni^{-m} \frac{d^m}{du^m} \ln(u + i/\alpha) \Big|_{u=0}.$$

Для первых четырех кумулянтов получаем

$$\begin{aligned}\kappa_1 = m_1 &= -ni^{-1} \left. \frac{1}{u - i/\alpha} \right|_{u=0} = n\alpha, \\ \kappa_2 = \sigma^2 &= -ni^{-2} \left. \frac{d}{du} \frac{1}{u - i/\alpha} \right|_{u=0} = -n \left. \frac{1}{(u - i/\alpha)^2} \right|_{u=0} = n\alpha^2,\end{aligned}$$

это дисперсия, что совпадает с (3).

$$\begin{aligned}\kappa_3 &= -ni^{-3} \left. \frac{d}{du} \frac{1}{(u - i/\alpha)^2} \right|_{u=0} = 2n\alpha^3, \\ \kappa_4 &= -2ni^{-4} \left. \frac{d}{du} \frac{1}{(u - i/\alpha)^3} \right|_{u=0} = 6n\alpha^4.\end{aligned}$$

Обобщая, получаем выражение для m -го кумулянта $\kappa_m = (m - 1)! n\alpha^m$. Мы видим, что коэффициент асимметрии

$$\frac{\kappa_3}{\sigma^3} = \frac{2}{\sqrt{n}},$$

описывающий, насколько левая часть распределения круче правой, стремится к нулю при стремлении коэффициента формы n к бесконечности. Коэффициент эксцесса — тоже стремится к нулю при $n \rightarrow \infty$.

$$\frac{\kappa_4}{\sigma^4} = \frac{6}{n},$$

следовательно, гамма-распределение переходит в распределение Гаусса при $n \rightarrow \infty$. Поскольку дисперсия должна оставаться конечной величиной, параметр масштаба стремится к нулю: $\alpha \rightarrow 0$.

1.3 Переход от гамма-распределения к Гауссовскому, когда матожидание много больше стандартного отклонения

Гамма-распределение описывает положительные случайные величины. Превращение этого распределения в нормальное возможно только в том случае, когда график плотности распределения вероятностей сдвинут далеко от оси ординат, то есть вероятностью того, что случайная величина может принимать малые значения, можно пренебречь. Это выполняется в случае, когда матожидание величины $\langle t \rangle$ много больше стандартного отклонения σ . Для выполнения предельного перехода рассмотрим флуктуацию ξ случайной величины t , распределенной с гамма-распределением, $\xi = t - \langle t \rangle = t - nT$. Плотность распределения вероятностей для этой

величины определяется по формуле $w_n(\xi) = w_n(t)|\partial t/\partial \xi|$ и выглядит следующим образом

$$w_n(\xi) = \frac{(\xi + Tn)^{n-1}}{(n-1)!T^n} \exp\left(-\frac{\xi + Tn}{T}\right). \quad (4)$$

Случайная величина ξ имеет нулевое среднее значение и характеризуется дисперсией $nT^2 = \sigma_t^2$. Эта дисперсия должна оставаться конечной величиной при предельном переходе к большим значениям $n \rightarrow \infty$. Это означает, что условный период должен быть мал $T \rightarrow 0$, и, соответственно, $Tn = \sigma_t^2/T \rightarrow \infty$. Плотность распределения вероятностей (4) нормирована при любом значении n , в том числе и при $n \rightarrow \infty$. Значит, можно внести в константу нормировки $C = ((n-1)!T)^{-1} \exp(-n)$ все, что не зависит от ξ , а именно $w_n(\xi) = Cf_n(\xi)$. Теперь можно вычислить предел ненормированной плотности распределения $f_n(\xi)$, а потом нормировать получившееся распределение. Получаем

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty, T \rightarrow 0} f_n(\xi) &= \lim_{n \rightarrow \infty, T \rightarrow 0} \left(\frac{\xi}{Tn} + 1\right)^{n-1} \exp\left(-\frac{\xi}{T}\right) = \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty, Tn \rightarrow \infty} \left(\frac{\xi}{Tn} + 1\right)^n \left(\exp\left(-\frac{\xi}{Tn}\right)\right)^n = \end{aligned}$$

разложим экспоненту в ряд до квадратичного слагаемого

$$\begin{aligned} &= \lim_{n \rightarrow \infty, Tn \rightarrow \infty} \left(\frac{\xi}{Tn} + 1\right)^n \left(1 - \frac{\xi}{Tn} + \frac{\xi^2}{2T^2n^2}\right)^n = \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} \left(1 - \frac{\xi^2}{(2\sigma_t^2)n}\right)^n = \exp\left(-\frac{\xi^2}{2\sigma_t^2}\right), \end{aligned}$$

здесь мы применили второй замечательный предел. Далее вычисляем константу нормировки и получаем

$$\lim_{n \rightarrow \infty, T \rightarrow 0} w_n(\xi) \equiv w_n^G(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_t^2}} \exp\left(-\frac{\xi^2}{2\sigma_t^2}\right).$$

Мы получили распределение Гаусса с такой же дисперсией, как и исходное распределение, для флуктуации ξ . Предельное Гауссовское распределение будет, соответственно,

$$w_n^G(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi T^2 n}} \exp\left(-\frac{(t - nT)^2}{2T^2 n}\right) \quad (5)$$

1.4 Условия предельного перехода от гамма-распределения к детерминированному значению величины, описываемому дельта-функцией. Характеристическая функция детерминированного процесса

При переходе к неслучайной величине матожидание должно оставаться постоянным, а дисперсия должна стремиться к нулю. Получаем $n \rightarrow \infty$

и $\alpha \rightarrow 0$. В этом случае экспонента резко убывает, а предэкспоненциальный множитель резко возрастает. Распределение вытягивается ввысь. Данное выражение можно рассматривать как одно из предельных представлений δ -функции. Перепишем характеристическую функцию гамма-распределения (2) через матожидание (3), чтобы сделать предельный переход с помощью второго замечательного предела. Получаем

$$C(u) = \frac{1}{\left(1 - \frac{i u m_1}{n}\right)^n} \rightarrow e^{i u m_1}.$$

Такой вид имеет характеристическая функция любой детерминированной величины. Это можно проверить, сделав Фурье-преобразование δ -функции

$$\int_0^{\infty} \delta(x - m_1) e^{i u x} dx = e^{i u m_1}.$$

Такой же вид характеристической функции детерминированного процесса можно получить из характеристической функции Гауссовского распределения, приравняв нулю дисперсию.

2 Дискретные марковские процессы

-- Достаточно будет стереть у обоих память, -- сказал он. -- Это самое лучшее, так мы собьем их со следа. Убив их, мы дадим ясно понять, что были здесь.
-- Ты у нас главный, -- с огромным облегчением произнес Рон. -- Правда, заклинание Забвения я еще никогда не использовал.

Дж.К. Роулинг

Марковскими называются процессы, в которых каждое следующее значение случайной величины зависит только от значения в настоящий момент и не зависит от предыстории. Система забывает всю предысторию.

2.1 Марковские матрицы

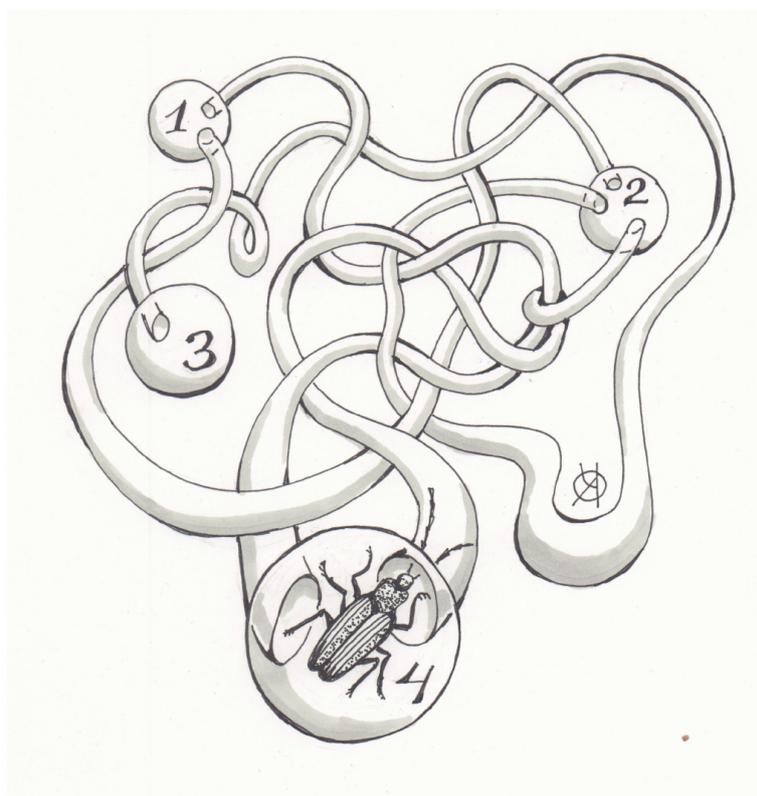


Рис. 2: Модель процесса марковских переходов между четырьмя состояниями системы

На рисунке представлен лабиринт для экспериментов над жуками. Изначально голодный жук находится в одной из четырех круглых камер. На каждом временном шаге жук вбегает в один из выходящих из камеры коридоров и пробегает его до конца. Номер камеры будет случайной величиной. Выбор жуком коридора совершенно произвольный, то есть

все возможные выходы из камеры равновероятны, но куда-то он точно побежит. Жук почти не обучается, не запоминает, откуда он пришел, поэтому его поведение можно описать как марковский процесс. Для аналогичных экспериментов с крысами эта модель не годится, потому что они умные и памятьливые. Нарисуем простую схему (граф) возможных переходов с прямыми стрелками и выберем правильную матрицу $\|P_{jk}\|$ вероятностей переходов из k -го состояния в j -е. Видим, что у всех матриц сумма столбцов равна 1, поскольку куда-то жук побежит непременно. Например, из первой камеры есть два пути: во вторую и в четвертую с вероятностями $1/2$, вероятность перехода в третью или в себя равны 0. Этому соответствует пятая матрица.

$$\begin{aligned}
 & 1) \begin{pmatrix} 3/4 & 1/3 & 0 & 0 \\ 1/4 & 1/3 & 0 & 1/3 \\ 0 & 0 & 1/2 & 1/3 \\ 0 & 1/3 & 1/2 & 1/3 \end{pmatrix} \quad 2) \begin{pmatrix} 1/3 & 1/4 & 0 & 1/3 \\ 1/3 & 1/4 & 1/2 & 1/3 \\ 0 & 1/4 & 1/2 & 0 \\ 1/3 & 1/4 & 0 & 1/3 \end{pmatrix} \quad 3) \begin{pmatrix} 5/6 & 1/4 & 0 & 0 \\ 1/6 & 1/2 & 0 & 1/4 \\ 0 & 0 & 1/2 & 1/4 \\ 0 & 1/4 & 1/2 & 1/2 \end{pmatrix} \\
 & 4) \begin{pmatrix} 2/3 & 1/2 & 0 & 0 \\ 1/3 & 0 & 0 & 1/2 \\ 0 & 0 & 0 & 1/2 \\ 0 & 1/2 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad 5) \begin{pmatrix} 0 & 1/3 & 0 & 1/2 \\ 1/2 & 0 & 1 & 1/2 \\ 0 & 1/3 & 0 & 0 \\ 1/2 & 1/3 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad 6) \begin{pmatrix} 1/2 & 1/6 & 0 & 1/4 \\ 1/4 & 1/2 & 1/2 & 1/4 \\ 0 & 1/6 & 1/2 & 0 \\ 1/4 & 1/6 & 0 & 1/2 \end{pmatrix}.
 \end{aligned}$$

Выберите правильную матрицу переходов для эксперимента над менее активным сытым жуком, в котором он с равными вероятностями может пойти по любому доступному из данной камеры коридору или остаться в ней.

Выберите правильную матрицу переходов для эксперимента над сонным жуком, в котором он с равными вероятностями может пойти куда-то или остаться в камере, а если пойдет, то все доступные из данной камеры коридоры равновероятны.

Для оставшихся невыбранных трех матриц восстановите структуру лабиринта и определите, к какому из жуков (голодный, сытый и сонный) каждая из них относится. Нарисуйте этот лабиринт.

2.2 Одношаговые процессы

Марковскими одношаговыми процессами называются процессы, в которых случайная величина может за шаг увеличиваться или уменьшаться только на единицу. Эти переходы описываются соответствующими коэффициентами: g_n — вероятность перехода вперед за единицу времени из n в $n + 1$, r_n — вероятность перехода назад за единицу времени из n в $n - 1$. Матрица марковских переходов будет содержать нули везде, кроме основной диагонали и двух соседних с ней.

Основное кинетическое уравнение тогда выглядит так

$$\dot{p}_n = r_{n+1}p_{n+1} + g_{n-1}p_{n-1} - (r_n + g_n)p_n, \quad (6)$$

здесь первые два слагаемых описывают все способы прийти в n -ое состояние, а остальные — уйти из него.

2.2.1 Свойства оператора шага и основное кинетическое уравнение

Для описания одношаговых процессов удобно использовать оператор шага, который следующим образом действует на произвольную функцию от целого аргумента:

$$\mathbf{E}f(n) = f(n+1), \quad \mathbf{E}^{-1}f(n) = f(n-1).$$

Этот оператор позволяет получать в общем виде соотношения для моментов и другие полезные выражения. Докажем свойство этого оператора

$$\sum_{n=0}^{N-1} \phi(n)\mathbf{E}f(n) = \sum_{n=1}^N f(n)\mathbf{E}^{-1}\phi(n). \quad (7)$$

Сдвинем индекс суммирования на единицу $m = n + 1$

$$\sum_{m=1}^N \phi(m-1)\mathbf{E}f(m-1) = \sum_{m=1}^N \phi(m-1)f(m) = \sum_{m=1}^N f(m)\mathbf{E}^{-1}\phi(m).$$

Уравнение (6) может быть записано через оператор шага

$$\dot{p}_n = (\mathbf{E} - 1)r_n p_n + (\mathbf{E}^{-1} - 1)g_n p_n. \quad (8)$$

2.2.2 Уравнение для первого момента

Уравнение для первого момента получим, домножая это уравнение на n и суммируя по всем значениям n

$$\frac{d}{dt}\langle n \rangle = \sum \dot{p}_n n = \sum (\mathbf{E} - 1)r_n p_n n + \sum (\mathbf{E}^{-1} - 1)g_n p_n n.$$

Мы не знаем, как действует оператор шага на коэффициенты r_n , g_n и вероятности p_n , поэтому перепишем, пользуясь доказанным ранее свойством оператора шага (7), так, чтобы он действовал только на n

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\langle n \rangle &= \sum r_n p_n (\mathbf{E}^{-1} - 1)n + \sum g_n p_n (\mathbf{E} - 1)n = \\ &= \sum r_n p_n (n - 1 - n) + \sum g_n p_n (n + 1 - n) = -\sum r_n p_n + \sum g_n p_n. \end{aligned}$$

Получаем в итоге уравнение для первого момента

$$\frac{d}{dt}\langle n \rangle = -\langle r_n \rangle + \langle g_n \rangle. \quad (9)$$

2.2.3 Уравнение для второго момента

Уравнение для второго момента получим, домножая это уравнение на n^2 и суммируя по всем значениям n

$$\frac{d}{dt}\langle n^2 \rangle = \sum \dot{p}_n n^2 = \sum (\mathbf{E} - 1)r_n p_n n^2 + \sum (\mathbf{E}^{-1} - 1)g_n p_n n^2.$$

Опять воспользуемся свойством оператора шага (7)

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\langle n^2 \rangle &= \sum r_n p_n (\mathbf{E}^{-1} - 1)n^2 + \sum g_n p_n (\mathbf{E} - 1)n^2 = \sum r_n p_n ((n-1)^2 - n^2) \\ &+ \sum g_n p_n ((n+1)^2 - n^2) = \sum r_n p_n (-2n+1) + \sum g_n p_n (2n+1). \end{aligned}$$

Получаем

$$\frac{d}{dt}\langle n^2 \rangle = 2\langle n(g_n - r_n) \rangle + \langle r_n \rangle + \langle g_n \rangle. \quad (10)$$

2.2.4 Стационарное состояние

Стационарное состояние определяется условием $\dot{p}_n = 0$. Подставим единицу в виде $1 = \mathbf{E}^{-1}\mathbf{E}$ в (8)

$$0 = (\mathbf{E} - 1)r_n p_n^s + (\mathbf{E}^{-1} - \mathbf{E}^{-1}\mathbf{E})g_n p_n^s = (\mathbf{E} - 1)[r_n p_n^s + \mathbf{E}^{-1}g_n p_n^s].$$

Из условия равенства нулю выражения во второй скобке получаем

$$r_n p_n^s = g_{n-1} p_{n-1}^s. \quad (11)$$

Суммарный поток вероятности равен нулю. Например, для двухуровневой системы, находящейся в равновесном состоянии получаем, что две вероятности переходов относятся так же, как вероятности обнаружить частицу в каждом из двух состояний. Чем больше вероятность уйти из данного состояния, тем меньше вероятность обнаружить там частицу.

2.3 Примеры дискретных процессов

Для следующих примеров дискретных процессов попробуем понять, является ли процесс марковским? Если да, является ли одношаговым? Как может выглядеть матрица переходов?

2.3.1 Сумма очков на двух игральные костях

Пусть случайной величиной от 2 до 12 является сумма очков на двух игральные костях, если за шаг мы перебрасываем только одну случайно выбранную кость. Будет ли этот процесс марковским? Предположим, сейчас случайная величина равна 6. Вероятность следующего значения

зависит от того, как эта 6 получилась 3+3 или 1+5. Но это зависит от того, что было на предыдущем шаге. Следовательно, процесс не является марковским.

2.3.2 Число молекул, испарившихся с поверхности жидкости

Пусть случайной величиной является число молекул, испарившихся с поверхности жидкости за некоторый интервал времени (шаг). Если рассмотреть малый шаг и малый участок поверхности, то процесс не будет марковским. Притяжение молекул преодолевают только самые быстрые молекулы. Следовательно, поверхность, с которой только что испарилась молекула, охлаждается. Испарение следующей молекулы в ближайшее время менее вероятно. Эта корреляция сохраняется недолго и на малом участке поверхности. Поэтому, если время шага достаточно велико или площадь поверхности достаточно большая, то процесс будет марковским. Видим, что в вопросе марковости многое определяется масштабами задачи.



Рис. 3: Испарение молекул с поверхности жидкости приводит к ее охлаждению, потому что улетают самые быстрые, способные преодолеть притяжение, молекулы. Это делает процесс испарения немарковским на малых временах.

2.3.3 Спонтанный распад

Примером процесса, являющегося марковским на любых масштабах является спонтанный распад радиоактивных ядер. На основе этого процесса происходит генерация самых дорогих элитных сортов случайных чисел. Он характеризуется скоростью распада γ . Число нераспавшихся ядер n может только убывать, поэтому $g_n = 0$ и $r_n = n\gamma$. Это дает экспоненциальный закон распада. Можно показать, что зависимость дисперсии от времени будет немонотонной. Сначала она возрастает, потом, когда нераспавшихся ядер становится мало, она убывает. Если мы захотим

использовать модель одношагового процесса, то время шага нужно выбрать достаточно малым, чтобы можно было пренебречь вероятностью распада двух ядер за это время.

2.3.4 Пуассоновский процесс

Этот процесс описывает количество наступивших независимых случайных событий, происходящих с постоянной интенсивностью. Все физические явления, характеризующиеся пуассоновским процессом, тоже являются марковскими. Будь то число невзаимодействующих частиц, зарегистрированных счетчиком, или число мух, севших на корову. Опять же можно добиться того, чтобы процесс был одношаговым, выбрав время шага меньше среднего интервала между импульсами. Здесь, наоборот, число пришедших импульсов не убывает, поэтому $g_n = \gamma$, $r_n = 0$ и для среднего из (9) получается линейный рост со временем $\langle n \rangle = \gamma t$. Уравнение баланса выглядит следующим образом

$$\dot{p}_n = \gamma p_{n-1} - \gamma p_n. \quad (12)$$

2.3.5 Дискретное блуждание

Частица блуждает по одномерной бесконечной дискретной решетке, с номерами ячеек n и постоянными вероятностями прыжков влево α и вправо β .

$$-\infty \leq n \leq \infty, \quad g_n = \beta, \quad r_n = \alpha.$$

Изменение со временем среднего номера ячейки можно описать как дрейф, скорость которого определяется из (9) разницей коэффициентов $\langle n \rangle = (-\alpha + \beta)t$. Дисперсия будет линейно расти со временем $\sigma_n^2 = (\alpha + \beta)t$, согласно из (10). Случай $\alpha = \beta$ описывает движение шарика в доске Гальтона. Пуассоновский процесс — это частный случай блуждания с нулевыми скачками влево $\alpha = 0$. Основное кинетическое уравнение запишется в виде

$$\dot{p}_n = \alpha(p_{n+1} - p_n) - \beta(p_n - p_{n-1}). \quad (13)$$

2.3.6 Число соударений броуновской частицы с частицами среды

Во всех рассмотренных случаях переходы зависели от того, в каком состоянии находится в данный момент система. Можно привести пример совсем уж марковского процесса, в котором нет даже такой зависимости. Рассмотрим такую дискретную величину, как число соударений броуновской частицы с частицами среды за некоторый интервал времени. На

каждом временном шаге значение этой величины не зависит от предыдущего и описывается Пуассоновским распределением $P(j)$. Марковская матрица будет содержать одинаковые столбцы нормированные на единицу $P_{jk} = P(j)$.

2.3.7 Задача Улама-Ферми

Частица совершает одномерное движение между двумя стенками, соударяясь с ними по закону абсолютно упругого удара, причем, одна стенка неподвижна, а вторая движется периодически со скоростью $\pm u_0/2$, половину периода в одну сторону, половину — в другую. Тогда при лобовом столкновении скорость частицы увеличивается на u_0 , а при догоняющем ударе — уменьшается на u_0 . Это можно получить из законов сохранения, устремив массу стенки в бесконечность или из формулы (41) при $\phi_n = 0$.

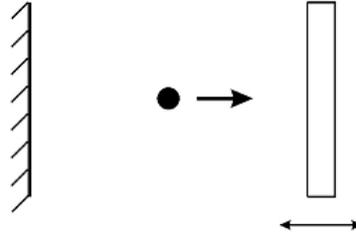


Рис. 4: Задача Улама

Если стенки далеко, то за время полета частицы τ проходит много циклов колебания стенки, и фазу скорости стенки в момент очередного столкновения можно считать случайной. Та же логика действует, когда раскручивают волчок или бутылочку, чтобы выбрать случайное направление. Процесс изменения скорости можно представить как одношаговый дискретный марковский процесс. Пусть начальная скорость частицы $v_0 = u_0/2$. Тогда p_n — вероятность того, что скорость частицы $v_n = v_0 + u_0 n$. Это зависит от того, сколько было ускоряющих и замедляющих ударов. Вероятность столкновения в единицу времени с приближающейся стенкой больше, чем с удаляющейся, поскольку она определяется относительной скоростью частицы относительно стенки $v_n + u_0 = u_0(n+1)$, тогда как $v_n - u_0 = u_0 n$. Коэффициенты переходов будут равны $g_n = \tau^{-1}(n+1)$ и $r_n = \tau^{-1}n$. Основное кинетическое уравнение запишется в виде

$$\dot{p}_n = \tau^{-1}(n+1)p_{n+1} + \tau^{-1}np_{n-1} - \tau^{-1}np_n - \tau^{-1}(n+1)p_n. \quad (14)$$

Для асимптотики моментов получаем из (9) и (10)

$$\langle n \rangle = \tau^{-1}t, \quad \sigma_n^2 = \tau^{-2}t^2 + \tau^{-1}t \approx \tau^{-2}t^2.$$

Поскольку частица ускоряется, выбранная модель будет работать только на некотором временном интервале, пока можно пренебречь изменением времени между соударениями.

При хаотическом движении стенки без смещения ускорения не будет, поскольку в этом случае вероятности столкновения с приближающейся и уходящей стенкой одинаковы $g_n = r_n = \tau^{-1}n$.

Кинетическое уравнение запишется тогда в виде $\dot{p}_n = \alpha(n+1)p_{n+1} + \alpha(n-1)p_{n-1} - \alpha n p_n - \alpha n p_n$, оно соответствует отсутствию ускорения.

2.3.8 Число частиц в выделенном объеме

Рассмотрим идеальный газ в некотором объеме, где выделен еще некоторый объем. Всего N точечных частиц, частицы могут влетать в выделенный объем V и вылетать из него. На рисунке тот объем, который нас интересует, показан в виде амебы, потому что эта задача важна для задач микробиологии. От того, сколько молекул попало в некоторый орган или клетку, может многое зависеть. Остальной объем показан в виде сосуда с выгнутыми внутрь стенками, чтобы движение в нем было хаотическим даже для одной частицы. Пренебрегая возможностью входа

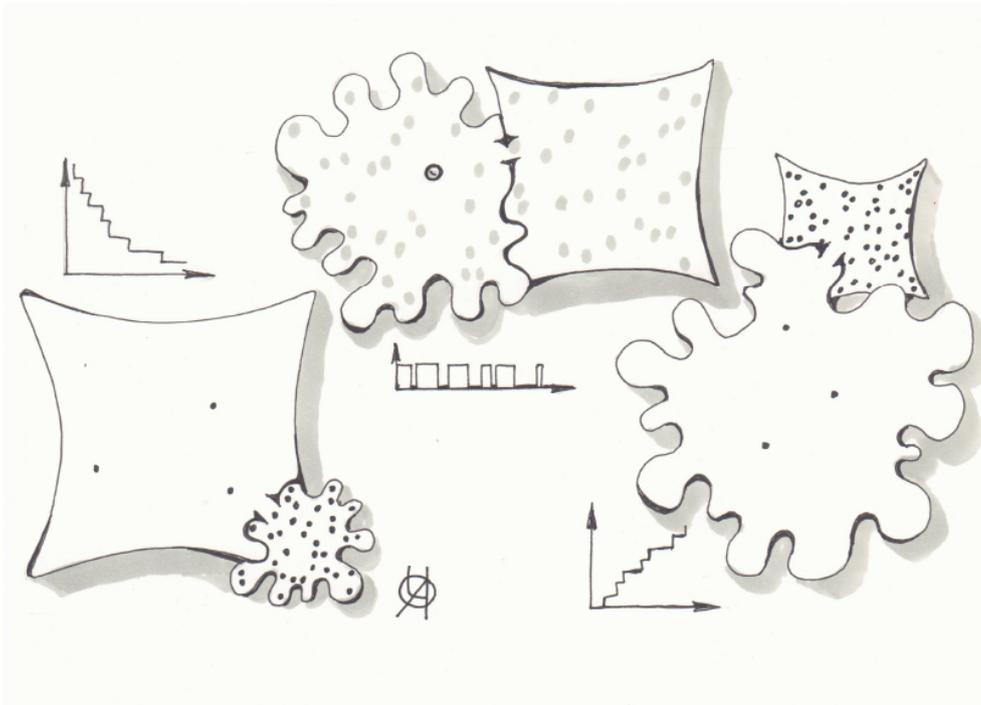


Рис. 5: Число частиц в выделенном объеме при различных соотношениях объемов и начальных условиях. Модели спонтанного распада, дихотомического процесса и пуассоновского процесса

или выхода двух частиц одновременно, запишем уравнение для числа частиц в выделенном объеме n , если в начальный момент их там было n_0 . Вероятность в единицу времени для одной из частиц, находящихся

вне объема V , влететь в этот объем β , а вероятность для одной из частиц в объеме вылететь α , эти коэффициенты определяются объемами сосудов, площадью отверстия s и проекциями скоростей частиц перпендикулярными отверстию $\langle v_{\perp} \rangle$, например, $\alpha = S \langle v_{\perp} \rangle / V$. Получаем

$$0 \leq n \leq N, \quad g_n = (N - n)\beta, \quad r_n = n\alpha.$$

Тогда изменение со временем среднего количества частиц в этом объеме согласно (9)

$$\langle n \rangle = \frac{\beta N}{\alpha + \beta} + \left(n_0 - \frac{\beta N}{\alpha + \beta} \right) e^{-(\alpha + \beta)t}. \quad (15)$$

Предельные случаи этой модели могут описывать другие процессы.

1. Спонтанный распад. В начальный момент почти все частицы внутри малого выделенного объема. Возможностью того, что туда могут влетать частицы из большого объема, можно пренебречь $\beta \approx 0$ до некоторого момента времени

$$n_0 \gg \frac{\beta N}{\alpha + \beta}.$$

Уравнение (15) дает экспоненциальное убывание среднего числа частиц.

2. Дихотомический процесс. Есть всего одна частица $N = 1$, в начальный момент она внутри выделенного объема $n_0 = 1$, причем этот объем равен объему остальной части сосуда $\alpha = \beta$

$$\langle n \rangle = \frac{1}{2} + \left(\frac{1}{2} \right) e^{-2\alpha t}. \quad (16)$$

3. Пуассоновский процесс. В начальный момент в выделенном большом объеме нет частиц $n_0 = 0$. Возможностью того, что оттуда могут вылетать частицы в малый $\beta \gg \alpha$, заполненный частицами $N \gg 1$ объем можно пренебречь до некоторого момента времени $\alpha t \ll 1$. Разлагая в (15) экспоненту в ряд, получаем линейный рост для среднего числа частиц.

3 Температура и энтропия

Холод большой.

Зима здорова.

Но блузы

прилипли к потненьким.

В. Маяковский

3.1 Основные понятия статфизики

Хорошо известное понятие температуры не имеет определения, которое подходило бы для всех случаев, когда это понятие используется. Например, рассмотрим банку с песком, на дно которой мы положили пингпон-говый шарик. Будем мелко трясти эту банку, как если бы у нас был алкогольный тремор. При этом шарик окажется на поверхности. Он в самом буквальном смысле всплыл. Наши случайные сотрясения банки заставили песчинки двигаться хаотически, как бы участвовать в макроскопическом тепловом движении. Песок, который сначала проявлял свойства твердого тела, стал жидкостью. Нагрелся и растаял. Чаще всего, конеч-

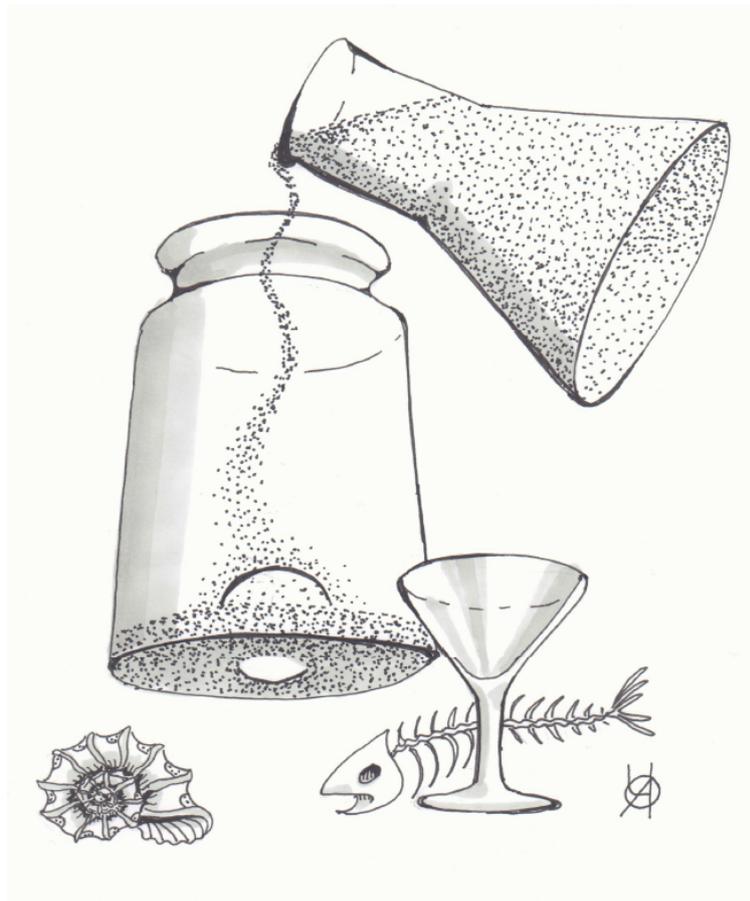


Рис. 6: Легкий шарик "всплывает" в песке при сотрясении банки

но, температура описывает хаотическое движение молекул. Различная плотность и подвижность молекул в разных агрегатных состояниях приводят к тому, что там будут различные типы теплового движения.

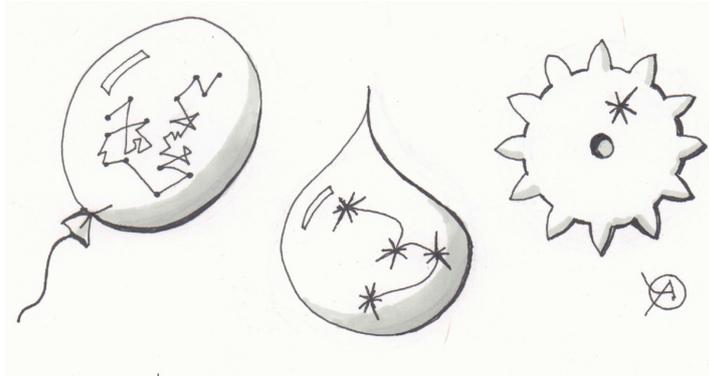


Рис. 7: Траектории теплового движения в газе, жидкости и твердом теле

С мая 1919 г. один Кельвин определяется как мера кинетической энергии хаотического движения молекул, за которыми теперь можно наблюдать непосредственно. Вспомним основные формулы и обозначения статистики.

Термодинамические параметры разделяют на внешние и внутренние. Внешними называют параметры $a = (a_1, a_2, \dots, a_r)$, определяемые состоянием не входящих в систему внешних тел, причем температуру часто отделяют $a_1 = T$; $a = (T, a')$. Величины B_i , определяемые движением и распределением в пространстве входящих в систему частиц, называют внутренними параметрами. Внутренние параметры разделяют на интенсивные, не зависящие от массы или числа частиц в системе, и экстенсивные (аддитивные), пропорциональные массе или числу частиц. Примерами термодинамических параметров являются объем системы, давление, концентрация, поляризация, напряженность магнитного поля и т.д.

При постоянстве внешних термодинамических параметров термодинамическая система приходит в состояние термодинамического равновесия, характеризуемое определенными значениями внутренних термодинамических параметров. Тогда $w(z, a)$ — равновесное распределение вероятностей, оно определяется a и каноническими переменными z . Равновесным называют процесс, при котором термодинамическая система в каждый момент времени находится в состоянии термодинамического равновесия. Этот процесс должен проводиться достаточно медленно, чтобы при изменении внешних термодинамических параметров система успевала прийти в новое равновесное состояние.

Первый закон термодинамики

$$dQ = dA + dU,$$

где $U(a) = \langle H \rangle = \int H(z, a') w(z, a) dz$ — внутренняя энергия (усредненный гамильтониан). Отсюда формальные определения работы и количества тепла

$$dU(a) = \int w(z, a) \delta H(z, a') dz + \int H(z, a') \delta w(z, a) dz.$$

А именно, при взаимодействии термодинамической системы с окружающими телами возможны два способа обмена энергией. Первый способ, связанный с изменением внешних параметров, называется работой. $dA = \sum_{i=2}^r \langle B_i \rangle da_i$, где $B_i = -\frac{\partial H}{\partial a_i}$ — внутренний термодинамический параметр, сопряженный внешнему a_i . Второй способ передачи энергии системе — без изменения внешних термодинамических параметров называют теплопередачей. Энергия, передаваемая от одного тела к другому в этом процессе, называется количеством теплоты $dQ = \int H(z, a') \delta w(z, a) dz$.

3.2 Энтропия

Определим энтропию для равновесных процессов через ее дифференциал:

$$dS = \frac{dQ}{T}.$$

Дифференциал энтропии является полным дифференциалом, то есть не зависит от пути перехода системы из начального в конечное состояние, а сама энтропия S является при этом функцией состояния. Статистическое определение энтропии:

$$S = -k \int \ln(w(z, a)) w(z, a) dz + S_0. \quad (17)$$

Энтропия — аддитивная величина. Энтропия двух подсистем равна сумме энтропий. Температура, например, — неаддитивная величина. Энтропия характеризует меру неопределенности в системе, количественно выражает степень упорядоченности или хаоса в ней. Второй закон термодинамики

$$dS \geq \frac{dQ}{T}, \quad (18)$$

причем равенство соответствует равновесному, то есть медленному процессу.

3.2.1 Изменение энтропии при равновесном и неравновесном процессах

Например, рассмотрим два одинаковых теплоизолированных сосуда с поршнями. В левом поршень опускается медленно, а в правом резко. После колебаний в обоих сосудах установится равновесное состояние. В каком из них поршень окажется на большей высоте?

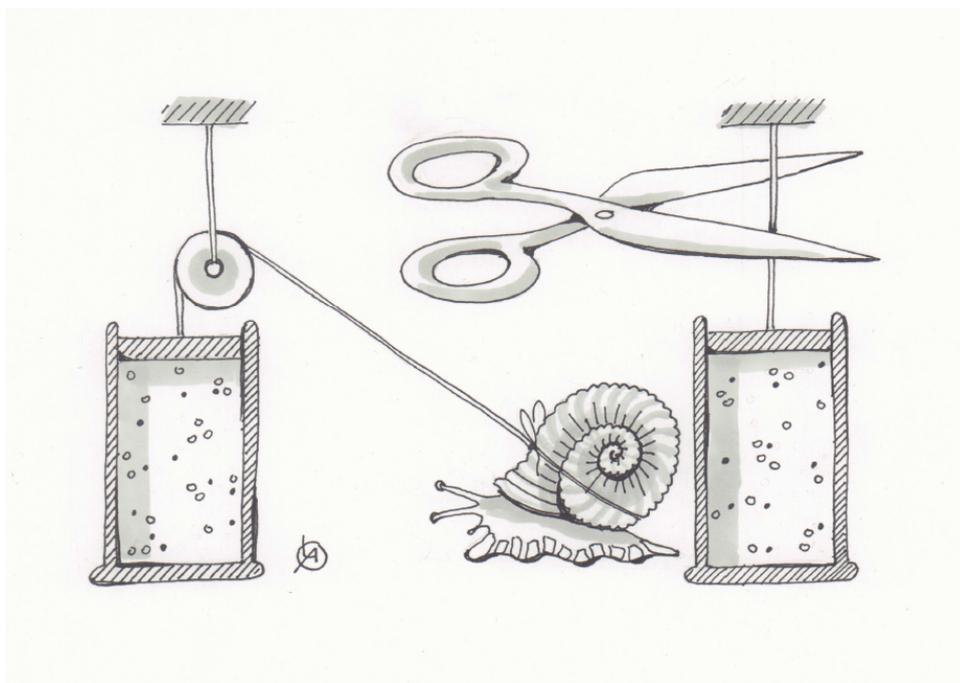


Рис. 8: Сравнение быстрого и медленного процессов

Решим задачу двумя способами.

1. С точки зрения энтропии. В правом сосуде процесс неравновесный, следовательно энтропия обязательно возрастает. В итоге она окажется больше, чем в левом сосуде, где процесс равновесный. Большей энтропии идеального газа соответствуют большие температура и объем $S = C_V \ln T + R\nu \ln V + S_0$. Они могут возрастать только вместе при фиксированном давлении, согласно уравнению идеального газа. Получаем, что в правом сосуде поршень окажется выше.

2. На микроуровне. При соударении молекулы газа с надвигающимся поршнем она ускоряется, как мячик ускоряется теннисной ракеткой. При столкновении с удаляющимся поршнем молекула замедляется. Правый поршень совершит несколько быстрых колебаний, пока не установится в равновесном положении. Причем, когда он опускается, концентрация молекул вблизи поршня будет больше, чем у дна. Он сметает на своем пути много молекул и ускоряет их. Потом, когда он движется обратно, он уходит от молекул и лишь малое их количество столкнется с удаляющимся поршнем и замедлится. Таким образом, эффект ускорения будет

гораздо больше замедления. Разогретый таким образом газ поднимет, в итоге, поршень на большую высоту, чем слева, где таких неравновесных колебаний не было.

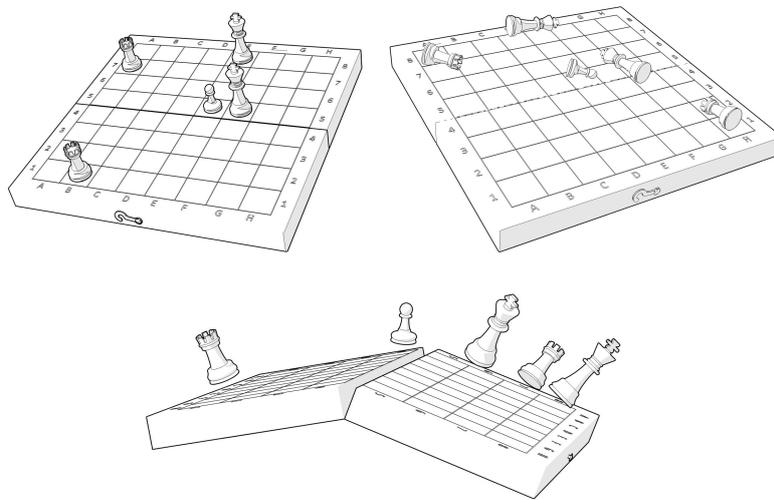


Рис. 9: Метастабильное, стабильное и нестабильное состояния шахмат

Это принципиальная разница в изменении энтропии при быстрых и медленных процессах используется для хранения продуктов. В живых тканях многие системы находятся в так называемом метастабильном состоянии, то есть в локальном минимуме энергии, из которого возможен переход в глобальный минимум, соответствующий стабильному состоянию. Вообще сложные структуры — это, как правило, метастабильные состояния. Например, шахматный гамбит. Стационарному состоянию соответствуют лежащие фигуры, а нестационарному — подброшенные ударом по доске.

Чем больше температура, тем больше систем в метастабильном состоянии. Можно представить это как частицу в двух потенциальных ямах разной глубины, переходящую из одной в другую под действием тепловых флуктуаций. Для поддержания жизни и, соответственно, свежести продукта нужно определенное число систем в метастабильном состоянии. Если заморозка происходит медленно, все системы постепенно переходят в стабильное состояние, энтропия при этом равновесном процессе уменьшается. Есть информация про каждую систему о том, в каком она состоянии (в стабильном). Структура ткани изменяется, теряется свежесть. Если же заморозка проходит быстро, тепловые флуктуации выключаются, все системы, бывшие в метастабильном состоянии так и останутся в нем. Энтропия почти не меняется и это хорошо.

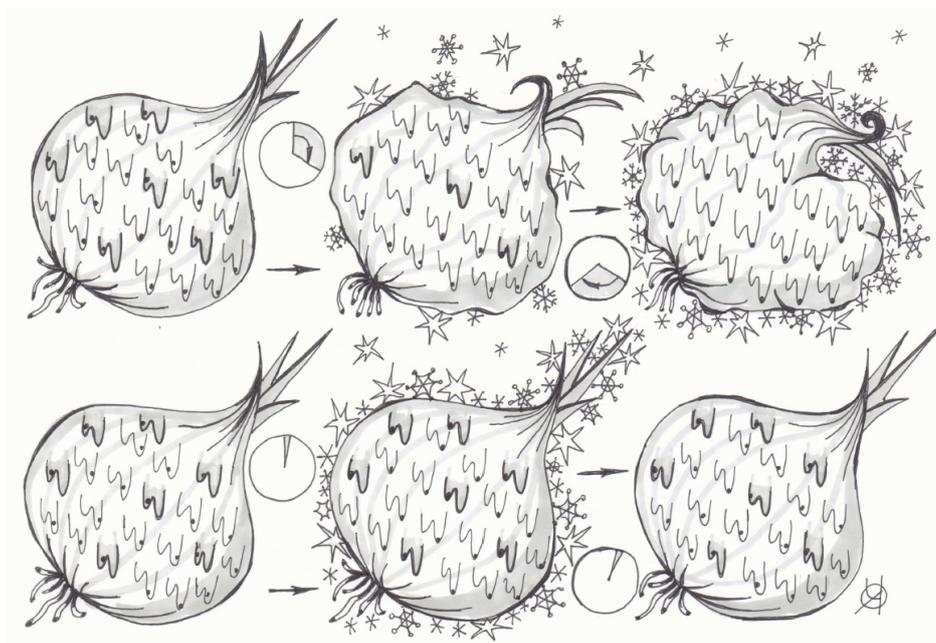


Рис. 10: Сравнение результатов медленной (наверху) и быстрой (внизу) заморозки

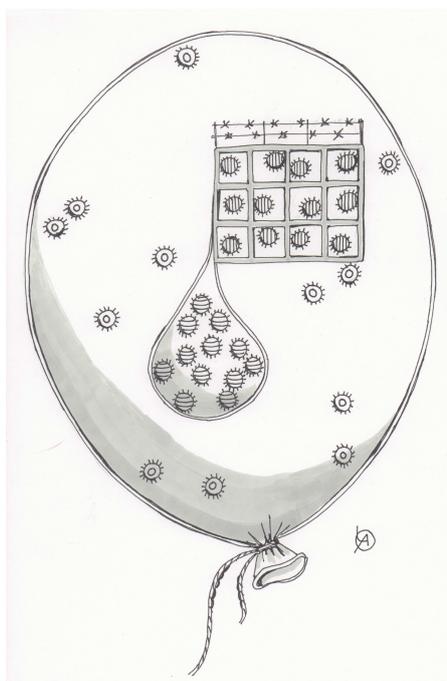


Рис. 11: Неопределенности положения молекул в газе, жидкости и твердом теле

3.2.2 Энтропия различных агрегатных состояний

Модель газа, учитывающая взаимодействия называется газом Ван-дер-Ваальса (ВдВ). Эта модель учитывает не только отталкивание молекул, но и притяжение. Однако, на энтропии притяжение не отражается. Она получается такой же как энтропия идеального газа, только вместо объема в ней будет свободный объем, то есть объем за вычетом объема самих молекул νb , а именно $S = C_V \ln T + R\nu \ln(V - \nu b) + S_0$. Энтропия газа ВдВ меньше, потому что неопределенность координаты больших молекул явно меньше. Искать иголку в стоге сена сложнее, чем шпалу. Например, в игре "Морской бой" четырех-палубный корабль подбить проще, чем одно-палубный.

Энтропия твердого тела будет, соответственно, еще меньше, потому что каждый атом привязан к своему месту в кристаллической решетке, как бы является узником одиночной камеры.

Это объясняет, почему фазовые переходы можно описывать с помощью свободной энергии $F = U - ST$. Можно показать, что в системе с фиксированной температурой, над которой не совершается работа $A = 0$, положение устойчивого равновесия соответствует точке минимума свободной энергии. Действительно, из второго начала следует $TdS \geq dQ = dU$. Значит свободная энергия уменьшается $dF = dU - TdS \leq 0$. Мы знаем два закона для физических систем. Из механики известно, что системы стремятся в состояние с минимальной энергией U , из термодинамики, что в состояние с максимальной энтропией S . Эти две тенденции учитываются в свободной энергии. Но они могут противоречить друг другу. Например, у жидкости энергия меньше чем у газа, как видно из формулы для газа ВдВ. Но и энтропия у жидкости меньше. Что победит, стремление системы минимизировать энергию или сделать максимальной энтропию? Арбитром в этом споре выступает температура. Она является в уравнении весовым множителем при энтропии. Если температура высока, то стремление увеличить энтропию побеждает и получается газ. Если температура мала, влияние энтропии меньше, все определяется тем, что энергия притягивающихся молекул минимальна, когда они на близком расстоянии друг от друга, и мы получаем жидкость. А если температура еще ниже, то система переходит в состояние с минимальной энтропией, зато максимально энергетически выгодное за счет определенной структуры, то есть твердое тело.

3.3 Микронарушения второго закона термодинамики

Энтропия изолированной системы может немного убывать из-за того, что сама энтропия флуктурует как любой термодинамический параметр. Так что если начальное состояние системы соответствовало максимальной энтропии, то потом, она станет средней, то есть уменьшится. Но разница может быть только очень малой, порядка константы Больцмана. Можно сказать, что запрещены все процессы, для которых

$$\int \frac{dQ}{T} - \Delta S \gg k_B.$$

Тут интересна драматичная борьба законов и флуктуаций. Сначала обнаружили, что тепловые флуктуации нарушают законы механики. Потом законы снова победили, потому что появились законы термодинамики, которые описывают эти флуктуации, особенно второй закон. Так флуктуации опять за старое! Они уже нарушают закон, который утверждает их права. В ответ был введен закон, который описывает, как флуктуации нарушают закон, который описывает флуктуации...

3.4 Флуктуации внутреннего термодинамического параметра

Введем условную энтропию при фиксированном значении термодинамического параметра B . Перейдем от переменных z к переменным B и ζ в распределении так, чтобы якобиан перехода был равен 1. Получим

$$S(|B) = -k \int \ln(w(\zeta|B)) w(\zeta|B) d\zeta + S_0.$$

Поскольку динамических переменных в термодинамической системе очень много, можно считать, что условная энтропия приближенно равна просто энтропии системы. Условное распределение вероятности при постоянной температуре можно записать, исходя из распределения Гиббса

$$w(\zeta|B) = \frac{C \exp(-H(\zeta, B)/kT)}{w(B)}.$$

Тогда условная энтропия запишется как

$$S(|B) = -k \int (\ln C - \ln w(B) - H(\zeta, B)/kT) w(\zeta|B) d\zeta + S_0.$$

В третьем слагаемом узнаем внутреннюю энергию и получаем

$$S(|B) = -\ln C + k \ln w(B) + U/T + S_0.$$

Отсюда плотность распределения вероятностей для внутреннего термодинамического параметра для системы в термостате

$$w(B) = C \exp\left(\frac{-F(|B)}{kT}\right). \quad (19)$$

где $F(|B)$ — условная свободная энергия. Видим, что наиболее вероятные значения внутреннего термодинамического параметра соответствуют минимальной свободной энергии.

Для изолированной системы внутренняя энергия является константой. Ее можно убрать из экспоненты в (19) в константу нормировки. Получаем плотность распределения вероятностей для внутреннего термодинамического параметра в изолированной системе

$$w(B) = C_1 \exp\left(\frac{S(|B)}{k}\right).$$

В качестве примера рассмотрим цилиндр с поршнем, под которым находится N молекул идеального газа. Газ контактирует с термостатом, имеющим температуру T . Поршень может перемещаться без трения и его вертикальная координата x флуктуирует под действием случайных толчков молекул. Давление газа снаружи от поршня можно считать равным нулю. Площадь поршня σ . Рассчитаем флуктуации вертикальной координаты.

Рассматриваемая система состоит из N молекул идеального газа и поршня, следовательно, координата поршня x является внутренним термодинамическим параметром. Его потенциальная энергия mgx входит во внутреннюю энергию системы. Система находится в контакте с термостатом, следовательно, можно воспользоваться формулой для функции распределения внутренних термодинамических параметров (19). Используя выражения для энтропии идеального газа, запишем зависимость свободной энергии системы от объема $V = \sigma x$, вынеся все остальное в функцию $f(T)$,

$$F = -kTN \ln V + mgx + f(T).$$

Подставляя найденное выражение для свободной энергии в формулу для флуктуаций (19) и убирая все независимые от x слагаемые в константу нормировки, найдем

$$w(x) = C_1 \exp\left(\frac{kTN \ln \sigma x - mgx - f(T)}{kT}\right) = C_1 x^N \exp\left(-\frac{mgx}{kT}\right).$$

Видим, что это гамма-распределение. С ростом N растет матожидание и дисперсия, однако для относительной флуктуации $x/\langle x \rangle$ дисперсия с ростом N уменьшается, и при $N \rightarrow \infty$ распределение представляет собой острый пик около 1.

4 Второй закон термодинамики в обобщенной формулировке

IMPERITIA PRO CULPA HABETUR.

Незнание вменяется в вину.

Формула римского права.

Понятие меры неопределенности тесно связано с понятием информации. Если энтропию и информацию измерять в одних и тех же единицах, то энтропию можно считать недостатком информации о состоянии системы. Обобщенная формулировка второго начала учитывает информацию, записанную в систему

$$dS \geq \frac{dQ}{T} - dI, \quad (20)$$

это та самая информация, которую получает демон Максвелла. Она определяется формулой Шеннона.

$$I = -k \sum P_i \ln P_i. \quad (21)$$

Хотя сам Максвелл никакого демона не придумывал. У него было просто существо (being). Вспыхнувшая вокруг этого вопроса полемика сделала всю эту историю несколько инфернальной.

4.1 Демон Максвелла

Рассмотрим мысленный эксперимент: предположим, сосуд с газом разделен непроницаемой перегородкой на две части: правую и левую. Молекулы хаотично движутся. В перегородке есть отверстие с устройством, так называемый демон Максвелла, которое позволяет пролетать быстрым (горячим) молекулам газа только из левой части сосуда в правую, а медленным (холодным) молекулам — только из правой части сосуда в левую. Демон открывает и закрывает перегородку перед молекулами, оценивая их скорость. Тогда через большой промежуток времени быстрые молекулы окажутся в правом сосуде, а медленные останутся в левом.

Таким образом, получается, что демон Максвелла позволяет нагреть правую часть сосуда и охладить левую без дополнительного подвода энергии к системе. Энтропия для системы, состоящей из правой и левой части сосуда, в начальном состоянии больше, чем в конечном, что противоречит термодинамическому принципу неубывания энтропии в замкнутых системах. Можно, например, создать двигатель, который работает только за счет энергии нагревателя.

Рассмотрим упрощенную модель в виде горизонтальной трубки объемом V , в которой движется одна молекула. Такой газ можно считать



Рис. 12: Демон Максвелла пропускает вправо только быстрые молекулы, а влево — только медленные, создавая разницу температур

идеальным, уравнение состояния которого $pV = kT$. Здесь под давлением подразумевается средний импульс, передаваемый частицей единице площади стенки в единицу времени. За счет соударений со стенками частица поддерживается при постоянной температуре T , т.е. ее средняя кинетическая энергия определяется этой температурой. Здесь усреднение проводится с помощью распределения Гиббса, которое применимо к одной частице, находящейся в контакте с термостатом. Предположим, что мы мысленно разделили трубку на N равных частей. Пусть демон Максвелла может в определенный момент задвигать через боковую поверхность в трубку поршень без совершения работы. Поршень делит трубку на объемы V/N слева и $(1 - 1/N)V$ справа от поршня. Пусть поступила информация, что частица находится слева, демон Максвелла вдвигает поршень. Далее поршень может достаточно медленно двигаться под действием ударов частицы. Энергию, потерянную при ударах о поршень, частица восстанавливает за счет ударов со стенками, поэтому процесс можно считать квазиравновесным изотермическим процессом. Это означает, что наш газ изотермически расширяется и совершает работу. Эта работа определяемая изменением объема, будет

$$A = kT \ln N.$$

Она получена из термостата в виде такого же количества теплоты $Q = kT \ln N$. Когда частица продвинет поршень до крайнего правого положения, то газ окажется в исходном состоянии, т.е. в состоянии до вдвигания поршня. При этом изменение энтропии равно нулю. Как видим, второе начало термодинамики в обычной формулировке не выполняется.

Покажем, что в данном случае выполняется обобщенная формулировка. Демон Максвелла узнал, что частица оказалась слева, и вдвинул поршень. Вероятность обнаружить частицу в одном из отсеков равна $1/N$, откуда информация, согласно (21), определяется вероятностью попадания в выделенный объем

$$I = k \ln N.$$

Видим, что нестрогое неравенство второго закона термодинамики в обобщенной форме в данном случае обращается в равенство, что соответствует квазиравновесному процессу. Кроме того, получается, что чем мельче разбиение нашего объема, тем больше мы получим информации, узнав, что частица в данной ячейке. Мы точнее измерим ее координату и станем образованней. В случае, если частица была справа от поршня, работа будет меньше, но и информации было получено меньше, поскольку в этом случае мы уже могли заранее догадываться, что частица, скорей всего, в большем объеме. Возникает вопрос, зачем, вообще, демону

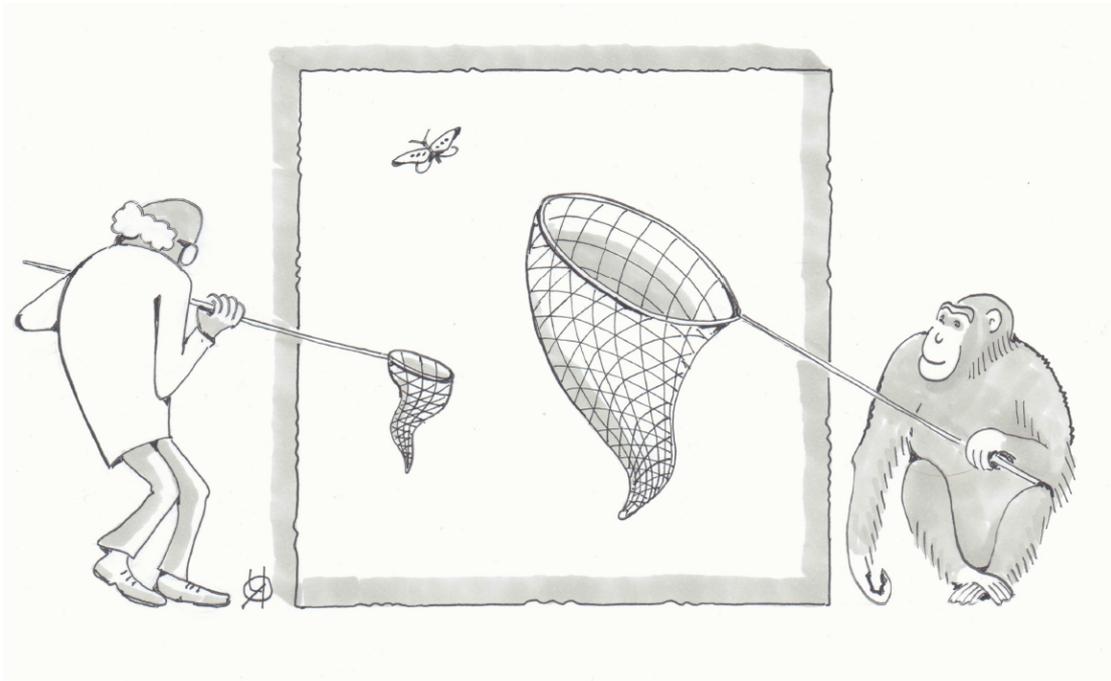


Рис. 13: Информация о попадании частицы в малый объем больше, чем информация о попадании частицы в большой объем

Максвелла знать, где находится частица, ведь поршень в любом случае куда-то сдвинется? Оказывается, при отсутствии этой информации движение поршня нельзя считать совершением работы. Его движение тогда является случайным тепловым движением как бы еще одной большой молекулы.

4.2 Квазиравновесное распределение Больцмана

Рассмотрим броуновское движение одной частицы массой m в потенциальной яме $U(\mathbf{r}) \leq 0$ под действием внешних шумов, характеризующихся температурой T , скорость ее движения подчиняется распределению Максвелла. Причем, частица может выйти из этой ямы, преодолев потенциальный барьер σ_0 , вдоль которого $U = 0$, но вероятность этого события мала. Такой процесс является равновесным по скоростям, но неравновесным по координатам в связи с тем, что время корреляции скорости много меньше, времени корреляции координаты τ_c .

Вероятность выхода в единицу времени a можно вычислить, представив себе систему, состоящую из двух ям, характеризующихся средними энергиями $\langle U \rangle$ и $\langle U_1 \rangle$, причем одной из них будет та, которую мы исследуем. Частица переходит из одной ямы в другую и обратно, и весь процесс является стационарным. В результате, мы можем применить распределение Больцмана к этой двухуровневой системе. Эту двухуровневую модель мы хорошо знаем как пример одношагового дискретного

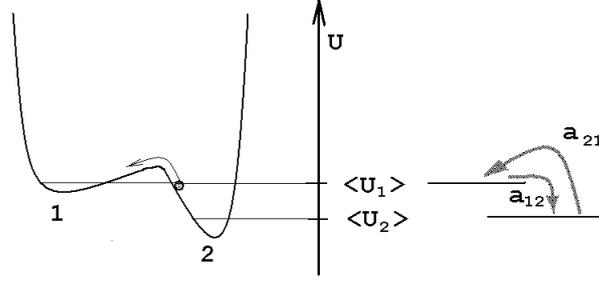


Рис. 14: Схема двухуровневой модели

марковского процесса. Можно применить формулу стационарного состояния (53)

$$a = C \exp\left(\frac{\langle U \rangle}{kT}\right) = 1/\tau. \quad (22)$$

Эта вероятность является величиной обратной среднему времени выхода из потенциальной ямы τ , или времени Крамерса. Тут мы смотрим на нашу яму снаружи. С другой стороны, при взгляде изнутри ямы, эта же вероятность выхода определяется плотностью распределения вероятностей $w(\sigma_0)$ вблизи границы длиной L , и скоростью приближения к границе, определяемой температурой

$$a = \sqrt{\frac{2kT}{m\pi}} L w(\sigma_0) = \frac{1}{\tau}. \quad (23)$$

Приравнивая их, получаем квазиравновесное распределение Больцмана

$$w(\mathbf{r}) = \frac{1}{\Omega} \exp\left(\frac{\langle U \rangle - U(\mathbf{r})\alpha}{kT}\right),$$

где Ω — объем ямы, k — постоянная Больцмана. Константа α характеризует неравновесность системы. При $\alpha = 1$ получается просто распределение Больцмана. Для определения α и $\langle U \rangle$ имеем систему уравнений

$$\begin{cases} \int \exp\left(\frac{-U\alpha}{kT}\right) d\mathbf{r} = \Omega \exp\left(\frac{-\langle U \rangle}{kT}\right) \\ \int U \exp\left(\frac{-U\alpha}{kT}\right) d\mathbf{r} = \langle U \rangle \Omega \exp\left(\frac{-\langle U \rangle}{kT}\right) \end{cases}$$

Первое из этих уравнений получается из условия нормировки, а второе — из того факта, что $\langle U \rangle$ является математическим ожиданием U . Это распределение является более узким, чем распределение Больцмана.

Представим себе эксперимент, в котором мы ловим вышедшую из ямы частицу и запускаем обратно в яму со скоростью, соответствующей упругому удару о стенку и ждем следующего выхода частицы. Сравним ее с равновесной системой, в которой есть стенка по всей границе ямы. Тогда

наша система отличается от равновесной системы со стенкой только фактом измерения моментов времени выхода (или столкновения со стенкой). То, что измерение приводит к сужению функции распределения, напоминает проблему квантовых измерений и может служить классическим аналогом частичного коллапса волновой функции.

В классическом случае разница средних времен жизни может быть объяснена из того факта, что наша модель неравновесного процесса исключает быстрые выходы из потенциальной ямы, то есть за время меньшее времени корреляции.

Иначе сужение распределения вероятностей можно интерпретировать как уменьшение эффективной температуры, аналогичное остыванию жидкости в процессе испарения. Только жидкость уменьшает температуру после (в результате) вылета молекулы, а в нашем случае сама возможность выхода, ненулевая вероятность такого события, приводит к уменьшению температуры как коэффициента, определяющего распределение вероятностей.

Уменьшение энтропии по сравнению с равновесной системой в результате измерения будет равно количеству информации I о моменте выхода

$$S_B - S = I,$$

где S_B — энтропия равновесной системы, описываемой больцмановским распределением, S — энтропия квазиравновесной системы.

Для определения количества информации необходимо дискретизировать время, т.е. задать характерный интервал времени. Таким является среднее время между ударами об стенку в равновесном случае τ_B . Вероятность выхода на протяжении i -го интервала не зависит от i и равна $P = a\tau_B = \tau_B/\tau$. Информация, получаемая при указании номера i одного из равновероятных интервалов, во время которого произошел выход частицы, в соответствии с формулой Шенона (21) равна $I = -k \ln P$.

Учитывая, что зависимость τ_B от средней энергии для равновесной системы такая же, как и для τ (22), получаем

$$I = k \frac{\langle U \rangle_B - \langle U \rangle}{kT},$$

что совпадает с выражением для разности энтропий, вычисленным по определению энтропии (17), и подтверждает формулу обобщенного второго закона термодинамики (20). Итак, мы получили, что убывание энтропии в системе равно количеству введенной в нее информации.

Учет эффекта неравновесности распределения позволяет правильно находить время выхода из потенциальной ямы (время Крамерса) в зависимости от формы этой ямы. На графике показаны эти зависимости

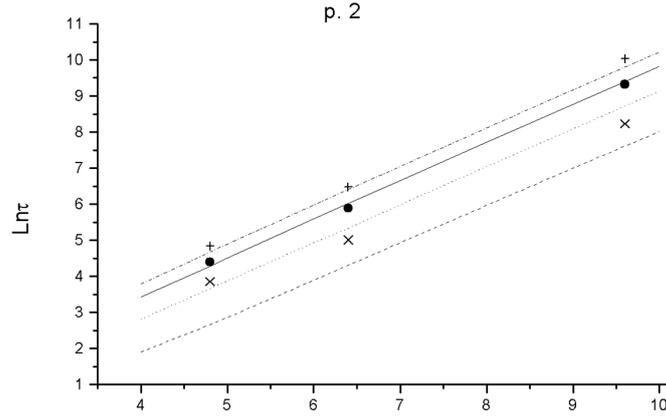


Рис. 15: Время Крамерса в зависимости от глубины ямы, нормированной на тепловую энергию

при разных формах ям. Внизу пунктиром показан результат без учета неравновесности видно, что он далек от результатов численного эксперимента.

4.3 Светоиндуцированный дрейф

Светоиндуцированный дрейф — один из самых известных эффектов, которые можно интерпретировать как запись в систему дополнительной информации или действие так называемого демона Максвелла. В длинной трубке есть инертный газ при температуре около 400 К и в нее добавляется облако атомов натрия.

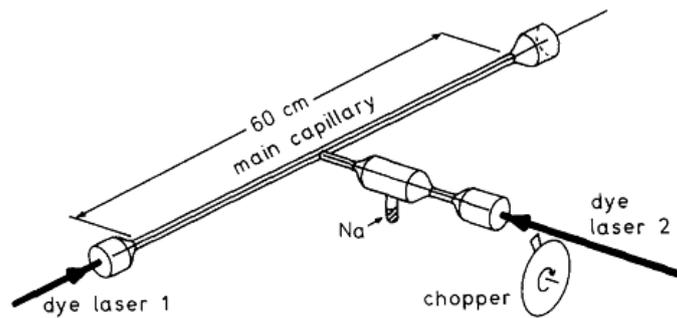


Рис. 16: Схема эксперимента светоиндуцированного дрейфа

Лазер светит вдоль трубки с частотой $\omega = \omega_0 + kv$, приводя в возбужденное состояние атомы натрия с соответствующей доплеровской частотой ω , то есть движущиеся с проекциями скоростей на ось трубки близким к скорости u . Этот дрейф хорошо заметен, поскольку натрий светится. Скорость и направление дрейфа определяются частотой отстройки лазерного излучения от собственной частоты натрия. Согласно закону сохранения импульса

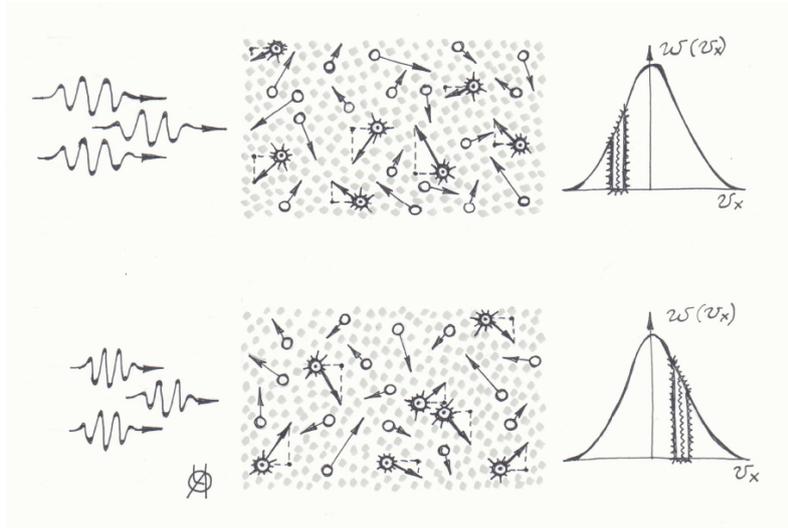


Рис. 17: Селективное возбуждение атомов натрия, имеющих скорость, соответствующую отстройке частоты излучения.

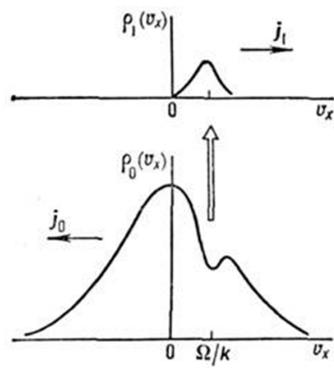


Рис. 18: Встречные потоки возбужденных и невозбужденных атомов натрия.

$$um_{Na}n_{Na} = u_g m_g n_g.$$

Энергия упорядоченного движения берется из тепловой. Поскольку кон-

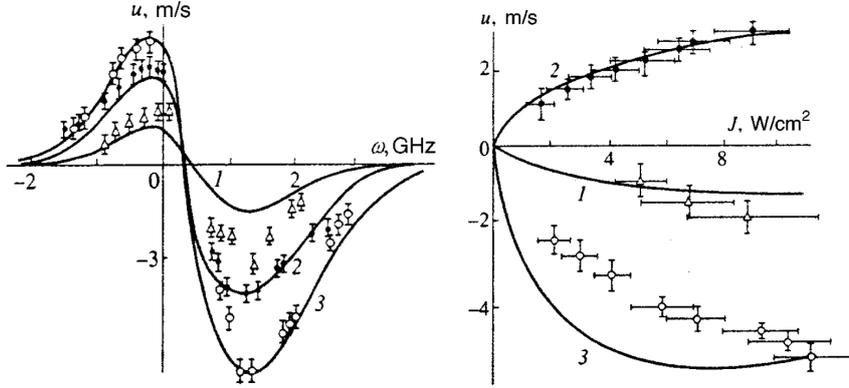


Рис. 19: Скорость светоиндуцированного дрейфа в зависимости от отстройки частоты (слева) и интенсивности лазерного излучения (справа). Линии — теория, значки — эксперимент при различных буферных газах: линии 1 и треугольники — гелий, линии 2 и черные кружки — аргон, Линии 3 и белые кружки — ксенон.

центрация буферного газа в 10^6 раз больше концентрации натрия, учитывается только поток буферного газа. Можно приравнять начальную температуру конечной за вычетом энергии дрейфа, разделенной на постоянную Больцмана

$$T_i = T_f + m_g \langle u_g^2 \rangle / (3k_B).$$

Как и в предыдущем примере, происходит уменьшение энтропии, так как часть энергии теплового движения превращается в кинетическую энергию дрейфа. Это изменение энтропии равно информации, которая записывается в систему, а именно, информация о скорости некоторых атомов натрия, которая зависит от частоты отстройки

$$\Delta S = \frac{3}{2} R \ln \frac{T_f}{T_i} = -\Delta I.$$

В результате получаем зависимость скорости дрейфа от количества записанной в систему информации

$$u = \frac{m_g n_g}{m_{Na} n_{Na}} \sqrt{\langle v_g^2 \rangle \left[1 - \exp \left(-\frac{2\Delta I}{3} \right) \right]}.$$

Пользуясь этим соотношением, можно получить зависимость скорости дрейфа от частоты отстройки при различных инертных газах, их давлениях и интенсивности лазерного излучения. Этот подход верен при рассмотрении газов как термодинамической системы. Если рассмотреть их вместе с излучением, то энергия поступательного движения газовых компонентов газа черпается из тепловой энергии, а действие излучения,

выступающего в роли своеобразного демона Максвелла, состоит в преобразовании хаотического (теплового) движения частиц газа в упорядоченное (направленное) движение компонентов смеси. Неизбежное при этом уменьшение энтропии газовой подсистемы компенсируется увеличением энтропии второй подсистемы — излучения: из упорядоченного (направленного) оно преобразуется в изотропно рассеянное излучение в результате спонтанного испускания после акта поглощения. Так что для этой большой системы работает второе начало в обычной формулировке.

5 Пуассоновский процесс

Понимаете, бывают такие дела, в которых
важно ничего не знать заранее.

К. С. Льюис

5.1 Определение Пуассоновского процесса

Рассмотрим импульсный пуассоновский процесс, характеризующийся числом пришедших независимых импульсов n . Примером такого процесса могут служить соударения броуновской частицы с хаотически движущимися и невзаимодействующими частицами среды. Каждый импульс соответствует одному соударению с одной из частиц среды. Пуассоновский процесс является частным случаем процесса восстановления. Он также может быть представлен как последовательность случайных точек на временной оси. Эта последовательность называется случайным точечным процессом. Моменты появления импульсов являются случайными величинами t_n . Причем, мы считаем вероятность появления более одного импульса на малом интервале бесконечно малой. Это свойство называется ординарностью случайного процесса. Временные интервалы между соседними, следующими друг за другом, импульсами $\vartheta_n = t_n - t_{n-1}$ тоже являются независимыми одинаково распределенными случайными величинами. Их среднее обозначим $\langle \vartheta \rangle = T$. Этот процесс стационарный. Условный период T является константой. Вероятность появления очередного импульса в единицу времени $p = 1/T$ также является постоянной величиной, никак не зависящей от того, когда был предыдущий импульс. Можно сказать, что система моментально "забывает" свое предыдущее состояние. Так же это соответствует минимуму возможности предсказать момент появления следующего импульса. Этот процесс является самым случайным импульсным процессом. Применительно к броуновской частице это означает, что ее столкновение с одной из частиц среды никак не влияет на то, когда она столкнется с другой частицей среды.

5.2 Плотность распределения вероятности для интервалов между соседними импульсами

Для Пуассоновского процесса найдем связь вероятности появления импульса в единицу времени и плотности распределения вероятности для интервалов между соседними импульсами ϑ .

Предположим, что произошел импульс, назовем его нулевым, найдем

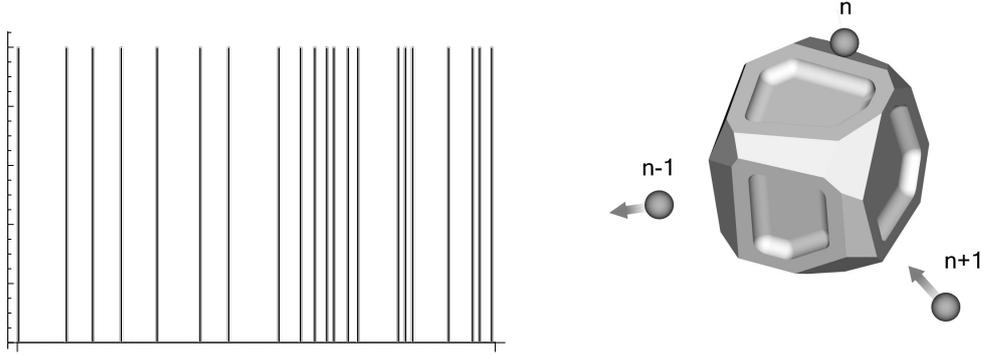


Рис. 20: Пример реализации пуассоновского процесса (слева). Нумерация ударов частиц среды о броуновскую частицу (справа).

распределение вероятностей для времени ожидания следующего, первого, импульса. Введем шкалу времени, начинающуюся в момент нулевого импульса, разобьем ее на малые интервалы Δt и введем дискретное время $\vartheta = m\Delta t$. Тогда вероятность того, что импульс появится на m -ом интервале равна $p\Delta t$, одинаковая для всех интервалов. Вероятность, что между импульсами будет m интервалов, равна произведению вероятностей независимых событий: (I) на m предыдущих интервалах импульсов не было с вероятностью $(1 - p\Delta t)^m$ и (II) на следующем, $(m + 1)$ -ом, он был с вероятностью $p\Delta t$

$$(1 - p\Delta t)^m p\Delta t = (1 - p\Delta t)^{\vartheta/\Delta t} p\Delta t.$$

Переходя к пределу малых Δt и используя второй замечательный предел получаем, что эта вероятность определяется следующим образом

$$w(\vartheta)\Delta t = p \exp(-\vartheta p)\Delta t = \frac{1}{T} \exp\left(-\frac{\vartheta}{T}\right)\Delta t, \quad (24)$$

где $w(\vartheta)$ — плотность распределения вероятностей для интервала между соседними импульсами. Экспоненциальное убывание вероятностей интервалов между импульсами можно проиллюстрировать тем, что длительность этих интервалов соответствует для броуновской частицы времени свободного пробега, без столкновений. Вероятность лететь долго, не испытывая столкновений, меньше, чем вероятность не столкнуться за малый интервал времени. То есть малые времена свободного пробега вероятней, чем большие. Та же самая закономерность прослеживается и для длин свободного пробега.

Таким же, как и распределение для интервалов между соседними импульсами (24) будет распределение $w_1(t)$ для первого импульса, если счи-

таем, что в начальный момент был импульс с номером 0

$$w_1(t) = \frac{1}{T} \exp\left(-\frac{t}{T}\right). \quad (25)$$

Итак, распределение вероятностей для интервалов между соседними импульсами экспоненциальное и $\sigma_y^2 = T^2$.

5.3 Плотность распределения вероятностей интервалов между произвольными n импульсами Пуассоновского процесса

Пусть $w_n(t)$ описывает плотность распределения вероятностей момента появления n -го импульса при условии, что нулевой был в начале отсчета времени, плотность распределения для него $w_0(t) = \delta(t)$.

Найдем плотность распределения вероятностей $w_2(t)$ времени t появления второго импульса. Введем опять дискретное время. Пусть $t_1 = m\Delta t_1$ — время появления первого импульса. Вероятность события, что первый импульс появился на m -ом интервале $w_1(t_1 = m\Delta t_1) \Delta t_1$, здесь плотность распределения вероятностей $w_1(t_1)$ определяется по формуле (25) с заменой t на t_1 .

Тогда вероятность события, что следующий, второй, импульс появился на интервале, соответствующем времени t , при условии, что первый был на m -ом интервале будет $w_1(t - t_1) \Delta t$. Это событие соответствует тому, что расстояние между первым и вторым импульсами $t - t_1$. Поскольку нас интересует только момент появления второго импульса, а первый может быть когда угодно на временном интервале от 0 до t , то, применяя формулу полной вероятности, получаем

$$w_2(t) \Delta t = \sum_{m=1}^{\infty} w_1(m\Delta t_1) \Delta t_1 w_1(t - m\Delta t_1) \Delta t.$$

Переходя обратно к непрерывному времени и интегрируя по t_1 , получаем

$$w_2(t) = \int_0^t w_1(t_1) w_1(t - t_1) dt_1 = \frac{1}{T^2} \int_0^t \exp\left(-\frac{t_1}{T}\right) \exp\left(-\frac{t - t_1}{T}\right) dt_1,$$

$$w_2(t) = \frac{t}{T^2} \exp\left(-\frac{t}{T}\right) = \frac{t}{T} w_1(t). \quad (26)$$

Рассуждая аналогично для времени появления третьего импульса и используя полученную плотность распределения для времени t_2 появления второго импульса (26), получаем

$$w_3(t) = \int_0^t w_2(t_2) w_1(t - t_2) dt_2 = \frac{1}{T^3} \int_0^t t_2 \exp\left(-\frac{t_2}{T}\right) \exp\left(-\frac{t - t_2}{T}\right) dt_2,$$

$$w_3(t) = \frac{t^2}{2T^3} \exp\left(-\frac{t}{T}\right) = \frac{t}{2T} w_2(t).$$

Получая аналогично для четвертого импульса

$$w_4(t) = \int_0^t w_3(t_3) w_1(t - t_3) dt_3 = \frac{1}{2T^4} \int_0^t t_3^2 \exp\left(-\frac{t_3}{T}\right) \exp\left(-\frac{t - t_3}{T}\right) dt_3,$$

$$w_4(t) = \frac{t^3}{1 \cdot 2 \cdot 3 T^4} \exp\left(-\frac{t}{T}\right) = \frac{t}{3T} w_3(t),$$

усматриваем закономерность $w_{n+1}(t) = (t/nT)w_n(t)$ и выписываем плотность распределения вероятностей для произвольного n -го импульса, оно называется гамма-распределением (1) с заменой x на t и α на T

Эта же плотность распределения $w_n(t)$ соответствует распределению для интервалов между m -м и $(n + m)$ -м импульсами. Важно отметить, что здесь t является случайной величиной, а n — параметром распределения.

5.4 Связь гамма-распределения и распределения Пуассона

Распределение Пуассона $P_t(n)$ описывает вероятность того, что к моменту времени t появилось ровно n импульсов. То есть здесь, в отличие от гамма-распределения, n является случайной величиной, а t — параметром распределения. В этой задаче мы зафиксировали время движения броуновской частицы и изучаем случайную величину количества соударений, которое она успела испытать за это время. Понятно, что время движения и количество соударений связаны между собой, поэтому можно ожидать, что и распределения этих двух величин окажутся связанными некоторым выражением. Получим это распределение Пуассона из гамма-распределения. Вероятность события, что $(n + 1)$ -й импульс произошел в малом интервале времени $(t, t + \Delta t)$ определяется Гамма-распределением (1) по определению плотности вероятности

$$w_{n+1}(t)\Delta t = \frac{t^n}{n! T^{n+1}} \exp\left(-\frac{t}{T}\right)\Delta t. \quad (27)$$

Это же событие состоит из двух независимых событий: (I) до момента t было ровно n импульсов с вероятностью $P_t(n)$ и (II) на интервале Δt

появился импульс с вероятностью $T^{-1}\Delta t$. Получаем

$$P_t(n) T^{-1}\Delta t. \quad (28)$$

Приравнивая (27) и (28), получаем выражение для распределения Пуассона и гамма-распределения в общем виде

$$P_t(n) = w_{n+1}(t)T. \quad (29)$$

Откуда получается выражение для распределения Пуассона

$$P_t(n) = \frac{(t/T)^n e^{-t/T}}{n!} = \frac{(\lambda)^n e^{-\lambda}}{n!}. \quad (30)$$

Его основные характеристики

$$\langle n \rangle = t/T = \lambda, \quad \sigma_n^2 = t/T = \lambda. \quad (31)$$

Проверим, что распределение Пуассона соответствует основному кинетическому уравнению для дискретного марковского процесса (12). Там $P_t(n)$ обозначено как p_n и γ соответствует $1/T$. Для этого воспользуемся его первой записью в (30), чтобы зависимость от времени была видна явно. Выражая производную \dot{p}_n и p_{n-1} через p_n , получаем

$$\dot{p}_n = \left(\frac{n}{t} - \frac{1}{T} \right) p(n), \quad p_{n-1} = \frac{nT}{t} p_n.$$

Видим, что они удовлетворяют уравнению (12).

5.5 Предельный переход от распределения Пуассона к Гауссовскому

Распределение Пуассона описывает дискретную величину n . Однако при больших значениях $\langle n \rangle = t/T = \lambda \gg 1$ прибавление одного импульса можно рассматривать как бесконечно малое приращение, и описывать динамику n как изменение непрерывной величины. Это условие соответствует предельному переходу $n \rightarrow \infty$, $T \rightarrow 0$, примененному для перехода от гамма-распределения к гауссовскому.

Для доказательства перехода от распределения Пуассона к нормальному воспользуемся выражением для него через гамма-распределение (29)

$$P_t^G(n) \equiv \lim_{n \rightarrow \infty, T \rightarrow 0} P_t(n) = w_{n+1}^G(t)T.$$

Введем малую флуктуацию числа импульсов $\eta = n - \langle n \rangle = n - \lambda = n - t/T$. Запишем предельное выражение для распределения $P_t(\eta)$, заменяя в предельном выражении для гамма-распределения $w_{n+1}^G(t)$ дисперсию на $T^2 n$ и время t на $nT + \eta T$

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty, T \rightarrow 0} P_t(\eta) &= \lim_{n \rightarrow \infty, T \rightarrow 0} \frac{T}{\sqrt{2\pi T^2 n}} \exp\left(-\frac{(\eta T)^2}{2T^2 n}\right) = \\ &= \lim_{\lambda \gg 1} \frac{1}{\sqrt{2\pi(\lambda + \eta)}} \exp\left(-\frac{\eta^2}{2(\lambda + \eta)}\right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\lambda}} \exp\left(-\frac{\eta^2}{2\lambda}\right). \end{aligned}$$

здесь мы заменили $n = \lambda + \eta$ и учли малость флуктуации η по сравнению с λ . Мы получили нормальное распределение, с такими же средним и дисперсией, как и в изначальном распределении Пуассона.

$$w_\lambda^G(n) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\lambda}} \exp\left(-\frac{(n - \lambda)^2}{2\lambda}\right).$$

5.6 Алгоритмы генерации

Рассмотрим алгоритмы генерации пуассоновского процесса на интервале T_0 , и подумаем какой из них лучше

1. Независимые точки на большом интервале \tilde{T} .

Выбираем интервал $\tilde{T} \gg T_0$, число точек $N = \tilde{T}/T$. Каждую из этих точек бросаем на интервал \tilde{T} с равномерным распределением.

Для всех $1 \leq m \leq N$ получаем $t_m = \tilde{T} \text{Random}$. Потом берем только то, что попало в наш интервал T_0 .

2. Шаги в хронологическом порядке.

Разбиваем интервал T_0 на N шагов величиной $\tau = T_0/N$. На каждом шаге с вероятностью τ/T есть импульс и с вероятностью $1 - \tau/T$ — нет.

Для всех $1 \leq m \leq N$ получаем $\eta_m = f_0/\tau$, если $\text{Random} \leq \lambda\tau$, $\eta_m = 0$, если иначе. Получаем набор столбиков шириной τ .

3. Экспоненциальное распределение для расстояний.

Используем готовое экспоненциальное распределение для ϑ_m .

Для всех $1 \leq m \leq N$ получаем $t_m = t_{m-1} + \vartheta_m$.

Пуассоновский процесс является базовым для описания многих явлений в сравнении с ним.

6 Случайные импульсные процессы и точечные структуры

Икота-икота, перейди на Федота,
с Федота на Якова, с Якова на всякого.

Поговорка

Рассмотрим случайную последовательность δ -импульсов, происходящих в моменты времени t_n и имеющими амплитуду f в общем виде, это так же называется точечным процессом. Временные интервалы между соседними, следующими друг за другом, импульсами $\vartheta_n = t_n - t_{n-1}$ тоже являются случайными величинами с некоторым распределением вероятности. Их среднее, то есть условный период, обозначим так же $\langle \vartheta \rangle = T$. Он не меняется со временем так же как и σ , то есть этот процесс является стационарным. Математически этот процесс можно представить как набор δ -функций

$$\eta(t) = \sum_n f \delta(t - t_n). \quad (32)$$

Многие процессы более общего вида и пространственные структуры могут быть описаны с помощью этой модели.

6.1 Переход к случайному точечному процессу от более сложных задач

6.1.1 Импульсный процесс с конечной шириной импульса

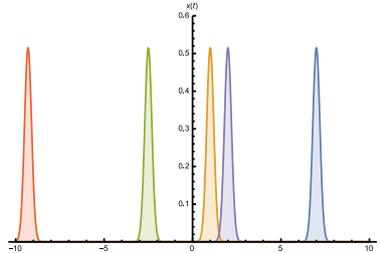


Рис. 21: Импульсы гауссообразной формы

Рассмотрим процесс $\xi(t)$, состоящий из одинаковых импульсов произвольной формы, причем эта форма задается функцией $G(t)$. Тогда его можно связать с точечным процессом $\eta(t)$ с помощью выражения

$$\xi(t) = \sum_j G(t - t_m) = \int G(t - t') \eta(t') dt'. \quad (33)$$

Это позволит находить спектральную плотность $\xi(t)$, зная спектральную плотность $\eta(t)$.

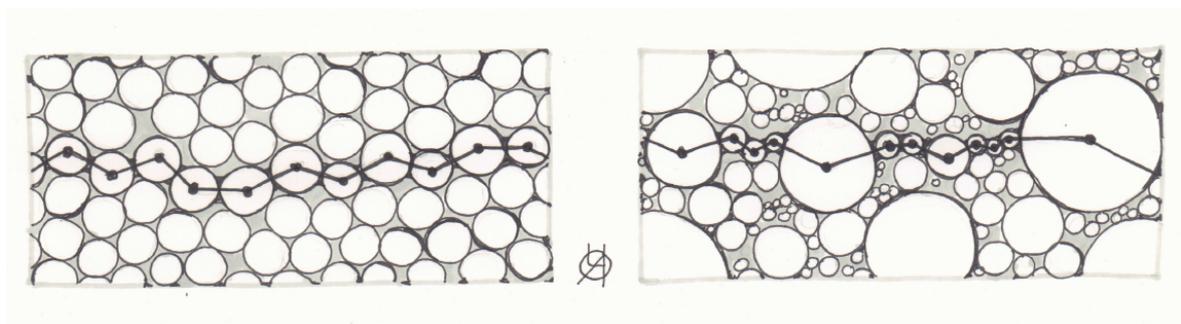


Рис. 22: Исследование периодичности изотропной наноструктуры с помощью случайного точечного процесса

6.1.2 Двумерные структуры

Точки на оси времени уже являются некоторой структурой, поэтому можно перейти от временного описания к пространственному и использовать математический аппарат импульсных процессов для описания одномерных точечных структур. Математически это позволяет обобщить все результаты на случаи, когда n -й импульс оказывается правее $n + 1$ -го. То есть интервал между соседними импульсами ϑ_n может принимать отрицательные значения. Более того, многие задачи анализа двумерных

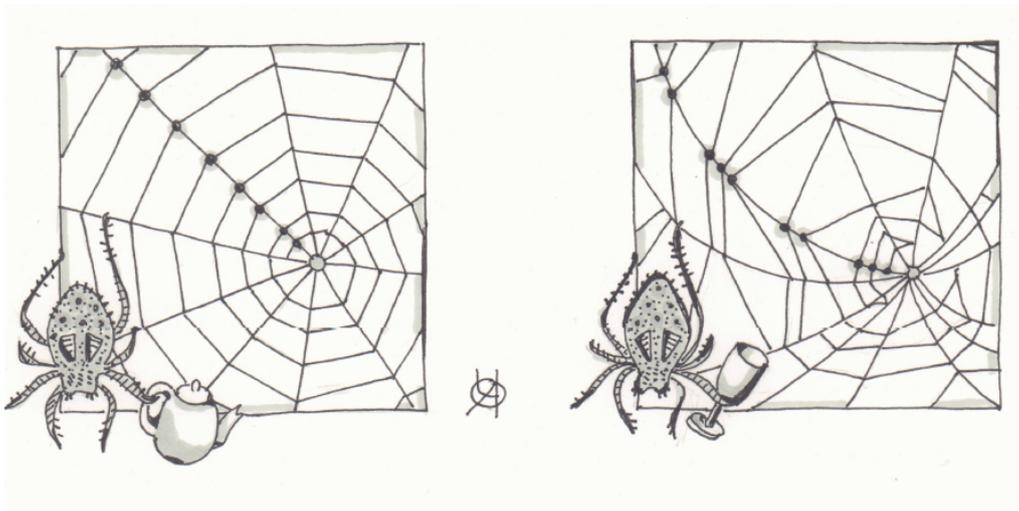


Рис. 23: Исследование случайности паутины с помощью случайного точечного процесса

структур можно свести к случайному точечному процессу. Например, некоторую изотропную квазипериодическую наноструктуру на поверхности, состоящую из ячеек разной величины, можно с большой степенью точности охарактеризовать расположением центров этих ячеек на некоторой линии, проведенной вдоль некоторого направления.

Природные объекты, которые никогда не бывают строго периодическими, тоже можно свести к процессу аналогичному $\eta(t)$. Даже для неизотропных структур можно выбрать характерное направление для

перехода к случайному точечному процессу, например, радиальная нить паутины. Периодичность паутины используется как индикатор состояния паука. С помощью этих паутин испытывают всякие психотропные вещества, имеющиеся в малом количестве. Дают пауку и смотрят, какую он сделает паутину. От веществ, например, концентрирующих внимание, получается строго периодическая паутинка.

6.2 Субпуассоновские и суперпуассоновские процессы

Процессы с дисперсией расстояний между соседними интервалами меньшей, чем квадрат среднего для этих интервалов $\sigma^2 < T^2$, называются субпуассоновскими или квазипериодическими. При обратном неравенстве $\sigma^2 > T^2$ получаем суперпуассоновский процесс с импульсами, собранными в кластеры с большими расстояниями между этими кластерами. В первом случае мы видим отрицательную корреляцию между импульсами. Появление одного уменьшает вероятность появления другого в ближайшем будущем, а при суперпуассоновской статистике корреляции положительные.

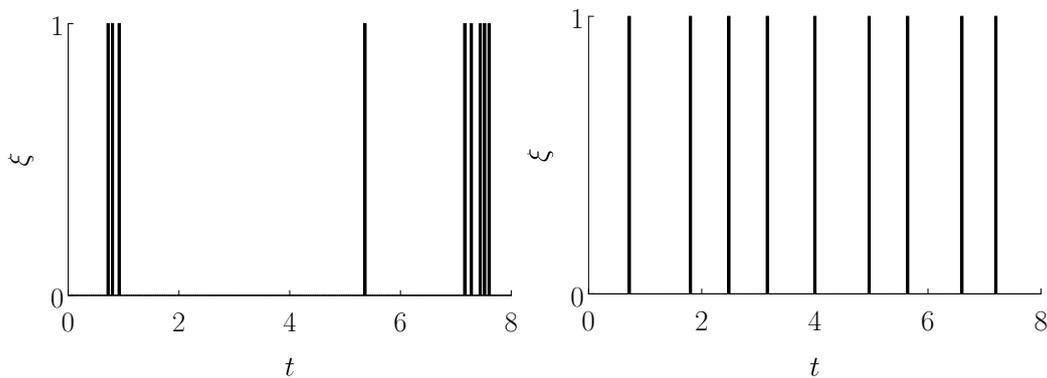


Рис. 24: Суперпуассоновский процесс (слева), Субпуассоновский процесс (справа)

Наглядный пример двух статистик дают лисицы и лисички. Первые тщательно охраняют свою территорию определенного размера. Эта территория обозначена метками, все другие лисицы с нее прогоняются. Поэтому, встретив одну лису маловероятно встретить другую в ближайшее время. А лисички растут колониями, принадлежащими к одной микоризе, поэтому, найдя одну, есть большая вероятность найти следующую. Это приводит к суперпуассоновской статистике.

Следующие случайные импульсные процессы разделите, пожалуйста, на те, которые лучше моделировать как суперпуассоновский процесс, и те, для которых больше подходит модель субпуассоновских процессов:

1. Регистрация потока притягивающихся частиц

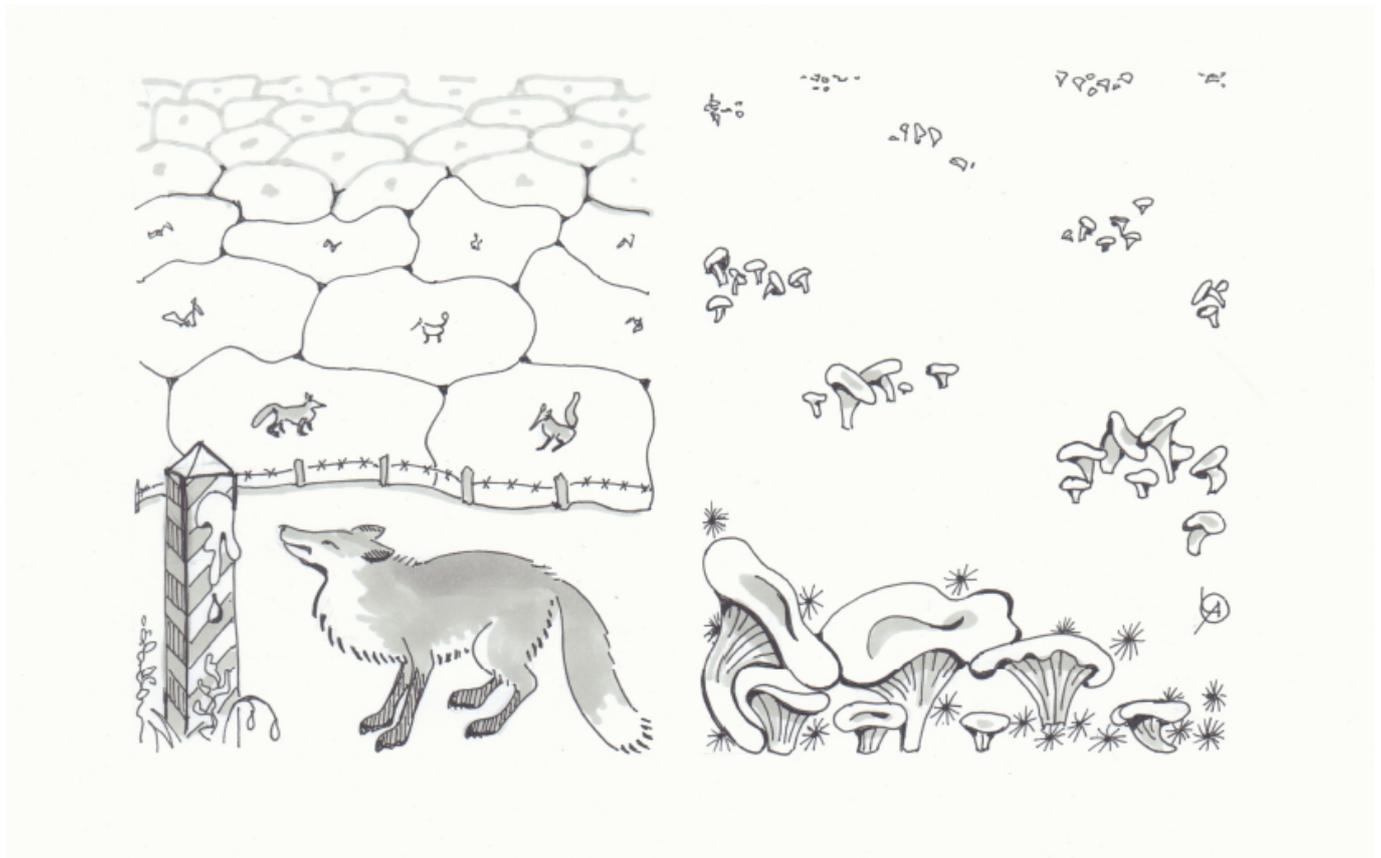


Рис. 25: Лисицы, распределенные с субпуассоновской статистикой, и лисички с суперпуассоновской статистикой

2. Моменты первых в году снегопадов
3. Моменты падения капель с сосульки
4. Моменты сезонного обострения аллергии у студента
6. Моменты заболевания гриппом студентов в одной учебной группе
7. Моменты обнаружения гриба лисички
8. Моменты встречи с различными лисицами в лесу
9. Моменты забивания шара одним игроком при игре в бильярд (при успешном ударе тот же игрок делает следующий ход)
10. Регистрация потока отталкивающихся частиц
11. Моменты коронаций монархов
12. Моменты ошибок нервного лектора
13. Моменты ошибок ленивого лектора
14. Каждое пятое столкновение броуновской частицы с частицами среды
15. Икота

16. Кашель

17. Вдохи оперной певицы во время пения

17. Шаги лектора во время лекции с использованием мела и доски

17. Шаги играющего в теннис

6.3 Проинтегрированный процесс или число импульсов

Рассмотрим процесс, характеризующийся числом пришедших импульсов. $P_m(t_0)$ — вероятность того, что к моменту времени t_0 появилось ровно m импульсов.

$$P_m(t_0) = P_{\geq m}(t_0)P_{< m+1/\geq m}(t_0),$$

где $P_{< m+1/\geq m}(t_0)$ — условная вероятность, такая что

$$P_{< m+1/\geq m} = 1 - P_{\geq m+1/\geq m} = 1 - \frac{P_{\geq m+1, \geq m}}{P_{\geq m}} = 1 - \frac{P_{\geq m+1}}{P_{\geq m}}.$$

Подставляем и получаем

$$P_m(t_0) = P_{\geq m}(t_0) - P_{\geq m+1}(t_0).$$

Здесь $P_{\geq m}(t_0)$ — вероятность того, что к моменту t_0 было больше или ровно m импульсов. Мы считаем, что в начальный момент был импульс с номером 0, распределение для него $w_0 = \delta(t)$. Тогда для любого $m \geq 1$ это событие полностью соответствует тому, что импульс с номером $m-1$ был до момента времени t_0 ,

$$P_{\geq m}(t_0) = \int_{-0}^{t_0} w_{m-1}(t) dt.$$

Здесь нижний предел интегрирования обозначен -0 для того, чтобы нулевой импульс тоже считался и интеграл от его распределения был равен единице. Распределение $w_m(t)$ описывает распределение вероятности появления m -го импульса при условии, что нулевой был в начале координат. Оно же соответствует распределению для интервалов между n -м и $(n+m)$ -м импульсами. Получаем

$$P_m(t_0) = \int_{-0}^{t_0} w_{m-1}(t) dt - \int_{-0}^{t_0} w_m(t) dt = \int_{t_0}^{\infty} w_m(t) dt - \int_{t_0}^{\infty} w_{m-1}(t) dt.$$

Это распределение вероятностей переходит в прямоугольник для периодического процесса и в распределение Пуассона в пределе некоррелированного процесса. При временах больших времени корреляции оно переходит в распределение Гаусса.

Среднее число импульсов можно представить в виде

$$\begin{aligned} \langle m \rangle(t_0) &= \sum_{m=1}^{\infty} m P_m(t_0) = \\ &= \sum_{m=1}^{\infty} \left[(m-1) \int_{-0}^{t_0} w_{m-1}(t) dt - m \int_{-0}^{t_0} w_m(t) dt + \int_{-0}^{t_0} w_{m-1}(t) dt \right] = \\ &= \sum_{m=1}^{\infty} \int_{-0}^{t_0} w_{m-1}(t) dt = \sum_{m=0}^{\infty} \int_{-0}^{t_0} w_m(t) dt. \end{aligned}$$

Иногда его удобней записать через характеристическую функцию, чтобы просуммировать прежде интегрирования

$$\frac{1}{2\pi} \sum_{m=0}^{\infty} \int_{-0}^{t_0} \int_{-\infty}^{\infty} C_m(\omega) e^{-i\omega t} d\omega dt. \quad (34)$$

Аналогично запишем для второго момента

$$\begin{aligned} \langle m^2 \rangle(t_0) &= \sum_{m=1}^{\infty} m^2 P_m(t_0) = \\ &= \sum_{m=1}^{\infty} \left[(m-1)^2 \int_{-0}^{t_0} w_{m-1}(t) dt - m^2 \int_{-0}^{t_0} w_m(t) dt + (2m-1) \int_{-0}^{t_0} w_{m-1}(t) dt \right] = \\ &= \sum_{m=1}^{\infty} \int_{-0}^{t_0} 2m w_{m-1}(t) dt - \langle m \rangle = 2 \sum_{m=0}^{\infty} \int_{-0}^{t_0} (m+1) w_m(t) dt - \langle m \rangle \\ &= \frac{1}{\pi} \sum_{m=0}^{\infty} \int_{-0}^{t_0} \int_{-\infty}^{\infty} (m+1) C_m(\omega) e^{-i\omega t} d\omega dt - \langle m \rangle. \end{aligned}$$

6.4 Процесс с фиксированными точками

Есть два принципиально разных процесса с регулируемой периодичностью. Одним из них является процесс с фиксированными точками. Этот процесс всегда субпуассоновский. На оси времени расположены точки с периодом T . Каждый импульс связан со своей точкой, но отклоняется от нее случайным образом на величину ν

$$t_n = nT + \nu_n.$$

Рассмотрим равномерное распределение для отклонений

$$w(\nu) = \frac{1}{\vartheta_T}, \quad |\nu| \leq \frac{\vartheta_T}{2}.$$

Для процесса с фиксированными точками начало отсчета времени свя-

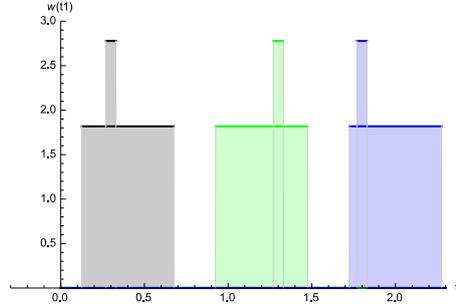


Рис. 26: Импульсный процесс с фиксированными точками и равномерным распределением отклонений

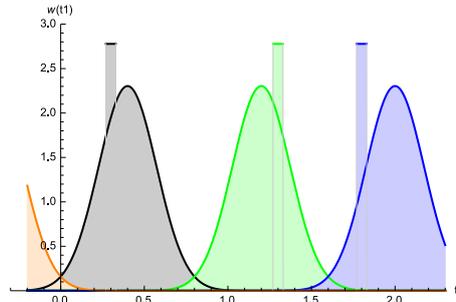


Рис. 27: Импульсный процесс с фиксированными точками и гауссовским распределением отклонений

жем с моментом, когда возможно появление нулевого импульса,

$$\langle m \rangle(t_0) = \sum_{m=0}^{\infty} \int_{-0}^{t_0} w_m(t) dt = n + P_{+1}(t_0),$$

где n определяется неравенством $Tn \leq t_0 < T(n+1)$, а функция $P_{+1}(t_0)$ определяет вероятность появления еще одного ($n+1$ -ого) импульса. Интеграл включает нулевой импульс, что обозначено в нижнем пределе интегрирования

$$P_{+1}(t_0) = \int_{-0}^{t_0 - Tn} w(\nu) d\nu.$$

Аналогично получаем для второго момента

$$\begin{aligned} \langle m^2 \rangle(t_0) &= 2 \sum_{m=0}^{\infty} \int_{-0}^{t_0} (m+1) w_m(t) dt - \langle m \rangle = 2 \sum_{m=0}^n m + 2(n+1)P_{+1}(t_0) - \langle m \rangle = \\ &= n^2 + n + 2(n+1)P_{+1}(t_0) - n - P_{+1}(t_0) = n^2 + 2nP_{+1}(t_0) + P_{+1}(t_0). \end{aligned}$$

Тогда дисперсия для процесса с фиксированными точками оказывается невозрастающей периодической функцией от t_0

$$\sigma_m^2 = n^2 + 2nP_{+1}(t_0) + P_{+1}(t_0) - n^2 - P_{+1}^2(t_0) - 2nP_{+1}(t_0) = P_{+1}(t_0) - P_{+1}^2(t_0).$$

Видим, что дисперсия этого процесса не возрастает с течением времени.

6.5 Обновляемый процесс (процесс восстановления)

Обновляемый процесс характеризуется независимыми одинаково распределенными интервалами между соседними импульсами. В случае обновляемого процесса удобно воспользоваться формулами с характеристической функцией (34) и поменять местами суммирование и интегрирование. Но тогда бесконечный ряд характеристических функций будет расходиться при ω и, соответственно, $C(0) = 1$. Чтобы избежать расходимости представим распределения вероятностей в следующем виде

$$w_m(t) \equiv \lim_{\alpha \rightarrow 0} w_m(t)e^{-\alpha t}.$$

Тогда характеристическая функция представляется в виде $|C_{\vartheta}^m(\omega + i\alpha)| < 1$, и для среднего числа импульсов получаем

$$\begin{aligned} \langle m \rangle(t_0) &= \frac{1}{2\pi} \lim_{\alpha \rightarrow 0} \int_{-0}^{t_0} \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} C_{\vartheta}^m(\omega + i\alpha) e^{-i\omega t} d\omega dt = \\ &= \frac{1}{2\pi} \lim_{\alpha \rightarrow 0} \int_{-0}^{t_0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-i\omega t}}{1 - C_{\vartheta}(\omega + i\alpha)} d\omega dt. \end{aligned}$$

Вклад в интеграл дают только малые частоты, поэтому можно разложить характеристическую функцию в ряд

$$C_{\vartheta}(\omega) = 1 + i(\omega + i\alpha)T - \frac{(\omega + i\alpha)^2 \langle \vartheta^2 \rangle}{2} + \dots$$

Подставляя ее в выражение для среднего числа импульсов, получаем

$$\langle m \rangle(t_0) = \frac{1}{2\pi} \lim_{\alpha \rightarrow 0} \int_{-0}^{t_0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-i\omega t}}{-i(\omega + i\alpha)T + \frac{(\omega + i\alpha)^2 \langle \vartheta^2 \rangle}{2}} d\omega dt.$$

Считая второе слагаемое в знаменателе малым по сравнению с первым, раскладываем дробь в ряд

$$\langle m \rangle(t_0) = \frac{1}{2\pi} \lim_{\alpha \rightarrow 0} \int_{-0}^{t_0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-i\omega t}}{-i(\omega + i\alpha)T} \left(1 - \frac{i(\omega + i\alpha) \langle \vartheta^2 \rangle}{2T} \right) d\omega dt =$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{2\pi} \lim_{\alpha \rightarrow 0} \int_{-0}^{t_0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-i\omega t}}{-i(\omega + i\alpha)T} d\omega dt + \\
&+ \frac{1}{2\pi} \int_{-0}^{t_0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-i\omega t} \langle \vartheta^2 \rangle}{2T^2} d\omega dt = \int_{-0}^{t_0} \left(\frac{1}{T} + \frac{\langle \vartheta^2 \rangle}{2T^2} \delta(t) \right) dt = \frac{t_0}{T} + \frac{\langle \vartheta^2 \rangle}{2T^2}.
\end{aligned}$$

Для второго момента аналогично получаем

$$\begin{aligned}
\langle m^2 \rangle(t_0) &= \frac{1}{\pi} \lim_{\alpha \rightarrow 0} \int_{-0}^{t_0} \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} (m+1) C_{\vartheta}^m(\omega + i\alpha) e^{-i\omega t} d\omega dt - \langle m \rangle = \\
&= \frac{1}{\pi} \lim_{\alpha \rightarrow 0} \int_{-0}^{t_0} \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\partial}{\partial C_{\vartheta}} C_{\vartheta}^{m+1} e^{-i\omega t} d\omega dt - \langle m \rangle = \\
&= \frac{1}{\pi} \lim_{\alpha \rightarrow 0} \int_{-0}^{t_0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial C_{\vartheta}} \left(\frac{C_{\vartheta} e^{-i\omega t}}{1 - C_{\vartheta}} \right) d\omega dt - \langle m \rangle \\
&= \frac{1}{\pi} \lim_{\alpha \rightarrow 0} \int_{-0}^{t_0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-i\omega t}}{(1 - C_{\vartheta}((\omega + i\alpha))^2)} d\omega dt - \langle m \rangle \\
&= \frac{1}{\pi} \lim_{\alpha \rightarrow 0} \int_{-0}^{t_0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-i\omega t}}{\left(-i(\omega + i\alpha)T + \frac{(\omega + i\alpha)^2 \langle \vartheta^2 \rangle}{2} \right)^2} d\omega dt - \langle m \rangle \\
&= \frac{1}{\pi} \lim_{\alpha \rightarrow 0} \int_{-0}^{t_0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-i\omega t}}{-(\omega + i\alpha)^2 T^2 - i(\omega + i\alpha)^3 T \langle \vartheta^2 \rangle} d\omega dt - \langle m \rangle \\
&= -\frac{1}{\pi} \lim_{\alpha \rightarrow 0} \int_{-0}^{t_0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-i\omega t}}{(\omega + i\alpha)^2 T^2} \left(1 - \frac{i(\omega + i\alpha) \langle \vartheta^2 \rangle}{T} \right) d\omega dt - \langle m \rangle \\
&= 2 \int_{-0}^{t_0} \left(\frac{t}{T^2} + \frac{\langle \vartheta^2 \rangle}{T^3} \right) dt - \langle m \rangle = \frac{t_0^2}{T^2} + \frac{2\langle \vartheta^2 \rangle t_0}{T^3} - \frac{t_0}{T}.
\end{aligned}$$

Дисперсия для обновляемого процесса линейно возрастает со временем и определяется дисперсией для расстояния между соседними импульсами

$$\sigma_m^2 = \frac{t_0^2}{T^2} + \frac{2\langle \vartheta^2 \rangle t_0}{T^3} - \frac{t_0}{T} - \frac{t_0^2}{T^2} - \frac{\langle \vartheta^2 \rangle t_0}{T^3} = \frac{t_0}{T^3} (\langle \vartheta^2 \rangle - T^2) = \frac{\sigma_{\vartheta}^2 t_0}{T^3}.$$

Это основное, но не единственное отличие обновляемого процесса от процесса с фиксированными точками.

6.6 Связь вероятности появления импульса в единицу времени и распределения для интервалов между импульсами

Вероятность появления импульса в единицу времени после окончания рефрактерного времени $p(t)$. Введем разбиение шкалы времени на шаги и дискретное время $t_m = m\Delta t$. Тогда вероятность того, что импульс появится на m -ом интервале $p(t_m)\Delta t$. Вероятность, что между импульсами будет ровно m интервалов, будет определяться вероятностью того, что их не было на m интервалах, и вероятностью того, что потом на $m + 1$ -м импульс появился

$$\begin{aligned} P_m &= p(t_{m+1})\Delta t \prod_{k=1}^m (1-p(t_k)\Delta t) = p(t_{m+1})\Delta t \exp\left(\ln\left[\prod_{k=1}^m (1-p(t_k)\Delta t)\right]\right) = \\ &= p(t_{m+1})\Delta t \exp\left(\sum_{k=1}^m \ln(1-p(t_k)\Delta t)\right). \end{aligned}$$

В пределе бесконечно малых интервалов Δt используем разложение логарифма, переходим от суммирования к интегрированию и получаем распределение для интервалов между импульсами

$$w(\vartheta) = p(\vartheta) \exp\left(-\int_0^{\vartheta} p(t) dt\right).$$

Для случая постоянной $p(t_m)$ получится экспоненциальное распределение и, соответственно, пуассоновский процесс. Можно сказать, что субпуассоновской статистике соответствует распределение для интервалов более компактное, чем экспоненциальное, а суперпуассоновской — размазанное по осям.

Процесс с распределением Парето между импульсами

Это распределение знаменито своими тяжелыми хвостами

$$w(\vartheta) = \frac{n\vartheta_0^n}{\vartheta^{n+1}} \theta(\vartheta - \vartheta_0).$$

Основные характеристики —

$$m_1 = \frac{n\vartheta_0}{n-1}, \quad \sigma^2 = \left(\frac{\vartheta_0}{n-1}\right)^2 \frac{n}{n-2}.$$

Периодический предел достигается при $n \rightarrow \infty$. При $2 < n < 1 + \sqrt{2}$ будет суперпуассоновская статистика, иначе — субпуассоновская. Это распределение соответствует случаю, когда вероятность появления импульса в единицу времени убывает как $p(t) = n/t$.

Процесс со сдвинутым распределением Вейбулла (Трехпараметрическим) между импульсами

Это распределение получается из экспоненциального заменой $x = [(\vartheta - \vartheta_0)/\alpha]^n$

$$w(\vartheta) = \frac{n}{\alpha} \left(\frac{\vartheta - \vartheta_0}{\alpha} \right)^{n-1} \exp \left(- \left[\frac{\vartheta - \vartheta_0}{\alpha} \right]^n \right) \theta(\vartheta - \vartheta_0).$$

Основные характеристики

$$m_1 = \alpha \Gamma \left(1 + \frac{1}{n} \right) + \vartheta_0, \quad \sigma^2 = \alpha^2 \left[\Gamma \left(1 + \frac{2}{n} \right) - \Gamma^2 \left(1 + \frac{1}{n} \right) \right].$$

Пуассоновский предел получается при $n = 1, \vartheta_0 = 0$. Периодический предел — при $n \rightarrow \infty$. При $0 < n < 1$ будет суперпуассоновская статистика, иначе — субпуассоновская. Это распределение соответствует случаю, когда вероятность появления импульса в единицу времени растет как $p(t) = nt^{n-1}/\alpha^n$.

7 Корреляционные свойства импульсных процессов и точечных структур

Ибо время, столкнувшись с памятью,
узнает о своем бесправии.

И. Бродский

Важной характеристикой импульсного процесса является его автокорреляционная функция. Она показывает, насколько значение случайной величины в определенный момент времени связано с ее значениями в предыдущие моменты времени. Время корреляции — это время, в течение которого система "помнит" свои предыдущие состояния. Чем меньше это время, тем более случайным является этот процесс. Самым случайным является дельта-коррелированный процесс, то есть процесс с нулевым временем корреляции. Это простейшая модель случайного процесса. С другой стороны, детерминированный процесс с бесконечным временем корреляции — тоже достаточно простая модель. Самыми сложными для описания являются процессы с конечным временем корреляции.

7.1 Корреляционная функция импульсного процесса

Рассмотрим импульсный процесс $\eta(t)$ (32) с положительными одинаковыми δ -импульсами. Пусть нам даны плотности распределений вероятностей $w_n(t)$ для интервалов между n -м импульсом и нулевым. Эти распределения так же являются условными распределениями вероятности получить n -й импульс в момент $t' + t$, если в момент времени t' был нулевой. При этом $w_0(t) = \delta(t)$.

Матожидание процесса определяется амплитудой и средним периодом. Оно может быть получено из, например, усреднения по времени

$$\langle \eta(t) \rangle = \frac{f}{\tilde{T}} \int_0^{\tilde{T}} \sum_m \delta(t - t_m) dt = \frac{fN}{\tilde{T}} = \frac{f}{T},$$

здесь учтено, что при большом интервале \tilde{T} число попавших в него импульсов стремится к $N = \tilde{T}/T$. Отсюда можно заключить, что плотность распределения для времени появления какого либо импульса $w(t) = 1/T$.

Корреляционная функция может быть разделена на три части в зависимости от знака $\tau = t'' - t'$

$$K_\eta(\tau) = K^+(\tau) + K^-(\tau) + K_0(\tau) - \langle \eta(t) \rangle^2.$$

Слагаемое для $\tau = t'' - t' > 0$ запишется в виде

$$K^+(\tau) = \langle \eta(t)\eta(t + \tau) \rangle.$$

Эта функция описывает совпадение некоторого импульса из сдвинутой на τ последовательности с импульсами не сдвинутой последовательности. Подставляя процесс $\eta(t)$, получаем

$$K^+(\tau) = f^2 \int \int \sum_{n=0, m=1} \delta(t' - t_n) \delta(t'' - t_m) w(t', t'') dt' dt'',$$

где совместная плотность распределения вероятностей обнаружить импульс в момент времени t' для одного процесса и в момент времени t'' для второго может быть представлена через условную плотность

$$w(t', t'') = \bar{w}(t') w(t''/t') = \frac{1}{T} w(t'' - t').$$

Здесь учтен тот факт, что процесс стационарный. Тогда мы можем выбрать некоторый произвольный нулевой импульс и рассмотреть корреляции с ним. Этот нулевой импульс распределен равномерно на интервале T . Если мы учтем совпадение этого импульса с другими, мы получим корреляционную функцию. Подставляем

$$K^+(\tau) = \frac{f^2}{T} \int \int \sum_m \delta(t' - t_0) \delta(t'' - t_m) w(t'' - t') dt' dt''.$$

Интегрируя по t' получаем

$$K^+(\tau) = \frac{f^2}{T} \int \sum_m \delta(t'' - t_m) w(t'' - t_0) dt''.$$

Далее, интегрируем по t'' и учитываем, что условное распределение для разности времен импульсов и есть данное нам распределение $w_n(t)$,

$$K^+(\tau) = \frac{f^2}{T} \sum_m w(t_m - t_0) = \frac{f^2}{T} \sum_m w_m(\tau).$$

Аналогично выглядит корреляционная функция для $\tau < 0$

$$K^-(\tau) = \frac{f^2}{T} \sum_m w_m^-(\tau).$$

Корреляционная функция в нуле описывает совпадение импульса с самим собой и может быть получена аналогично $K^+(\tau)$ если взять $m = 0$

$$K_0(\tau) = \frac{f^2}{T} w_0(\tau) = \frac{f^2}{T} \delta(\tau).$$

Собирая вместе все слагаемые, подставляем в общее выражение для корреляционной функции и получаем

$$K_\eta(\tau) = \frac{f^2}{T} \left(\delta(\tau) + \sum_{n=1}^{\infty} [w_n(\tau) + w_n^-(\tau)] - \frac{1}{T} \right).$$

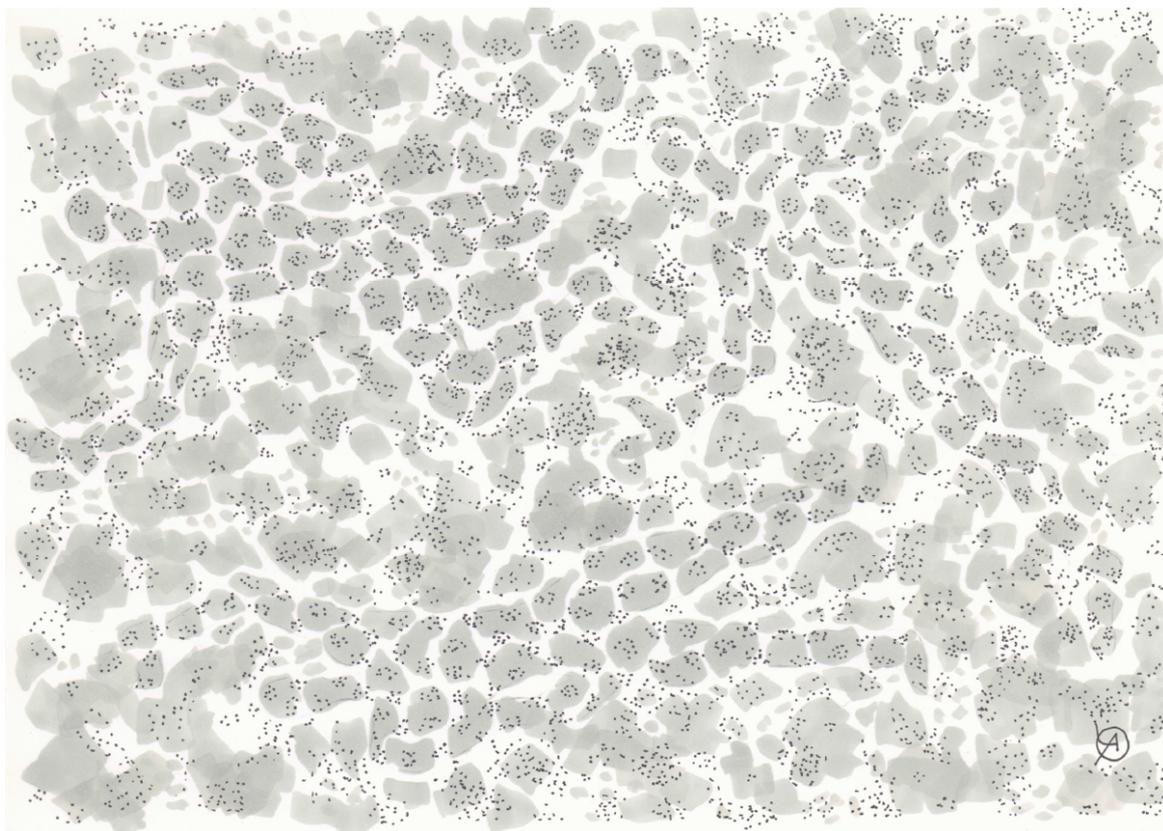


Рис. 28: Искусственная случайность рисунка на камуфляже более коррелирована чем на земле, поэтому можно увидеть десантников. Сколько их?

Мы выяснили, что для процесса с фиксированными точками распределения интервалов не расплываются с увеличением n , а только сдвигаются вдоль оси. Поэтому корреляционная функция будет неубывающей периодической функцией.

Для процесса обновления при больших временах в сумме ненулевой вклад будут давать распределения с большими n , а эти распределения, согласно ЦПТ, можно заменить гауссовскими или гамма-распределениями. Сумма этих распределений дает $1/T$, с учетом разложения экспоненты в ряд, и сокращается с последним слагаемым. Таким образом, корреляционная функция процесса восстановления на больших временах убывает и стремится к нулю.

Надо отметить, что то, что нам на глаз кажется случайным, на самом деле часто имеет отрицательные корреляции и является квазипериодическим. Таким образом, создание случайных структур и процессов лучше доверить компьютеру. Например, дизайнер создает камуфляжный костюм со случайными пятнами. На самом деле пятна получатся примерно близкими по размеру и по расстояниям между ними. На рисунке показаны десантники в маск-халатах, ползущие по осенним листьям. Попробуйте понять, сколько их, учитывая, что рисунок на их костюмах

сделан человеком.

7.2 Спектральная плотность импульсного процесса

С помощью Фурье-преобразования корреляционной функции получаем спектральную плотность через характеристические функции распределений

$$S_\eta(\omega) = \frac{f^2}{T} \left[1 + \sum_{m=1}^{\infty} [C_m(\omega) + C_m(-\omega)] \right] - \frac{f^2}{T^2} \delta(\omega).$$

Для процесса с фиксированными точками характеристические функции для разных интервалов отличаются только экспонентой $\exp(inT\omega)$, их суммирование приведет к появлению дельта-функций спектре.

Для процесса восстановления введем процесс $\zeta(t) = \eta(t) - \langle \eta \rangle$, описывающий флуктуации процесса $\eta(t)$. Тогда обозначим $S_\eta = S_\zeta + f_0 \delta(\omega)/T^2$, где S_ζ — спектральная плотность процессов $\zeta(t)$ и $\eta(t)$. Пользуясь общей формулой для спектральной плотности и тем, что $C_m(\omega) = C^m(\omega)$ для независимых и одинаково распределенных интервалов между импульсами, суммируем геометрические прогрессии и получаем

$$S_\eta(\omega) = \frac{f^2}{T} \frac{1 - |C(\omega)|^2}{|1 - C(\omega)|^2}, \quad (35)$$

где $C(\omega)$ — характеристическая функция для интервалов между двумя соседними импульсами. Она обладает свойством $S_\eta(\omega) \rightarrow 1$ при $\omega \rightarrow \infty$. Важная характеристика шума, которая называется интенсивностью шума

$$S_\eta(0) = \frac{f^2 \sigma_\vartheta^2}{T^3}. \quad (36)$$

Максимально периодический предел $\sigma_\vartheta^2/T \rightarrow 0$ тоже будет одинаковым для всех обновляемых процессов

$$S_\eta(\omega) = \frac{f^2 \sigma_\vartheta^2 \omega^2}{2T(1 - \cos(T\omega))}. \quad (37)$$

7.3 Время корреляции обновляемого процесса

Время корреляции обновляемого процесса должно обладать следующими свойствами: оно равно нулю при Пуассоновском процессе (отсутствие корреляций), оно стремится к среднеквадратичному отклонению при суперпуассоновском процессе (положительные корреляции импульсов), оно

стремится к бесконечности в периодическом пределе (отрицательные корреляции импульсов). Кроме того, оно должно соответствовать визуальной оценке заметного убывания на графике корреляционной функции.

В литературе можно встретить различные формулы для вычисления времени корреляции

$$\tau_{c1} = \frac{1}{\sqrt{\sigma^2}} \int_0^\infty K(\tau) d\tau \quad \tau_{c2} = \frac{1}{\sqrt{\sigma^2}} \int_0^\infty |K(\tau)| d\tau \quad \tau_{c3} = \frac{1}{\sigma^2} \int_0^\infty K^2(\tau) d\tau.$$

Первое из этих определений не годится в случае немонотонного убывания корреляционной функции. Второе и третье определения почти никогда не дают возможности аналитического вычисления времени корреляции и ясной интерпретации его зависимости от параметров. То же самое можно сказать и про случай, когда время корреляции определяется интегралом не самой корреляционной функции, а ее огибающей.

Кроме того, для импульсного процесса, задаваемого δ -импульсами $\sigma^2 = K(0)$ является неопределенной, поскольку корреляционная функция в нуле определяется δ -функцией. Знаменатель в этих формулах нужно заменить на максимальное значение $M = K_{\max}(\tau \neq 0)$.

Рассмотрим сначала обновляемые процессы, задаваемые распределениями интервалов, которые могут становиться экспоненциальными при определенном наборе значений параметров. Тогда наша формула должна учитывать, что в этом Пуассоновском случае время корреляции равно нулю. Для оценки времени корреляции можно предложить следующую полуфеноменологическую формулу с учетом (36)

$$\tau_c^P = \frac{T |\sqrt{\sigma_\vartheta^2} - T|}{\sqrt{\sigma_\vartheta^2}} = \frac{|\sqrt{S(0)T^3} - f|}{\sqrt{S(0)T}}.$$

Вторая форма записи времени корреляции годится так же и для процессов с фиксированными точками, поскольку в этом случае время корреляции бесконечно, и спектральная плотность в нуле равна нулю.

Для обновляемых процессов, где Пуассоновский случай невозможен, вероятность импульса в единицу времени не является константой, а является функцией относительно предыдущего импульса. Это значит, что информация о предыдущем импульсе сохраняется до тех пор, пока не возникнет следующий импульс. Таким образом, время корреляции должно быть больше T

$$\tau_c = \max[T, \tau_c^P].$$

Соответствие этого определения самому общему свойству времени корреляции, а именно тому, что за это время корреляционная функция убы-

вает заметным образом, можно проверить на примере тех процессов, для которых корреляционная функция вычисляется аналитически.

Величина $\Delta\omega = 2\pi/\tau$ будет характеризовать ширину главного пика в спектральной плотности. Наиболее коррелированный процесс с большим временем корреляции будет иметь спектральную плотность с узкими пиками.

7.4 Выбор между моделями процессов восстановления (обновляемых) и с фиксированными точками

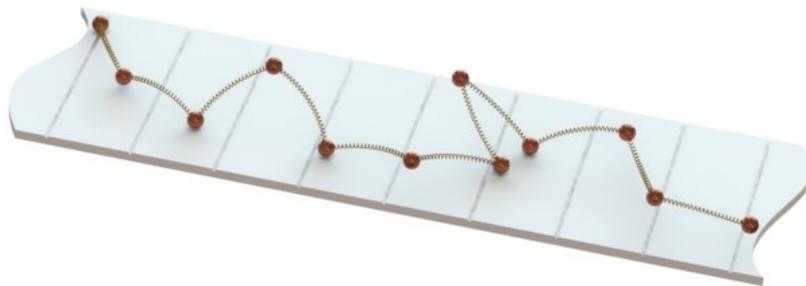


Рис. 29: Деформированный в результате теплового движения полимер на поверхности

Следующие квазипериодические точечные структуры разделите, пожалуйста, на те, которые лучше моделировать как процесс восстановления, и те, для которых больше подходит модель фиксированных точек:

1. Положение атомов кристалла с учетом теплового движения
2. Координаты атомов вдоль оси одномерного полимера, находящегося на гладкой поверхности
3. Центры ячеек наноструктуры на рисунке из предыдущей лекции
4. Точки вдоль траектории броуновской частицы, соответствующие каждому пятому углу (изгибу) траектории
5. Следы от выступа на колесе, прокатившемся по песку, смещенные затем следами прошедших людей
6. Узлы паутины вдоль радиальной линии
7. Расположение броуновских частиц в периодическом по пространству потенциале
8. На выставке собак хозяева построились в линию вдоль оси строго по разметке на одинаковом расстоянии. Собаки бегают на достаточно

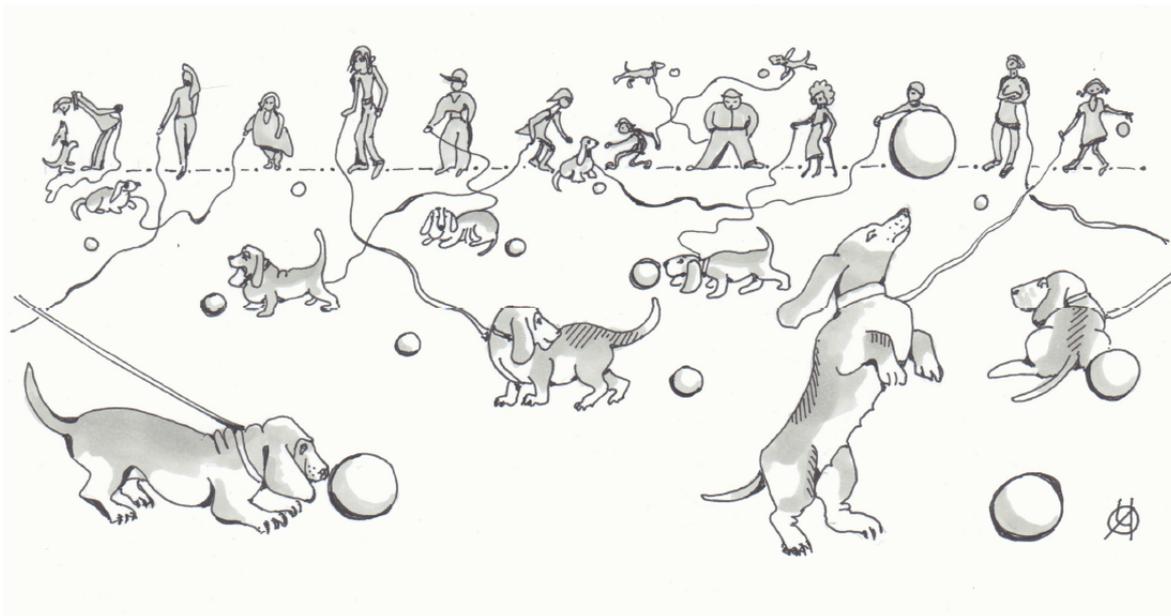


Рис. 30: Строго выстроенные в шеренгу хозяева держат своих собак на длинных поводках

длинных поводках так, что структура их координат вдоль этой оси является одномерной суперпуассоновской структурой

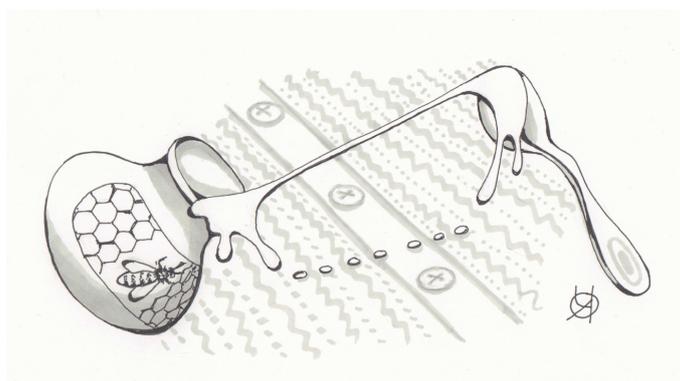


Рис. 31: Капли меда на шершавой поверхности

9. Между банкой и ложкой растянулась тонкая нить меда. Она упала на шершавую поверхность и распалась на отдельные мелкие капли за счет поверхностного натяжения, лежащие на одной прямой
10. На рисунке две структуры из точек. Одна получена путем разбиения листа на клеточки. Каждая точка ставится в произвольном месте в клетке. Вторая структура получена без клеточек с примерно таким же распределением расстояний между точками. Какой из них является структура А
11. На том же рисунке структура В

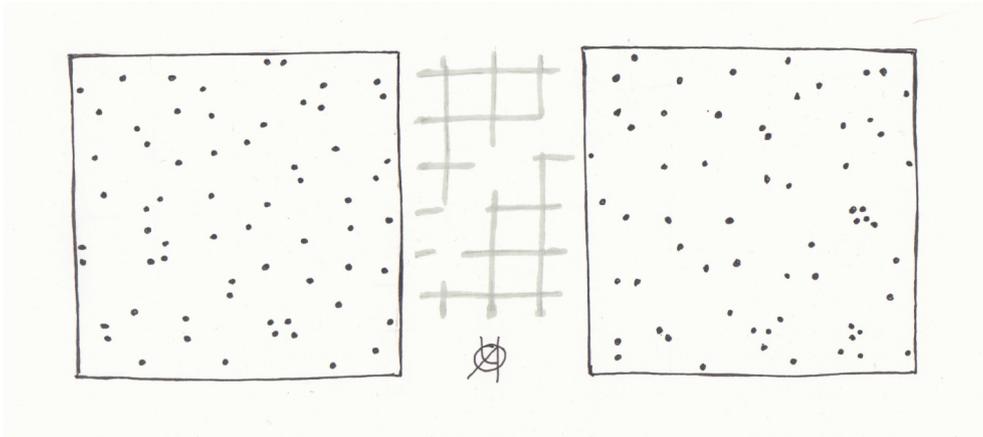


Рис. 32: Структуры из 64 случайных точек. Одна из них сделана по клеточкам, другая — без них. Левая — А, правая — В

7.5 Различные виды распределений интервалов обновляемого процесса

Рассмотрим примеры импульсных процессов восстановления, для которых спектральная плотность может быть вычислена аналитически. Можно проверить, что эти результаты соответствуют общим свойствам спектральных плотностей. На рисунках показаны графики для случаев квазипуассоновского, когда $S(0) = 1$, суперпуассоновского $S(0) > 1$ и субпуассоновского $S(0) < 1$ процессов. Видно, что субпуассоновский процесс является квазипериодическим.

7.5.1 Процесс с гамма-распределением для интервалов между импульсами

Рассмотрим импульсный пуассоновский процесс $\eta(t)$ с гамма-распределением (1) для интервалов между импульсами. Если среднее время между двумя последовательными регистрациями частиц $T = \alpha n$ будет фиксированным, то можно регулировать периодичность процесса, меняя n . Гамма-распределение соответствует случаю, если мы выбираем каждый n -ый импульс из пуассоновской последовательности импульсов, когда вероятность появления импульса в единицу времени $p(t) = 1/\alpha$. Например, если счетчик частиц срабатывает только после того, как в него попадут n случайно летящих частиц. Или вот более наглядный пример: корова делает взмахи хвостом с некоторой нестрогой периодичностью. Возможно, дело в том, что смахивать $n - 1$ сидящих на ней мух ей лень. Но, когда их становится уже n штук, они ее так раздражают, что она делает взмах хвостом. В результате получается субпуассоновский процесс. Аналогично с травинками разной высоты. Если каждая пятая выше других, то для них уже наблюдается некоторая периодичность.

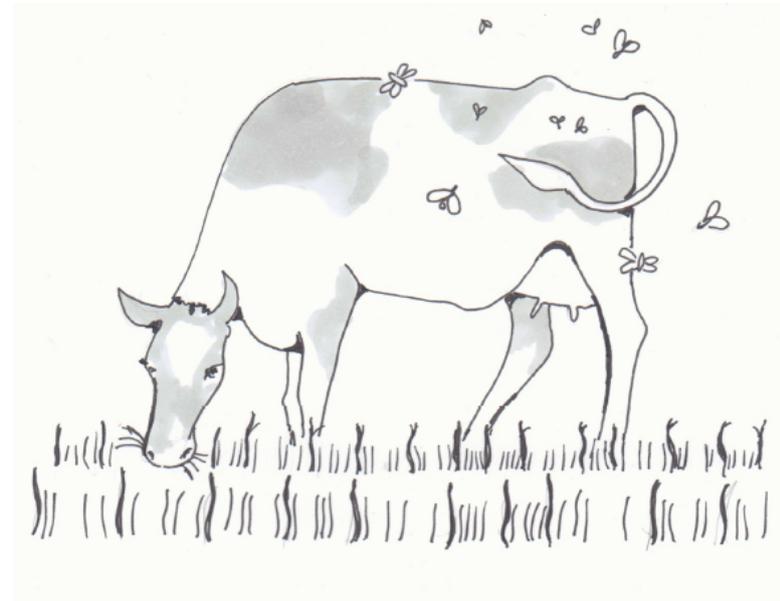


Рис. 33: Квазипериодические взмахи хвостом и высокие травинки

Спектральная плотность для этого процесса, согласно (35),

$$S(\omega) = \frac{f^2}{T} \frac{(1 + \alpha^2 \omega^2)^n - 1}{(1 + \alpha^2 \omega^2)^n + 1 - 2(1 + \alpha^2 \omega^2)^{n/2} \cos(n \arccos(1 + \alpha^2 \omega^2)^{-1/2})}.$$

Интенсивность тогда $S(\omega \rightarrow 0) = (f^2)/(Tn)$. Пуассоновский предел будет при $n = 1$, $S(\omega) = f^2/(T)$. Здесь нарисованы спектральные плот-

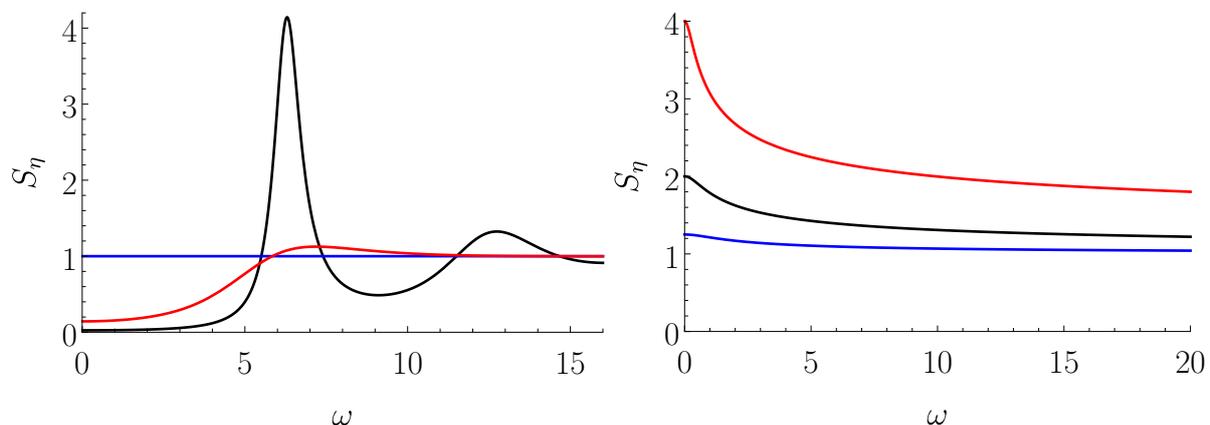


Рис. 34: Спектральная плотность для процесса с гамма-распределением для интервалов. Субпуассон $n = 40$, 7 и пуассон $n = 1$ (слева), суперпуассон $n = 0.5$, 0.2, 0.1 (справа)

ности для различных значений параметров порядка n . В таблице даны соответствующие времена корреляции τ и спектральные интервалы $\Delta\omega$. Определите, какому графику они соответствуют.

показатель формы n	время корреляции τ	ширина пика $\Delta\omega$
40	5.3	1.2
7	1.6	3.8
1	0	∞
0.8	0.1	60
0.5	0.2	21
0.25	0.5	13

Распределение для m интервалов будут тоже гамма-распределениями

$$w(t_m) = \frac{(t_m)^{nm-1}}{\Gamma(nm)\alpha^{nm}} \exp\left(-\frac{t_m}{\alpha}\right) \theta(t_m).$$

Моменты для времен появления m -го импульса $\langle t_m \rangle = Tm$, $\sigma_m^2 = m\sigma^2$. С помощью этих распределений можно построить корреляционную функцию и увидеть, что характерное время ее убывания будет примерно равно τ .

7.5.2 Процесс со сдвинутой половинкой косинуса

Рассмотрим импульсный обновляемый процесс $\eta(t)$ с параметром сдвига ϑ_0 , причем $\vartheta_0 - \alpha \leq \vartheta \leq \vartheta_0$,

$$w(\vartheta) = \frac{\pi}{2\alpha} \cos\left(\frac{\pi}{2\alpha}(-\vartheta + \vartheta_0)\right).$$

Среднее между двумя последовательными импульсами $T = m_1 = \vartheta_0 - \alpha + 2\alpha/\pi$, дисперсия $\sigma^2 = \left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^2 (\pi - 3)$.

Спектральная плотность, согласно (35),

$$S(\omega) = \frac{f^2}{T}$$

$$\frac{x^4 - 3x^2 + 2x \sin(\alpha\omega)}{2 + x^4 - x^2 - 2x \sin(\alpha\omega) - 2(1 - x^2) \cos(\vartheta_0\omega - \alpha\omega) + 2x(1 - x^2) \sin(\vartheta_0\omega)},$$

где $x = \frac{2\alpha\omega}{\pi}$.

7.5.3 Процесс с равномерным распределением

Рассмотрим импульсный обновляемый процесс $\eta(t)$ с параметром сдвига $\vartheta_0 = a$, причем $a \leq \vartheta \leq b$,

$$w(\vartheta) = \frac{1}{b - a}.$$

Среднее время между двумя последовательными импульсами $T = m_1 = (a + b)/2$, дисперсия $\sigma^2 = \frac{(b-a)^2}{12}$.

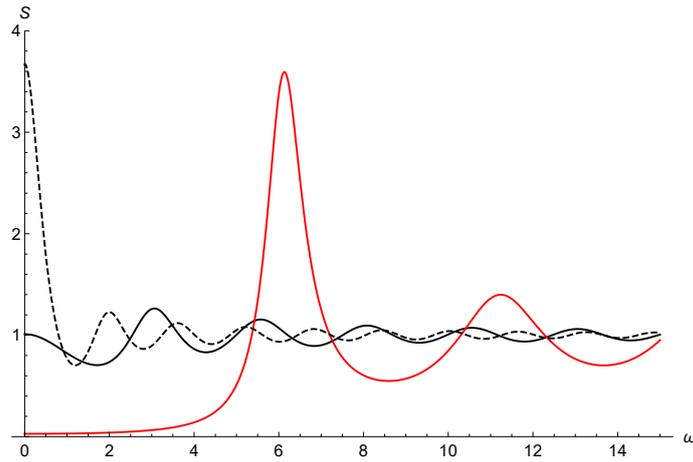


Рис. 35: Спектральная плотность импульсного процесса с распределением интервалов по сдвинутой половине косинуса

Спектральная плотность, согласно (35),

$$S(\omega) = \frac{f^2}{T} \frac{\omega^2(b-a)^2 - 2 + 2 \cos((b-a)\omega)}{\omega^2(b-a)^2 + 2 - 2 \cos((b-a)\omega) + 2\omega(b-a)(\sin(a\omega) - \sin(b\omega))}.$$

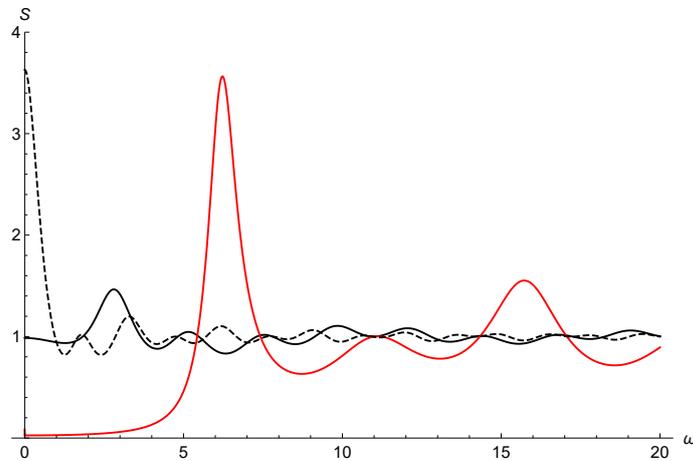


Рис. 36: Спектральная плотность импульсного процесса с равномерным распределением интервалов

7.5.4 Процесс со сдвинутым косинусом на пьедестале

Рассмотрим импульсный обновляемый процесс $\eta(t)$ с параметром сдвига ϑ_0 , причем $\vartheta_0 - \alpha \leq \vartheta \leq \vartheta_0 + \alpha$,

$$w(\vartheta) = \frac{1}{2\alpha} \left(1 + \cos \left(\frac{\pi}{\alpha} (\vartheta - \vartheta_0) \right) \right).$$

Среднее между двумя последовательными импульсами $T = m_1 = \vartheta_0$, дисперсия $\sigma^2 = \alpha^2 \left(\frac{1}{3} - \frac{2}{\pi^2} \right)$. Плотность распределения запишется в виде

Спектральная плотность, согласно (35),

$$S(\omega) = \frac{f^2}{T} \frac{\omega^2 \alpha^2 (\pi^2 - \omega^2 \alpha^2)^2 - \pi^4 \sin^2(\omega \alpha)}{\omega^2 \alpha^2 (\pi^2 - \omega^2 \alpha^2)^2 + \pi^4 \sin^2(\omega \alpha) - 2\pi^2 \omega \alpha (\pi^2 - \omega^2 \alpha^2) \sin(\omega \alpha) \cos(\vartheta_0 \omega)}.$$

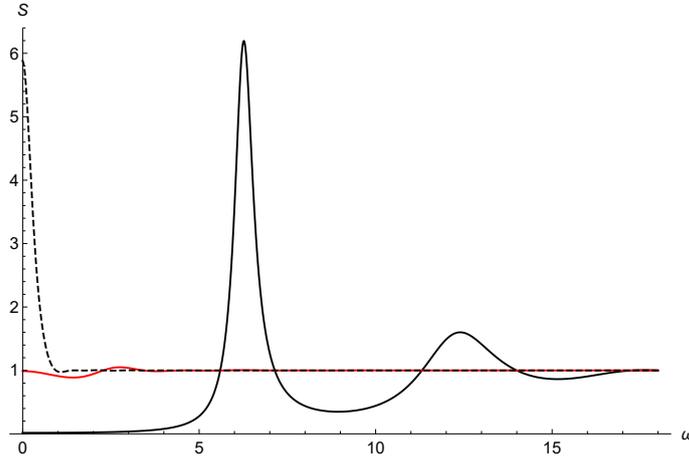


Рис. 37: Спектральная плотность импульсного процесса с распределением интервалов по косинусу на пьедестале

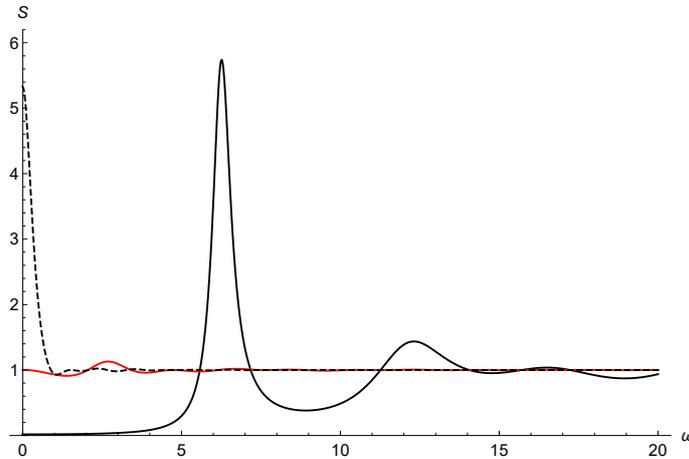


Рис. 38: Спектральная плотность импульсного процесса с распределением интервалов по косинусу

7.5.5 Процесс со сдвинутым косинусом

Рассмотрим импульсный обновляемый процесс $\eta(t)$ с параметром сдвига ϑ_0 , причем $\vartheta_0 - \alpha \leq \vartheta \leq \vartheta_0 + \alpha$,

$$w(\vartheta) = \frac{\pi}{4\alpha} \cos\left(\frac{\pi}{2\alpha}(\vartheta - \vartheta_0)\right).$$

Среднее между двумя последовательными импульсами $T = m_1 = \vartheta_0$, дисперсия $\sigma^2 = \alpha^2 \left(1 - \frac{8}{\pi^2}\right)$.

Спектральная плотность, согласно (35),

$$S(\omega) = \frac{f^2}{T}$$

$$\frac{(\pi^2 - 4\omega^2\alpha^2)^2 - \pi^4 \cos^2(\omega\alpha)}{(\pi^2 - 4\omega^2\alpha^2)^2 + \pi^4 \cos^2(\omega\alpha) - 2\pi^2(\pi^2 - 4\omega^2\alpha^2) \cos(\omega\alpha) \cos(\vartheta_0\omega)}.$$

Во всех случаях видим, что общие свойства обновляемых процессов проявляются в этих примерах. Время корреляции растет при удалении от пуассоновского процесса в сторону суб- или суперпуассоновского.

8 Динамический хаос

Не было гвоздя -- подкова пропала,
Не было подковы -- лошадь захромала,
Лошадь захромала -- командир убит,
Конница разбита, армия бежит!
Враг вступает в город, пленных не щадя,
Оттого, что в кузнице не было гвоздя!
английские детские стихи
в переводе С. Маршака

8.1 Фазовое пространство

Мы изучили много различных способов описания флуктуационных явлений, теперь попробуем обсудить причины флуктуаций. Эта задача может иметь не только научное, но и весьма практическое значение. В современном мире проблема изобретения хорошего генератора случайных чисел стоит очень остро. Численные методы не дают нужного качества. Генераторы, основанные на физических процессах (аппаратные генераторы) часто медленные и дорогие. Есть фирмы, которые за большие деньги продают элитные сорта качественных случайных чисел.

Рассмотрим механизмы возникновения необратимости, исходя из самых основ физики. Для этого придется вспомнить некоторые важные термины, описывающие системы в которых как раз-таки никаких случайностей изначально нет.

Динамическая система — множество элементов, для которого задана функциональная зависимость между временем и положением в фазовом пространстве каждого элемента системы.

Фазовое пространство — это пространство, на котором представлено множество всех состояний системы так, что каждому возможному состоянию системы соответствует точка фазового пространства. Движение описывается фазовой траекторией, которая отличается от обычной траектории.

Простым примером динамической системы является пружинный маятник, его еще называют гармоническим осциллятором. Ее фазовым пространством является плоскость (x, v) , где v — скорость точки с координатой x . Уравнения движения получаются из определения скорости и второго закона Ньютона

$$\frac{dx}{dt} = v, \quad \frac{dv}{dt} = -kx.$$

Фазовыми кривыми (траекториями) осциллятора являются эллипсы с центром в нуле. А если мы учтем силу трения, то получим скручивающуюся спираль.

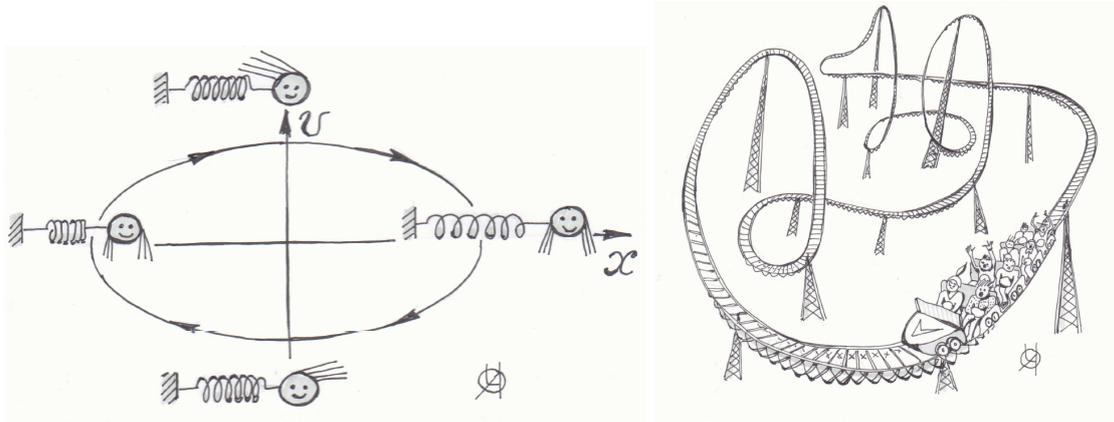


Рис. 39: Системы с двумерными фазовыми пространствами. Гармонический осциллятор (слева). Сложная траектория движения паровозика на американских горках соответствует одной степени свободы и, соответственно, двумерному фазовому пространству (справа)

8.1.1 Степени свободы

Число степеней свободы определяет минимальное количество независимых переменных (обобщенных координат), необходимых для полного описания состояния механической системы. Число степеней свободы находят с учетом наложенных связей. У осциллятора одна степень свободы.

Простейшая механическая система — материальная точка в трехмерном пространстве — обладает тремя степенями свободы, так как ее состояние полностью описывается тремя пространственными координатами. Абсолютно твердое тело обладает шестью степенями свободы, так как для полного описания положения такого тела достаточно задать три координаты центра масс и три угла, описывающих ориентацию тела.

В механике применяются обобщенные координаты (по числу степеней свободы) и соответствующие им обобщенные импульсы. Размерность фазового пространства, то есть количество координатных осей, будет вдвое больше, чем число степеней свободы. Динамика системы будет описываться уравнениями Гамильтона

$$\dot{p}_j = -\frac{\partial H}{\partial q_j}; \quad \dot{q}_j = \frac{\partial H}{\partial p_j}.$$

Правильно учитывать связи, чтобы минимизировать количество необходимых для задания состояния системы чисел, иногда непросто. Например, сложная траектория движения паровозика на американских горках не меняет того, что система имеет только одну степень свободы: координату вдоль рельсов. Фазовое пространство будет двумерным.

Удобно вычислить число степеней свободы хоккеистов в настольном хоккее. Всего 12 игроков, у каждого одна поступательная, одна вращательная степень свободы. Фазовое пространство получается 48-мерное. Можно добавить сюда еще две степени свободы двухмерного движения шайбы, получим 54.

Число степеней свободы зависит от типа движения, которое мы хотим описать. Например, цепочка из N звеньев имеет число степеней свободы $6N$, потому что каждое звено может немного сместиться и немного поворачиваться. Теперь представим, что мы раскрутили эту цепочку до больших скоростей и запустили катиться как колесо. Очевидно, она растянется из-за центробежной силы, и тогда ее движение можно будет описать как движение цельного твердого тела — колеса, а именно 6-ю степенями свободы.

Вопрос о числе степеней свободы некоторого объекта важен для компьютерной анимации и мультипликации. Учет каждой новой возможности, чтобы что-то гнулось, усложняет работу. Ограничение числа степеней свободы может определяться здесь не только физическими причинами, но и, например, правилами приличий. Например, пожилая преподавательница в длинной юбке может быть смоделирована гораздо меньшим числом степеней свободы. Или само строение персонажа позволяет отсечь лишние степени свободы как в Смешариках.

8.1.2 Модель Лотки-Вольтерры хищник — жертва

Применим всю эту терминологию к не физической задаче, а задаче из динамики популяций. Классическая модель Лотки-Вольтерры хищник — жертва.

Рассматривается закрытый ареал, в котором обитают два вида — травоядные (жертвы) и хищники. Предполагается, что животные не иммигрируют и не эмигрируют, и что еды для травоядных животных имеется с избытком. Тогда уравнение изменения количества жертв без учета хищников принимает вид: $\frac{dx}{dt} = \alpha x$, где α — коэффициент рождаемости жертв, x — величина популяции жертв, $\frac{dx}{dt}$ — скорость прироста популяции жертв.

Пока хищники не охотятся, они вымирают. Следовательно, уравнение

для численности хищников без учета численности жертв принимает вид: $\frac{dy}{dt} = -\gamma y$, где γ — коэффициент убыли хищников, y — величина популяции хищников, $\frac{dy}{dt}$ — скорость прироста популяции хищников.

При встречах хищников и жертв (частота которых прямо пропорциональна величине xy) происходит убийство жертв с коэффициентом β , сытые хищники способны к воспроизводству с коэффициентом δ . С учетом этого, система уравнений модели такова:

$$\begin{aligned}\frac{dx}{dt} &= \alpha x - \beta xy = (\alpha - \beta y)x \\ \frac{dy}{dt} &= -\gamma y + \delta xy = (\delta x - \gamma)y.\end{aligned}$$

Найдем стационарное решение системы. Тогда $\bar{x} > 0$, $\bar{y} > 0$ изменение численности популяции равно нулю. Следовательно,

$$\alpha\bar{x} - \beta\bar{x}\bar{y} = 0, \quad -\gamma\bar{y} + \delta\bar{x}\bar{y} = 0,$$

получаем, что стационарная точка системы, вокруг которой происходят колебания, определяется следующим образом $\bar{x} = \frac{\gamma}{\delta}$, $\bar{y} = \frac{\alpha}{\beta}$.

Далее можно рассмотреть малые линейные отклонения от этих средних значений, которые опишут колебания $\tilde{x} \ll \bar{x}$ и $\tilde{y} \ll \bar{y}$. Применяя их к уравнениям модели, получим ровно такие же уравнения, как для осциллятора:

$$\frac{d\tilde{x}}{dt} = -\frac{\beta\gamma}{\delta}\tilde{y}, \quad \frac{d\tilde{y}}{dt} = \frac{\delta\alpha}{\beta}\tilde{x}.$$

Значит, траектория в фазовом пространстве будет эллипсом. Период прохождения цикла $T = \frac{2\pi}{\sqrt{\alpha\gamma}}$.

Для больших отклонений от стационарного значения решение можно найти численно. Получатся тоже циклы, только не в форме эллипсов. Реальные данные о численности хищника и жертвы качественно подтверждают правильность этой модели. Есть колебания, и для хищника они отстают по фазе от колебаний для жертвы. Но они содержат больше случайных отклонений. Отчасти это объясняется тем, что есть еще много неучтенных параметров: пища для жертвы, которая может истощаться, внутривидовая конкуренция, изменения климата, охота человека, другие жертвы того же хищника и т.д. Для описания реалистичной ситуации нужно больше уравнений, и в современных моделях в них еще есть источник случайности.

Данная модель Лотки-Вольтерры активно применяется в химии для описания реакций на поверхности, являющейся катализатором превращения вещества А (жертва) в вещество В (хищник). При этом вещество

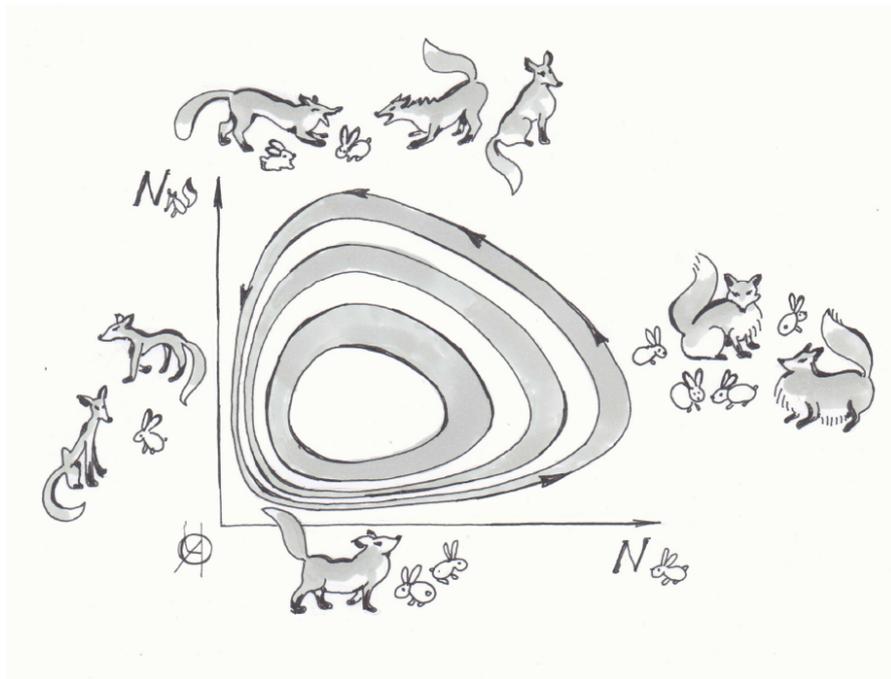


Рис. 40: Фазовое пространство модели хищник-жертва. У начала координатных осей мало и зайцев и лисиц, в результате зайцы размножаются, поэтому лисы тоже размножаются, а поедаемых зайцев становится меньше, это приводит к вымиранию лис, цикл возвращается в начальную точку

А адсорбируется на поверхность, а В, наоборот, может испаряться с поверхности. В результате на поверхности могут наблюдаться циклы смены концентраций веществ А и В.

Многие циклические процессы могут быть приближенно объяснены в рамках модели хищник-жертва. Например, можно наблюдать циклическое изменение популярности спецкурсов. Возможно, в роли жертвы выступает положительность отзывов в соцсетях. Чем лучше отзывы, тем больше людей выбирает спецкурс (хищник размножается), в результате там оказывается много людей, которым этот спецкурс не интересен, пришедших за компанию. Отзывы, очевидно, портятся (жертва истребляется хищником), в следующем году этот курс выбирают только те, кому он действительно нужен, отзывы начинают улучшаться.

Древнегреческий историк Геродот писал, что люди и народы живут по циклам: успех, гордыня, риск, поражение, раскаяние, успех и т.д. Эту схему тоже можно расписать в модели хищник-жертва, где жертвой будет реальный успех, а хищником — мнение о себе. Тогда риск — это поедание хищником жертвы.

Эта модель, как и гармонический осциллятор, описывает динамику системы в фазовом пространстве. Этот процесс является устойчивым. Если рассмотреть две системы с немного отличающимися начальными условиями, то они будут описываться близко расположенными циклами

ми, расстояние между траекториями в фазовом пространстве не будет увеличиваться.

8.2 Динамическая неустойчивость

Основной причиной возникновения случайности движения является динамическая неустойчивость. То есть неустойчивость (чувствительность) по отношению к начальным условиям и параметрам: малое изменение начального условия со временем приводит к сколь угодно большим изменениям динамики системы.

Например, состояние неустойчивого равновесия. Частица находится на вершине потенциального барьера. Небольшое отклонение от вершины приведет к тому, что она скатится вниз. Таким образом направление, в котором она скатится зависит от малого отклонения начальных условий. Это мы наблюдаем в доске Гальтона.

Другой пример, в известной игре Bad Balance на полушаре выстраиваются конструкции. Небольшой крен приводит к разрушению всего сооружения.

Хорошо известна неустойчивость полета прямоугольного параллелепипеда. Если попытаться подбросить и закрутить его относительно одной из осей симметрии. То вращение относительно самой длинной и самой короткой будет устойчивым. А вращение относительно средней — неустойчивым. Он начнет кувыркаться, и его будет трудно поймать. Можете проделать этот опыт с прямоугольной коробкой из под чего-нибудь. Это свойство используется в игральных кубиках, которые падают совершенно непредсказуемым образом.

В бильярдных системах с рассеивающей поверхностью можно наблюдать как две изначально близкие частицы, столкнувшись с выпуклой поверхностью, отражаются под расходящимися углами и начинают разбегаться. Так небольшая неточность в начальных условиях нарастает. Это приводит к полной потере информации о предыстории частицы, то есть к хаосу.

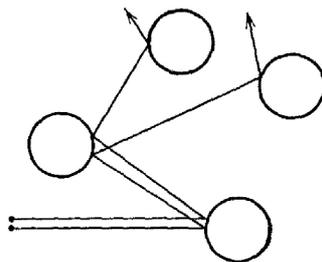


Рис. 41: Расхождение траекторий в газе Лоренца

В системах с динамической неустойчивостью малое воздействие может приводить к принципиально новому развитию событий. Интересно, какую судьбоносную роль играет в сказках маленькая мышка, в Репке или Курочке Рябе, например. И как тут не вспомнить евангельскую притчу о горчичном семени.

8.2.1 Показатель Ляпунова λ .

Расхождение траекторий в фазовом пространстве удобно описывать с помощью показателя Ляпунова. Представим, что расстояние между точками, которые изначально были близкими друг другу и двигались в одном направлении, увеличивается экспоненциально

$$f(t) = f(t_0) \exp(\lambda t).$$

Тогда показатель такой экспоненты и будет показателем Ляпунова

$$\lambda = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \ln \frac{f(t)}{f(t_0)}.$$

В примере с затухающими колебаниями гармонического осциллятора показатель будет отрицательным. Ведь там близкие в начальный момент траектории будут сближаться, пока не сойдутся в одной точке. Эта точка называется аттрактором, то есть областью притяжения всех траекторий. Мы рассмотрим в дальнейшем вычисление показателя Ляпунова для простого примера.

Но пока важно отметить, что этот показатель может быть положительным вдоль одних осей и отрицательным вдоль других. Тогда возникают структуры, которые называются странными аттракторами. Эта фрактальная структура является уже совсем хаотической.

Показатель Ляпунова служит мерой хаотичности системы, а именно наличие положительных показателей свидетельствует о хаотическом поведении системы.

8.2.2 Отображение Пуанкаре

Еще один способ определения, есть ли в системе хаос, называется отображением Пуанкаре. В n -мерном фазовом пространстве определенным образом строится поверхность размерности $n - 1$ (сечение Пуанкаре). Траектория, описывающая динамику системы будет пересекать эту поверхность в определенном направлении, создавая набор пронумерованных точек пересечения y_n . Причем, можно задать y_{n+1} как функцию от

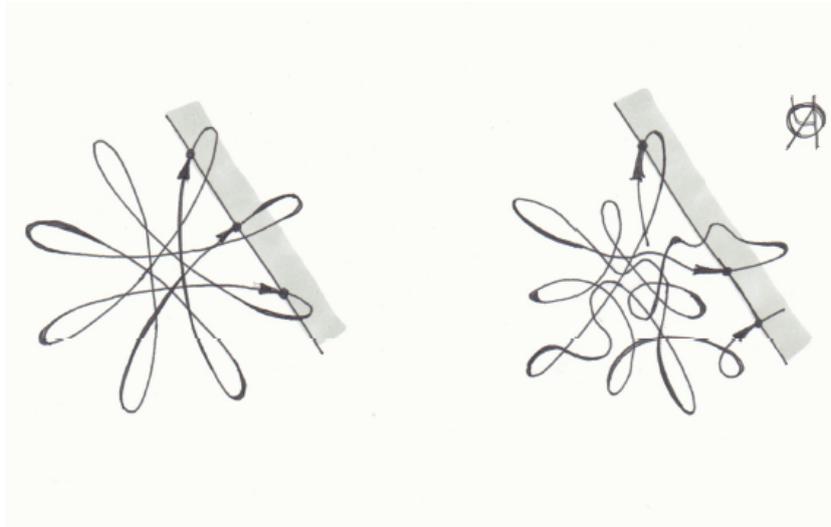


Рис. 42: Отображение Пуанкаре. Для циклического процесса (слева) сечение содержит конечное число точек, для хаотического (справа) — новые точки будут появляться с течением времени

y_n , это и будет отображением Пуанкаре в дискретном времени. При периодическом процессе (замкнутой траектории в фазовом пространстве) будет конечное число точек, а при хаотической динамике будут появляться новые точки. Например, для одномерного гармонического осциллятора и для системы Лотки-Вольтерры сечение Пуанкаре будет линией поперек траектории и будет содержать всего одну точку, отображающуюся в себя. А для затухающего колебания, это будет набор точек. В общем случае, вид отображения Пуанкаре зависит от того, как мы выбрали сечение, но критерий хаоса от этого не зависит.

8.2.3 Преобразование (отображение) пекаря

Преобразование состоит из однородного сжатия квадрата в 2 раза в вертикальном направлении и растяжения в горизонтальном. Далее правую половину следует отрезать и положить на левую. Так поступает пекарь, чтобы сделать слоеное тесто.

$$x_{n+1} = 2x_n, \quad y_{n+1} = \frac{1}{2}y_n \quad \text{при } 0 \leq x \leq \frac{1}{2}$$

$$x_{n+1} = 2x_n - 1, \quad y_{n+1} = \frac{1}{2}y_n + \frac{1}{2} \quad \text{при } \frac{1}{2} \leq x \leq 1$$

Таким образом расстояние между двумя точками вдоль оси X будет на каждом шагу возрастать вдвое. Расхождение траекторий $\Delta x(n) = 2^n \Delta x(0)$. Показатель Ляпунова $\lambda_x = \ln 2$.

Представим себе две точки вблизи границы разреза по разные стороны от нее. Расстояние между ними может быть очень малым, но на следующем шаге они окажутся далеко друг от друга. То есть, происходит

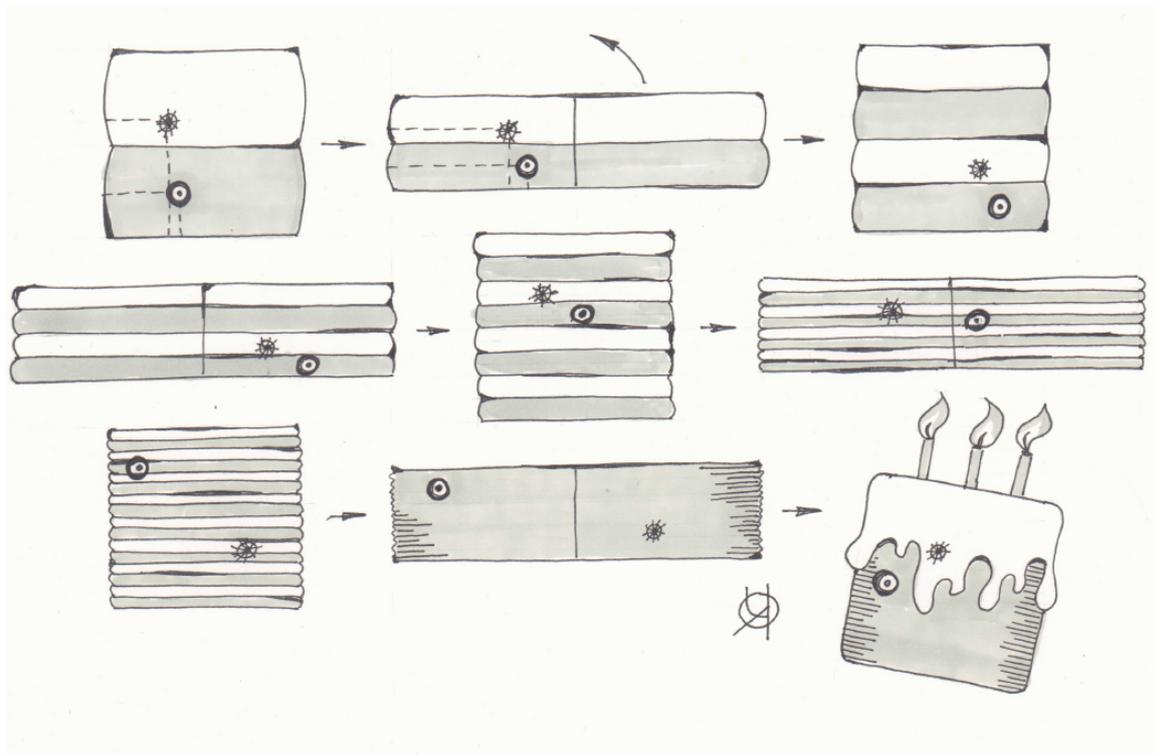


Рис. 43: Отображение двух точек при преобразовании пекаря

разбегание траекторий. Точку, где расходятся две траектории называют точкой бифуркации. Как мы поняли, это расхождение вызвано неустойчивостью состояния. Можно сказать, что в этой точке происходит качественное изменение системы. Например, фазовый переход или развилка дорог, русла реки, ходов в лабиринте.

Во многих случаях непредсказуемость того, по какому из путей пойдет система, и является причиной возникновения хаоса. Одной из самых убедительных моделей развития чего-либо является ветвящаяся структура, состоящая из каскада различных бифуркаций. Ветвящиеся структуры помогают в классификации многих важных понятий, часто просто красивы и применяются в дизайне.

Вспомним еще задачу Улама (14). Мы считали, что это дискретный марковский процесс. Здесь случайность связана с дискретностью скорости стенки, при гармоническом движении стенки такого эффекта не будет, потому что движение частицы не будет хаотическим. Нужна дискретность движения. Действительно, две частицы, начавшие движение с близкими начальными скоростями и координатами могут разойтись только в том случае, если одна из них столкнется, например, с приближающейся стенкой, а вторая — уже с уходящей. Это будет бифуркацией.

8.2.4 Перемешивание

Перемешивание — это свойство системы "забывать" информацию о начальном условии с течением времени.

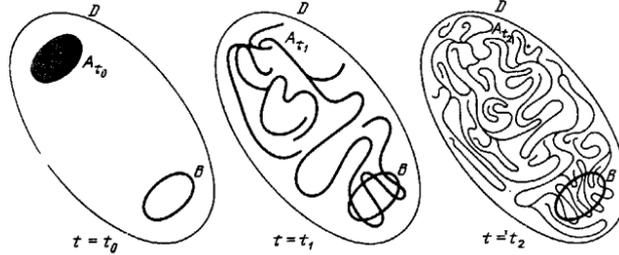


Рис. 2.16. Эволюция области A в случае перемешивания

Рис. 44: Перемешивание

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\mu(A_t \cap B)}{\mu(B)} = \mu(A).$$

8.3 Осциллятор Неймарка

Рассмотрим одномерный осциллятор с отрицательным трением, которое и является причиной динамической неустойчивости. Траектория в фазовом пространстве является раскручивающейся спиралью. В момент, когда осциллятор проходит точку равновесия ($x = 0$) при скорости большей некоторого критического значения a , происходит удар, снижающий скорость на величину h . Здесь a — точка бифуркации в пространстве скоростей. Уравнение движения

$$\ddot{x} - 2\delta\dot{x} + (1 + \delta^2)x = -h\theta(\dot{x} - a)\dot{x}\delta(x).$$

Решение уравнения

$$\begin{aligned} x &= A(t) \sin(\phi) & \dot{x} \equiv y &= A(t)\delta \sin(\phi) + A(t) \cos(\phi) \\ A(t) &= A_0 \exp(\delta t) & \phi &= \phi_0 + t. \end{aligned}$$

Увеличение амплитуды за период колебаний:

$$\gamma = \exp(2\pi\delta).$$

Можно ввести дискретный процесс преобразования оси скоростей за полпериода в момент прохождения положения равновесия

$$y_{n+1} = -\gamma^{1/2}y_n - h\theta(-\gamma^{1/2}y_n - a).$$

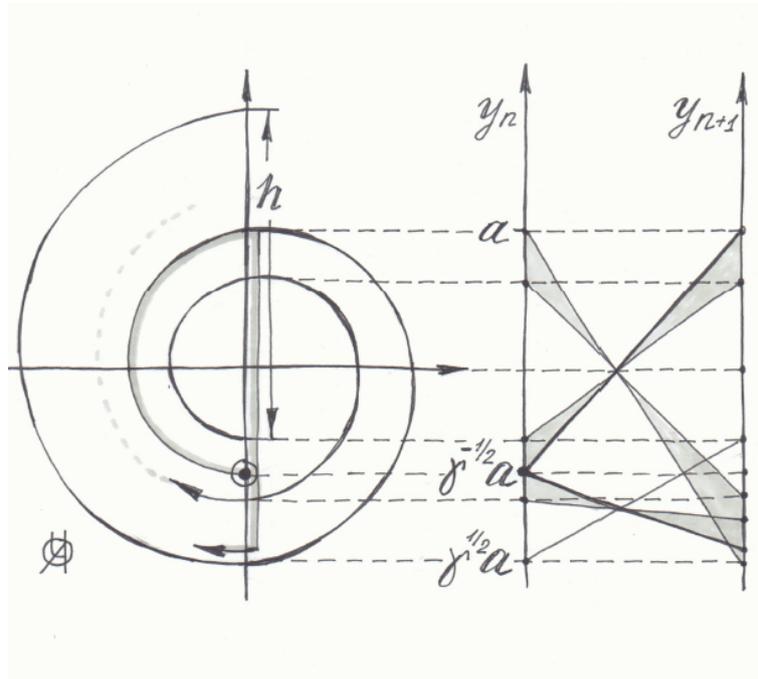


Рис. 45: Траектория в фазовом пространстве для осциллятора Неймарка и отображение Пуанкаре на основе сечения вдоль оси OY

Таким образом мы строим сечение Пуанкаре нашего двумерного фазового пространства одномерной линией. Каждый раз на этом сечении будет появляться новая точка, разбивая ось скоростей на новые отрезки. В какой-то момент она окажется близко с заданной точностью к уже существующей. Можно считать, что процесс образования новых отрезков закончился. Тогда непрерывный детерминированный процесс можно сколь угодно точно представить в виде дискретного марковского процесса отображений отрезков оси скорости за полпериода. Это дает возможность построить корреляционную функцию, которая будет убывать, характеризуя время корреляции этого строго детерминированного процесса.

9 Генераторы случайных чисел

-- ... Если грубо округлить параметры, я в тридцать миллиардов раз интеллектуальнее вас. Для примера -- задумайте число.

-- Э-э, пять, -- сказал матрасс.

-- Неверно, -- пробурчал Марвин. -- Вот видите?

Это произвело на матрасса весьма сильное впечатление. Он осознал, что удостоился знакомства с носителем незаурядного ума.

Д.Адамс. Автостопом по галактике

Проблема изобретения надежного и дешевого генератора случайных чисел стоит очень остро. Причем, численные алгоритмы генерации псевдослучайных чисел не дают нужной степени непредсказуемости с одной стороны и устойчивости статистических характеристик с другой стороны. Все большее значение приобретают так называемые аппаратные генераторы, создающие случайные числа на основе некоторого физического процесса с хаотически изменяющимися параметрами. Несколько сотен случайных бит, получаемых при запуске компьютера раз в день, достаточно для создания необходимых криптографических ключей. В 1890 году английский исследователь Фрэнсис Гальтон описал способ использования игровых костей для генерации случайных чисел в научных целях. Дальнейшим развитием аппаратных генераторов случайных чисел можно считать специальные устройства — лототроны. Они главным образом состоят из барабана, перемешивающего шары с числами, и устройства, извлекающего их из него поочередно. Потом публиковали таблицы случайных чисел в виде книжек. В 1951 году в компьютер была включена программа, которая генерировала случайные числа, используя шум резистора. Идея создания этой программы принадлежала А. Тьюрингу.

Самыми надежными с точки зрения непредсказуемости, но и самыми дорогими, аппаратными генераторами случайных чисел являются квантовые:

- 1 Дробовой шум — это шум, вызванный дискретностью носителей электрического заряда или фотонов.
- 2 Радиоактивный распад используется в качестве источника шума, поскольку для него характерна случайность каждого отдельного акта распада. В результате на приемник (например, счетчик Гейгера или сцинтилляционный счетчик) в различные промежутки времени

попадает разное количество частиц. Таким дорогим способом создают самые элитные сорта случайных чисел.

- 3 Спонтанное параметрическое рассеяние света также может быть использовано в генераторах случайных чисел.

Однако, квантовые источники чувствительны к внешним условиям и требуют сложной аппаратуры для считывания. Классические источники используются гораздо чаще:

- 1 Тепловой шум в резисторе, из которого после усиления получается генератор случайных напряжений.
- 2 Атмосферный шум, измеренный радиоприемником; сюда же можно отнести и прием частиц, попадающих на Землю из космоса. Веб-сервис [Random.org](https://www.random.org/) использует данный подход.
- 3 Разница в скорости хода часов — явление, заключающееся в том, что ход разных часов не будет абсолютно совпадать.
- 4 Измерение времени между нажатиями на кнопки клавиатуры или мыши. К недостаткам данного метода следует отнести малую скорость генерации и необходимость наличия пользователя.
- 5 Использование шума со встроенного микрофона в компьютере. Но, помимо белого шума, в спектре будут присутствовать такие паразитные составляющие, которые нужно отфильтровывать.
- 6 Использование сети или интернета, например, время между принятыми пакетами или контрольная сумма новостей предыдущей недели.
- 7 К наиболее необычным генераторам следует отнести устройства, которые используют цифровые видеокамеры, снимающие макроскопические явления. Например, пузыри в аквариуме или ленты в потоке воздуха от вентилятора.

Корпорация [Cloudflare](https://www.cloudflare.com/), использует массив из лавовых ламп в штаб-квартире компании в Сан-Франциско для создания случайной информации.

Лавовая лампа — декоративный светильник, представляющий собой прозрачную стеклянную емкость с прозрачной жидкостью и полупрозрачным парафином, внизу расположена лампа накаливания. Она нагревает и подсвечивает содержимое цилиндра, при этом происходит случайное "лавообразное" перемещение парафина в масле. Эффект основан на том, что при обычной температуре парафин

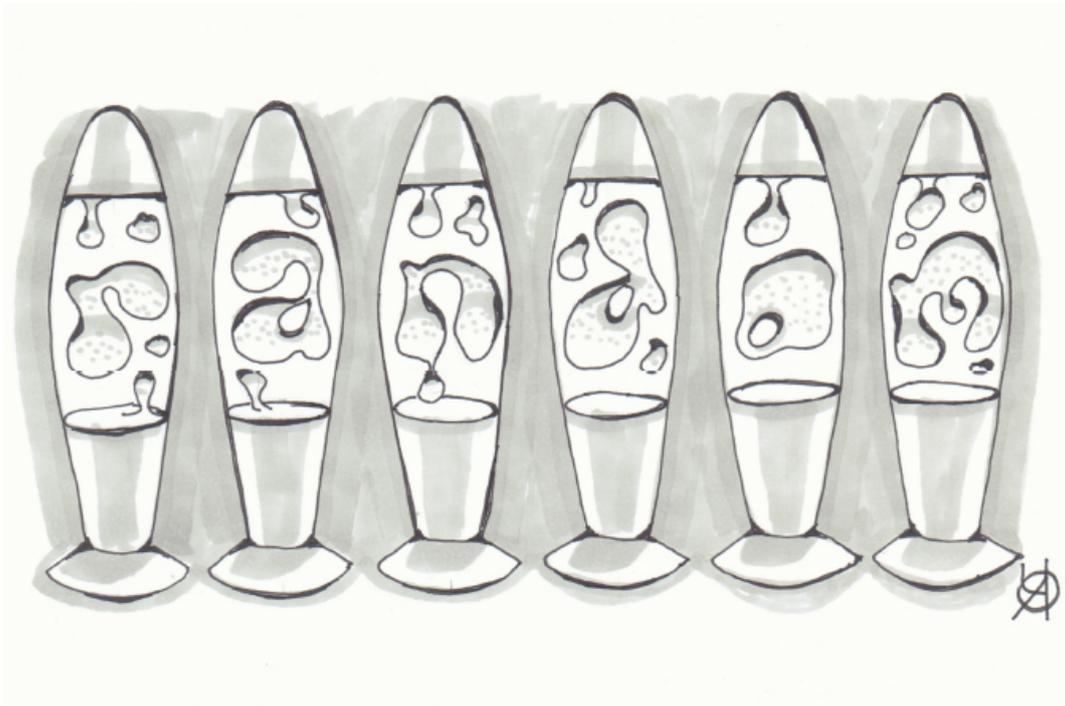


Рис. 46: Лавовые лампы как генераторы случайных чисел. Понятно, почему их тут шесть?

немного тяжелее масла и опускается на дно, а при небольшом нагреве парафин становится легче масла и всплывает. На поверхности он охлаждается и тонет.

9.1 Традиционные генераторы случайных чисел

Давайте подумаем, на каких физических принципах основана работа традиционных генераторов, используемых в играх. Следующие 8 уравнений как-то связаны четырьмя традиционными генераторами: игральные кости (кубики), лототрон, колода экзаменационных билетов (ее можно тасовать) и волчок (рулетка). Попробуйте определить, какие к каким относятся.

- 1

$$p(V - \nu b) = \nu RT$$

- 2

$$x_{n+1} = 2x_n(x - [x]), \quad y_{n+1} = 1/2(y_n - [2x]),$$

$[x]$ — целая часть числа x

- 3

$$S = k \ln 6$$

- 4

$$\lambda = \lim_{t \rightarrow \infty} \lim_{f(t_0) \rightarrow 0} \frac{1}{t} \ln \frac{f(t)}{f(t_0)} = \ln 2$$

• 5

$$S = \nu c_v \ln T + R \ln(V - \nu b)$$

• 6

$$\dot{\omega} = -a\omega - b - c\xi$$

• 7

$$\begin{aligned} J_{xx}\dot{\omega}_x + (J_{zz} - J_{yy})\omega_y\omega_z &= N_x \\ J_{yy}\dot{\omega}_y + (J_{xx} - J_{zz})\omega_x\omega_z &= N_y \\ J_{zz}\dot{\omega}_z + (J_{yy} - J_{xx})\omega_x\omega_y &= N_z \end{aligned}$$

• 8

$$\lambda = \lim_{t \rightarrow \infty} \lim_{f(t_0) \rightarrow 0} \frac{1}{t} \ln \frac{f(t)}{f(t_0)} < 0$$

Мы видим, что помимо динамической неустойчивости важен переход от непрерывной величины к дискретной. Например, ориентация кубика — непрерывная величина, в момент падения она переходит в дискретную величину, принимающую только 6 возможных значений. Непрерывное распределение координат шариков в лототроне переходит в дискретную величину, принимающую два значения 1 (выпал) или 0 (не выпал).

9.2 Статистика соударений с фрагментом стенки в математическом бильярде

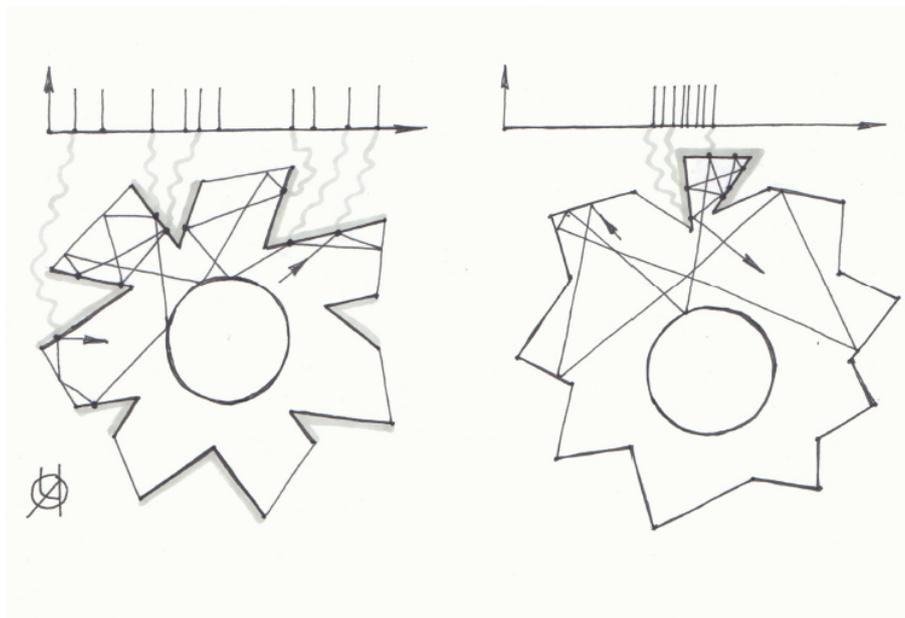


Рис. 47: Бильярды для генерации импульсного процесса с заданной статистикой. Каждый импульс соответствует столкновению с выделенной стенкой. Слева субпуассоновский, справа — суперпуассоновский процесс

В большинстве случаев случайные числа, полученные аппаратным генератором, требуют дальнейшей обработки с помощью специальных алгоритмов, при этом теряется много данных и времени. Например, если получена последовательность нулей и единиц, где единиц гораздо больше. Дж. Нейман одним из первых предложил простой алгоритм для исправления такого перекоса математического ожидания в последовательности. Алгоритм заключается в том, что биты рассматриваются парами: если в паре два одинаковых значения, то пара отбрасывается, если биты разные, то вместо пары записывается только первый бит в этой паре. Недостаток этого алгоритма заключается в том, что большая часть битов выбрасывается.

Получается, что хорошо было бы создать генератор случайных чисел с возможностью настройки статистических параметров. Рассмотрим идею такого генератора, выдающего импульсный процесс, который можно перестраивать с суб-пуассоновского на супер-пуассоновский.

Представим себе бильярд, форму которого можно менять и выделять определенные фрагменты стенок. В бильярде движется частица. При каждом соударении с выбранной стенкой рисуется вертикальный импульс на графике. Строится распределение для интервалов между двумя последовательными соударениями.

Для бильярда с чередующимися выделенными участками должна быть суб-пуассоновская статистика, потому что есть расстояние, меньше которого не может быть пробег, и есть расстояние максимально возможное. Для участка границы в малом объемчике, проход в который узок, должна наблюдаться супер-пуассоновская статистика. Действительно, частица редко заходит в эту область, но если уж зайдет, застревает там на некоторое время, поэтому мы получаем группы импульсов с большими интервалами между группами.

До этого мы говорили об одной частице и влиянии геометрии бильярда на статистику соударений. В случае большого числа частиц зависимость от геометрии пропадает. Мы получим пуассоновскую статистику при любом выборе границ, в том числе и в малом объеме. Какая-то часть частиц там всегда есть и соударяется со стенками.

10 Математические бильярды

Один, в расчеты погруженный,
Тупым кием вооруженный,
Он на бильярде в два шара
Играет с самого утра.

А. Пушкин

10.1 Бильярды с неподвижными границами

Бильярд — динамическая система, отвечающая свободному движению материальной точки (бильярдного шара) внутри области площадью Ω с кусочно-гладкой границей. При достижении границы частица упруго отражается от нее. В случае столкновения с выпуклой (рассеивающей) стенкой, траектории расходятся. Чем больше кривизна выпуклой поверхности, тем к большему разбеганию траекторий приводят столкновения с этой поверхностью. В результате показатель Ляпунова положительный, и возникает хаос.

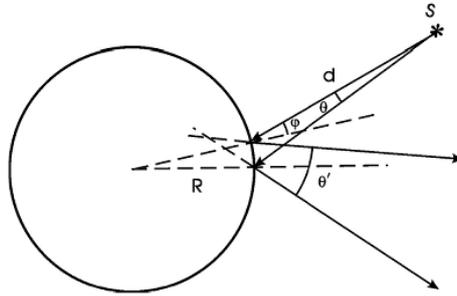


Рис. 48: Разбегание траекторий при столкновении с выпуклой поверхностью

Самый известный — бильярд Синая. Для этого бильярда строго доказано существование хаоса. Траектория со временем равномерно закрывает поверхность — это называется перемешивание.

Стадион Бунимовича состоит из двух дуг и двух прямолинейных стенок. От соотношения геометрических параметров зависит, будет ли движение хаотическим или детерминированным. Вогнутая поверхность фокусирует траектории двух близких частиц, то есть они будут приближаться друг к другу. Казалось бы, хаоса не возникнет. Но потом траектории сходятся в одну точку фокуса и начинают расходиться. Таким образом, если до следующей стенки траектории успеют разойтись дальше, чем были до столкновения, то хаос будет в этом бильярде.

Рассмотрим движение частицы в двумерном хаотическом бильярде. Оно будет описываться двумя координатами положения частицы и уг-

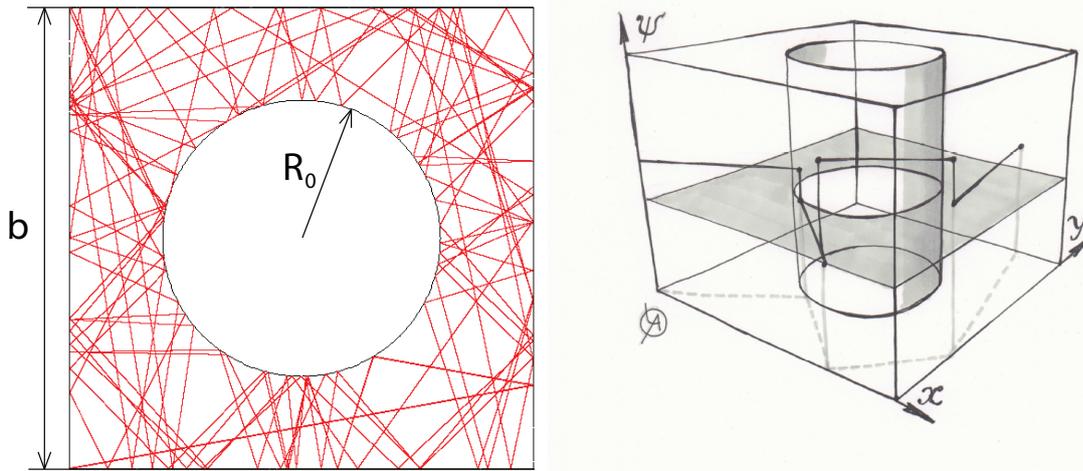


Рис. 49: Бильярд Сивая и его фазовое пространство

лом направления скорости движения частицы. Модуль скорости v не меняется. Фазовое пространство будет трехмерным, то есть площадь самого бильярда и еще третье измерение, где откладывается угол. Причем траектории в этом пространстве лежат в горизонтальных плоскостях, соответствующих углу направления скорости. При соударении со стенкой угол меняется, траектория переходит в другую плоскость.

Плотность распределения вероятностей будет равномерной на всем объеме фазового пространства и равной единице, деленной на этот объем.

$$w(x, y, \phi) = \frac{1}{2\pi\Omega},$$

где Ω — площадь бильярда, то есть той области, где движется частица.

10.1.1 Длина свободного пробега

Вычислим длину свободного пробега в бильярде. Вероятность столкновения частицы, летящей под углом ϕ к стенке, с участком стенки длиной L в единицу времени, определяется интегралом вдоль этого участка от вероятности того, что частица окажется рядом со стенкой, умноженной на проекцию скорости на перпендикуляр к этой стенке. А для получения вероятности столкновения под любым углом нужно проинтегрировать по углам

$$p(L) = \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\phi \int_L dl w(x, y, \phi) v \cos \phi = \frac{Lv}{\pi\Omega}. \quad (38)$$

Тогда вероятность столкновения с любой стенкой под любым углом будет определяться периметром P , а именно $Pv/\pi\Omega$. Мы получили частоту соударений частицы со стенками. Она, естественно, будет больше

при большом периметре, большой скорости и малой площади бильярда. Обратная ей величина p^{-1} будет временем свободного пробега. Если это время умножить на скорость, то скорость сократится, и мы получим длину свободного пробега

$$\lambda = vp^{-1}(P) = \frac{\pi\Omega}{P}.$$

10.1.2 Плотность распределения вероятностей углов падения частиц на стенку

Плотность распределения вероятностей для угла скорости частицы в сосуде является равномерной $w(\alpha) = (2\pi)^{-1}$, т.е. все направления движения равновероятны. Выберем ось, направленную перпендикулярно стенке, и будем отмерять углы относительно нее. Вероятность того, что частица движется под углом в интервале $[\alpha; \alpha + d\alpha]$, будет $P(\alpha) = w(\alpha)d\alpha$. Условная вероятность того, что частица двигалась под углом в интервале $[\alpha; \alpha + d\alpha]$ при условии, что она столкнулась со стенкой длиной L за время Δt , выражается через искомую плотность распределения вероятностей $P(\alpha/col) = w(\alpha/col)d\alpha$. Воспользуемся свойством условных вероятностей

$$P(\alpha/col)P(col) = P(\alpha, col) = P(col/\alpha)P(\alpha). \quad (39)$$

Рассмотрим условную вероятность $P(col/\alpha)$ столкновения частицы с данной стенкой при условии, что у нее был угол α . Аналогично (38), получаем, что

$$P(col/\alpha) = \frac{\Delta tLv \cos(\alpha)}{\Omega},$$

где $\alpha \in [-\pi/2; \pi/2]$. Тогда вероятность того, что столкновение состоялось, и угол был вблизи α , будет, согласно (39),

$$P(\alpha, col) = \frac{\Delta tLv \cos(\alpha)d\alpha}{2\pi\Omega}.$$

Вероятность просто столкновения со стенкой длиной L за время Δt получаем, интегрируя по всем возможным углам,

$$P(col) = \int_{-\pi/2}^{\pi/2} P(\alpha, col)d\alpha = \frac{\Delta tLv}{\pi\Omega}.$$

Подставляя в (39), находим искомую плотность распределения вероятностей

$$w(\alpha/col) = \frac{1}{2} \cos(\alpha),$$

где $\alpha \in [-\pi/2; \pi/2]$. Можно убедиться, что это вероятностное распределение является нормированным и его дисперсия меньше дисперсии распределения $w(\alpha)$, потому что информация о том, что произошло столкновение с данной стенкой, делает значение угла более определенным, энтропия убывает. Можно найти моменты, которые понадобятся дальше

$$\langle \cos \phi_n \rangle = \pi/4, \quad \langle \sin^2 \phi_n \rangle = 1/3. \quad (40)$$

10.1.3 Газ Лоренца

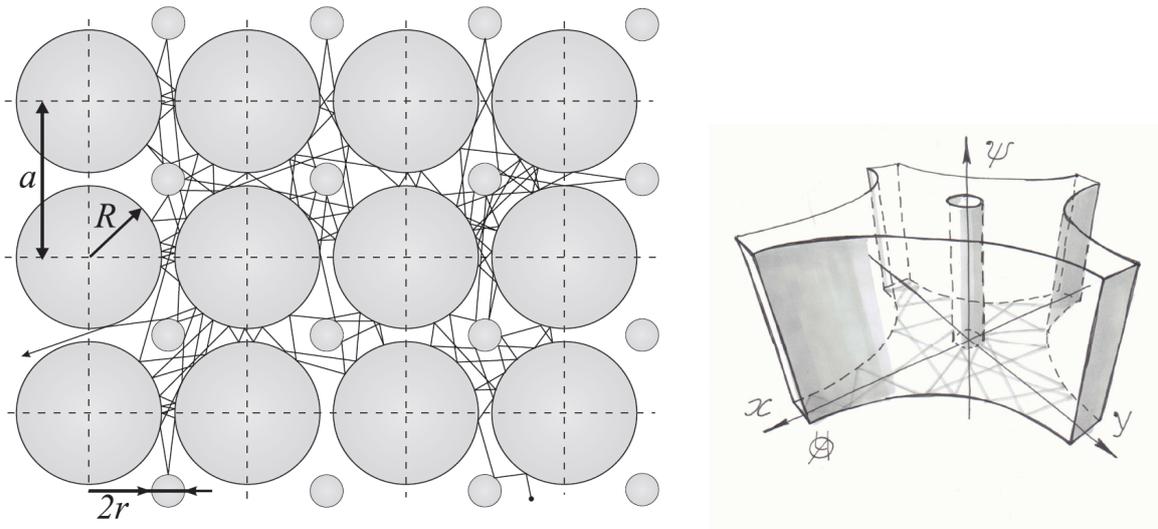


Рис. 50: Газ Лоренца с квадратной решеткой (слева), фазовое пространство ячейки газа Лоренца (справа)

Бильярд может представлять из себя большое пространство с ровными рядами круглых рассеивателей. Тогда он называется газ Лоренца и активно используется для изучения явлений переноса. Можно рассмотреть отдельную ячейку такой решетки и ее фазовое пространство. Рассмотрим выход из ячейки через настолько малое отверстие l_0 , что в ячейке успевают установиться равномерное распределение, тогда вероятность выхода в единицу времени $p(l_0) = l_0 v / (\pi \Omega) = 1/\tau = l_0 v / (P \lambda)$. Распределение вероятностей для времени жизни частицы в ячейке и для длины траектории l до выхода тогда

$$w(t) = \frac{1}{\tau} \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right), \quad w(l) = \frac{1}{L} \exp\left(-\frac{l}{L}\right),$$

где $L = \langle l \rangle = v \tau = \pi \Omega / l_0 = \lambda P / l_0$. Численный эксперимент показывает, что распределение вероятностей времен выхода частицы из ячейки будет экспоненциальным, а процесс последовательных выходов — пуассоновским.

10.2 Бильярды с подвижными границами

10.2.1 Изменение скорости при ударе

Особый интерес вызывают бильярды с границами осциллирующими со скоростью $u = u_0 \cos \varphi$. Рассмотрим n -е столкновение бильярдной частицы с движущейся стенкой. Направим ось ОХ перпендикулярно к стенке. Применим законы сохранения энергии и импульса, считая пока массу стенки M конечной величиной. Потом учтем, что масса стенки стремится к бесконечности. Компонента скорости параллельная границе не меняется $v_{n+1,y} - v_{n,y} = 0$.

$$m(v_{n+1}^2 - v_n^2) = m(v_{n+1,x}^2 - v_{n,x}^2) = M(u_n^2 - u_{n+1}^2),$$
$$m(v_{n+1,x} - v_{n,x}) = M(u_n - u_{n+1}).$$

Поделим уравнение для кинетических энергий на уравнение для импульсов $v_{n+1,x} + v_{n,x} = -u_n - u_{n+1}$. Учтем, что стенка гораздо тяжелее частицы и поэтому ее скорость не изменится $m/M \rightarrow 0$, тогда $v_{n+1,x} = -2u_n - v_{n,x}$.

Возведем последнее выражение в квадрат

$$v_{n+1,x}^2 = 4u_n^2 + 4u_n v_{n,x} + v_{n,x}^2.$$

Выразим перпендикулярную компоненту через угол падения и добавим равные друг другу $v_{n+1,y}^2$ и $v_{n,y}^2$ в левую и правую части уравнения

$$v_{n+1}^2 = 4u_n^2 + 4u_n v_n \cos(\phi_n) + v_n^2.$$

Изменение квадрата скорости частицы при n -ом столкновении

$$\Delta(v_n^2) = 4u_n v_n \cos \phi_n + 4u_n^2.$$

Извлекаем корень и дальше будем считать, что изменение скорости при каждом соударении много меньше самой скорости, то есть скорость стенки много меньше скорости частицы. Тогда можно разложить корень в ряд и получить изменение скорости частицы при n -ом столкновении

$$\Delta v_n = 2u_n \cos \phi_n + \frac{2u_n^2 \sin^2 \phi_n}{v_n}. \quad (41)$$

Синус квадрат здесь получился из единицы и косинуса в квадрате.

10.3 Стохастические колебания границ

Сначала предположим, что стенка движется хаотически (φ равномерно распределенная фаза), совершая очень быстрые скачки вперед или назад с некоторой амплитудой u_0 так, что $\langle u^2 \rangle = u_0^2/2$ $\langle u \rangle = 0$, поэтому первое

слагаемое (41) исчезает. Среднее квадрата синуса угла падения получаем из (40). Скорость можно представить как отношение длины свободного пробега к времени свободного пробега. Тогда получаем линейный рост скорости

$$\langle v \rangle = \frac{u_0^2}{3\lambda} t$$

Это называется ускорением Ферми. Численное моделирование движения бильярдной частицы тоже показывает линейный рост скорости с ускорением Ферми хорошо совпадающим с тем, которое мы сейчас получили. Эффект ускорения Ферми не зависит от формы бильярда. Наша формула применима и к случайному расположению рассеивателей.

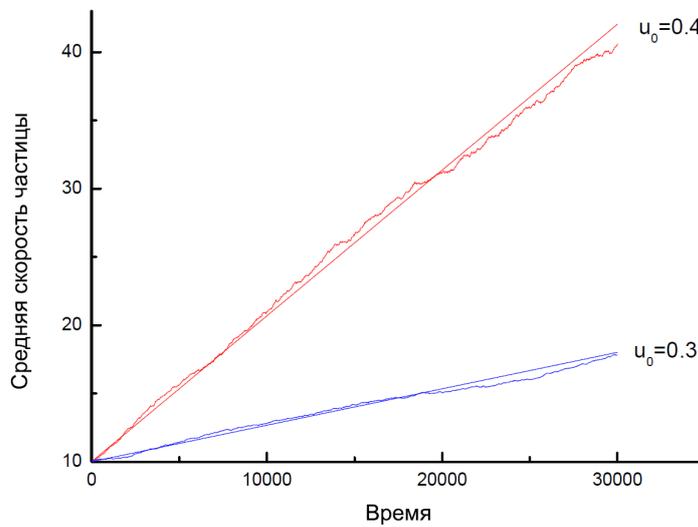


Рис. 51: Средняя скорость бильярдной частицы от времени при хаотическом движении рассеивателей с различными амплитудами скорости рассеивателя. Аналитический результат — прямые линии, численный счет — флуктуирующие линии

10.4 Гармонические колебания границ

В случае гармонического колебания границ, стенка движется с фазой $\varphi = 2\pi t/T$. При условии, что период колебания стенки T подчиняется условиям таким, что он больше времени свободного пробега λ/v_0 , но при этом смещение стенки Tu_0 мало по сравнению с длиной свободного пробега

$$\frac{\lambda}{v_0} \ll T \ll \frac{\lambda}{u_0}. \quad (42)$$

Ускорение частицы в результате ударов о стенки можно представить как случайный импульсный процесс, причем модулированный косинусом. Импульсы идут все чаще, потому что скорость увеличивается и частота ударов — тоже. Дальше можно аналогично вычислить ускорение.

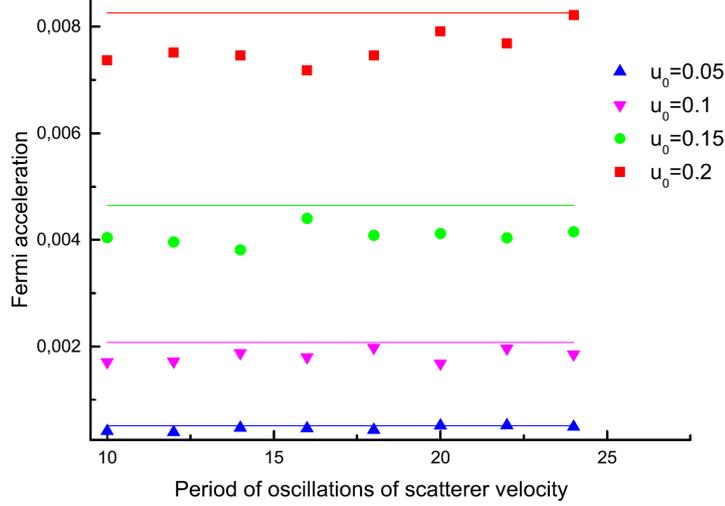


Рис. 52: Зависимость, точнее, независимость ускорения Ферми от периода колебаний границ при различных амплитудах колебаний рассеивателей

Теперь вероятность столкновения зависит от скорости частицы относительно движущейся стенки

$$p(v, u, \phi) = \int_P (v \cos \phi + u) w(x, y, \psi) dl = \frac{P(v \cos \phi + u)}{2\pi\Omega} = \frac{v \cos \phi + u}{2\lambda}. \quad (43)$$

Приращение скорости за период тогда

$$\langle \Delta v_T \rangle = \int_0^T dt \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \frac{v \cos \phi_n + u}{2\lambda} \left(2u_n \cos \phi_n + 2\frac{u_n^2}{v_n} \sin^2 \phi_n \right) d\phi_n.$$

Ненулевыми будут только слагаемые с u_n^2

$$\langle \Delta v_T \rangle = \frac{1}{2\lambda} \int_0^T dt \int_{-\pi/2}^{\pi/2} (2u_n^2 \cos \phi_n + 2u_n^2 \sin^2 \phi_n \cos \phi_n) d\phi_n.$$

Усредняя по ϕ_n , получаем приращение скорости за период и за время t

$$\langle \Delta v_T \rangle = \frac{u_0^2}{\lambda} \left(2 + \frac{2}{3} \right) \int_0^T \cos^2 \left(\frac{2\pi}{T} t \right) dt = \frac{4Tu_0^2}{3\lambda}, \quad \langle v \rangle = \frac{4u_0^2}{3\lambda} t. \quad (44)$$

Мы получили, что для периодического движения ускорение Ферми ровно в четыре раза больше, чем для случайного. Видим, что от периода колебаний стенки результат не зависит.

Для термодинамической интерпретации можно рассмотреть трехмерный бильярд, то есть сосуд с движущимся поршнем. Движения поршня является неравновесным процессом. Следовательно, энтропия газа должна возрастать, как в задаче про улитку. Объем не меняется, следовательно, должна возрастать температура, то есть скорость.

11 Случайные блуждания

Известно, что человек, заблудившийся в незнакомой части города, особенно ночью, никак не может идти прямо по улице; его поминутно подталкивает какая-то неведомая сила непременно сворачивать во все встречающиеся на пути улицы и переулки. Следуя этой системе, Павел Александрович заблудился окончательно.

Ф. Достоевский

11.1 Броуновское движение

Случайное блуждание совершает любая молекула газа, вирусы, бактерии, пыльца растений, мелкая пылинка, частица в бильярде, насекомое в поисках пищи, заблудившийся человек. Если блуждание происходит в результате теплового движения молекул окружающей среды, то его называют Броуновским движением.

11.1.1 Одномерное дискретное блуждание

Многие современные направления исследования флуктуаций связаны с блужданиями и являются некоторым обобщением основных закономерностей движения броуновской частицы. Для начала важно вспомнить эти закономерности. Рассмотрим одномерное дискретное случайное блуждание. Вычислим смещение вдоль оси за N шагов. Оно определяется суммой положительных и отрицательных шагов, потому что частица с равными вероятностями может сделать шаг в одну или в другую сторону. Среднее равно нулю. Для второго момента, который здесь равен дисперсии, выделим из двойной суммы все слагаемые с одинаковыми индексами. Остальная часть будет равна нулю, потому что в ней примерно поровну положительных и отрицательных слагаемых

$$\langle \Delta x_N^2 \rangle = \langle \sum_{n=1}^N \Delta x_n \sum_{m=1}^N \Delta x_m \rangle = N \langle (\Delta x)^2 \rangle = \langle (\Delta x)^2 \rangle \frac{t}{\tau} = 2D_x t. \quad (45)$$

Здесь мы заменили число шагов на отношение времени эксперимента ко времени одного шага. Мы получили, что дисперсия равняется удвоенному коэффициенту диффузии D_x , умноженному на время.

11.1.2 Диффузия

Такое случайное блуждание отвечает за диффузию. Если капнуть точечную капельку броуновских частиц в вещество, они будут случайно блуждать. Пятно будет расплываться по закону линейного роста дисперсии. Среднее расстояние, на которое частицы разойдутся, будет пропорционально корню из времени.

Распределение плотности частиц (а так же плотности вероятности обнаружить частицу) будет гауссовским с нулевым средним и линейно возрастающей со временем дисперсией. Это следует из центральной предельной теоремы, поскольку смещение — это интеграл от скорости. Это распределение будет расплываться со временем

$$w(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi 2D_x t}} \exp\left(-\frac{x^2}{4D_x t}\right). \quad (46)$$

Оно является решением уравнения диффузии

$$\frac{\partial w(x, t)}{\partial t} = D_x \frac{\partial^2}{\partial x^2} w(x, t). \quad (47)$$

Еще важно помнить, что разобравшись с диффузией, мы заодно получили уравнения для всех явлений переноса. Ведь молекулы являются единственными носителями всех свойств: кинетической энергии для теплопроводности и импульса упорядоченного движения для вязкости

Проверим, получится ли похожий же результат (47) из уравнения для дискретного блуждания (13) в непрерывном пределе при $n \gg 1$. Разложим вероятности p_{n+1} и p_{n-1} в ряд до квадратичного по n слагаемого и подставим в (13)

$$\dot{p}_n = D p_n'' - \gamma p_n',$$

где $D_x = (\alpha + \beta)/2$ соответствует коэффициенту диффузии, $\gamma = (-\alpha + \beta)$ — коэффициенту дрейфа. Решением этого уравнения является распределение Гаусса с линейно растущими дисперсией и матожиданием. Поскольку пуассоновский процесс и движение шарика в доске Гальтона — это частные случаи блуждания, то мы заодно доказали, что распределения Пуассона и биномиальное переходит в распределение Гаусса в пределе больших n .

11.1.3 Изменение энтропии при диффузии

Процесс диффузии всегда является неравновесным процессом, поэтому энтропия должна увеличиваться со временем. Подставим полученное распределение (46) в статистическое определение энтропии (17) и

выполним интегрирование, учтем, что интеграл от распределения равен единице

$$S = -kN \left(\ln \frac{1}{\sqrt{2\pi 2D_x t}} + \frac{\langle x^2 \rangle}{4D_x t} \right) + const = \frac{kN}{2} \ln 2\pi e 2D_x t + const.$$

Энтропия возрастает. В дальнейшем, распределение будет переходить в равномерное на всем предоставленном объеме. Тогда уже оно не будет гауссовским, но будет выполняться основная закономерность: чем шире распределение, тем больше энтропия. Равномерное распределение будет соответствовать максимальной энтропии.

11.1.4 Многомерная диффузия

Все это рассуждение можно обобщить на случай любой размерности, например на двумерный случай. Основная закономерность, связанная с тем, что смещение по прямой будет пропорционально корню от времени, здесь сохраняется.

Как играли дети до компьютерных игр? Например, разрисовывали лист всякими обозначениями приключений и начинали случайное блуждание по нему с помощью волчка. Начиная с центра, делаем шаг в сантиметр в направлении, указанном волчком, опять запускаем волчок, и т.д. Крутить можно пузатую ручку, телефон или что-то еще. При этом попадаем на какие-то приключения и додумываем сюжет. Если пройти такие случайные маршруты много раз, потом усреднить число шагов, и расстояния, на которые удалось удалиться по прямой, то получится некоторая закономерность, показанная на рисунке.

Видим, что в двумерном случае можно обнаружить все ту же закономерность: длина траектории в шагах равна квадрату расстояния по прямой. Поэтому, например, важно, заблудившись, следить за тем, чтобы идти по прямой и не блуждать.

Свяжем коэффициент диффузии с длиной свободного пробега в трехмерном случае. Плотность распределения вероятностей длин свободного пробега l между последовательными столкновениями является экспонентой. Значит, если λ — средняя длина свободного пробега, то второй момент будет $2\lambda^2$.

Мы получили выше (45) зависимость коэффициента диффузии от $\langle (\Delta x)^2 \rangle$. Поскольку движение относительно всех трех осей одинаково, можно записать

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle + \langle (\Delta y)^2 \rangle + \langle (\Delta z)^2 \rangle = \langle l^2 \rangle = 2\lambda^2, \quad \langle (\Delta x)^2 \rangle = \frac{2\lambda^2}{3}.$$

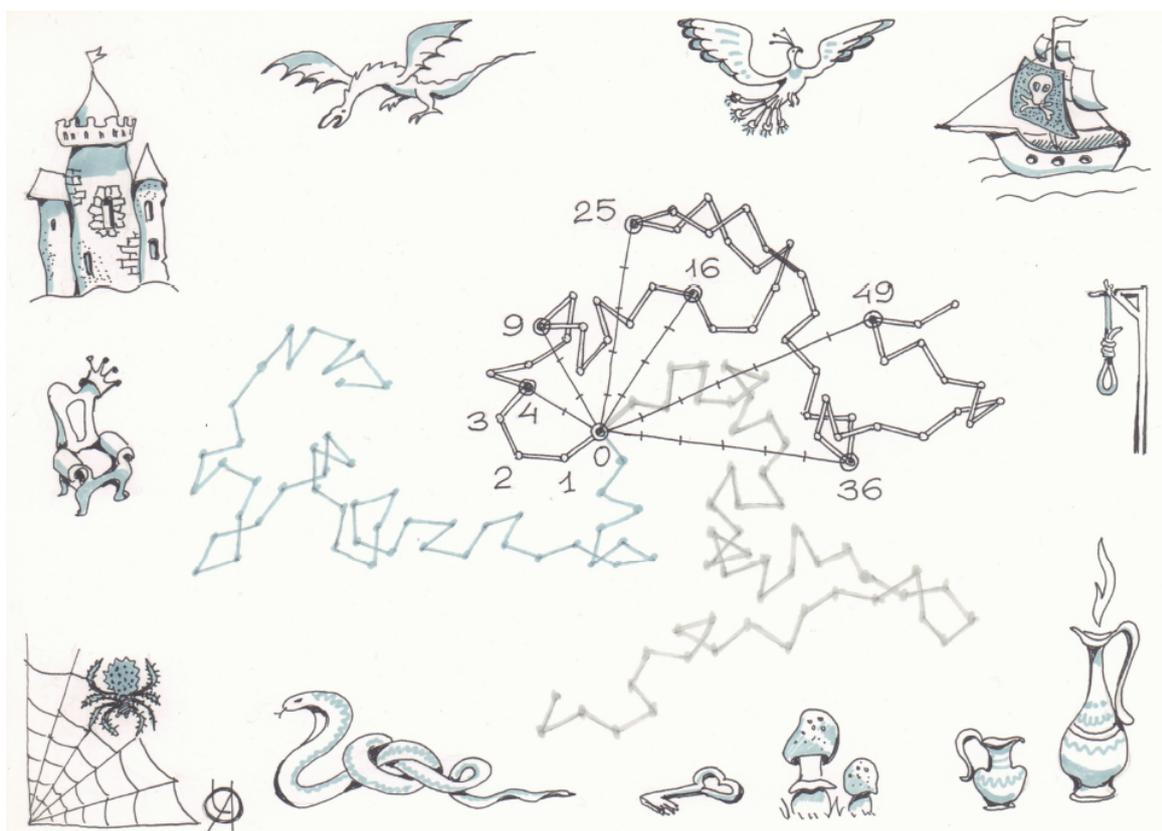


Рис. 53: Дискретные блуждания со случайными направлениями после каждого шага. Связь длины траектории и смещения по прямой

Окончательно для коэффициента диффузии в трехмерном пространстве получаем

$$D_x = \lambda^2 / (3\tau) = \lambda \langle v \rangle / 3. \quad (48)$$

Для двумерной задачи вместо тройки будет двойка в знаменателе.

11.1.5 Сворачивание полимера в глобулу

Свойства траектории броуновской частицы можно применить к одномерному полимеру. Такой полимер может быть представлен в виде сегментов, соединенных шарнирами, позволяющими произвольно изменять направление. Такой полимер в своем тепловом движении сворачивается в клубок, размер которого примерно равен корню из его длины.

11.1.6 Фрактальность траектории

Для траекторий броуновской частицы свойственна фрактальность. Это означает масштабную инвариантность. Небольшой фрагмент, если его увеличить, выглядит так же, как вся траектория. Фракталы имеют дробную размерность. Траектория как бы заштриховывает часть поверхно-

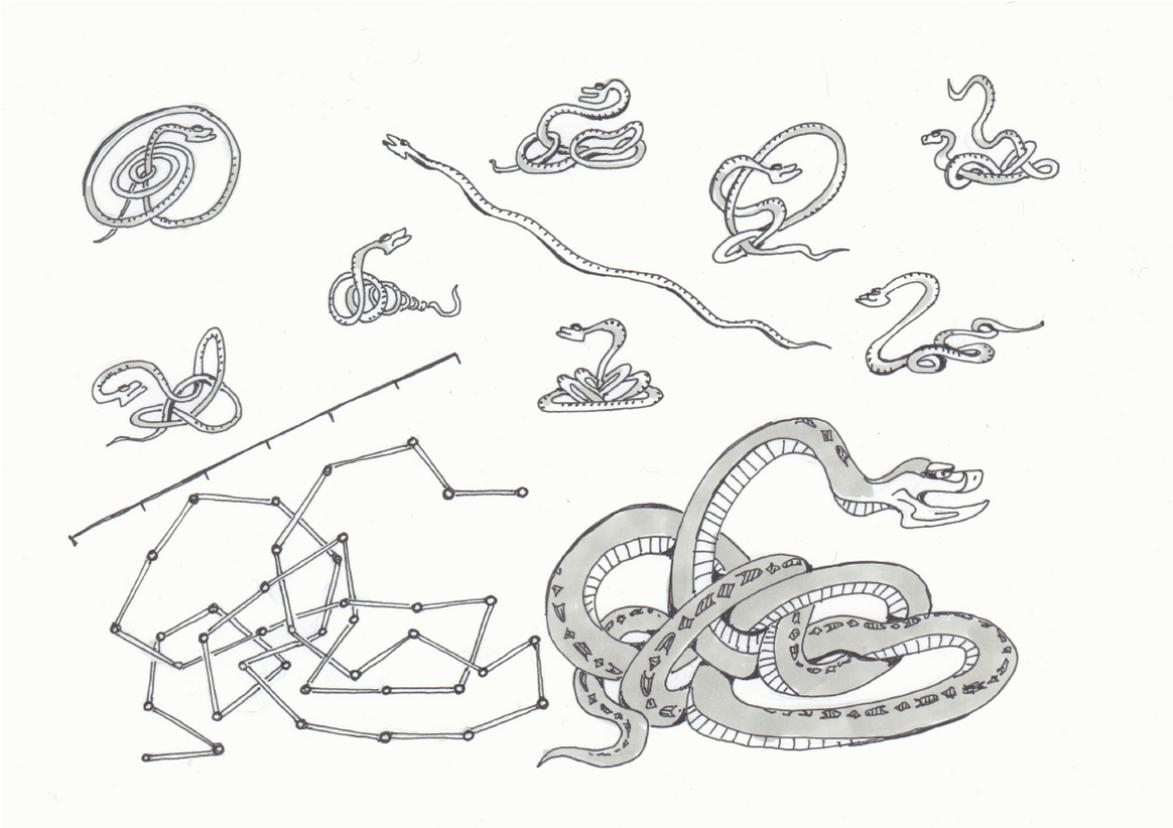


Рис. 54: Движение удава Каа приводит к тому, что он свернут в структуру, размеры которой определяются корнем из длины траектории

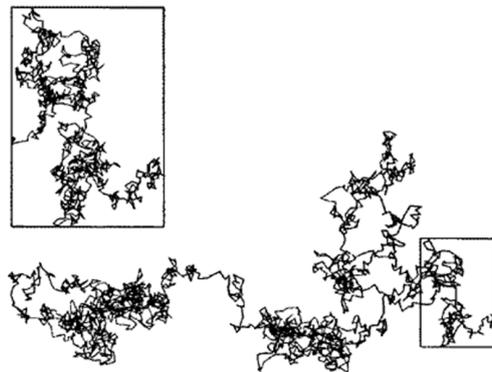


Рис. 55: Фрактальные свойства траектории броуновской частицы

сти, то есть это уже не одномерная линия, но и не двухмерная поверхность.

11.2 Аномальная диффузия

Наряду с обычной диффузией, когда квадрат смещения пропорционален времени, есть аномальная диффузия. Скачки определяют тип диффузии $\langle \Delta x_N^2 \rangle \sim t^\nu$. Если $\nu > 1$, то супердиффузия, если $\nu < 1$ — субдиффузия.

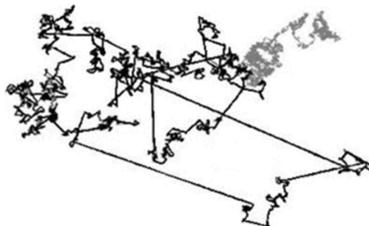


Рис. 56: Полеты Леви

Один из механизмов супердиффузии — это наличие гигантских скачков, они называются полетами Леви. Например, многие животные движутся так для оптимального поиска пищи.

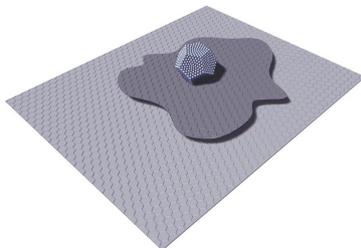


Рис. 57: Модель кластера на гладкой чешуйке графита

Сверхскользкость чешуек графита — еще один из источников супердиффузии для наночастиц на ней. Коэффициент трения стремится к нулю при определенных поворотах или деформациях чешуек. Каждая чешуйка участвует в тепловом движении как броуновская частица. Если на ее поверхность напыляются кластеры металлов, движение чешуйки ускоряет диффузию этих кластеров. В этом случае траектория кластеров выглядит так же, как и при обычной диффузии, но коэффициент диффузии возрастает со временем.

Субдиффузия возникает тогда, когда есть ловушки, в которых частица может застрять на большое время. Например, траектории случайного блуждания в пористом стекле самоподобной структуры (стекло Леви).

Для него характерны сильные флуктуации времен скачков.

Для математического описания аномальной диффузии записываются уравнения с дробными производными. При обычной диффузии динамика распределения описывается второй производной по координате. Соответственно, для аномальной диффузии этот показатель принимает дробное значение. Проще всего ввести понятие дробной производной в спектральном представлении. Здесь дифференцирование n раз соответствует умножению на $(i\omega)^n$. Соответственно, показатель n может принимать дробные значения.

Еще одним важным направлением обобщения уравнения диффузии является модель активных броуновских частиц. Это частицы, обладающие внутренним источником энергии, за счет которого они движутся. Они могут описывать живые организмы или роботов. Это подразумевает, что коэффициент трения пассивных частиц $\gamma > 0$ заменяется на зависящий от скорости коэффициент $\gamma(v)$, который в определенном диапазоне значений скорости может быть отрицательным. Поэтому частица при движении в среде может не только терять энергию за счет трения, но и извлекать энергию из среды. Уравнение диффузии для таких частиц может принимать довольно причудливые формы. В частности, возможны коэффициенты диффузии меньше нуля. То есть возникшая где-то неоднородность будет не разглаживаться, а, наоборот, усиливаться. Мы можем наблюдать такие эффекты на примере голубей. Они слетаются туда, где уже есть некоторое скопление голубей, ожидая, что их там кормят.

12 Стохастические дифференциальные уравнения (СДУ) с белым шумом и уравнения Фоккера-Планка (УФП)

Как если б мастер проявлял уменье,
Но действовал дрожащею рукой.

Данте

12.1 Стохастические дифференциальные уравнения

Мы разобрались с процессами, в которых случайность играет основную роль (случайные блуждания, движение в бильярдах, дискретные марковские процессы). Но в реальных процессах, происходящих в природе и в человеческом обществе, все сложнее. Детерминированное (предсказуемое, соответствующее законам) и случайное сочетаются некоторым нетривиальным образом, и нельзя пренебречь ни тем ни другим. Рассмотрим величину, которая эволюционирует таким сложным образом. Тогда уравнение для производной этой величины будет содержать два слагаемых, описывающих детерминированную часть и случайную. Такие уравнения называются стохастическими дифференциальными уравнениями (СДУ)

$$\dot{x} + a(x) = b(x)\xi(t), \quad (49)$$

здесь функция $a(x)$ описывает детерминированную динамику системы, задаваемую, например, уравнением Ньютона или Кирхгофа. Для учета случайных воздействий и приближения модели к реальности в уравнение добавляется шум, а именно, $\xi(t)$ — дельта-коррелированный случайный процесс $\langle \xi(t)\xi(t + \tau) \rangle = 2D \delta(\tau)$. Это означает, что время корреляции равно нулю. Следующее значение величины $\xi(t)$ не связано с предыдущим, а константа D характеризует интенсивность шума. Кроме того, этот процесс характеризуется нулевым средним $\langle \xi(t) \rangle = 0$. Функция $b(x)$ описывает зависимость влияния шума на систему от состояния самой системы.

12.1.1 Шумовое слагаемое

Рассмотрим примеры уравнений (49), где есть только одно из двух слагаемых. Например, уравнение координаты Броуновской частицы, рассмотренное в разделе "Случайные блуждания состоит только из шумового слагаемого. Здесь в качестве белого шума выступает скорость частицы, которая меняется в результате некоррелированных ударов частиц

среды. При этом никакие силы и поля не учитываются: $a = 0$. Распределение будет определяться уравнением диффузии (47). Там, где вторая производная по координате положительная (выпуклость вниз), функция возрастает со временем (производная по времени положительная) и наоборот. То есть все ямы поднимаются, а холмы сглаживаются. При этом сохраняется нормировка.

В общем случае такой процесс называется винеровским процессом

$$\dot{W}(t) = b\xi(t).$$

Решение уравнения можно формально записать в виде

$$W(t) = b \int_0^t \xi(t_1) dt_1.$$

По центральной предельной теореме $W(t)$ будет описываться распределением Гаусса с линейно растущей дисперсией (46) $\sigma_W^2 = 2b^2 D$.

12.1.2 Детерминированное слагаемое

В противоположном случае отсутствия второго, хаотического, слагаемого в (49), мы получаем обыкновенное дифференциальное уравнение. Теперь поймем, как влияет на распределение детерминированное воздействие. Оно приводит к сдвигу (дрейфу) всего распределения как целого с некоторой скоростью v . При этом форма распределения не меняется. Его можно описать уравнением дрейфа

$$\frac{\partial w(x, t)}{\partial t} = -v \frac{\partial}{\partial x} (w(x, t)).$$

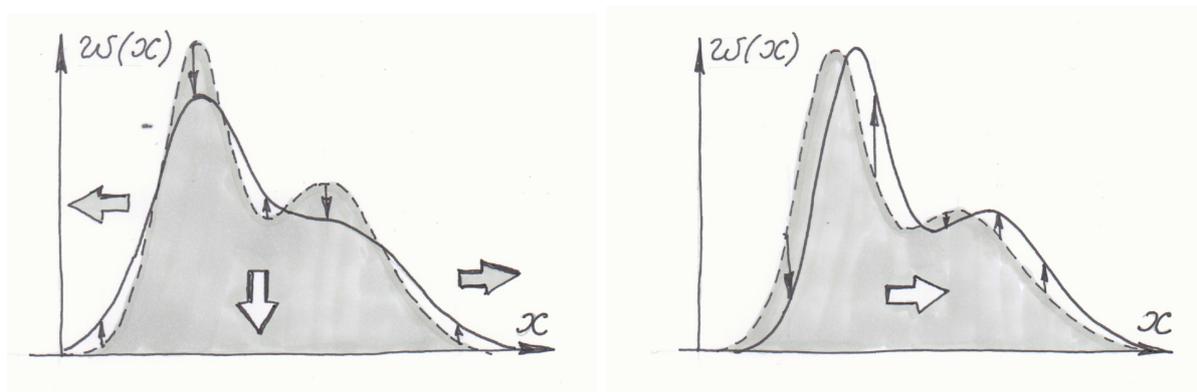


Рис. 58: Эволюция распределения $w(x, t)$ со временем, задаваемая уравнением диффузии (слева), задаваемая уравнением дрейфа (справа)

Видим, что при движении вправо та часть графика, где производная положительная, как бы спускается, то есть производная по времени

отрицательная, и наоборот. Причем, чем круче идет график, тем это изменение (подъем — спуск) заметней.

12.2 Уравнения Фоккера-Планка (УФП)

12.2.1 Полуфеноменологический подход

Уравнение Фоккера-Планка имеет строгий математический вывод. Но можно записать его из полуфеноменологических соображений как уравнение, которое должно описывать и дрейф, и диффузию

$$\frac{\partial w(x, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}(K_1 w(x, t)) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2}(K_2 w(x, t)). \quad (50)$$

Кинетические коэффициенты называются коэффициентом сноса (или дрейфа) K_1 и коэффициентом диффузии K_2 . на самом деле они могут быть функциями от x . Тут важно не путать эти названия с физическим коэффициентом диффузии D_x . Кинетические коэффициенты определяются с помощью приращения за шаг

$$K_s = \left\langle \frac{(\Delta x_\tau)^s}{\tau} \right\rangle, \quad (51)$$

где τ — интервал времени достаточно большой, чтобы корреляции успели затухнуть, и процесс стал марковским, но и достаточно малый, чтобы условное приращение $\Delta x_\tau = x(t + \tau) - x(t)$ за это время было много меньше характерных масштабов процесса.

12.2.2 Математический вывод

Марковский процесс. Случайная величина x_τ отражает значение величины x в момент времени $t + \tau$. Она зависит от значения x в момент времени t . Эту зависимость описывает условная вероятность $p_{t, t+\tau}(x_{t+\tau}|x_t)$ перехода из состояния x в состояние x_τ за время τ

$$w_\tau(x_\tau) = \int p_{t, t+\tau}(x_{t+\tau}|x_t) w(x) dx.$$

Случайное приращение Δx при условии $x(t) = x$ можно записать через характеристическую функцию, которая, в свою очередь, раскладывается через условные моменты $m_s(x) = \langle (\Delta x_\tau)^s \rangle$

$$w_\tau(x) = w(x) + \sum_{s=1}^{\infty} \frac{1}{s!} \left(-\frac{\partial}{\partial x} \right)^s [m_s(x) w(x)].$$

12.2.3 Многомерное УФП с нулевым коэффициентом диффузии

При $K_2 = 0$ многомерное УФП можно записать следующим образом

$$\frac{\partial w(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = - \sum_{m=1}^N \frac{\partial}{\partial x_m} (K_{1m} w(\mathbf{x}, t)).$$

Для динамической системы это уравнение можно преобразовать в уравнение Лиувилля

$$\frac{\partial w(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)}{\partial t} = \sum_{n=1}^{3N} \left(\frac{\partial H}{\partial q_n} \frac{\partial w}{\partial p_n} - \frac{\partial H}{\partial p_n} \frac{\partial w}{\partial q_n} \right),$$

здесь H — гамильтониан системы, т.е. полная энергия системы, выраженная через обобщенные координаты и импульсы q_n и p_n . Кинетические коэффициенты K_{1m} являются производными от гамильтониана по каноническим переменным.

12.3 Связь УФП и СДУ

Теперь возникает вопрос, как связаны коэффициенты в УФП (50) с коэффициентами в СДУ (49). На первый взгляд может показаться, что коэффициент диффузии K_2 будет определяться только шумовым параметром $b(x)$ и интенсивностью шумов D , а коэффициент дрейфа K_1 будет определяться детерминированным параметром $a(x)$. Именно так и будет, если шум в СДУ аддитивный, то есть $b(x) = const$. И так будет при интерпретации Ито. Но давайте представим случай изменения шумового параметра $b'(x) \neq 0$. Например, рассмотрим процесс блуждания броуновской частицы в среде с неоднородным в пространстве вдоль оси X , но постоянным во времени, коэффициентом диффузии $D_x = \lambda \langle v \rangle / 3$. Коэффициент диффузии зависит от длины свободного пробега и скорости частиц. Длина свободного пробега определяется концентрацией, но состояния среды с неоднородной концентрацией быстро исчезают и концентрация выравнивается. Именно благодаря этому мы можем разговаривать. А вот температура часто бывает неоднородной в обычных условиях. Градиенты температур могут устанавливаться надолго. Тогда в более нагретой части пространства молекулы перемещаются быстрее чем в холодной.

Соответственно, в горячей области диффузия происходит быстрее. Летом всегда чем-то пахнет, а морозный зимний воздух часто встречается в поэзии как образ чистоты (отсутствия примеси). Представим такой эксперимент, мы капнули каплю духов в область с градиентом температур. Распределение плотности молекул духов будет расплываться в результате их хаотического движения. Но в горячей области это расплывание

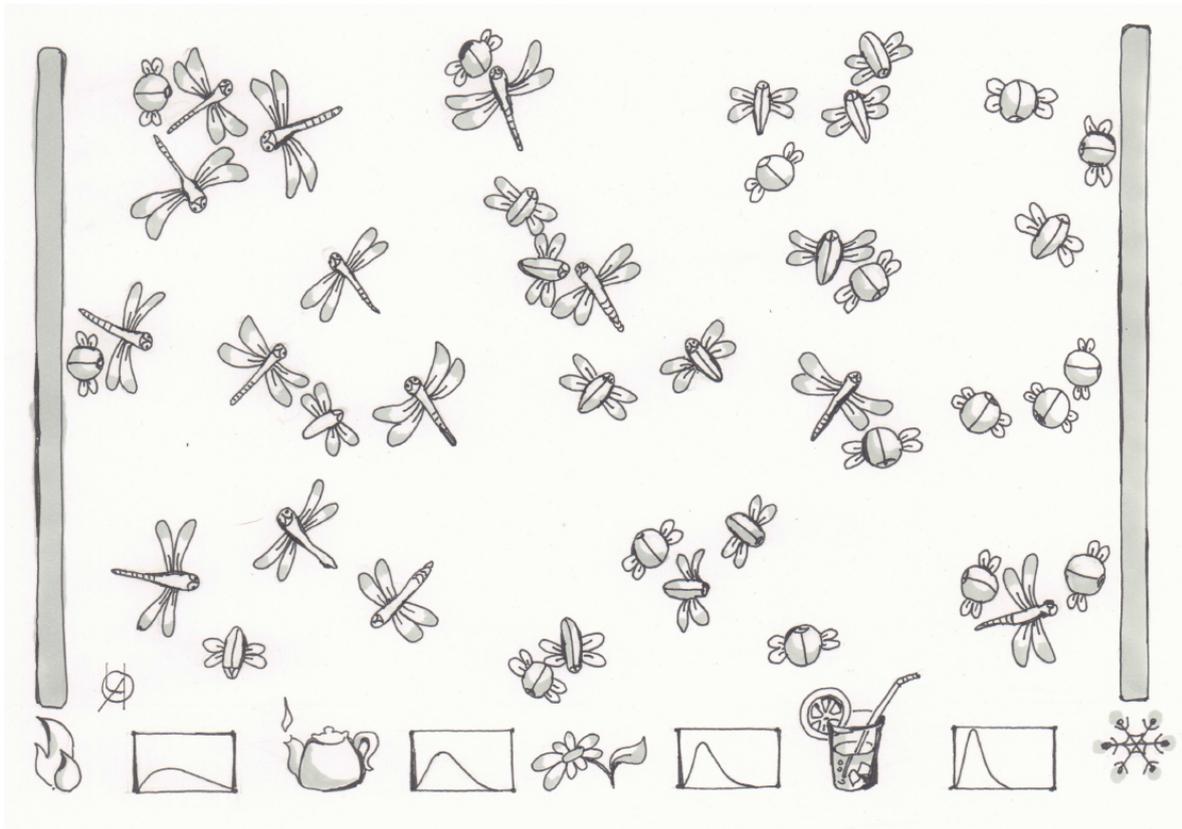


Рис. 59: Градиент температур. В горячей области быстрых молекул всякое перемешивание будет происходить быстрее, чем в холодной

будет происходить быстрее, так что облако духов сместится в сторону горячего газа. Из двух собак, находящихся на одинаковом расстоянии от капли, первой запах духов почует та, которая находится в нагретой области. Можно сказать, что облако дрейфует в более нагретую область. Значит, коэффициент дрейфа K_1 будет определяться не только детерминированным параметром $a(x)$, но еще и производной $b'(x)$. Пользуясь определением кинетических коэффициентов через средние смещения за время шага Δx_τ и выражая их как интеграл от производной по времени, можно доказать, что кинетические коэффициенты УФП запишутся через коэффициенты СДУ следующим образом

$$K_2 = 2Db^2, \quad K_1 = -a + Dbb'. \quad (52)$$

Это интерпретация Стратоновича. Если выкинуть второе слагаемое в K_1 , будет интерпретация Ито. Интерпретация Стратоновича правильная, но чаще используют Ито, потому что она проще. При постоянном значении $b(x)$ они совпадают.

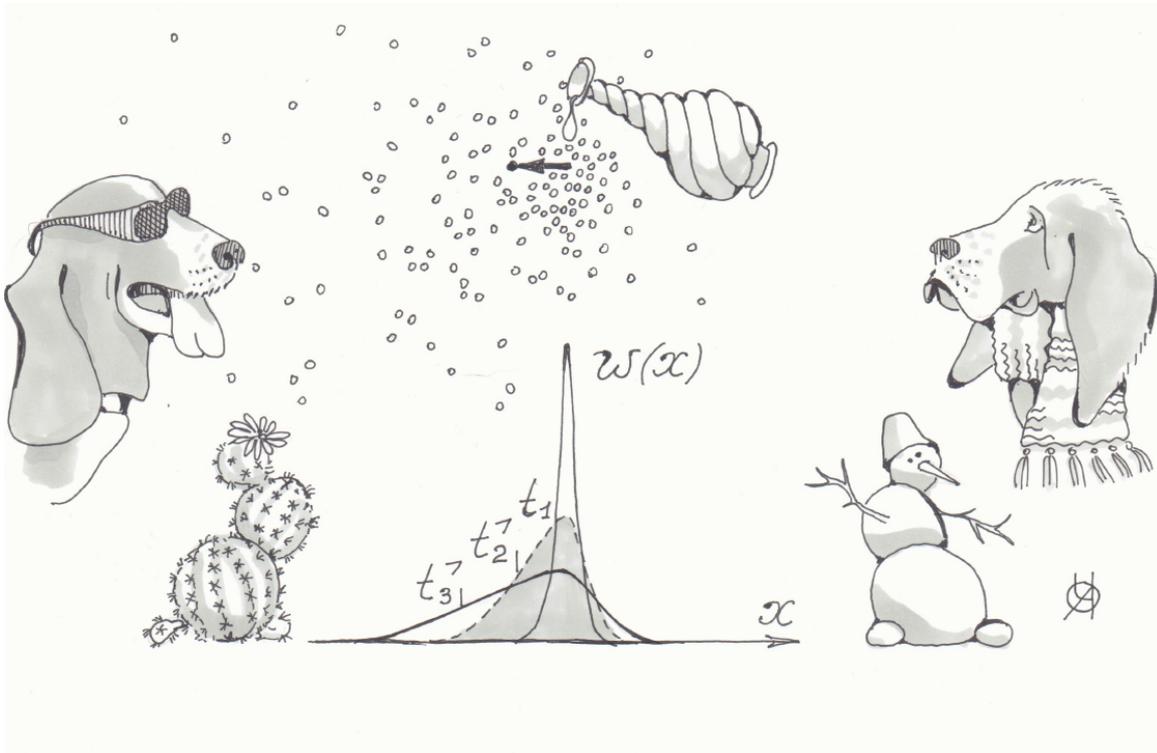


Рис. 60: Дрейф облака диффундирующих частиц при градиенте температур в сторону более нагретой области

12.4 Стационарное распределение вероятностей

Можно найти стационарное распределение вероятностей, приравняв нулю производную по времени в УФП (50). Затем можно убрать одно дифференцирование по x , считая константу равной нулю, и получить распределение с точностью до константы нормировки

$$0 = -K_1 \tilde{w}(x, t) + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x} (K_2 \tilde{w}(x, t)).$$

Решая это уравнение и домножая на константу нормировки C , получаем равновесное распределение через коэффициенты УФП, которое потом можно выразить через коэффициенты СДУ

$$w_{st}(x) = \frac{C}{K_2} \exp \left[2 \int^x \frac{K_1(x') dx'}{K_2(x')} \right] = \frac{C}{|b(x)|} \exp \left[-\frac{1}{D} \int^x \frac{a(x') dx'}{b^2(x')} \right]. \quad (53)$$

12.5 Применение к бильярдам с осциллирующими границами

Применим формализм УФП к рассмотренным нами бильярдным системам с подвижными границами, используя полученные ранее результаты.

12.5.1 Стохастические колебания границ

В случае стохастического колебания границ (φ — равномерно распределенная фаза), шаг $\tau = \lambda/v$ в определении кинетических коэффициентов — это время свободного пробега. Изменение скорости за этот шаг, в соответствии с (41),

$$\langle \Delta v_n \rangle = \frac{u_0^2 \langle \sin^2 \phi_n \rangle}{v} = \frac{u_0^2}{3v} = \frac{u_0^2 \tau}{3\lambda}.$$

Подставляя это в определение первого кинетического коэффициента (51), получаем $K_1 = \frac{u_0^2}{3\lambda}$. Для второго момента, необходимого для второго кинетического коэффициента, получаем

$$\langle (\Delta v_n)^2 \rangle = \left\langle \left(2 u_n \cos \phi_n + 2 \frac{u_n^2}{v_n} \sin^2 \phi_n \right)^2 \right\rangle = 4 \langle u^2 \rangle \langle \cos^2 \phi \rangle = \frac{4}{3} u_0^2.$$

Отсюда второй кинетический коэффициент вычисляется как $K_2 = \frac{4u_0^2 v}{3\lambda}$. Тогда можно проверить, что решение УФП запишется в виде

$$w(v, t) = \frac{2}{\sqrt{2tK_2\pi v}} \exp\left(-\frac{2v}{tK_2}\right).$$

Это гамма-распределение с коэффициентом формы $n = 1/2$. Средняя скорость, получаемая на основе этого распределения, $\langle v \rangle = u_0^2 t / (3\lambda)$. Получаем СДУ с коэффициентами $a = 0$, $b = \sqrt{v}$, $D = 2u_0^2 / (3\lambda)$

$$\dot{v} = \sqrt{v} \xi(t).$$

Интересно, что заменой $x = 2\sqrt{v}$ и распространением на случай отрицательных значений x этот процесс сводится к виннеровскому. Для виннеровского процесса, как мы знаем, УФП имеет вид уравнения диффузии, а решение — расплывающийся Гаусс. Так что наше распределение для v можно получить с помощью обратной замены переменной по правилу $w(v) = w(x) |\partial x / \partial v|$. Мы видим, что формализм Стратоновича дает результаты, которые не противоречат хорошо изученным законам диффузии. Кроме того, они совпадают с результатами численного моделирования, как было показано в предыдущем разделе. Если бы мы применили к этому СДУ формализм Ито при $a = 0$, то получили бы $K_1 = 0$. Это дало бы совершенно другой, неправильный, результат.

12.5.2 Гармонические колебания границ

Если колебания границ гармонические с фазой $\varphi = 2\pi t/T$, то период T является шагом УФП. Используя (44), получаем первый момент для

коэффициента дрейфа (51) $K_1 = 4u_0^2/(3\lambda)$, а коэффициент диффузии в этом случае такой же, как и для стохастического колебания границ. Получаем решение УФП в виде гамма-распределения с коэффициентом формы $n = 2$

$$w(v, t) = \frac{1}{v} \left(\frac{2\lambda v}{u_0^2 t} \right)^2 \exp \left(-\frac{2\lambda v}{u_0^2 t} \right). \quad (54)$$

Соответствующее СДУ с интенсивностью шума $D = 2u_0^2/(3\lambda)$

$$\dot{v} = \frac{u_0^2}{\lambda} + \sqrt{v} \xi(t). \quad (55)$$

Важно отметить, что мы получили это уравнение для системы, на которую оказывается периодическое воздействие. Может показаться странным, что оно оборачивается белым шумом в СДУ. Дело в том, что для системы с ярко выраженными хаотическими свойствами любое воздействие будет восприниматься как хаотическое. Можно так же заметить, что результат не зависит от периода колебания стенок. Всякие свойства и особенности внешнего воздействия исчезают, остается только информация о его интенсивности. Это может быть использовано для создания систем аппаратного уничтожения данных без уничтожения носителя.

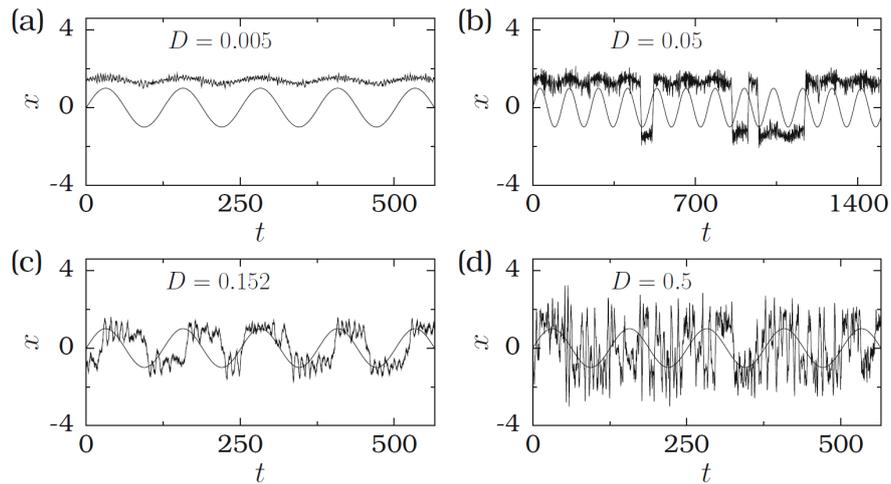
12.6 Стохастический резонанс

Стохастический резонанс — это усиление периодического сигнала под действием белого шума определенной мощности. Он является универсальным явлением, присущим многим системам, находящимся под внешним воздействием одновременно хаотического и слабого периодического сигналов. Пусть частица находится в потенциале с двумя ямами

$$V = -\frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{8}x^4.$$

Каждая потенциальная яма соответствует метастабильному состоянию. Среднее время жизни такого состояния, то есть время, за которое частица переходит из одной ямы в другую, зависит от интенсивности шума D и называется временем Крамерса. Движение частицы будет описываться как хорошо известный дихотомический сигнал. Таким образом, получаем бистабильную систему под воздействием гармонического возмущения. СДУ для этой системы

$$\ddot{x} = -\frac{\partial V}{\partial x} - \gamma \dot{x} + f \sin(\omega t) + \xi(t).$$



Первое слагаемое — сила, созданная потенциалом, второе — трение, третье — периодический сигнал, ну и шум. Резонанс возникает, когда период колебаний совпадает со временем Крамерса. Если шум мал, то он

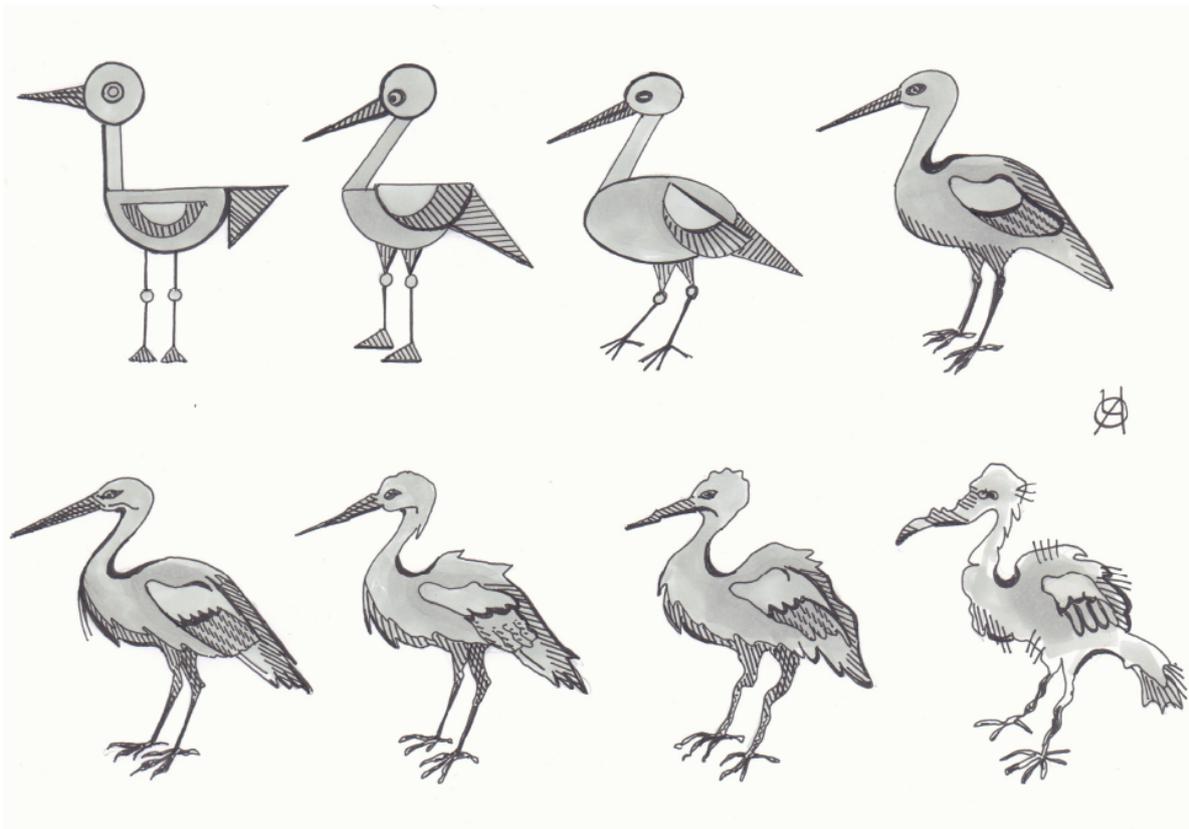


Рис. 61: Оптимальное сочетание случайности и закономерности в изображении аиста

не помогает переходам из ямы в яму, а периодического сигнала недостаточно. Частица остается в одной потенциальной яме. Если шум большой, то ямы и периодический сигнал вообще не заметны. Частица скачет из ямы в яму хаотическим образом. Есть некоторый оптимальный уровень

шума, при котором происходит усиление слабого периодического сигнала, и частица переходит из одной ямы в другую почти периодически. Соотношение сигнал-шум имеет резонансный вид с ярко выраженным максимумом.

Впервые такую модель предложили для объяснения переходов между ледниковыми и не ледниковыми периодами. Подробно изучены органы слуха раков и сверчков. Благодаря стохастическому резонансу они могут слышать очень слабые вибрации воды или воздуха. С помощью стохастического резонанса объясняют некоторые явления в нейронных сетях.

Общая идея, что для любого процесса самоорганизации нужен некоторый оптимальный уровень шумов, подтверждается множеством примеров. Более того, понятия красоты и естественности в искусстве тоже предполагают некоторую вполне определенную порцию спонтанности. Например, изображение аиста будет выглядеть странно, если оно почти лишено случайных элементов, и в том случае, если их слишком много.

13 СДУ и УФП с коррелированным шумом

Зло подкрадывается, как болезнь.

Добро прибегает запыхавшись, как врач.

Г.Честертон

Рассмотрим обобщение СДУ на случай негауссовских коррелированных шумов. А именно, будем рассматривать случайный импульсный процесс в качестве источника шума. Таким образом, СДУ будет описывать сочетание некоторой непрерывной детерминированной динамики системы и резкие случайные изменения. Эта модель гораздо ближе к реальности, поскольку даже броуновская частица, на самом деле, подвержена воздействию именно импульсного процесса отдельных ударов молекул. Оказывается, что хорошо знакомое распределение Максвелла — это тоже решение соответствующего УФП.

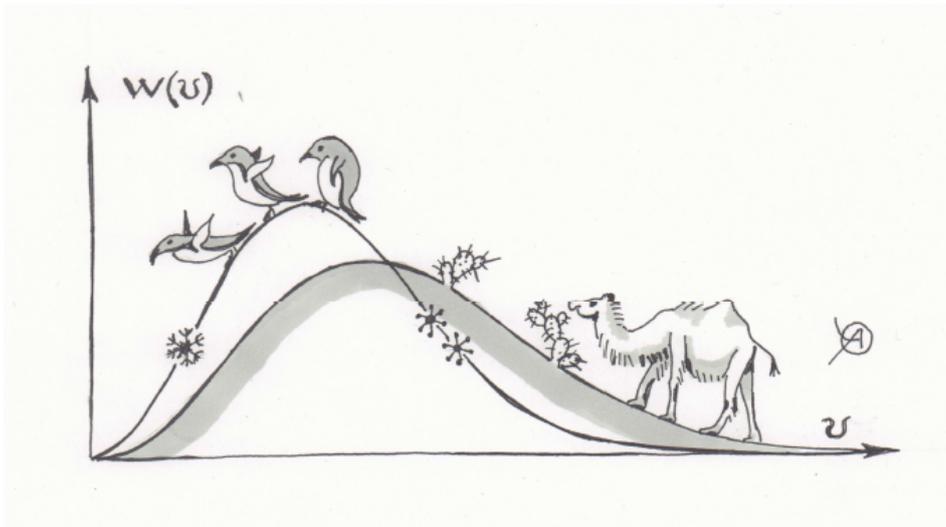


Рис. 62: Распределения Максвелла для температур, соответствующих Антарктиде и Сахаре

13.1 Процесс нарушения стабильности

Простейшее линейное уравнение стабильности запишется так

$$\dot{x} = -ax + x\xi,$$

где ξ — импульсный обновляемый процесс, характеризуемый спектральной плотностью в нуле $S(0)_\xi$ (36). Это уравнение описывает множество процессов. Механическая модель соответствует передемфированной задаче с грузиком на пружинке в ускоряющемся потоке частиц. Сила упругости пытается вернуть грузик, а последовательность ударов частиц уносит. Это может быть простейшей моделью тромба в кровеносном сосуде.

В эпидемиологии эта модель может описывать число инфицированных. Причем, выздоровление происходит детерминированно и непрерывно, а новые заражения — случайно и импульсно при контактах.

С помощью замены переменной $y = \log x$ проинтегрируем СДУ и получим

$$\langle x(t) \rangle = x_0 e^{-at} \left\langle \exp \left\{ \int_0^t \xi(\tau) d\tau \right\} \right\rangle. \quad (56)$$

Введем проинтегрированный шум $\alpha(t) = \int_0^t \xi(\tau) d\tau$. Согласно центральной предельной теореме, эта величина распределена по Гауссу. Значит, среднее от экспоненты этой величины определяется только матожиданием, задающим число импульсов, пришедших к моменту t ,

$$\langle \alpha(t) \rangle = \left\langle \int_0^t \xi(\tau) d\tau \right\rangle = \frac{f}{T} t \quad (57)$$

и дисперсией, определяемой как интеграл от корреляционной функции

$$\sigma_\alpha^2(t) = \left\langle \int_0^t \xi(\tau') d\tau' \int_0^t \xi(\tau'') d\tau'' \right\rangle = \int_0^t \int_0^t \xi \langle \xi(\tau') \xi(\tau'') \rangle d\tau' d\tau''. \quad (58)$$

Заменяя переменные и интегрируя, получаем

$$\sigma_\alpha^2(t) = 2 \int_0^t (t - \tau) K_\xi(\tau) d\tau \approx t \int_{-\infty}^{\infty} K_\xi(\tau) d\tau = S(0)_\xi t = \frac{f^2 \sigma_\xi^2}{T^3} t.$$

Здесь мы предположили, что время корреляции процесса много меньше t и получили, что дисперсия возрастает линейно со временем и определяется спектральной плотностью в нуле. Получаем, используя выражение для характеристической функции гауссовского процесса,

$$\langle x(t) \rangle \simeq x_0 \exp \left\{ \left(\frac{f}{T} + \frac{f^2 \sigma_\xi^2}{2T^3} - a \right) t \right\}. \quad (59)$$

Критерий стабильности тогда $\frac{f}{T} + \frac{f^2 \sigma_\xi^2}{2T^3} < a$. Получили, что возможны такие ситуации, когда при более периодическом импульсном воздействии система может остаться стабильной, а при более случайном — наоборот.

13.2 Процессы Бесселя

Рассмотрим n -мерное броуновское движение. Распределение вероятностей будет представлять из себя ту же расплывающуюся гауссовскую экспоненту, умноженную на якобиан перехода, то есть на x^{n-1} . Это соответствует следующему СДУ

$$\dot{x} = \frac{n-1}{2x} + \xi(t). \quad (60)$$

Особенно интересен Корневой процесс Бесселя. Если заменить переменную $x = \sqrt{v}$ в процессе Бесселя, получим знакомое нам уравнение для скорости бильярдной частицы (55)

$$\dot{v} = a - \frac{Db^2}{2} + b\sqrt{v}\xi(t), \quad (61)$$

для него УФП

$$\frac{\partial w}{\partial t} = -a \frac{\partial w}{\partial v} + Db^2 \frac{\partial^2}{\partial v^2} (vw). \quad (62)$$

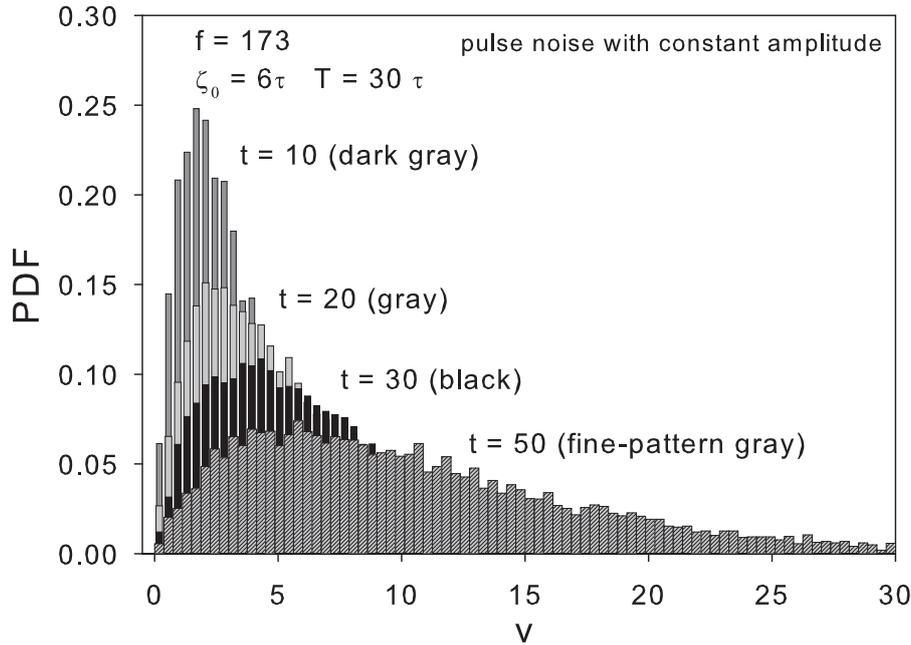


Рис. 63: Динамика распределения при корневом процессе Бесселя

Можно показать, что решение не зависит от деталей статистики шума, а только от его интенсивности $D = S_\xi(0)$ и имеет вид гамма-распределения. Это соответствует результатам, полученным для бильярдов.

13.3 Квазистабильные процессы

Рассмотрим уравнение более общего вида,

$$\dot{v} = av^\mu + v^\gamma \xi(t), \quad (63)$$

при $\mu = 2\gamma - 1$ и $\gamma < 1$ соотношение детерминированной и случайной частей сохраняется на больших временах. Такие процессы называются квазистабильными. Корневой процесс Бесселя — его частный случай. При других значениях μ со временем будет доминировать случайное или

детерминированное слагаемое. УФП для такого процесса

$$\frac{\partial w}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial v} [(a + D\gamma)v^{2\gamma-1}w] + \frac{\partial^2}{\partial v^2} [Dv^{2\gamma}w]. \quad (64)$$

Средняя скорость на больших временах будет меняться как $\langle v \rangle \sim t^{\frac{1}{2(1-\gamma)}}$. В этом случае тип динамики процесса не будет зависеть от корреляционных свойств шума, информация о котором содержится в D .

13.3.1 Стационарные процессы с положительными и отрицательными импульсами

Попробуем разделить стационарные процессы с положительными импульсами (+) и плавным убыванием $\dot{v} = -av^\mu + v^\gamma\xi(t)$, $\mu > \gamma$, и, наоборот, процессы с отрицательными импульсами (-) и плавным ростом $\dot{v} = av^\mu - v^\gamma\xi(t)$, $\mu < \gamma$, в этом списке:

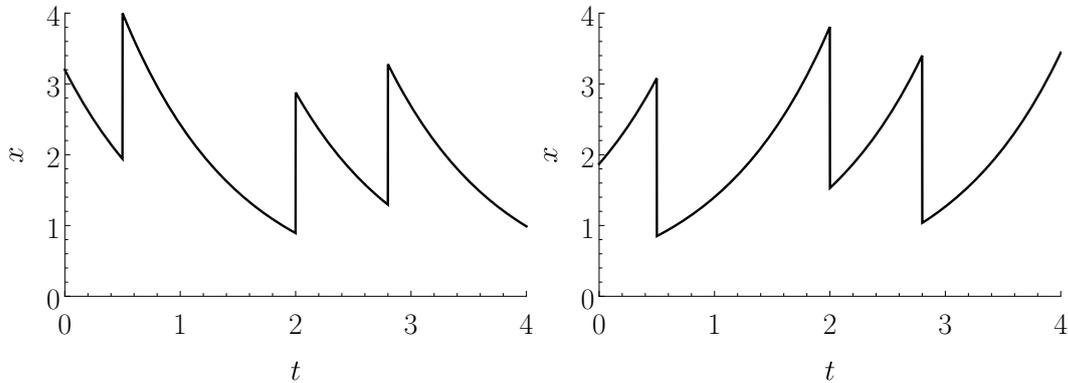


Рис. 64: Стационарные процессы с положительными импульсами и плавным убыванием (слева) и с отрицательными импульсами и плавным ростом (справа)

1. Уровень жизни кочевников, учитывая переселения на новую территорию
2. Уровень жизни оседлых народов, учитывая пожары, эпидемии и набеги врагов
3. Количество воды в капле, свисающей с сосульки
4. Численность хищника, питающегося леммингами
5. Толщина слезной пленки на глазу



Рис. 65: Моргание — квазипериодический процесс

6. Количество пыли на чем-то в жилом помещении
7. Количество зелени на дачной грядке
8. Баланс на карте, куда начисляют зарплату

9. Количество воды в большой невысыхающей до конца луже
10. Модуль скорости мяча в футболе
11. Скорость парящего орла
12. Количество товара на полке в супермаркете
13. Количество мух на спине лошади, отмахивающейся время от времени хвостом
14. Состояние произведения искусства, которое регулярно реставрируют
15. Объем воздуха в легких оперной певицы

14 Современные направления исследования флуктуаций

Наука и ум подчиняются моде столько же,
сколько сережки и пуговики.

Д. Фонвизин

В этом разделе мы рассмотрим несколько наиболее быстро развивающихся и популярных направлений исследования флуктуаций.

14.1 Кластеры золота на чешуйках графита

Свойства графита — одно из модных направлений. Особая гладкость чешуек графита приводит к их сверхскользкости. Коэффициент трения стремится к нулю при определенных поворотах или деформациях чешуек. Каждая чешуйка, даже будучи размером порядка микрометров заметным образом участвует в двумерном тепловом движении как броуновская частица. Если на ее поверхность напыляются кластеры металлов, движение чешуйки ускоряет диффузию этих кластеров.

Рассмотрим движение кластеров, состоящих из большого числа атомов золота, на поверхности чешуйки графита. Диффузия таких кластеров имеет аномально высокие скорости, и можно предположить, что это связано со свойствами графитовой подложки, так как на другой подложке коэффициенты диффузии значительно меньше. Можно так же показать, что эта скорость зависит от того, связана ли чешуйка с поверхностью или нет. Взаимодействие кластера с чешуйкой можно сравнить с взаимодействием бильярдной частицы с движущимся рассеивателем. Результатом, как мы знаем, является ускорение Ферми, которое будет зависеть от подвижности чешуйки и, соответственно, от скорости ее движения. Таким образом, можно моделировать диффузию кластеров на движущихся чешуйках с помощью бильярдных с движущимися границами. Получим линейный рост скорости (44), а значит и коэффициента диффузии (48). Для периодического бильярда, или газа Лоренца, свободный пробег предполагается равным размеру ячейки, а за скорость частицы принимается скорость перехода из ячейки в ячейку. В нашем случае из-за ускорения Ферми вероятность скачка из ячейки в ячейку зависит от времени. Поскольку коэффициент диффузии пропорционален времени, средний квадрат отклонения пропорционален квадрату времени, то есть, в системе наблюдается супердиффузия бильярдных частиц и, соответственно, кластеров на чешуйках графита. Механизм такого аномального переноса отличается от классического механизма Леви. Его можно объяснить с помощью термодинамической интерпретации ускорения Ферми

как рост эффективной температуры бильярдной частицы.



Рис. 66: Осаждение холодных кластеров, разогрев и присоединение к островку

Далее интересно проанализировать распределение скоростей этих ускоряющихся кластеров. Кластеры насаждаются на поверхность графита с потоком J и начальным распределением $f(v)$. Затем ускоряются в соответствии с моделью Ферми, потом прикрепляются к островку с вероятностью αv . Можно записать уравнение баланса для скоростей свободных кластеров

$$\frac{\partial n(v, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial v} \left(a + \frac{D}{2} \right) n(v, t) + D \frac{\partial^2}{\partial v^2} v n(v, t) + J f(v) - \alpha v n(v, t). \quad (65)$$

Здесь первые два слагаемых взяты из УФП для бильярдной частицы. В результате возможно стационарное состояние с эффективной температурой $T = \frac{m a_F}{2k \alpha}$. При этом ускорение Ферми как бы разогревает кластеры, а присоединение к островку — охлаждает. От скорости движения кластеров зависит, какие структуры будут формироваться на поверхности. При быстрой диффузии будут получаться большие островки, а при медленной — много маленьких. В последнем случае будет велика вероятность встречи двух блуждающих кластеров и образование ими зародыша нового островка. Таким образом, можно регулировать параметры структуры на поверхности, меняя температуру или подвижность чешуйки. Эти структуры могут иметь фрактальную размерность и использоваться в качестве катализаторов химических реакций.

14.2 Тепловой диод

Большие технологические возможности могли бы открыться, если бы существовали объекты с большой теплопроводностью в одном направлении и с малой в другом. Это позволило бы создавать устройства типа классического демона Максвелла. Причем, важно, чтобы этот прибор был микроскопическим. Бильярдная система, где теплопроводность в одном направлении отличается от теплопроводности в другом, моделирует пористую перегородку. Она состоит из двух камер со свободно вращающимися дисками разного размера.

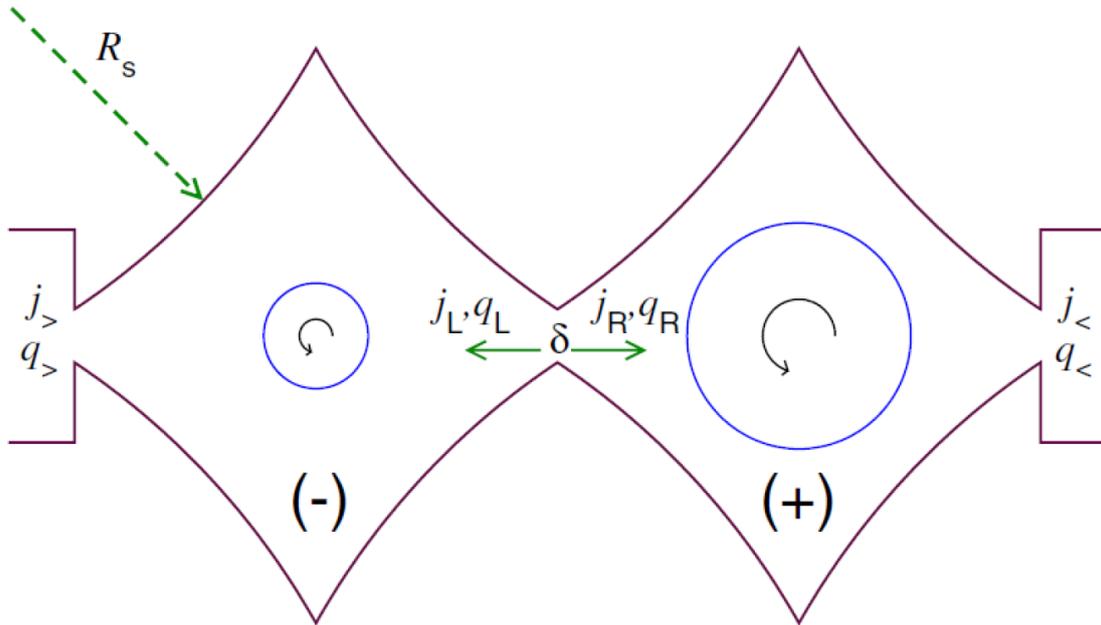


Рис. 67: Бильярдная модель теплового диода

При столкновении с диском частица меняет тангенциальную составляющую своей скорости и скорость вращения диска. Таким способом частицы обмениваются энергией друг с другом. В камере с большим диском таких обменов больше, чем при малом диске. Численные исследования обнаружили асимметрию в передаче тепла. Ее характеризует следующий коэффициент

$$\delta j = \frac{j_> - j_<}{j_> + j_<}, \quad \delta q = \frac{q_> - q_<}{q_> + q_<},$$

где $j \propto n\sqrt{T}$ — число частиц, влетающих в единицу времени, и $q = \frac{3}{2}jT$ — энергия, переносимая частицами в единицу времени.

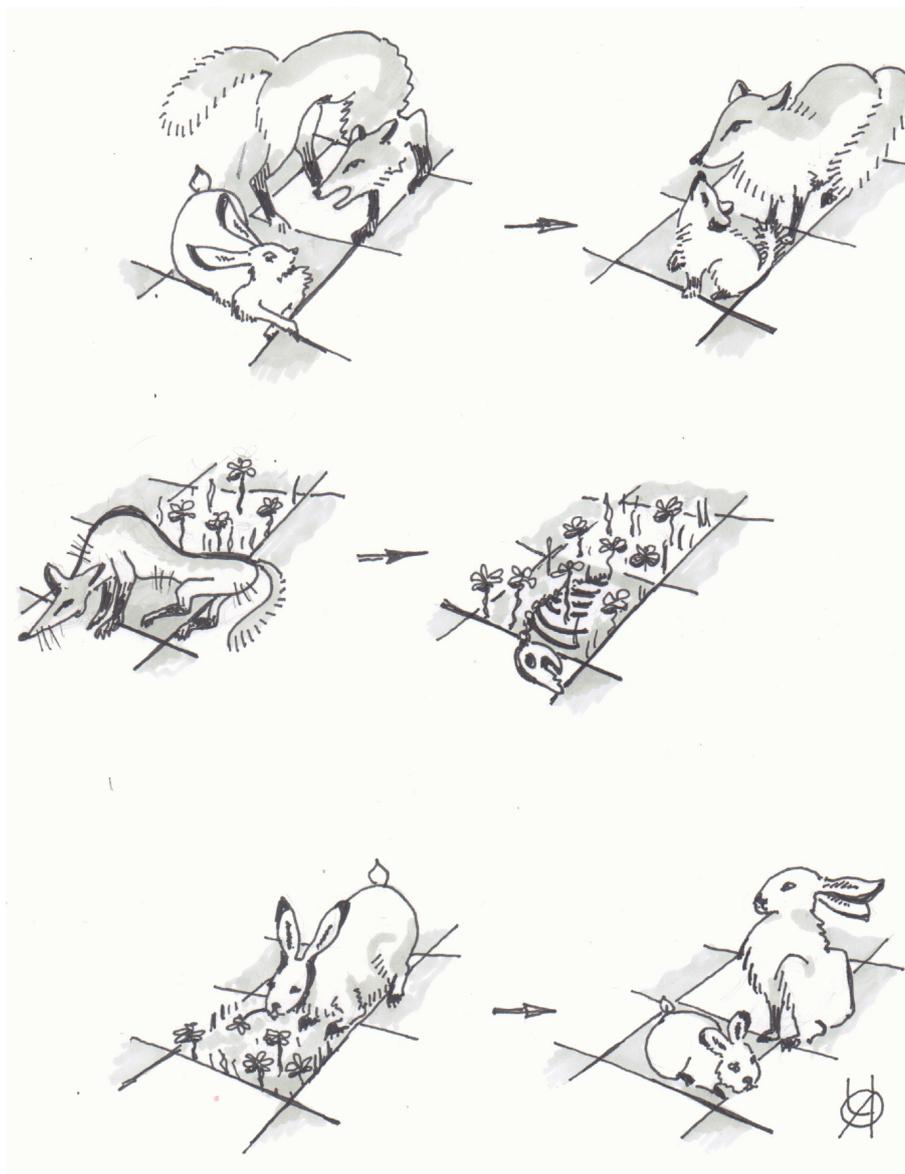


Рис. 68: Модель хищник-жертва-корм на дискретной поверхности

14.3 Химические реакции на фрактальной поверхности

Рассмотрим два вещества на поверхности, причем поверхность может иметь различную размерность. Второе вещество (2) превращает первое (1) в себе подобное. Эту реакцию описывает кинетический коэффициент k_s , то есть вероятность в единицу времени. Вещество (2) может испариться с поверхности, оставив пустую ячейку (s) с вероятностью k_1 . Первое вещество может адсорбироваться в пустую ячейку с вероятностью k_2 . Система описывается уже знакомыми уравнениями Лотка-Вольтерры. Можно привести аналогию с системой хищник-жертва-корм(трава). Вещество (2) соответствует хищнику, (1) — жертве, пустая ячейка (s) — траве. Чтобы учесть пространственное распределение, разобьем плос-

кость на квадратные ячейки. Если в соседней с хищником ячейке есть жертва, она может "превратиться" в еще одного хищника (съел и сытый размножился). Аналогично, жертва поедает траву и размножается, ну и трава может поглотить хищника, поскольку для него губительно отсутствие жертвы. Тогда для каждой ячейки можно записать систему уравнений

$$\frac{dx_1(t)}{dt} = k_2 x_1 s - k_s x_1 x_2, \quad \frac{dx_2(t)}{dt} = k_s x_2 x_1 - k_1 x_2 s, \quad \frac{ds(t)}{dt} = k_1 x_2 s - k_2 x_1 s.$$

Численное исследование и эксперимент показали, что в зависимости от соотношения кинетических коэффициентов в системе возможно два принципиально разных режима: колебания концентраций, при близких значениях кинетических коэффициентов, и поглощение всей поверхности одним веществом, если кинетические коэффициенты сильно отличаются. Качественное изменение режима при достижении коэффициентами определенных значений напоминает фазовый переход. Попробуем описать это с помощью физической модели и применить теорию фазовых переходов. Представим броуновскую частицу, которая движется в потенциале из трех ям, соответствующих трем состояниям: (1), (2) и (s). Тогда

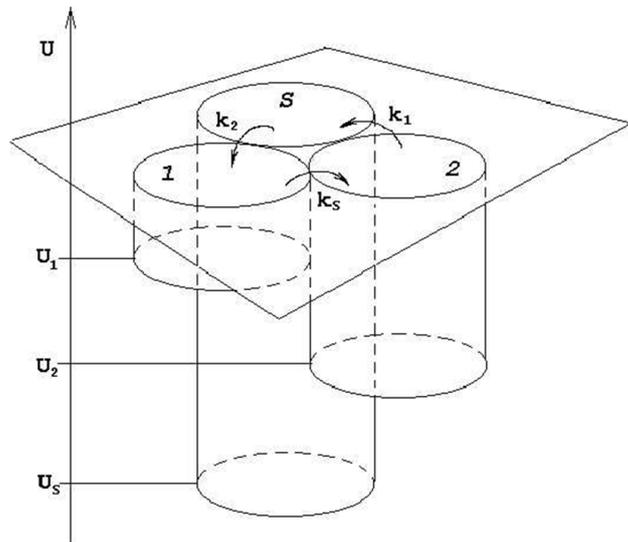


Рис. 69: Воображаемый набор потенциальных ям с энергией, определяемой кинетическими коэффициентами

можно определить потенциальную энергию этих ям, зная кинетические коэффициенты (22)

$$k_2 = \exp \frac{U_s}{kT}, \quad k_1 = \exp \frac{U_2}{kT}, \quad k_s = \exp \frac{U_1}{kT}.$$

Свободная энергия модельной системы будет определяться средней потенциальной энергией, температурой и энтропией

$$F(k_1, k_2, k_s, D) = \langle U \rangle + kT/2 - ST.$$

Максимум F разделяет режимы осцилляций и поглощения всей поверхности одним элементом. Эффективная температура характеризует скорость каких-либо изменений в системе $T = \tau(k_1 + k_2 + k_s)$.

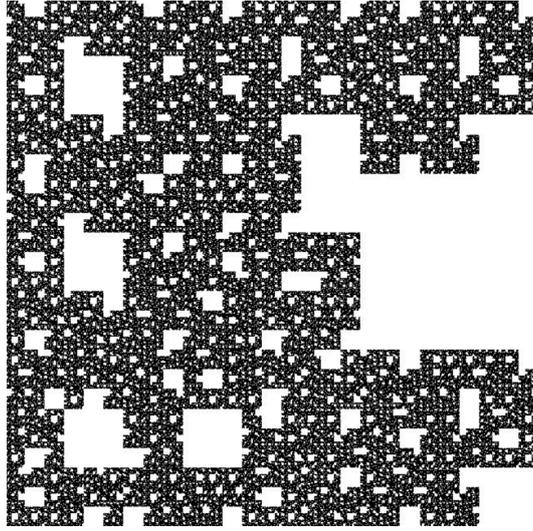


Рис. 70: Случайный фрактал Серпинского

Энтропия определяется как мера неопределенности состояния каждой ячейки, она зависит от числа соседей, то есть от размерности поверхности. Поэтому можно управлять реакцией, выбирая поверхность нужной размерности. Например, фрактальную поверхность в виде случайного фрактала Серпинского. Предсказания режима на основе этого термодинамического подхода совпали с результатами численного описания. Мы видим, что термодинамический подход и теория фазовых переходов могут применяться не только для физических задач. И еще раз убеждаемся в общности статистических законов.