Σημειώσεις Στοχαστικής Δυναμικής

22 Νοεμβρίου 2023

1 1 Τυχαίος περίπατος με διακριτά βήματα

Ας αρχίσουμε με έναν τυχαίο περίπατο στην ευθεία με διακριτά ανεξάρτητα διαδοχικά βήματα μήκους δ, είτε δεξιά είτε αριστερά με πιθανότητα p, q αντιστοίχως, με $p + q = 1$. Η πυκνότητα πιθανότητας, $P(x)$, για μετατόπιση του σωματιδίου κατά x είναι:

$$P(x) = p\delta(x - \delta) + q\delta(x + \delta) \ .$$

Η θέση του σωματιδίου μετά από n τέτοια ανεξάρτητα βήματα:

$$S_n = \sum_{i=1}^{n} x_i \ ,$$

όπου x_i το i-οστό βήμα. Επειδή τα βήματα είναι ανεξάρτητα, $\langle (x_i - \langle x_i \rangle)(x_j - \langle x_j \rangle) \rangle = \delta_{ij}$ η μέση τιμή της τελικής μετατόπισης θα είναι το άθροισμα της μέσης μετατόπισης σε κάθε βήμα που είναι

$$\langle x_i \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x p(x) dx = (p - q)\delta \ ,$$

οπότε

$$M = \langle S_n \rangle = (p - q)n\delta \ ,$$

2 και η διασπορά της S_n από τη μέση τιμής της θα είναι το άθροισμα της διασποράς σε κάθε βήμα που
3 είναι:

$$\begin{aligned}
\langle (x_i - \langle x_i \rangle)^2 \rangle &= \langle x_i^2 \rangle - \langle x_i \rangle^2 && (1)\\
&= \int_{-\infty}^{\infty} x^2 p(x) dx - (p - q)^2 \delta^2 && (2)\\
&= (p + q - (p - q)^2)\delta^2 && (3)\\
&= ((p + q)^2 - (p - q)^2)\delta^2 && (4)\\
&= (p + q + p - q)(p + q - p + q)\delta^2 && (5)\\
&= 4pq\delta^2 \ . && (6)
\end{aligned}$$

Συνεπώς:

$$C = \langle (S_n - \langle S_n \rangle)^2 \rangle = 4pqn\delta^2 \ .$$

Εάν τώρα θεωρήσουμε ότι τα βήματα γίνονται κάθε τ μονάδες του χρόνου, τότε στον χρόνο t έχουν επιτελεστεί περί τις $n = t/\tau$ μετατοπίσεις και συνεπώς η μέση θέση του σωματιδίου και η διασπορά περί τη μέση τιμή θα είναι :

$$M = (p-q)\frac{\delta}{\tau}t \ \ , \ \ C = 4pq\frac{\delta^2}{\tau}t \ . \tag{7}$$

Αν $p = q = 1/2$ έχουμε τον κλασσικό τυχαίο περίπατο με:

$$\langle S_n \rangle = 0 \ \ , \ \ \langle S_n^2 \rangle = \frac{\delta^2}{\tau}t \ .$$

Οι εξισώσεις αυτές εκφράζουν τη χαρακτηριστική φυσική συμπεριφορά ενός τυχαίου περιπάτου: ενώ η μέση θέση του σωματιδίου είναι μηδενική η διασπορά στη θέση του σωματιδίου αυξάνεται γραμμικά με τον χρόνο. Εάν αρχικά ένας μεγάλος αριθμός σωματιδίων βρίσκονταν στο $x = 0$ και διενεργούσε τυχαίο περίπατο, στον χρόνο t τα σωματίδια θα ήταν κατανεμημένα σχεδόν συμμετρικά (και ακριβώς συμμετρικά στο όριο $N \to \infty$) περί την αρχή και η τυπική απόκλιση από την αρχή θα αυξάνονταν ως $\sqrt{(\delta^2/\tau)\,t}$.

Η παραπάνω μαθηματική περιγραφή προτείνεται ως περιγραφή της κίνησης Brown. Η περιγραφή αυτή είναι όμως κατ'ουσίαν περιγραφή της κίνησης Brown στην Αριστοτέλεια μηχανική και όχι στο Νευτώνειο πλαίσιο. Διότι αν υποθέταμε ότι ο τυχαίος περίπατος προκύπτει από κρούσεις του σωματιδίου, τότε ο τυχαίος περίπατος διενεργείται στις ταχύτητες των σωματιδίων που δέχονται απανωτά κρούσεις, και σύμφωνα με τα παραπάνω αυτό οδηγεί σε διασπορά των ταχυτήτων που αυξάνει γραμμικά με τον χρόνο και δηλαδή οδηγεί σε γραμμική αύξηση με τον χρόνο της κινητικής ενέργειας των σωματιδίων, κάτι που δεν συμβαίνει.

2 Απόδειξη ότι η διασπορά τυχαίου περιπάτου αυξάνεται γραμμικά με το χρόνο μέσω τριγώνου Pascal

3 Στο συνεχές όριο ο τυχαίος περίπατος περιγράφει ένα φαινόμενο διάχυσης

Η διακριτή ανάλυση ανέδειξε την ποσότητα δ^2/τ ως τον ρυθμό αύξησης της διασποράς με τον χρόνο. Μάλιστα αν $\delta \to 0$, $\tau \to 0$ από τα παραπάνω βλέπουμε ότι αν τα δ και τ τείνουν στο 0 με τον ίδιο ρυθμό τότε η τελική διασπορά είναι μηδενική στο όριο και τα σωματίδια δεν διαχέονται. Από την (7) βλέπουμε επίσης ότι σε αυτή την περίπτωση τα σωματιδίων θα κινούνταν συστηματικά σε μία διεύθυνση χωρίς διάχυση αν $p \neq q$. Για να έχουμε διάχυση απαιτείται στο όριο $\delta \to 0$, $\tau \to 0$ ο λόγος δ^2/τ να έχει μη μηδενικό όριο δηλαδή το δ να μηδενίζεται με τον ίδιο ρυθμό με το $\sqrt{\tau}$. Είναι ενδιαφέρον να παρατηρήσετε τι συμβάνει στην εξέλιξη της μέσης τιμής που δίνεται στην εξ. (7)) όταν $p \neq q$. Στο όριο $\delta \to 0$, $\tau \to 0$ με $\delta = O(\sqrt{\tau})$,

$$M = (p-q)\frac{\delta}{\tau}t = (p-q)\frac{\delta^2}{\tau}\frac{1}{\delta}\,t \to \infty.$$

Αυτό σημαίνει ότι αν $p \neq q$, παρότι το δ^2/τ δεν έχει μηδενικό όριο, διασπορά δεν θα παρατηρηθεί διότι σε χρόνο $t = O(1)$ τα σωματίδια θα έχουν πάει στο άπειρο. Μόνο αν $p - q = O(\delta)$ μπορεί να παρατηρηθεί και μετατόπιση και διασπορά στο συνεχές όριο. Αυτό είναι σημαντικό συμπέρασμα. Υποθέστε ότι υπάρχει κάποια φυσική αιτία που ευνοεί κίνηση προς μία κατεύθυνση π.χ. εισάγεται ένα ηλεκτρικό πεδίο και τα ηλεκτρόνια, αν δεν υπήρχαν τυχαίες κρούσεις, θα κινούνταν όλα ευθύγραμμα αντίθετα από τη διεύθυνση του πεδίου. Η παραπάνω παρατήρηση μας βεβαιώνει ότι αυτό θα συμβεί και όταν γίνονται κρούσεις.

Θα δείξουμε τώρα ότι η δυναμική του τυχαίου περιπάτου στο συνεχές όριο, δηλαδή όταν τα σωματίδια είναι κατανεμημένα με συνεχή πυκνότητα, ρ, και με $\delta \to 0$, $\tau \to 0$, οδηγεί σε διάχυση της πυκνότητας των σωματιδίων που διέπεται από την εξίσωση διάχυσης

$$\partial_t \rho = \nu \partial_{xx} \rho \ ,$$

όπου:

$$\lim_{\tau,\delta \to 0} \frac{\delta^2}{\tau} = 2\nu \ ,$$

και όχι στο μηδέν, όπως θα μπορούσε κάποιος να αναμένει. Αυτό κρύβει μία σημαντική ιδιότητα που πρέπει να κατανοήσουμε βαθύτερα. Επειδή η πυκνότητα ρ που θα παρατηρηθεί είναι ανάλογη της πιθανότητας, p, να βρίσκεται το σωματίδιο στη θέση x, τη χρονική στιγμή, t, αναμένουμε και η πιθανότητα να ικανοποιεί την εξίσωση διάχυσης. Η τελική καταληκτική κατανομή αναμένεται από το κεντρικό οριακό θεώρημα να είναι γκαουσιανή. Θα δείξουμε από πρώτες αρχές στην περίπτωση του απλού περιπάτου ότι ισχύει το κεντρικό οριακό θεώρημα και ότι η πιθανότητα ικανοποεί εξίσωσης διάχυσης.

Αν $p(x,t)$ είναι η πιθανότητα να βρίσκεται το σωματίδιο στο χωροχρονικό σημείο x και t τότε θα ισχύει ότι

$$\begin{aligned} p(x, t+\tau) &= \int_{-\infty}^{\infty} dx' \ p(x',t) \left(\frac{1}{2}\delta(x - x' + \delta) + \frac{1}{2}\delta(x - x' - \delta) \right) \\ &= \frac{1}{2} \left(p(x+\delta, t) + p(x-\delta, t) \right) \\ &= p(x,t) + \frac{\delta^2}{2} \partial_{xx} p(x,t) + O(\delta^4) \ , \end{aligned}$$

ή

$$\partial_t p = \frac{\delta^2}{2\tau} \partial_{xx} p(x,t) + O(\delta^4/\tau, \tau) \ .$$

Οπότε πάλι υπό την προϋπόθεση ότι το όριο $\delta \to 0$, $\tau \to 0$ του δ^2/τ είναι πεπερασμένο προκύπτει ότι η πιθανότητα εξελίσσεται σύμφωνα με την εξίσωση διάχυσης:

$$\partial_t p = \nu \partial_{xx} p(x,t) \ ,$$

με συντελεστή διάχυσης

$$\nu \stackrel{\text{def}}{=} \lim_{\delta \to 0, \tau \to 0} \frac{\delta^2}{2\tau} .$$

Θα δείξουμε τώρα ότι αυτό συνεπάγεται κανονική (γκαουσιανή) κατανομή με διασπορά που αυξάνεται γραμμικά με το t.

Μετασχηματίζοντας κατά Fourier:

$$p(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk \; \hat{p}(k,t) e^{-ikx} \quad , \quad \hat{p}(k,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \; p(x,t) e^{ikx} \;\; ,$$

την εξίσωση διάχυσης έχουμε ότι:

$$\partial_t \hat{p}(k,t) = -\nu k^2 \; \hat{p}(k,t) \; ,$$

και συνεπώς

$$\hat{p}(k,t) = e^{-\nu k^2 t} \hat{p}(k,0) \; ,$$

και άρα αν αρχικά όλα τα σωματίδα ήταν συγκεντρωμένα στην αρχή, ώστε αρχικά η κατανομή πιθανότητας να ήταν η $p(x,0) = \delta(x)$, και επειδή $\hat{p}(k,0) = 1/\sqrt{2\pi}$, η κατανομή πιθανότητας στον χρόνο t είναι:

$$\begin{aligned} p(x,t) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \; e^{-\nu k^2 t - ikx} \\ &= \frac{e^{-x^2/(4\nu t)}}{2\pi\sqrt{\nu t}} \int_{-\infty}^{\infty} dk \; e^{-(k + ix/\sqrt{2\nu t})^2} \\ &= \frac{e^{-x^2/(4\nu t)}}{\sqrt{4\pi\nu t}} \; . \end{aligned} \tag{8}$$

Δηλαδή στον χρόνο t η κατανομή των θέσεων του σωματιδίου είναι μία γκαουσιανή με μηδενική μέση τιμή και διασπορά:

$$\langle x^2 \rangle \;\; = \;\; \int_{-\infty}^{\infty} dx \; x^2 \; \frac{e^{-x^2/(4\nu t)}}{\sqrt{4\pi\nu t}} = 2\nu t \; , \tag{9}$$

όπως ακριβώς αναμένεται από τον τυχαίο περίπατο. Η κατανομή αυτή συμβολίζεται ως $N(0, 2\nu t)$.

Δηλαδή συμπεραίνουμε ότι στο συνεχές όριο η τελική θέση έχει γκαυσιανή κατανομή και διασπορά που αυξάνεται με τον χρόνο. Επειδή η τελική θέση μπορεί να εκληφθεί ότι προκύπτει από χρονική ολοκλήρωση τυχαίων μεταβλητών, συμπεραίνουμε ότι όταν ολοκληρώνουμε ανεξάρτητες τυχαίες μεταβλητές η τιμή του ολοκληρώματος έχει τυπική απόκλιση (η τετραγωνική ρίζα της διασποράς) που αυξάνεται με την τετραγωνική ρίζα του χρόνου. Πως όμως είναι δυνατόν αυτό;

4 Πώς μπορεί να περιγραφεί το φαινόμενο διάχυσης με ένα συνεχή περίπατο;

Θα έλεγε κάποιος ότι αν θα θέλαμε να μελετήσουμε στο συνεχές όριο το ολοκλήρωμα τυχαίων μεταβλητών θα μελετούσαμε στο όριο $\delta t \to 0$ τη κατανομή του $x(t)$ που προκύπτει από την χρονική προώθηση της διακριτής αναδρομικής σχέσης:

$$x(t + \delta t) = x(t) + \delta t \; \xi(t) \;\; , \tag{10}$$

όπου $\xi(t)$ είναι μια συνεχής στοχαστική μεταβλητή, που για ευκολία υποθέτουμε ότι ανά πάσα στιγμή έχει γκαουσιανή κατανομή $N(0,1)$, με πυκνότητα $p(x) = \exp(-x^2/2)/\sqrt{2\pi}$. Στο όριο $\delta t \to 0$ η παραπάνω σχέση ελπίζουμε να ισοδυναμεί με επίλυση της στοχαστικής διαφορικής εξίσωσης

$$\frac{dx}{dt} = \xi \ , \tag{11}$$

ή η θέση, που είναι το ολοκλήρωμα των τυχαίων μεταβλητών, να είναι η τυχαία μεταβλητή

$$x(t) = x_0 + \int_0^t ds\, \xi(s) ds \ . \tag{12}$$

Το ερώτημα είναι τι κατανομή συνεπάγεται η (12) με την ερμηνεία του ορίου $\delta t \to 0$ της (10) με ξ γκαυσιανό με κατανομή ανά πάσα στιγμή $N(0,1)$; Αθροίζοντας όλες αυτές τις ανεξάρτητες γκαουσιανές σχηματίζουμε την

$$x(t) = x_0 + \sum_{i=1}^{n} \delta t\, \xi_n, \qquad \delta t = t/n \ .$$

Στο όριο $n \to \infty$ έχουμε το ολοκλήρωμα. Όμως επειδή η στοχαστική μεταβλητή $\delta t \xi(t)$ έχει κατανομή $\delta t N(0,1) = N(0, \delta t^2)$ και το άθροισμα οποιουδήποτε αριθμού γκαουσιανών στοχαστικών μεταβλητών είναι πάλι μια γκαουσιανή μεταβλητή με μέση τιμή και διασπορά το άθροισμα των μέσων τιμών και διασπορών των γκαουσιανών, η $x(t)$ είναι μία γκαουσιανή μεταβλητή με κατανομή $N(0, n\delta t^2) = N(0, t\delta t)$ η οποία στο όριο $\delta t \to 0$, που αντιστοιχεί στο ολοκλήρωμα, καταλήγει στη σίγουρη μηδενική μεταβλητή με κατανομή $N(0,0) \stackrel{\text{def}}{=} \delta(x)$. Το ολοκλήρωμα τυχαίων γκαουσιανών μεταβλητών δεν οδηγεί σε τυχαία μεταβλητή διότι οι τυχαίες μεταβλητές αλληλοαναιρούνται. Η παραπάνω ολοκλήρωση είναι ισοδύναμη με ένα τυχαίο περίπατο στον οποίο έχουμε θέση το χωρικό βήμα δ ίσο με το χρονικό $\tau = \delta t$ και έχουμε προχωρήσει στο όριο $\delta t \to 0$. Στην περίπτωση αυτή ξέρουμε ότι δεν υπάρχει διασπορά. Για να υπάρξει διασπορά πρέπει το χωρικό βήμα να ληφθεί ανάλογο με $\sqrt{\delta t}$, δηλαδή να ερμηνεύσουμε τη συνεχή λύση της

$$\frac{dx}{dt} = \xi \ ,$$

ως το όριο $\delta t \to 0$ του τυχαίου περιπάτου

$$x(t + \delta t) = x(t) + \sqrt{\delta t}\, \xi(t) \ , \tag{13}$$

όπου $\xi(t)$ είναι πάλι μια συνεχής στοχαστική μεταβλητή, που για ευκολία ας υποθέσουμε ότι ανά πάσα στιγμή έχει γκαουσιανή κατανομή $N(0,1)$. Διότι πράγματι η τυχαία μεταβλητή

$$x(t) = x_0 + \sum_{i=1}^{n} \sqrt{\delta t}\, \xi_n \ , \qquad t = n\delta t \ , \tag{14}$$

έχει την γκαουσιανή κατανομή

$$\sum_{i=1}^{n} \sqrt{\delta t}\, N(0,1) = N(0,t) \ , \tag{15}$$

η οποία στο όριο $\delta t \to 0$ έχει διασπορά που αυξάνεται γραμμικά με τον χρόνο. Δηλαδή για να αποφύγουμε την αλληλοαναίρεση πρέπει κατά την ολοκλήρωση να πολλαπλασιάζουμε την τυχαία μεταβλητή με μία ποσότητα μεγαλύτερη από το δt. **Είναι καταπληκτικό ότι οι φυσικές παρατηρήσεις επιβεβαιώνουν ότι πρέπει να δίνουμε αυτή την περίεργη ερμηνεία στα ολοκληρώματα στοχαστικών μεταβλητών και ότι έτσι γίνονται τα αθροίσματα τυχαίων γεγονότων στη φύση εάν επιμένουμε να θεωρούμε τα φυσικά φαινόμενα στο συνεχές όριο.**

Μπρορούμε να χρησιμοποιούμε τον συνηθισμένο απειροστικό λογισμό αλλά θα πρέπει τότε να ορίσουμε μία νέα γκαουσιανή στοχαστική μεταβλητή η με κατανομή $(1/\sqrt{\delta t})N(0,1) = N(0,1/\delta t)$ έτσι ώστε η λύση της στοχαστικής διαφορικής εξίσωσης

$$\frac{dx}{dt} = \eta \ ,$$

να δίνεται σύμφωνα με τη κλασσική διατύπωση του απειροστικού λογισμού από το άθροισμα

$$x(t) = x_0 + \sum_{i=1}^{n} \delta t \, \eta_n \ , \qquad t = n\delta t \ ,$$

το οποίο με τον ορισμό της η είναι ισόδύναμο με την τυχαία μεταβλητή που ορίζεται στην (14) και έχει την ορθή κατανομή $N(0,t)$.

Οι ανεξάρτητες μεταβλητές η_n με κατανομή $(1/\sqrt{\delta t})N(0,1) = N(0,1/\delta t)$ που διεγείρουν το σύστημα στο όριο $\delta t \to 0$ ονομάζονται λευκός θόρυβος. Αυτές χαρακτηρίζονται από τις ροπές:

$$\langle \eta_n \rangle = 0 \ , \ \ \langle \eta_n \eta_m \rangle = \frac{\delta_{nm}}{\delta t},$$

επειδή οι η_n και η_m είναι ανεξάρτητες. Στο όριο $\delta t \to 0$ οδηγούμαστε να ορίσουμε τον λευκό θόρυβο $\eta(t)$ ως την τυχαία μεταβλητή με γκαουσιανή κατανομή και ροπές:

$$\langle \eta(t) \rangle = 0 \ , \ \ \langle \eta(t) \eta(t') \rangle = \delta(t - t') \ . \tag{16}$$

Η δεύτερη συνθήκη βεβαιώνει ότι οι διεγέρσεις $\eta(t)$ είναι χρονικά ασυσχέτιστες καθώς η διασπορά τους απειρίζεται καταλλήλως έτσι ώστε να επιτύχουν τη διασπορά τυχαίου περιπάτου στο συνεχές όριο.

Για να υπάρχει διασπορά στον τυχαίο περίπατο στο συνεχές όριο πρέπει να εισάγουμε στο n-οστό βήμα τη διέγερση $\xi_n = (1/\sqrt{\delta t})N(0,1) = N(0,1/\delta t)$ έτσι ώστε Αυτό σημαίνει ότι οι στοχαστικές διαφορικές εξισώσεις

$$\frac{dx}{dt} = \xi \ ,$$

πρέπει να ερμηνεύονται ως το όρια $\delta t \to 0$ των αναδρομικών σχέσεων:

$$x(t + \delta t) = x(t) + \sqrt{\delta t} \, \xi(t) \ \ ,$$

όπου ξ τυχαίοι αριθμοί κατανομής $N(0,1)$.

Ισοδύναμα αν θέλουμε να θεωρήσουμε τη διαφορική εξίσωση ως συνηθισμένη διαφορετική εξίσωση πρέπει να απαιτήσουμε ότι η συνεχής τυχαία μεταβλητή $\xi(t)$ έχει για κάθε χρονική στιγμή t

κατανομή $\lim_{\delta t\to 0} N(0,1/\delta t)$ με τον χαρακτηρισμό:

$$\langle \xi(t) \rangle = 0 \ \ , \ \ \langle \xi(t)\xi(s) \rangle = \delta(t-s) \ .$$

Με τις παραπάνω διευκρινήσεις για τον τρόπο διέγερσης μπορούμε πλέον να εργαστούμε με τις κλασσικές μεθόδους. Ας επαναλάβουμε τον χαρακτηρισμό της λύσης της

$$\frac{dx}{dt} = \eta \ \ , \ \ x(t) = \int_0^t \eta(s) ds \ \ . \tag{17}$$

Η κατανομή της $x(t)$ θα είναι γκαουσιανή και αρκεί για τον προσδιορισμ'ο της κατανομής ο προσδιορισμός της μέσης τιμής και της διασποράς. Η μέση τιμή είναι

$$\langle x(t) \rangle = 0 \ .$$

ενώ η διασπορά υπολογίζεται με τον εξής τρόπο:

$$\begin{aligned} \langle x^2(t) \rangle &= \int_0^t ds \int_0^t ds' \ \langle \eta(s)\eta(s') \rangle \\ &= \int_0^t ds \int_0^t ds' \ \delta(s-s') \\ &= \int_0^t ds \\ &= t \ . \end{aligned}$$

Μπορεί να αποδειχθεί (βλ. άσκηση IV) ότι

$$\langle x(t) x(s) \rangle = \min(t,s) \ .$$

Η τυχαία μεταβλητή x που κατασκευάστηκε περιγράφει έναν τυχαίο περίπατο στο συνεχές όριο. Αναφέρεται στα μαθηματικά ως κίνηση Brown ή διαδικασία Wiener. Η μαθηματική κίνηση Brown έχει μία περίπλοκη τροχιά η οποία είναι σχεδόν σίγουρα συνεχής (βλ. άσκηση VII) αλλά είναι σχεδόν σίγουρα πουθενά παραγωγίσιμη (απαιτούνται αρκετά τεχνικά επιχειρήματα για να το δείξει κανείς αυτό). Αυτό γίνεται διαισθητικά αντιληπτό διότι η κίνηση Brown είναι αυτοόμοια στις αλλαγές χρονικής κλίμακας: η $x(\alpha t)/\sqrt{\alpha}$ είναι και αυτή κίνηση Brown με την ίδια κατανομή με την $x(t)$ (βλ. άσκηση V), και οι διακυμάνσεις συνεχίζονται σε οποιαδήποτε κλίμακα. Επίσης, η $(x(\varepsilon) - x(0))/\varepsilon$ που προσσεγγίζει την παράγωγο στο 0 έχει την ίδια κατανομή με την $(x(1) - x(0))/\sqrt{\varepsilon}$, που όμως έχει άπειρη διακύμανση όταν $\varepsilon \to 0$. Δηλαδή η $x(t)$ όπως το διάστημα μικραίνει δεν γίνεται ομαλή, συνεχίζει να έχεις διακυνάνσεις. Μάλιστα είναι εύκολο να αποδείξει κανείς ότι σχεδόν σίγουρα η κίνηση Brown δεν είναι μονότονη σε κάνενα χρονικό διάστημα (βλ. άσκηση VIII). Είναι δύσκολο να κατασκευάσει κανείς συνεχείς συναρτήσεις οι οποίες όμως σε κάθε σημείο τους δεν είναι παραγωγίσιμες. Οι συναρτήσεις αυτές πρέπει να έχουν διακυμάνσεις σε κάθε κλίμακα. Ένα περίφημο παράδειγμα τέτοιας συνάρτησης δόθηκε πάλι από δίδυμο Bolzano και Weierstrass, ο πρώτος το 1830 ενώ ο δεύτερος, μάλλον, ανεξάρτητα το 1872. Είναι η συνάρτηση:

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{2^n} \sin(2^n x) \ . \tag{18}$$

5 Κίνηση Brown κατά Langevin

Θεωρήστε τη μονοδιάστατη κίνηση σωματιδίου που κινείται σε μέσο με γραμμική τριβή και το οποίο δέχεται τυχαίες δυνάμεις. Η εξίσωση κίνησης του σωματιδίου μπορεί να γραφεί στη μορφή:

$$\frac{d^2x}{dt^2} = -\gamma\dot{x} + \sigma\eta_2(t) \quad \gamma > 0\,, \tag{19}$$

όπου η_2 λευκός θόρυβος. Με αυτό το μοντέλο περιγράφει τη κίνηση Brown ο Langevin στο Νευτώνειο πλαίσιο. Η ενδιαφέρουσα παρατήρηση του Langevin είναι ότι όλο το δεξί σκέλος της (19), **δηλαδή το άθροισμα της αντίστασης στη κίνηση, που δίνεται από τον γραμμικό όρο τριβής $\gamma\dot{x}$, καθώς και οι τυχαίες ωθήσεις στην ταχύτητα, πηγάζουν και οι δύο από τις τυχαίες κρούσεις που γίνονται σε μικρή κλίμακα. Οι δύο αυτοί όροι παραμετροποιούν στην αδρομερή περιγραφή της κίνησης του σωματιδίου την επιρροή των τυχαίων κρούσεων που αφορούν κλίμακες που δεν περιλαμβάνονται στη δυναμική.**

Εάν ορίσουμε

$$\psi = \begin{bmatrix} x \\ v \end{bmatrix}$$

όπου $v = \dot{x}$ είναι η ταχύτητα, η εξίσωση κίνησης του σωματιδίου και την κολώνα των ανεξαρτήτων λευκών θορύβων η_1, η_2:

$$\eta = \begin{bmatrix} \eta_1 \\ \eta_2 \end{bmatrix}$$

οι οποίοι ικανοποιούν τις σχέσεις:

$$\langle \eta_\alpha(t) \rangle = 0 \;\;,\;\; \langle \eta_\alpha(t)\eta_\beta(t') \rangle = \delta_{\alpha\beta}\delta(t-t')\;, \quad \alpha, \beta = 1, 2\,, \tag{20}$$

η (19) μπορεί να γραφεί ισοδύναμα στη μορφή του γραμμικού δυναμικού συστήματος

$$\frac{d\psi}{dt} = \mathbf{A}\psi + \mathbf{F}\eta\;. \tag{21}$$

με τους πίνακες

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & -\gamma \end{bmatrix} \;\;,\;\; \mathbf{F} = \sigma \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}\;. \tag{22}$$

Γενικότερα, θεωρούμε ότι η κατάσταση του φυσικού συστήματος προσδιορίζεται από τις n συντεταγμένες της ψ, μία $n \times 1$ κολώνα, που μπορεί να λαμβάνει μιγαδικές τιμές και το φυσικό σύστημα να υπακούει στην γενικότερη στοχαστική γραμμική δυναμική:

$$\frac{d\psi}{dt} = \mathbf{A}\psi + \mathbf{F}\eta\;. \tag{23}$$

Οι $\mathbf{A}$ και $\mathbf{F}$ είναι $n \times n$ χρονοανεξάρτητοι πίνακες, ο πρώτος περιγράφει τη δυναμική, ενώ ο δεύτερος τη δομή της διέγερσης. Η διέγερση η είναι μια διέγερση κολώνα διάστασης $n \times 1$ με στοιχεία n ανεξαρτήτους λευκούς θορύβους η_α, $\alpha = 1, \cdots, n$ οι οποίοι ικανοποιούν τις σχέσεις:

$$\langle \eta_\alpha(t) \rangle = 0 \ , \ \langle \eta_\alpha(t) \eta^*_\beta(t') \rangle = \delta_{\alpha\beta} \delta(t - t') \ , \tag{24}$$

όπου το $*$ συμβολίζει τον μιγαδικό συζυγή. Η ανεξαρτησία των λευκών θορύβων επιβάλλεται μέ την $\delta_{\alpha\beta}$. Ισοδυνάμως μπορούμε να γράψουμε τις συσχετίσεις των διαφορετικών συνιστωσών του θορύβου ώς

$$\langle \eta(t) \eta^\dagger(t') \rangle = \delta(t - t') \, \mathbf{I} \ . \tag{25}$$

όπου $\mathbf{I}$ ο μοναδιαίος $n \times n$ πίνακας και $\dagger$ συμβολίζει τον ερμιτιανό ανάστροφο, δηλαδή η $\eta^\dagger$ είναι η $1 \times n$ γραμμή με στοιχεία τους συζυγείς λευκούς θορύβους η^*_α.

Θέλουμε να προσδιορίσουμε την κατανομή πιθανότητας της τυχαίας μεταβλητής ψ:

$$\psi(t) = e^{\mathbf{A}t} \psi(0) + \int_0^t e^{\mathbf{A}(t-s)} \mathbf{F} \eta(s) \, ds \ , \tag{26}$$

η οποία επιλύει την (50). Επειδή η ψ είναι γραμμικός μετασχηματισμός του η, και δεδομένου ότι έχει γκαουσιανή κατανομή, η ψ θα είναι και αυτή γκαουσιανή και συνεπώς για τον προσδιορισμό της αρκεί να προσδιορίσουμε τις πρώτες δύο ροπές. Επειδή η ψ έχει n συνιστώσες απαιτείται ο προσδιορισμός των n μέσων τιμών $\langle \psi_\alpha \rangle$ και όλων των $n(n+1)/2$ ροπών δεύτερης τάξης $\langle (\psi_\alpha - \langle \psi_\alpha \rangle)(\psi_\beta - \langle \psi_\beta \rangle)^* \rangle$. Οι ροπές δεύτερης τάξης είναι στοιχεία του πίνακα αυτοσυσχέτισης

$$\mathbf{C} = \langle (\psi - \langle \psi \rangle)(\psi - \langle \psi \rangle)^\dagger \rangle \ . \tag{27}$$

που είναι **μία εξελισσόμενη συνάρτηση με τον χρόνο**. 0 $\mathbf{C}$ αναφέρεται άλλοτε ως covariance matrix (πίνακας συνδιακύμανσης) και στη κβαντική μηχανική ως density matrix. Ο πίνακας αυτός είναι Ερμιτιανός, δηλαδή είναι $\mathbf{C} = \mathbf{C}^\dagger$, και είναι **αναγκαστικά θετικός**[1] , δηλαδή για κάθε κατάσταση $\phi \neq 0$ είναι $\phi^\dagger \mathbf{C} \phi > 0$, και συνεπώς όλες οι ιδιοτιμές του $\mathbf{C}$ είναι θετικοί αριθμοί.

Η πυκνότητα πιθανότητας της τυχαίας μεταβλητής ψ ότι είναι η χρονοεξαρτώμενη γκαουσιανή:

$$p(\psi) = \frac{\exp\left(-\frac{1}{2} (\psi - \langle \psi \rangle)^\dagger \mathbf{C}^{-1} (\psi - \langle \psi \rangle) \right)}{(2\pi)^{n/2} (\det(\mathbf{C}))^{1/2}} \ . \tag{28}$$

Το τετραγωνικό μέτρο

$$||\psi - \langle \psi \rangle||^2_M = (\psi - \langle \psi \rangle)^\dagger \mathbf{C}^{-1} (\psi - \langle \psi \rangle) \ , \tag{29}$$

που εισέχεται στο όρισμο της γκαουσιανής ονομάζεται μέτρο Mahalanobis και υποδηλοί την απόσταση της κατάστασης ψ από τη μέση τιμή της $\langle \psi \rangle$ και χαρακτηρίζει την πιθανότητα να βρίσκεται το φυσικό μας σύστημα στην κατάσταση ψ. Στη συνέχεια θα συζητήσουμε τη φυσική σημασία του $\mathbf{C}$ και του μέτρου αυτού. Εάν το σύστημα καταλήξει σε κατάσταση στατιστικής ισορροπίας τότε $\lim_{t\to\infty} \mathbf{C} = \mathbf{C}^\infty$ καθώς και η μέση τιμή καθίσταται και αυτή σταθερή και πεπερασμένη, έτσι ώστε στην κατάσταση στατιστικής ισορροπίας η πυκνότητα πιθανότητας των καταστάσεων ψ να είναι ανεξάρτητη του χρόνου. Θέλουμε να προσδιορίσουμε την κατανομή πιθανότητας στην κατάσταση στατιστικής ισορροπίας αν

[1] Ο πίνακας συνδιακύμανσης $\mathbf{C}$ είναι άθροισμα (διαιρεμένο με τον αριθμό των καταστάσεων) των θετικών πινάκων $\psi_i \psi_i^\dagger$ που προκύπτουν από τις καταστάσεις ψ_i. Ο κάθε πίνακας $\psi_i \psi_i^\dagger$ ειναι θετικός διότι για κάθε ϕ είναι $\phi^\dagger \psi \psi^\dagger \phi = (\psi^\dagger \phi)^\dagger (\psi^\dagger \phi) = |\psi^\dagger \phi|^2 \geq 0$, και το άθροισμα θετικών πινάκων είναι πάντα θετικό.

αυτή υπάρχει.

Η εξέλιξη της μέσης τιμής προσδιορίζεται αμέσως από την (26). Επειδή είναι γραμμική και $\langle \eta \rangle = 0$ έχουμε διαδοχικά:

$$
\begin{aligned}
\langle \psi(t) \rangle &= \left\langle e^{\mathbf{A}t}\psi(0) + \int_0^t e^{\mathbf{A}(t-s)}\mathbf{F}\eta(s)\, ds \right\rangle \\
&= e^{\mathbf{A}t}\langle \psi(0) \rangle + \left\langle \int_0^t e^{\mathbf{A}(t-s)}\mathbf{F}\eta(s)\, ds \right\rangle \\
&= e^{\mathbf{A}t}\langle \psi(0) \rangle + \int_0^t e^{\mathbf{A}(t-s)}\mathbf{F}\langle \eta(s) \rangle\, ds \\
&= e^{\mathbf{A}t}\langle \psi(0) \rangle\,,
\end{aligned}
\tag{30}
$$

όπου $\langle \psi(0) \rangle$ η μέση τιμή της αρχικής κατάστασης του συστήματος. Αν το πραγματικό μέρος των ιδιοτιμών του $\mathbf{A}$ είναι αρνητικό ο πίνακας $\mathbf{A}$ είναι ασυμπτωτικά ευσταθής και $\lim_{t\to\infty}\langle \psi(t) \rangle = 0$, οπότε η μέση τιμή συν τω χρόνω μηδενίζεται.

Ας θεωρήσουμε (χωρίς έλλειψη της γενικότητας) για απλούστευση ότι η αρχική κατάσταση του συστήματος είναι μηδενική. Υπολογίζουμε τώρα τα στοιχεία του πίνακα αυτοσυσχέτισης με $\psi(0) = 0$. Έχουμε διαδοχικά κάνοντας χρήση της (24):

$$
\begin{aligned}
C_{ab} &= \langle \psi_a \psi_b^* \rangle \\
&= \left\langle \int_0^t ds\, e_{ac}^{\mathbf{A}(t-s)} F_{cd}\eta_d(s) \int_0^t ds'\, e_{be}^{\mathbf{A}^*(t-s')} F_{ek}^* \eta_k^*(s') \right\rangle \\
&= \int_0^t ds \int_0^t ds'\, e_{ac}^{\mathbf{A}(t-s)} F_{cd} \langle \eta_d(s)\eta_k^*(s') \rangle F_{ek}^* e_{be}^{\mathbf{A}^*(t-s')} \\
&= \int_0^t ds \int_0^t ds'\, e_{ac}^{\mathbf{A}(t-s)} F_{cd}\delta_{dk}\delta(s-s') F_{ek}^* e_{be}^{\mathbf{A}^*(t-s')} \\
&= \int_0^t ds\, e_{ac}^{\mathbf{A}(t-s)} F_{cd} F_{ed}^* e_{be}^{\mathbf{A}^*(t-s)}\,,
\end{aligned}
$$

δηλαδή ο πίνακας αυτοσυσχέτισης προκύπτει ότι δίδεται από το ολοκλήρωμα:

$$
\mathbf{C}(t) = \int_0^t ds\, e^{\mathbf{A}(t-s)}\mathbf{F}\mathbf{F}^\dagger e^{\mathbf{A}^\dagger(t-s)}\,. \tag{31}
$$

Αν δε αλλάξουμε τη μεταβλητή ολοκλήρωσης στην $\tau = t - s$, ο πίνακας αυτοσυσχέτισης γίνεται:

$$
\mathbf{C}(t) = \int_0^t d\tau\, e^{\mathbf{A}\tau}\mathbf{F}\mathbf{F}^\dagger e^{\mathbf{A}^\dagger\tau}\,. \tag{32}
$$

και παραγωγίζοντας αυτή ως προς τον χρόνο έχουμε:

$$
\frac{d\mathbf{C}}{dt} = e^{\mathbf{A}t}\mathbf{F}\mathbf{F}^\dagger e^{\mathbf{A}^\dagger t}\,. \tag{33}
$$

Για να καταλήξει το σύστημα σε κατάσταση στατιστικής ισορροπίας θα πρέπει στο όριο $t \to \infty$ οι ροπές του ψ να γίνουν σταθερές και πεπερασμένες. Δηλαδή, η μέση τιμή να τείνει σε μία σταθερή τιμή, που σε αυτή τη διατύπωση του προβλήματος δεν μπορεί να είναι άλλη από τη μηδενική, και ο πίνακας αυτοσυσχέτισης να τείνει στον πεπερασμένο πίνακα $\lim_{t\to\infty}\mathbf{C}(t) = \mathbf{C}^\infty$. Για να συμβεί αυτό επειδή ο πίνακας αυτοσυσχέτισης, όπως φαίνεται από τις (31) και (32), προκύπτει από ολοκλήρωση της εκθετικής συνάρτησης $e^{\mathbf{A}t}$ τα ολοκλήρωματα αυτά πρέπει να συγκλίνουν στο όριο $t \to \infty$, που απαιτεί να είναι $\exp(\mathbf{A}t) \to 0$ δηλαδή το σύστημα για να καταλήξει σε κατάσταση στατιστικής ισορροπίας θα πρέπει ο πίνακας $\mathbf{A}$ να είναι ευσταθής και η πρώτη ροπή κατά συνέπεια μηδενική. Επίσης, από την (33) φαίνεται ότι συνεπώς και η χρονική παράγωγος τείνει στο μηδεν με την πάροδο του χρόνο όταν ο πίνακας $\mathbf{A}$ είναι ευσταθής. Συνεπώς όταν ο πίνακας $\mathbf{A}$ είναι ευσταθής το σύστημα καταλήγει σε στατιστική ισορροπία.

Είναι ενδιαφέρον, ότι την κατάσταση του συστήματος στη στατιστική ισορροπία στις περιπτώσεις αυτές είναι ιδαιτέρως εύκολο να την υπολογίσουμε διότι αφενός η πρώτη ροπή είναι μηδενική ο δε $\mathbf{C}^\infty$ ικανοποιεί ένα γραμμικό σύστημα εξισώσεων. Αν παραγωγίσουμε την (31) ως προς τον χρόνο έχουμε διαδοχικά:

$$\begin{aligned}
\frac{d\mathbf{C}}{dt} &= \mathbf{F}\mathbf{F}^\dagger + \mathbf{A}\int_0^t ds\, e^{\mathbf{A}(t-s)}\mathbf{F}\mathbf{F}^\dagger e^{\mathbf{A}^\dagger(t-s)} + \int_0^t ds\, e^{\mathbf{A}(t-s)}\mathbf{F}\mathbf{F}^\dagger \mathbf{A}^\dagger e^{\mathbf{A}^\dagger(t-s)} \\
&= \mathbf{F}\mathbf{F}^\dagger + \mathbf{A}\left(\int_0^t ds\, e^{\mathbf{A}(t-s)}\mathbf{F}\mathbf{F}^\dagger e^{\mathbf{A}^\dagger(t-s)}\right) + \left(\int_0^t ds\, e^{\mathbf{A}(t-s)}\mathbf{F}\mathbf{F}^\dagger e^{\mathbf{A}^\dagger(t-s)}\right)\mathbf{A}^\dagger \\
&= \mathbf{F}\mathbf{F}^\dagger + \mathbf{A}\mathbf{C} + \mathbf{C}\mathbf{A}^\dagger
\end{aligned} \tag{34}$$

Αντί δηλαδή να υπολογίσουμε τον $\mathbf{C}$ μέσω του ολοκληρώματος (32) μπορούμε να λύσουμε τη διαφορική εξίσωση πινάκων (34), η οποία ονομάζεται χρονοεξαρτώμενη εξίσωση Lyapunov. Όταν ο πινακας $\mathbf{A}$ είναι ευσταθής τότε λαμβάνοντας το όριο $t \to \infty$ της εξίσωσης (34) καταλήγουμε ότι ο $\mathbf{C}^\infty$ ικανοποιεί το γραμμικό σύστημα εξισώσεων:

$$\mathbf{A}\mathbf{C}^\infty + \mathbf{C}^\infty\mathbf{A}^\dagger = -\mathbf{F}\mathbf{F}^\dagger\,. \tag{35}$$

Η εξίσωση (35) ονομάζεται εξίσωση Lyapunov.

Ας επανέλθουμε στη μελέτη της κίνησης Brown κατά Langevin. Για αυτό αρκεί να προσδιορίσουμε την εξέλιξη των ροπών δεύτερης τάξης που διέπονται από την (34). Επειδή ο $\mathbf{A}$ δεν είναι ασυμπτωτικά ευσταθής, οι ιδιοτιμές του ειναι οι 0 και $-\gamma$, μπορεί το σύστημα αυτό να μην καταλήγει σε στατιστική ισορροπία (βλ. άσκηση XII), δηλαδή μπορεί μερικά ή όλα τα στοιχεία του $\mathbf{C}$, να μην έχουν πεπερασμένο όριο. Τα στοιχεία του $\mathbf{C}$ είναι η διασπορά της θέσης, $\langle x^2\rangle$, της ταχύτητας, $\langle v^2\rangle$, και η μέση συσχέτιση θέσης και ταχύτητας, $\langle xv\rangle$. Η (34) οδηγεί στο εξής σύστημα εξισώσεων για την εξέλιξή των ροπών αυτών:

$$\frac{d\langle v^2\rangle}{dt} = -2\gamma\langle v^2\rangle + \sigma^2\,, \tag{36}$$

$$\frac{d\langle xv\rangle}{dt} = -\gamma\langle xv\rangle + \langle v^2\rangle\ , \tag{37}$$

$$\frac{d\langle x^2\rangle}{dt} = 2\langle xv\rangle\ . \tag{38}$$

Η $\langle v^2\rangle$ που ικανοποιεί την (36) τείνει προφανώς στην ασυμπτωτική τιμή

$$\langle v^2\rangle_\infty = \frac{\sigma^2}{2\gamma}\,, \tag{39}$$

και σύμφωνα με την (36) η χρονική εξέλιξη της διασποράς της ταχύτητας είναι:

$$\begin{aligned}\langle v^2\rangle(t) &= \int_0^t e^{-2\gamma(t-s)}\sigma^2 ds \\ &= \frac{\sigma^2}{2\gamma}(1-e^{-2\gamma t})\,. \end{aligned} \tag{40}$$

Η (37) προσδιορίζει ότι και η συσχέτιση θέσης και ταχύτητας τείνει ασυμπτωτικά στην

$$\langle xv\rangle_\infty = \frac{\langle v^2\rangle_\infty}{\gamma} = \frac{\sigma^2}{2\gamma^2}\,, \tag{41}$$

ενώ η χρονική της εξέλιξη δίνεται από την:

$$\begin{aligned}\langle xv\rangle(t) &= \int_0^t e^{-\gamma(t-s)}\langle v^2\rangle(s) ds \\ &= \frac{\sigma^2}{2\gamma^2}(1-2e^{-\gamma t}+e^{-2\gamma t})\,. \end{aligned} \tag{42}$$

Και η (38) προσδιορίζει ότι η διασπορά εξελίσσεται ως

$$\begin{aligned}\langle x^2\rangle(t) &= 2\int_0^t \langle xv\rangle(s) ds \\ &= \frac{\sigma^2}{\gamma^2}\left(t-2\frac{1-e^{-\gamma t}}{\gamma}+\frac{1-e^{-2\gamma t}}{2\gamma}\right)\,, \end{aligned} \tag{43}$$

δηλαδή ασυμπτωτικά αυξάνεται γραμμικά με τον χρόνο

$$\langle x^2\rangle(t) \approx \frac{\sigma^2}{\gamma^2}t\ ,\quad t>>1/\gamma\,, \tag{44}$$

όπως ακριβώς προβλέπεται από διάχυση με συντελεστή $\nu = \sigma^2/(2\gamma^2)$ (βλ. (9)). Ενώ για μικρούς χρόνους η διασπορά αυξάνεται με την τρίτη δύναμη του χρόνου:

$$\langle x^2\rangle(t) \approx \frac{\sigma^2}{3}t^3\ ,\quad t<<1/\gamma\,. \tag{45}$$

Στο σημείο αυτό πρέπει να αναφερθούμε σε μία παρατήρηση του Einstein. Στην κατάσταση στατιστικής ισορροπίας τα σωματίδια Brown που είναι εμβαπτισμένα σε ένα ρευστό περιβάλλον (λουτρό) έχουν ανά βαθμό ελευθερίας κινητική ενέργεια $kT/2$, όπου T είναι η θερμοκρασία του περιβάλλοντος λουτρού. Πρέπει τότε σύμφωνα με την (39) να είναι:

$$\frac{m}{2}\langle v^2\rangle_\infty = \frac{1}{2}kT = \frac{m}{2}\frac{\sigma^2}{2\gamma}\,, \tag{46}$$

δηλαδή η διακύμανση της στοχαστικής διέγερσης, σ, και ο συντελεστής της τριβής, γ, πρέπει να συνδέονται μέσω της σχέσης:

$$\sigma^2 = \frac{2kT}{m}\gamma\,. \tag{47}$$

Αυτό είναι παράδειγμα ένός γενικότερου θεωρήματος που ονομάζεται θεώρημα διακύμανσης-ανάλωσης (fluctuation-dissipation theorem-FDT). Μέσω της (47) και της (44) ο Einstein έδωσε μία πρώτη εκτίμηση της σταθεράς του Boltzmann, k, και του αριθμού Avogadro, N_A, δεδομένου ότι συνδέονται με τη σχέση $k = R/N_A$ όπου R η σταθερά των ιδανικών αερίων. Από παρατηρήσεις της διάχυσης μπορούμε να έχουμε πειραματική εκτίμηση του $\langle x^2 \rangle / t = \sigma^2/\gamma^2$ και τότε η (47) μας δίνει ότι η σταθερά Boltzmann είναι:

$$k = \frac{\langle x^2 \rangle}{t} \, \frac{m\gamma}{2T} \, . \tag{48}$$

Στη σχέση αυτή ο συντελεστής τριβής ακολουθεί τον τύπο του Stokes $\gamma = 6\pi\rho_b \nu r$ που ισχύει για την αντίσταση που ασκείται στα σωματίδια Brown, που θεωρούνται σφαιρίδια ακτίνας r και μάζας m, που κινούνται σε ρευστό πυκνότητας ρ_b και κινηματικού ιξώδους, ν. Ο τύπος του Stokes είναι ακριβής περιγραφή της αντίστασης όταν ο αριθμός Reynolds, $Re = rv/\nu$, όπου v η ταχύτητα των σφαιριδίων είναι μικρός.