

EÖTVÖS LORÁND TUDOMÁNYEGYETEM

TERMÉSZETTUDOMÁNYI KAR

# Nemegyensúlyi statisztikus fizika

Készült Sasvári László előadásai alapján

# Tartalomjegyzék

<b>1. A lineáris válasz elmélete</b>	<b>4</b>
1.1. A sztatikus lineáris válasz elmélete . . . . .	5
1.2. A dinamikai lineáris válasz elmélete . . . . .	10
1.2.1. A dinamikai válaszfüggvény . . . . .	10
1.2.2. Dinamikai válaszfüggvény a kvantummechanikában . . . . .	13
1.2.3. Energiareprezentáció . . . . .	18
1.2.4. Korrelációs függvények . . . . .	19
1.2.5. Összegszabályok . . . . .	21
1.2.6. Megmaradó mennyiségek válasza . . . . .	21
1.2.7. Időtükrozési invariancia . . . . .	23
<b>2. Sztochasztikus folyamatok</b>	<b>26</b>
2.1. Sztochasztikus folyamatok általános leírása . . . . .	26
2.1.1. Sztochasztikus folyamatok fogalma . . . . .	26
2.1.2. Markov-folyamatok . . . . .	27
2.1.3. Homogén Markov-folyamatok . . . . .	29
2.2. Diffúziós folyamatok . . . . .	32
2.2.1. Valószínűségszámítási fogalmak összefoglalása . . . . .	32
2.2.2. A diffúziós folyamat fogalma . . . . .	32
2.2.3. Fokker-Planck egyenlet . . . . .	33
2.2.4. Wiener-folyamat . . . . .	35
2.2.5. Gauss-típusú fehérzaj . . . . .	36
2.2.6. Langevin-egyenlet . . . . .	37
2.2.7. Ornstein-Uhlenbeck folyamat . . . . .	38
2.2.8. Általánosítás több változóra . . . . .	41
2.3. Brown-mozgás . . . . .	43
2.3.1. Klasszikus mozgás hőtartályban, egy-dimenzióban . . . . .	43
2.3.2. A Brown-mozgás vizsgálata . . . . .	44
2.3.3. Mozgás harmonikus-oszcillátor potenciálban . . . . .	46
2.4. Master-egyenlet . . . . .	48
2.4.1. $p_1$ kielégíti a Master-egyenletet . . . . .	49
2.4.2. Stacionárius (egyensúlyi) megoldások . . . . .	49
2.4.3. Részletes egyensúly . . . . .	49
2.4.4. Időtükrozési invariancia . . . . .	50
2.4.5. Véges állapottér esete . . . . .	50
2.4.6. A Master-egyenlettel kapcsolatos fizikai feladatok . . . . .	50

TARTALOMJEGYZÉK	3
2.5. $H$ -tétel és alkalmazásai . . . . .	51
2.5.1. A $H$ -tétel levezetése . . . . .	51
2.5.2. Alkalmazás a kanonikus sokaságra . . . . .	53
2.5.3. Metropolis algoritmus . . . . .	54
<b>3. Függelék</b>	<b>55</b>
3.1. Fourier-transzformáció . . . . .	55
3.2. Néhány szó a disztribúciókról . . . . .	55

# 1. fejezet

## A lineáris válasz elmélete

Tekintsünk egy  $\mathcal{H}$  Hamilton operátorral jellemzett kvantummechanikai rendszert. Ha ezt megzavarjuk, akkor a megzavart rendszer  $\mathcal{H}'$  operátora:

$$(1.1) \quad \mathcal{H}' = \mathcal{H} + \delta\mathcal{H}.$$

- A  $\delta\mathcal{H}$  zavar lehet időben állandó. Ekkor tulajdonképpen azt vizsgáljuk, hogy hogyan változik a rendszer egyensúlyi állapota a zavar nagyságától függően (pl. bekapcsolunk egy kis mágneses teret). Lényegében arról van itt szó, hogy ha  $f$  jelöli a zavart és  $\mathbf{B}$  egy fizikai mennyiséget, akkor  $\langle \mathbf{B} \rangle_f - \langle \mathbf{B} \rangle_0$  arányos az  $f$  zavarral, és az arányossági tényező  $\chi$ , egy zavartól és időtől független állandó, amit sztatikus lineáris válasznak nevezünk.
- A zavar lehet időben változó. Ekkor a válasz is változik, amit ebből fakadóan dinamikai lineáris válaszfüggvénynek nevezünk.

Most külön megvizsgáljuk a sztatikus és a dinamikai válasz esetét. Az átlagokat az első esetben a Boltzmann-eloszlással, a második esetben pedig a sűrűségoperátorral fejezzük ki.

## 1.1. A sztatikus lineáris válasz elmélete

**Általános megfontolások.** Tekintsük azt az esetet, amikor  $\delta\mathcal{H}$  időben állandó. Egy tetszőleges  $\mathbf{B}$  fizikai mennyiség egyensúlyi (Boltzmann) átlaga ekkor:

$$(1.2) \quad \langle \mathbf{B} \rangle = \frac{\text{Tr} [e^{-\beta\mathcal{H}'} \mathbf{B}]}{\text{Tr} [e^{-\beta\mathcal{H}'}]}.$$

A  $\mathbf{B}$  fizikai mennyiség zavarmentes egyensúlyi átlaga:

$$(1.3) \quad \langle \mathbf{B} \rangle_0 = \frac{\text{Tr} [e^{-\beta\mathcal{H}} \mathbf{B}]}{\text{Tr} [e^{-\beta\mathcal{H}}]}.$$

A  $\langle \mathbf{B} \rangle$  átlag kiszámításához  $e^{-\beta\mathcal{H}'}$ -t kell vizsgálnunk:

$$(1.4) \quad e^{-\beta\mathcal{H}'} = e^{-\beta(\mathcal{H}+\delta\mathcal{H})} = \begin{cases} e^{-\beta\mathcal{H}} e^{-\beta\delta\mathcal{H}}, & \text{ha } [\mathcal{H}, \delta\mathcal{H}] = 0, \\ e^{-\beta\mathcal{H}} S(\beta), & \text{egyébként.} \end{cases}$$

Az utóbbinál  $S(0) = 1$  és ha  $\delta\mathcal{H} = 0$ , akkor  $S(\beta) = 1$ . Maradva az utóbbi esetről:  $S$ -re felírhatunk egy differenciál, illetve egy azzal ekvivalens integrál egyenletet:

$$(1.5) \quad \begin{aligned} e^{-\beta(\mathcal{H}+\delta\mathcal{H})} &= e^{-\beta\mathcal{H}} S(\beta) & / \frac{\partial}{\partial\beta} \\ -(\mathcal{H} + \delta\mathcal{H}) \underbrace{e^{-\beta(\mathcal{H}+\delta\mathcal{H})}}_{e^{-\beta\mathcal{H}} S(\beta)} &= -\mathcal{H} e^{-\beta\mathcal{H}} S(\beta) + e^{-\beta\mathcal{H}} \frac{\partial S(\beta)}{\partial\beta} \end{aligned}$$

A kapcsolószerű jelben lévő rész olyan, mint a Heisenberg-kép imaginárius idővel, így  $\delta\mathcal{H}(\beta) := e^{\beta\mathcal{H}} \delta\mathcal{H} e^{-\beta\mathcal{H}}$ . Ezzel a differenciálegyenlet végső formája:

$$(1.6) \quad \frac{\partial S(\beta)}{\partial\beta} = -\delta\mathcal{H}(\beta) S(\beta), \quad S(\beta = 0) = 1.$$

Ezt átírhatjuk integrál-egyenletté:

$$(1.7) \quad S(\beta) = 1 - \int_0^\beta \delta\mathcal{H}(\tau) S(\tau) d\tau,$$

aminek megoldását a szukcesszív-approximáció módszerrel közelíthetjük:

$$(1.8) \quad \begin{aligned} S_0(\beta) &= 1. \\ S_1(\beta) &= 1 - \int_0^\beta \delta\mathcal{H}(\tau) d\tau. \\ S_2(\beta) &= 1 - \int_0^\beta \delta\mathcal{H}(\tau) d\tau + \int_0^\beta \delta\mathcal{H}(\tau) \int_0^\tau \delta\mathcal{H}(\tau') d\tau' d\tau. \\ &\vdots \end{aligned}$$

$\delta\mathcal{H}$  **megválasztása.** Most tételezzük fel, hogy a zavar alakja  $\delta\mathcal{H} = -\mathbf{A}f$ , ahol  $\mathbf{A}$  egy fizikai mennyiség és  $f$  egy kicsi zavar erőssége. A kicsi itt azt jelenti, hogy  $\mathcal{O}(f^2)$  elhanyagolható. Ekkor

$$(1.9) \quad S(\beta) = 1 + f \int_0^\beta [e^{\tau\mathcal{H}}\mathbf{A}e^{-\tau\mathcal{H}}] d\tau + \mathcal{O}(f^2).$$

Itt a kapcsos zárójelben lévő részt  $\mathbf{A}(\tau)$ -val jelöljük, utalva a Heisenberg-képbeli alakra. Ennek segítségével kifejezhetjük  $\mathbf{B}$  átlagát az  $f$  erősségű zavar jelenlétében:

$$(1.10) \quad \langle \mathbf{B} \rangle_f = \frac{\text{Tr} [e^{-\beta\mathcal{H}} S(\beta) \mathbf{B}]}{\text{Tr} [e^{-\beta\mathcal{H}} S(\beta)]} = \frac{\text{Tr} \left[ e^{-\beta\mathcal{H}} \left( 1 + f \int_0^\beta \mathbf{A}(\tau) d\tau \right) \mathbf{B} \right]}{\text{Tr} \left[ e^{-\beta\mathcal{H}} \left( 1 + f \int_0^\beta \mathbf{A}(\tau) d\tau \right) \right]}.$$

Vizsgáljuk meg a nevezőt:

$$\text{Tr} \left[ e^{-\beta\mathcal{H}} \left( 1 + f \int_0^\beta \mathbf{A}(\tau) d\tau \right) \right] = \text{Tr} e^{-\beta\mathcal{H}} + f \int_0^\beta \text{Tr} [e^{-\beta\mathcal{H}} \mathbf{A}(\tau)] d\tau.$$

Itt az integrandus valójában független  $\tau$ -tól:

$$\begin{aligned} \text{Tr} [e^{-\beta\mathcal{H}} \mathbf{A}(\tau)] &= \text{Tr} [e^{-\beta\mathcal{H}} e^{\tau\mathcal{H}} \mathbf{A} e^{-\tau\mathcal{H}}] = \text{Tr} [e^{-\tau\mathcal{H}} e^{-\beta\mathcal{H}} e^{\tau\mathcal{H}} \mathbf{A}] = \\ &= \text{Tr} [e^{-\beta\mathcal{H}} e^{-\tau\mathcal{H}} e^{\tau\mathcal{H}} \mathbf{A}] = \text{Tr} [e^{-\beta\mathcal{H}} \mathbf{A}]. \end{aligned}$$

A nevező végleges alakja tehát

$$\text{Tr} e^{-\beta\mathcal{H}} + \beta f \text{Tr} [e^{-\beta\mathcal{H}} \mathbf{A}] = \text{Tr} [e^{-\beta\mathcal{H}}] \left( 1 + \beta f \frac{\text{Tr} [e^{-\beta\mathcal{H}} \mathbf{A}]}{\text{Tr} e^{-\beta\mathcal{H}}} \right) = \text{Tr} [e^{-\beta\mathcal{H}}] (1 + \beta f \langle \mathbf{A} \rangle_0).$$

Ennek ismeretében  $\mathbf{B}$  átlaga egyszerűbb alakra hozható:

$$(1.11) \quad \langle \mathbf{B} \rangle_f = (1 + \beta f \langle \mathbf{A} \rangle_0)^{-1} \left[ \langle \mathbf{B} \rangle_0 + f \int_0^\beta \langle \mathbf{A}(\tau) \mathbf{B} \rangle_0 d\tau \right].$$

Ez tovább egyszerűsíthető, ha az első tagot sorba fejtjük (mértani sor):

$$(1 + \beta f \langle \mathbf{A} \rangle_0)^{-1} = 1 - \beta f \langle \mathbf{A} \rangle_0 + \underbrace{(\beta f \langle \mathbf{A} \rangle_0)^2 - (\beta f \langle \mathbf{A} \rangle_0)^3 + (\beta f \langle \mathbf{A} \rangle_0)^4 \mp \dots}_{\mathcal{O}(f^2)}.$$

Mivel  $\mathcal{O}(f^2)$  elhanyagolható, azért

$$(1.12) \quad \langle \mathbf{B} \rangle_f = (1 - \beta f \langle \mathbf{A} \rangle_0) \left[ \langle \mathbf{B} \rangle_0 + f \int_0^\beta \langle \mathbf{A}(\tau) \mathbf{B} \rangle_0 d\tau \right].$$

Ezt a szorzatot, ha kifejtjük, akkor megjelenik benne egy  $f^2$ -es tag, amit elhanyagolhatunk. A fennmaradó részt átrendezve az alábbi összefüggéshez jutunk:

$$(1.13) \quad \langle \mathbf{B} \rangle_f - \langle \mathbf{B} \rangle_0 = \left[ \int_0^\beta \langle \mathbf{A}(\tau) \mathbf{B} \rangle_0 d\tau - \beta \langle \mathbf{A} \rangle_0 \langle \mathbf{B} \rangle_0 \right] f.$$

A zavar által okozott átlag változás tehát lineárisan függ az  $f$  zavartól, és az arányossági tényező a zavarmentes átlagokból származtatható.

**A lineáris válasz.** Vezessük be a következő jelölést:

$$(1.14) \quad \chi_{\mathbf{BA}} := \int_0^\beta \langle \mathbf{A}(\tau) \mathbf{B} \rangle_0 d\tau - \beta \langle \mathbf{A} \rangle_0 \langle \mathbf{B} \rangle_0.$$

$\chi_{\mathbf{BA}}$ -t a  $\mathbf{A}$  által keltett zavar  $\mathbf{B}$ -re adott lineáris válaszának nevezzük. Gyakran előfordul, hogy a zavarmentes átlagokat nullának tekintjük, ami azt jelenti, hogy ha  $\mathbf{A}'$  és  $\mathbf{B}'$  tetszőleges fizikai mennyiségek, akkor helyettük az  $\mathbf{A} := \mathbf{A}' - \langle \mathbf{A}' \rangle_0$  és  $\mathbf{B} := \mathbf{B}' - \langle \mathbf{B}' \rangle_0$  operátorokra térünk át. Ekkor ugyanis

$$(1.15) \quad \langle \mathbf{B} \rangle_f = \chi_{\mathbf{BA}} f, \quad \chi_{\mathbf{BA}} = \int_0^\beta \langle \mathbf{A}(\tau) \mathbf{B} \rangle_0 d\tau.$$

A  $\chi$  válasznak van egy kiemelkedően fontos tulajdonsága:

$$(1.16) \quad \chi_{\mathbf{BA}} = \chi_{\mathbf{AB}}.$$

BIZONYÍTÁS.

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{A}(\tau) \mathbf{B} \rangle_0 &= \frac{\text{Tr} [e^{-\beta \mathcal{H}} e^{\tau \mathcal{H}} \mathbf{A} e^{-\tau \mathcal{H}} \mathbf{B}]}{\text{Tr} e^{-\beta \mathcal{H}}} = \frac{\text{Tr} [e^{-\tau \mathcal{H}} \mathbf{B} e^{-\beta \mathcal{H}} e^{\tau \mathcal{H}} \mathbf{A}]}{\text{Tr} e^{-\beta \mathcal{H}}} = \\ &= \frac{\text{Tr} [e^{-\beta \mathcal{H}} e^{\beta \mathcal{H}} e^{-\tau \mathcal{H}} \mathbf{B} e^{-\beta \mathcal{H}} e^{\tau \mathcal{H}} \mathbf{A}]}{\text{Tr} e^{-\beta \mathcal{H}}} = \frac{\text{Tr} [e^{-\beta \mathcal{H}} e^{(\beta-\tau) \mathcal{H}} \mathbf{B} e^{-(\beta-\tau) \mathcal{H}} \mathbf{A}]}{\text{Tr} e^{-\beta \mathcal{H}}} = \langle \mathbf{B}(\beta - \tau) \mathbf{A} \rangle_0. \end{aligned}$$

Innen a  $\tau' := \beta - \tau$  helyettesítést használva kapjuk a fenti formulát:

$$\chi_{\mathbf{BA}} = \int_0^\beta \langle \mathbf{A}(\tau) \mathbf{B} \rangle_0 d\tau = \int_0^\beta \langle \mathbf{B}(\beta - \tau) \mathbf{A} \rangle_0 d\tau = - \int_\beta^0 \langle \mathbf{B}(\tau') \mathbf{A} \rangle_0 d\tau' = \int_0^\beta \langle \mathbf{B}(\tau') \mathbf{A} \rangle_0 d\tau' = \chi_{\mathbf{AB}}.$$

**Klasszikus eset.** Ha  $\mathbf{A}$  kommutál a  $\mathcal{H}$  operátorral, akkor

$$(1.17) \quad \langle \mathbf{A}(\tau) \mathbf{B} \rangle_0 = \langle \mathbf{AB} \rangle_0 = \langle \mathbf{BA} \rangle_0 \quad \Rightarrow \quad \chi_{\mathbf{BA}} = \beta \langle \mathbf{AB} \rangle_0.$$

Ez nem más, mint a klasszikus alakja a válasznak: a két fizikai mennyiség korrelációja megszorozva  $\beta$ -val. Ugyanezt az eredményt kapjuk, ha  $\mathbf{B}$  kommutál a  $\mathcal{H}$  operátorral.

**Energiareprezentáció.** Legyen  $\mathcal{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$ , ahol  $\{|n\rangle\}$  teljes ortonormált rendszer az állapotok Hilbert-terén. Ekkor  $e^{\alpha\mathcal{H}}|n\rangle = e^{\alpha E_n}|n\rangle$  és  $\sum_m |m\rangle\langle m| = 1$ .

$$(1.18) \quad Z := \text{Tr} e^{-\beta\mathcal{H}} = \sum_n \langle n| e^{-\beta\mathcal{H}} |n\rangle = \sum_n e^{-\beta E_n}.$$

Ekkor  $\chi_{\text{BA}}$  alakja az alábbi módon átírható:

$$\begin{aligned} \chi_{\text{BA}} &= \frac{1}{Z} \int_0^\beta \text{Tr} [e^{-\beta\mathcal{H}} e^{\tau\mathcal{H}} \mathbf{A} e^{-\tau\mathcal{H}} \mathbf{B}] d\tau = \frac{1}{Z} \int_0^\beta \text{Tr} [\mathbf{A} e^{-\tau\mathcal{H}} \mathbf{B} e^{-\beta\mathcal{H}} e^{\tau\mathcal{H}}] d\tau \\ &= \frac{1}{Z} \int_0^\beta \sum_n \langle n| \mathbf{A} e^{-\tau\mathcal{H}} \mathbf{B} e^{-\beta\mathcal{H}} e^{\tau\mathcal{H}} |n\rangle d\tau = \frac{1}{Z} \int_0^\beta \sum_{n,m} e^{-\beta E_n} e^{\tau E_n} \langle n| \mathbf{A} e^{-\tau\mathcal{H}} |m\rangle \langle m| \mathbf{B} |n\rangle d\tau \\ &= \frac{1}{Z} \int_0^\beta \sum_{n,m} e^{-\beta E_n} e^{\tau(E_n - E_m)} \langle n| \mathbf{A} |m\rangle \langle m| \mathbf{B} |n\rangle d\tau \end{aligned}$$

Itt az integrált könnyen kiszámíthatjuk, hiszen csak egyetlen tag függ  $\tau$ -tól

$$\int_0^\beta e^{\tau(E_n - E_m)} d\tau = \begin{cases} \beta, & \text{ha } E_n = E_m, \\ \frac{e^{\beta(E_n - E_m)} - 1}{E_n - E_m}, & \text{egyébként.} \end{cases}$$

Ezt a látszólag két különböző eredményt kezelhetjük egyben, hiszen az exponenciális függvény hatványsorából következik, hogy

$$\lim_{E_n \rightarrow E_m} \frac{e^{\beta(E_n - E_m)} - 1}{E_n - E_m} = \beta.$$

Mindezek fényében felírhatjuk  $\chi_{\text{BA}}$  alakját energiareprezentációban:

$$(1.19) \quad \chi_{\text{BA}} = \frac{1}{Z} \sum_{n,m} \frac{e^{-\beta E_m} - e^{-\beta E_n}}{E_n - E_m} \langle n| \mathbf{A} |m\rangle \langle m| \mathbf{B} |n\rangle.$$

Ebben a formulában a tört nem változik az  $n \leftrightarrow m$  csere esetén, aminek két látható következménye van:

- $\chi_{\text{BA}} = \chi_{\text{AB}}$ , ezt már láttuk, de innen is kijön.
- $\chi_{\text{BA}}^* = \chi_{\text{BA}}$ , azaz a válasz valós.

**$\delta\mathcal{H}$  megválasztásának általánosítása.** Legyenek  $\mathbf{A}_1, \mathbf{A}_2, \dots, \mathbf{A}_N$  lineárisan független operátorok és  $f_1, f_2, \dots, f_N$  kicsi zavarok (tehát bármely  $f_i f_j$  szorzat elhanyagolható), ekkor

$$(1.20) \quad \delta\mathcal{H} := - \sum_{j=1}^N \mathbf{A}_j f_j.$$



Ha ránézünk az  $S$  függvény (1.8) sorfejtésére, akkor az  $f_j$ -k kicsisége miatt:

$$(1.21) \quad S(\beta) = 1 + \sum_{j=1}^N f_j \int_0^{\beta} \mathbf{A}_j(\tau) d\tau, \text{ ahol } \mathbf{A}_j(\tau) = e^{\tau\mathcal{H}} \mathbf{A}_j e^{-\tau\mathcal{H}}.$$

Ezzel végigszámolva egy tetszőleges  $\mathbf{B}$  operátor (1.10) átlagát, a következő eredményt kapjuk:

$$(1.22) \quad \langle \mathbf{B} \rangle - \langle \mathbf{B} \rangle_0 = \sum_{j=1}^N \left[ \int_0^{\beta} \langle \mathbf{A}_j(\tau) \mathbf{B} \rangle_0 d\tau - \beta \langle \mathbf{A}_j \rangle_0 \langle \mathbf{B} \rangle_0 \right] f_j.$$

Tegyük fel, hogy az  $\mathbf{A}_j$  operátorok zavarmentes egyensúlyi átlaga nulla. Ekkor az előbbi formula szerint

$$(1.23) \quad \langle \mathbf{A}_i \rangle = \sum_{j=1}^N \chi_{ij} \mathbf{A}_j, \text{ ahol } \chi_{ij} = \chi_{\mathbf{A}_i \mathbf{A}_j} = \int_0^{\beta} \langle \mathbf{A}_j(\tau) \mathbf{A}_i \rangle_0 d\tau.$$

A  $\chi_{ij}$  mátrix természetesen valós, és (1.16) szerint szimmetrikus, azaz  $\chi_{ij} = \chi_{ji}$ , energia-reprezentációbeli alakja pedig:

$$(1.24) \quad \chi_{ij} = \frac{1}{Z} \sum_{n,m} \frac{e^{-\beta E_m} - e^{-\beta E_n}}{E_n - E_m} \langle n | \mathbf{A}_j | m \rangle \langle m | \mathbf{A}_i | n \rangle.$$

Most pedig megmutatjuk a  $\chi_{ij}$  mátrixnak még egy fontos tulajdonságát:

$$(1.25) \quad \chi_{ij} \text{ pozitív definit.}$$

BIZONYÍTÁS. Azt kell megmutatni, hogy tetszőleges  $\alpha \in \mathbb{R}^N \setminus \{0\}$  esetén

$$\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \alpha_i \chi_{ij} \alpha_j > 0.$$

Használjuk fel az energia-reprezentációs alakot

$$\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \alpha_i \chi_{ij} \alpha_j = \frac{1}{Z} \sum_{n,m} \frac{e^{-\beta E_m} - e^{-\beta E_n}}{E_n - E_m} \langle n | \sum_{j=1}^N \alpha_j \mathbf{A}_j | m \rangle \langle m | \sum_{i=1}^N \alpha_i \mathbf{A}_i | n \rangle.$$

Itt  $1/Z$  és az energiákat tartalmazó tört mindig pozitív, az utolsó két tag pedig egymás komplex konjugáltja, vagyis nemnegatív:

$$\langle n | \sum_{j=1}^N \alpha_j \mathbf{A}_j | m \rangle \langle m | \sum_{i=1}^N \alpha_i \mathbf{A}_i | n \rangle = \left| \langle n | \sum_{j=1}^N \alpha_j \mathbf{A}_j | m \rangle \right|^2 \geq 0, \quad \forall n, m \text{ esetén.}$$

Mivel  $\{|n\rangle\}$  teljes ortonormált rendszer, ezért ha minden  $n, m$  esetén  $\left| \langle n | \sum_{j=1}^N \alpha_j \mathbf{A}_j | m \rangle \right|^2 = 0$ ,

akkor  $\sum_{j=1}^N \alpha_j \mathbf{A}_j = 0$ , ami az  $\mathbf{A}_j$  operátorok lineáris függetlensége miatt, csak  $\alpha = 0$  esetén teljesül. **q. e. d.**

## 1.2. A dinamikai lineáris válasz elmélete

### 1.2.1. A dinamikai válaszfüggvény

Zavarjunk meg egy rendszert valamilyen  $f(t)$  zavarral, és mérjük a  $B(t)$  fizikai mennyiséget. Dinamikai válaszfüggvénynek egy olyan  $\chi(t, t')$  függvényt várunk, amelyre

$$(1.26) \quad B(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \chi(t, t') f(t') dt'.$$

**Alapvető követelmények.**

- Teljesül a kauzalitás, azaz a mérhető mennyiség jelenlegi értéke csak a múltbeli értékektől függhet:  $\chi(t, t') = 0$ , ha  $t' > t$ .
- Van időeltolási invariancia, azaz teljesen mindegy, hogy mikor kapcsoljuk be a zavart, onnantól a lefutása mindig azonos, vagyis tekinthetjük úgy, hogy a zavart a  $t' = -\infty$ -ben kapcsoljuk be:  $\chi(t, t') = \chi(t - t')$ .
- A válaszfüggvény valós.

**Közvetlen következmények.** Legyen  $\tau = t - t'$ , ekkor

$$(1.27) \quad B(t) = \int_{-\infty}^t \chi(t - t') f(t') dt' = \int_0^{\infty} \chi(\tau) f(t - \tau) d\tau.$$

Írjuk fel a Fourier transzformáltat:

$$(1.28) \quad \chi(\omega) = \int_0^{\infty} \chi(\tau) e^{i\omega\tau} d\tau, \quad \chi(\tau) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \chi(\omega) e^{-i\omega\tau} d\omega.$$

Mivel  $\chi(\tau) = \chi^*(\tau)$  ezért

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \chi(\omega) e^{-i\omega\tau} d\omega &= \chi(\tau) = \chi^*(\tau) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \chi^*(\omega) e^{i\omega\tau} d\omega = \\ &= -\frac{1}{2\pi} \int_{\infty}^{-\infty} \chi^*(-\omega) e^{-i\omega\tau} d\omega = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \chi^*(-\omega) e^{-i\omega\tau} d\omega, \end{aligned}$$

vagyis mivel a kezdő és a végső formula között a reláció minden  $\tau$ -ra fennáll, ezért

$$(1.29) \quad \chi^*(\omega) = \chi(-\omega).$$

Ebből viszont az következik, hogy

$$(1.30) \quad \begin{aligned} \operatorname{Re}(\chi(\omega)) &= \operatorname{Re}(\chi^*(\omega)) = \operatorname{Re}(\chi(-\omega)) && \Rightarrow && a \text{ valós rész páros,} \\ \operatorname{Im}(\chi(\omega)) &= -\operatorname{Im}(\chi^*(\omega)) = -\operatorname{Im}(\chi(-\omega)) && \Rightarrow && a \text{ képzetes rész páratlan.} \end{aligned}$$

A lineáris válasz tulajdonság a Fourier-transzformáltakra is fönnáll, hiszen

$$(1.31) \quad \begin{aligned} B(\omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} B(t)e^{i\omega t} dt = \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_0^{\infty} d\tau \chi(\tau) f(t-\tau) e^{i\omega t} = \\ &= \int_0^{\infty} d\tau \chi(\tau) e^{i\omega\tau} \int_{-\infty}^{\infty} dt f(t-\tau) e^{i\omega(t-\tau)} = \int_0^{\infty} d\tau \chi(\tau) e^{i\omega\tau} f(\omega) = \chi(\omega) f(\omega). \end{aligned}$$

**Monokromatikus zavar.** Monokromatikus zavarról akkor beszélünk, amikor  $f(t) = f_{\omega} e^{-i\omega t}$ . Ekkor (1.27) és az előbbi szerint

$$B(t) = \int_0^{\infty} \chi(\tau) f(t-\tau) d\tau = f_{\omega} e^{-i\omega t} \int_0^{\infty} \chi(\tau) e^{i\omega\tau} d\tau = f_{\omega} \chi(\omega) e^{-i\omega t} = B(\omega) e^{-i\omega t}.$$

**Fourier-transzformálás komplex frekvenciákon** Vizsgáljuk meg az alábbi transzformációt:

$$\chi(z) = \int_0^{\infty} \chi(\tau) e^{iz\tau} d\tau.$$

Mivel  $e^{iz\tau} = e^{i\operatorname{Re}(z)\tau} e^{-\operatorname{Im}(z)\tau}$  és  $\tau > 0$ , ezért

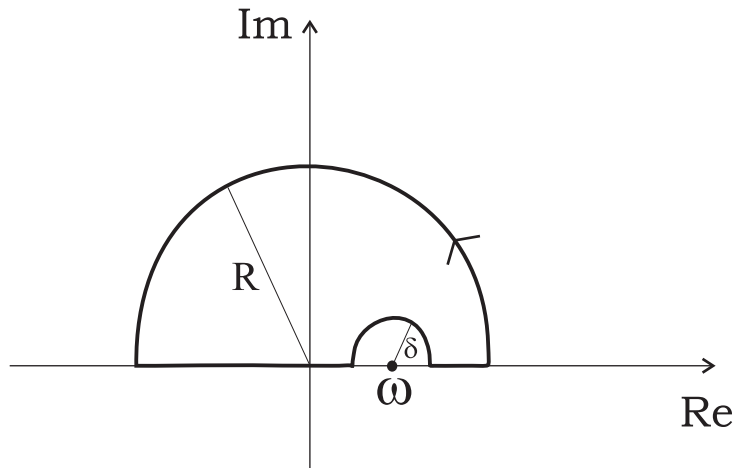
- $\chi(z)$ -nek nincs szingularitása a felső félsíkon ( $\operatorname{Im}(z) > 0$  esetén), ezen a részen  $\chi(z)$  analitikus,
- ha  $\chi(\tau)$  korlátos, akkor  $\chi(z)$  is az,
- $\chi(z)$  még akkor is lehet analitikus, ha  $\chi(\tau)$  nem az.

Fontos azonban látni, hogy az integrál elszáll  $\operatorname{Im}(z) < 0$  esetén, vagyis az alsó félsíkon nincs értelmezve.

Komplex függvénytanból ismeretes, hogy ha  $\chi(z)$  analitikus, akkor

$$(1.32) \quad \oint_C \frac{\chi(z)}{z-\omega} dz = 0,$$

ahol  $C$  az alábbi kontúr:



A fenti integrált részletesen kiírhatjuk a kontúr mentén:

$$0 = \int_{-R}^{\omega-\delta} \frac{\chi(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega' + \int_{\pi}^0 \frac{\chi(\omega + \delta e^{i\varphi})}{\omega + \delta e^{i\varphi} - \omega} i\delta e^{i\varphi} d\varphi + \int_{\omega+\delta}^R \frac{\chi(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega' + \int_0^{\pi} \frac{\chi(\omega + Re^{i\varphi})}{\omega + Re^{i\varphi} - \omega} iRe^{i\varphi} d\varphi,$$

azaz némi egyszerűsítés után

$$0 = \int_{-R}^{\omega-\delta} \frac{\chi(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega' + \int_{\omega+\delta}^R \frac{\chi(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega' + i \int_{\pi}^0 \chi(\omega + \delta e^{i\varphi}) d\varphi + i \int_0^{\pi} \chi(\omega + Re^{i\varphi}) d\varphi.$$

Tegyük fel, hogy  $\chi(z)$  tart nullához, midőn  $|z|$  tart végtelenhez. Ekkor  $R \rightarrow \infty$  esetén egyrészt a legutóbbi egyenlet bal oldala, vagyis az integrál értéke, nulla marad mindvégig, másrészt a jobb oldal utolsó tagja nullába megy, így

$$0 = \int_{-\infty}^{\omega-\delta} \frac{\chi(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega' + \int_{\omega+\delta}^{\infty} \frac{\chi(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega' + i \int_{\pi}^0 \chi(\omega + \delta e^{i\varphi}) d\varphi.$$

Tartsunk ez után  $\delta$ -val nullához:

$$0 = \lim_{\delta \rightarrow +0} \left[ \int_{-\infty}^{\omega-\delta} \frac{\chi(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega' + \int_{\omega+\delta}^{\infty} \frac{\chi(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega' \right] - i\pi\chi(\omega)$$

Az itt szereplő limeszt főérték-integrálnak is szokták nevezni, és  $\mathbb{P}$ -vel jelölik. Így a végeredmény az úgynevezett Kramers-Kronig reláció:

$$(1.33) \quad \mathbb{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\chi(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega' = i\pi\chi(\omega).$$

Ennek ki szokták írni külön a valós, és külön a képzetes részét:

$$(1.34) \quad \begin{aligned} \mathbb{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\operatorname{Re}(\chi(\omega'))}{\omega' - \omega} d\omega' &= \operatorname{Re}(i\pi\chi(\omega)) = -\pi \operatorname{Im}(\chi(\omega)), \\ \mathbb{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\operatorname{Im}(\chi(\omega'))}{\omega' - \omega} d\omega' &= \operatorname{Im}(i\pi\chi(\omega)) = \pi \operatorname{Re}(\chi(\omega)). \end{aligned}$$

E két egyenlet egymás Hilbert-transzformáltja, és fontos következményei vannak:

- A valós és képzetes részek egymásból kiszámíthatóak.
- Nem lehet a  $\chi(\omega)$  válaszfüggvény tisztán valós, vagy tisztán képzetes.

A fenti formulák levezetése nem csak az általunk végigjárt úton lehetséges, ugyanis:

**Tichmarsh tétel.** Az alábbi három állítás ekvivalens:

- $f$  olyan függvény, ami egy  $t > 0$ -ra nem nulla függvény Fourier-transzformáltja.
- $f$  a felső félsíkon analitikus.
- Fennáll  $f$ -re a Kramers-Kronig reláció.

### 1.2.2. Dinamikai válaszfüggvény a kvantummechanikában

Az alábbiakban gyakran alkalmazzuk a következő matematikai összefüggéseket:

$$\text{Tr} [|a\rangle \langle b| \mathbf{A}] = \sum_{i,j} a_i b_j^* A_{ji} = \sum_{i,j} b_j^* A_{ji} a_i = \langle b | \mathbf{A} | a \rangle,$$

$$\text{Tr} [|a\rangle \langle a|] = \sum_i a_i^* a_i = \|a\|^2.$$

**A sűrűségoperátor mérési motivációja.** Tételezzük fel, hogy egy  $|\psi\rangle$  állapotban lévő kvantummechanikai rendszeren egy  $\mathbf{M}$  mérést végzünk. Ekkor a rendszer beugrik az  $\mathbf{M}$  operátor valamelyik  $|m_i\rangle$  sajátállapotába, és a mérőműszer a  $\lambda_i$  sajátértéket mutatja. Ha nagyon sokszor előállítjuk ugyanezt a  $|\psi\rangle$  állapotot, majd elvégezzük az  $\mathbf{M}$  mérést, akkor megtudhatjuk, hogy mekkora  $p_i$  valószínűséggel ugrik a rendszer az  $|m_i\rangle$  állapotba. Feltételezzük, hogy a mérési-operátor sajátállapotai teljes ortonormált rendszert alkotnak a lehetséges állapotok Hilbert-terén, így

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |m_i\rangle.$$

Mi a  $c_i$  együtthatókat mérésekkel nem tudjuk előállítani, ugyanis mindegyik hordoz egy komplex fázist is, amit mi nem mérhetünk. Annyit azonban tudunk, hogy  $p_i = |c_i|^2$ . Ez az összes információnk az eredeti állapotról, amit mérésekkel előállíthatunk. E hiányos tudásunk motiválja a sűrűségoperátor bevezetését:

$$\hat{\rho} := \sum_i p_i |m_i\rangle \langle m_i|.$$

Nagyon fontos előnye az, hogy az  $\mathbf{M}$  operátor  $|\psi\rangle$ -re vonatkozó átlaga, vagyis a mérés átlaga, kifejezhető a sűrűségoperátor segítségével:

$$\langle \mathbf{M} \rangle_\psi = \langle \psi | \mathbf{M} | \psi \rangle = \sum_{i,j} c_i^* c_j \langle m_i | \langle \mathbf{M} | m_j \rangle = \sum_i p_i \lambda_i = \text{Tr} \hat{\rho} \mathbf{M}$$

**Sűrűségoperátor tiszta állapotban.** Az eredeti  $|\psi\rangle$  állapothoz is rendelhető egy sűrűségoperátor

$$\hat{\rho} := |\psi\rangle \langle \psi|.$$

Az ilyen szituációt, tehát amikor létezik a Hilbert-térnek olyan eleme, amellyel a rendszer szóbanforgó sűrűségoperátora kifejezhető ilyen alakban, nevezzük tiszta állapotnak. Ekkor természetesen, ha előállítjuk  $\hat{\rho}$  mátrixalakját a fenti  $\mathbf{M}$  sajátállapotainak bázisán, akkor nem diagonálmátrixot kapunk, hisz

$$\rho_{ij} = \langle m_i | \hat{\rho} | m_j \rangle = c_i^* c_j,$$

és tetszőleges  $\mathbf{A}$  fizikai mennyiségre teljesül, hogy

$$\langle \mathbf{A} \rangle_\psi = \text{Tr} \hat{\rho} \mathbf{A}.$$

**Sűrűségoperátor kevert állapotban.** Legyenek a  $\{|\psi_\alpha\rangle\}$  állapotok tetszőleges normált elemei a Hilbert-térnek, tehát semmilyen ortogonalitási, vagy teljességi feltételnek nem kell, hogy eleget tegyenek, és a  $\{p_\alpha\}$  nemnegatív számok olyanok, hogy  $\sum_\alpha p_\alpha = 1$ . Ekkor az ezekből készített kevert állapot alatt az alábbi sűrűségoperátort értjük:

$$(1.35) \quad \hat{\rho} := \sum_\alpha p_\alpha |\psi_\alpha\rangle \langle \psi_\alpha|.$$

Ekkor egy tetszőleges  $A$  fizikai mennyiség átlagát ebben a kevert állapotban így értjük

$$(1.36) \quad \langle A \rangle := \sum_\alpha p_\alpha \langle \psi_\alpha | A | \psi_\alpha \rangle = \text{Tr } \hat{\rho} A.$$

**A sűrűségoperátor tulajdonságai** Induljunk ki egy kevert állapotból. Ekkor

- $\hat{\rho}$  önadjungált.
- $\text{Tr } \hat{\rho} = \sum_\alpha p_\alpha \|\psi_\alpha\|^2 = 1$ .
- $\text{Tr } \hat{\rho}^2 \leq 1$ , ugyanis a Cauchy-Schwarz egyenlőtlenség szerint

$$\begin{aligned} \text{Tr } \hat{\rho}^2 &= \sum_{\alpha,\beta} p_\alpha p_\beta \text{Tr} [|\psi_\alpha\rangle \langle \psi_\alpha| |\psi_\beta\rangle \langle \psi_\beta|] = \sum_{\alpha,\beta} p_\alpha p_\beta \langle \psi_\alpha | \psi_\beta \rangle \langle \psi_\beta | \psi_\alpha \rangle = \\ &= \sum_{\alpha,\beta} p_\alpha p_\beta |\langle \psi_\alpha | \psi_\beta \rangle|^2 \leq \sum_{\alpha,\beta} p_\alpha p_\beta \langle \psi_\alpha | \psi_\alpha \rangle \langle \psi_\beta | \psi_\beta \rangle = 1. \end{aligned}$$

Egyenlőség pedig pontosan akkor teljesül, ha  $\hat{\rho}$  tiszta állapot.

**A sűrűségoperátor mozgásegyenlete.** Induljunk ki a kevert állapotból, és írjuk fel az egyes állapotok időfejlődését az időfüggő Schrödinger-egyenlet szerint:

$$\begin{aligned} i\hbar \partial_t |\psi_\alpha\rangle &= \mathcal{H} |\psi_\alpha\rangle & \Rightarrow & \quad i\hbar \partial_t (|\psi_\alpha\rangle \langle \psi_\alpha|) = (i\hbar \partial_t |\psi_\alpha\rangle) \langle \psi_\alpha| + |\psi_\alpha\rangle (i\hbar \partial_t \langle \psi_\alpha|) = \\ i\hbar \partial_t \langle \psi_\alpha| &= -\langle \psi_\alpha| \mathcal{H} & & = \mathcal{H} |\psi_\alpha\rangle \langle \psi_\alpha| - |\psi_\alpha\rangle \langle \psi_\alpha| \mathcal{H} = [\mathcal{H}, |\psi_\alpha\rangle \langle \psi_\alpha|]. \end{aligned}$$

Szorozzuk meg mindegyik egyenletet  $p_\alpha$ -val és összegezzünk  $\alpha$ -ra:

$$i\hbar \partial_t \left( \sum_\alpha p_\alpha |\psi_\alpha\rangle \langle \psi_\alpha| \right) = \left[ \mathcal{H}, \sum_\alpha p_\alpha |\psi_\alpha\rangle \langle \psi_\alpha| \right].$$

Ha beírjuk a sűrűségoperátort, akkor megkapjuk a von Neumann egyenletet:

$$(1.37) \quad i\hbar \partial_t \hat{\rho} = [\mathcal{H}, \hat{\rho}].$$

Itt feltettük, hogy  $p_\alpha$  nem változik az időfejlődés során, vagyis az egyes  $|\psi_\alpha\rangle$  tiszta állapotok statisztikai súlya minden időpillanatban azonos (ez azért jogos, mert a teljes kevert állapot, vagy másnéven sokaság időfejlődése az egyes tiszta állapotok időfejlődése miatt történik).

**Az időfejlődési operátor.** Az időfüggő Schrödinger-egyenletnél most használjunk kezdeti feltételt is, és hagyjuk el a bra-cat jelölést az áttekinthetőség érdekében:

$$\partial_t \psi_\alpha(t) = -\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} \psi_\alpha(t), \quad \psi_\alpha(t = t_0) = \psi_\alpha(t_0).$$

Ennek leolvashatjuk a megoldását:

$$\psi_\alpha(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}(t-t_0)} \psi_\alpha(t_0).$$

Itt az operátor exponensét a hatványsor definiálja. Érdemes ezt külön jelölni:

$$(1.38) \quad \mathcal{U}(t, t_0) := e^{-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}(t-t_0)}.$$

Mivel  $\mathcal{H}$  önadjungált, ezért  $\mathcal{U}(t, t_0)$  unitér, vagyis az adjungáltja az inverze, ami egyenértékű azzal, hogy a normát nem változtatja meg.

**Időfüggő Hamilton-operátor.** Tegyük fel, hogy  $\mathcal{H} = \mathcal{H}(t)$ , de önadjungált minden időpillanatban. Ekkor is a Schrödinger-egyenlet szabályozza az időfejlődést:

$$i\hbar \partial_t \psi_\alpha(t) = \mathcal{H}(t) \psi_\alpha(t), \quad \psi_\alpha(t = t_0) = \psi_\alpha(t_0).$$

Itt már nem írhatjuk fel exponens alakban az időfejlődés operátorát. Azt viszont megállapíthatjuk, hogy az időfejlődés nem változtat a skalárszorzaton (kihasználva  $\mathcal{H}(t)$  önadjungáltságát):

$$\begin{aligned} \partial_t \langle \psi_1(t), \psi_2(t) \rangle &= \langle \partial_t \psi_1(t), \psi_2(t) \rangle + \langle \psi_1(t), \partial_t \psi_2(t) \rangle = \\ &= \frac{i}{\hbar} \langle \mathcal{H}(t) \psi_1(t), \psi_2(t) \rangle - \frac{i}{\hbar} \langle \psi_1(t), \mathcal{H}(t) \psi_2(t) \rangle = 0. \end{aligned}$$

Ez azt jelenti, hogy bár nem tudjuk felírni az időfejlődést exponens alakjában, de a skalárszorzat megmarad az időfejlődés során, vagyis az időfejlesztési operátor unitér:

$$(1.39) \quad \psi_\alpha(t) = \mathcal{U}(t, t_0) \psi_\alpha(t_0).$$

Ezt beírhatjuk a Schrödinger-egyenletbe, így megkapjuk  $\mathcal{U}(t, t_0)$  egyenletét

$$(1.40) \quad i\hbar \partial_t \mathcal{U}(t, t_0) = \mathcal{H}(t) \mathcal{U}(t, t_0), \quad \mathcal{U}(t_0, t_0) = 1.$$

**Az időfejlődési és a sűrűségoperátor kapcsolata** Kevert állapotban egy tetszőleges  $\mathbf{A}$  fizikai mennyiség átlaga a  $t$  időpillanatban:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{A} \rangle_t &= \text{Tr} \hat{\rho}(t) \mathbf{A} = \sum_\alpha p_\alpha \langle \psi_\alpha(t), \mathbf{A} \psi_\alpha(t) \rangle = \\ &= \sum_\alpha p_\alpha \langle \mathcal{U}(t, t_0) \psi_\alpha(t_0), \mathbf{A} \mathcal{U}(t, t_0) \psi_\alpha(t_0) \rangle = \sum_\alpha p_\alpha \langle \psi_\alpha(t_0), \mathcal{U}^\dagger(t, t_0) \mathbf{A} \mathcal{U}(t, t_0) \psi_\alpha(t_0) \rangle = \\ &= \text{Tr} [\hat{\rho}(t_0) \mathcal{U}^\dagger(t, t_0) \mathbf{A} \mathcal{U}(t, t_0)] = \text{Tr} [\mathcal{U}(t, t_0) \hat{\rho}(t_0) \mathcal{U}^\dagger(t, t_0) \mathbf{A}], \end{aligned}$$

vagyis leolvashatjuk, hogy

$$(1.41) \quad \hat{\rho}(t) = \mathcal{U}(t, t_0) \hat{\rho}(t_0) \mathcal{U}^\dagger(t, t_0).$$

Ha ezt deriváljuk idő szerint, és használjuk az időfejlődési operátor (1.40) egyenletét, akkor vissza kapjuk a von Neumann egyenletet időfüggő Hamilton operátor esetére is:

$$(1.42) \quad i\hbar \partial_t \hat{\rho}(t) = [\mathcal{H}(t), \hat{\rho}(t)].$$

**Időfüggő perturbációszámítás.** Legyen  $\mathcal{H}$  a zavar nélküli időben állandó Hamilton-operátor, és  $\delta\mathcal{H}(t)$  a zavar operátora.  $\mathcal{H}'(t) = \mathcal{H} + \delta\mathcal{H}(t)$ . Legyen  $\mathcal{U}(t, t_0)$  a  $\mathcal{H}'(t)$  operátor által generált időfejlődés, vagyis ezzel az operátorral teljesül a (1.40) egyenlet. Válasszuk le ebből az időfüggetlen operátor időfejlődését, így a kölcsönhatás által generált időfejlődés:

$$(1.43) \quad S(t, t_0) = e^{\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}t}\mathcal{U}(t, t_0)e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}t_0}$$

Ezt a formulát az motiválja, hogy ha  $\delta\mathcal{H}(t) = 0$ , akkor  $\mathcal{H}' = \mathcal{H}$  időfüggetlen operátor, vagyis (1.38) szerint  $S(t, t_0) = 1$ . Deriváljuk idő szerint ezt a formulát:

$$\partial_t S(t, t_0) = \frac{i}{\hbar}\mathcal{H}S(t, t_0) + e^{\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}t}\partial_t\mathcal{U}(t, t_0)e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}t_0} =$$

most használjuk a (1.40) egyenletet:

$$= \frac{i}{\hbar}\mathcal{H}S(t, t_0) - \frac{i}{\hbar}e^{\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}t}(\mathcal{H} + \delta\mathcal{H}(t))\mathcal{U}(t, t_0)e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}t_0}.$$

$\mathcal{H}$  és  $e^{\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}t}$  kommutálnak, így összegből származó első tag  $-\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}S(t, t_0)$ , vagyis ez kiesik. A fennmaradó részből az alábbi eredményt kapjuk:

$$(1.44) \quad i\hbar\partial_t S(t, t_0) = e^{\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}t}\delta\mathcal{H}(t)\mathcal{U}(t, t_0)e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}t_0} = \delta\mathcal{H}_i(t)S(t, t_0).$$

Itt az  $i$  index az interaction-re utal, és

$$(1.45) \quad \delta\mathcal{H}_i(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}t}\delta\mathcal{H}(t)e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}t}.$$

Alakítsuk át a (1.44) differenciálegyenletet integrálegyenletté. Ehhez csak le kell olvasnunk a (1.43) formulából a kezdeti feltételt:  $S(t_0, t_0) = 1$ , majd alkalmazzuk a (1.8) szukcesszív approximációt:

$$(1.46) \quad S(t, t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \delta\mathcal{H}_i(t') dt' + \mathcal{O}(\delta\mathcal{H}^2).$$

Ebből előállíthatjuk  $\mathcal{U}(t, t_0)$ -t a (1.43) formula segítségével:

$$(1.47) \quad \mathcal{U}(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}t} \left( 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \delta\mathcal{H}_i(t') dt' \right) e^{\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}t_0}.$$

**Átlagok kiszámítása.** Tegyük fel, hogy  $\delta\mathcal{H}(t) = -Af(t)$ , ahol  $f(t) = 0$ , ha  $t < t_0$ . Válasszuk a  $t_0$ -beli eloszlást a Boltzmann-eloszlásnak:

$$(1.48) \quad \hat{\rho}_0 := \hat{\rho}(t_0) = \frac{1}{Z} e^{-\beta\mathcal{H}}, \quad Z = \text{Tr} e^{-\beta\mathcal{H}}.$$

Vezessünk be az operátorok egyensúlyi átlagára és időfejlődésére jelölést:

$$(1.49) \quad \langle C \rangle_0 := \text{Tr} [\hat{\rho}_0 C], \quad C(t) := e^{\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}t} C e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}t}.$$



Az időfüggő sűrűségoperátor segítségével ki tudjuk számítani az időben változó átlagokat, az időfüggés kifejezésére pedig használhatjuk (1.41)-t:

$$\langle \mathbf{B} \rangle_t = \text{Tr} [\mathcal{U}(t, t_0) \hat{\rho}_0 \mathcal{U}^+(t, t_0) \mathbf{B}] = \text{Tr} [\hat{\rho}_0 \mathcal{U}^+(t, t_0) \mathbf{B} \mathcal{U}(t, t_0)] =$$

most használjuk fel  $\mathcal{U}(t, t_0)$  (1.47) perturbációs kifejtését:

$$\begin{aligned} &= \text{Tr} \left[ \hat{\rho}_0 e^{-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} t_0} \left( 1 + \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \delta \mathcal{H}_i(t') dt' \right) e^{\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} t} \mathbf{B} e^{-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} t} \left( 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \delta \mathcal{H}_i(t') dt' \right) e^{\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} t_0} \right] = \\ &= \text{Tr} [\hat{\rho}_0 \mathbf{B}] - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \text{Tr} (\hat{\rho}_0 [\mathbf{B}(t), \delta \mathcal{H}_i(t')]) dt' + \mathcal{O}(\delta \mathcal{H}^2) = \end{aligned}$$

most használjuk fel az (1.45) összefüggést és  $\delta \mathcal{H}(t)$  választott alakját:

$$= \text{Tr} [\hat{\rho}_0 \mathbf{B}] + \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \text{Tr} (\hat{\rho}_0 [\mathbf{B}(t), \mathbf{A}(t')]) f(t') dt'.$$

Tartsunk  $t_0$  a  $-\infty$ , ami azt jelenti, hogy valamikor a távoli múltban a rendszer egyensúlyban volt, és akkor kapcsoltuk rá az  $f(t)$  zavart. Így végeredményben azt kapjuk, hogy

$$(1.50) \quad \langle \mathbf{B} \rangle_t - \langle \mathbf{B} \rangle_0 = \int_{-\infty}^t \left\langle \frac{i}{\hbar} [\mathbf{B}(t), \mathbf{A}(t')] \right\rangle_0 f(t') dt'.$$

**A válaszfüggvény.** Legyen

$$(1.51) \quad \varphi_{\mathbf{B}\mathbf{A}}(t, t') := \left\langle \frac{i}{\hbar} [\mathbf{B}(t), \mathbf{A}(t')] \right\rangle_0.$$

Ez még nem a keresett válaszfüggvény, mert a kauzalitás nem feltétlenül teljesül, az időeltolási invariancia azonban teljesül. Ehhez csak annyit kell meggondolni, hogy

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{B}(t) \mathbf{A}(t') \rangle_0 &= \text{Tr} \left[ \hat{\rho}_0 e^{\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} t} \mathbf{B} e^{-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} t} e^{\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} t'} \mathbf{A} e^{-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} t'} \right] = \langle \mathbf{B}(t - t') \mathbf{A} \rangle_0, \\ \langle \mathbf{A}(t') \mathbf{B}(t) \rangle_0 &= \text{Tr} \left[ \hat{\rho}_0 e^{\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} t'} \mathbf{A} e^{-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} t'} e^{\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} t} \mathbf{B} e^{-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} t} \right] = \langle \mathbf{A} \mathbf{B}(t - t') \rangle_0, \end{aligned}$$

vagyis ebből következik, hogy

$$(1.52) \quad \left\langle \frac{i}{\hbar} [\mathbf{B}(t), \mathbf{A}(t')] \right\rangle_0 = \left\langle \frac{i}{\hbar} [\mathbf{B}(t - t'), \mathbf{A}] \right\rangle_0 = \varphi_{\mathbf{B}\mathbf{A}}(t - t').$$

Vezessük be megfelelő, azaz a kauzalitásnak eleget tevő válaszfüggvényt:

$$(1.53) \quad \chi_{\mathbf{B}\mathbf{A}}(t, t') := \begin{cases} \varphi_{\mathbf{B}\mathbf{A}}(t, t'), & \text{ha } t > t', \\ 0, & \text{ha } t < t'. \end{cases}$$

Ezzel pedig felírhatjuk (1.50) végleges alakját:

$$(1.54) \quad \langle \mathbf{B} \rangle_t - \langle \mathbf{B} \rangle_0 = \int_{-\infty}^{\infty} \chi_{\mathbf{B}\mathbf{A}}(t, t') f(t') dt'.$$

### 1.2.3. Energiareprezentáció

Legyen  $\mathcal{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$ , ahol feltesszük, hogy a sajátállapotok teljes ortonormált rendszert alkotnak a lehetséges állapotok Hilbert-terén. Ekkor

$$\begin{aligned}\varphi_{\text{BA}}(t) &= \left\langle \frac{i}{\hbar} [\mathbf{B}(t), \mathbf{A}] \right\rangle_0 = \frac{i}{\hbar} \text{Tr} \left[ \frac{e^{-\beta\mathcal{H}}}{Z} (\mathbf{B}(t)\mathbf{A} - \mathbf{A}\mathbf{B}(t)) \right] = \\ &= \frac{i}{\hbar} \sum_{n,m} \left[ \langle n | \frac{e^{-\beta\mathcal{H}}}{Z} \mathbf{B}(t) | m \rangle \langle m | \mathbf{A} | n \rangle - \langle m | \frac{e^{-\beta\mathcal{H}}}{Z} \mathbf{A} | n \rangle \langle n | \mathbf{B}(t) | m \rangle \right].\end{aligned}$$

Itt a hátsó tagban végrehajtottunk egy  $n \leftrightarrow m$  cserét, ami az  $n$ -re és  $m$ -re történő összegzés miatt nem változtat az értéken. Használjuk ki az időfüggés (1.49) definícióját. E definícióban szereplő exponensek önmagukban unitér, és nem önadjungált operátorok. A fenti formulában azonban minden operátor eredendően a hátsó vektorra hat. Így amikor ezekből az unitér operátorokból egyeseket az első vektorra alkalmazunk, akkor előtte adjungálnunk kell. Legyen  $\omega_{mn} := \frac{E_m - E_n}{\hbar}$ , ezzel felírhatjuk az energiareprezentáció végleges alakját:

$$(1.55) \quad \varphi_{\text{BA}}(t) = \frac{i}{\hbar} \sum_{n,m} \frac{e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}}{Z} e^{-i\omega_{mn}t} \langle n | \mathbf{B} | m \rangle \langle m | \mathbf{A} | n \rangle.$$

**Az energiareprezentáció Fourier-transzformáltja.** A válaszfüggvény (1.53) definíciója szerint  $\chi_{\text{BA}}(t) = \varphi_{\text{BA}}(t)$   $t > 0$ -ra, egyébként nulla. Így a dinamikai válaszfüggvény Fourier-transzformáltjáról megállapított általános tulajdonságok alapján nem meglepő, hogy most  $\text{Im}(z) > 0$  esetén a Fourier-transzformálás egzaktul elvégezhető (hiszen ekkor megjelenik egy exponenciális lecsengés  $\text{Im}(z)$  miatt):

$$\int_0^{\infty} e^{-i\omega_{mn}t} e^{izt} dt = \left[ \frac{e^{i(z-\omega_{mn})t}}{i(z-\omega_{mn})} \right]_0^{\infty} = \frac{i}{z-\omega_{mn}},$$

vagyis maga a Fourier-transzformált:

$$(1.56) \quad \chi_{\text{BA}}(z) = -\frac{1}{\hbar} \sum_{n,m} \frac{e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}}{Z} \frac{\langle n | \mathbf{B} | m \rangle \langle m | \mathbf{A} | n \rangle}{z - \omega_{mn}}.$$

Ez a függvény bár majdnem az egész komplex számsíkon értelmezett, de csak  $\text{Im}(z) > 0$  esetén Fourier-transzformáltja a válaszfüggvénynek. Érdekes megfigyelni, hogy a függvény pólusai, a  $\omega_{mn}$  pontok, a valós tengelyen vannak.

**Fourier-transzformált a valós számegeyenesen.** Az (1.56) egyenletből a felső félsíkról közelítve megkaphatjuk a válaszfüggvényt a valós számegeyenesen:

$$\chi_{\text{BA}}(\omega) = -\frac{1}{\hbar} \sum_{n,m} \frac{e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}}{Z} \langle n | \mathbf{B} | m \rangle \langle m | \mathbf{A} | n \rangle \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \frac{1}{\omega - \omega_{mn} + i\varepsilon}.$$

Most használjuk fel a (3.1) határértéket:

$$(1.57) \quad \chi_{\text{BA}}(\omega) = -\frac{1}{\hbar} \sum_{n,m} \frac{e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}}{Z} \langle n | \mathbf{B} | m \rangle \langle m | \mathbf{A} | n \rangle \times \\ \times \left[ \mathbb{P} \left( \frac{1}{\omega - \omega_{mn}} \right) - i\pi \delta(\omega - \omega_{mn}) \right].$$

Ezt az egyenletet szétválaszthatjuk:

$$(1.58) \quad \chi'_{\text{BA}}(\omega) = -\frac{1}{\hbar} \sum_{n,m} \frac{e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}}{Z} \langle n | \mathbf{B} | m \rangle \langle m | \mathbf{A} | n \rangle \mathbb{P} \left( \frac{1}{\omega - \omega_{mn}} \right) \\ \chi''_{\text{BA}}(\omega) = \frac{\pi}{\hbar} \sum_{n,m} \frac{e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}}{Z} \langle n | \mathbf{B} | m \rangle \langle m | \mathbf{A} | n \rangle \delta(\omega - \omega_{mn}) \\ \Rightarrow \chi_{\text{BA}}(\omega) = \chi'_{\text{BA}}(\omega) + i\chi''_{\text{BA}}(\omega).$$

Ez általában nem a válaszfüggvény valós és képzetes része, kivéve az  $\mathbf{A} = \mathbf{B}$  esetet. Viszont vegyük észre, hogy

$$(1.59) \quad \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\chi''_{\text{BA}}(\omega)}{z - \omega'} d\omega' = -\pi \chi_{\text{BA}}(z),$$

vagyis  $\chi''_{\text{BA}}(\omega)$ -ból a teljes  $\chi_{\text{BA}}(z)$  előállítható.

### 1.2.4. Korrelációs függvények

Vezessük be a korrelációs függvényeket:

$$(1.60) \quad S_{\text{BA}}(t) := \langle \mathbf{B}(t) \mathbf{A} \rangle_0, \quad \tilde{S}_{\text{BA}}(t) := \langle \mathbf{A} \mathbf{B}(t) \rangle_0.$$

Ezek segítségével két újabb korrelációs függvényt értelmezhetünk, melyek közül az egyikkel már találkoztunk:

$$(1.61) \quad C_{\text{BA}}(t) = \frac{1}{2} [S_{\text{BA}}(t) + \tilde{S}_{\text{BA}}(t)], \quad \varphi_{\text{BA}}(t) = \frac{i}{\hbar} [S_{\text{BA}}(t) - \tilde{S}_{\text{BA}}(t)].$$

A (1.55) formulából leolvashatjuk  $S_{\text{BA}}$  és  $\tilde{S}_{\text{BA}}$  energiareprezentációs alakját:

$$(1.62) \quad S_{\text{BA}}(t) = \sum_{n,m} \frac{e^{-\beta E_n}}{Z} \langle n | \mathbf{B} | m \rangle \langle m | \mathbf{A} | n \rangle e^{-i\omega_{mn}t}, \\ \tilde{S}_{\text{BA}}(t) = \sum_{n,m} \frac{e^{-\beta E_m}}{Z} \langle n | \mathbf{B} | m \rangle \langle m | \mathbf{A} | n \rangle e^{-i\omega_{mn}t}.$$

**Fourier-transzformált.** Most a Fourier-transzformációban  $t$  a teljes számegyenesen végigmegegy, hiszen nem a válaszfüggvénnyel dolgozunk, továbbá csak valós frekvenciákra Fourier-transzformálunk, ami természetesen csak disztribúcióként értelmezhető eredményt ad, hiszen egy periodikus függvényt az egész számegyenesen nem lehet integrálni:

$$\underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} e^{i(\omega - \omega_{mn})t} dt}_{\text{ez nem létezik}} = \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \left[ \int_{-\infty}^0 e^{i(\omega - \omega_{mn})t} e^{\varepsilon t} dt + \int_0^{\infty} e^{i(\omega - \omega_{mn})t} e^{-\varepsilon t} dt \right] =$$

$$\begin{aligned}
&= \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \left\{ \left[ \frac{e^{i(\omega - \omega_{mn})t} e^{\varepsilon t}}{i(\omega - \omega_{mn} - i\varepsilon)} \right]_{-\infty}^0 + \left[ \frac{e^{i(\omega - \omega_{mn})t} e^{-\varepsilon t}}{i(\omega - \omega_{mn} + i\varepsilon)} \right]_0^{\infty} \right\} = \\
&= \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \left[ \frac{1}{i} \left( \frac{1}{\omega - \omega_{mn} - i\varepsilon} - \frac{1}{\omega - \omega_{mn} + i\varepsilon} \right) \right] = 2\pi\delta(\omega - \omega_{mn}),
\end{aligned}$$

ahol az utóbbi végeredményhez felhasználtuk a (3.1) összefüggést. Ennek segítségével kifejezhetjük a Fourier-transzformáltakat:

$$\begin{aligned}
(1.63) \quad S_{\text{BA}}(\omega) &= 2\pi \sum_{n,m} \frac{e^{-\beta E_n}}{Z} \langle n | \mathbf{B} | m \rangle \langle m | \mathbf{A} | n \rangle \delta(\omega - \omega_{mn}), \\
\tilde{S}_{\text{BA}}(\omega) &= 2\pi \sum_{n,m} \frac{e^{-\beta E_m}}{Z} \langle n | \mathbf{B} | m \rangle \langle m | \mathbf{A} | n \rangle \delta(\omega - \omega_{mn}).
\end{aligned}$$

Tudjuk, hogy  $\omega_{mn} = \frac{E_m - E_n}{\hbar}$ , vagyis  $-\beta E_m = -\beta E_n - \beta \hbar \omega_{mn}$ . Emellett tetszőleges  $f$  függvényre  $f(\omega_{mn})\delta(\omega - \omega_{mn}) = f(\omega)\delta(\omega - \omega_{mn})$  hiszen akármelyik próbafüggvényre alkalmazzuk, ugyanazt az eredményt kapjuk. Ezekkel kapcsolat létesíthető  $S_{\text{BA}}$  és  $\tilde{S}_{\text{BA}}$  között:

$$(1.64) \quad \tilde{S}_{\text{BA}}(\omega) = e^{-\beta \hbar \omega} S_{\text{BA}}(\omega).$$

Fejezzük ki most ennek ismeretében a másik két korrelációs függvényt is:

$$(1.65) \quad C_{\text{BA}}(\omega) = \frac{1}{2} S_{\text{BA}}(\omega) [1 + e^{-\beta \hbar \omega}], \quad \varphi_{\text{BA}}(\omega) = \frac{i}{\hbar} S_{\text{BA}}(\omega) [1 - e^{-\beta \hbar \omega}].$$

Elég tehát csak egy korrelációs függvényt ismernünk, hiszen abból a másik három kifejezhető. vegyük észre, hogy ezek a formulák univerzálisak, mert minden fizikai rendszerre, zavarra, mért mennyiségre alkalmazhatók.

**Fluktuáció-disszipáció tétel.**  $\varphi_{\text{BA}}(\omega)$ -nak (1.58) felhasználásával egy másik fontos alakját is megadhatjuk:

$$(1.66) \quad \varphi_{\text{BA}}(\omega) = \frac{i}{\hbar} \sum_{n,m} \frac{e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}}{Z} \langle n | \mathbf{B} | m \rangle \langle m | \mathbf{A} | n \rangle 2\pi\delta(\omega - \omega_{mn}) = 2i\chi''_{\text{BA}}(\omega).$$

Ugyanakkor (1.65) szerint

$$\frac{C_{\text{BA}}(\omega)}{\varphi_{\text{BA}}(\omega)} = \frac{\hbar}{2i} \frac{1 + e^{-\beta \hbar \omega}}{1 - e^{-\beta \hbar \omega}} = \frac{\hbar}{2i} \coth\left(\frac{\beta \hbar \omega}{2}\right).$$

E két eredményből leolvasható, hogy

$$(1.67) \quad C_{\text{BA}}(\omega) = \hbar \coth\left(\frac{\beta \hbar \omega}{2}\right) \chi''_{\text{BA}}(\omega),$$

vagyis teljesül a fluktuáció-disszipáció tétel.

### 1.2.5. Összegszabályok

$\chi''_{\text{BA}}(\omega)$  **momentumai.** Inverz Fourier-transzformálás és (1.66) segítségével:

$$\varphi_{\text{BA}}(t) = \frac{i}{\hbar} \langle [\text{B}(t), \text{A}] \rangle_0 = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_{\text{BA}}(\omega) e^{-i\omega t} d\omega = \frac{i}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \chi''_{\text{BA}}(\omega) e^{-i\omega t} d\omega.$$

Fejazzük ki  $\varphi_{\text{BA}}(t)$   $n$ -edik deriváltját ( $n \geq 0$ ) a  $t = 0$  helyen:

$$(1.68) \quad \left. \frac{d^n \varphi_{\text{BA}}(t)}{dt^n} \right|_{t=0} = \frac{i^{1-n}}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \omega^n \chi''_{\text{BA}}(\omega) d\omega.$$

Ez tehát az  $n$ -edik momentuma  $\chi''_{\text{BA}}(\omega)$ -nak.

**Aszimptotikus kifejtés.** Kihasználva, hogy a válaszfüggvény  $t > 0$  esetén  $\varphi_{\text{BA}}$ -val egyenlő, a komplex frekvenciás Fourier-transzformáltját átalakíthatjuk:

$$\chi_{\text{BA}}(z) = \int_0^{\infty} \chi_{\text{BA}}(t) e^{izt} dt = \int_0^{\infty} \varphi_{\text{BA}}(t) e^{izt} dt =$$

mivel a  $\varphi_{\text{BA}}$  korreláció  $t \rightarrow \infty$  esetén kénytelen lecsengeni, alkalmazhatjuk a parciális integrálást

$$= \left[ \frac{e^{izt}}{iz} \varphi_{\text{BA}}(t) \right]_0^{\infty} - \frac{1}{iz} \int_0^{\infty} \frac{d\varphi_{\text{BA}}(t)}{dt} e^{izt} dt = -\frac{\varphi_{\text{BA}}(0)}{iz} - \frac{1}{iz} \int_0^{\infty} \frac{d\varphi_{\text{BA}}(t)}{dt} e^{izt} dt.$$

A hátsó tagra újra és újra alkalmazhatjuk a parciális integrálást, így végeredményben a következő összeghez jutunk:

$$(1.69) \quad \chi_{\text{BA}}(z) = \sum_{n=0}^{\infty} \left( \frac{i}{z} \right)^{n+1} \left. \frac{d^n \varphi_{\text{BA}}(t)}{dt^n} \right|_{t=0}.$$

### 1.2.6. Megmaradó mennyiségek válasza

Egy  $\text{B}$  fizikai mennyiség megmaradó, ha  $[\text{B}, \mathcal{H}] = 0$ . Ekkor a  $\text{B}$  operátor egyensúlyi időfejlődése (1.49) alapján

$$\text{B}(t) = e^{\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} t} \text{B} e^{-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} t} = \text{B},$$

vagyis nincs időfüggése, így a lineáris válasz (1.52) alapján

$$\begin{aligned} \varphi_{\text{BA}}(t) &= \left\langle \frac{i}{\hbar} [\text{B}(t), \text{A}] \right\rangle_0 = \frac{i}{\hbar Z} \text{Tr} [e^{-\beta \mathcal{H}} (\text{BA} - \text{AB})] = \\ &= \frac{i}{\hbar Z} \{ \text{Tr} [\text{B} e^{-\beta \mathcal{H}} \text{A}] - \text{Tr} [e^{-\beta \mathcal{H}} \text{AB}] \} = 0, \end{aligned}$$

azaz megmaradó mennyiségnek nincs lineáris válasza. Természetesen, ha a perturbációs sorfejtésben tovább megyünk, négyzetes rendben már jelentkezhetnek járulékok.

**A rendszer energiája.**  $\mathcal{H}$  minden rendszerben megmaradó, hiszen kommutál önmagával. Így feltéve, hogy a zavar továbbra is  $\mathcal{H}'(t) = \mathcal{H} - \mathbf{A}f(t)$  alakú, vezessük le sorfejtés nélkül az energiaátlag megváltozását:

$$\frac{d\langle \mathcal{H} \rangle_t}{dt} = \text{Tr} [\partial_t \hat{\rho}(t) \mathcal{H}] =$$

itt most használjuk a (1.42) von Neumann egyenletet

$$= -\frac{i}{\hbar} \text{Tr} [[\mathcal{H}'(t), \hat{\rho}(t)] \mathcal{H}] = -\frac{i}{\hbar} \text{Tr} [(\mathcal{H} \hat{\rho}(t) - \mathbf{A} \hat{\rho}(t) f(t) - \hat{\rho}(t) \mathcal{H} + \hat{\rho}(t) \mathbf{A} f(t)) \mathcal{H}] =$$

mivel  $\text{Tr} [\mathcal{H} \hat{\rho}(t) \mathcal{H}] = \text{Tr} [\hat{\rho}(t) \mathcal{H} \mathcal{H}]$ , ezért ezek a tagok kiesenek

$$= -\frac{i}{\hbar} \text{Tr} [(\hat{\rho}(t) \mathbf{A} - \mathbf{A} \hat{\rho}(t)) \mathcal{H}] f(t) = \text{Tr} \left[ \hat{\rho}(t) \frac{i}{\hbar} [\mathcal{H}, \mathbf{A}] \right] f(t).$$

A standard kvantummechanikából ismeretes, hogy ha egy  $\mathbf{A}$  operátor nem hordoz explicit időfüggést, akkor  $\dot{\mathbf{A}} = \frac{i}{\hbar} [\mathcal{H}, \mathbf{A}]$ . Ezt felhasználva

$$(1.70) \quad \frac{d\langle \mathcal{H} \rangle_t}{dt} = \text{Tr} \left[ \hat{\rho}(t) \dot{\mathbf{A}} \right] f(t) = \left\langle \dot{\mathbf{A}} \right\rangle_t f(t).$$

Ez a formula tehát a rendszer energiájának időderiváltját, vagyis a zavar teljesítményét adja meg.

**Fermi-féle aranszabály.** Legyen  $\mathbf{A} = \mathbf{B}$ , és legyen a zavar koszinuszos:

$$(1.71) \quad f(t) = f_\omega \cos(\omega t) = \frac{f_\omega}{2} (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}).$$

Legyen  $\chi = \chi_{\mathbf{A}\mathbf{A}}$ , így

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{A} \rangle_t &= \int_0^\infty \chi(\tau) f(t - \tau) d\tau = \frac{f_\omega}{2} \left[ e^{i\omega t} \int_0^\infty \chi(\tau) e^{-i\omega\tau} d\tau + e^{-i\omega t} \int_0^\infty \chi(\tau) e^{i\omega\tau} d\tau \right] = \\ &= \frac{f_\omega}{2} [e^{i\omega t} \chi^*(\omega) + e^{-i\omega t} \chi(\omega)] = \frac{f_\omega}{2} [e^{i\omega t} \chi^*(\omega) + e^{-i\omega t} \chi(\omega)]. \end{aligned}$$

A zavar teljesítménye ekkor:

$$\begin{aligned} W_\omega &= \left\langle \dot{\mathbf{A}} \right\rangle_t f(t) = (i\omega) \frac{f_\omega}{2} [e^{i\omega t} \chi^*(\omega) - e^{-i\omega t} \chi(\omega)] \frac{f_\omega}{2} (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) = \\ &= (i\omega) \left( \frac{f_\omega}{2} \right)^2 [\chi^*(\omega) - \chi(\omega) + e^{i2\omega t} \chi^*(\omega) - e^{-i2\omega t} \chi(\omega)]. \end{aligned}$$

Itt egy kis csalást követtünk el, ugyanis a fenti eredményben nem  $\left\langle \dot{\mathbf{A}} \right\rangle_t$ , hanem  $\partial_t \langle \mathbf{A} \rangle_t$  szerepel. Igazából itt arról van szó, hogy a derivált átlagát nem ismerjük, így azt

az átlag deriváltjával közelítjük. Vegyük most a kapott teljesítmény időátlagát. Az oszcilláló tagok időátlaga zérus, így

$$\langle W_\omega \rangle = (i\omega) \left( \frac{f_\omega}{2} \right)^2 [\chi^*(\omega) - \chi(\omega)] = \omega \frac{f_\omega^2}{2} \operatorname{Im} [\chi(\omega)].$$

(1.58) szerint  $\mathbf{A} = \mathbf{B}$  esetén  $\operatorname{Im} [\chi(\omega)] = \chi''(\omega)$ . Ez utóbbit felhasználva eljutunk az úgynevezett Fermi-féle aranyszabályhoz:

$$(1.72) \quad \langle W_\omega \rangle = \frac{2\pi}{\hbar} \left( \frac{f_\omega}{2} \right)^2 \sum_{n,m} \left[ \frac{e^{-\beta E_n}}{Z} - \frac{e^{-\beta E_m}}{Z} \right] |\langle n | \mathbf{A} | m \rangle|^2 (E_m - E_n) \delta[\hbar\omega - (E_m - E_n)].$$

Itt még azt is felhasználtuk, hogy

$$\omega \delta \left( \omega - \frac{E_m - E_n}{\hbar} \right) = (E_m - E_n) \delta[\hbar\omega - (E_m - E_n)],$$

hiszen bármelyik  $\varphi(\omega)$  próbafüggvényre hattatva, tehát  $\varphi(\omega)$ -val összeintegrálva, ugyanazt az értéket kapjuk. Érdeemes bevezetni a

$$(1.73) \quad w_{mn} := \frac{2\pi}{\hbar} \left( \frac{f_\omega}{2} \right)^2 |\langle n | \mathbf{A} | m \rangle|^2 \delta[\hbar\omega - (E_m - E_n)]$$

jelölést. Ezek az ún. időegységre jutó átmeneti valószínűségek, segítségükkel áttekinthetőbb formát ölt az aranyszabály:

$$\langle W_\omega \rangle = \sum_{n,m} \underbrace{w_{mn}}_{\substack{m \rightarrow n \\ \text{átmenet} \\ \text{valószínűsége}}} \underbrace{\left[ \frac{e^{-\beta E_n}}{Z} - \frac{e^{-\beta E_m}}{Z} \right]}_{\substack{n\text{-állapot} \\ \text{valószínűsége}} - \substack{m\text{-állapot} \\ \text{valószínűsége}}} \underbrace{(E_m - E_n)}_{\substack{m \rightarrow n \\ \text{átmenet} \\ \text{energiája}}}$$

### 1.2.7. Időtükrozési invariancia

**Időtükrozés a Schrödinger-egyenletben.** Tekintsünk egy olyan rendszert, melynek Hamilton-operátora időfüggetlen. Ekkor adott  $\psi(t_0) = \psi_0$  kezdeti feltétel mellett egyértelmű  $\psi$  megoldása van a Schrödinger-egyenletnek, és ekkor természetesen  $\psi^*$  egyértelmű megoldása a konjugált Schrödinger-egyenletnek a  $\psi^*(t_0) = \psi_0^*$  kezdeti feltétel mellett.

$$\begin{array}{ll} \text{Schrödinger-egyenlet} & \text{Konjugált egyenlet} \\ \psi(t_0) = \psi_0 & \Leftrightarrow \psi^*(t_0) = \psi_0^* \\ i\hbar\partial_t\psi = \mathcal{H}\psi & -i\hbar\partial_t\psi^* = \mathcal{H}\psi^* \end{array}$$

Legyen  $\mathbb{T}$  az időtükrözés operátora, azaz  $\mathbb{T}\psi(t) = \psi(-t)$ . Ekkor

$$\partial_t \mathbb{T}\psi = -\mathbb{T}\partial_t\psi.$$

Alkalmazzuk a  $\mathbb{T}$  operátort a Schrödinger-egyenlet mindkét oldalára:

$$-i\hbar\partial_t \mathbb{T}\psi = \mathcal{H}\mathbb{T}\psi,$$

vagyis azt kaptuk, hogy  $\mathbb{T}\psi$  eleget tesz a konjugált egyenletnek. Mivel a megoldások egyértelműek, és a konjugált egyenlet megoldása  $\psi^*$ , ezért a végeredmény:

$$(1.74) \quad \mathbb{T}\psi = \psi^*, \text{ tehát } \psi(-t) = \psi^*(t).$$

**Operátorok időtükrözése.** Az operátorok fizikai mennyiségekhez vannak társítva. Vannak olyan fizikai mennyiségek, melyekre az időtükrözés nem hat. Ilyen a hely és az energia. Vannak azonban olyan fizikai mennyiségek, amelyek az időtükrözésre előjelet váltanak. Ilyenek az impulzus, az impulzuszórány, spin, áramsűrűség. Tehát ha egy  $\mathbf{A}$  operátort időtükrözünk, akkor egy  $\varepsilon_{\mathbf{A}}\mathbf{A}$  operátort kapunk, ahol  $\varepsilon_{\mathbf{A}} \in \{-1, 1\}$ . Ha az operátor időfüggést is hordoz, akkor

$$\mathbf{T}\mathbf{B}(t) = \varepsilon_{\mathbf{B}}\mathbf{B}(-t).$$

**Korrelációk időtükrözése.** Vizsgáljuk meg  $S_{\mathbf{B}\mathbf{A}}(t)$  jelentését:  $S_{\mathbf{B}\mathbf{A}}(t) = \langle \mathbf{B}(t)\mathbf{A} \rangle_0$ , ahol  $\mathbf{A} = \mathbf{A}(0)$ .  $S_{\mathbf{B}\mathbf{A}}(t)$  tehát azt jelenti, hogy a nulla időpillanatban bekapcsolt  $\mathbf{A}$  mennyiség milyen hatással van a  $t$  időpillanatban a  $\mathbf{B}$  mennyiségre. Ennek az időtükrözöttje a következő: a  $-t$  időpillanatban bekapcsolt  $\varepsilon_{\mathbf{B}}\mathbf{B}$  mennyiség milyen hatással van a nulla időpillanatban az  $\varepsilon_{\mathbf{A}}\mathbf{A}$ -ra. Feltéve, hogy az időtükrözés szimmetriája a rendszernek, a két korrelációnak egyenlőnek kell lennie:

$$(1.75) \quad S_{\mathbf{B}\mathbf{A}}(t) = \langle \mathbf{B}(t)\mathbf{A} \rangle_0 = \varepsilon_{\mathbf{A}}\varepsilon_{\mathbf{B}} \langle \mathbf{A}\mathbf{B}(-t) \rangle_0 = \varepsilon_{\mathbf{A}}\varepsilon_{\mathbf{B}} \langle \mathbf{A}(t)\mathbf{B} \rangle_0 = \varepsilon_{\mathbf{A}}\varepsilon_{\mathbf{B}} S_{\mathbf{A}\mathbf{B}}(t).$$

Itt még felhasználtuk az időeltolási invarianciát is. Teljesen hasonló eljárással a másik három korrelációs függvényre:

$$(1.76) \quad \tilde{S}_{\mathbf{B}\mathbf{A}}(t) = \varepsilon_{\mathbf{A}}\varepsilon_{\mathbf{B}}\tilde{S}_{\mathbf{A}\mathbf{B}}(t), \quad C_{\mathbf{B}\mathbf{A}}(t) = \varepsilon_{\mathbf{A}}\varepsilon_{\mathbf{B}}C_{\mathbf{A}\mathbf{B}}(t), \quad \varphi_{\mathbf{B}\mathbf{A}}(t) = \varepsilon_{\mathbf{A}}\varepsilon_{\mathbf{B}}\varphi_{\mathbf{A}\mathbf{B}}(t).$$

Mivel a  $\chi_{\mathbf{B}\mathbf{A}}(t)$  válaszfüggvény  $\varphi_{\mathbf{B}\mathbf{A}}(t)$ -vel egyenlő  $t > 0$ -ra, egyébként nulla, ezért a válaszfüggvény is teljesíti ezt az összefüggést:

$$(1.77) \quad \chi_{\mathbf{B}\mathbf{A}}(t) = \varepsilon_{\mathbf{A}}\varepsilon_{\mathbf{B}}\chi_{\mathbf{A}\mathbf{B}}(t).$$

Emellett  $\varphi_{\mathbf{B}\mathbf{A}}$  teljesít még egy összefüggést

$$(1.78) \quad \varphi_{\mathbf{B}\mathbf{A}}(t) = \frac{i}{\hbar} \langle \mathbf{B}(t)\mathbf{A} \rangle_0 - \langle \mathbf{A}\mathbf{B}(t) \rangle_0 = \varepsilon_{\mathbf{A}}\varepsilon_{\mathbf{B}} \frac{i}{\hbar} \langle \mathbf{A}\mathbf{B}(-t) \rangle_0 - \langle \mathbf{B}(-t)\mathbf{A} \rangle_0 = -\varepsilon_{\mathbf{A}}\varepsilon_{\mathbf{B}}\varphi_{\mathbf{B}\mathbf{A}}(-t).$$

A Fourier transzformáltak között is vannak összefüggések:

$$\begin{aligned} \varphi_{\mathbf{B}\mathbf{A}}(\omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_{\mathbf{B}\mathbf{A}}(t)e^{i\omega t} dt = \int_{-\infty}^0 \varphi_{\mathbf{B}\mathbf{A}}(t)e^{i\omega t} dt + \int_0^{\infty} \varphi_{\mathbf{B}\mathbf{A}}(t)e^{i\omega t} dt = \\ &= -\varepsilon_{\mathbf{A}}\varepsilon_{\mathbf{B}} \int_0^{\infty} \varphi_{\mathbf{B}\mathbf{A}}(t)e^{i(-\omega)t} dt + \chi_{\mathbf{B}\mathbf{A}}(\omega) = -\varepsilon_{\mathbf{A}}\varepsilon_{\mathbf{B}}\chi_{\mathbf{B}\mathbf{A}}(-\omega) + \chi_{\mathbf{B}\mathbf{A}}(\omega). \end{aligned}$$

Az alábbi módon összegezhethetjük a végeredményt, amiben (1.66)-t is felhasználjuk:

$$(1.79) \quad \varphi_{\mathbf{B}\mathbf{A}}(\omega) = \chi_{\mathbf{B}\mathbf{A}}(\omega) - \varepsilon_{\mathbf{A}}\varepsilon_{\mathbf{B}}\chi_{\mathbf{B}\mathbf{A}}^*(\omega) = 2i\chi_{\mathbf{B}\mathbf{A}}''(\omega).$$

Ebből azt olvashatjuk le, hogy

$$(1.80) \quad \varphi_{\mathbf{B}\mathbf{A}}(\omega) = 2i\chi_{\mathbf{B}\mathbf{A}}''(\omega) = \begin{cases} 2i \operatorname{Im} \chi_{\mathbf{B}\mathbf{A}}(\omega), & \text{ha } \varepsilon_{\mathbf{A}}\varepsilon_{\mathbf{B}} = 1, \\ 2 \operatorname{Re} \chi_{\mathbf{B}\mathbf{A}}(\omega), & \text{ha } \varepsilon_{\mathbf{A}}\varepsilon_{\mathbf{B}} = -1. \end{cases}$$



Ha ezt alkalmazzuk a (1.67) fluktuáció-disszipáció tételre, akkor

$$(1.81) \quad C_{\text{BA}}(\omega) = \begin{cases} \hbar \coth\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right) \text{Im } \chi_{\text{BA}}(\omega), & \text{ha } \varepsilon_{\text{A}}\varepsilon_{\text{B}} = 1 \Rightarrow \text{valós, páros} \\ -i\hbar \coth\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right) \text{Re } \chi_{\text{BA}}(\omega), & \text{ha } \varepsilon_{\text{A}}\varepsilon_{\text{B}} = -1 \Rightarrow \text{képzetes,} \\ & \text{páratlan} \\ & \text{függvény} \end{cases}$$

Itt a paritástulajdonságok alapja, hogy  $\chi_{\text{BA}}(-\omega) = \chi_{\text{BA}}^*(\omega)$ .

## 2. fejezet

# Sztochasztikus folyamatok

### 2.1. Sztochasztikus folyamatok általános leírása

#### 2.1.1. Sztochasztikus folyamatok fogalma

Tekintsük egy rendszert, amelyet valamilyen kezdőállapotból elindítunk, majd különböző időpillanatokban mérést hajtunk rajta végre. Ennek eredményeként az alábbi mérési idősort kapjuk:

$$\begin{array}{c|c} \text{Mikor mérünk?} & t_n < t_{n-1} < \dots < t_2 < t_1 \\ \text{Mit mérünk?} & x_n & x_{n-1} & \dots & x_2 & x_1 \end{array}$$

Ha az adott rendszert újra és újra elindítjuk a kezdőállapotból, majd újra megmérjük ugyanezekben az időpillanatokban, akkor újabb és újabb adatsorokat kapunk, amelyekből eloszlásfüggvényeket készíthetünk. Megadhatjuk minden időpillanathoz a  $p_1(x_i, t_i)$  eloszlást, amely arról ad információt, hogy mekkora valószínűséggel mérünk  $x_i$ -t a  $t_i$  időpillanatban. Természetesen ez az eljárás nem függ a mérési időpontok megválasztásától, választhatunk más időpontokat is. Aztán vizsgálhatunk együttes eloszlásokat is: általánosan arra kérdésre keressük a választ, hogy mekkora annak a valószínűsége, hogy  $n$  mérésből  $t_1$ -ben  $x_1$ -et,  $t_2$ -ben  $x_2$ -t,  $\dots$ ,  $t_n$ -ben  $x_n$ -et mérünk? Ahhoz, hogy erre egy  $n$ -től és a mérési időpontoktól független választ kapjunk, tekintsünk egy olyan  $X_t$  valószínűségi változót, melyre

$$(2.1) \quad \begin{aligned} \mathcal{P}(x_1 < X_{t_1} < x_1 + dx_1, x_2 < X_{t_2} < x_2 + dx_2, \dots, x_n < X_{t_n} < x_n + dx_n) = \\ = p_n(x_1, t_1; x_2, t_2; \dots; x_n, t_n) dx_1 dx_2 \dots dx_n, \end{aligned}$$

ahol  $p_n$  a keresett valószínűséget jelöli. Az  $X_t$  valószínűségi változót sztochasztikus folyamatnak nevezzük, ha  $n$ -től és a mérési időpontok megválasztásától függetlenül teljesülnek az alábbiak

- *Normáltság:*

$$(2.2) \quad \int p_n(x_1, t_1; x_2, t_2; \dots; x_n, t_n) dx_1 dx_2 \dots dx_n = 1.$$

- *Komplementaritás:*

$$(2.3) \quad \int p_n(x_1, t_1; x_2, t_2; \dots; x_{i-1}, t_{i-1}; x_i, t_i; x_{i+1}, t_{i+1}; \dots; x_n, t_n) dx_i = \\ = p_{n-1}(x_1, t_1; x_2, t_2; \dots; x_{i-1}, t_{i-1}; x_{i+1}, t_{i+1}; \dots; x_n, t_n).$$

Itt természetesen feltettük, hogy a mérés  $x$  adatai valamilyen  $\Omega \subseteq \mathbb{R}$  intervallumból veszik fel értékeiket. Ez az  $\Omega$  halmaz az integrálások tartománya is. A lehetséges mérési adatok  $\Omega$  halmazát állapotternek nevezzük. Az előbb bevezetett  $X_t$  sztochasztikus folyamat ún. folytonos állapotterű sztochasztikus folyamat.

Lehet azonban  $\Omega$  diszkrét halmaz is. Ebben az esetben  $X_t$ -t diszkrét állapotterű sztochasztikus folyamatnak nevezzük. Ilyenkor

$$(2.4) \quad \mathcal{P}(x_1 = X_{t_1}, x_2 = X_{t_2}, \dots, x_n = X_{t_n}) = p_n(x_1, t_1; x_2, t_2; \dots; x_n, t_n),$$

továbbá itt is teljesülnie kell a folytonos esetben megkövetelt tulajdonságoknak:

- *Normáltság:*

$$(2.5) \quad \sum_{x_1, x_2, \dots, x_n \in \Omega} p_n(x_1, t_1; x_2, t_2; \dots; x_n, t_n) = 1.$$

- *Komplementaritás:*

$$(2.6) \quad \sum_{x_i \in \Omega} p_n(x_1, t_1; x_2, t_2; \dots; x_{i-1}, t_{i-1}; x_i, t_i; x_{i+1}, t_{i+1}; \dots; x_n, t_n) = \\ = p_{n-1}(x_1, t_1; x_2, t_2; \dots; x_{i-1}, t_{i-1}; x_{i+1}, t_{i+1}; \dots; x_n, t_n).$$

Fizikai szempontból érdekes a várható érték, és a korrelációs függvény:

	<b>Folytonos</b>	<b>Diszkrét</b>
(2.7) $\langle x_t \rangle =$	$\int_{\Omega} p_1(x, t) x dx$	$\sum_{x \in \Omega} p_1(x, t) x$
$\langle x_t x_{t'} \rangle =$	$\int_{\Omega^2} p_2(x_1, t; x_2, t') x_1 x_2 dx_1 dx_2$	$\sum_{x_1, x_2 \in \Omega} p_2(x_1, t; x_2, t') x_1 x_2$

### 2.1.2. Markov-folyamatok

Mekkora a valószínűsége annak, hogy  $t_1$ -ben  $x_1$ -et mérünk, ha előtte  $t_2$ -ben  $x_2$ -t, ...,  $t_n$ -ben  $x_n$ -t mértünk? Ez a kérdés tulajdonképpen a feltételes valószínűség megfogalmazása:

$$(2.8) \quad p(x_1, t_1 | x_2, t_2; \dots; x_n, t_n) = \frac{p_n(x_1, t_1; x_2, t_2; \dots; x_n, t_n)}{p_{n-1}(x_2, t_2; \dots; x_n, t_n)}.$$

Markov folyamatról akkor beszélünk, ha  $n$ -től és a mérési időpontok megválasztásától függetlenül

$$(2.9) \quad p(x_1, t_1 | x_2, t_2; \dots; x_n, t_n) = p(x_1, t_1 | x_2, t_2) = \frac{p_2(x_1, t_1; x_2, t_2)}{p_1(x_2, t_2)}.$$

Most pedig megmutatjuk a Markov-folyamatoknak két nagyon fontos tulajdonságát:

**Állítás.** *Markov folyamatoknál, ha ismerjük a  $p(x, t|x', t')$ , ( $t' < t$ ) feltételes valószínűséget és a  $p_1$  eloszlást egy adott  $t_0$  pillanatban, akkor  $n$ -től és a  $t_0$ -nál nagyobb mérési időpontok megválasztásától függetlenül az összes  $p_n$  eloszlást ki tudjuk fejezeni.*

**BIZONYÍTÁS.** Ugyanis egyrészt a komplementaritás miatt  $t > t_0$  esetén

$$(2.10) \quad \text{folytonos: } p_1(x, t) = \int_{\Omega} p_2(x, t; x_0, t_0) dx_0 = \int_{\Omega} p(x, t|x_0, t_0) p_1(x_0, t_0) dx_0,$$

$$\text{diszkrét: } p_1(x, t) = \sum_{x_0 \in \Omega} p_2(x, t; x_0, t_0) = \sum_{x_0 \in \Omega} p(x, t|x_0, t_0) p_1(x_0, t_0).$$

Másrészt a feltételes valószínűség és a Markov-folyamat definíciójából adódóan tetszőleges  $t_0 \leq t_n < t_{n-1} < \dots < t_2 < t_1$  időpontokat választva

$$(2.11) \quad p_n(x_1, t_1; x_2, t_2; \dots; x_n, t_n) = p(x_1, t_1|x_2, t_2) p_{n-1}(x_2, t_2; x_3, t_3; \dots; x_n, t_n) = \dots \\ \dots = p(x_1, t_1|x_2, t_2) p(x_2, t_2|x_3, t_3) \dots p(x_{n-1}, t_{n-1}|x_n, t_n) p_1(x_n, t_n).$$

**Következmény.** (2.10) alapján az alábbi határértékek következnek:

$$(2.12) \quad \text{folytonos: } \lim_{t \rightarrow t'} p(x, t|x', t') = \delta(x - x'), \quad \text{diszkrét: } \lim_{t \rightarrow t'} p(x, t|x', t') = \delta_{xx'}.$$

**Chapmann-Kolmogorov egyenlet.** *Markov-folyamatoknál tetszőleges  $t > t'' > t'$  időpontokat választva*

$$(2.13) \quad \text{folytonos: } p(x, t|x', t') = \int_{\Omega} p(x, t|x'', t'') p(x'', t''|x', t') dx'',$$

$$\text{diszkrét: } p(x, t|x', t') = \sum_{x'' \in \Omega} p(x, t|x'', t'') p(x'', t''|x', t').$$

**BIZONYÍTÁS.** Folytonos esetben a komplementaritás miatt

$$p_2(x, t; x', t') = \int_{\Omega} p_3(x, t; x'', t''; x', t') dx''.$$

Most alkalmazzuk mindkét oldalon a (2.11) formulát:

$$p(x, t|x', t') p_1(x', t') = \int_{\Omega} p(x, t|x'', t'') p(x'', t''|x', t') p_1(x', t') dx''.$$

Osszuk mindkét oldalt  $p_1(x', t')$ -vel, és készen is vagyunk. Diszkrét esetben ugyanígy. **q. e. d.**

Markov-folyamatoknál tehát kiemelt szerepe van a  $p_1(x, 0)$  kezdeti eloszlás függvénynek, és a  $p(x, t|x', t')$  átmeneti-valószínűség függvénynek, ahol  $t > t'$ . Ezekkel ugyanis az egész folyamat leírható. Gondoljuk meg még egyszer ezen függvények jelentését az állapotok segítségével:

- $p_1(x, t)$  annak a valószínűsége, hogy a rendszer a  $t$  időpillanatban az  $x$  állapotban van.
- Ha a rendszer a  $t'$  időpillanatban az  $x'$  állapotban volt, akkor a későbbi  $t$  időpillanatban  $p(x, t|x', t')$  valószínűséggel lesz az  $x$  állapotban.

Ezekből természetesen kézenfekvőnek tűnnek az alábbi normáltsági összefüggések:

	Folytonos	Diszkrét
(2.14)	$\int_{\Omega} p_1(x, 0) dx = 1$	$\sum_{x \in \Omega} p_1(x, 0) = 1$
	$\int_{\Omega} p(x, t x', t') dx = 1$	$\sum_{x \in \Omega} p(x, t x', t') = 1$

Az kezdő állapot normáltsága következik a (2.2) illetve (2.5) normálási feltételekből, az átmenet normáltsága pedig  $p_1(x', t') \neq 0$  esetén következik a komplementaritásból:

$$\int_{\Omega} p(x, t|x', t') dx = \frac{\int_{\Omega} p_2(x, t; x', t') dx}{p_1(x', t')} = \frac{p_1(x', t')}{p_1(x', t')} = 1.$$

Ezek után megadhatjuk a Markov-folyamatoknak egy (2.9)-vel ekvivalens definícióját:

*A  $q_1(x, 0)$  és  $q(x, t|x', t')$ ,  $t > t'$  függvények Markov-folyamatot határoznak meg, ha teljesül a (2.14) normálás és a (2.13) Chapman-Kolmogorov egyenlet.*

Ekkor a  $q_1(x, t)$ ,  $t > 0$  függvényt a (2.10) írja le, és a  $q_n$  függvényeket a (2.11) határozza meg. Az így bevezetett  $q_1$  és  $q_n$  függvények eleget tesznek a (2.2) illetve (2.5) normálási feltételnek a (2.14) miatt, továbbá eleget tesznek a (2.3) illetve (2.6) komplementaritási feltételnek a (2.13) Chapman-Kolmogorov egyenlet miatt.

### 2.1.3. Homogén Markov-folyamatok

Egy Markov-folyamatot homogénnek nevezünk, ha  $p(x, t|x', t') = p(x, t - t'|x', 0)$ . Ez persze nem ugyanaz, mint a stacionárius eset, hiszen itt  $p_1$  függhet időtől. Általában a következő jelölést használjuk

$$p(x, t|x') := p(x, t|x', 0) \underset{\text{homogenitás}}{\Rightarrow} p(x, t|x') = p(x, t + s|x', s), \quad \forall s > 0 \text{ esetén.}$$

Érdemes meggondolni  $p(x, t|x')$  jelentését: ha a rendszer az  $x'$  állapotban van, akkor  $p(x, t|x')$  valószínűséggel lesz  $t$  idő múlva az  $x$  állapotban.

**Homogén Markov-folyamatok tulajdonságai.** Legyen adott egy  $p(x, t|x')$  átmeneti valószínűségű ( $t > 0$ ) és  $p_1(x, 0)$  kezdeti eloszlású homogén Markov-folyamat (diszkrét esetben a továbbiakban  $n, m, \dots$  betűket használunk az állapottér elemeinek jelölésére). Ekkor az alábbi tulajdonságok teljesülnek:

Először is tekintsük meg  $p_1$  alakját a (2.10) alapján:

$$(2.15) \quad \boxed{p_1(x, t) = \int_{\Omega} p(x, t|x'') p_1(x'', 0) dx'' \quad \bigg| \quad p_1(n, t) = \sum_{m \in \Omega} p(n, t|m) p_1(m, 0)}$$

A (2.13) Chapman-Kolmogorov egyenlet alakja ( $t'' = s$  ill.  $t'' = t$  esetén):

$$(2.16) \quad \boxed{\begin{array}{l|l} p(x, t + s|x') = & p(n, t + s|m) = \\ = \int_{\Omega} p(x, t|x'')p(x'', s|x')dx'' = & = \sum_{k \in \Omega} p(n, t|k)p(k, s|m) = \\ = \int_{\Omega} p(x, s|x'')p(x'', t|x')dx'' & = \sum_{k \in \Omega} p(n, s|k)p(k, t|m) \end{array}}$$

A (2.12)  $t = 0$  határérték most így néz ki:

$$(2.17) \quad \boxed{p(x, 0|x') = \delta(x - x') \quad | \quad p(n, 0|m) = \delta_{nm}}$$

A (2.14) normálások alakja:

$$(2.18) \quad \boxed{\begin{array}{l|l} \int_{\Omega} p_1(x, 0)dx = 1, & \sum_{n \in \Omega} p_1(n, 0) = 1, \\ \int_{\Omega} p(x, t|x')dx = 1 & \sum_{n \in \Omega} p(n, t|m) = 1 \end{array}}$$

Végül folytonos esetben fenn kell állnia az alábbi természetes határfeltételeknek:

$$(2.19) \quad \lim_{x \rightarrow \pm\infty} p(x, t|x') = 0, \quad \lim_{x \rightarrow \pm\infty} \frac{\partial p(x, t|x')}{\partial x} = 0.$$

### Homogén és stacionárius Markov-folyamatok, ergodicitás

Egy homogén Markov-folyamat akkor stacionárius (vagy egyensúlyi), ha  $p_1$  időben nem változik. Ha adott egy a fenti feltételeknek eleget tevő  $p$  átmeneti valószínűség, akkor megkereshetjük ennek  $\tilde{p}_1$  stacionárius megoldásait (2.15) segítségével:

$$\tilde{p}_1(x) = \int_{\Omega} p(x, t|x')\tilde{p}_1(x')dx', \quad \text{vagy} \quad \tilde{p}_1(n) = \sum_{m \in \Omega} p(n, t|m)\tilde{p}_1(m), \quad \forall t > 0 \text{ esetén.}$$

Azt mondjuk, hogy a  $p$  átmeneti valószínűséggel meghatározott folyamat ergodikus, ha van olyan  $\tilde{p}_1$  stacionárius eloszlás, hogy bármely  $p_1$  eloszlás esetén

$$\lim_{t \rightarrow \infty} p_1(x, t) = \tilde{p}_1(x).$$

Ez akkor és csak akkor teljesül, ha  $x'$  megválasztásától függetlenül

$$\lim_{t \rightarrow \infty} p(x, t|x') = \tilde{p}_1(x).$$

Ugyanígy értendő diszkrét esetben is. Az ekvivalencia elegendősége a (2.15) egyenletből a határátmenet képzésével  $p$  normáltsága miatt nyilvánvaló. A szükségesség belátásához pedig elég kiindulni egy  $p_1(x, 0) = \delta(x - x')$  kezdeti eloszlásból, ezt ugyanis beírva a (2.15) egyenletbe, majd képezve a határátmenetet, megkapjuk a kívánt eredményt.

**Az infinitezimális operátor**

Legyen adott a  $p$  átmeneti valószínűség. Ekkor egy  $f$  függvény feltételes várható-értéke:

$$(2.20) \quad \int_{\Omega} f(x)p(x, t|x')dx = g_t(x') \quad \text{vagy} \quad \sum_{n \in \Omega} f(n)p(n, t|m)dx = g_t(m).$$

Vezessük be a következő operátoros jelölést:  $t > 0$  esetén  $\hat{\mathbf{T}}_t f = g_t$ . A  $\hat{\mathbf{T}}_t$  operátor jelzi tehát ezt a  $p$ -vel összeintegráló, vagy összesummázó függvényműveletet. Bármennyire is rondának tűnik, van néhány nagyon szép tulajdonsága ennek az operátornak. Először is  $\hat{\mathbf{T}}_t$  lineáris. Másrészt (2.17) miatt  $\hat{\mathbf{T}}_0 f = f$ , vagyis  $\hat{\mathbf{T}}_0 = 1$  egységoperátor. Végül pedig a (2.16) Chapman-Kolmogorov egyenlet miatt

$$\hat{\mathbf{T}}_t \hat{\mathbf{T}}_s = \hat{\mathbf{T}}_{t+s} = \hat{\mathbf{T}}_s \hat{\mathbf{T}}_t.$$

Most vezessük be, az infinitezimális operátort:

$$(2.21) \quad \hat{\mathbf{T}}_s = 1 + \hat{\mathbf{A}}s + \mathcal{O}(s^2) \quad \Rightarrow \quad \hat{\mathbf{A}} = \lim_{s \rightarrow 0} \frac{\hat{\mathbf{T}}_s - 1}{s}.$$

Ennek segítségével felírhatunk  $\hat{\mathbf{T}}_t$ -re egy differenciál egyenletet, hiszen

$$\hat{\mathbf{T}}_{t+s} = \hat{\mathbf{T}}_s \hat{\mathbf{T}}_t = \left[1 + \hat{\mathbf{A}}s + \mathcal{O}(s^2)\right] \hat{\mathbf{T}}_t \quad \Rightarrow \quad \hat{\mathbf{A}} \hat{\mathbf{T}}_t = \lim_{s \rightarrow 0} \frac{\hat{\mathbf{T}}_{t+s} - \hat{\mathbf{T}}_t}{s} = \frac{d\hat{\mathbf{T}}_t}{dt}.$$

Itt  $\hat{\mathbf{T}}_{t+s}$  másik sorrendben is felbontható lenne, akkor azt kapnánk, hogy  $\hat{\mathbf{A}} \hat{\mathbf{T}}_t = d\hat{\mathbf{T}}_t/dt$ , vagyis  $\hat{\mathbf{A}} \hat{\mathbf{T}}_t = \hat{\mathbf{T}}_t \hat{\mathbf{A}}$ . Összefoglalva:

$$(2.22) \quad \frac{d\hat{\mathbf{T}}_t}{dt} = \hat{\mathbf{A}} \hat{\mathbf{T}}_t = \hat{\mathbf{T}}_t \hat{\mathbf{A}} \quad \text{és} \quad \hat{\mathbf{T}}_0 = 1 \quad \Rightarrow \quad \hat{\mathbf{T}}_t = e^{\hat{\mathbf{A}}t}.$$

Az infinitezimális operátorral tehát felépíthetők a  $\hat{\mathbf{T}}_t$  operátorok (amelyeket megfelelő  $\delta$  függvényekre alkalmazva visszakaphatjuk a  $p$  átmeneti valószínűséget), vagyis az infinitezimális operátor meghatározza a Markov-folyamatot.

## 2.2. Diffúziós folyamatok

### 2.2.1. Valószínűségszámítási fogalmak összefoglalása

Legyen  $p(x)$  egy folytonos eloszlásfüggvény, azaz  $p(x) \geq 0$  és  $\int_{\mathbb{R}} p(x) dx = 1$ .

**Momentumok**

$$(2.23) \quad M_n := \langle x^n \rangle = \int_{\mathbb{R}} p(x) x^n dx$$

**Generátorfüggvény**

$$(2.24) \quad \Phi(z) = \langle e^{zx} \rangle = \int_{\mathbb{R}} e^{zx} p(x) dx = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{z^l}{l!} M_l \quad \Rightarrow \quad \left. \frac{\partial^l \Phi(z)}{\partial z^l} \right|_{z=0} = M_l$$

**Kumuláns generátorfüggvény**

$$(2.25) \quad \ln \Phi(z) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{z^l}{l!} K_l, \quad \text{ahol} \quad K_l = \left. \frac{\partial^l \ln \Phi(z)}{\partial z^l} \right|_{z=0}$$

Érdemes megjegyezni, a  $K_l$  kumulánsok első tagjait

$$(2.26) \quad K_0 = 0; \quad K_1 = M_1 = \langle x \rangle; \quad K_2 = M_2 - M_1^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 =: \sigma^2(x).$$

**Gauss-eloszlás**

$$(2.27) \quad p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{(x-m)^2}{2\sigma^2}} \quad \Rightarrow \quad \langle x \rangle = m, \quad \sigma^2(x) = \sigma^2, \quad \Phi(z) = e^{zm + \frac{\sigma^2 z^2}{2}}$$

A kumulánsok:  $K_1 = m, K_2 = \sigma^2, K_{n \geq 3} = 0$ , és  $m = 0$  esetén a momentumok:

$$M_l = \begin{cases} 0, & \text{ha } l \text{ páratlan,} \\ 1 \cdot 3 \cdot 5 \cdot \dots \cdot (l-1) \sigma^l, & \text{ha } l \text{ páros.} \end{cases}$$

### 2.2.2. A diffúziós folyamat fogalma

A továbbiakban  $\mathcal{O}(t)$  alatt olyan függvényt értünk, amelyre  $\lim_{t \rightarrow 0} \frac{\mathcal{O}(t)}{t} = 0$ . Legyen  $p(x, t|x'), p_1(x, 0)$  egy homogén Markov-folyamat, melynek állapottere  $\mathbb{R}$ , így az alábbi integrálások mindig  $-\infty$ -től  $+\infty$ -ig értendők. Ez a folyamat diffúziós, ha

$$(2.28) \quad \int_{\mathbb{R}} (x-x')^n p(x, t|x') dx = \begin{cases} v(x')t + \mathcal{O}(t) & n = 1, \\ \sigma^2(x')t + \mathcal{O}(t) & n = 2, \\ \mathcal{O}(t) & n \geq 3. \end{cases}$$

Ebből fakadóan nagyon kicsi  $t$ -kre

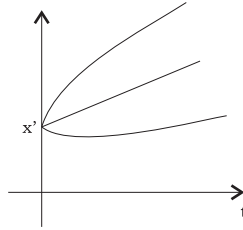
$$p(x, t|x') \sim e^{-\frac{(x-x'+v(x')t)^2}{2\sigma^2(x')t}} \quad \Rightarrow \quad \text{Gauss-eloszlás.}$$



A (2.17) miatt egy diffúziós folyamat olyan, hogy Dirac-deltából indul, majd kezdetben Gauss-szerűen folyik szét. A szétfolyás sebességét a szórás változásával tudjuk jellemezni

$$(2.29) \quad v_{szétfolyás}(t) = \frac{d\sigma(x')\sqrt{t}}{dt} = \frac{\sigma(x')}{2\sqrt{t}},$$

vagyis kezdetben nagyon gyors a szétfolyás, majd fokozatosan lassul. Gyakran magát ezt a szétfolyást nevezik diffúziónak. Azonban nem csak szétfolyás van egy diffúziós folyamatban. A fenti Gaussnak az átlagértéke is eltolódik, méghozzá  $dv(x')t/dt = v(x')$  sebességgel. Ezt szokták driftnek is nevezni.



Az ábrán a középső vonal az átlagérték, amely  $v(x')$  sebességgel tolódik el. Az alsó és felső görbe az átlag körüli szélesedő szórás.

Maga a pálya<sup>1</sup> az  $x'$ -ből indul, majd tipikusan a  $(v(x')t - \sigma(x')\sqrt{t}, v(x')t + \sigma(x')\sqrt{t})$  intervallumból meríti értékeit a különböző  $t$  időpillanatokban. Ez általában folytonos és seholsem differenciálható függvény. Ennek egyszerűen az az oka, hogy ha differenciálható lenne, akkor kellőképpen sima lenne ahhoz, hogy visszafele is tudjunk következtetni, ami ellentmond a folyamat markovságának.

### 2.2.3. Fokker-Planck egyenlet

Most levezetünk egy differenciál-egyenletet, amit a diffúziós-folyamatoknak teljesíteniük kell. Legyen  $p(x, t|x')$  egy diffúziós folyamat, és  $f$  egy tetszőleges függvény.

$$\int f(x)p(x, t + s|x')dx = \int f(x) \left[ p(x, t|x') + s \frac{\partial p(x, t|x')}{\partial t} \right] dx + \mathcal{O}(s^2).$$

A (2.16) Chapmann-Kolmogorov egyenlet és az  $f$  függvény  $y$ -körüli sorfejtése szerint

$$\begin{aligned} \int f(x)p(x, t + s|x')dx &= \int \int f(x)p(x, s|y)p(y, t|x')dydx = \\ &= \int \int \left[ f(y) + f'(y)(x - y) + \frac{1}{2}f''(y)(x - y)^2 + \dots \right] p(x, s|y)p(y, t|x')dydx = \end{aligned}$$

számoljuk ki az utóbbi képlet  $x$  szerinti integrálját (2.28) alapján:

$$= \int \left[ f(y) + f'(y)v(y)s + \frac{1}{2}f''(y)\sigma^2(y)s + \mathcal{O}(s) \right] p(y, t|x')dy =$$

<sup>1</sup>Ha az  $x'$  pontban vagyunk, akkor  $p(x, t|x')$  valószínűséggel leszünk  $t$  idő múlva az  $x$  pontban. Ezt ismerjük. A pálya( $t$ ) az a függvény, ami azt mondja meg, hogy a  $t$  időpillanatban melyik pontban vagyunk. Ezt határolja be a  $p$  valószínűség.

használjuk a parciális integrálást a (2.19) természetes határfeltételekkel:

$$= \int f(y) \left\{ p(y, t|x') + s \left[ -\frac{\partial}{\partial y} (v(y)p(y, t|x')) + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \left( \frac{\sigma^2(y)}{2} p(y, t|x') \right) \right] \right\} dy + \mathcal{O}(s).$$

A legelső egyenlet jobb oldala, és ez utóbbi megegyeznek. Az utóbbiban áttérhetünk  $y$ -ről  $x$ -re.  $\int f(x)p(x, t|x')dx$  mindkét egyenletben ott van, így kiesik, a fennmaradó részeket  $s$ -el osztva, majd  $s$ -el 0-hoz tartva  $\mathcal{O}(s)/s$  és  $\mathcal{O}(s^2)/s$  eltűnnek. Ami megmarad:

$$\int f(x) \frac{\partial p(x, t|x')}{\partial t} dx = \int f(x) \left[ -\frac{\partial}{\partial x} (v(x)p(x, t|x')) + \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left( \frac{\sigma^2(x)}{2} p(x, t|x') \right) \right] dx.$$

Mivel ez tetszőleges  $f(x)$ -re teljesül, ezért az integrandusoknak is meg kell egyezniük. Így jutunk a Fokker-Planck egyenlethez:

$$(2.30) \quad \frac{\partial p(x, t|x')}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} [v(x)p(x, t|x')] + \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left[ \frac{\sigma^2(x)}{2} p(x, t|x') \right].$$

A levezetésből (közvetlenül a parciális integrálás előtti formulából) leolvashatjuk a (2.1.3) részben definiált infinitezimális operátort:

$$\hat{\mathbf{A}} = v(x) \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\sigma^2(x)}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2}.$$

**Megjegyzés.** Természetesen a diffúziós folyamat definíciójában megengedhetjük volna, hogy magasabb momentumok is arányosak legyenek  $t$ -vel. Ez ebben az egyenletben magasabb deriváltak megjelenését jelentené. Csakhogy kiderül, hogy az ilyen folyamatok már általában ugró folyamatok, vagyis nem írhatók le differenciál egyenlettel.

**$p_1$  kielégíti a Fokker-Planck egyenletet** A (2.15) mindkét oldalát deriváljuk  $t$  szerint és használjuk az előbbi (2.30) egyenletet:

$$\begin{aligned} \frac{\partial p_1(x, t)}{\partial t} &= \int \frac{\partial p(x, t|x')}{\partial t} p_1(x', 0) dx' = \\ &= -\frac{\partial}{\partial x} \left[ v(x) \int p(x, t|x') p_1(x', 0) dx' \right] + \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left[ \frac{\sigma^2(x)}{2} \int p(x, t|x') p_1(x', 0) dx' \right]. \end{aligned}$$

Itt (2.15) ismételt alkalmazásával az alábbi eredményre jutunk:

$$(2.31) \quad \frac{\partial p_1(x, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} \left[ v(x) p_1(x, t) - \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{\sigma^2(x)}{2} p_1(x, t) \right] \right].$$

Érdeemes észrevenni a következőt:

$$(2.32) \quad J(x) := v(x) p_1(x, t) - \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{\sigma^2(x)}{2} p_1(x, t) \right] \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial p_1(x, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} J(x).$$

$J(x)$ -et valószínűségi áramsűrűségnek is nevezhetjük. Így a fenti egyenlet egy kontinuitási egyenlet. Ha megvizsgáljuk ezt az áramot, akkor az első tagja a konvektív, vagy drift áram, a második tagja a konduktív, vagy diffúziós áram<sup>2</sup>.

<sup>2</sup>Hőtanban *konduktív áramnak* nevezik azt, amikor egy fém vezet a hőt, tehát hővezetés, és így hőáram történik anyagi áramlás nélkül. *Konvektív hőáramról* pedig akkor beszélünk, amikor a hő gáz, vagy folyadék áramlása által terjed (pl. tűz fölött a levegő kitágul, ritkább lesz, helyét hidegebb foglalja el, vagyis levegő által hordott hőáramlás keletkezik). Itt most nem anyagsűrűség, hanem valószínűségi-sűrűség szerepel az egyenletben, és látható, hogy a konvektív tag a valószínűség-sűrűség "mozgása" által létrejövő áram, a konduktív tag, pedig e sűrűség gradienséből létrejövő áramlás.

**Speciális folyamatok** A  $v(x)$  és  $\sigma^2(x)$  megválasztásától függően különböző speciális diffúziós folyamatok és egyenletek születtek:

- $v(x) = 0$  és  $\sigma^2(x) = \sigma^2 = 2D$ , azaz  $x$ -től független, ekkor beszélünk Wiener-folyamatról.
- $v(x)$  adott és  $\sigma^2(x) = \sigma^2 = 2D$ . Az ilyen folyamatokat a Langevin-egyenlet is leírja.
- $v(x) = -\gamma x$  adott és  $\sigma^2(x) = \sigma^2 = 2D$ , ekkor beszélünk lineáris, vagy Ornstein-Uhlenbeck folyamatról.

A továbbiakban ezeket vizsgáljuk meg részletesen.

### 2.2.4. Wiener-folyamat

Olyan diffúziós folyamat, amelyben  $v(x) = 0$  és  $\sigma^2(x) = 2D$ . Ekkor (2.30) így módosul:

$$(2.33) \quad \frac{\partial p(x, t|x')}{\partial t} = D \frac{\partial^2 p(x, t|x')}{\partial x^2}.$$

Ezt szokás diffúziós egyenletnek nevezni. Ugyanez az egyenlete  $p_1$ -nek is (2.31) szerint.

Oldjuk meg a fenti diffúziós egyenletet:

$$(2.34) \quad \Phi(z, t) = \int e^{zx} p(x, t|x') dx \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial \Phi(z, t)}{\partial t} = \int e^{zx} \frac{\partial p(x, t|x')}{\partial t} dx.$$

Az utóbbinál az integrandust átírhatjuk a (2.33) által, majd a kapott eredményt kétszer parciálisan integrálva a (2.19) természetes határfeltételekkel, az alábbiakat kapjuk:

$$\frac{\partial \Phi(z, t)}{\partial t} = Dz^2 \int e^{zx} p(x, t|x') dx = Dz^2 \Phi(z, t).$$

A kezdeti feltétellel is adódik  $\Phi(z, t)$  (2.34) alakjából (2.17) felhasználásával:

$$p(x, 0|x') = \delta(x - x') \quad \Rightarrow \quad \Phi(z, t) = e^{zx'}.$$

Innen a megoldás leolvasható:

$$\Phi(z, t) = e^{zx' + Dz^2 t}.$$

Ez egy (2.27) Gauss-eloszlás generátorfüggvénye, amelyben  $m = x'$  és  $\sigma^2 = 2Dt$ , vagyis

$$(2.35) \quad p(x, t|x') = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{(x-x')^2}{4Dt}}.$$

Ez a diffúziós-egyenlet alapmegoldása, vagy Green-függvénye, ugyanis ha a kezdeti eloszlással összeintegráljuk (2.15) szerint, akkor megkapjuk a rendszer  $p_1(x, t)$  megoldását.

**Ergodicitás.** Az alapmegoldásból leolvasható, hogy a Wiener-folyamat ergodik, hisz  $t$  növelésével a Gauss egyre keskenyebbé válik, végül Dirac-deltába megy át:

$$(2.36) \quad \lim_{t \rightarrow \infty} p(x, t|x') = \delta(x - x').$$

**A Wiener-folyamat növekményei** Az alapmegoldásból származtatjuk a Wiener-folyamat növekményeit. Legyen  $W_t$  egy speciális Wiener folyamat, amely az origóból indul ( $x' = 0$ ,  $\sigma^2 = 2D$ ), vagyis a  $W_t$ -hez tartozó átmeneti valószínűség:

$$p(x, t|0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2 t}} e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2 t}},$$

így használhatjuk a (2.27) Gauss-eloszlás tulajdonságait. Ekkor a momentumok:

$$(2.37) \quad \begin{aligned} \langle W_t \rangle &= \int w P(w, t|0) dw = 0, \\ \langle W_t^2 \rangle &= \int w^2 P(w, t|0) dw = \sigma^2 t, \\ \langle W_t^{2n} \rangle &= \int w^{2n} P(w, t|0) dw = \sigma^{2n} t^n = 1 \cdot 3 \cdot 5 \cdot \dots \cdot (2n-1) (\sigma^2 t)^n, \\ \langle W_t^{2n+1} \rangle &= 0, \end{aligned}$$

és a korrelációs függvény ( $t > t'$  esetén):

$$(2.38) \quad \langle W_t W_{t'} \rangle = \int w w' p(w, t-t'|w') p(w', t'|0) dw dw' = \sigma^2 t'.$$

Ebből fakadóan általános esetben  $\langle W_t W_{t'} \rangle = \sigma^2 \min\{t, t'\}$ .

### 2.2.5. Gauss-típusú fehérzaj

Tekintsünk egy olyan  $\xi_t$  sztochasztikus folyamatot, amelyre a következők igazak:

$$(2.39) \quad \langle \xi_t \rangle = 0, \quad \langle \xi_t \xi_{t'} \rangle = \sigma^2 \delta(t-t').$$

Tulajdonképpen ez egy olyan 0 körüli zaj, amelyben a különböző időpontbeli értékek egymástól függetlenek, nincs közöttük korreláció.  $\xi_t$  egy úgynevezett általánosított sztochasztikus folyamat, hiszen nem függvények, hanem disztribúciók vannak benne. Ehhez hozzárendelhetünk egy valódi  $Y_t$  folyamatot is:

$$(2.40) \quad Y_t := \int_0^t \xi_s ds.$$

Ennek a folyamatnak is megnézhetjük a növekményeit:

$$(2.41) \quad \langle Y_t \rangle = \int_0^t \langle \xi_s \rangle ds = 0, \quad \langle Y_t Y_{t'} \rangle = \int_0^t \int_0^{t'} \langle \xi_s \xi_{s'} \rangle ds' ds = \sigma^2 \min\{t, t'\},$$

vagyis  $Y_t$  egy  $x' = 0$  típusú Wiener-folyamat növekménye, vagyis  $Y_t = W_t$ , emiatt Gauss-eloszlású. A  $\xi_t$  fehérzaj tehát felfogható úgy, mint egy Wiener-folyamat disztribúció értelemben vett deriváltja  $t$  szerint.

### 2.2.6. Langevin-egyenlet

Legyen  $\xi_t$  egy (2.39) Gauss-típusú fehér zaj, melyben  $\sigma^2$  nem függ az  $x$  változótól. Ekkor az alábbi egyenletet nevezzük Langevin-egyenletnek:

$$(2.42) \quad \dot{x}_t = v(x_t) + \xi_t.$$

Itt  $v(x)$  adja meg az átlagos viselkedést,  $\xi_t$  pedig az átlagtól való eltérést. Ezt úgy kell tekinteni, hogy a  $t$  időpillanatban a jobb oldalon a  $v(x_t)$  értékhez hozzáadunk egy  $\xi_t$  eloszlása szerinti véletlen számot. Emiatt maga  $x_t$  is egy időben változó valószínűségi változó, vagyis sztochasztikus folyamat.

Most megvizsgáljuk, hogy milyen kapcsolat van a Langevin-egyenlet és a diffúziós folyamatok között. Jelölje  $W_t$  a  $\xi_t$  által meghatározott (2.40) Wiener folyamatot. A zajnak természetesen nem értelmes a  $\xi_t dt$  differenciálja, hiszen,  $\xi_t$  disztribúció, azonban függvény esetben  $dW_t = \int_t^{t+dt} \xi_s ds$ , vagyis  $dW_t$  ugyanaz, mint  $\xi_t dt$ . Így felírható  $dx_t$ , a Langevin-egyenlet alapján:

$$dx_t = v(x_t)dt + dW_t + \mathcal{O}(dt), \quad \lim_{dt \rightarrow 0} \frac{\mathcal{O}(dt)}{dt} = 0.$$

Ebből máris leolvasható, hogy az  $x_t$  folyamat megváltozása csak a  $t$ -beli értéktől és a Wiener-folyamat megváltozásától függ, vagyis Markov-folyamat. Nézzük meg  $dW_t$  momentumait (2.37) alapján:

$$\begin{aligned} \langle dW_t \rangle &= 0, \\ \langle dW_t^2 \rangle &= \sigma^2 dt, \\ \langle dW_t^{2n} \rangle &\sim (\sigma^2 dt)^n = \mathcal{O}(dt^n), \\ \langle dW_t^{2n+1} \rangle &= 0. \end{aligned}$$

Ennek segítségével felírhatjuk  $dx_t$  momentumait:

$$\begin{aligned} \langle dx_t \rangle &= \langle v(x_t)dt + dW_t + \mathcal{O}(dt) \rangle = \langle v(x_t)dt \rangle + \langle dW_t \rangle + \mathcal{O}(dt) = v(x_t)dt + \mathcal{O}(dt) \\ \langle dx_t^2 \rangle &= \langle [v(x_t)dt + dW_t + \mathcal{O}(dt)]^2 \rangle = \\ &= \langle [v(x_t)dt]^2 \rangle + 2v(x_t)dt \langle dW_t \rangle + \langle dW_t^2 \rangle + \mathcal{O}(dt) = \sigma^2 dt + \mathcal{O}(dt), \\ \langle dx_t^n \rangle &= \mathcal{O}(dt), \quad (n \geq 3). \end{aligned}$$

Ha ezt összevetjük a diffúziós folyamatok (2.28) definíciójával, akkor azt kapjuk, hogy  $x_t$  diffúziós folyamat a  $v(x)$  átlaggal és  $\sigma^2$  szórással, vagyis felírhatjuk a megfelelő Fokker-Planck egyenletet a  $p$  átmeneti és a  $p_1$  kezdeti eloszlásra:

$$(2.43) \quad \frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}[v(x)p] + \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left[ \frac{\sigma^2}{2} p \right].$$

Összefoglalva: az  $x_t$  diffúziós (sztochasztikus) folyamatról szól a Langevin-egyenlet. Az  $x_t$  folyamathoz tartozó  $p$  átmeneti valószínűségről szól a Fokker-Planck egyenlet. A két leírás ekvivalens. Az egyes paraméterek jelentése:

- $\sigma^2$  jellemzi a zaj szórásnégyzetét.
- $v(x)$  tulajdonképpen a zaj nélküli differenciálegyenletet határozza meg: rendszer viselkedése zaj nélkül.

**A Riemann-integrál korlátai.** Amikor  $\sigma^2$  mégis függ  $x$ -től akkor beleütközünk a Riemann-integrál korlátaiba, ugyanis nem lesz mindegy, hogy a Riemann-összegben az intervallum elejéről, közepéről, vagy végéről választunk értéket. Ez alapján két nevezetes Sztochasztikus integrál, és hozzátartozó sztochasztikus-differenciálegyenlet született:

- Ito-fél integrál: amikor az értéket mindig az intervallum elejéről választjuk.
- Stratonovich-féle integrál: amikor az értéket mindig azintervallum középpontjából vesszük.

**Stacionárius megoldások** Amikor ergodikus a folyamat, tudjuk, hogy a kezdő, és az átmeneti valószínűségek is ugyanahhoz a stacionárius megoldáshoz tartanak, emiatt fontos megvizsgálunk ezt az esetet is. Az előbbi (2.43) egyenlet stacionárius  $\tilde{p}$  megoldásai azok, melyekre  $\partial\tilde{p}/\partial t = 0$ . Vizsgáljuk meg a (2.32) egyenletben definiált áramot:

$$0 = -\frac{\partial}{\partial x}J(x) \quad \Rightarrow \quad J(x) = \text{const.}$$

A (2.19) természetes határfeltételekből tudjuk, hogy  $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} J(x) = 0$ , vagyis a konstans értéke nulla, így (2.32) segítségével felírhatunk a stacionárius megoldásra egy egyszerű egyenletet ( $\sigma^2 = 2D$ ):

$$(2.44) \quad D \frac{d\tilde{p}(x)}{dx} - v(x)\tilde{p}(x) = 0.$$

Ennek megoldásait általában

$$(2.45) \quad \tilde{p}(x) = C e^{-\Phi(x)}$$

alakban keressük, ahol  $\Phi(x)$ -et valamilyen nemnegatív értékű termodinamikai potenciálként foghatjuk föl, és  $C$ -t úgy kell megválasztani, hogy  $\tilde{p}$  normált legyen. Ha ezt beírjuk a fenti egyenletbe, akkor

$$-DC e^{-\Phi(x)} \frac{d\Phi(x)}{dx} - v(x)C e^{-\Phi(x)} = 0 \quad \Rightarrow \quad D \frac{d\Phi(x)}{dx} + v(x) = 0,$$

vagyis  $\Phi(x)$  és  $v(x)$  meghatározzák egymást:

$$(2.46) \quad v(x) = -D \frac{d\Phi(x)}{dx} \quad \Leftrightarrow \quad \Phi(x) = -\frac{1}{D} \int v(x) dx.$$

Itt az integrál a primitív függvényre utal. Még valamit érdemes megjegyezni: ha ismerjük a  $\tilde{p}(x)$  egyensúlyi eloszlást, akkor abból  $\Phi(x)$  kifejezhető, így  $v(x)$  is, vagyis felírhatjuk a nemegyensúlyi (2.42) Langevin-, vagy a vele ekvivalens (2.43) Fokker-Planck egyenletet.

### 2.2.7. Ornstein-Uhlenbeck folyamat

Az Ornstein-Uhlenbeck folyamat olyan diffúziós folyamat, amelyben  $v(x) = -\gamma x$  lineáris függvény, és  $\sigma^2(x) = \sigma^2 = 2D$   $x$ -től független. Ekkor a Fokker-Planck egyenlet (2.43) alapján ( $p$  lehet a kezdeti és az átmeneti valószínűség is):

$$(2.47) \quad \frac{\partial p}{\partial t} = \gamma \frac{\partial}{\partial x}(xp) + D \frac{\partial^2 p}{\partial x^2}.$$

Ugyanígy felírhatjuk (2.42) alapján a folyamat Langevin egyenletét is:

$$(2.48) \quad \dot{x}(t) = -\gamma x(t) + \xi(t), \quad \langle \xi(t) \rangle = 0, \quad \langle \xi(t)\xi(t') \rangle = 2D\delta(t-t').$$

**Stacionárius megoldás.**  $v(x) = -\gamma x$ , így (2.46) alapján felírhatjuk  $\Phi(x)$ -et:

$$\Phi(x) = -\frac{\gamma}{2D}x^2 + \ln C.$$

Ebből (2.45) alapján felírhatjuk a  $\tilde{p}$  stacionárius eloszlást:

$$(2.49) \quad \tilde{p}(x) = \sqrt{\frac{\gamma}{2\pi D}} e^{-\frac{\gamma}{2D}x^2},$$

ahol felhasználtuk, hogy a Gauss-eloszlás ezzel a konstanssal normált.

**Az átmeneti valószínűség generátorfüggvénye.** A fenti (2.47) egyenletet megoldhatjuk a  $p(x, t|x')$  átmeneti valószínűségre, figyelembe véve a (2.17) kezdeti feltételt, a (2.19) természetes határfeltételeket, mint peremfeltételeket, és a (2.18) normálási feltételt. Írjuk föl a (2.2.1) generátorfüggvényt:

$$G(z, t) = \int e^{zx} p(x, t|x') dx, \quad \langle x^n \rangle = \left. \frac{\partial^n G}{\partial z^n} \right|_{z=0}.$$

Szorozzuk meg (2.47) mindkét oldalát  $e^{zx}$ -el, majd integráljuk mindkét oldalt  $x$  szerint. Az egyes tagok:

$$\begin{aligned} \int e^{zx} \frac{\partial p}{\partial t} dx &= \frac{\partial G}{\partial t}, \\ \int e^{zx} \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} dx &= z^2 G, \\ \int e^{zx} \frac{\partial}{\partial x} (xp) dx &= -z \int e^{zx} xp dx = -z \frac{\partial G}{\partial z}. \end{aligned}$$

Itt az utóbbi két esetben a parciális integrálást és a természetes határfeltételeket alkalmaztuk. Így végeredményként az alábbi egyenlethez jutunk:

$$(2.50) \quad \frac{\partial G}{\partial t} + \gamma z \frac{\partial G}{\partial z} = Dz^2 G.$$

Ez már csak egy elsőrendű egyenlet. Ha beírjuk  $G$  definíciójába a  $p$ -re vonatkozó kezdeti feltételt, akkor a  $G(z, 0) = e^{zx'}$  kezdeti feltételt kapjuk  $G$ -re.

**$G$  egyenletének megoldása a karakterisztikák módszerével.** A megoldás a  $(z, t)$  síkon van, így kereshetjük  $s \mapsto (z(s), t(s))$  alakban. Mivel  $G(s) = G(z(s), t(s))$  ezért a derivált:

$$\frac{dG(s)}{ds} = \frac{\partial G}{\partial z} \frac{dz(s)}{ds} + \frac{\partial G}{\partial t} \frac{dt(s)}{ds}.$$

Ha ránézünk (2.50) baloldalára, akkor leolvashatjuk, hogy

$$\frac{dz(s)}{ds} = \gamma z(s) \Rightarrow z(s) = ce^{\gamma s}, \quad \frac{dt(s)}{ds} = 1 \Rightarrow t(s) = s.$$

Ezzel a választással a (2.50) egyenlet  $\frac{dG(s)}{ds} = Dz^2(s)G(s)$  alakú lesz, ami szétválasztható:

$$\frac{dG(s)}{G(s)} = Dz^2(s)ds \quad \Rightarrow \quad \int_0^s \frac{dG(s')}{G(s')} = Dc^2 \int_0^s e^{2\gamma s'} ds'.$$

A határokat az motiválta, hogy  $t(s) = s$ , és tudjuk, hogy  $t \geq 0$ . Az integrálás után

$$\ln G(s) - \ln G(0) = Dc^2 \frac{e^{2\gamma s} - 1}{2\gamma},$$

ahol a kezdeti feltétel alapján  $G(0) = G(z(0), t(0)) = G(c, 0) = e^{cx'}$ . Ebből  $G(s)$ -t kifejezhetjük:

$$G(s) = e^{cx' + \frac{Dc^2}{2\gamma}(e^{2\gamma s} - 1)}.$$

$G$ -t visszaírhatjuk  $z$  és  $t$  változókra, hiszen  $s = t$ , és így  $z = ce^{\gamma t}$ , vagyis  $c = ze^{-\gamma t}$ .

$$(2.51) \quad G(z, t) = e^{zx'e^{-\gamma t} + \frac{Dz^2}{2\gamma}(1 - e^{-2\gamma t})}.$$

**$p$  kifejezése  $G$ -ből.** Vezessük be az

$$x_0 = x'e^{-\gamma t} \quad \text{és} \quad \alpha^2 = \frac{D}{\gamma}(1 - e^{-2\gamma t})$$

jelöléseket. Ekkor  $G(z) = e^{zx_0 + \frac{\alpha^2}{2}z^2}$ , vagyis  $G$  a Gauss-eloszlás (2.27) generátorfüggvénye. Ebből adódik, hogy  $p$  Gauss-eloszlás:

$$(2.52) \quad p(x, t|x') = \frac{1}{\sqrt{2\pi\alpha^2}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\alpha^2}}.$$

**Az Ornstein-Uhlenbeck folyamat ergodikus.** Ha a most megkapott  $p$  átmeneti valószínűségben  $t \rightarrow \infty$ , akkor a határértékben megkapjuk a (2.49) stacionárius eloszlást. Ez azt jelenti, hogy a folyamat ergodikus.

**Korrelációs függvény stacionárius állapotban.** A stacionárius állapot azt jelenti, hogy  $p_1(x, t) = \tilde{p}(x)$ . Ekkor (2.7) alapján,  $t > t'$  esetén:

$$\langle x_t x_{t'} \rangle = \int \int x x' p_2(x, t; x', t') dx dx' = \int x' \left[ \int x p(x, t - t'|x') dx \right] \tilde{p}(x') dx'.$$

Most használjuk ki, hogy ismerjük a  $p$  és  $\tilde{p}$  eloszlást:

$$\begin{aligned} \int x p(x, t - t'|x') dx &= \langle x \rangle = x_0 = x' e^{-\gamma(t-t')}, \\ \int x'^2 \tilde{p}(x') dx' &= \langle x^2 \rangle = D/\gamma. \end{aligned}$$

Ezekből leolvashatjuk a korrelációs függvényt:

$$(2.53) \quad \langle x_t x_{t'} \rangle = \frac{D}{\gamma} e^{-\gamma|t-t'|}, \quad \forall t, t' \in \mathbb{R}.$$



### 2.2.8. Általánosítás több változóra

Most a Langevin-egyenlettel leírható folyamatoknak adjuk meg a többváltozós alakját. Először is  $\mathbf{x} := (x_1, x_2, \dots, x_n)$ . A  $\xi(t) \in \mathbb{R}^n$  Gauss-típusú fehérzaj, ha

$$(2.54) \quad \langle \xi_i(t) \rangle = 0, \quad \langle \xi_i(t) \xi_j(t') \rangle = 2D_{ij} \delta(t - t'),$$

ahol a  $\mathbf{D}$  mátrix szimmetrikus (hiszen a korreláció is az), és pozitív (szemi)definit<sup>3</sup> (hisz sajátértékei a szórásnégyzetek).

A (2.42) Langevin egyenlet vektoros alakja ( $\mathbf{v} : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ ):

$$(2.55) \quad \dot{\mathbf{x}}(t) = \mathbf{v}(\mathbf{x}(t)) + \xi(t).$$

Az ezzel ekvivalens (2.43) Fokker-Planck egyenlet vektoros alakját is felírhatjuk a  $p(\mathbf{x}, t)$  valószínűségi eloszlásra:

$$(2.56) \quad \frac{\partial p}{\partial t} = -\operatorname{div} \mathbf{J}, \quad \text{ahol } \mathbf{J} = \mathbf{v}p - \mathbf{D} \operatorname{grad} p.$$

**Stacionárius megoldások.** Stacionárius esetben  $\operatorname{div} \mathbf{J} = 0$ . Ebből viszont nem következik, hogy  $\mathbf{J}$  konstans lenne. Ebben az esetben a szokásos formában keressük a stacionárius megoldást:

$$(2.57) \quad \tilde{p}(\mathbf{x}) = ce^{-\Phi(\mathbf{x})},$$

ahol  $c$  a normálási tag,  $\Phi$  pedig valamilyen nemnegatív értékű termodinamikai potenciálként fogható föl, így  $\Phi$  gradiensére valamilyen erőként tekinthetünk. Vegyük észre, hogy ekkor  $\operatorname{grad} \tilde{p} = -\tilde{p} \operatorname{grad} \Phi$ , vagyis

$$(2.58) \quad 0 = \operatorname{div} \mathbf{J} = \operatorname{div} [(\mathbf{v} + \mathbf{D} \operatorname{grad} \Phi) \tilde{p}].$$

Érdeemes megvizsgálni két egyszerű esetet, amelyek teljesítik a  $\operatorname{div} \mathbf{J} = 0$  feltételt.

**Első eset:**  $\mathbf{J} = 0$ . Ez azt jelenti, hogy a  $\tilde{p}$ -vel jellemzett stacionárius állapotban (egyensúlyban) nincs valószínűségi áram. Ekkor (2.58) szerint  $\mathbf{v} = -\mathbf{D} \operatorname{grad} \Phi$ . Ezt írjuk be a (2.55) Langevin-egyenletbe:

$$(2.59) \quad \dot{\mathbf{x}}(t) = -\mathbf{D} \operatorname{grad} \Phi(\mathbf{x}(t)) + \xi(t).$$

Zaj nélküli, vagy determinisztikus mozgásról beszélünk, ha  $\xi(t) = 0$ . Ebben az esetben

$$(2.60) \quad \dot{\mathbf{x}}(t) = -\mathbf{D} \operatorname{grad} \Phi(\mathbf{x}(t)).$$

Nézzük meg hogyan viselkedik  $\Phi$  a rendszer által bejárt  $\mathbf{x}(t)$  pálya mentén:

$$\dot{\Phi}(\mathbf{x}(t)) = (\operatorname{grad} \Phi) \dot{\mathbf{x}} = -(\operatorname{grad} \Phi) \mathbf{D} (\operatorname{grad} \Phi) \leq 0,$$

<sup>3</sup>Egy szimmetrikus  $\mathbf{A}$  mátrix pozitív szemidefinit, ha tetszőleges  $\mathbf{x}$  vektor esetén  $\mathbf{x} \mathbf{A} \mathbf{x} = \sum_{i,j=1}^n A_{ij} x_i x_j \geq 0$ . Ez pontosan akkor teljesül, ha  $\mathbf{A}$  sajátértékei nemnegatívak. Pozitív definitnek akkor nevezük az  $\mathbf{A}$  mátrixot, ha tetszőleges nem nulla  $\mathbf{x}$  vektor esetén  $\mathbf{x} \mathbf{A} \mathbf{x} > 0$ . Ez akkor és csak akkor teljesül, ha  $\mathbf{A}$  minden sajátértéke pozitív.

hiszen  $\mathbf{D}$  pozitív definit, és emiatt  $\dot{\Phi}(\mathbf{x}(t)) = 0$  akkor és csak akkor, ha  $\text{grad } \Phi = 0$ . Ez azt jelenti, hogy  $\Phi$  időderiváltja az  $\mathbf{x}(t)$  pálya mentén általában negatív, azaz  $\Phi$  a pálya mentén csökken, és csak akkor nulla, ha  $\Phi$ -nek szélsőértéke, jelen esetben minimuma van, vagyis amikor (2.60) szerint a mozgás megáll ( $\text{grad } \Phi = 0 \Rightarrow \dot{\mathbf{x}} = 0$ ). Ez egyben egy lokális legnagyobb valószínűségű állapot is, hiszen  $\Phi$  lokális minimumánál  $\tilde{p}$ -nek lokális maximuma van.

Összefoglalva: *determinisztikus mozgás során olyan a rendszer  $\mathbf{x}(t)$  pályája, hogy  $\Phi$  e pálya mentén állandóan csökken, és akkor áll meg a rendszer, ha belekerül  $\Phi$  valamilyen lokális minimumába.* Ha van zaj, akkor az folyamatosan arra törekszik, hogy kilökdösse a rendszert ezekből a lokális minimumokból. E két folyamat egyensúlyából alakul ki az egyensúlyi eloszlás. Ezt a jelenséget disszipatív mozgásnak nevezzük.

**Második eset.** Legyen  $\mathbf{Q}$  egy tetszőleges  $n \times n$ -es antiszimmetrikus mátrix.

$$(2.61) \quad \mathbf{v} := \mathbf{Q} \text{grad } \Phi - \mathbf{D} \text{grad } \Phi.$$

Ekkor (2.58) alapján

$$\text{div } \mathbf{J} = \text{div} [\tilde{p} \mathbf{Q}(\text{grad } \Phi)] = (\text{grad } \tilde{p}) \mathbf{Q}(\text{grad } \Phi) + \tilde{p} \text{div} [\mathbf{Q}(\text{grad } \Phi)].$$

Itt használjuk ki, hogy  $\text{grad } \tilde{p} = -\tilde{p} \text{grad } \Phi$ , és írjuk ki indexek szerint az eredményt:

$$\text{div } \mathbf{J} = -\tilde{p} \sum_{i,j} Q_{ij} (\partial_i \Phi) (\partial_j \Phi) + \sum_{i,j} Q_{ij} (\partial_i \partial_j \Phi) = 0,$$

ugyanis  $\mathbf{Q}$  antiszimmetrikus, azaz  $Q_{ij} = -Q_{ji}$ , ebből fakadóan az összeg mindkét tagja külön-külön nulla. Ha tehát  $\mathbf{v}$ -t (2.61) szerint választjuk, akkor teljesül a  $\text{div } \mathbf{J} = 0$  stacionaritási feltétel.

Vizsgáljuk meg most is a determinisztikus mozgást. A Langevin-egyenlet ekkor

$$(2.62) \quad \dot{\mathbf{x}}(t) = \mathbf{v}(\mathbf{x}(t)) = (\mathbf{Q} - \mathbf{D}) [\text{grad } \Phi(\mathbf{x}(t))].$$

Nézzük meg mi történik  $\Phi$ -vel a rendszer által bejárt pálya mentén:

$$\dot{\Phi}(\mathbf{x}(t)) = (\text{grad } \Phi) \dot{\mathbf{x}} = (\text{grad } \Phi) (\mathbf{Q} - \mathbf{D}) (\text{grad } \Phi) = -(\text{grad } \Phi) \mathbf{D} (\text{grad } \Phi) \leq 0,$$

ugyanis  $(\text{grad } \Phi) \mathbf{Q} (\text{grad } \Phi)$ -ről már az előbb beláttuk, hogy nulla, a fennmaradó részt pedig az előző,  $\mathbf{J} = 0$  esetben részletesen megvizsgáltuk, vagyis a rendszer ugyanúgy viselkedik, mint a  $\mathbf{J} = 0$  esetben: a rendszer  $\mathbf{x}(t)$  pályája mentén  $\Phi$  állandóan csökken, míg el nem éri  $\Phi$  valamilyik lokális minimumát, ahol megáll.  $\mathbf{v}$  fenti (2.61) alakjában az első tagot reverzibilis résznek, a második tagot disszipatív résznek nevezzük. A reverzibilis név arra utal, hogy nem befolyásolja  $\Phi$ -t a mozgás pályája mentén.

## 2.3. Brown-mozgás

Folyadékokban, vagy gázokban lévő apró részecskék zezugos, véletlenszerű mozgást végeznek. Ezt a jelenséget nevezzük Brown-mozgásnak. Ma már tudjuk, hogy ennek az az oka, hogy az apró (de a folyadék, ill. gáz molekuláinál sokkal nagyobb) részecske állandóan ütközik a gáz ill. folyadék molekuláival, és ennek köszönhető ez a véletlenszerű mozgás. Természetesen, egy bizonyos méret fölött, ezek az apró részecskék már semmit nem mutatnak a molekuláris ütközésekből.

Tekintsük egy  $m$ -tömegű apró részecske mozgását az egy adott irányban. Jelölje ebben a kitüntetett irányban a részecske impulzusát  $p$ . Ekkor a Stokes-féle ellenállási törvény értelmében

$$(2.63) \quad \dot{p} = -\gamma p + K,$$

ahol az első tag a súrlódási erő (sebességgel arányos), a második tag pedig egy állandó erő, ami az adott irányba hat. Ha ezt a törvényt alkalmazni szeretnénk a Brown-mozgásra, akkor a (2.42) Langevin-egyenlethez jutunk, ahol  $K$  helyébe a  $\xi$  véletlen erőt írjuk, ami tulajdonképpen a részecske véletlen-szerű ütközése a molekulákkal. A valóságban ezekből a véletlen ütközésekből származó korrelációk - tehát az, hogy mekkora hatással vannak egy adott  $t$  időpillantbeli ütközések, a  $t + \Delta t$  időpillantbeli ütközésekre - igen kicsinyek már kis  $\Delta t$ -k esetén is, vagyis a fehérzaj közelítés jó modellje a rendszernek.

Most elsőként egy általánosabb problémát vizsgálunk, majd annak speciális eseteként állítjuk elő a Brown-mozgást, és más fizikailag érdekes szituációkat, majd megvizsgáljuk ezek tulajdonságait.

### 2.3.1. Klasszikus mozgás hőtartályban, egy-dimenzióban

Legyen egy egy-dimenzióban mozgó pont Hamilton függvénye:

$$(2.64) \quad \mathcal{H}(x, p) = \frac{p^2}{2m} + U(x).$$

Ekkor az egyensúlyi Boltzmann-eloszlás

$$(2.65) \quad \tilde{p}(x, p) = \frac{1}{Z} e^{-\beta \mathcal{H}(x, p)}, \quad Z = \int e^{-\beta \mathcal{H}(x, p)} dx dp, \quad \beta = \frac{1}{k_B T}.$$

Most írjuk le a nemegyensúlyi viselkedést. Ehhez használjuk a (2.57) eloszlást:

$$(2.66) \quad \Phi(x, p) := \beta \mathcal{H}(x, p),$$

így a Hamilton-féle kanonikus egyenletek:

$$\dot{x} = \frac{p}{m} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p} = kT \frac{\partial \Phi}{\partial p}, \quad \dot{p} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial x} = -kT \frac{\partial \Phi}{\partial x}.$$

Ezeket összevetve a (2.63) egyenlettel, felírhatjuk a (2.55) Langevin-egyenleteket az  $x$  és a  $p$  változókra:

$$\dot{x} = kT \frac{\partial \Phi}{\partial p}, \quad \dot{p} = -kT \frac{\partial \Phi}{\partial x} - \gamma m \dot{x} + \xi = -kT \frac{\partial \Phi}{\partial x} - \gamma m kT \frac{\partial \Phi}{\partial p} + \xi.$$

Ezt az egyenletrendszert átrendezhetjük olyan formára, hogy megfeleltethető legyen a többváltozós általánosításánál vizsgált stacionárius megoldások második esetével:

$$(2.67) \quad \begin{pmatrix} \dot{x} \\ \dot{p} \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} 0, & k_B T \\ -k_B T, & 0 \end{pmatrix}}_{\mathbf{Q}} \underbrace{\begin{pmatrix} \frac{\partial \Phi}{\partial x} \\ \frac{\partial \Phi}{\partial p} \end{pmatrix}}_{\text{grad } \Phi} - \underbrace{\begin{pmatrix} 0, & 0 \\ 0, & \gamma m k_B T \end{pmatrix}}_{\mathbf{D}} \underbrace{\begin{pmatrix} \frac{\partial \Phi}{\partial x} \\ \frac{\partial \Phi}{\partial p} \end{pmatrix}}_{\text{grad } \Phi} + \begin{pmatrix} 0 \\ \xi \end{pmatrix}.$$

Ebből felírhatjuk a (2.61) és a (2.56) által a Fokker-Planck egyenletet egy tetszőleges  $p(x, p, t)$  eloszlásra. Itt a jelölés zavaró, hiszen a külső  $p$  az eloszlásra, és a belső  $p$  az impulzusra utal, így érdemes  $p(x, mv, t) = p(x, v, t)$ -t használni, és figyelembe venni, hogy  $\frac{\partial p(x, p, t)}{\partial p} = \frac{1}{m} \frac{\partial p(x, v, t)}{\partial v}$ .

$$(2.68) \quad \frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}(vp) + \frac{\partial}{\partial v} \left[ \left( \frac{1}{m} \frac{dU(x)}{dx} + \gamma v \right) p \right] + \frac{\gamma k_B T}{m} \frac{\partial^2 p}{\partial v^2}.$$

A megoldások szempontjából nincs szükség a teljes (2.67) Langevin-egyenletrendszerre, hiszen ebből az első az  $\dot{x} = p/m$ , vagyis az impulzus definíciója, így elég a második egyenletet vizsgálni:

$$(2.69) \quad \dot{p} = -\frac{dU(x)}{dx} - \gamma p + \xi,$$

vagyis valójában egy egyváltozós, kibővített Langevin-egyenlettel van dolgunk.

### 2.3.2. A Brown-mozgás vizsgálata

Brown-mozgásról akkor beszélünk, amikor  $U(x) = 0$ . Ekkor az előbbi egyenlet

$$\dot{p} = -\gamma p + \xi,$$

vagyis megkaptuk az Ornstein-Uhlenbeck folyamatnak a (2.48) Langevin-egyenletét. Térjünk át sebességre:  $p = mv$ , legyen  $\eta = \xi/m$ , így

$$(2.70) \quad \dot{v} = -\gamma v + \eta, \quad \langle \eta(t) \rangle = 0, \quad \langle \eta(t)\eta(t') \rangle = 2D\delta(t-t'), \quad \Phi(v) = \frac{mv^2}{2k_B T}$$

Ismerjük az egyensúlyi eloszlást (2.45) alapján, ami most Gauss:

$$(2.71) \quad \tilde{p}(v) = \sqrt{\frac{m}{2\pi k_B T}} e^{-\frac{mv^2}{2k_B T}},$$

és fel tudunk írni egy összefüggést  $D$  és  $\gamma$  között (2.46) segítségével:

$$(2.72) \quad \gamma = \frac{mD}{k_B T}.$$

Mivel Ornstein-Uhlenbeck folyamatról van szó, ezért egyrészt ismerjük az átmeneti valószínűségeket (2.52), és a korrelációs függvényt (2.53). Ez utóbbit érdemes megismételni:

$$(2.73) \quad \langle v(t)v(t') \rangle = \frac{k_B T}{m} e^{-\gamma|t-t'|} \Rightarrow \frac{1}{2} m \langle v^2(t) \rangle = \frac{1}{2} k_B T,$$

vagyis a sebesség szórásnégyzete minden időpillanatban az egyensúlyi eloszlás szórásnégyzete, és ez az érték összeegyeztethető az ekvipartíció-tétellel

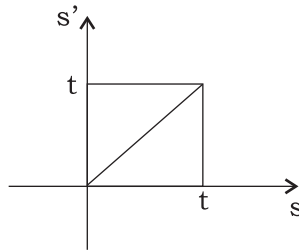
Szeretnénk mondani valamit a részecskék helyéről is. A sebesség  $v(t)$  egy Ornstein-Uhlenbeck folyamat, aminek az átmeneti valószínűsége, mint tudjuk, Gauss. A hely,  $x(t)$  is egy sztochasztikus folyamat, ami valamilyen értelemben a sebesség idő szerinti integrálja, vagyis  $x(t)$  is Gauss-szerűen fog viselkedni. Most csak az átlagokra vonatkozó integrálásokat végezzük el.

$$\langle x(t) - x(0) \rangle = \int_0^t \langle v(s) \rangle ds = 0,$$

és a szórás, amihez használjuk fel a (2.73) korrelációs függvényt:

$$\langle [x(t) - x(0)]^2 \rangle = \int_0^t ds \int_0^t ds' \langle v(s)v(s') \rangle = \frac{k_B T}{m} \int_0^t ds \int_0^t ds' e^{-\gamma|s-s'|} =$$

Vizsgáljuk meg az integrálási tartományt geometriailag:



Az integrál értéke ugyan az lesz a két háromszögben, így

$$= \frac{2k_B T}{m} \int_0^t ds \int_0^s ds' e^{-\gamma(s-s')} = \frac{2k_B T}{m} \int_0^t e^{-\gamma s} \frac{e^{\gamma s} - 1}{\gamma} ds = \frac{2k_B T}{m\gamma} \left[ t + \frac{e^{-\gamma t} - 1}{\gamma} \right].$$

Ez kis idők esetén, azaz ha exponens sorfejtésében másodrendig haladunk, átalakul az

$$\langle x(t) - x(0) \rangle = \frac{k_B T}{m} t^2$$

eredménnyé, amiben az az érdekes, hogy nem szerepel benne a  $\gamma$  csillapítási, vagy súrlódási tényező. Nagy időkre pedig, tehát amikor  $\gamma t \gg 1$ , azt kapjuk, hogy

$$\langle x(t) - x(0) \rangle = \frac{2k_B T}{m\gamma} t \quad \Rightarrow \quad D = \frac{k_B T}{m\gamma}.$$

Megkaptuk tehát az  $x(t)$  folyamat diffúziós együtthatóját. Ez az Einstein-reláció.

### 2.3.3. Mozgás harmonikus-oszcillátor potenciálban

Legyen  $U(x) = \frac{1}{2}m\omega_0^2 x^2$ . Ekkor a (2.69) egyenlet alakja:

$$(2.74) \quad \ddot{x}_t = -\omega_0^2 x_t - \gamma \dot{x}_t + \frac{\xi_t}{m} + \frac{f_t}{m}, \quad \langle \xi_t \rangle = 0, \quad \langle \xi_t \xi_{t'} \rangle = 2Dm^2 \delta(t-t'), \quad D = \frac{\gamma k_B T}{m}.$$

ahol  $f_t$  egy determinisztikus külső gerjesztés, és felhasználtuk a (2.72) összefüggést, illetve azt, hogy előbb  $\xi/m$  korrelációs együtthatóját jelöltük  $2D$ -vel (így került be  $m^2$ ). Fourier-transzformáljuk ennek az egyenletnek mindkét oldalát:

$$(2.75) \quad (i\omega)^2 x_\omega = -\omega_0^2 x_\omega + (i\omega)\gamma x_\omega + \frac{\xi_\omega}{m} + \frac{f_\omega}{m} \quad \Rightarrow \quad x_\omega = \frac{1}{m} \frac{\xi_\omega + f_\omega}{(i\omega)^2 - (i\omega)\gamma + \omega_0^2}.$$

Innen  $x_\omega$  átlagát könnyen ki tudjuk fejezni, hiszen

$$\langle \xi_\omega \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} \langle \xi_t \rangle dt = 0,$$

a többi tag pedig konstans az átlagképzés szempontjából:

$$(2.76) \quad \langle x_\omega \rangle = \chi(\omega) f(\omega), \quad \chi(\omega) = \frac{1}{m} \frac{1}{(i\omega)^2 - (i\omega)\gamma + \omega_0^2}.$$

Itt  $\chi(\omega)$  ún. lineáris válaszfüggvény: az  $f(\omega)$  által keltett kis gerjesztésekre a rendszer  $\langle x_\omega \rangle$  elmozdulása arányos.

#### A válaszfüggvény pólusai.

$$(i\omega)^2 - (i\omega)\gamma + \omega_0^2 = 0 \quad \Leftrightarrow \quad i\omega = \frac{\gamma}{2} \pm \sqrt{\frac{\gamma^2}{4} - \omega_0^2}.$$

Két eset lehetséges:

- ha  $\omega_0^2 > \gamma^2/4$ , akkor  $\omega = -i\frac{\gamma}{2} \pm \sqrt{\omega_0^2 - \frac{\gamma^2}{4}}$ , vagyis a pólusok az alsó félsíkon vannak (csillapított eset).
- ha  $\omega_0^2 < \gamma^2/4$ , akkor  $\omega = -i\left(\frac{\gamma}{2} \pm \sqrt{\frac{\gamma^2}{4} - \omega_0^2}\right)$ , vagyis a pólusok az imaginárius tengelyen vannak (túlcsillapított eset).

A válaszfüggvények eleget kell tennie a kauzalitásnak, és függetlenül a zavar bekapcsolási idejétől, ugyanolyan viselkedést kell mutatnia. E két tulajdonság együtt azt eredményezi, hogy  $\chi(\tau)$   $\tau < 0$ -ra nullát ad. Ezzel ekvivalens, hogy  $\chi(z) = \int_0^{\infty} \chi(\tau) e^{iz\tau} d\tau$ , vagyis a komplex számsíkra kiterjesztett Fourier-transzformált a felső félsíkon analitikus. A pólusok tehát az alsó félsíkon, vagy a valós tengelyen lehetnek.

**Korrelációs függvények.** Most keressük meg a  $\langle \xi_\omega \xi_{\omega'} \rangle$  korrelációs függvényt. Kezdjük azzal, amit tudunk:

$$\begin{aligned} \langle \xi_t \xi_{t'} \rangle &= 2\gamma m k_B T \delta(t - t') = 2\gamma m k_B T \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega(t-t')} = \\ &= 2\gamma m k_B T \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} e^{-i\omega t} e^{-i\omega' t'} 2\pi \delta(\omega + \omega'), \end{aligned}$$

de ez kifejezhető a keresett korrelációs függvény inverz Fourier-transzformáltjaként is:

$$\langle \xi_t \xi_{t'} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} e^{-i\omega t} e^{-i\omega' t'} \langle \xi_\omega \xi_{\omega'} \rangle.$$

A két eredményből leolvasható, hogy

$$(2.77) \quad \langle \xi_\omega \xi_{\omega'} \rangle = 2\gamma m k_B T 2\pi \delta(\omega + \omega').$$

A rendszerben van egy időeltolási invariancia. Ez a korrelációkban úgy jelenik meg, hogy csak azok a frekvenciák maradnak meg, melyek összege zérus. A (2.75) közvetlen behelyettesítésével kiszámíthatjuk az  $x_\omega$  korrelációs függvényét (kihasználva, hogy  $\langle \xi_\omega \rangle = \langle \xi_{-\omega} \rangle = 0$ ):

$$\langle x_\omega x_{-\omega} \rangle = \frac{1}{m^2} \frac{\langle \xi_\omega \xi_{-\omega} \rangle + f_\omega f_{-\omega}}{[(i\omega)^2 - (i\omega)\gamma + \omega_0^2] [(i\omega)^2 + (i\omega)\gamma + \omega_0^2]}$$

## 2.4. Master-egyenlet

Tekintsünk egy olyan homogén Markov-folyamatot, ahol az állapottér diszkrét. Adott a  $p_1(n, 0)$  kezdőeloszlás és a  $p(n, t|m)$ ,  $t > 0$  átmeneti valószínűség. Fejtsük sorba  $p(n, s|m)$ -et  $s$  szerint:

$$p(n, s|m) = p(n, 0|m) + \left. \frac{\partial p(n, s|m)}{\partial s} \right|_{s=0} s + \mathcal{O}(s^2).$$

Itt (2.17) szerint  $p(n, 0|m) = \delta_{nm}$ .  $w_{nm} := \left. \frac{\partial p(n, s|m)}{\partial s} \right|_{s=0}$ , ezt úgy is tekinthetjük, mint időegységre jutó átmeneti valószínűség. Ezekkel az előbbi egyenlet:

$$(2.78) \quad p(n, s|m) = \delta_{nm} + w_{nm}s + \mathcal{O}(s^2).$$

Tekintsük  $s$ -t elegendően kicsinek ahhoz, hogy  $\mathcal{O}(s^2)$  elhanyagolható legyen.  $w_{nm}$  valószínűségi jellegét ekkor könnyen ellenőrizhetjük:

- Ha  $n \neq m$ , akkor  $p(n, s|m) = w_{nm}s$ . Mivel  $s > 0$  és  $p$  nemnegatív függvény, így  $w_{nm}$  nemnegatív, vagyis lehet valószínűségi jellege.
- Ha  $n = m$ , akkor  $p(m, s|m) = 1 + w_{mm}s$ . Mivel  $p \leq 1$ , és  $s > 0$ , ezért  $w_{mm} \leq 0$ , vagyis ekkor nem lehet valószínűség.

$w_{mm}$  nem független a többi tagtól, ugyanis összegezve a (2.78) egyenlet mindkét oldalát  $n$ -re, és felhasználva a (2.18) normálást, az alábbi eredményt kapjuk:

$$1 = 1 + s \sum_{n \in \Omega} w_{nm} + \mathcal{O}(s^2) \quad \Rightarrow \quad \sum_{n \in \Omega} w_{nm} = \frac{\mathcal{O}(s^2)}{s}.$$

Itt az  $s \rightarrow 0$  határátmenetben  $\lim_{s \rightarrow 0} \mathcal{O}(s^2)/s = 0$ , vagyis

$$(2.79) \quad w_{mm} = - \sum_{n \in \Omega \setminus \{m\}} w_{nm}.$$

A Chapmann-Kolmogorov egyenletnek egy sokatmondó differenciális alakját is felírhatjuk az eddigiek segítségével. Először is tekintsük  $p(n, t + s|m)$  sorfejtését:

$$p(n, t + s|m) = p(n, t|m) + \frac{\partial p(n, t|m)}{\partial t} s + \mathcal{O}(s^2).$$

Másrészt viszont a (2.16) Chapmann-Kolmogorov egyenlet és a (2.78) szerint

$$\begin{aligned} p(n, t + s|m) &= \sum_{l \in \Omega} p(n, s|l)p(l, t|m) = \sum_{l \in \Omega} [\delta_{nl} + w_{nl}s + \mathcal{O}(s^2)] p(l, t|m) = \\ &= p(n, t|m) + s \sum_{l \in \Omega} w_{nl}p(l, t|m) + \mathcal{O}(s^2). \end{aligned}$$

Mint hogy az előbbi két egyenlet bal oldalai azonosak, így a jobb oldalak is azok:

$$\frac{\partial p(n, t|m)}{\partial t} = \sum_{l \in \Omega \setminus \{n\}} w_{nl}p(l, t|m) + w_{nn}p(n, t|m) + \frac{\mathcal{O}(s^2)}{s}.$$



Itt  $s \rightarrow 0$  határátmenetben  $\mathcal{O}(s^2)/s$  eltűnik, és ekkor (2.79) is használható. Így jutunk el az ún. Master-egyenlethez:

$$(2.80) \quad \frac{\partial p(n, t|m)}{\partial t} = \sum_{l \in \Omega} [w_{nl}p(l, t|m) - w_{ln}p(n, t|m)].$$

Itt nyilván fölösleges kizárnunk az összegben az  $l = n$  esetet.

### 2.4.1. $p_1$ kielégíti a Master-egyenletet

Deriváljuk (2.15) mindkét oldalát  $t$  szerint:

$$\frac{\partial p_1(n, t)}{\partial t} = \sum_{m \in \Omega} \frac{\partial p(n, t|m)}{\partial t} p_1(m, 0).$$

Alkalmazzuk a (2.80) Master-egyenletet:

$$\frac{\partial p_1(n, t)}{\partial t} = \sum_{m \in \Omega} \sum_{l \in \Omega} [w_{nl}p(l, t|m) - w_{ln}p(n, t|m)] p_1(m, 0).$$

Itt (2.15) felhasználásával azt kapjuk, hogy  $p_1$  is kielégíti a Master-egyenletet:

$$(2.81) \quad \frac{\partial p_1(n, t)}{\partial t} = \sum_{l \in \Omega} [w_{nl}p_1(l, t) - w_{ln}p_1(n, t)].$$

### 2.4.2. Stacionárius (egyensúlyi) megoldások

Stacionárius esetben, vagyis amikor  $p_1(n, t) = \tilde{p}(n)$ , az előbbi egyenlet:

$$(2.82) \quad 0 = \sum_{l \in \Omega} [w_{nl}\tilde{p}(l) - w_{ln}\tilde{p}(n)], \quad \forall n \in \Omega \text{ esetén.}$$

Ha ismerjük a  $w_{nm}$  átmeneti valószínűségeket, akkor ennek az algebrai egyenletrendszernek a megoldásával megkereshetjük a  $w_{nm}$ -hez tartozó normált stacionárius  $\tilde{p}$  megoldásokat.

### 2.4.3. Részletes egyensúly

Részletes egyensúlyról akkor beszélünk, ha az előbbi egyenlet tagonként zérus, azaz

$$(2.83) \quad w_{nl}\tilde{p}(l) = w_{ln}\tilde{p}(n), \quad \forall n, l \in \Omega \text{ esetén.}$$

Ekkor azt mondjuk, hogy  $\tilde{p}$  olyan stacionárius megoldás, amely teljesíti a részletes egyensúlyt.

### 2.4.4. Időtükrozési invariancia

Időtükrozési invarianciáról akkor beszélünk, ha

$$(2.84) \quad p_2(n, t; m, t') = p_2(m, t; n, t'),$$

így (2.11) szerint,  $t' = 0$  esetén, valamely  $\tilde{p}$  stacionárius megoldásra

$$p(n, t|m)\tilde{p}(m) = p(m, t|n)\tilde{p}(n).$$

Alkalmazzuk a (2.78) sorfejtést. A  $\delta_{nm}$ -es tagok mindkét oldalon egyenlőek, így kiesnek.

$$(2.85) \quad w_{nm}\tilde{p}(m) = w_{mn}\tilde{p}(n) + \frac{\mathcal{O}(t^2)}{t} \underset{t \rightarrow 0}{\Rightarrow} w_{nm}\tilde{p}(m) = w_{mn}\tilde{p}(n).$$

Azt kaptuk tehát, hogy ha időtükrözési invariancia van, akkor minden stacionárius megoldásra fennáll a részletes egyensúly.

### 2.4.5. Véges állapottér esete

Legyen  $\Omega = \{1, 2, \dots, N\}$ . Ekkor megadhatjuk az átmeneti valószínűségeket egy  $\mathbf{w}$   $N \times N$ -es mátrix formájában, amely teljesíti a (2.79) egyenletet:  $\sum_{n=1}^N w_{nm} = 0$ . Könnyű belátni, hogy ekkor  $\mathbf{w}$  minden pozitív egész hatványa is teljesíti ezt. Jelölje  $\mathbf{p}(t)$  azt a mátrixot, amelynek elemei a  $p(n, t|m)$  átmeneti valószínűségek. Ekkor a (2.80) Master egyenlet és a (2.17) kezdeti feltétel szerint

$$\dot{\mathbf{p}}(t) = \mathbf{w}\mathbf{p}, \quad \mathbf{p}(0) = \mathbf{1} \quad \Rightarrow \quad \mathbf{p}(t) = e^{\mathbf{w}t}.$$

Vegyük észre, hogy  $\mathbf{p}(t) = \hat{\mathbf{T}}_t$ , ahol ez utóbbi az infinitezimális operátorról szóló (2.1.3) részben bevezetett operátor. Ebből fakadóan  $\mathbf{w}$  itt maga az infinitezimális operátor.

Tulajdonképpen tetszőleges (2.79) egyenletnek eleget tevő  $\mathbf{w}$  mátrixal felépíthetünk így  $\mathbf{p}(t)$  átmeneti valószínűséget. Hiszen  $\mathbf{p}(t) = e^{\mathbf{w}t}$  eleget tesz a (2.16) Chapman-Kolmogorov egyenletnek, és mivel  $\mathbf{w}$  minden pozitív hatványára is iga (2.79), ezért  $\mathbf{p}(t)$  hatványsorából kihozható, hogy  $\mathbf{p}(t)$  eleget tesz a (2.18) normálásnak.

### 2.4.6. A Master-egyenlettel kapcsolatos fizikai feladatok

- Egy fizikai folyamat  $w_{nm}$  átmeneti valószínűségeit valamilyen fizikai érvekkel megpróbáljuk meghatározni. Ezekkel felírjuk a Master-egyenletet és megoldjuk.
- Tudjuk, hogy mi a  $\tilde{p}$  egyensúlyi eloszlás (pl. kanonikus eloszlásból). Ehhez megpróbálunk olyan  $w_{nm}$ -eket választani, amelyekre fennáll a részletes egyensúly, majd ezekkel megoldjuk a Master-egyenletet. (A részletes-egyensúly használata helyett más módszereket is választhatunk az átmeneti valószínűségek meghatározásához.)
- Nem érdekel a dinamika, csak az egyensúlyi eloszlás (Monte-Carlo módszerek). Szeretnénk meghatározni a sokaság átlagait, de nem megy valami miatt. Ilyenkor definiálunk egy Master-egyenletet az egyensúlyi eloszláshoz (tehát olyan  $w_{nm}$  átmeneti valószínűségeket veszünk, amelyek az adott egyensúlyi eloszláshoz tartanak) és sokaságátlagok helyett időátlagokat számolunk. Kérdés persze, hogy a rendszer bárhol elindítva egyértelműen az adott egyensúlyi eloszlásba kerül-e.

## 2.5. $H$ -tétel és alkalmazásai

Legyen adott egy  $\Omega$  állapottér és a  $w_{nm}$  átmeneti valószínűségek. A rendszer gráfját úgy konstruálhatjuk meg, hogy kijelöljük az  $\Omega$  állapottér elemeinek pontjait a síkon, és akkor rajzolunk  $m \rightarrow n$  irányított élt ha  $w_{nm} > 0$ . Ez a gráf irreducibilis, ha bármely állapotból eljuthatunk véges sok lépésben bármelyik állapotba.

**Állítás.** *Tegyük fel, hogy az állapottér irreducibilis, és van olyan  $\tilde{p}(n)$  stacionárius megoldás, melyre fennáll a részletes egyensúly. Ekkor a folyamat ergodikus, és a stacionárius határeloszlás a  $\tilde{p}$ .*

### 2.5.1. A $H$ -tétel levezetése

$\tilde{p}(n) > 0$ , **minden  $n$ -re.** *Először is megmutatjuk, hogy ekkor  $\tilde{p}(n) > 0$ , minden  $n$ -re.* Válasszunk egy olyan  $n$  állapotot, hogy  $\tilde{p}(n) > 0$  (ilyen van), és válasszunk egy tetszőleges  $k$  állapotot.  $n$ -ből  $k$ -ba véges sok lépéssel el lehet jutni:

$$n \rightarrow l_1 \rightarrow l_2 \rightarrow \dots \rightarrow l_j \rightarrow k.$$

$w_{l_1, n} > 0$  és a részletes egyensúly miatt  $\tilde{p}(n)w_{l_1, n} = \tilde{p}(l_1)w_{n, l_1}$ . Itt a bal oldal pozitív, így a jobb oldal is az, vagyis  $\tilde{p}(l_1) > 0$ .  $w_{l_2, l_1} > 0$  és a részletes egyensúly miatt  $\tilde{p}(l_1)w_{l_2, l_1} = \tilde{p}(l_2)w_{l_1, l_2}$ . Itt a bal oldal pozitív, így a jobb oldal is az, vagyis  $\tilde{p}(l_2) > 0$ . Ezt tovább csinálhatjuk, amíg el nem jutunk  $k$ -ba, így  $\tilde{p}(k) > 0$ .

**A  $H$  függvény.** Legyen  $p(n, t|k)$  megoldása a Master-egyenletnek ( $w_{nm}$ -ek adottak, így felírható és megoldható a Master-egyenlet).  $k$ -t most tekintsük rögzítettnek, és vezessük be a  $p(n, t) := p(n, t|k)$  jelölést.

$$(2.86) \quad H(t) := \sum_{n \in \Omega} p(n, t) \ln \frac{p(n, t)}{\tilde{p}(n)}.$$

Mivel  $\sum_{n \in \Omega} p(n, t) = \sum_{n \in \Omega} \tilde{p}(n) = 1$ , ezért  $y_n := \frac{p(n, t)}{\tilde{p}(n)}$  bevezetésével

$$H = \sum_{n \in \Omega} \left[ p(n, t) \ln \frac{p(n, t)}{\tilde{p}(n)} - p(n, t) + \tilde{p}(n) \right] = \sum_{n \in \Omega} \tilde{p}(n) [y_n \ln y_n - y_n + 1].$$

Tekintsük az  $f(y) = y \ln y - y + 1$  függvényt ( $y > 0$ ). Könnyen ellenőrizhető, hogy  $f(1) = 0$ , minden más helyen pozitív, sőt 0, illetve  $\infty$  határértékben sem tart nullához.

Ebből következik, hogy  $H \geq 0$ , és mivel  $\tilde{p}(n)$  mindig pozitív, ezért  $H = 0$  akkor és csak akkor, ha mindegyik  $y_n \ln y_n - y_n + 1 = 0$ . Ez  $y_n = 1$  esetén áll fenn, vagyis  $H = 0$  akkor és csak akkor, ha  $p(n, t) = \tilde{p}(n)$  minden  $n$ -re.

**$H$  deriváltja.** Deriváljuk a (2.86)  $H$  függvényt idő szerint. Itt az összegben csak azok a tagok szerepelnek, melyekben  $p(n, t) \neq 0$ , hiszen az ilyen tagok  $H$ -hoz sem adnak semmit.

$$\dot{H}(t) := \sum_n \dot{p}(n, t) \ln \frac{p(n, t)}{\tilde{p}(n)} + \sum_n p(n, t) \frac{\tilde{p}(n)}{p(n, t)} \frac{\dot{p}(n, t)}{\tilde{p}(n)} = \sum_n \dot{p}(n, t) \ln \frac{p(n, t)}{\tilde{p}(n)},$$

ugyanis  $\sum_n \dot{p}(n, t) = \frac{\partial}{\partial t} \sum_n p(n, t) = \frac{\partial}{\partial t} 1 = 0$ . Most használjuk fel a (2.80)-t:

$$\begin{aligned} \dot{H}(t) &= \sum_{n,l, n \neq l} [w_{nl}p(l, t) - w_{ln}p(n, t)] \ln \frac{p(n, t)}{\tilde{p}(n)} \\ + \dot{H}(t) &= \sum_{n,l, n \neq l} [w_{ln}p(n, t) - w_{nl}p(l, t)] \ln \frac{p(l, t)}{\tilde{p}(l)} \quad n \leftrightarrow l \text{ csere} \\ \hline 2\dot{H}(t) &= \sum_{n,l, n \neq l} [w_{nl}p(l, t) - w_{ln}p(n, t)] \ln \left( \frac{p(n, t)}{\tilde{p}(n)} \frac{\tilde{p}(l)}{p(l, t)} \right) \end{aligned}$$

Az utóbbi egyenletben az összegzésből kihagyhatjuk azokat a tagokat, amelyeknél  $w_{nl} = 0$ , hiszen ekkor a részletes egyensúly és  $\tilde{p}$  pozitívága miatt  $w_{ln} = 0$ , vagyis az ilyen tagok nem adnak járulékot.

$$\dot{H}(t) = \frac{1}{2} \sum_{n,l, n \neq l} w_{nl}p(l, t) \left[ 1 - \frac{w_{ln}p(n, t)}{w_{nl}p(l, t)} \right] \ln \left( \frac{p(n, t)}{\tilde{p}(n)} \frac{\tilde{p}(l)}{p(l, t)} \right).$$

Itt  $w_{ln}/w_{nl} = \tilde{p}(l)/\tilde{p}(n)$ , a részletes egyensúly miatt. Így bevezetve az  $y_{nl} := \frac{p(n, t)}{\tilde{p}(n)} \frac{\tilde{p}(l)}{p(l, t)}$  jelölést, a fenti egyenlet alakja:

$$(2.87) \quad \dot{H}(t) = \frac{1}{2} \sum_{n,l, n \neq l} w_{nl}p(l, t) [1 - y_{nl}] \ln y_{nl}.$$

Vizsgáljuk az  $f(y) := (1 - y) \ln y$  függvényt ( $y > 0$ ). Könnyen ellenőrizhető, hogy  $f(1) = 0$  és minden más helyen negatív, és 0, illetve  $\infty$  határértékben sem tart nullához. Mivel  $w_{nl}p(l, t) > 0$ , azért  $\dot{H} \leq 0$ , vagyis  $H$  monoton csökkenő.

**Végeredmény.** Mivel  $H$  nemnegatív és monoton csökkenő, ezért  $t \rightarrow \infty$  esetén véges határértékhez tart. Ebből fakadóan  $\lim_{t \rightarrow \infty} \dot{H} = 0$ , hiszen  $H$  monoton csökkenőleg történő véges határértékhez tartása azt jelenti, hogy az érintő fokozatosan átmegy vízszintesbe.

Nagyon nagy  $t$ -kre már  $p(n, t) = p(n, t|k)$  sem lehet nulla, hiszen a gráf irreducibilis, vagyis  $k$ -ból  $n$ -be véges sok lépéssel el lehet jutni, így a  $k$ -ból  $n$ -be jutás valószínűsége elég nagy idő után már biztosan pozitív. Ez azt is jelenti, hogy nagy  $t$ -k esetén a (2.87) összegben csak azok a tagok nem szerepelnek, melyekben  $w_{nl} = w_{ln} = 0$ .

$t \rightarrow \infty$  esetén (2.87) bal oldala nulla, jobb oldala pedig csak akkor lehet nulla, ha az összegben szereplő összes  $nl$  párra  $y_{nl} = 1$ .

$$1 = \frac{p(n, t)}{\tilde{p}(n)} \frac{\tilde{p}(l)}{p(l, t)} \quad \Rightarrow \quad \frac{p(n, t)}{\tilde{p}(n)} = \frac{p(l, t)}{\tilde{p}(l)} =: \lambda.$$

Node a normálási feltételek miatt

$$\lambda \sum_{n \in \Omega} \tilde{p}(n) = \sum_{n \in \Omega} p(n, t) \quad \Rightarrow \quad \lambda = 1.$$

Látjuk tehát, hogy  $y_{nl} = 1$  esetén  $p(n, t) = \tilde{p}(n)$  és  $p(l, t) = \tilde{p}(l)$ . Minthogy az irreducibilitás miatt az összegben szereplő  $nl$  párok összesen lefedik az állapotteret, és bármely

$k$ -ból indulva végigmehetünk a levezetés eddigi lépésein, így arra a végeredményre jutunk, hogy

$$(2.88) \quad \lim_{t \rightarrow \infty} p(n, t|k) = \tilde{p}(n), \quad \forall n, k \in \Omega \text{ esetén.}$$

Ez a  $H$ -tétel<sup>4</sup>. Az irreducibilitás és a részletes egyensúly fennállása tehát ergodikus rendszerhez vezet. Fontos következmény, hogy  $\lim_{t \rightarrow \infty} H(t) = 0$ .

### 2.5.2. Alkalmazás a kanonikus sokaságra

Legyen  $E : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$  alulról korlátos függvény. Ekkor

$$(2.89) \quad Z := \sum_{n \in \Omega} e^{-\beta E_n}, \quad \tilde{p}(n) := \frac{1}{Z} e^{-\beta E_n}.$$

Ezt nevezzük Boltzmann-féle kanonikus eloszlásnak. Általában egy fizikai rendszer mikroszkopikus szintjén fennáll az időtükrözési szimmetria, így  $w_{nm}$  definiálásakor kiindulhatunk a részletes egyensúlyból, így  $n \neq m$  esetén

$$(2.90) \quad w_{nm} e^{-\beta E_m} = w_{mn} e^{-\beta E_n} \quad \Rightarrow \quad \frac{w_{nm}}{w_{mn}} = e^{-\beta(E_n - E_m)},$$

$w_{nn}$  meghatározásához pedig (2.79)-et kell alkalmazni. Ez az eljárás rendkívül nagy szabadságot ad a  $w_{nm}$  értékek meghatározásához. Minthogy itt mindegyik  $w_{nm}, n \neq m$  érték pozitív, ezért a gráf irreducibilis lesz, vagyis fennáll a  $H$ -tétel: a (2.80) Master-egyenlet  $p(n, t|m)$  megoldása esetén

$$\lim_{t \rightarrow \infty} p(n, t|m) = \tilde{p}(n) = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_n}.$$

Mindenek előtt vizsgáljuk meg az időbeli változás, és az egyensúlyi termodinamikai fogalmak kapcsolatát. Legyen  $m$  tetszőleges, de rögzített állapot és  $p(n, t) := p(n, t|m)$ . Ehhez használjuk a (2.86)  $H$  függvényt:

$$H = \sum_{n \in \Omega} p(n, t) \ln p(n, t) - \sum_{n \in \Omega} p(n, t) [-\beta E_n - \ln Z] \geq 0 \quad \Bigg/ \cdot \frac{1}{\beta}$$

$$\frac{H}{\beta} = \frac{1}{\beta} \sum_{n \in \Omega} p(n, t) \ln p(n, t) + \sum_{n \in \Omega} p(n, t) E_n + \frac{1}{\beta} \ln Z \geq 0.$$

Bevezetve az alábbi jelöléseket, szemléletes alakra hozhatjuk ezt az egyenletet:

$$\begin{aligned} \beta &= \frac{1}{k_B T}, \\ F &= -\frac{1}{\beta} \ln Z, \\ \langle E_t \rangle &= \sum_{n \in \Omega} p(n, t) E_n, \\ -TS_{inf}(t) &= \frac{1}{\beta} \sum_{n \in \Omega} p(n, t) \ln p(n, t), \end{aligned} \quad \Rightarrow \quad k_B T H(t) = \underbrace{-TS_{inf}(t)}_{F_{nemegyensulyi}(t)} + \langle E_t \rangle - F \geq 0.$$

<sup>4</sup>A bizonyítás az utolsó rész kivételével korrekt. Az utolsó részben tulajdonképpen hallgatólagosan azt használtuk ki, hogy  $p(n, t)$ -nek létezik pozitív határértéke. Ez azonban még bizonyításra szorul.

Láthatjuk tehát, hogy  $F_{nemeqyensúlyi}(t) \geq F$ . Ha  $t \rightarrow \infty$ , akkor  $H \rightarrow 0$ , így

$$\lim_{t \rightarrow \infty} F_{nemeqyensúlyi}(t) = F.$$

Az eredmény rendkívül szemléletes: egy fizikai rendszer nemegyensúlyi szabadenergiája nagyobb az egyensúlyi szabadenergiánál. Az idő múlásával pedig mindenképpen beáll az egyensúly.

### 2.5.3. Metropolis algoritmus

Készíteni akarunk egy olyan algoritmust, ami a (2.89) egyensúlyi eloszláshoz tart. Ehhez vezessük be a következő jelöléseket ( $n \neq m$  esetén)

$$A(m \rightarrow n) = \begin{cases} 1, & \text{ha } E_n \leq E_m, \\ e^{-\beta(E_n - E_m)}, & \text{ha } E_n > E_m. \end{cases} \quad \text{ún. elfogadási valószínűség,}$$

$$g(m \rightarrow n) = g(n \rightarrow m) \quad \text{ún. kiválasztási valószínűség.}$$

Ezek segítségével vezessük be az átmeneti valószínűségeket:

$$w_{nm} := g(m \rightarrow n)A(m \rightarrow n).$$

Ekkor teljesül a (2.90), vagyis az eloszlásnak megfelelő átmeneteket hoztunk létre, és az egyensúlyi  $\tilde{p}$  eloszlással teljesül a (2.83) részletes egyensúly is.

Az eredeti Metropolis algoritmusban  $g(m \rightarrow n) = 1/N$ , ahol  $N$  az állapottér elemeinek száma. Az algoritmus pedig úgy megy, hogy elindulunk valamelyik  $m$  állapotból, és a következő lépésben  $w_{nm}$  valószínűséggel leszünk a  $n$  állapotban (véletlenszám-generálás szükséges). Az algoritmus akkor halad gyorsan, ha  $\sum_{n, n \neq m} w_{nm}$  alig kisebb 1-nél, és az

$A(m \rightarrow n)$  arányok is a lehető legnagyobbak. Elég sok lépés után ( $t \rightarrow \infty$ ) annak a valószínűsége, hogy épp az  $n$  állapotban vagyunk  $\tilde{p}(n)$ , függetlenül attól, hogy melyik állapotból indultunk.

## 3. fejezet

# Függelék

### 3.1. Fourier-transzformáció

Egy  $g(t)$   $\pm\infty$ -ben eltűnő függvény Fourier-transzformáltját így értjük:

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

Ez egy lineáris (unitér) transzformáció, melynek legfontosabb tulajdonságai:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \dot{g}(t)e^{i\omega t} dt = -i\omega g(\omega), \quad \int_{-\infty}^{\infty} e^{\pm i\omega t} d\omega = 2\pi\delta(t).$$

### 3.2. Néhány szó a disztribúciókról

Jelölje  $D$  az olyan valós számokon értelmezett, akárhányszor differenciálható függvényeket, melyek csak egy korlátos halmazon különböznek nullától. Disztribúcióknak az olyan  $f : D \rightarrow \mathbb{R}$ , vagy  $f : D \rightarrow \mathbb{C}$  függvényeket nevezzük, melyek lineárisak és folytonosak.  $D$  elemeit tipikusan  $\varphi$ -vel jelöljük, és próbafüggvényeknek nevezzük. Ha  $f$  disztribúció, akkor  $\langle \varphi, f \rangle$  jelöli az  $f(\varphi)$  valós, vagy komplex számot. Ha  $f$  egy lokálisan (azaz tetszőleges véges intervallumon) integrálható függvény, akkor  $f$ -ből disztribúciót is képezhetünk:

$$\langle \varphi, f \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(x)f(x)dx.$$

Ezeket nevezzük reguláris disztribúcióknak. A disztribúciók körében úgy szokás műveleteket bevezetni, hogy a bevezetendő műveletet kipróbáljuk a reguláris disztribúciókon, majd ezt általánosítjuk. Például a deriválást a parciális integrálás segítségével:

$$\langle \varphi, f' \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(x)f'(x)dx = - \int_{-\infty}^{\infty} \varphi'(x)f(x)dx = - \langle \varphi', f \rangle.$$

Ezt a formulát tekintjük a továbbiakban minden disztribúció deriváltjának. Vannak nem reguláris disztribúciók is. Ilyen például a Dirac-delta:

$$\langle \varphi, \delta(x - x_0) \rangle = \varphi(x_0).$$

Az ilyen disztribúciókra is gyakran alkalmazzuk a reguláris jelölést, emiatt vannak  $\int_{-\infty}^{\infty} \varphi(x) \delta(x - x_0) dx$  alakú integrálok. Egy másik híres, nem reguláris disztribúció a főérték-integrál:

$$\left\langle \varphi, \mathbb{P} \left( \frac{1}{x} \right) \right\rangle = \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \left[ \int_{-\infty}^{-\varepsilon} \frac{\varphi(x)}{x} dx + \int_{\varepsilon}^{\infty} \frac{\varphi(x)}{x} dx \right].$$

Könnyű megmutatni, hogy  $(\ln|x|)' = \mathbb{P} \left( \frac{1}{x} \right)$  disztribúció értelemben, azaz ha két oldalt, mint egy-egy disztribúciót valamely próbafüggvényre alkalmazzuk, akkor azonos értéket kapunk. Most pedig gondoljuk meg az alábbi határátmenetet:

$$(3.1) \quad \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \frac{1}{x \pm i\varepsilon} = \mathbb{P} \left( \frac{1}{x} \right) \mp i\pi\delta(x).$$

Ezt a limeszt úgy kell érteni, hogy tetszőleges  $\varphi$  próbafüggvényt véve

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \left\langle \varphi, \frac{1}{x \pm i\varepsilon} \right\rangle = \left\langle \varphi, \mathbb{P} \left( \frac{1}{x} \right) \mp i\pi\delta(x) \right\rangle.$$

Először is alakítsuk át a törtet:

$$\frac{1}{x \pm i\varepsilon} = \frac{x}{x^2 + \varepsilon^2} \mp i \frac{\varepsilon}{x^2 + \varepsilon^2}.$$

Innen tagonként vizsgálódhatunk. Kezdjük az elsővel:

$$\left\langle \varphi, \frac{x}{x^2 + \varepsilon^2} \right\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(x) \frac{x}{x^2 + \varepsilon^2} dx.$$

A tört  $\varepsilon \rightarrow +0$  esetén egyre inkább átmegey  $1/x$ -be, maga az integrál pedig a főértékhez tart. A második tagnál

$$\left\langle \varphi, \frac{\varepsilon}{x^2 + \varepsilon^2} \right\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(x) \frac{\varepsilon}{x^2 + \varepsilon^2} dx = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(z\varepsilon) \frac{1}{z^2 + 1} dz.$$

Ez  $\varepsilon \rightarrow +0$  esetén egyre inkább átalakul a

$$\varphi(0) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{z^2 + 1} dz = \varphi(0) [\arctan z]_{-\infty}^{\infty} = \varphi(0)\pi = \langle \varphi, \pi\delta(x) \rangle$$

értékbe. Ezzel a fenti formulát igazoltuk.