

NIEGAUSSOWSKIE PROCESY
STOCHASTYCZNE I NIEDEBYE'OWSKA
RELAKSACJA ORAZ ZDARZENIA RZADKIE
W ŚWIECIE REALNYM.

*Od anomalnej dyfuzji i transportu w ciałach
amorficznych oraz fraktalnej relaksacji w
materialach lepko-sprężystych poprzez teorię
zdarzeń ekstremalnych do współczesnej teorii
ryzyka*

Ryszard Kutner

*Zakład Dydaktyki Fizyki
Instytut Fizyki Doświadczalnej, Wydział Fizyki, Uniwersytet
Warszawski*

Warszawa, luty 2006

Spis treści

I	Wstęp	11
1	Motywacja	13
2	Zasadnicze pytania	17
2.1	Rys historyczny: rozkłady potęgowe	17
2.1.1	Skalowanie i log-periodyczność a bąble i krachy giełdowe . . .	19
2.2	Kluczowe pytanie matematyczne	21
2.2.1	Niezbędne wyjaśnienia	26
2.2.2	Paradoks Petersburski a brak skali fizycznej	32
2.3	Motywacja fizyczna	33
2.4	Relaksacja fraktalna	37
2.4.1	Rola pamięci w relaksacji	38
2.4.2	Spowolniona relaksacja na Warszawskiej GPW	39
2.5	Dynamika materiału lepko-sprężystego a relaksacja fraktalna	41
2.5.1	Model Zenera ciała stałego	41
2.6	Dyfuzja fraktalna	43
2.6.1	Rola pamięci w dyfuzji	45
II	Procesy gaussowskie	49
3	Ruchy Browna, opalescencja krytyczna, błękit nieba, rozpraszanie krytyczne	51
3.1	Ruchy Browna	51
3.2	Fraktalne ruchy Browna	53
3.3	Zjawisko opalescencji krytycznej i temu podobne	54
3.4	Wstępne definicje	55
3.5	Pierwszy i drugi moment	55
3.6	Propagator	59
3.6.1	Dekompozycja propagatora	59
3.6.2	Rozkłady asymptotycznie gaussowskie	62
3.7	Proces Markowa - równanie Mistrza	63
3.8	Dyfuzja	66

3.8.1	Dyfuzja Ficka	68
3.9	Centralne twierdzenie graniczne rac jeszcze	68
3.10	Dyfuzja oraz unoszenie	69
3.10.1	Twierdzenie o fluktuacji i dysypacji	73
3.10.2	Równanie ciągłości a liczba Avogadro - doświadczenie Perrina	74
3.11	Równanie Fokkera-Plancka-Smoluchowskiego	77
3.11.1	Równanie Langevina	78
3.12	Autokorelacje - złamanie centralnego twierdzenia granicznego	78
3.12.1	Dyspersja a funkcja autokorelacji	80
3.13	CTG a zanik potęgowy: "oderzenie dwóch światów"	82
3.13.1	Przykład: rozkład Gaussa i rozkład potęgowy w jednym	82
3.14	Procesy moltiplikatywne: rozkład logarytmiczno-normalny	85
3.14.1	Od rozkładu log-normalnego do potęgowego	88
3.14.2	Log-normalne oraz potęgowe dochody jednostek w społeczeństwie	88
3.14.3	Potęgowe dochody przedsiębiorstw	89
3.14.4	Bardziej realistyczny stochastyczny proces moltiplikatywny	89
3.14.5	Równanie Fokkera-Plancka	91
3.14.6	Swobodne równanie Langevina	92
3.14.7	Moltiplikatywno-addytywny proces stochastyczny a proces moltiplikatywny z ograniczającą, odpychającą barierą	92
3.14.8	Równanie Langevina	93
4	Analiza portfelowa	105
4.1	Opcje jako zasadniczy instrument na rynku finansowym	105
4.1.1	Kontrakty terminowe	105
4.2	Dynamiczna wycena opcji - model Blacka-Scholesa a przewodnictwo cieplne	106
4.2.1	Proces stochastyczny Itô	107
4.2.2	Dynamika infinitesimalnej zmiany ceny opcji	108
4.2.3	Portfel pozbawiony ryzyka - równanie Blacka-Scholesa	108
4.2.4	Formuła wyceny opcji kupna Blacka-Scholesa	111
4.2.5	Dochód posiadacza opcji sprzedaży	122

III Procesy niegaussowskie 127

5	Fraktale stochastyczne - charakterystyczne doświadczenia	129
5.1	Fraktale matematyczne a fraktale fizyczne	129
5.2	Fraktale przypadkowe	130
5.2.1	Ograniczone fraktale samopodobne	130
5.2.2	Graniczny paradoks - struktura prawie wszędzie pusta	133
5.2.3	Dolny wymiar samopodobieństwa	133
5.2.4	Gęstość struktury	134

5.2.5	Wymiar pudełkowy ograniczonych struktur fraktalnych	134
5.2.6	Nieograniczone fraktale samopodobne	136
5.2.7	Pudełkowy wymiar fraktalny	140
5.3	Fraktale statystyczne	140
5.3.1	Ograniczone fraktale statystyczne	140
5.3.2	Różne sposoby defektowania struktur	142
5.3.3	Zespolone wymiary fraktalne	143
5.3.4	Dyskretne a ciągłe prawa skalowania	143
5.4	Statystyczne struktury multifraktalne	143
5.4.1	Formalny związek multifraktali z termodynamiką statystyczną	145
6	Transport dyspersyjny - doświadczenia Sharfe'a, Gilla i Pfistera	149
6.1	Błądzenie w czasie ciągłym	150
6.1.1	Podstawowe wielkości	150
6.1.2	Funkcja rozkładu czasów oczekiwania w obecności dryfu . . .	152
6.1.3	Propagtor jednocząstkowy	154
6.1.4	Postać zamknięta propagatora	156
6.1.5	Uogólnione równanie mistrza	157
6.1.6	Pierwszy moment	158
6.1.7	Rola pierwszego oczekiwania oraz przelotu	159
6.1.8	Niejednorodne uogólnione równanie mistrza	160
6.2	Przypadkowe pułapowanie	160
6.2.1	Ciągła funkcja rozkładu czasów oczekiwania	161
6.2.2	Wielkości pokrewne	164
6.2.3	Równanie skalowania	165
6.2.4	Rozkład Lévy'ego a rozkład Poissona	167
6.2.5	Średni czas oczekiwania	168
6.2.6	Oczekiwanie Weierstrassa-Mandelbrota	169
6.2.7	Dyskretna funkcja rozkładu czasów oczekiwania	169
6.2.8	Czasowe równanie skalowania	171
6.2.9	Gra petersburska	173
6.3	Dalsze charakterystyczne doświadczenia	174
6.3.1	Anomalna dyfuzja wodoru w amorficznych metalach	174
6.3.2	Eksperyment kserograficzny	174
6.3.3	Rekombinacja w epitaksjalnym półprzewodniku	174
6.3.4	Starzenie się szkła	174
6.4	Błądzenia fraktalne	174
6.5	Przeloty Weierstrassa	174
6.5.1	Definicje i interpretacje	175
6.5.2	Czynnik strukturalny przelotów Weierstrassa	179
6.5.3	Przestrzenne równanie skalowania	180
6.5.4	Dyfuzja anomalna	182
6.5.5	Rzadkie, ekstremalne zdarzenia	184

6.5.6	Średnia po zespole statystycznym	186
6.5.7	Rozkład Pareto-Lévy'ego	187
6.6	Spacery Weierstrassa-Mandelbrota	190
6.7	Multifraktalne błędzenie w czasie ciągłym	190
6.8	Różne rozkłady potencjału w modelu dolinowym i ich wpływ na błędzenie przypadkowe	193
IV	Extreme Value Theory	203
6.9	Introduction and motivation	205
6.10	Basic elements of the biased Hierarchical Continuous-Time Random Flight	206
6.10.1	Scaling relation obeyed by the waiting-time distribution	211
6.10.2	Explicit asymptotic form of the waiting-time distribution	211
6.10.3	Asymptotic form of the propagator	212
6.10.4	Explicit asymptotic form of the first and second moments	213
6.11	Statistics of extremes	214
6.11.1	General derivation	214
6.11.2	The Gumbel distribution versus the Fréchet one	216
6.11.3	Pictorial analysis of rank ordering	219
6.11.4	Rank ordering of random variables. General approach	224
6.11.5	Concluding remarks	226
V	Współczesna teoria oceny ryzyka rynkowego	229
6.12	Tradycyjna analiza poziomu ryzyka	231
6.12.1	Twierdzenia graniczne na giełdzie	234
6.12.2	Uogólnione Centralne Twierdzenie Graniczne na NYSE	234
6.12.3	Stabilny, symetryczny rozkład Lévy'ego	235
6.13	Rozszerzona analiza Uogólnionego Centralnego Twierdzenia Granicznego na NYSE	236
6.14	Nowoczesne podejście do oceny ryzyka	237
6.14.1	Zasadnicze pytania	238
6.14.2	Charakterystyczne przykłady	239
6.14.3	Poziom ryzyka a zmienność	242
VI	Fraktalne równanie dyfuzji oraz fraktalne równanie Fokkera-Plancka (w przygotowaniu)	255
VII	Dyfuzja anomalna a dynamika chaotyczna (w przygotowaniu)	257
6.15	Potencjał typu "kartonu na jajka"	259

7	Dyfuzja anomalna w chaotycznej adwekcji	261
7.1	Doświadczenie Swinney'a i inn.	261
8	Channeling a ujemny efekt Halla	263
9	Bilard Sinai'a oraz bilard Cassiniego - demon Maxwella w akcji	265
10	Hierarchiczne wysepki na powierzchni Poincaré - złamanie ergodyczności	267
VIII Ewoluujące sieci (w przygotowaniu)		269
IX Dodatki		271
A	Pochodna fraktalna dowolnego stopnia - definicja Riemanna Liouville'a	273
A.1	Podstawowe własności pochodnej fraktalnej	274
B	Własności średniej po zespole	275
C	Asymptotyka funkcji rozkładu czasów oczekiwania	277
D	Ścisła funkcja rozkładu czasów oczekiwania	279
E	Nieporządek gaussowski oraz poissonowski	281
F	Ścisła funkcja rozkładu czasów oczekiwania	283
G	Użyteczne transformaty Laplace'a	287
H	Ścisły czynnik strukturalny dla błędzenia Weierstrassa	289
I	Sferyczne błędzenie Weierstrassa	291
J	Twierdzenie Abeliana i twierdzenie Tauberina	293

Dodatek A0: Wymiar Hausdorffa

Dodatek A01: Wymiar Hausdorffa a wymiar samopodobieństwa

Dodatek A02: Wymiar Hausdorffa a wymiar pudełkowy

Dodatek A2: Pułapki o skończonej głębokości

Dodatek C: Wykładnicza oraz potęgowa asymptotyka funkcji rozkładu

Część I

Wstęp

Rozdział 1

Motywacja

Niniejsza praca stanowi rozszerzoną wersję interdyscyplinarnego wykładu monograficznego (o zbliżonym tytule) prowadzonego przeze mnie na Wydziale Fizyki Uniwersytetu Warszawskiego. Jej zasadniczym celem jest ilościowa analiza wybranych, ważnych zagadnień z dziedziny rynków finansowych oraz gospodarek wolnorynkowych, prowadzona przez pryzmat modeli używanych do opisu zjawisk i procesów fizycznych. Jest to obiecujące podejście zwłaszcza, że bierzemy pod uwagę przede wszystkim modele dopuszczające występowanie zdarzeń ekstremalnych (rzadkich), które (jak się wydaje) odgrywają coraz większą rolę także na rynkach finansowych i w gospodarkach wolnorynkowych. Innymi słowy, zajmujemy się tutaj przede wszystkim takimi modelami, które pełnią dualną rolę: są stosowane zarówno w fizyce jak też do opisu zjawisk zachodzących na rynkach finansowych oraz w gospodarce makroskali. Prowadzi to do uściślenia oraz pogłębionej interpretacji zjawisk i procesów ekonomicznych oraz socjologicznych a w tym zwłaszcza zjawisk typu bąbli i krachów giełdowych (D. Sornette: "Why Stock Markets Crash. Critical Events in Complex Financial Systems", Princeton University Press, Princeton and Oxford 2002, [1]). Tego typu podejście do ekonomii i socjologii mieści się w ramach wschodzących, interdyscyplinarnych dziedzin wiedzy potocznie zwanych ekonofizyką a także socjofizyką.

Należy zaznaczyć, że w niniejszej pracy wykorzystujemy jako narzędzie matematyczne przede wszystkim niegaussowskie procesy stochastyczne, np. typu Lévy'ego, traktując procesy gaussowskie tylko jako niezbędny punkt odniesienia (gdyż są one niewystarczające do opisu otaczającej nas rzeczywistości). Tego typu podejście jest usprawiedliwione faktem, że procesy niegaussowskie mogą być nieergodyczne czyli np. mogą być rządzone właśnie przez zdarzenia rzadkie, stanowiące najprawdopodobniej podstawę zarówno wspomnianych bąbli i krachów giełdowych jak też będące podstawą spowolnionej, niedebye'owskiej relaksacji fotoprądów w materiałach amorficznych, leżąc także u podstaw nieergodycznego chłodzenia laserowego stanowiącego przecież niezbędny etap doświadczalny prowadzący do uzyskania kondensatu Bosego-Einsteina (W.D. Phillips: "Laserowe chłodzenie i pułapowanie atomów obojętnych", Postępy Fizyki, Tom 49 (1998) 310-335, [2]; F. Bardou, J.-P.

Bouchaud, A. Aspect, C. Cohen-Tannoudji: "Lévy Statistics and Laser Cooling. How Rare Events Bring Atoms to Rest", Cambridge Univ. Press, Cambridge 2002, [3]). Oczywiście, oznacza to konieczność zastąpienia dobrze znanego Centralnego Twierdzenia Granicznego przez tzw. Uogólnione Centralne Twierdzenie Graniczne Lévy'ego-Chincina dotyczące rozkładów stabilnych posiadających zarówno skończoną jak i nieskończoną wariancję.

Ponadto, wspomniana na wstępie interdyscyplinarność bierze m.in. na obserwacji, że procesy stochastyczne za pomocą których staramy się opisać otaczającą nas rzeczywistość fizyczną bądź też ekonomiczno-socjologiczną (np. dynamika stochastyczna: rozwoju populacji w obecności zewnętrznego źródła, rozprzestrzeniania się epidemii, imigracji ludności, opisująca ewolucję portfela inwestora giełdowego, itd, itp) mają często charakter multiplikatywno-addytywny tzn. zawierają zarówno sum multiplikatywny jak też sum addytywny (D. Sornette: "Linear stochastic dynamics with nonlinear fractal properties", *Physica A* (1998) 295-314). Za pomocą tego typu procesów, wprowadzając odpowiednią konkurencję obu rodzajów sumy, można odtworzyć dla asymptotycznych wartości zmiennych losowych zarówno rozkład Gaussa (R.N. Mantegna, H.E. Stanley: "Ekonofizyka. Wprowadzenie", Wydawnictwa Naukowe PWN, Warszawa 2001; [11]) jak też logarytmiczno-normalny (E.W. Montroll, M.F. Shlesinger: "On the wonderful world of random walks" w "Nonequilibrium Phenomena II. From Stochastics to Hydrodynamics", *Studies in Statistical Mechanics*, Vol. XI, eds. J.L. Lebowitz, E.W. Montroll, North-Holland, Amsterdam 1984; [12]) a zwłaszcza rozkład potęgowy (D. Sornette: "Critical Phenomena in Natural Sciences. Chaos, Fractals, Selforganization and Disorder: Concepts and Tools", Springer-Verlag, Berlin 2000; D. Sornette: "Multiplicative processes and power law", *Physical Review E* 57 (1998) 4811-4813; [15]) czyli rozkłady odgrywające zasadniczą rolę zarówno w naukach przyrodniczych jak też ekonomiczno-społecznych¹ (J.-P. Bouchaud, M. Potter: "Theory of Financial Risks. From Statistical Physics to Risk Management", Cambridge Univ. Press, Cambridge 2001, [16]).

Do pracy dodaliśmy tytułem uzupełnienia rozdziały poświęcone materiałom lepkosprężystym takim jak np. biopolimery, w których relaksacja deformacji zachodząca pod wpływem przyłożonego naprężenia jest opisana dynamiką fraktalną tzn. różnego rodzaju fraktalnymi równaniami relaksacji (Th. F. Nonnenmacher, Ralf Metzler: "Applications of Fractional Calculus Techniques to Problems in Biophysics" in "Applications of Fractional Calculus in Physics", ed. R. Hilfer, World Scientific, Singapore 2000). Jak się okazuje, rozwiązania takich równań oparte są na funkcjach H-Forta, które posiadają własności interesujące z punktu widzenia rynków finansowych. Na przykład, zanikają asymptotycznie zgodnie z prawem potęgowym natomiast dla krótkich czasów zachowują się jak rozciągnięty eksponent. Potwala to odtworzyć trendy (wznosący i opadający) tworzące lokalne maksima steregów czasowych dziennych indeksów giełdowych (M. Kocłowska, R. Kutner: "Dynamics

¹Oczywiście, w naszych rozważaniach nie pominiemy rozkładów typu rozciągniętego eksponenta zarówno zmiennej losowej jak też jej logarytmu, które są także używane m.in. do opisu relaksacji w układach szklistych.

of the Warsaw Stock Exchange index as analysed by the Mittag-Leffler function",
DPG - Fruejahristagung des Arbeitskreises Festkörperphysik in conjunction with EPS
- 21st General Conference of the Matter Division, Dresden, Germany 2006 [15]).

Rozdział 2

Zasadnicze pytania

2.1 Rys historyczny: rozkłady potęgowe

Historia rozkładu potęgowego a w tym Pareto-Lévy'ego jest interesująca i warto ją tutaj, jak sądzę, przytoczyć. Mianowicie, zaskoczenie może budzić fakt, że powszechnie uważa się iż rozkład potęgowy a dokładniej rzecz biorąc tego typu zależność została odkryta w świecie realnym dopiero w roku 1897 przez włoskiego ekonomistę i socjologa Vinifredo Pareto podczas gdy relaksacja potęgowa (czyli analogiczna zależność tyle tylko, że od czasu) została już zaobserwowana w roku 1729 przez fizyka i inżyniera B.G. Buelfingera, o czym jest mowa w rozdz.2.3. Co więcej, na początku drugiej połowy XIX w. francuski matematyk i fizyk baron Augustyn L. Cauchy wprowadził i analizował rozkład postaci,

$$p(x) \sim \frac{1}{1+x^2}, \quad (2.1)$$

zwany dzisiaj właśnie rozkładem Cauchy'ego lub lorentzianem od nazwiska holenderskiego fizyka Hendrika A. Lorentza, który pierwszy zastosował ten rozkład w spektroskopii do opisu kształtów linii widmowych i to pomimo jego nieskończonej wariancji. Rozkład odkryty przez Pareto jest niezwykle ważny chociażby ze względu na jego coraz liczniejsze zastosowania w różnych gałęziach nauki - od matematyczno-przyrodniczych po ekonomiczno-społeczne.

Pareto badał empirycznie wzrost zamożności jednostek w różnych społeczeństwach w okresach "pokoju społecznego" (tzn. w okresie braku wojen, rewolucji, krachów, etc.). Zauważył, że liczba jednostek $y(x)$, których dochód jest nie mniejszy od x daje się opisać, dla względnie dużych wartości dochodu, za pomocą rozkładu potęgowego postaci,

$$y(x) \sim \frac{1}{x^\alpha}, \quad x > 0, \quad (2.2)$$

gdzie α jest jedynym (oprócz przedwykładniczego czynnika normalizującego) parametrem definiującym rozkład. Pareto wyznaczył empirycznie ten wykładnik - wyniósł on z dobrym przybliżeniem 1.5 dla tak różnych społeczeństw jak mieszkańcy

Anglii, Irlandii, Niemiec, Włoch a nawet Peru. Wzór (2.2) można wyrazić za pomocą funkcji gęstości prawdopodobieństwa $f(x) \sim 1/x^{1+\alpha}$

$$y(x) \sim \int_x^{x_{\max}} dx' f(x') \sim \int_x^{x_{\max}} dx' \frac{1}{x'^{1+\alpha}}, \quad (2.3)$$

gdzie $1 \ll x \ll x_{\max}$ (tutaj, x_{\max} jest maksymalnym możliwym do osiągnięcia dochodem jednostki); gęstość $f(x)$ jest miarą względnej liczby jednostek posiadających dochód równy dokładnie x . Zatem V. Pareto zaobserwował rozkład asymptotycznie potęgowy dla dodatnich x ,

$$f(x) \sim \frac{1}{x^{1+\alpha}}. \quad (2.4)$$

Rozszerzenie tego rozkładu na ujemne x -y oraz jego systematyczna analiza została opublikowana dopiero w roku 1936 przez matematyka francuskiego, Paula Lévy'ego oraz niezależnie przez angielskiego geofizyka L. Richardsona, który zastosował ten rozkład do opisu ruchu obiektów (tzw. pasywnych skalarów) w atmosferze w obecności turbulencji (A. Tsinober: "Variability of anomalous transport exponents versus different physical situations in geophysical and laboratory turbulence", w "Lévy Flights and Related Topics in Physics", Lecture Notes in Physics Vol.450, Springer-Verlag, Berlin 1995, pp.3-33). Należy zaznaczyć, że rozkład Pareto-Lévy'ego jest weryfikowany po dziś dzień. Na przykład, badania opublikowane w 2001 roku nad społeczeństwem Wielkiej Brytanii (A. Dragulescu, V.M. Yakovenko: "Exponential and power-law probability distributions of wealth and income in the United Kingdom and the United States", Physica A 299 (2001) 213-221) potwierdzają w całej rozciągłości obserwacje V. Pareto przy czym tutaj $\alpha = 1.90$ (gdzie błąd jest na drugim miejscu po przecinku) dla dochodu netto powyżej 100 k£/year. Byłoby wielce interesującym przeprowadzenie analogicznych badań nad społeczeństwami wschodzących rynków i gospodarek kapitalistycznych.

Oczywiście, oprócz badań nad zamożnością jednostek prowadzone były i są badania nad dochodami wielu państw. Badania te przeprowadził jako pierwszy, na podstawie zbiorczych danych uzyskanych z urzędów skarbowych, włoski ekonomista i socjolog C. Gini w roku 1922; stwierdził on, że dochody te podlegają (z dobrym przybliżeniem) prawom potęgowym o znacząco różniących się wykładnikach potęg.

Stosunkowo interesujące były badania przeprowadzone pod koniec ubiegłego stulecia nad gospodarką japońską (K. Okuyama, M. Takayasu, H. Takayasu: "Zipf's law in income distribution of companies", Physica A 269 (1999) 125-131), które wykazały, że dochody przedsiębiorstw japońskich podlegają prawu potęgowemu Zipfa¹ (w zakresie blisko czterech dekad od dochodu ponad 10 milionów jenów do blisko 10⁸ milionów jenów - patrz rozdz.3.14.3). Co więcej, dochody przedsiębiorstw w ramach poszczególnych gałęzi gospodarki był tym lepiej opisywane prawem potęgowym im

¹Prawo potęgowe Zipfa jest asymptotycznie równoważne rozkładowi Cauchy'ego-Lorentza dla dodatnich x czyli zbudowane na nim skumulowane prawdopodobieństwo posiada długozasięgowy "ogon" zanikający z wykładnikiem 1.

bardziej dana gałąź uczestniczyła w grze wolnorynkowej czyli im mniej było w danej branży interwencjonizmu państwowego (przy czym wykładnik potęgi α zawiera się w przedziale $0.72 \leq \alpha \leq 1.13$ a jego konkretna wartość zmienia się od gałęzi do gałęzi). Na przykład, branża budowlana podlegająca niemal w pełni wolnej konkurencji daje się opisać prawem potęgowym o wykładniku $\alpha = 1.13$ w zakresie trzech dekad podczas gdy energetyka, podlegająca istotnej ochronie państwa, zachowuje się, paradoksalnie, w sposób trudny do opisania.

2.1.1 Skalowanie i log-periodyczność a bąble i krachy giełdowe

Zauważmy, że funkcja potęgowa $y(x)$ dana za pomocą wzoru Pareto (2.2) spełnia następujące równanie skalowania ciągłego²

$$y(\lambda x) = f(|\lambda|)y(x), \quad (2.5)$$

gdzie czynnik skalujący funkcję $y(x)$ jest zależny od λ i tutaj dany wzorem

$$f(\lambda) = |\lambda|^{-\nu}. \quad (2.6)$$

Żadajmy teraz odwrotne pytanie, a mianowicie: jaka jest najogólniejsza postać rozwiązania singularnego równania skalowania (2.5)? Łatwo sprawdzić, że funkcja postaci

$$y(x) = |x|^\alpha F\left(\frac{\ln|x|}{\ln|\lambda|}\right), \quad (2.7)$$

jest rozwiązaniem tego równania, przy czym wykładnik potęgi przybiera postać

$$\alpha = \frac{\ln f(|\lambda|)}{\ln |\lambda|}. \quad (2.8)$$

Podstawiając konkretną postać funkcji $f(|\lambda|)$ (tutaj daną wyrażeniem (2.6)) otrzymujemy, że $\alpha = -\nu$. Jak widać, $F(u)$ jest wolnozmienną, priodyczną funkcją u (o okresie równym 1) co pozwala na jej następujące rozwinięcie w szereg Fouriera. (Fakt, że (2.7) jest najogólniejszą postacią rozwiązania wykazemy w dalszej części.)

$$F\left(\frac{\ln|x|}{\ln|\lambda|}\right) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n \exp\left(2\pi i n \cdot \frac{\ln|x|}{\ln|\lambda|}\right) = c_0 \left[1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{c_n}{c_0} \cos\left(\frac{2\pi n}{\ln|\lambda|} \cdot \ln|x|\right)\right], \quad (2.9)$$

przy czym współczynniki rozwinięcia c_n są tutaj dane w postaci

$$c_n = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 du F(u) \exp(-2\pi i n u) = \int_0^1 du F(u) \cos(2\pi n u), \quad n = 1, 2, \dots, \quad (2.10)$$

²Dokładniej rzecz biorąc, równanie skalowania (2.5) dotyczy rozkładu Pareto-Lévy'ego czyli rozkładu $y(x) \sim \frac{1}{x^{1+\nu}}$, gdzie zmienna losowa x może przyjmować zarówno wartości ujemne jak i dodatnie a nie tylko dodatnie jak to ma miejsce dla rozkładu Pareto.

gdzie dla uproszczenia założyliśmy, że $F(u)$ jest parzystą funkcją u a stąd każdy współczynnik rozwinięcia fourierowskiego jest parzystą funkcją n (tzn. $c_n = c_{-n}$) co zostało wykorzystane w drugiej równości w (2.9). Ponadto, ograniczamy się tutaj do rzeczywistej funkcji F co oznacza, że współczynniki c_n też są rzeczywiste. Należy podkreślić, że parametr λ skalujący zmienną losową nie jest dowolny tylko dla dyskretnej relacji skalowania o czym będzie także mowa w dalszej części (D. Sornette: "Discrete scaling invariance and complex dimensions", Physics Reports 297 (1998) 239-270, [4]).

Stosując grupę renormalizacji wykazemy, że log-periodyczność jest obecna nie tylko w rozkładach opisujących statystyki zmiennych losowych, np. indeksów giełdowych, ale tkwi już w samych równaniach stochastycznych opisujących dynamikę tych zmiennych (D. Sornette, A. Johansen, J.-P. Bouchaud: "Stock Market Crashes, Precursors and Replicas", J. Phys. I France 6 (1996) 167-175,[5]; D. Sornette and A. Johansen: "Large financial crashes", Physica A 245 (1997) 411-422, [6]).

Na rys.2.1 przedstawiono notowania indeksu Dow Jones na Giełdzie Nowojorskiej (NYSE) przed październikiem 1929 roku czyli przed wielkim krachem na Wall Street - największym kryzysem giełdowym jaki dotknął świat, a w tym także Stany Zjednoczone Ameryki, w XX wieku. O głębokości tego kryzysu świadczy fakt, że w feralnym tygodniu: (otwarcie) środa 23 październik - (zamknięcie) wtorek 29 październik, indeks NYSE stracił ok. 30% swojej wartości³. Ponadto, dla porównania przedstawiono najlepsze dopasowanie rozwiązania singularnego (2.7) uwzględniające jedynie liniową log-periodyczność (tzn. uwzględniające w drugiej równości w (2.9), w występującym tam szeregu tylko pierwszy wyraz $n = 1$), przy czym jako zmienną niezależną przyjęto tutaj $x = a \cdot (t_c - t)$ gdzie $t(< t_c)$ jest czasem (liczonym w dniach) natomiast t_c jest dniem krachu (a jest tutaj, po prostu, stałą proporcjonalności). Innymi słowy, wzięto tutaj pod uwagę następującą, uproszczoną formułę teoretyczną dla czasu poprzedzającego dzień krachu t_c (czyli dla $t < t_c$)⁴

$$y(t_c - t) \approx A + B \cdot (t_c - t)^a [1 + C \cos(\omega \ln(t_c - t) - \phi)], \quad (2.11)$$

gdzie zastosowano wygodniejsze oznaczenia $B = c_0 \cdot a^a$, $C = 2c_1/c_0$, $\omega = 2\pi/\ln|\lambda|$, $\phi = -\omega \ln(a)$.

Jak widać, krach ten nastąpił tuż przed trzecim lokalnym maksimum tej krzywej - nie jest to jednak bąbel giełdowy w przeciwieństwie do sytuacji przedstawionej na rys.2.2, gdzie jest on wyraźnie widoczny w przebiegu indeksu giełdy w Kuala Lumpur (Malezja) w postaci ostrego, lokalnego maksimum bezpośrednio poprzedzającego krach o zupełnie innym kształcie niż wspomniane wcześniej. Właśnie tego typu kształt będzie dla nas w dalszym ciągu niezbędną sygnaturą bąbla giełdowego; ogólna definicja tzw. racjonalnego bąbla giełdowego pochodzi od Blacharda i

³Należy zaznaczyć, że podobny kryzys zdarzył się np. w październiku 1987 roku w tygodniu od 14 (otwarcie) do 19 października (zamknięcie); na szczęście jego skutki nie były już tak dramatyczne jak w roku 1929.

⁴Zauważmy, że data krachu uzyskana z dopasowania funkcji (2.11) do danych empirycznych może być nieznacznie większa od rzeczywistej daty gdyż dalszemu spadkowi indeksów może po prostu przeciwdziałać wstrzymanie obrotów na giełdzie.

Watsona (O. J. Blanchard: "Speculative bubbles, crashes and rational expectations", *Economics Letters* 3 (1979) 387-389, [9]; O. J. Blanchard, M.W. Watson: "Bubbles, rational expectations and speculative markets" w "Crisis in Economic and Financial Structure: Bubbles, Bursts, and Shocks", ed. P. Wachtel, Lexington Books, Lexington, MA, [10]) i mówi tylko tyle, że jest to wzrost notowań akcji zachodzący w relatywnie krótkim okresie czasu (w stosunku do całego rozpatrywanego przedziału czasu), który znacznie odbiega od fundamentalnej wyceny akcji ale nadal mieści się w oszacowaniach wynikających z istniejących modeli, w przeciwieństwie do bąbli czysto spekulacyjnych.

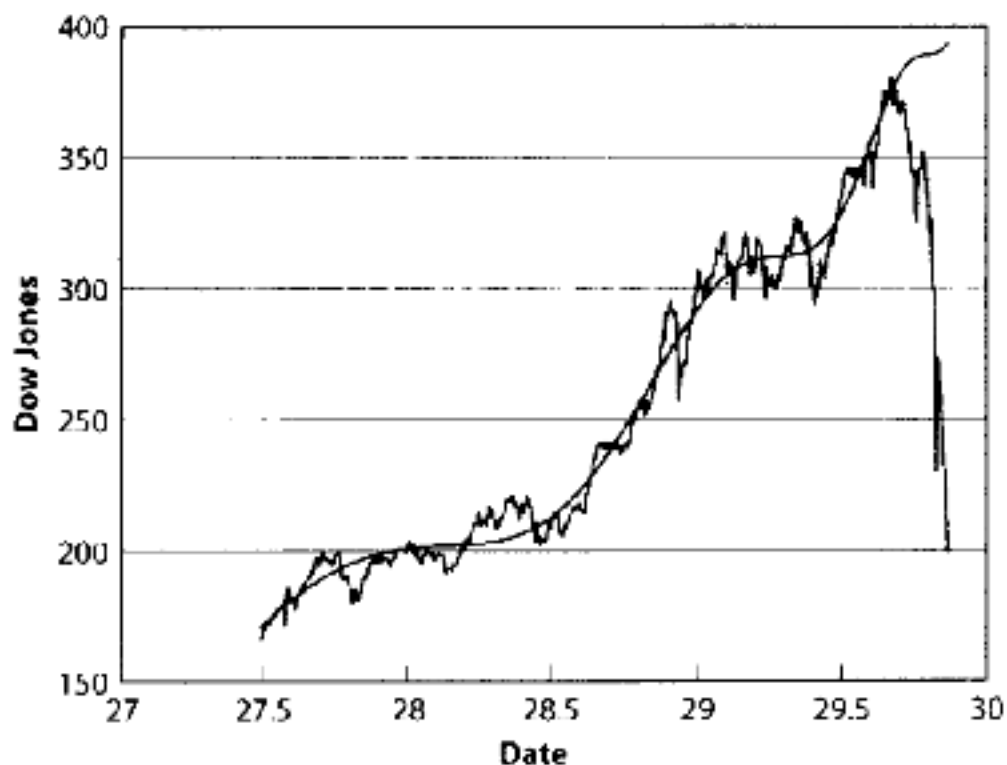
Ze względu na olbrzymie znaczenie wyrażenia (2.11) w analizie technicznej notowań giełdowych, przedstawiamy na poniższych dwóch rysunkach zarówno zależność y od czasu jak też jego składowych: potęgowej i log-periodycznej.

Poniżej zamieściliśmy trzy dodatkowe wykresy prezentujące rolę drugiej harmonicznej log-periodycznej poprawki dla pierwszego "bąbla" na WIG-u.

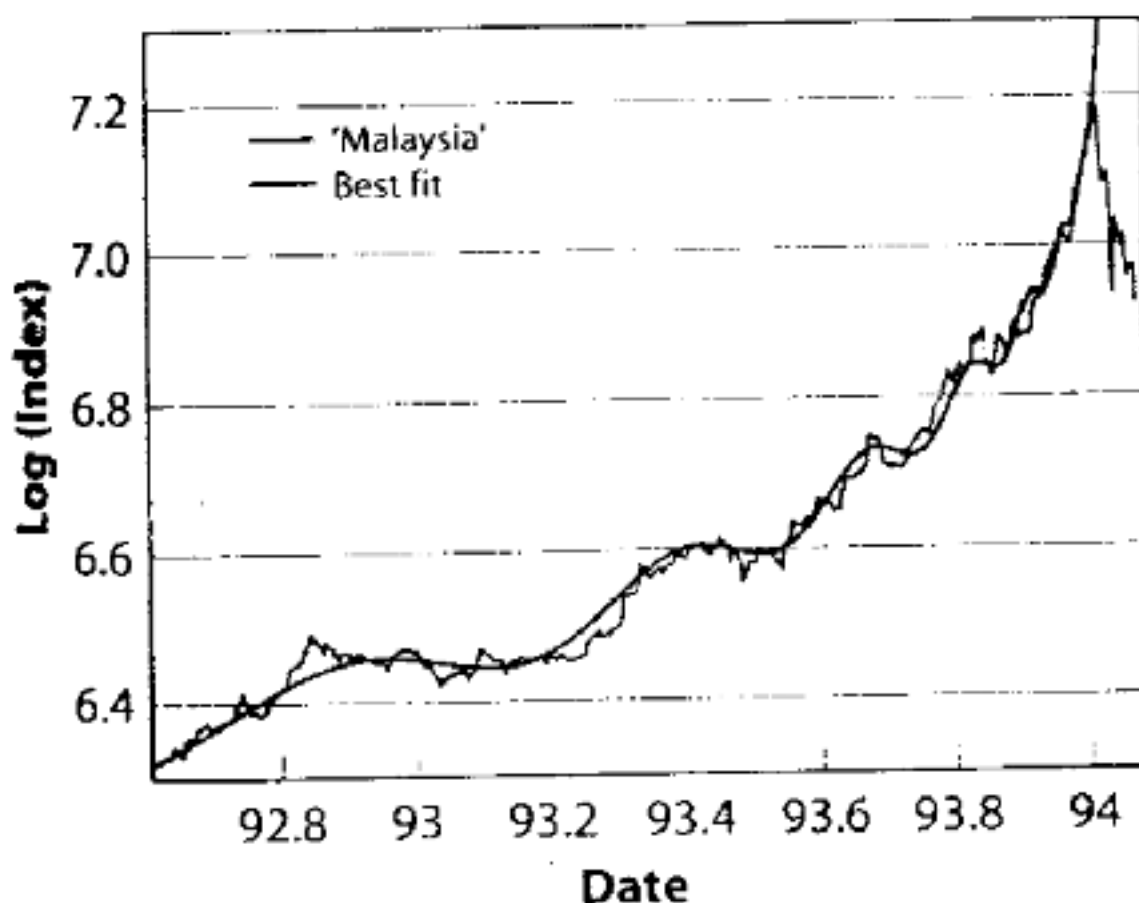
2.2 Kluczowe pytanie matematyczne

Lévy interesował się przede wszystkim klasą rozkładów stabilnych tzn. takich, które nie zmieniają swojego kształtu po dokonaniu transformacji od pojedynczej do sumarycznej zmiennej losowej; mogą one ulegać np. odpowiedniemu spłaszczeniu i rozciągnięciu. Do tego typu klasy należą m.in. rozkłady Gaussa i Cauchy'ego (Lorentza) (R. Nowak: "Statystyka dla fizyków", Wydawnictwa Naukowe PWN, Warszawa 2002). Wymienione dwa rozkłady różni jedna zasadnicza cecha: rozkład Gaussa posiada skończony drugi moment natomiast dla rozkładu Cauchy'ego jest on nieskończony.

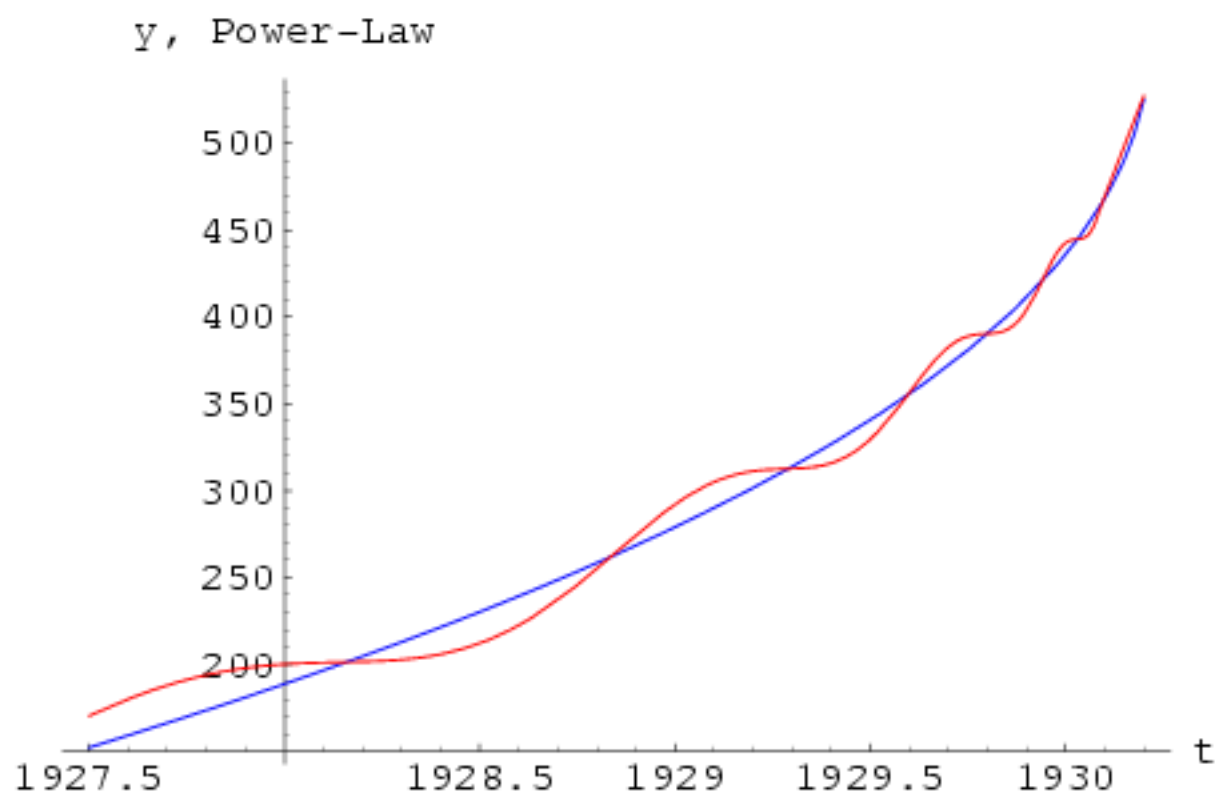
W związku z tym, że rozkłady posiadające skończony drugi moment nie muszą być stabilne, Lévy postawił kluczowe pytanie o charakterze czysto matematycznym, mianowicie: jaka jest najogólniejsza definicja pełnej klasy rozkładów stabilnych? Odpowiedź na to pytanie została sformułowana przez Lévy'ego a nieco później doprecyzowana przez Chincina w postaci tzw. Uogólnionego Centralnego Twierdzenia Granicznego (UCTG; W. Paul, J. Baschnagel: "Stochastic Processes. From Physics to Finance", Springer-Verlag, Berlin 1999; R.N. Mantegna, H.E. Stanley: "Ekonomia fizyka. Wprowadzenie, Wydawnictwa Naukowe PWN, Warszawa 2001; J.-P. Bouchaud, M. Potter: "Theory of Financial Risks. From Statistical Physics to Risk Management", Cambridge Univ. Press, Cambridge 2001; J.-P. Bouchaud, A. Georges: "Anomalous diffusion in disordered media: statistical mechanics, models and physical applications", *Physics Reports* 195 (1990) 127-293) zwanego także twierdzeniem granicznym Lévy'ego-Chincina. Twierdzenie to podaje *explicite* najogólniejszą postać rozkładu stabilnego zwanego już dzisiaj rozkładem Pareto-Lévy'ego - omówienie UCTG, a w tym tego rozkładu oraz jego różnych zastosowań w fizyce i na rynkach finansowych, jest jednym z zasadniczych celów niniejszej książki.



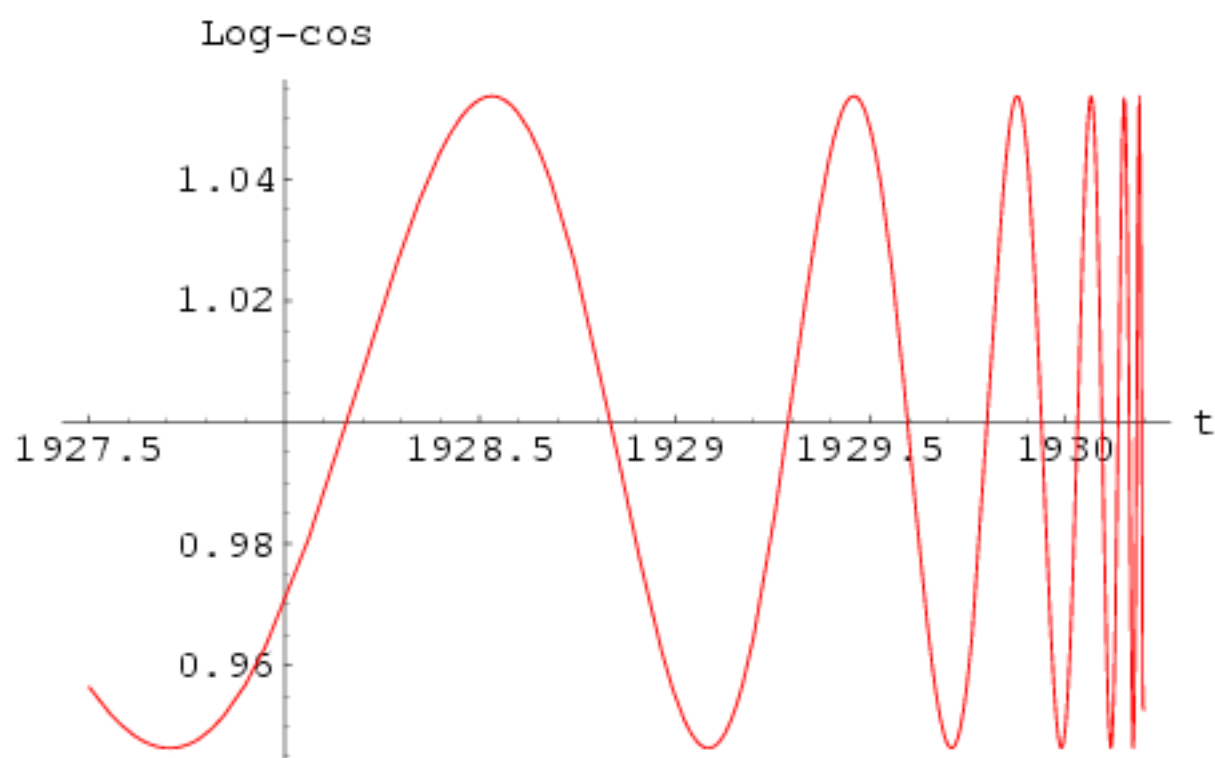
Rysunek 2.1: Notowania indeksu Dow Jones na Giełdzie Nowojorskiej (NYSE) przed październikiem 1929 roku czyli przed wielkim krachem na Wall Street - największym kryzysem giełdowym jaki dotknął świat, a w tym także Stany Zjednoczone Ameryki, w XX wieku. Linia ciągłą oznaczono najlepsze dopasowanie rozwiązania singularnego (2.7) uwzględniające jedynie liniową log-periodyczność (tzn. uwzględniające w drugiej równości w (2.9) w występującym tam szeregu tylko wyraz $n = 1$). Optymalne wartości parametrów to: $A = 571$, $B = -267$, $C = -0.0536$, $\alpha = 0.45$, $t_c = 1930.22$, $\omega = 7.9$ oraz $\phi = 1.0$. Jak widać, krach nastąpił tuż przed trzecim lokalnym maksimum tej krzywej. (Rysunek zaczerpnięto z pracy A. Johansen, D. Sornette: "Critical Crashes", Risk 12 (1990) 91-94, [7]).



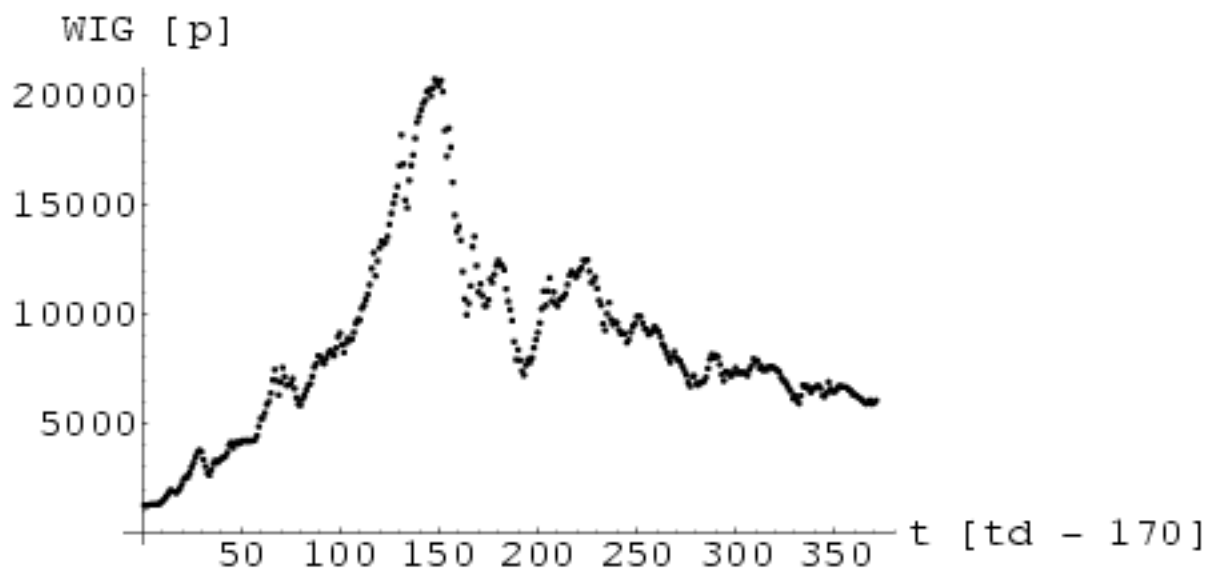
Rysunek 2.2: Przebieg indeksu giełdy w Kuala Lumpur (Malezja) przed jej krachem w styczniu 1994 roku - największym kryzysem giełdowym jaki dotknął Azję w XX wieku. Linia ciągłą oznaczono najlepsze dopasowanie rozwiązania singularnego (2.7) uwzględniające jedynie liniową log-periodyczność (tzn. uwzględniające w drugiej równości w (2.9) w występującym tam szeregu tylko wyraz $n = 1$). Najważniejsze parametry tego dopasowania to: $\alpha = 0.24$, $t_c = 1994.02$ oraz $\omega = 10.9$. Jak widać, krach nastąpił tuż po ostrym lokalnym maksimum tej krzywej czyli był poprzedzony przez tzw. bąbel giełdowy. (Rysunek zaczerpnięto z pracy A. Johansen, D. Sornette: "Bubbles and anti-bubbles in Latin-American, Asian and Western stock markets: An empirical study", International Journal of Theoretical and Applied Finance 4 (2001) 853-920, [8]).



Rysunek 2.3: Zależność funkcji $y(t_c - t)$ danej wzorem (2.11) od czasu t liczonego w dniach (oscylująca, czerwona linia ciągła) oraz jej składowej potęgowej danej wzorem $y_{PL}(t_c - t) = A + B \cdot (t_c - t)^\alpha$, (niebieska linia ciągła); obie linie poprowadzono dla wartości parametrów otrzymanych z dopasowania do danych empirycznych przedstawionych na rys.2.1.



Rysunek 2.4: Zależność od czasu (liczonego w dniach) log-periodycznej składowej funkcji $y(t_c - t)$ danej wzorem $y_{LP} = 1 + C \cos(\omega \ln(t_c - t) - \phi)$ dla parametrów otrzymanych z dopasowania tej funkcji do danych empirycznych przedstawionych na rys.2.1.



Rysunek 2.5: Pierwszy "bąbel" na WIG-u (czas jest liczony w dniach transakcyjnych (td) a index WIG w punktach (p)).

2.2.1 Niezbędne wyjaśnienia

Na rys.2.8 przedstawiliśmy orientacyjnie symetryczny rozkład Pareto-Lévy'ego czyli najogólniejszą postać (symetrycznego) rozkładu stabilnego

$$P(x) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \exp(-\gamma |k|^\alpha) \cos(kx) dk, \quad 0 < \alpha \leq 2, \quad (2.12)$$

dla czterech typowych wartości indeksu Pareto-Lévy'ego; zauważmy, że gęstość prawdopodobieństwa powrotu do początku (zgodnie z (2.12)) wynosi

$$P(x=0) = \frac{1}{\pi \gamma^{1/\alpha}} \Gamma_{\text{Euler}}(1 + \frac{1}{\alpha}) \quad (2.13)$$

i maleje ze wzrostem indeksu α jak to pokazano rysunku.

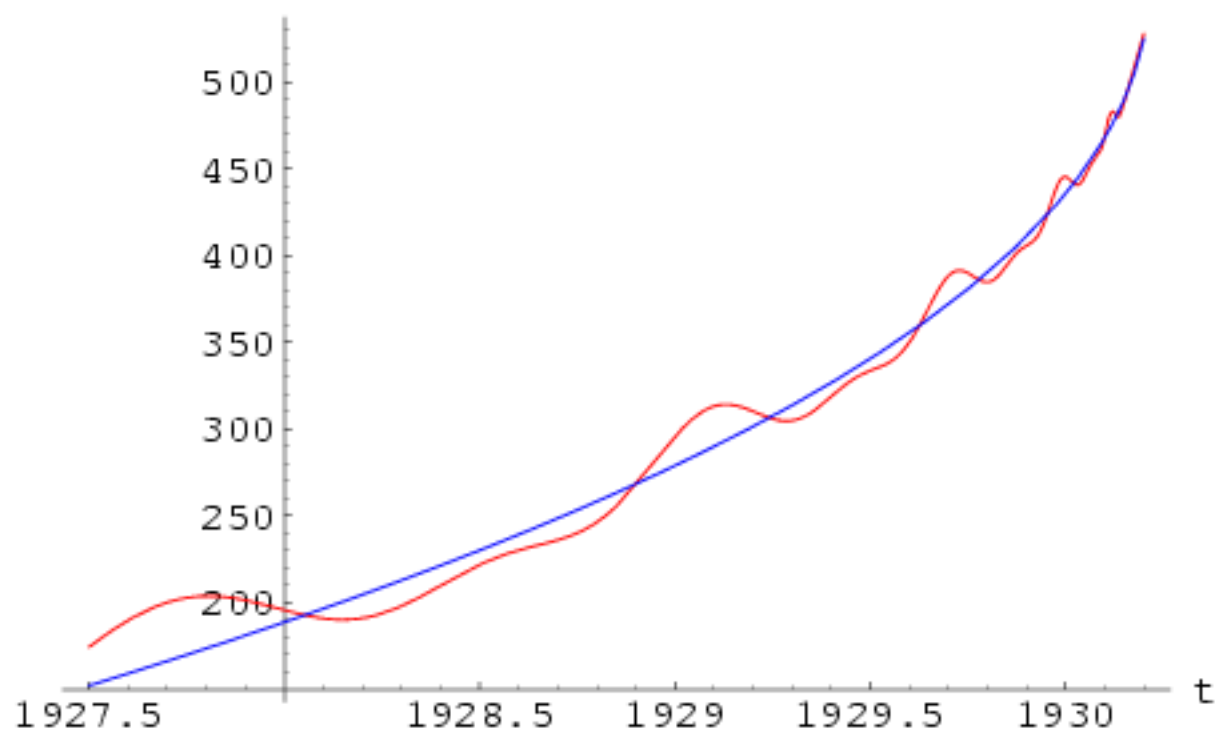
Korzystając z rozwinięcia w szeregi funkcji eksponens, następnie zamieniając odpowiednio zmienną bieżącą w wyrażeniu (2.12) i całkując wyraz po wyrazie z wykorzystaniem definicji funkcji gamma Eulera (czyli całki Eulera drugiego rodzaju) można rozkład Pareto-Lévy'ego wyrazić dla $|x| > 0$ w postaci następującego, wielo- przydatnego szeregu

$$P(x) = -\frac{1}{\pi} \sum_{j=1}^{\infty} \frac{(-1)^j}{j!} \gamma^j \Gamma_{\text{Euler}}(1 + \frac{1}{\alpha}) \sin(\frac{j\pi\alpha}{2}) \frac{1}{|x|^{1+j\alpha}} \quad (2.14)$$

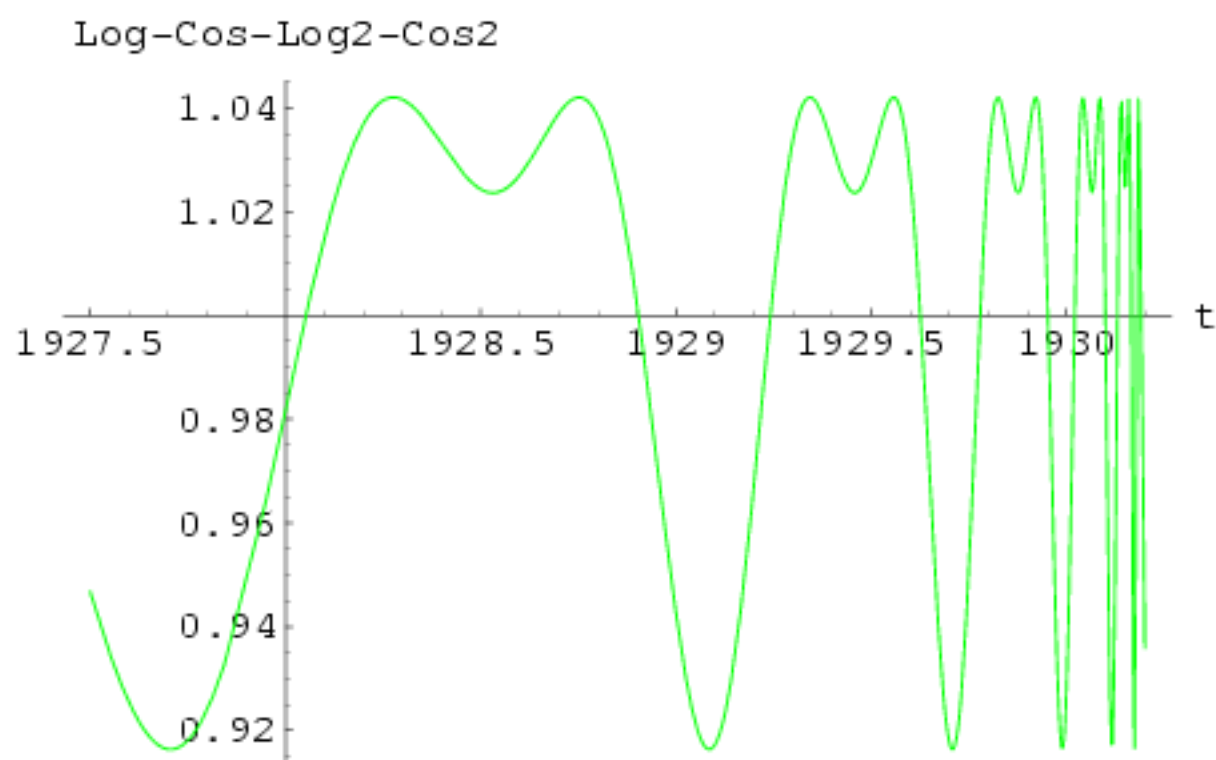
z którego wynika, że dla $|x| \rightarrow \infty$ dominować będzie pierwszy wyraz tego szeregu

$$P(x \rightarrow \infty) \sim \frac{1}{|x|^{1+\alpha}} \quad (2.15)$$

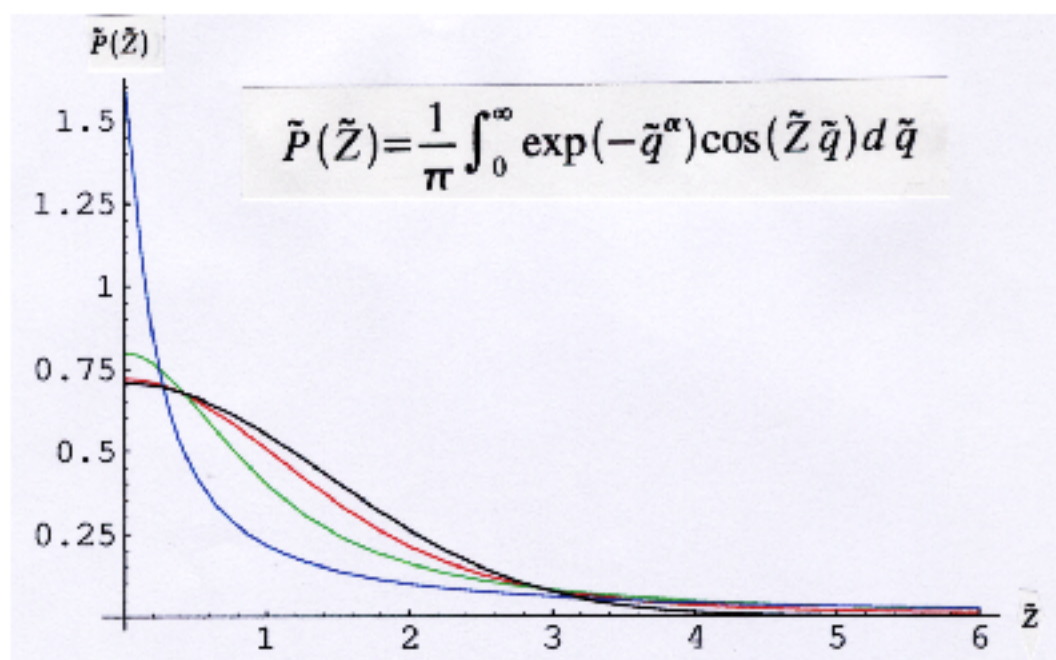
P-Log-Cos-Log2-Cos2



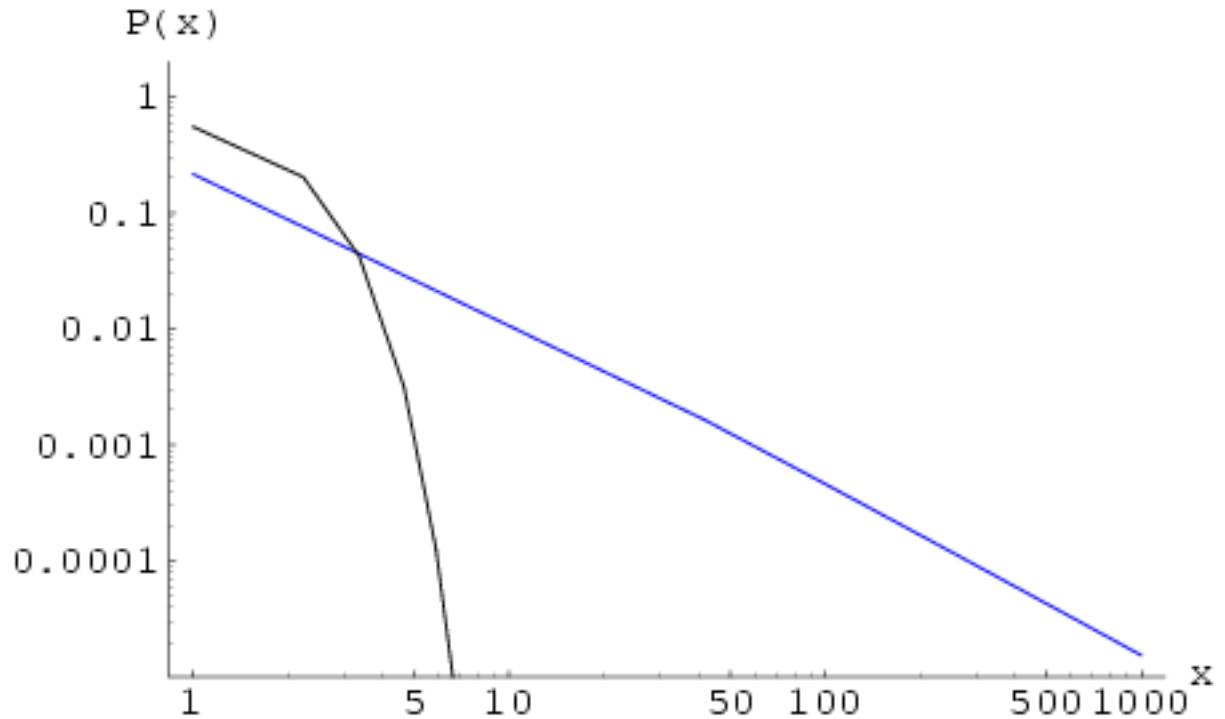
Rysunek 2.6: Zależność funkcji $y(t_c - t) \approx A + B \cdot (t_c - t)^\alpha [1 + C \cos(\omega \ln(t_c - t) - \phi) + C' \cos(2\omega \ln(t_c - t) - 2\phi)]$ od czasu t (liczonego w dniach) uwzględniającej drugą harmoniczną log-periodyczną poprawkę (oscylująca, czerwona linia ciągła) oraz jej składowej potęgowej danej wzorem $y_{PL}(t_c - t) = A + B \cdot (t_c - t)^\alpha$, (niebieska linia ciągła); obie linie poprowadzono dla wartości parametrów otrzymanych z dopasowania do danych empirycznych przedstawionych na rys.2.1 przy czym swobodny parametr wazący tą poprawkę jest tutaj ujemny i wynosi przykładowo $C' = 0.03$.



Rysunek 2.7: Zależność składowych log-periodycznych (zerowej, pierwszej i drugiej harmonicznej traktowanych sumarycznie) dla tego samego przypadku, którego dotyczy rys.2.6.



Rysunek 2.8: Rozkład Pareto-Lévy'ego dla wartości parametru skalującego $\gamma = 1$ oraz czterech typowych wartości indeksu Pareto-Lévy'ego: (1) linia czarna dotyczy indeksu $\alpha = 2$ czyli opisuje rozkład Gaussa centrowany w zerze o dyspersji $\sigma = \sqrt{2}$, (2) linia czerwona opisuje rozkład Pareto-Lévy'ego o indeksie $\alpha = 1.5$, natomiast (3) linia zielona o indeksie $\alpha = 1$ czyli rozkład Cauchy'ego-Lorentza, podczas gdy (4) linia niebieska rozkład o indeksie $\alpha = 0.5$. Widać istotną różnicę pomiędzy rozkładami o indeksie $\alpha \geq 1$ a tymi o indeksie $\alpha < 1$.



Rysunek 2.9: Rozkład Pareto-Lévy'ego w skali $\log - \log$ dla wartości parametru skalującego $\gamma = 1$ oraz dwóch skrajnych (spośród czterech typowych) wartości indeksu Pareto-Lévy'ego przedstawionych na rys.2.8: (1) linia czarna dotyczy indeksu $\alpha = 2$ czyli opisuje rozkład Gaussa centrowany w zerze o dyspersji $\sigma = \sqrt{2}$, a (2) linia niebieska rozkład o indeksie $\alpha = 0.5$.

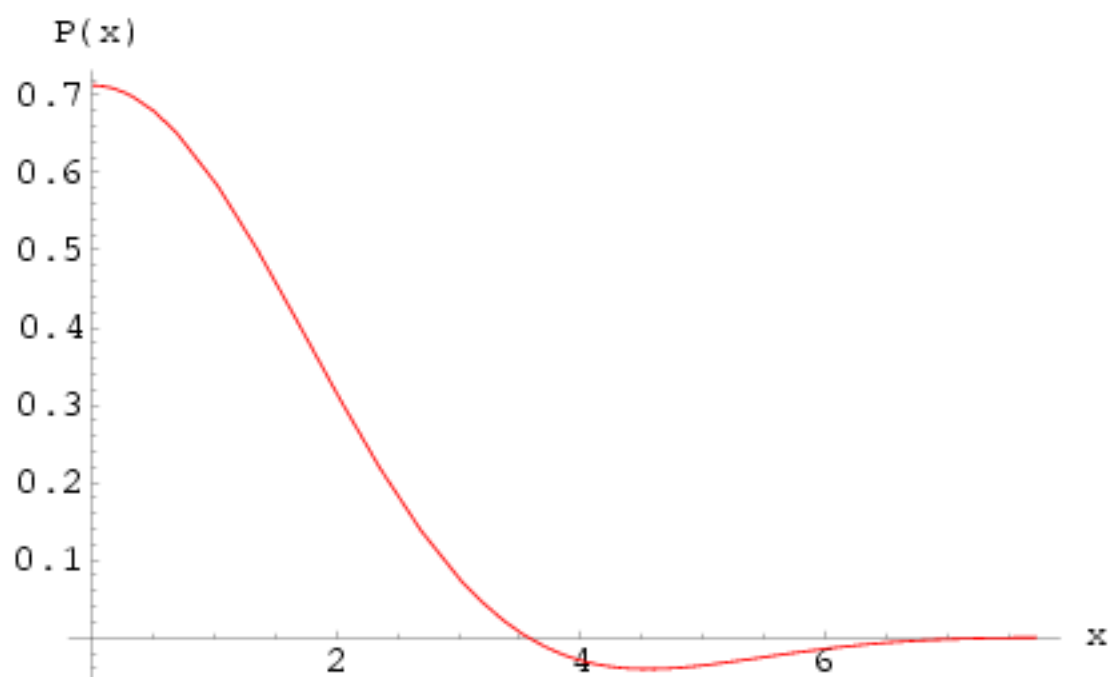
co dobrze widać w skali $\log - \log$ na rys.2.9 (porównaj (2.4)).

Na pierwszy rzut oka może budzić zdziwienie istnienie górnego ograniczenia na indeks rozkładu Pareto-Lévy'ego we wzorze (2.12) - rys.2.10 wyjaśnia ten problem. Chodzi o to, że gdy $\alpha > 2$ wówczas funkcja $P(x)$ dana wzorem (2.12) staje się ujemna dla niektórych wartości zmiennej niezależnej x co pierwszy zauważył w roku 1919 matematyk F. Bernstein.

Na koniec tego paragrafu należy zaznaczyć, że jak dotychczas znane są tylko trzy zamknięte postacie symetrycznego rozkładu Pareto-Lévy'ego: oprócz rozkładów Gaussa i Cauchy'ego o których już mówiliśmy, jest jeszcze rozkład Zolotariewa czyli rozkład Pareto-Lévy'ego o indeksie $\alpha = 2/3$, który wyraża się za pomocą funkcji Whittakera $W_{1/2,1/6}$

$$P(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{|x|} W_{1/2,1/6}\left(\frac{4}{27} \frac{\gamma^{2/3}}{x^2}\right) \exp\left(-\frac{2}{27} \frac{\gamma^3}{x^2}\right); \quad (2.16)$$

jak widać rozkład Zolotariewa wyraża się za pomocą funkcji nieelementarnej (w przeciwieństwie do dwóch pozostałych).



Rysunek 2.10: Zależność funkcji $P(x)$ danej wzorem (2.12) od x dla parametru $\gamma = 1$ oraz indeksu $\alpha = 3$ - jest to zależność typowa dla sytuacji gdy indeks α jest większy od 2. Jak widać, funkcja $P(x)$ przybiera także wartości ujemne co ją dyskwalifikuje jako funkcję rozkładu prawdopodobieństwa dla $\alpha > 2$.

Tabela 2.1: Tabela wygranych

Kolejność	Wygrana	Prawdopodobieństwo	Wartość oczekiwana
1	1	1/2	$1 \cdot 1/2 = 1/2$
2	2	1/4	$2 \cdot 1/4 = 1/2$
3	4	1/8	$4 \cdot 1/8 = 1/2$
...
n	2^{n-1}	$1/2^n$	$2^{n-1} \cdot 1/2^n = 1/2$
...

2.2.2 Paradoks Petersburski a brak skali fizycznej

Rozkład Pareto-Lévyego posiada zaskakującą własność, która przez dziesięciolecia powstrzymywała fizyków przed jego stosowaniem - chodzi o rozbieżność drugiego momentu czyli o nieskończoną dyspersję tego rozkładu. Zauważmy, że ma miejsce następujący wzór na moment rzędu (stopnia) m zmiennej losowej x

$$\langle x^m \rangle = (-i)^m \frac{d^m}{dk^m} \tilde{P}(k) \big|_{k=0}, \quad (2.17)$$

gdzie $\tilde{P}(k)$ jest transformatą Fouriera, zwaną także funkcją charakterystyczną rozkładu $P(x)$ (wzór (2.17) wyprowadziliśmy w rozdz. ... dla ogólniejszego przypadku momentów ułamkowych, korzystając z definicji pochodnej ułamkowej). Jak widać, funkcja charakterystyczna rozkładu Pareto-Lévy'ego (2.12) jest dana wyrażeniem

$$\tilde{P}(k) = \exp(-\gamma |k|^\alpha), \quad (2.18)$$

co w połączeniu ze wzorem (2.17) prowadzi do warunków

$$\langle x^m \rangle \begin{cases} < \infty, & \text{dla } m \leq \alpha \\ = \infty, & \text{w przeciwnym razie} \end{cases} \quad (2.19)$$

czyli np. do wspomnianej na wstępie rozbieżności dyspersji rozkładu $\sigma_x = \sqrt{\langle x^2 \rangle}$.

Na istnienie w rachunku prawdopodobieństwa nieskończonych wartości przeciętnych zwrócili już uwagę na początku XVIII wieku N. Bernoulli i D. Bernoulli posługując się wprowadzonym przez siebie przykładem tzw. paradoksem petersburskim. Jest to gra hazardowa, w której bankier rzuca symetryczną monetą $n+1$ razy. Gracz uczestniczący w tej grze wygrywa 2^{n-1} monet jeżeli n razy pod rząd wypadnie awers zanim w kolejnym ($n+1$ rzucie) wypadnie revers. Otrzymane wyniki zostały przedstawione w tabeli 2.1. Jak widać, sumaryczna wygrana (czyli wartość oczekiwana), która jest równa sumie wszystkich liczb z ostatniej kolumny $1/2 + 1/2 + \dots$, rozbiega się w miarę jak liczba rzutów rośnie. Zatem, dla każdej skończonej stawki jaką mógłby zaproponować wchodzący do gry gracz jego wygrana będzie prędzej czy później

bardziej prawdopodobna niż porażka. Mimo to gracz nie zgodzi się na nieskończoną stawkę jaka byłaby wymagana przez grę sprawiedliwą gdyż, oczywiście, nie jest w stanie grać nieskończenie długo. Z kolei bankier nie zgodzi się na żadną skończoną opłatę wstępną gracza gdyż (jak powiedzieliśmy) straci ją prędzej czy później. Wiadać, że mamy tutaj do czynienia z nierozwiązywalnym konfliktem (częścią z tego powodu gry o nieskończonej wartości oczekiwanej nie nadają się do zastosowania w kasynach). Jaka jest przyczyna tego konfliktu. Otóż bankier i gracz nie mogą ustalić żadnej kompromisowej stawki gdyż takiej charakterystycznej stawki (lub mówiąc językiem fizyki, skali) po prostu nie ma.

Wracając do rozkładu Pareto-Lévy'ego, nieskończona dyspersja oznacza właśnie brak charakterystycznej skali; innymi słowy wszystkie skale są tutaj równoprawne - zjawiska opisywane tym rozkładem zachodzące w różnych skalach są (w sensie matematycznym) podobne czyli połączone relacją skalowania o czym jest mowa szczegółowo w dalszej części książki.

2.3 Motywacja fizyczna

Chcąc nie chcąc, liczba doświadczeń które dają się opisać za pomocą spowolnionej relaksacji, zwanej także długookresową (czyli anomalną, niedebye'owską albo nieeksponencjalną) szybko rośnie. Są to przede wszystkim zjawiska dotyczące relaksacji w środowisku amorficznym, nieuporządkowanym ("random materials"). Spośród nich najbardziej znane są te dotyczące relaksacji (M. Ghosh, B.K. Chakrabarti: "Relaxation in disordered systems", Indian Journal of Physics 65 A (1991) 1-24):

- fotoprądów w amorficznych filmach szklistych a w tym relaksacji fotoprądów w eksperymentach kserograficznych (E.W. Montrol, M.F. Shlesinger: "On the wonderful world of random walks" in "Nonequilibrium Phenomena II. From Stochastics to Hydrodynamics", Studies in Statistical Mechanics, Vol.XI, eds. J.L. Lebowitz, E.W. Montroll, North-Holland, Amsterdam 1984)
- relaksacji namagnesowania magnetyków poniżej temperatury krytycznej
- szkieł spinowych
- układów perkolujących
- starzejących się szkieł i polimerów
- relaksacji wiskoelastycznej
- relaksacji rekombinacyjnej w epitaksjalnych półprzewodnikach
- niestabilności w materii granulowanej (np. lawiny w samoorganizującej się krytyczności kopca piachu)

a także dotyczące

- anomalnej dyfuzji wodoru w amorficznych metalach przejściowych (R. Hempelmann: "Hydrogen Diffusion in Proton Conducting Oxides and in Nanocrystalline Metals" in "Anomalous Diffusion. From Basics to Applications", Lecture Notes in Physics Vol. 519, eds. R. Kutner, A. Pękalski, K. Szajd-Weron, Springer-Verlag, Berlin 1999)
- chłodzenia laserowego stanowiącego zasadniczy element metody pozwalającej na pułapkowanie atomów w postaci kondensatu Bosego-Einsteina, przy czym statystyka czasów życia tych atomów w pułapce podlega rozkładowi Lévy'ego z wykładnikiem $\alpha = 1/2$, (F. Bardou, J.-P. Bouchaud, A. Aspect, C. Cohen-Tannoudji: "Lévy Statistics and Laser Cooling. How Rare Events Bring Atoms to Rest", Cambridge Univ. Press, Cambridge 2002).

Spowolnioną relaksację opisuje się najczęściej za pomocą kilku rodzajów funkcji relaksacji $f(t)$. Na przykład, za pomocą prawa Kohlrauscha-Williamsa-Wattsa (KWW)

$$f(t) = \exp \left(- \left(\frac{t}{\tau} \right)^\alpha \right), \quad (2.20)$$

gdzie $0 < \alpha < 1$; wyrażenie (2.20) nosi także nazwę rozciągniętego eksponenta ('stretched exponent'). Również za pomocą prawa potęgowej relaksacji Nuttinga

$$f(t) = \frac{1}{(1 + t/\tau)^n}, \quad (2.21)$$

gdzie wykładnik $0 < n < 1$. Jak też, ogólnie rzecz biorąc, za pomocą funkcji, które posiadają asymptotyczny zanik potęgowy

$$f(t) \sim \frac{1}{t^\alpha}, \quad (2.22)$$

(gdzie $0 < \alpha$) o czy będzie mowa w dalszej części.

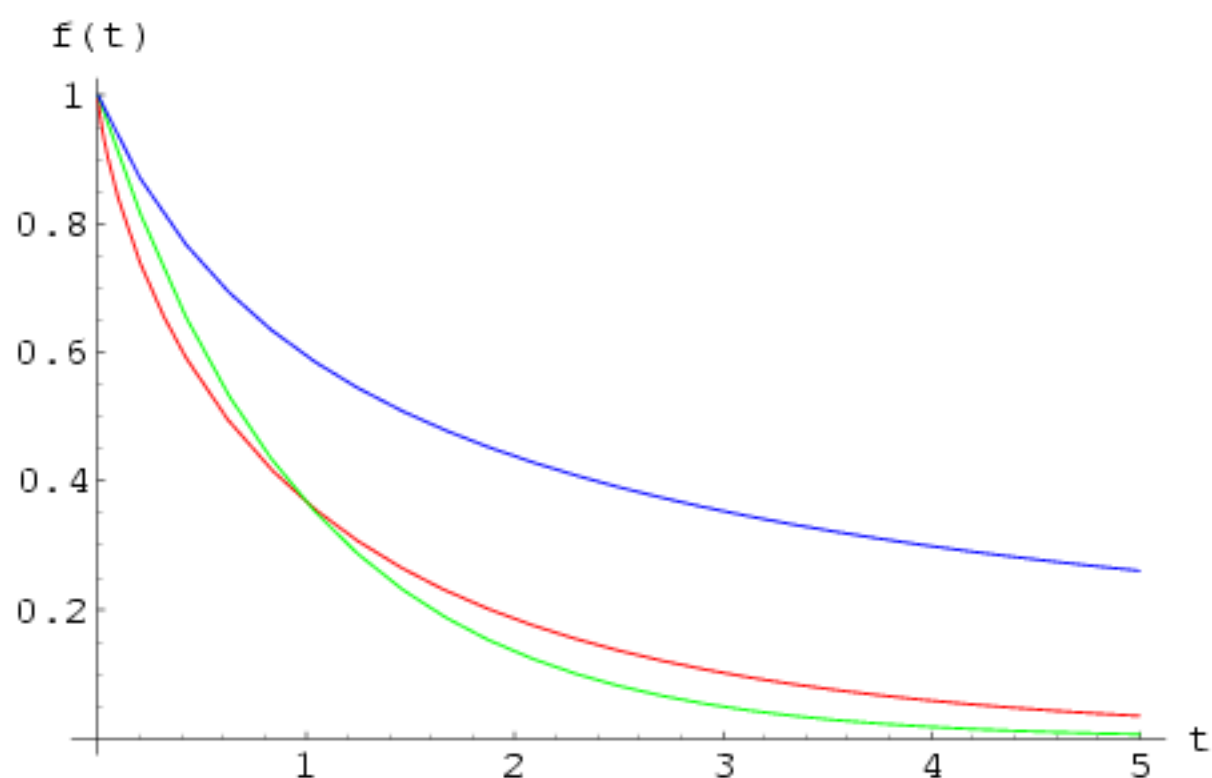
Na rys.2.11 porównano w skali liniowej trzy rodzaje funkcji relaksacji: (zwykły) eksponent czyli (standardowe) prawo relaksacji Debye'a (linia zielona)

$$f(t) = \exp(-t/\tau), \quad (2.23)$$

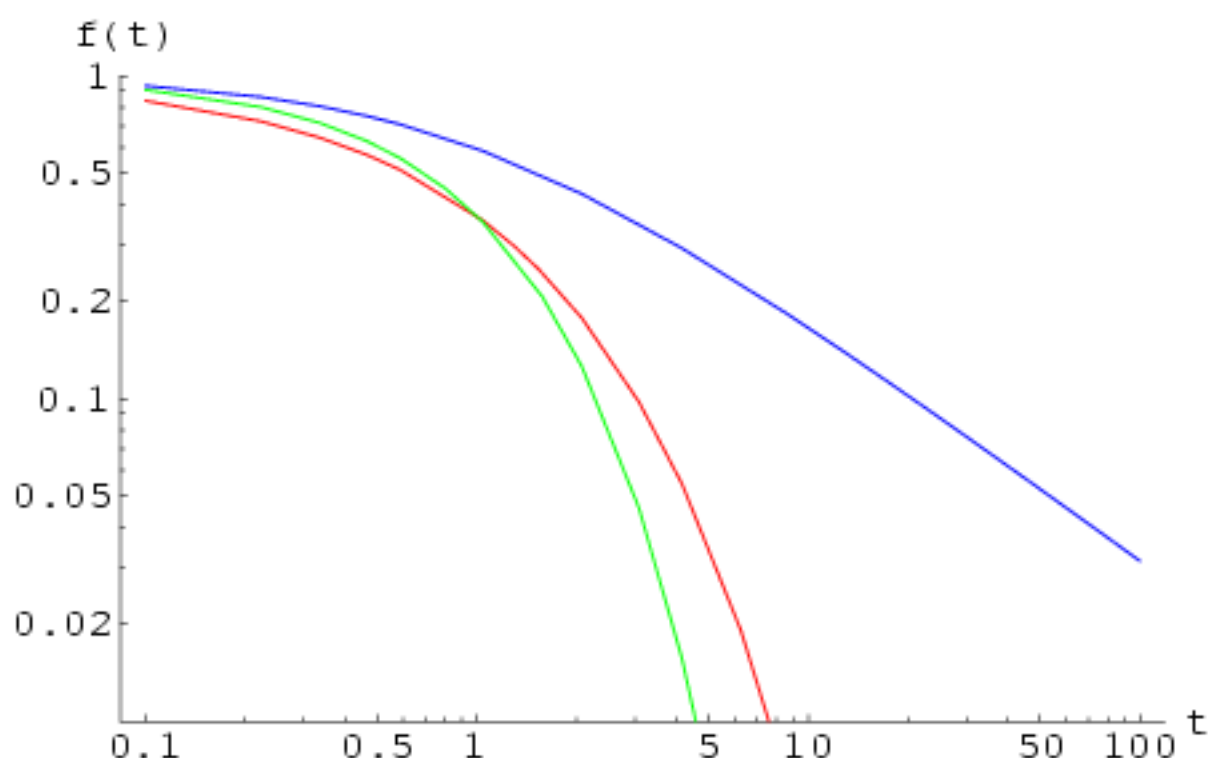
oraz prawa KWW (linia czerwona) i Nuttinga (linia niebieska) dla parametrów $\tau = 1$ i $\alpha = 0.75$.

Analogicznie, na rys.2.12 porównano w skali $\log - \log$ trzy rodzaje funkcji relaksacji: prawa relaksacji Debye'a (linia zielona), Kohlrauscha-Williamsa-Wattsa (linia czerwona) oraz Nuttinga (linia niebieska) dla takich samych wartości parametrów τ , α i n .

Jak powiedzieliśmy na wstępie, relaksacja potęgowa została po raz pierwszy zaobserwowana przez B.G. Buelfingera w roku 1729 w badaniach nad relaksacją naprężeń w takich materiałach jak stal i kamień. Od roku 1888 nosi ona nazwę prawa sprężystości Bacha.



Rysunek 2.11: Porównanie w skali liniowej trzech rodzajów funkcji relaksacji: prawa relaksacji Debye'a (linia zielona), Kohlrauscha-Williamsa-Wattsa (linia czerwona) oraz Nuttinga (linia niebieska) dla parametrów $\tau = 1$ oraz $\alpha = n = 0.75$.



Rysunek 2.12: Porównanie w skali $\log - \log$ trzech rodzajów funkcji relaksacji przedstawionych na rys.2.11 w skali liniowej: prawa relaksacji Debye'a (linia niebieska), Kohlrauscha-Williamsa-Wattsa (linia czerwona) oraz Nuttinga (linia zielona) dla takich samych wartości parametrów τ , α i n .

Z grubsza rzecz biorąc, spowolniona relaksacja może być wynikiem istnienia w układzie złożonym wielu silnie sprzężonych i różnie relaksujących podukładów, co może prowadzić do retardacji lub, ogólniej mówiąc, pamięci a zatem do niemarkowskiego charakteru procesu relaksacji (W.G. Glöckle, Th.F. Nonnenmacher: "Fox Function Representation of Non-Debye Relaxation Processes", Journal of Statistical Physics 71 (1993) 741-757; Th.F. Nonnenmacher, R. Metzler: "Applications of fractional calculus techniques to problems in biophysics" rozdz.VIII w "Applications of fractional calculus in physics", pod redakcją R. Hilfera, World Scientific, Singapore 2000). To z kolei prowadzi do ułamkowego (czyli fraktalnego) równania relaksacji, którego rozwiązaniem jest funkcja Foxa zanikająca, jak wiadomo, potęgowo. Systematyczne omówienie tych zagadnień jest jednym z zasadniczych celów niniejszej pracy.

2.4 Relaksacja fraktalna

Na zakończenie tego rozdziału wprowadzimy fraktalne równanie na funkcję relaksacji dzięki któremu będziemy mogli odtworzyć wprowadzoną wcześniej relaksację potęgową. Jak wiadomo, wykładnicza funkcja relaksacji (2.23) jest rozwiązaniem równania różniczkowego

$$\frac{df(t)}{dt} = -\frac{1}{\tau}f(t), \quad t > 0, \quad (2.24)$$

z zadanyim warunkiem początkowym $f(t=0) = f_0$. Odpowiednikiem całkowym równania (2.24) jest następujące

$$f(t) - f_0 = -\frac{1}{\tau} \frac{d^{-1}f(t)}{dt^{-1}} \stackrel{\text{def.}}{=} -\frac{1}{\tau} \int_0^t dt' f(t'); \quad (2.25)$$

ponieważ całkowanie pełni rolę operacji odwrotnej do zwykłego różniczkowania dlatego oznaczyliśmy je tutaj jako ujemną pochodną. Oczywiście, pochodna ta ma zupełnie inny charakter niż dodatnia a mianowicie, jest typu globalnego (w przeciwieństwie do dodatniej, która ma charakter lokalny).

Uogólnienie równania (2.25) polega na zastąpieniu występującego tam ujemnego różniczkowania, ujemnym różniczkowaniem ułamkowym

$$f(t) - f_0 = -\frac{1}{\tau^\alpha} \frac{d^{-\alpha}f(t)}{dt^{-\alpha}}, \quad 0 < \alpha, \quad (2.26)$$

gdzie ujemna pochodna stopnia $-\alpha$ jest po prostu operatorem całkowym Riemanna-Liouville'a

$$\frac{d^{-\alpha}f(t)}{dt^{-\alpha}} \stackrel{\text{def.}}{=} \begin{cases} \frac{1}{\Gamma_{\text{Euler}}(\alpha)} \int_0^t dt' \frac{f(t')}{(t-t')^{1-\alpha}} & \text{dla } \alpha > 0 \\ f(t) & \text{dla } \alpha = 0 \end{cases} \quad (2.27)$$

(patrz Dodatek A). Różniczkując stronami równanie całkowite (2.26) otrzymujemy fraktalne równanie relaksacji czyli równanie różniczkowo-całkowe postaci

$$\frac{df(t)}{dt} = -\frac{1}{\tau^\alpha} \frac{d^{1-\alpha}f(t)}{dt^{1-\alpha}}, \quad 0 < \alpha, \quad (2.28)$$

które stanowi bezpośrednie uogólnienie zwykłego równania różniczkowego pierwszego stopnia (2.24) opisującego relaksację debye'owską. Rozwiązanie tego równania wyraża się za pomocą funkcji Foxa typu $H_{1,2}^{1,1}$ (Th.F. Nonnenmacher, R. Metzler: "Applications of Fractional Calculus Techniques to Problems in Biophysics" w "Applications of Fractional Calculus in Physics", ed. R. Hilfer, World Scientific, Singapore 2000) lub inaczej rzecz biorąc, za pomocą funkcji Mittag-Leffler E_α (R. Metzler and J. Klafter: "The Random Walk's Guide to Anomalous Diffusion: A Fractional

Dynamics Approach", Physics Reports 339 (2000) 1-77),

$$\begin{aligned} f(t) &= \frac{f_0}{\alpha} H_{1,2}^{1,1} \left[\frac{t}{\tau} \middle| \begin{matrix} (0, \frac{1}{\alpha}) \\ (0, \frac{1}{\alpha}), (0, 1) \end{matrix} \right] = f_0 H_{1,2}^{1,1} \left[\left(\frac{t}{\tau} \right)^\alpha \middle| \begin{matrix} (0, 1) \\ (0, 1), (0, \alpha) \end{matrix} \right] \\ &= f_0 E_\alpha \left(\left(-\frac{t}{\tau} \right)^\alpha \right) = f_0 \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\left(-\frac{t}{\tau} \right)^{\alpha j}}{\Gamma_{\text{Euler}}(1 + \alpha j)}. \end{aligned} \quad (2.29)$$

Rozwiązanie to przejawia następujące zachowania graniczne

$$f(t) \approx f_0 \begin{cases} \exp \left(-\frac{(t/\tau)^\alpha}{\Gamma_{\text{Euler}}(1+\alpha)} \right) & \text{dla } t \ll \tau \\ \frac{1}{\Gamma_{\text{Euler}}(1-\alpha)} \frac{1}{(t/\tau)^\alpha} & \text{dla } t \gg \tau \text{ oraz } 0 < \alpha < 1, \end{cases} \quad (2.30)$$

z których pierwsze to nic innego jak wspomniane przez nas wcześniej prawo relaksacji Kohlrausha-Williamsa-Wattsa a drugie (także wspomniane przez nas) prawo zaniku potęgowego z wykładnikiem $0 < \alpha < 1$; dla innych wartości α nie uzyskuje się asymptotycznego prawa potęgowego.

Na rys. ... przedstawiono przykładowy przebieg funkcji Foxa $H_{1,2}^{1,1}$ dla trzech różnych wartości wykładnika α .

2.4.1 Rola pamięci w relaksacji

Spojrzymy teraz na relaksację od strony umożliwiającej analizę roli jaką odgrywa w niej pamięć. Rozważmy zatem następujące równanie różniczkowo-całkowe z jądrem pamięci $K(t)$,

$$\frac{df(t)}{dt} = - \int_0^t dt' K(t-t') f(t'). \quad (2.31)$$

Należy podkreślić, że powyższe równanie uzyskano przy wykorzystaniu techniki operatorów rzutowych Zwanziga. Powyższe równanie pozwoli nam na wyprowadzenie wszystkich omawianych dotychczas rodzajów relaksacji poprzez odpowiedni dobór jądra całkowego $K(t)$.

A) Brak pamięci. Przypuśćmy, że w układzie nie występuje pamięć tzn., że jądro całkowe

$$K(t) = \frac{1}{\tau} \delta(t); \quad (2.32)$$

podstawiając powyższe wyrażenie do równania (2.31) otrzymujemy jako jego rozwiązanie wykładniczą funkcję relaksacji

$$f(t) = f_0 \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) \quad (2.33)$$

(daną już wcześniej właśnie wzorem (2.23)).

B) Pamięć stała. Załóżmy teraz, że jądro pamięci jest niezależne od czasu czyli

$$K(t) = \omega^2, \quad (2.34)$$

wówczas, podstawiając (2.34) do (2.32), otrzymujemy oscylujące rozwiązanie na funkcję relaksacji

$$f(t) = f_0 \cos(\omega t), \quad (2.35)$$

gdzie ω jest pewną stałą większą od zera.

C) Pamięć wolnozmienna. Przypuśćmy, że jądro całkowite, $K(t)$, jest wolnozmienną funkcją czasu i początkowo (dla $t \ll \tau$) narasta w sposób potęgowy

$$K(t) = K_0 t^\gamma, \quad \gamma > 0. \quad (2.36)$$

Stąd oraz z równania (2.31) otrzymujemy jako rozwiązanie funkcję relaksacji

$$f(t) \approx f_0 \exp\left(-\left(\frac{t}{\tau}\right)^{\gamma+2}\right), \quad \tau^{-1} = K_0^{1/(\gamma+2)} \quad (2.37)$$

w postaci rozciągniętego eksponentu.

D) Pamięć długookresowa. Załóżmy teraz, że jądro pamięci jest dla $t > 0$ algebraicznie malejącą funkcją czasu

$$K(t) = \frac{K_0}{t^{2-\alpha}}, \quad K_0 > 0, \quad 1 < \alpha \leq 2; \quad (2.38)$$

podstawiając, jak zwykle, powyższą postać jądra do równania (2.31) otrzymujemy natychmiast, że

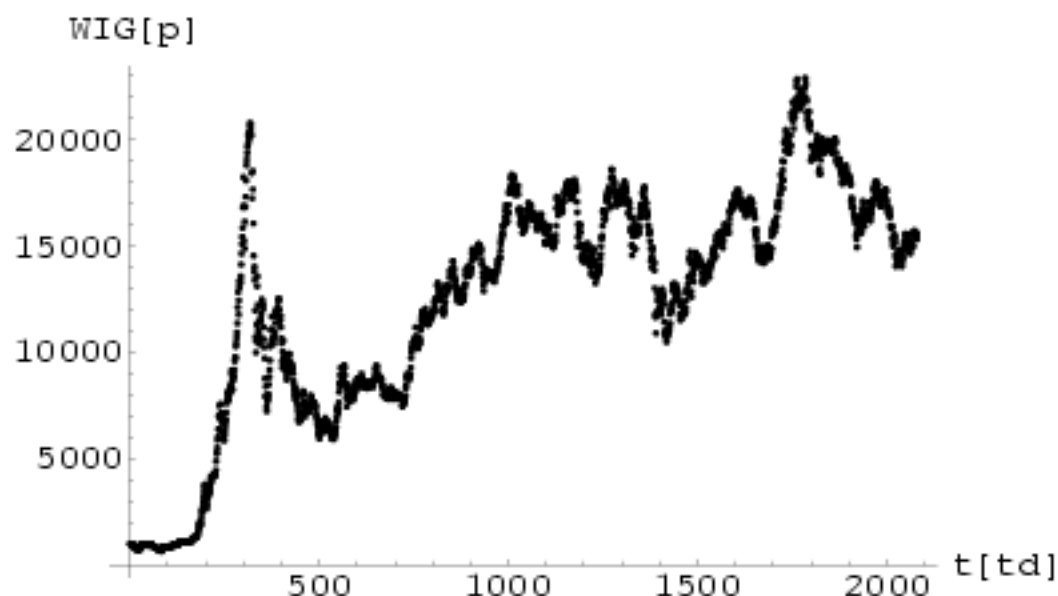
$$\frac{df(t)}{dt} = -\frac{1}{\tau^\alpha} \frac{d^{1-\alpha} f(t)}{dt^{1-\alpha}}, \quad \tau^{-\alpha} \stackrel{\text{def}}{=} K_0 \Gamma(\alpha - 1) \quad (2.39)$$

gdzie po drodze skorzystaliśmy z definicji ujemnej pochodnej fraktalnej (2.27). Jak widać, jądro całkowite typu (2.38) prowadzi do równania relaksacji fraktalnej (2.28) z zakresem wykładnika α ograniczonym do przedziału $1 < \alpha \leq 2$.

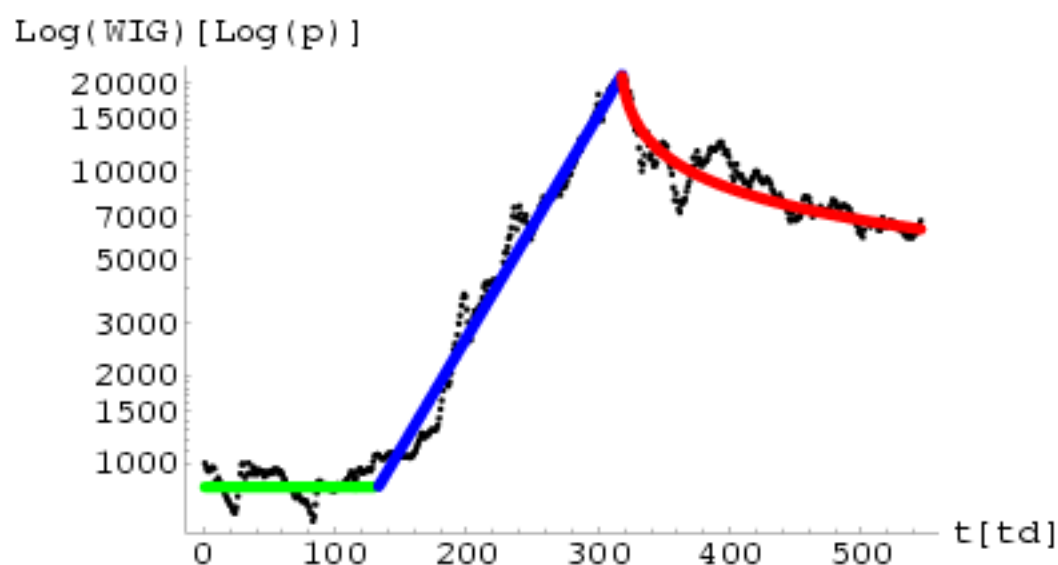
Powstaje teraz pytanie o związek fraktalnego równania relaksacji (2.28) z równaniem z pamięcią (2.31) dla $0 < \alpha \leq 1$. Innymi słowy, chodzi o odpowiedź na pytanie czy dla $0 < \alpha \leq 1$ istnieje jądro całkowite $K(t)$ a jeżeli tak to jaką ma postać?

2.4.2 Spowolniona relaksacja na Warszawskiej GPW

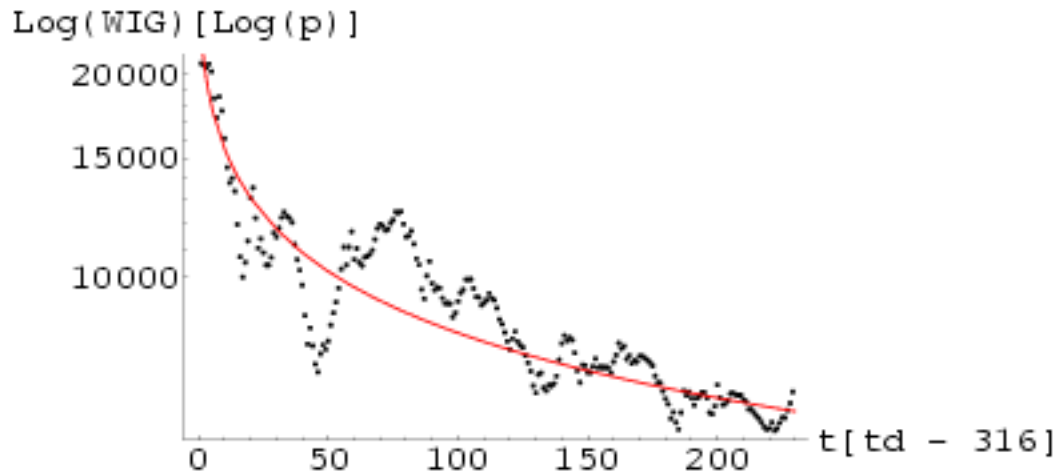
Tytułem przykładu spowolnionej relaksacji rozważymy indeks WIG a dokładniej jego relaksację po osiągnięciu pierwszego maksimum (zawartego w obszarze pierwszych 550 dni transakcyjnych istnienia giełdy co jest dobrze widocznego na rysunku 2.13). Na rysunku 2.14 przedstawiono już tylko wspomniany obszar pierwszego maksimum. Dokładniej, prawe zboczce tego maksimum przedstawia rysunek 2.15.



Rysunek 2.13: Przykładowy przebieg indeksu WIG poczynając od pierwszej sesji ... aż do tej w ... liczony w dniach transakcyjnych (td) na otwarciu.



Rysunek 2.14: Przebieg indeksu WIG (w skali półlogarytmicznej) dla pierwszych 550 dni transakcyjnych istnienia giełdy. Zielona linia oznacza poziom odniesienia, linia niebieska pokazuje eksponensyjny wzrost indeksu, natomiast linia czerwona jest dana wzorem (2.29).



Rysunek 2.15: Przebieg prawego zbocza indeksu WIG (w skali półlogarytmicznej) dla pierwszego maksimum; czerwona linia jest obliczona za pomocą szeregu we wzorze (2.29).

2.5 Dynamika materiału lepko-sprężystego a relaksacja fraktalna

Przedstawimy teraz drogę na jakiej uzyskuje się relaksację fraktalną z równań opisujących dynamikę materiału lepko-sprężystego (wisko-elastycznego). Punktem wyjścia jest połączenie prawa sprężystości Hooke’a z prawem Newtona opisującego lepkie właściwości ciała stałego związane z nieodwracalną dysypacją energii sprężystości. Połączenie to prowadzi do modelu Maxwella-Zenera ciała stałego. Dopiero w następnym kroku, posługując się analogią, przejdziemy do opisu relaksacji fraktalnej indeksu giełdowego, przykładowo WIG-u.

2.5.1 Model Zenera ciała stałego

Prawo Hooke’a. Siły działające prostopadle do powierzchni ciała stałego powodują, w zależności od zwrotu, jego ściskanie albo rozciąganie. Miarą odkształcenia (zarówno przy ścisaniu jak i rozciąganiu) jest względna zmiana długości ciała $\varepsilon = \Delta l/l$ zwana odkształceniem lub deformacją; związek tej wielkości z działającą siłą F określa prawo Hooke’a:

$$\varepsilon = K\sigma = \frac{1}{E}\sigma, \quad (2.40)$$

gdzie naprężenie wewnętrzne $\sigma = F/S$, przy czym S jest polem przekroju poprzecznego pręta (w dalszym ciągu będziemy omawiać tylko tego typu ciała), natomiast współczynnik E jest modulem sprężystości Younga. Z prawa tego wynika, że reakcja ciała na przyłożone naprężenie jest natychmiastowa tak jak i po usunięciu go.

Tego typu zachowanie ciała nazywamy sprężystym. Wiadomo z doświadczenia, że własności sprężyste ciało obserwuje się tylko w ograniczonym zakresie odkształceń. W szerszym zakresie obserwuje się (w różnym stopniu) zachowanie plastyczne, w którym odkształcenie wzrasta (do pewnej charakterystycznej wielkości) nawet jeżeli naprężenie nie ulega zmianie. Model Zenera (MZ) ciała stałego uwzględnia już oba efekty (sprężystości i plastyczności). Aby opisać efekt plastyczności model Zenera bierze, oprócz prawa Hooke'a, na wyrażeniu Maxwella-Newtona opisującego relaksację ciała posiadającego lepkość.

Wyrażenie Maxwella-Newtona. Wyrażenie Maxwella-Newtona łączy naprężenie przyłożone do ciała z szybkością zmiany odkształcenia na jednostkę czasu

$$\frac{d\varepsilon}{dt} = b \cdot \sigma(t) \equiv \eta \frac{d\varepsilon}{dt} = \sigma, \quad (2.41)$$

gdzie η jest lepkością ciała (zwaną także tarcie wewnętrzne) a b ruchliwością.

Model Zenera. Model Zenera sformułujemy w postaci umożliwiającej bezpośrednie zastosowanie do opisu dynamiki indeksów giełdowych. Sformułowanie to utaleźnia odkształcenie ε od naprężenia σ a nie odwrotnie jak to jest w tradycyjnym podejściu. Oznacza to, że skorzystamy z pierwszych równości w (2.40) i (2.41). Obecne podejście bierze na następującym liniowym równaniu różniczkowym:

$$\frac{d\varepsilon(t)}{dt} + \frac{1}{\tau_0} \varepsilon(t) = \frac{K_1}{\tau_0} \sigma(t) + (K_1 + K_2) \frac{d\sigma(t)}{dt}, \quad (2.42)$$

które jest kombinacją prawa Hooke'a i wyrażenia Maxwella-Newtona; τ_0 , K_1 , K_2 są niezależnymi parametrami a współczynnik lepkości $\eta = 1/b = (K_1/\tau_0)^{-1}$. Jego rozwiązanie jest postaci:

$$\varepsilon(t) = C_1 \exp\left(-\frac{t}{\tau_0}\right) + C_2 \exp\left(-\frac{t}{\tau_0}\right) \int_0^t \exp\left(\frac{t'}{\tau_0}\right) \left[\frac{K_1}{\tau_0} \sigma(t') + (K_1 + K_2) \frac{d\sigma(t')}{dt'} \right] dt' \quad (2.43)$$

która świetnie nadaje się do dalszej analizy. Aby zrozumieć znaczenie współczynników K_1 i K_2 przedyskutujemy to rozwiązanie dla przypadku stałego naprężenia σ_0 (wyznaczając przy okazji stałe C_1 i C_2).

Dyskusja rozwiązania równania (2.42) dla przypadku stałego naprężenia. W tym przypadku rozwiązanie równania (2.42) przyjmuje prostszą postać:

$$\varepsilon(t) = C_1 \exp\left(-\frac{t}{\tau_0}\right) + C_2 K_1 \sigma_0 [1 - \exp\left(-\frac{t}{\tau_0}\right)], \quad (2.44)$$

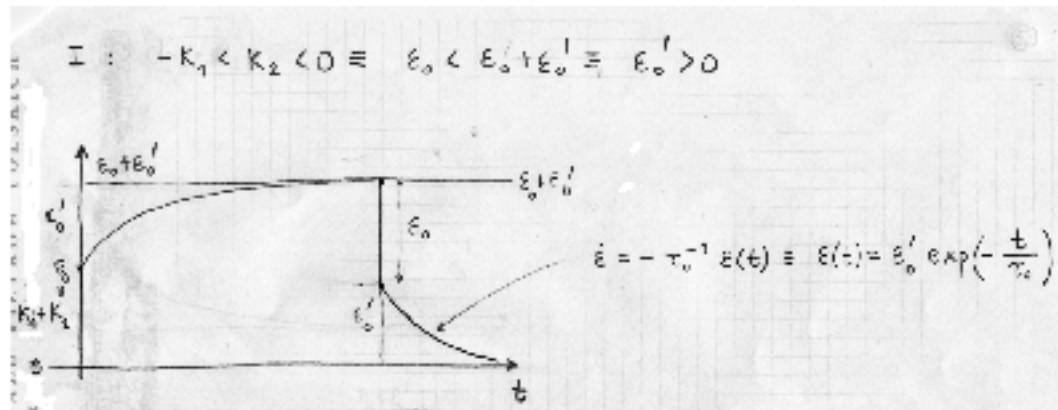
przy czym stałą C_1 można wyznaczyć z warunku początkowego

$$\varepsilon(t=0) = \varepsilon_0 = (K_1 + K_2) \sigma_0 = C_1, \quad (2.45)$$

natomiast stałą C_2 z ograniczenia jakie накладamy na asymptotyczne zachowanie

$$\varepsilon(t \rightarrow \infty) = \varepsilon_0 + \varepsilon'_0 = K_1 \sigma_0, \quad (2.46)$$

które oznacza (w połączeniu z (2.45)), że $\varepsilon'_0 = -K_2 \sigma_0$ oraz (w połączeniu z (2.44)), że $C_2 = 1$. Rozwiązanie (2.44) wraz z wyznaczonymi stałymi prowadzi do dwóch następujących sytuacji:



Rysunek 2.16: Rozwiązanie równania (2.44) dla sytuacji (i).

(i) $-K_1 \leq K_2 < 0 \equiv \varepsilon_0 \leq \varepsilon_0 + \varepsilon'_0 \equiv \varepsilon'_0 \geq 0,$

(ii) $K_2 \geq 0 \equiv \varepsilon'_0 \leq 0,$

które ilustrujemy na dwóch kolejnych rysunkach 2.16 i 2.17.

⁵Wyprowadzenie równania (2.42). Dokładniej rzecz biorąc, równanie (2.42) zostało uzyskane w oparciu o termodynamikę procesów nieodwracalnych. Tutaj wyprowadzimy je analogicznie ale w kontekście rynków finansowych korzystając z odpowiednich analogii zebranych w poniższej tabeli.

2.6 Dyfuzja fraktalna

Analogicznie jak w rozdz.2.4 można otrzymać równanie dyfuzji fraktalnej. Rozważmy w tym celu jednowymiarowe równanie dyfuzji Ficka (dla uproszczenia bez dryfu)

$$\frac{\partial f(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 f(x, t)}{\partial x^2}; \quad (2.47)$$

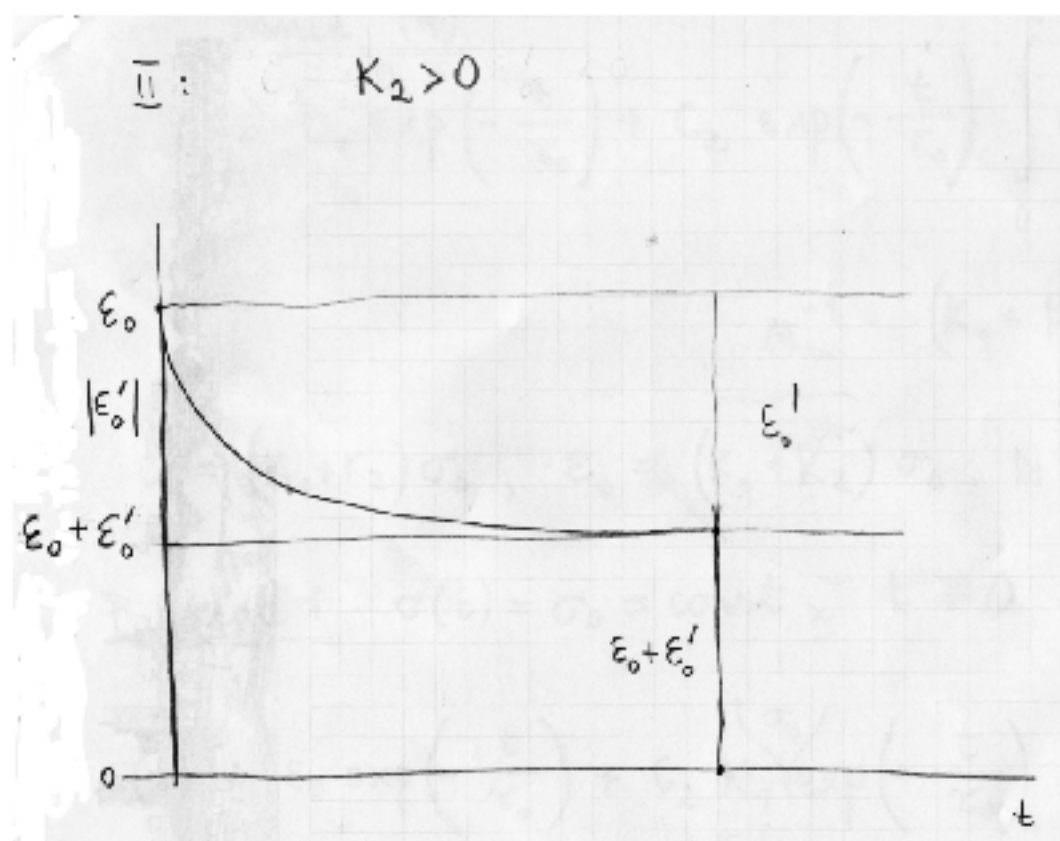
w dalszym ciągu zakładamy dla prostoty, że współczynnik dyfuzji D jest stały. Całkując to równanie stronami po czasie otrzymujemy jako kroki pośrednie:

$$f(x, t) - f(x, t=0) = D \frac{\partial^{-1}}{\partial t^{-1}} \frac{\partial^2 f(t)}{\partial x^2} \quad (2.48)$$

oraz uogólnienie powyższego równania dla $0 \leq \alpha < 1$

$$f(x, t) - f(x, t=0) = D_\alpha \frac{\partial^{-\alpha}}{\partial t^{-\alpha}} \frac{\partial^2 f(t)}{\partial x^2}, \quad (2.49)$$

⁵W pierwszym czytaniu można niniejsze wyprowadzenie opuścić.



Rysunek 2.17: Rozwiązanie równania (2.44) dla sytuacji (ii).

gdzie D_α jest uogólnionym współczynnikiem dyfuzji (tutaj stałym), którego wymiar wynosi długość²/czas ^{α} o czym dokładniej powiemy w dalszej części. Różniczkując cząstkowo po czasie (2.49) uzyskujemy poszukiwane równanie dyfuzji fraktalnej (R. Metzler, J. Klafter: "The Random Walk's Guide to Anomalous Diffusion: A Fractal Dynamics Approach", Physics Report 339 (2000) 1-77, [3])

$$\frac{\partial f(x,t)}{\partial t} = D_\alpha \frac{\partial^{1-\alpha}}{\partial t^{1-\alpha}} \frac{\partial^2 f(x,t)}{\partial x^2}. \quad (2.50)$$

Rozwiązanie tego równania można wyrazić za pomocą funkcji Foxa

$$f(x,t) = \frac{1}{\sqrt{4D_\alpha t^\alpha}} H_{2,0}^{1,2} \left[\frac{x^2}{4D_\alpha t^\alpha} \left| \begin{matrix} (1 - \frac{\alpha}{2}, \alpha) \\ (0,1) \end{matrix} \right. \right] \quad (2.51)$$

albo w alternatywnej postaci

$$f(x,t) = \frac{1}{\sqrt{4D_\alpha t^\alpha}} H_{1,0}^{1,1} \left[\frac{|x|}{\sqrt{D_\alpha t^\alpha}} \left| \begin{matrix} (1 - \frac{\alpha}{2}, \frac{\alpha}{2}) \\ (0,1) \end{matrix} \right. \right] \quad (2.52)$$

Najważniejsze własności funkcji Foxa omówiliśmy w Dodatku A.

2.6.1 Rola pamięci w dyfuzji

Bibliografia

- [1] D. Sornette: "Why Stock Markets Crash. Critical Events in Complex Financial Systems", Princeton
- [2] Univerity Press, Princeton and Oxford 2002. W.D. Phillips: "Laserowe chłodzenie i pułapkowanie atomów obojętnych", *Postępy Fizyki*, Tom 49 (1998) 310-335.
- [3] F. Bardou, J.-P. Bouchaud, A. Aspect, C. Cohen-Tannoudji: "Lévy Statistics and Laser Cooling. How Rare Events Bring Atoms to Rest", Cambridge Univ. Press, Cambridge 2002.
- [4] D. Sornette: "Discrete scaling invariance and complex dimensions", *Physics Reports* 297 (1998) 239-270.
- [5] (D. Sornette, A. Johansen, J.-P. Bouchaud: "Stock Markets Crashes, Precursors and Replicas", *J. Phys. I France* 6 (1996) 167-175.
- [6] D. Sornette and A. Johansen: "Large financial crashes", *Physica A* 245 (1997) 411-422.
- [7] A. Johansen, D. Sornette: "Critical Crashes", *Risk* 12 (1990) 91-94.
- [8] A. Johansen, D. Sornette: "Bubbles and anti-bubbles in Latin-American, Asian and Western stock markets: An empirical study", *International Journal of Theoretical and Applied Finance* 4 (2001) 853-920.
- [9] O.J. Blanchard: "Speculative bubbles, crashes and rational expectations", *Economics Letters* 3 (1979) 387-389.
- [10] O.J. Blanchard, M.W. Watson: "Bubbles, rational expectations and speculative markets" w "Crisis in Economic and Financial Structure: Bubbles, Bursts, and Shocks", ed. P. Wachtel, Lexington Books, Lexington, MA.
- [11] R.N. Mantegna, H.E. Stanley: "Ekonoofizyka. Wprowadzenie", Wydawnictwa Naukowe PWN, Warszawa 2001.

- [12] E.W. Montroll, M.F. Shlesinger: "On the wonderful world of random walks" w
"Nonequilibrium Phenomena II. From Stochastics to Hydrodynamics", Studies
in Statistical Mechanics, Vol.XI, eds. J.L. Lebowitz, E.W. Montroll, North-
Holland, Amsterdam 1984.
- [13] D. Sornette: "Critical Phenomena in Natural Sciences. Chacs, Fractals, Selfor-
ganization and Disorder: Concepts and Tools", Springer-Verlag, Berlin 2000;
D. Sornette: "Multiplicative processes and power law", Physical Review E 57
(1998) 4811-4813.
- [14] R. Metzler, J. Klafter: "The Random Walk's Guide to Anomalous Diffusion: A
Fractal Dynamics Approach", Physics Report 339 (2000) 1-77
- [15] M. Kocłowska, R. Kutner: "Dynamics of the Warsaw Stock Exchange index as
analysed by the Mittag-Leffler function", DPG - Fruejahrstagung des Arbeit-
skreises Festkoerperphysik in conjunction with EPS - 21st General Conference of
the Matter Division, Dresden, Germany 2006.

Część II

Procesy gaussowskie

Rozdział 3

Ruchy Browna, opalescencja krytyczna, błękit nieba, rozpraszanie krytyczne

Nasuwa się od razu pytanie: co łączy ze sobą wymienione w tytule tego rozdziału, kluczowe dla następnich rozważań, zjawiska? Odpowiedź, podaną niezależnie przez fizyków Alberta Einsteina i Mariana Smoluchowskiego można wyrzucić jednym słowem fluktuacje - to dzięki istnieniu dużych fluktuacji termicznych w różnych układach złożonych możliwe jest zaobserwowanie ruchów Browna, opalescencji krytycznej i temu podobnych zjawisk. Jednakże pomiędzy tymi zjawiskami występują także zasadnicze różnice co do charakteru fluktuacji chociaż w obu przypadkach są one makroskopowe: w ruchach Browna są ograniczone podczas gdy w zjawiskach krytycznych są z zasady nieograniczone. Odpowiednio do tego mówimy o procesach gaussowskich i niegaussowskich.

Należy podkreślić, że niniejsza praca dotyczy właśnie niegaussowskiego aspektu różnorodnych zjawisk przyrody, w tym biologicznych, medycznych i ekologicznych, ale także zjawisk społecznych i ekonomicznych przy czym zawężona jest do dziedziny błędów przypadkowych.

3.1 Ruchy Browna

Zrozumienie zjawiska ruchów Browna, które zostało szczegółowo opisane przez angielskiego botanika Roberta Browna w 1827 roku, nastąpiło na początku XX w. i związane jest z nazwiskami fizyków Alberta Einsteina, Paula Langevina, a przede wszystkim Mariana Smoluchowskiego - zawdzięczamy Im wyjaśnienie mechanizmu tego zjawiska w oparciu o kinetyczno-molekularną teorię materii, dynamikę stochastyczną oraz teorię stochastycznych procesów Markowa (patrz N.G. van Kampen: "Procesy stochastyczne w fizyce i chemii", Państwowe Wydawnictwo Naukowe, Warszawa 1990; R. Kubo, M.Toda, N. Hashitsume: "Fizyka statystyczna II. Mechanika

statystyczna stanów nierównowagowych", Wydawnictwa Naukowe PWN, Warszawa 1991; S. Chandrasekhar, M. Kac, R. Smoluchowski, "Marian Smoluchowski His Life and Scientific Work", PWN, Warszawa 2000; S. Chandrasekhar, "Stochastic Problems in Physics and Astronomy", Rev. Mod. Physics, 15, 1-89 (1943); B. Cichocki, "Ruchy Browna", Delta (1983) nr 4 str. 4-5 oraz nr 5 str. 6-10; R. Kutner, "Metoda Monte Carlo a ruchy Browna", Delta (1986) nr 9 str. 10-12; B. Średniawa, "Marian Smoluchowski (1872-1917)", Delta (1997) nr 12 str. 3-6). Porównanie teorii z doświadczeniem pozwoliło Jeanowi Perrinowi na wyznaczenie liczby Avogadro, a zatem bezwzględnych mas atomowych i stanowiło przekonujący dowód realności tzw. hipotezy atomistycznej budowy materii, której korzenie sięgają starożytności, poczynając od Demokryta z Abdery (A. Gawryś, Z. Gawryś, "Poczet wielkich fizyków atomistów", Instytut Wydawniczy "Nasza Księgarnia", Warszawa 1976), a przede wszystkim doprowadziło ostatecznie (w roku 1908) do uznania kinetycznej teorii materii stworzonej (w 1898 roku) przez Ludwiga Boltzmanna (który niestety nie dożył tej chwili).

Charakterystyczna własność ruchów Browna to występująca nieustannie nieregularna zmiana położenia makrocząsteczki (np. kuleczki tłuszczu lub pyłku kwiatowego) o rozmiarach rzędu 10^{-4} cm, zawieszonej w cieczy (np. w rozcieńczonym mleku albo w wodzie) lub w gazie, wywołana przypadkowymi potrąceniami ze strony otaczających ją znacznie mniejszych (nawet o cztery rzędy wielkości) cząsteczek ośrodka. Inaczej mówiąc, na cząsteczkę zawieszony działa fluktuująca siła spowodowana chaotycznymi nieskompensowanymi, wielokrotnymi uderzeniami cząsteczek ośrodka. Wynik pojedynczego, całkowitego przypadkowego zderzenia jest bardzo mały (nawet w skali mikroskopowej), jednak sumarycznym efektem dużej liczby tych zderzeń może być, obserwowane przez mikroskop nawet o niewielkim powiększeniu, znaczne wypadkowe przemieszczenie przypadkowej cząstki zawieszony. Oczywiście, aby takie przemieszczenie mogło być zaobserwowane musi istnieć znaczna chwilowa różnica liczby cząstek ośrodka po obu stronach cząsteczki zawieszony innymi słowy, *muszą istnieć znaczne fluktuacje liczby cząsteczek ośrodka w otoczeniu cząsteczki zawieszony* - zostało to po raz pierwszy wykazane przez Smoluchowskiego, który wykorzystał w tym celu rozkład dwumianowy Bernoulliego.

Dokładnie rzecz biorąc, pytanie jakie postawił Smoluchowski brzmiało następujące: jaka jest, średnio rzecz biorąc, nadwyżka, $\langle \Delta n (= n_R - n_L) \rangle$, liczby cząsteczek ośrodka, n_R , znajdujących się, na przykład, po prawej stronie cząsteczki zawieszony względem tych po lewej, n_L , (przy czym $n_R + n_L = n$, gdzie n jest całkowitą liczbą cząsteczek ośrodka znajdujących się w najbliższym otoczeniu makromolekuły)? Tą wartość średnią obliczył bardzo prosto

$$\langle \Delta n \rangle = \sum_{\Delta n > 0}^n \Delta n \cdot p_n(\Delta n), \quad (3.1)$$

gdzie prawdopodobieństwo nadwyżki

$$p_n(\Delta n) = \frac{1}{2^n} \binom{n}{\frac{n+\Delta n}{2}} \quad (3.2)$$

zostało otrzymane przez naturalnym założeniu równego prawdopodobieństwa znalezienia pojedynczej cząsteczki ośrodka po obu stronach makromolekuły (przy czym wyrażenie w nawiasie jest dobrze znanym współczynnikiem dwumianowym zwanym także czynnikiem Newtona, patrz J. Antoniewicz: "Tablice matematyczno-fizyczne", Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa 1991); należy pamiętać, że suma w wyrażeniu (3.1) rozciąga się tylko na takie wartości Δn , które posiadają taką samą parzystość jak samo n . Oczywiście pytanie Smoluchowskiego dotyczy sytuacji dla dużych wartości n (szacuje się, że w normalnych warunkach, w ciągu jednej sekundy z cząsteczką zawiesziny odziera się $n \approx 10^{20}$ cząsteczek ośrodka). Stosując do wyrażenia (3.1) wzór Stirlinga otrzymujemy z dobrym przybliżeniem, że

$$\langle \Delta n \rangle \sim \sqrt{n}. \quad (3.3)$$

Oznacza to, że w normalnych warunkach ogromna liczba, średnio rzędu 10^{10} nadmiarowych cząsteczek ośrodka, odziera się w ciągu jednej sekundy z jedną ze stron makromolekuły co może prowadzić do widocznego pod mikroskopem, nawet o niewielkim powiększeniu (rzędu 10^2) przemieszczenia cząsteczki zawiesziny. Używając języka teorii gier (często stosowanej na rynkach finansowych), możemy stwierdzić, że im dłużej toczy się gra tym średnia wielkość wygranej albo przegranej rośnie pierwiastkowo z czasem.

Otrzymany wynik nie jest sprzeczny z faktem, że średnia liczba cząsteczek ośrodka po obu stronach makromolekuły jest równa i wynosi $\langle n_L \rangle = \langle n_R \rangle = n/2$, gdyż jest on związany z fluktuacją liczby cząsteczek po obu stronach czyli z dyspersją $\sigma_J = \langle (n_J - \langle n_J \rangle)^2 \rangle$, $J = L, R$. Ponownie korzystając z rozkładu Bernoulliego można łatwo obliczyć, że

$$\sigma_J \sim \sqrt{n}, \quad J = L, R; \quad (3.4)$$

czyli nadmiar cząsteczek po jednej stronie jest związany z ich niedomiarem po drugiej co w efekcie daje identyczny rozrzut kwadratowy (a więc obcinający znak) - jest to w pełni zgodne z wynikiem (3.3).

Oczywiście, Smoluchowskiemu udało się rozwiązać wiele innych wątpliwości (na przykład dotyczących średniej prędkości cząsteczki zawiesziny), których tutaj już nie będziemy omawiać. Można powiedzieć, że *możliwość występowania znacznych fluktuacji gęstości ośrodka w bezpośrednim otoczeniu cząsteczki zawiesziny oraz przypadkowość w jej ruchu* przejawiająca się w postaci zygzakowatej trajektorii błędzącej makromolekuły, leżą u podstaw statystycznego charakteru ruchów Browna.

3.2 Fraktalne ruchy Browna

Jest jeszcze jeden prosty ale istotny aspekt ruchów Browna, na który zwrócił uwagę amerykański matematyk Benoit B. Mandelbrot a który później został przez niego wykorzystany do opisu ułamkowych (fraktalnych) ruchów Browna m.in. na rynkach finansowych (B.B. Mandelbrot: "Multifraktale rządzą na Wall Street", Świat Nauki

92 (1999) 64-67; G. Paladin, A. Vulpiani: "Anomalous Scaling Laws in Multifractal Objects", Physics Reports 156 (1987) 147-225). Mianowicie, w miarę upływu czasu cząsteczka zawiesziny odwiedza coraz większą liczbę punktów płaszczyzny, witytuując w granicy (jak się wydaje) prawie wszystkie równie często (średnio rzecz biorąc) zatem, wymiar fraktalny (Hausdorffa) d_f trajektorii brownowskiej jest równy 2 natomiast jej wymiar topologiczny d_{top} wynosi 1 (gdyż jest to nadal linia); do omawiania tych zagadnień powrócimy w rozdz. ... w kontekście zaobserwowanych przez angielskiego hydrologa H.E. Hursta w roku 1951 i analizowanych przez B.B. Mandelbrota (poczynając od roku 1971) fraktalnych ruchów Browna, dla których $0 < d_f < 2$, (H.-O. Peitgen, H. Jürgens, D. Saupe: "Granice Chaosu. Fraktale", tom 1, Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa 1997). Hurst badał wariancję (a więc fluktuacje) poziomu rzeki Nilu w zależności od czasu¹ zauważając, iż zależność ta jest superliniowa czyli persystentna (a nie liniowa jak dla ruchów Browna) co pozwoliło mu lepiej określić rozmiary zbiornika wodnego tamy a jednocześnie zapoczątkowało badania nad błędzeniami niebrownowskimi.

3.3 Zjawisko opalescencji krytycznej i temu podobne

Rola fluktuacji, wskazywana przez Smoluchowskiego, przejawia się szczególnie wyraźnie w zjawisku opalescencji krytycznej ("Słownik fizyczny", Wiedza Powszechna, Warszawa, 1984; "Encyklopedia Fizyki Współczesnej", PWN, Warszawa, 1983) które należy do szerokiej grupy zjawisk krytycznych związanych z rozpraszaniem promieniowania na układach znajdujących się w obszarze przejścia fazowego. Zjawisko to polega na tym że ośrodki, które w warunkach normalnych są dla promieniowania optycznie przezroczyste, w pobliżu punktu krytycznego mętnieją a natężenie promieniowania rozproszonego² na tych ośrodkach pod niezerowym kątem (względem kierunku fali padającej) gwałtownie rośnie - mówimy wtedy o rozpraszaniu krytycznym. Zatem w zjawisku opalescencji krytycznej mamy do czynienia z rozpraszaniem krytycznym. Zjawisko opalescencji krytycznej zostało wyjaśnione przez Mariana Smoluchowskiego. Wykazał on, że gwałtowny wzrost promieniowania rozproszonego (pod niezerowym kątem) jest spowodowany makroskopowymi fluktuacjami gęstości ośrodka w pobliżu punktu krytycznego - tym samym układ staje się wysoce niejednorodny a dużym zgęszczeniom ośrodka towarzyszą jego znaczne rozrzedzenia. Innymi słowy, te duże fluktuacje powodują wystąpienie zjawisk charakterystycznych dla ośrodków

¹Hurst, jako hydrolog, uczestniczył w projektowaniu tamy assuańskiej dysponując odnalezionymi rejestrami poziomu Nilu prowadzonymi przez Egipcjan od blisko 800 lat (J. Czekaj, M. Woś, J. Żarnowski: "Efektywność giełdowego rynku akcji w Polsce z perspektywy dziesięciolecia", Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa 2001).

²Jest to tzw. rayleighowskie rozpraszanie czyli rozpraszanie światła bez zmiany jego długości fali, "Encyklopedia fizyki współczesnej", PWN Warszawa 1983.

mętnych - obok wspomnianych powyżej także takich jak zjawisko Tyndalla³. Smoluchowski zauważył na przykład, że fluktuacje gęstości powietrza (przede wszystkim cząsteczek tlenu i azotu) wywołują lokalne zmiany współczynnika załamania światła, powodując przez to wzrost rozpraszania światła w atmosferze. Ponieważ rozpraszanie to jest największe dla fal krótkich⁴, więc w wyniku przechodzenia światła przez atmosferę niebo uzyskuje zabarwienie błękitne. Analogiczne zjawiska występują również w magnetykach gdzie obserwuje się krytyczne rozpraszanie neutronów na fluktuacjach momentów magnetycznych w pobliżu temperatury Curie; podobnie rzecz się ma o krytycznym rozpraszaniem promieni rentgenowskich na ferroelektrykach i stopach podwójnych.

W pierwszej części pracy dajemy przegląd najważniejszych elementów tematyki dotyczącej procesów gaussowskich - jest to konieczny wstęp do procesów niegaussowskich, stanowiących zasadniczą część (drugą), niniejszej pracy.

3.4 Wstępne definicje

Rozważamy przykładowo błędzenie przypadkowe pojedynczej cząsteczki zawiesziny przedstawione schematycznie na rys.3.1, gdzie wektory $\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_n$ oznaczają kolejne przypadkowe przemieszczenia cząsteczki (n jest całkowitą liczbą tych przemieszczeń). Sumaryczne (wypadkowe) przemieszczenie cząsteczki wyraża się wzorem

$$\vec{X}(n) - \vec{X}_0 = \vec{x}_1 + \vec{x}_2 + \dots + \vec{x}_n, \quad (3.5)$$

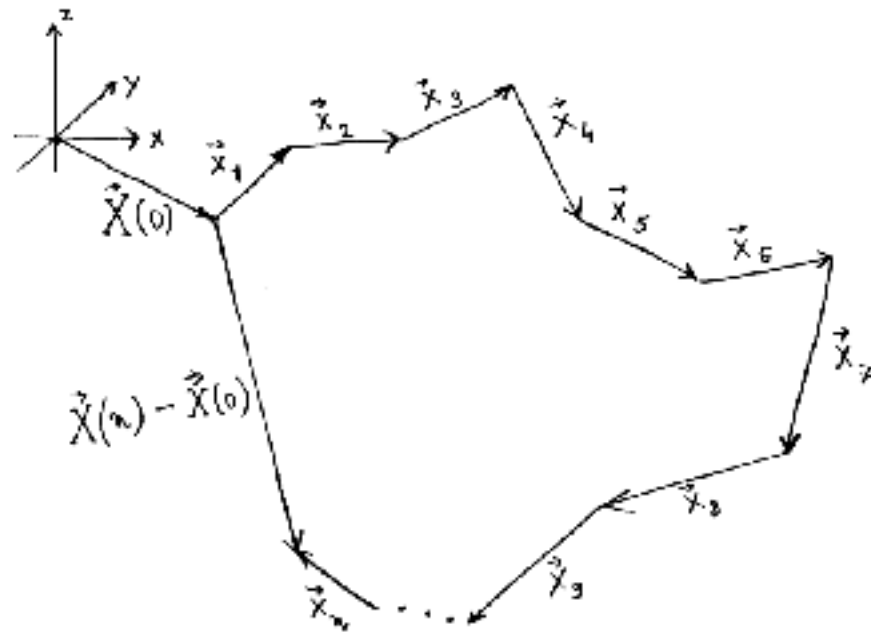
(gdzie \vec{X}_0 jest położeniem początkowym cząsteczki zawiesziny a $\vec{X}(n)$ jej położeniem końcowym); z matematycznego punktu widzenia, zarówno pojedyncze jak też sumaryczne przemieszczenia traktujemy jak (wektorowe) zmienne losowe tzn. takie co do których wiadomo, że ich występowanie opisane jest jakimiś rozkładami prawdopodobieństwa - w dalszym ciągu przyjmujemy, że *pojedyncze przemieszczenia opisane są identycznym rozkładem*, co wynika bezpośrednio z obserwacji.

3.5 Pierwszy i drugi moment

Pytanie jakie stawiamy na wstępie dotyczy zależności średniej z kwadratu wypadkowego przemieszczenia $\langle (\vec{X}(t) - \vec{X}_0)^2 \rangle$ cząsteczki zawiesziny (startującej z punktu \vec{X}_0) od czasu t ; przy okazji, obliczamy średnią z sumarycznego przemieszczenia $\langle \vec{X} - \vec{X}_0 \rangle$.

³Ogólnie mówiąc, zjawisko to występuje np. przy przechodzeniu światła przez ośrodek wysoce niejednorodny; niejednorodność ta może być spowodowana nie tylko makroskopowymi fluktuacjami ale np. makrokolektami aero- lub hydrosolami takimi jak dym, mgła albo koloid, "Słownik fizyki", Prószyński i S-ka Warszawa 1999.

⁴Moc rozprószonej fali elektromagnetycznej, czyli reemitowanej przez drgające dipole cząsteczek gazów pobudzonych przez falę padającą, jest zgodnie ze wzorem Rayleigha, wprost proporcjonalna do kwadratu objętości (kulistego) obiektu rozpraszającego i odwrotnie proporcjonalna do czwartej potęgi długości fali co faworyzuje oczywiście fale krótkie.



Rysunek 3.1: Prosta graficzna reprezentacja sumarycznej zmiennej losowej $\vec{X}(n) - \vec{X}(0) = \sum_{j=1}^n \vec{x}_j$.

Występująca tutaj oraz wstępnie w tym rozdziale średnia (którą oznaczamy przez $\langle \dots \rangle$) jest średnią (arytmetyczną) po zespole statystycznym doświadczeń podobnych o czym jest mowa poniżej (patrz rys.3.2). W przypadku *błądzenia cząsteczek statystycznie niezależnych*, co ma miejsce np. dla rozcieńczonych zawieszin, taka średnia jest oczywiście równoważna średniej (arytmetycznej) po liczbie cząsteczek.

Na rys.3.2 przedstawiono zespół statystyczny doświadczeń przeprowadzonych w identycznych warunkach termodynamicznych, co oczywiście nie oznacza, że wyniki tych doświadczeń są identyczne. Jak widać, w różnych doświadczeniach sumaryczne przemieszczenie cząsteczki $\vec{X}^l(n) - \vec{X}_0^l$ jest (na ogół) różne podobnie jak różne są (na ogół) pojedyncze przemieszczenia \vec{x}_j^l , gdzie $j = 1, 2, \dots, n$, numeruje kolejne pojedyncze przemieszczenia, natomiast $l = 1, \dots, L$, numeruje kolejne doświadczenia w zespole statystycznym doświadczeń (L jest liczebnością tego zespołu - w praktyce dobiera się $L \gg 1$). Możemy teraz zdefiniować potrzebne nam pierwsze dwa momenty zmiennej losowej $\vec{X}(n) - \vec{X}_0$ w postaci następującej średniej arytmetycznej,

$$\langle (\vec{X}(n) - \vec{X}_0)^m \rangle = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \sum_{l=1}^L (\vec{X}^l(n) - \vec{X}_0^l)^m \approx \frac{1}{L} \sum_{l=1}^L (\vec{X}^l(n) - \vec{X}_0^l)^m, \quad m = 1, 2, \quad (3.6)$$

którą nazywa się właśnie *średnią po zespole*. (Zdefiniowana powyżej operacja nie

zawiera oczywiście średniowania po liczbie cząsteczek gdyż dotyczy przypadku błędzenia pojedynczej cząsteczki zawiesziny.) Równość przybliżona dotyczy przypadku, gdy średnie są skończone bowiem wówczas, na mocy *prawa wielkich liczb*, można z kontrolowaną dokładnością przybliżyć wartość graniczną przez średnią dla odpowiednio dobranego skończonego L (często rzędu np. 10^4). Niezbędne własności średniej po despolu zostały omówione w Dodatku B.

Zakładamy, że przestrzeń, w której odbywa się błędzenie jest izotropowa (przypadek przestrzeni anizotropowej związanej z istnieniem zewnętrznego pola rozważamy w dalszych rozdziałach). Dla L dostatecznie dużego otrzymuje się z dobrym przybliżeniem, że pierwszy moment (odpowiadający przyjęciu w wyrażeniu (3.6) $m = 1$),

$$\langle \vec{X}(n) - \vec{X}_0 \rangle = 0, \quad (3.7)$$

co dobrze widać na rys.3.3. Przedstawiono na nim zależność $\langle \vec{X}(n) - \vec{X}_0 \rangle$ od L uzyskaną na drodze symulacji Monte Carlo⁵. Wynik ten jest niemal oczywisty jeżeli uprzątniemy sobie, że dla dostatecznie dużych L sumaryczne przemieszczenie uzyskane w dowolnie wybranym doświadczeniu posiada, z dobrym przybliżeniem, swoje kontrprzemieszczenie (przemieszczenie przeciwne) otrzymane w jakimś innym doświadczeniu.

Wobec tego, obliczenie drugiego momentu $\langle (\vec{X}(n) - \vec{X}_0)^2 \rangle$ jest równoważne (w przypadku przestrzeni izotropowej) wyznaczeniu dyspersji (wariancji) wypadkowego przemieszczenia $\vec{X}(n) - \vec{X}_0$,

$$\begin{aligned} (\sigma_X(n))^2 &= \langle (\vec{X}(n) - \vec{X}_0)^2 \rangle - \langle \vec{X}(n) - \vec{X}_0 \rangle^2 (= \langle (\vec{X}(n))^2 \rangle - \langle \vec{X}(n) \rangle^2) \\ &= \langle (\vec{X}(n) - \vec{X}_0)^2 \rangle; \end{aligned} \quad (3.8)$$

wyprowadzamy związek pomiędzy dyspersją $\sigma_X(n)$ wypadkowego przemieszczenia (składającego się z n pojedynczych przemieszczeń) a dyspersją σ_x pojedynczego przemieszczenia. Związek ten stanowi pierwszy punkt tezy *centralnego twierdzenia granicznego*, które formułujemy w dalszej części.

Z (3.5), (3.6), (3.7) oraz (3.8) otrzymujemy natychmiast, że

$$\begin{aligned} (\sigma_X(n))^2 &= \langle (\vec{X}(n) - \vec{X}_0)^2 \rangle = \langle (\sum_{j=1}^n \vec{x}_j)^2 \rangle \\ &= \sum_{j=1}^n \langle (\vec{x}_j)^2 \rangle + \sum_{i \neq j} \langle \vec{x}_i \cdot \vec{x}_j \rangle, \end{aligned} \quad (3.9)$$

gdzie skorzystaliśmy z własności addytywności średniej, wynikającej bezpośrednio z określenia (3.6), mówiącej że *średnia sumy zmiennych losowych jest równa sumie średnich tych zmiennych*.

Wykorzystujemy teraz własność multiplikatywności średniej mówiącą, że *średnia z iloczynu niezależnych zmiennych losowych jest równa iloczynowi średnich tych*

⁵Dla uproszczenia i przyspieszenia symulacji wszystkie elementarne przemieszczenia są tutaj jednakowej długości.

zmiennych; własność ta wynika także z (3.6) po odpowiednim przegrupowaniu składników wchodzących w skład występującej tam sumy. Dla rozcieńczonych zawieszin, nie dostrzegamy w ruchach Browna żadnej zależności (lub inaczej mówiąc korelacji) pomiędzy różnymi pojedynczymi przemieszczeniami cząsteczek zawiesziny - stąd założenie o statystycznej niezależności tych przemieszczeń jest usprawiedliwione. Zatem wykorzystując równość (3.9), otrzymujemy natychmiast

$$(\sigma_X(n))^2 = \sum_{j=1}^n \langle (\vec{x}_j)^2 \rangle = n \langle (\vec{x})^2 \rangle = n(\sigma_x)^2, \quad (3.10)$$

gdzie opuściliśmy wskaźnik indeksujący numer kroku aby podkreślić niezależność średniej z kwadratu pojedynczego przemieszczenia od jego numeru co wynika z faktu, że pojedyncze przemieszczenia są równoprawne - jest to skutek jednorodności czasu oraz jednorodności przestrzeni. Ponadto, podobnie jak dla sumarycznego przemieszczenia, skrótyliśmy z izotropowości przestrzeni prowadzącej do znikania pierwszego momentu pojedynczego przemieszczenia

$$\langle \vec{x}_j \rangle = 0, \quad j = 1, 2, \dots, n. \quad (3.11)$$

Wyrażenie (3.10) jest kluczowym gdyż pozwala (co wykażemy w dalszej części) wyrazić tak ważną wielkość jaką jest (makroskopowy) współczynnik dyfuzji za pomocą wielkości mikroskopowych charakteryzujących pojedyncze przemieszczenia cząsteczek.

Równość (3.10) można przepisać w postaci jawnie uwzględniającej czas; w tym celu wprowadzamy elementarny przedział czasu τ charakteryzujący średni czas upływający pomiędzy kolejnymi, pojedynczymi przemieszczeniami (istnienie takiego czasu oznacza, że rozkład czasów oczekiwania pomiędzy kolejnymi przemieszczeniami dany jest rozkładem Poissona - patrz Dodatek ...). Stąd,

$$(\sigma_X(t))^2 = \langle (\vec{X}(t) - \vec{X}_0)^2 \rangle = 2d(t - t_0)D, \quad (3.12)$$

gdzie d jest wymiarem przestrzeni Euklidesowej, w której zachodzi błędzenie, $t - t_0 = n\tau$ czasem, natomiast

$$D = \frac{1}{2d} \frac{(\sigma_x)^2}{\tau}, \quad (3.13)$$

określa, o czym jest mowa także w dalszej części, współczynnik dyfuzji cząstek zawiesziny w nieobecności zewnętrznego pola. Należy podkreślić, że powyższe przejście do obrazu ciągłego w czasie jest możliwe, z dobrym przybliżeniem, tylko wtedy gdy $t - t_0 \gg \tau$ co odpowiada wykonaniu przez cząsteczkę dużej liczby przemieszczeń - oznacza to, że $n \gg 1$ i w rezultacie cząsteczka ma możliwość penetrowania znacznych obszarów przestrzeni. Innymi słowy, rozpatrujemy *błędzenie cząsteczki w skali makroskopowej*, które tym samym jest scharakteryzowane makroskopowym współczynnikiem D . Zatem ściśle rzecz biorąc, wyrażenie (3.12) należy zapisać w postaci

wykorzystującej przejście graniczne

$$D = \lim_{t \rightarrow t_0 \rightarrow \infty} \frac{1}{2d} \frac{(\sigma_X(t))^2}{t - t_0}, \quad (3.14)$$

podkreślającej makroskopowy charakter współczynnika dyfuzji D . Jak widać, współczynnik dyfuzji można wyznaczać na dwa zasadniczo różne sposoby: 1) makroskopowy, za pomocą wyrażenia (3.14) oraz 2) mikroskopowy, stosując wyrażenie (3.13). Jest to uderzająca dualność sugerująca samopodobny, niezależny od skali w jakiej prowadzone są pomiary, charakter błędzenia - do problemu tego powrócimy w dalszej części.

3.6 Propagator

Celem niniejszego rozdziału jest wyznaczenie asymptotycznej gęstości prawdopodobieństwa warunkowego $\mathcal{P}(\vec{X}, t \mid \vec{X}_0, t_0)$ znalezienia cząsteczki zawieszony w położeniu \vec{X} w chwili t pod warunkiem, że w chwili początkowej t_0 cząsteczka znajdowała się w położeniu \vec{X}_0 . Cel ten zostanie zrealizowany dzięki odpowiedniej dekompozycji propagatora. Przy okazji zostanie wyprowadzona druga część *Centralnego Twierdzenia Granicznego*.

3.6.1 Dekompozycja propagatora

Innymi słowy, naszym celem jest znalezienie jednocząsteczkowego propagatora - możemy go wyrzucić w postaci następującej dekompozycji (superpozycji),

$$\mathcal{P}(\vec{X}, t \mid \vec{X}_0, t_0) = \sum_{n=0}^{\infty} \mathcal{P}(\vec{X}, t, n \mid \vec{X}_0, t_0), \quad (3.15)$$

gdzie $\mathcal{P}(\vec{X}, t, n \mid \vec{X}_0, t_0)$ jest gęstością prawdopodobieństwa warunkowego znalezienia cząsteczki zawieszony w położeniu \vec{X} w chwili t w wyniku dokładnie n przemieszczeń pod warunkiem, że w chwili początkowej t_0 cząsteczka znajdowała się w położeniu \vec{X}_0 . W dalszym ciągu $\mathcal{P}(\vec{X}, t, n \mid \vec{X}_0, t_0)$ można zapisać w postaci,

$$\mathcal{P}(\vec{X}, t, n \mid \vec{X}_0, t_0) = \mathcal{P}(\vec{X} - \vec{X}_0 \mid t - t_0, n) \psi(t - t_0, n), \quad (3.16)$$

gdzie $\mathcal{P}(\vec{X} - \vec{X}_0 \mid t - t_0, n)$ jest gęstością prawdopodobieństwa warunkowego przemieszczenia cząsteczki o wektor $\vec{X} - \vec{X}_0$ pod warunkiem, że nastąpiło to w przeciągu czasu $t - t_0$ w wyniku n pojedynczych przemieszczeń; $\psi(t - t_0, n)$ jest prawdopodobieństwem wykonania przez cząsteczkę w przeciągu czasu $t - t_0$ dokładnie n przemieszczeń.

Obecnie zajmijmy się obliczeniem gęstości prawdopodobieństwa $\mathcal{P}(\vec{X} - \vec{X}_0 \mid t - t_0, n)$. W niniejszej części zakładamy, że jest ono niezależne od czasu $t - t_0$ co ma miejsce wtedy gdy środowisko, w którym zachodzi błędzenie cząsteczki pozostaje

w każdej chwili w stanie równowagi statystycznej (dopuszczającej, rzecz jasna, istnienie fluktuacji). Zatem, ma miejsce następująca oczywista konwolucyjna równość łańcuchowa,

$$\begin{aligned}\mathcal{P}(\vec{X} - \vec{X}_0 | n) &= \int \mathcal{P}(\vec{X} - \vec{X}_1 | n-1) \mathcal{P}(\vec{X}_1 - \vec{X}_0 | 1) d\vec{X}_1 \\ &= \mathcal{P}(\vec{X} - \vec{X}_1 | n-1) \otimes \mathcal{P}(\vec{X}_1 - \vec{X}_0 | 1),\end{aligned}\quad (3.17)$$

gdzie całkowanie w (3.17) jest przeprowadzone po całej, nieograniczonej przestrzeni euklidesowej; wykonując kolejne kroki rekurencyjne (dla $n = 2, 3, \dots$) otrzymujemy następującą n -krotną konwolucję

$$\begin{aligned}\mathcal{P}(\vec{X} - \vec{X}_0 | n) &= \mathcal{P}(\vec{X} - \vec{X}_{n-1} | 1) \otimes \dots \otimes \mathcal{P}(\vec{X}_3 - \vec{X}_2 | 1) \\ &\otimes \mathcal{P}(\vec{X}_2 - \vec{X}_1 | 1) \otimes \mathcal{P}(\vec{X}_1 - \vec{X}_0 | 1).\end{aligned}\quad (3.18)$$

Po dokonaniu transformacji Fouriera i skorzystaniu z własności, że transformata Fouriera konwolucji ciągu funkcji jest równa iloczynowi transformat Fouriera tych funkcji wyrażenie (3.18) przybiera postać,

$$\tilde{\mathcal{P}}(\vec{k} | n) = \tilde{\mathcal{P}}(\vec{k} | 1)^n = \exp(n \ln(\tilde{\mathcal{P}}(\vec{k} | 1))), \quad n = 1, 2, \dots, \quad (3.19)$$

gdzie

$$\tilde{f}(\vec{k}) = \int d\vec{X} \mathcal{F}(\vec{X}) \exp(i\vec{k} \cdot \vec{X}) \quad (3.20)$$

jest transformatą Fouriera funkcji $f(\vec{X})$ (całkowanie w (3.20) jest, identycznie jak w (3.17), przeprowadzone po całej, nieograniczonej przestrzeni euklidesowej).

W dalszym ciągu wprowadzimy prostsze oznaczenia, mianowicie

$$\tilde{\mathcal{P}}(\vec{k} | 1) = \tilde{p}(\vec{k}) \quad (3.21)$$

oraz

$$\mathcal{P}(\vec{X} - \vec{X}_0 | 1) = \mathcal{P}(\vec{X} - \vec{X}_0); \quad (3.22)$$

\tilde{p} nosi nazwę funkcji tworzącej prawdopodobieństwa \mathcal{P} , czasami nazywa się ją także czynnikiem strukturalnym błędzenia przypadkowego. Innymi słowy,

$$\tilde{p}(\vec{k}) = \int d\vec{X} \mathcal{P}(\vec{X}) \exp(i\vec{k} \cdot \vec{X}), \quad (3.23)$$

gdzie stosujemy oznaczenia $\vec{k} \equiv (k_x, k_y, \dots) \equiv (k_1, \dots, k_d) \equiv \{k_j\}_{j=1}^d$ (przy czym d jest wymiarem przestrzeni Euklidesowej); powyższe równanie wraz z (3.19) pozwoli nam podać warunki w jakich buduje się rozkład Gaussa dla n -krokowej zmiennej losowej (czyli sumarycznego przemieszczenia $\vec{X} - \vec{X}_0$).

Wprowadzimy teraz definicję rozkładów stabilnych oraz rozkładów nieskończenie podzielnych. Mianowicie, o *rozkładzie stabilnym* mówimy wtedy i tylko wtedy gdy $\forall \vec{Y}$ prawdopodobieństwo $\mathcal{P}(\vec{Y} | n)$ jest, z dokładnością do czynnika skalującego (zarówno zmienną niezależną jak i samo prawdopodobieństwo), równe $\mathcal{P}(\vec{Y} | 1)$ tzn. gdy istnieje taka liczba a zależna od n , że

$$a^d \mathcal{P}(a\vec{Y} | n) = \mathcal{P}(\vec{Y} | 1), \quad n \geq 1. \quad (3.24)$$

Oznacza to, że rozciągnięciu zmiennej niezależnej musi towarzyszyć splaszczenie rozkładu tak aby zachować jego normalizację. Z relacji skalowania (3.24), (w oparciu o (3.19) i (3.21)) wynika, że

$$\bar{p}(a\vec{k}) = [\bar{p}(\vec{k})]^n \equiv \bar{p}(\vec{k}) = [\bar{p}(a\vec{k})]^n. \quad (3.25)$$

Z rozkładem *nieskończenie podzielnym* mamy do czynienia wtedy i tylko wtedy gdy dla każdego naturalnego n jego funkcja charakterystyczna $\bar{\phi}(\vec{k})$ jest n -tą potęgą jakiejś funkcji charakterystycznej $\bar{\phi}_n(\vec{k})$, czyli

$$\bar{\phi}(\vec{k}) = [\bar{\phi}_n(\vec{k})]^n. \quad (3.26)$$

Zostanie pokazane w dalszej części, że rozkłady stabilne są jednocześnie nieskończenie podzielne (ale nie odwrotnie, co schematycznie ilustruje rys.3.4).

Przykład 1: rozkład Gaussa. Obserwacje ruchów Browna prowadzą do wniosku, że rozkład gęstości prawdopodobieństwa kolejnego pojedynczego przemieszczenia cząsteczki zawieszyny jest niezależny od jego numeru. Powyższy wniosek jest niemal oczywisty w świetle założenia o statystycznej niezależności pojedynczych przemieszczeń oraz jednorodności czasu. Przypuśćmy, że rozkład ten jest dany krzywą Gaussa, co stanowi dobre przybliżenie rzeczywistej sytuacji. Zatem, niech

$$\mathcal{P}(\vec{x}_j) = \mathcal{P}_G(\vec{x}_j) = \frac{1}{[2\pi(\sigma_x)^2]^{d/2}} \exp(-(\vec{x}_j)^2/2(\sigma_x)^2) \quad (3.27)$$

(gdzie skróciliśmy z oznaczeń (3.5) i (3.22)). Podstawiając powyższy rozkład do definicji funkcji charakterystycznej (3.21), otrzymujemy funkcję charakterystyczną, $\bar{p}_G(\vec{k})$, rozkładu Gaussa także w postaci funkcji Gaussa,

$$\bar{p}_G(\vec{k}) = \exp(-(\sigma_x)^2 k^2). \quad (3.28)$$

Zgodnie z powyższą zależnością oraz relacją (3.19), funkcja charakterystyczna rozkładu sumarycznej zmiennej losowej $\vec{X}(n)$ (patrz (3.5)) przyjmuje także, dla każdego $n \geq 1$, postać funkcji Gaussa,

$$\bar{P}_G(\vec{k} | n) = \exp(-(\sigma_x)^2 k^2 n). \quad (3.29)$$

Stąd, odwracając relację (3.23) otrzymujemy,

$$P_G(\vec{X}(n)) = \frac{1}{[2\pi(\sigma_x)^2]^{d/2}} \exp(-(\vec{X}(n))^2/2(\sigma_x)^2), \quad (3.30)$$

rozkład Gaussa, przy czym dyspersja tego rozkładu σ_X jest dana wzorem (3.10). Jak widać, rozkład Gaussa jest rozkładem stabilnym, przy czym czynnik skalujący wynosi tutaj $a = n^{1/2}$. Łatwo sprawdzić, iż jest on także rozkładem nieskończenie podzielny.

Przykład 2: rozkład Lorentza. Przypuśćmy, że w pewnych warunkach, np. w pobliżu punktu krytycznego czy też na granicy faz, błędząca cząsteczka może od czasu do czasu wpadać w poślizg ("zrywać" tarcie) co może prowadzić z rzadka do długich pojedynczych przemieszczeń. Tego typu zachowanie (o czym będzie obszernie mowa w dalszej części) może prowadzić do rozkładu Lorentza, który nie posiada skończonej dyspersji. Funkcja charakterystyczna rozkładu Lorentza jest dana w postaci następującej funkcji wykładniczej,

$$\tilde{p}_L(\vec{k}) = \exp(-\gamma |\vec{k}|). \quad (3.31)$$

Stąd, funkcja gęstości rozkładu Lorentza przyjmuje postać,

$$\mathcal{P}_L(\vec{x}_j) = \frac{\gamma}{\pi} \frac{1}{\gamma^2 + (\vec{x}_j)^2}, \quad (3.32)$$

przy czym rozważamy dla prostoty tylko przypadek jednowymiarowy. Podstawiając, podobnie jak w poprzednim przykładzie, wyrażenie (3.31) do relacji (3.19) otrzymujemy funkcję charakterystyczną sumarycznej zmiennej losowej,

$$\tilde{P}_L(\vec{k} | n) = \exp(-\gamma |\vec{k}| | n) \quad (3.33)$$

a stąd jej rozkład

$$\mathcal{P}_L(\vec{X}(n)) = \frac{\gamma}{\pi} \frac{1}{n \gamma^2 + (\vec{X}(n)/n)^2}. \quad (3.34)$$

Jak widać, czynnik skalujący $a = n$, czyli rozkład Lorentza jest stabilny oraz nieskończenie podzielny.

Przykład 3. Rozkład Zolotariewa. Sytuację fizyczną omówioną w poprzednim przykładzie można także opisać za pomocą rozkładu Zolotariewa.

Kończąc omawianie tych przykładów zauważmy, że wszystkie one dają się wyrazić za pomocą wspólnej, ogólnej funkcji charakterystycznej

$$\tilde{p}(\vec{k}) = \exp(-const |\vec{k}|^\beta), \quad (3.35)$$

gdzie wykładnik $0 \leq \beta \leq 2$.

3.6.2 Rozkłady asymptotycznie gaussowskie

Rozwińmy w szereg Taylora funkcję charakterystyczną $\tilde{p}(\vec{k})$,

$$\tilde{p}(\vec{k}) = 1 - \frac{1}{2} k^2 (\sigma_x)^2 + \Theta(\{(k_j)^4\}_{j=1,d}) \quad (3.36)$$

gdzie

$$(\sigma_x)^2 = \int d\vec{X} \vec{X}^2 \mathcal{P}(\vec{X}); \quad (3.37)$$

przyjęliśmy tutaj, że przestrzeń jest izotropowa (np. nie występuje dryf) co oznacza, że funkcja charakterystyczna jest parzystą funkcją \vec{k} (czyli pierwsza pochodna po \vec{k} znika oraz reszta Θ jest także parzystą funkcją \vec{k}); ponadto, założyliśmy, że spełniony jest pierwszy punkt *centralnego twierdzenia granicznego* tzn. $\sigma_x < \infty$. Należy podkreślić, że rozwinięcie (3.36) nie oznacza, że wyższe (niż druga) pochodne funkcji charakterystycznej istnieją - w ogólności tak być nie musi. W dalszym ciągu, dla małych wartości $|\vec{k}|$ tzn. dla $k_j^2 \ll 1$, $j = 1, \dots, d$, korzystając z (3.36) możemy z dobrym przybliżeniem wyrazić (3.19) w postaci funkcji wykładniczej

$$\tilde{\mathcal{P}}(\vec{k} | n) \approx \exp\left(-\frac{1}{2}(\sigma_X(n))^2 k^2\right), \quad (3.38)$$

gdzie $(\sigma_X(n))^2$ dane jest wyrażeniem (3.10). Oczywiście, gdyby nie był spełniony pierwszy punkt CTG rozwinięcie nie byłoby możliwe i wtedy zamkniętej postaci $\tilde{\mathcal{P}}(\vec{k} | n)$ musielibyśmy poszukiwać na innej drodze; takiej właśnie sytuacji dotyczy część druga niniejszej pracy. W oparciu o (3.38) możemy wyznaczyć $\tilde{\mathcal{P}}(\vec{X} - \vec{X}_0 | n)$ jako transformatę Fouriera

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{P}}(\vec{X} - \vec{X}_0 | n) &= \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \int d\vec{k} \exp(-i\vec{k} \cdot (\vec{X} - \vec{X}_0)) \tilde{\mathcal{P}}(\vec{k} | n) \\ &\approx \frac{1}{[2\pi(\sigma_X(n))^2]^{d/2}} \exp[-(\vec{X} - \vec{X}_0)^2 / 2(\sigma_X(n))^2]; \end{aligned} \quad (3.39)$$

przy czym powyższa, gaussowska postać rozkładu $\tilde{\mathcal{P}}(\vec{X} - \vec{X}_0 | n)$ jest słuszną dla dużych wartości przemieszczenia, tzn. dla $|\vec{X} - \vec{X}_0| \gg 1$. Oczywiście, warunek ten da się w zasadzie spełnić wtedy gdy $n \gg 1$ czyli dla asymptotycznie dużej liczby pojedynczych przemieszczeń. Zatem rozkład $\tilde{\mathcal{P}}(\vec{X} - \vec{X}_0 | n)$ przybiera asymptotycznie postać rozkładu Gaussa (3.39). Stanowi to treść drugiego (i ostatniego) punktu *centralnego twierdzenia granicznego*.

3.7 Proces Markowa - równanie Mistrza

Bazując na obserwacji ruchów Browna pojedynczej cząsteczki zawiesziny, można zaproponować do ich opisu równanie Bachelier'a-Chapmana-Kolmogorowa (S. Chandrasekhar: *Stochastic Problems in Physics and Astronomy*, *Review of Modern Physics*, 15 (1943) 1-89; E. W. Montroll, B. J. West: *Studies in Statistical Mechanics*, Vol. VII, Eds. E.W. Montroll, J.L. Lebowitz, North-Holland, Amsterdam 1979; N.G. van Kampen: *Procesy stochastyczne w fizyce i chemii*, PWN, Warszawa 1990 (tłum. z j. angielskiego); R. Kubo, M. Toda, N. Hashitane: *Fizyka statystyczna II. Mechanika statystyczna stanów nierównowagowych*, Wydawnictwa Naukowe

PWN, Warszawa 1991; I.I. Gikhman, A.V. Skorokhod: "Introduction to the Theory of Random Processes", Dover Publ. Inc., New York 1996 (tłum. z j. rosyjskiego))

$$\begin{aligned} \mathcal{P}(\vec{X}, t + \Delta t | \vec{X}_0, t_0) = \\ \sum_{\Delta \vec{X}} W(\vec{X}, t + \Delta t | \vec{X} - \Delta \vec{X}, t) \mathcal{P}(\vec{X} - \Delta \vec{X}, t | \vec{X}_0, t_0) = \\ W(\vec{X}, t + \Delta t | \vec{X}, t) \mathcal{P}(\vec{X}, t | \vec{X}_0, t_0) + \\ \sum_{\Delta \vec{X} \neq 0} W(\vec{X}, t + \Delta t | \vec{X} - \Delta \vec{X}, t) \mathcal{P}(\vec{X} - \Delta \vec{X}, t | \vec{X}_0, t_0), \end{aligned} \quad (3.40)$$

która pozwala uzyskać równanie ewolucji na wielkość $\mathcal{P}(\vec{X}, t | \vec{X}_0, t_0)$ zdefiniowaną jako prawdopodobieństwo warunkowe (lub gęstość prawdopodobieństwa warunkowego o ile operujemy ciągłymi zmiennymi losowymi⁶) znalezienia cząsteczki w położeniu \vec{X} w chwili t pod warunkiem, że początkowo w chwili t_0 cząsteczka ta znajdowała się w położeniu \vec{X}_0 . *Prawdopodobieństwo to jest kluczową wielkością charakteryzującą proces stochastyczny.* Oczywiście, pełny opis procesu stochastycznego Markowa uzyskujemy dopiero po wprowadzeniu (niemal oczywistej) reguły łączącej wspomniane prawdopodobieństwo warunkowe z jednoznaczową funkcją rozkładu

$$\mathcal{P}(\vec{X}, t + \Delta t) = \sum_{\Delta \vec{X}} W(\vec{X}, t + \Delta t | \vec{X} - \Delta \vec{X}, t) \mathcal{P}(\vec{X} - \Delta \vec{X}, t). \quad (3.41)$$

Sumowanie po prawej stronie równości (3.40) zawiera element, w którym $\Delta \vec{X} = 0$; opisuje on przetrwanie cząsteczki w położeniu \vec{X} od chwili t do $t + \Delta t$. Element ten jest prawdopodobieństwem warunkowym znalezienia cząsteczki w położeniu \vec{X} w chwili $t + \Delta t$ pod warunkiem, że w położeniu tym pozostawała od chwili t . Gdy przemieszczenie $\Delta \vec{X} \neq 0$, element przejścia $W(\vec{X}, t + \Delta t | \vec{X} - \Delta \vec{X}, t)$ jest prawdopodobieństwem warunkowym znalezienia cząsteczki w położeniu \vec{X} w chwili $t + \Delta t$ pod warunkiem, że wcześniej, w chwili t cząsteczka znajdowała się w położeniu $\vec{X} - \Delta \vec{X}$. Zauważmy, że prawdopodobieństwa W , czyli element przetrwania i elementy przejścia, definiują jednoznacznie proces stochastyczny; innymi słowy, *proces stochastyczny można utożsamiać ze zbiorem $\{W\}$, którego elementy spełniają warunek normalizacyjny*

$$\begin{aligned} \sum_{\Delta \vec{X}} W(\vec{X} - \Delta \vec{X}, t + \Delta t | \vec{X}, t) = \\ W(\vec{X}, t + \Delta t | \vec{X}, t) + \sum_{\Delta \vec{X} \neq 0} W(\vec{X} - \Delta \vec{X}, t + \Delta t | \vec{X}, t) = 1. \end{aligned} \quad (3.42)$$

Z powyższego warunku wyznaczamy element opisujący przetrwanie i podstawiamy

⁶Operowanie ciągłymi zmiennymi losowymi prowadzi do równania Mistrza niemal identycznego z uzyskanym tutaj (3.44) z taką różnicą, że występujące w takim równaniu sumowanie należy zastąpić całkowaniem - niestety jego wyprowadzenie wymagałoby bardziej wyrafinowanego podejścia.

do równości (3.40), otrzymując po prostych przekształceniach wygodną postać pośrednią, zawierającą już tylko jeden rodzaj elementów,

$$\begin{aligned} \frac{\mathcal{P}(\vec{X}, t + \Delta t | \vec{X}_0, t_0) - \mathcal{P}(\vec{X}, t | \vec{X}_0, t_0)}{\Delta t} = \\ \sum_{\Delta \vec{X} \neq 0} \left[\frac{W(\vec{X}, t + \Delta t | \vec{X} - \Delta \vec{X}, t)}{\Delta t} \mathcal{P}(\vec{X} - \Delta \vec{X}, t | \vec{X}_0, t_0) - \right. \\ \left. \frac{W(\vec{X} - \Delta \vec{X}, t + \Delta t | \vec{X}, t)}{\Delta t} \mathcal{P}(\vec{X}, t | \vec{X}_0, t_0) \right]; \end{aligned} \quad (3.43)$$

wykonując w powyższym wyrażeniu (obustronne) przejście graniczne $\Delta t \rightarrow 0$ otrzymujemy poszukiwane różniczkowo-różnicowe równanie Mistra na ewolucję prawdopodobieństwa warunkowego $\mathcal{P}(\vec{X}, t | \vec{X}_0, t_0)$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{P}(\vec{X}, t | \vec{X}_0, t_0)}{\partial t} = \sum_{\Delta \vec{X} \neq 0} [\Gamma(\Delta \vec{X}) \mathcal{P}(\vec{X} - \Delta \vec{X}, t | \vec{X}_0, t_0) - \\ \Gamma(-\Delta \vec{X}) \mathcal{P}(\vec{X}, t | \vec{X}_0, t_0)], \end{aligned} \quad (3.44)$$

gdzie element przejścia

$$\Gamma(\Delta \vec{X}) \stackrel{\text{def}}{=} \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{W(\vec{X}, t + \Delta t | \vec{X} - \Delta \vec{X}, t)}{\Delta t} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{W(\Delta \vec{X}, \Delta t)}{\Delta t}, \quad (3.45)$$

oraz analogicznie zdefiniowany $\Gamma(-\Delta \vec{X})$, są *jednorodnymi* prawdopodobieństwami przejścia na jednostkę czasu (uzyskanymi przy założeniu jednorodności czasoprzestrzennej prawdopodobieństw przejść W) zwanymi także funkcjami intensywności procesu statystycznego (stochastycznego) albo po prostu intensywnościami procesu statystycznego - elementy te muszą być zadane aby można było efektywnie rozwiązać równanie ewolucji (3.44); przy wprowadzeniu tych elementów skróciliśmy z własności jednorodności przestrzeni oraz jednorodności czasu nie korzystając przy tym z anizotropowości przestrzeni. Proces Markowa posiadający tego typu własność nosi nazwę *stacjonarnego*; w dalszym ciągu, tam gdzie używamy procesu Markowa jest on właśnie tego typu.

Równanie (3.44) opisuje propagację statystyczną cząsteczki zawieszony zarówno pod nieobecność jak też w obecności zewnętrznego pola. Równanie (3.44) nosi nazwę *równania mistra* (patrz N.G. van Kampena pt.: "Procesy stochastyczne w fizyce i chemii", PWN, Warszawa 1990) albo *prospektywnego równania Kolmogorowa* (patrz M.Fisz, "Rachunek prawdopodobieństwa i statystyka matematyczna", rozdz.8, PWN, Warszawa 1967) i jak widać opisuje ewolucję propagatora wprzód w czasie; ewolucję wstecz opisuje (analogicznie wyprowadzane) *równanie retrospektywne Kolmogorowa*.

3.8 Dyfuzja

Równanie dyfuzji, zarówno pod nieobecność jak też w obecności zewnętrznego pola, można otrzymać bezpośrednio z równania (3.44). Procedura polega na rozwinięciu prawdopodobieństwa $\mathcal{P}(\vec{X} - \Delta\vec{X}, t | \vec{X}_0, t_0)$ w szereg Taylora w punkcie \vec{X} (które w tym przypadku zwane jest także rozwinięciem Kramersa-Moyala, patrz N.G. van Kampena pt.: "Procesy stochastyczne w fizyce i chemii", rozdz.8, PWN, Warszawa 1990) i ograniczeniu się tylko do wyrazów kwadratowych w $\Delta\vec{X}$. Tego typu przybliżenie jest usprawiedliwione gdy $|\Delta\vec{X}| \ll |\vec{X}|$ czyli gdy długość pojedynczego przemieszczenia cząsteczki jest znacznie mniejsza od aktualnej odległości cząsteczki od punktu początkowego co ma miejsce na ogół dla dostatecznie długiego okresu czasu $t(\gg \tau)$, (o czym była już mowa wcześniej) lub gdy rozkład zmiennej $\Delta\vec{X}$, dany elementem przejścia $\Gamma(\Delta\vec{X})$, jest wąski (bardziej systematyczne, subtelniejsze podejście, przedstawione np. w książce N.G. van Kampena pt.: "Procesy stochastyczne w fizyce i chemii", PWN, Warszawa 1990, oparte jest na rozwinięciu równania mistrza względem potęg małego nartuconego zewnątrz specyficznego parametru - jak się wydaje jest to podejście lepiej umotywowane niż rozwinięcie Kramersa-Moyala).

Rozważamy teraz przypadek braku dryfu co oznacza, że przestrzeń w której zachodzi błędzenie jest izotropowa; prowadzi to do znoszenia się wyrazów liniowych w $\Delta\vec{X}$. W takiej sytuacji z równania (3.44) otrzymujemy równanie dyfuzji

$$\frac{\partial \mathcal{P}(\vec{X}, t | \vec{X}_0, t_0)}{\partial t} = D \nabla_d^2 \mathcal{P}(\vec{X}, t | \vec{X}_0, t_0) \quad (3.46)$$

(gdzie ∇_d jest d -wymiarowym gradientem); współczynnik dyfuzji D otrzymaliśmy tutaj w postaci

$$D = \frac{1}{2} \sum_{\Delta\vec{X} \neq 0} (\Delta X_j)^2 \Gamma(\Delta\vec{X}) = \frac{1}{2d} \sum_{\Delta\vec{X} \neq 0} (\Delta\vec{X})^2 \Gamma(|\Delta\vec{X}|), \quad j = 1, \dots, d, \quad (3.47)$$

przy czym równość drugą można było napisać dzięki izotropowości przestrzeni, która jest skutkiem braku (w tym przypadku) dryfu - pozwala to na uzależnienie elementów przejścia Γ jedynie od długości wektora pojedynczego przemieszczenia $|\Delta\vec{X}| = \sqrt{\sum_{j=1}^d (\Delta X_j)^2}$. Zatem, powyższa postać równania dyfuzji (3.46) została uzyskana

dzięki znikaniu elementów krzyżowych (poza diagonalnych)

$$\sum_{\Delta\vec{X} \neq 0} \Delta X_i \Delta X_j \Gamma(|\Delta\vec{X}|) = 0, \quad i \neq j, \quad i, j = 1, \dots, d; \quad (3.48)$$

co wynika (tutaj) z izotropowości przestrzeni. Zarówno postać równania dyfuzji (3.46) jak też wyrażenie na współczynnik dyfuzji mogą ulec zmianie po włączeniu zewnętrznego pola co rozważamy w dalszej części.

Wzór (3.47) może się wydawać dokładniejszy od (3.13), który został wyprowadzony w rozdz.3.5 jednak, jak wykazujemy oba wyrażenia są sobie równoważne. Jak

widać, współczynnik D dany wyrażeniem (3.47) jest, podobnie jak (3.13) i (3.14), wielkością makroskopową gdyż dotyczy błędzenia na makroskopowo duże odległości a zatem pokonywane przez cząsteczkę zawiesziny w makroskopowo długich okresach czasu.

Łatwo sprawdzić (przez proste różniczkowania po czasie i po zmiennych przestrzennych), że rozkład Gaussa

$$\mathcal{P}(\vec{X}, t | \vec{X}_0, t_0) = \frac{1}{(4\pi(t-t_0)D)^{d/2}} \exp\left(-\frac{(\vec{X} - \vec{X}_0)^2}{4(t-t_0)D}\right) \quad (3.49)$$

jest rozwiązaniem równania dyfuzji (3.46) pod nieobecność zewnętrznego pola spełniającym wymagany warunek początkowy

$$\mathcal{P}(\vec{X}, t_0 | \vec{X}_0, t_0) = \delta(\vec{X} - \vec{X}_0), \quad (3.50)$$

stwierdzający, że w chwili początkowej cząsteczka zawiesziny znajduje się w ściśle określonym położeniu \vec{X}_0

Korzystając z jawnej postaci propagatora (3.49), znajdujemy po prostym skalowaniu

$$\begin{aligned} \langle (\vec{X}(t) - \vec{X}_0)^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} d\vec{X} (\vec{X} - \vec{X}_0)^2 \frac{1}{(4\pi(t-t_0)D)^{d/2}} \exp\left(-\frac{(\vec{X} - \vec{X}_0)^2}{4(t-t_0)D}\right) \\ &= 2(t-t_0)dD; \end{aligned} \quad (3.51)$$

jak widać, jest to postać identyczna do uzyskanej wcześniej (3.12) - wykazaliśmy tym samym identyczność obu postaci (3.13) oraz (3.47) współczynnika dyfuzji.

Obie postacie współczynnika dyfuzji ((3.47) oraz (3.13)) posiadają uderzającą cechę o której wspomnieliśmy wcześniej mianowicie, wielkość makroskopowa jaką jest współczynnik dyfuzji D (patrz równość (3.14)) daje się wyrazić za pomocą lokalnych wielkości mikroskopowych tzn. średniego pojedynczego przemieszczenia kwadratowego oraz czasu potrzebnego na to pojedyncze przemieszczenie. Oznacza to, że z zachowania zawiesziny w skali mikroskopowej potrafimy odtworzyć jej zachowanie w skali makroskopowej - sugeruje to samopodobny charakter ewolucji; *ewolucja układu w skali makro jest podobna do ewolucji układu oglądanej w innych skalach np. mikro* jest to podstawowa cecha tzw. błędzi fraktalnych.

Zauważmy, że równanie (3.46) na prawdopodobieństwo warunkowe $\mathcal{P}(\vec{X}, t | \vec{X}_0, t_0)$ jest spełnione przy dowolnym warunku początkowym $\mathcal{P}(\vec{X}_0, t_0)$; dlatego średniując to równanie stronami po wszystkich możliwych warunkach początkowych otrzymujemy równanie dyfuzji

$$\frac{\partial \mathcal{P}(\vec{X}, t)}{\partial t} = D \nabla_d^2 \mathcal{P}(\vec{X}, t) \quad (3.52)$$

na jednocząstkową funkcję rozkładu.

3.8.1 Dyfuzja Ficka

Literalnie rzecz biorąc, dyfuzja Ficka dotyczy gęstości (koncentracji) cząsteczek (np. zawiesiny) a nie prawdopodobieństw. Oczywiście, w przypadku statystycznie niezależnych cząsteczek istnieje prosty związek pomiędzy gęstością (liczbową) $n(\vec{X}, t)$ a prawdopodobieństwem warunkowym

$$n(\vec{X}, t) = \int \mathcal{P}(\vec{X}, t | \vec{X}_0, t_0) n(\vec{X}_0, t_0) d\vec{X}_0, \quad (3.53)$$

gdzie $n(\vec{X}_0, t_0)$ jest gęstością (liczbową) w chwili początkowej t_0 w położeniu \vec{X}_0 . Uśredniając równanie (3.46) z gęstością początkową $n(\vec{X}_0, t_0)$ otrzymujemy (w oparciu o (3.53))

$$\frac{\partial n(\vec{X}, t)}{\partial t} = D \nabla_d^2 n(\vec{X}, t) \quad (3.54)$$

dobrze znane równanie dyfuzji Ficka (patrz np. J.R. Manning, "Diffusion Kinetics for atoms in crystals", D. van Nostrand Comp. Inc., Princeton 1968, (istnieje tłum. na język rosyjski)). Oczywiście, na równanie to można patrzeć jak na równanie ciągłości czyli jak na prawo zachowania liczby cząsteczek. Wówczas, można je zapisać w postaci

$$\frac{\partial n(\vec{X}, t)}{\partial t} + \nabla_d \vec{j}_D(\vec{X}, t) = 0, \quad (3.55)$$

gdzie

$$\vec{j}_D(\vec{X}, t) = -D \nabla_d n(\vec{X}, t), \quad (3.56)$$

jest strumieniem dyfuzyjnym cząsteczek.

Jednym z zasadniczych problemów inwestorów giełdowych jest wycena opcja.

3.9 Centralne twierdzenie graniczne raz jeszcze

Jeden z najważniejszych wniosków jaki można sformułować na podstawie rozważań przeprowadzonych w poprzednich rozdziałach, daje się sformułować w postaci następującego (wektorowego) twierdzenia Lindeberga-Lévy'ego (patrz M. Fisz, "Rachunek prawdopodobieństwa i statystyka matematyczna", PWN, Warszawa 1967) znanego, ze względu na swoje zasadnicze znaczenie w dziedzinie twierdzeń granicznych, jako

Centralne Twierdzenie Graniczne (CTG)

Wprowadźmy ciąg niezależnych, wektorowych zmiennych losowych $\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_n$ posiadających identyczny rozkład prawdopodobieństwa, a zatem taką samą wartość średnią, $\langle \vec{x} \rangle$, oraz dyspersję σ_x , tzn.

$$\begin{aligned}\langle \vec{x}_j \rangle &= \langle \vec{x} \rangle, \quad j = 1, 2, \dots, n \\ \sigma_x^2 &= \langle (\vec{x}_j)^2 \rangle - \langle \vec{x}_j \rangle^2 = \langle \vec{x}^2 \rangle - \langle \vec{x} \rangle^2, \quad j = 1, 2, \dots\end{aligned}\quad (3.57)$$

Zdefiniujmy teraz sumaryczną, standaryzowaną (wyskalowaną), wektorową zmienną losową

$$\vec{Y}(n) = \frac{\vec{X}(n) - \langle \vec{X}(n) \rangle}{\sigma_x} = \frac{\sum_{j=1}^n (\vec{x}_j - \langle \vec{x} \rangle)}{\sigma_x}, \quad (3.58)$$

zależną od n ; jak widać, wartość oczekiwana tej zmiennej $\langle \vec{Y}(n) \rangle = 0$ oraz jej dyspersja $\sigma_Y(n) = 1$ niezależnie od n ,

Tęza CTG mówi, że

- 1) istnieje związek pomiędzy dyspersją $\sigma_X(n)$ sumarycznej zmiennej losowej $\vec{X}(n)$ a dyspersją σ_x pojedynczej zmiennej \vec{x} postaci: $\sigma_X(n) = \sqrt{n} \sigma_x$,

- 2) dla asymptotycznie dużych n funkcja rozkładu standaryzowanej zmiennej losowej $\vec{Y}(n)$ dana jest, z dobrym przybliżeniem, rozkładem Gaussa:

$$G(\vec{Y}(n)) = \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \exp(-(\vec{Y}(n))^2/2),$$

gdzie d jest wymiarem przestrzeni wektorowej do której należy zmienna $\vec{Y}(n)$.

Powyższe twierdzenie zostało sformułowane nieco ogólniej niż rozważania z których wyrosło mianowicie, uwzględnia ono także dryf wywołany przyłożeniem do układu zewnętrznego pola. Dryf ten można charakteryzować za pomocą stałej prędkości unoszenia

$$\langle \vec{V} \rangle = \frac{d\langle \vec{X}(n) \rangle}{dt} = \frac{\langle \vec{x} \rangle}{\tau} = \langle \vec{v} \rangle, \quad (3.59)$$

gdzie skrótyliśmy z definicji (3.5) z rozdz.3.4 oraz wzoru $t = n\tau$ wprowadzonego w rozdz.3.5. Jak widać prędkość unoszenia $\langle \vec{V} \rangle$ obliczona na podstawie wypadkowego wektora przemieszczenia cząsteczki zawiesziny jest, jak być powinna, identyczna z prędkością unoszenia $\langle \vec{v} \rangle$ obliczoną w oparciu o pojedyncze przemieszczenie tej cząsteczki. Zagadnienie dyfuzji w obecności dryfu omawiamy krótko w następnym rozdziale, co usprawiedliwia wprowadzoną powyżej postać CTG.

3.10 Dyfuzja oraz unoszenie

Przedstawiamy teraz zmiany jakie powinny być uwzględnione w stosunku do rozważań prowadzonych w rozdziałach 3.5, 3.7, 3.8 w przypadku istnienia w układzie

dryfu, co jest jedyną modyfikacją warunków błędzenia cząstki zawieszony jaką dopuszczamy.

Zasadniczą konsekwencją tej modyfikacji jest fakt że pierwszy moment, zarówno pojedynczej jak też sumarycznej zmiennej losowej, nie znika czyli

$$\langle \vec{X}(n) - \vec{X}_0 \rangle = \sum_{j=1}^n \langle \vec{x}_j \rangle = n \langle \vec{x} \rangle \neq 0, \quad (3.60)$$

tym samym złamana została równość (3.7) (gdzie po drodze skorzystaliśmy z równości (3.5)).

W związku z powyższym, dyspersja zdefiniowana wzorem (3.8) nie równa się teraz $\langle (\vec{X}(n) - \vec{X}_0)^2 \rangle$ co prowadzi do wyniku ogólniejszego niż dany wyrażeniem (3.9) oraz (3.10). Korzystając z ogólnej definicji dyspersji (druga równość w (3.8)), otrzymujemy po prostych przekształceniach

$$\begin{aligned} (\sigma_X(n))^2 &= \sum_{j=1}^n [\langle (\vec{x}_j)^2 \rangle - \langle \vec{x}_j \rangle^2] + \sum_{i \neq j}^n [\langle \vec{x}_i \cdot \vec{x}_j \rangle - \langle \vec{x}_i \rangle \cdot \langle \vec{x}_j \rangle] \\ &= n(\sigma_x)^2 + 2\mathcal{K}(n), \end{aligned} \quad (3.61)$$

gdzie sumaryczna funkcja korelacji $\mathcal{K}(n)$ jest dana przez tą część wyrażenia (3.61), które zawiera wyrazy krzyżowe; jak widać, funkcja ta znika dla takiego błędzenia w którym pojedyncze przemieszczenia są nieskorelowane - przypadek błędzeń skorelowanych, np. usztywnionych polimerów, omawiamy w dalszej części.

Wyrażenie (3.61) można zapisać w postaci umożliwiającej wprowadzenie współczynników dyfuzji dla nieskorelowanego błędzenia pojedynczej cząsteczki w obecności dryfu - jest ono uogólnieniem wyrażenia (3.12)

$$(\sigma_X(t))^2 = 2(t - t_0)[(d - 1)D_{\perp} + D_{\parallel}] \quad (3.62)$$

gdzie współczynnik

$$D_{\perp} = \frac{1}{2(d - 1)} \frac{\langle (\vec{x}_{\perp})^2 \rangle}{\tau}, \quad (3.63)$$

opisuje dyfuzję w kierunku poprzecznym do kierunku dryfu, natomiast

$$D_{\parallel} = \frac{1}{2} \frac{\langle (\vec{x}_{\parallel})^2 \rangle - \langle \vec{x}_{\parallel} \rangle^2}{\tau} = \frac{1}{2} \frac{\langle (\vec{x}_{\parallel})^2 \rangle - \langle (\vec{V})(t - t_0) \rangle^2}{\tau}, \quad (3.64)$$

dyfuzję równoległą do kierunku dryfu przy czym w ogólności

$$D_{\perp} \neq D_{\parallel} \quad (3.65)$$

a ponadto,

$$D_{\parallel} \neq D \text{ oraz } D_{\perp} \neq D, \quad (3.66)$$

przy czym ostatnia nierówność w ogólności ma miejsce pomimo, że dotyczy dyfuzji poprzecznej - będzie o tym jeszcze mowa poniżej. Jak widać, wyrażenie (3.62) stanowi uogólnienie wzoru (3.12) na przypadek występowania zewnętrznego pola wywołującego dryf. Należy zaznaczyć, że współczynnik dyfuzji równoległej D_{\parallel} jest niezależny od czasu (co wykazujemy poniżej) gdyż identyczna (do jawnie wypisanej) paraboliczna zależność od czasu tkwi także w średniej z kwadratu pojedynczego przemieszczenia $\langle(\vec{x}_{\parallel})^2\rangle$, prowadząc do jej skrócenia się.

Istnienie zewnętrznego pola wprowadza anizotropię przestrzeni co zmienia, jak wykazujemy poniżej, postać równania dyfuzji Fick'a (3.46). Postępując analogicznie jak w rozdziale 3.8 (czyli rozwijając propagator $\mathcal{P}(\vec{X} - \Delta\vec{X}, t | \vec{X}_0, t_0)$ w szereg Taylora w punkcie \vec{X} i ograniczając się tylko do wyrazów kwadratowych w $\Delta\vec{X}$), przekształcamy równanie mistrza (3.44) do postaci

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{P}(\vec{X}, t | \vec{X}_0, t_0)}{\partial t} &= D_{\perp} \nabla_{d-1}^2 \mathcal{P}(\vec{X}, t | \vec{X}_0, t_0) + D_{\parallel} \nabla_{\parallel}^2 \mathcal{P}(\vec{X}, t | \vec{X}_0, t_0) \\ &- \langle \vec{V} \rangle \cdot \nabla \mathcal{P}(\vec{X}, t | \vec{X}_0, t_0) \end{aligned} \quad (3.67)$$

zawierającej obok pierwszego składnika odpowiedzialnego za dyfuzję w kierunku poprzecznym do kierunku przyłożonego pola gdzie,

$$\begin{aligned} D_{\perp} &= \frac{1}{2(d-1)} \sum_{\Delta\vec{X} \neq 0} (\Delta\vec{X}_{\perp})^2 \Gamma(\Delta\vec{X}) \\ &= \frac{1}{2(d-1)} \sum_{\Delta\vec{X} \neq 0} (\Delta\vec{X}_{\perp})^2 \Gamma(|\Delta\vec{X}|) \exp(\vec{F} \cdot \Delta\vec{X}_{\parallel} / 2k_B T) \\ &= \frac{1}{2(d-1)} \sum_{\Delta\vec{X} \neq 0} (\Delta\vec{X}_{\perp})^2 \Gamma(|\Delta\vec{X}|) \cosh\left(\frac{\vec{F} \cdot \Delta\vec{X}_{\parallel}}{2k_B T}\right) \\ &\approx \frac{1}{2(d-1)} \sum_{\Delta\vec{X} \neq 0} (\Delta\vec{X}_{\perp})^2 \Gamma(|\Delta\vec{X}|) \left[1 + \frac{1}{2} \frac{(\vec{F})^2 (\Delta\vec{X}_{\parallel})^2}{(2k_B T)^2}\right] \\ &= D + \frac{(\vec{F})^2}{(2k_B T)^2} \frac{1}{4(d-1)} \sum_{\Delta\vec{X} \neq 0} (\Delta\vec{X}_{\perp})^2 (\Delta\vec{X}_{\parallel})^2 \Gamma(|\Delta\vec{X}|) \end{aligned} \quad (3.68)$$

jest współczynnikiem dyfuzji poprzecznej, także drugi oznaczający dyfuzję wzdłuż kierunku pola przy czym,

$$\begin{aligned} D_{\parallel} &= \frac{1}{2} \sum_{\Delta\vec{X} \neq 0} (\Delta\vec{X}_{\parallel})^2 \Gamma(\Delta\vec{X}) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\Delta\vec{X} \neq 0} (\Delta\vec{X}_{\parallel})^2 \Gamma(|\Delta\vec{X}|) \exp(\vec{F} \cdot \Delta\vec{X}_{\parallel} / 2k_B T) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\Delta\vec{X} \neq 0} (\Delta\vec{X}_{\parallel})^2 \Gamma(|\Delta\vec{X}|) \cosh\left(\frac{\vec{F} \cdot \Delta\vec{X}_{\parallel}}{2k_B T}\right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&\approx \frac{1}{2} \sum_{\Delta \vec{X} \neq 0} (\Delta \vec{X}_{\parallel})^2 \Gamma(|\Delta \vec{X}|) \left[1 + \frac{1}{2} \frac{(\vec{F})^2 (\Delta \vec{X}_{\parallel})^2}{(2k_B T)^2} \right] \\
&= D + \frac{(\vec{F})^2}{(2k_B T)^2} \frac{1}{4} \sum_{\Delta \vec{X} \neq 0} (\Delta \vec{X}_{\parallel})^2 (\Delta \vec{X}_{\perp})^2 \Gamma(|\Delta \vec{X}|) \quad (3.69)
\end{aligned}$$

jest współczynnikiem dyfuzji wzdłuż pola oraz trzeci składnik związany z unoszeniem (wzdłuż kierunku pola) gdzie prędkość unoszenia

$$\begin{aligned}
\langle \vec{V} \rangle &= \sum_{\Delta \vec{X} \neq 0} \Delta \vec{X}_{\parallel} \Gamma(\Delta \vec{X}) = \sum_{\Delta \vec{X} \neq 0} \Delta \vec{X}_{\parallel} \Gamma(|\Delta \vec{X}|) \exp\left(\frac{\vec{F} \cdot \Delta \vec{X}_{\parallel}}{2k_B T}\right) \\
&= \sum_{\Delta \vec{X} \neq 0} \Delta \vec{X}_{\parallel} \Gamma(|\Delta \vec{X}|) \sinh\left(\frac{\vec{F} \cdot \Delta \vec{X}_{\parallel}}{2k_B T}\right) \\
&\approx \frac{F}{2k_B T} \sum_{\Delta \vec{X} \neq 0} (\Delta \vec{X}_{\parallel})^2 \Gamma(|\Delta \vec{X}|) = \frac{F}{k_B T} D, \quad (3.70)
\end{aligned}$$

jest równoległa do kierunku pola ze względu na symetrię zwierciadlaną (F jest w takim układzie współrzędnych jedyną nieznikającą składową wektora siły). Przy okazji, wszystkie trzy wielkości wyrażiliśmy w postaci jawnie zależnej od zewnętrznej (stałej) siły.

Należy podkreślić, że istnienie anizotropii przestrzeni nie narusza symetrii zwierciadlanej funkcji intensywności procesu stochastycznego; funkcje te posiadają symetrię zwierciadlaną względem (dowolnej) płaszczyzny, w której leży wektor prędkości unoszenia $\langle \vec{V} \rangle$ co prowadzi, podobnie jak w przypadku braku pola, do znikania wyrazów krzyżowych typu (3.48) oraz zeruje unoszenie prostopadłe do kierunku pola.

Można bez trudu sprawdzić, że rozwiązanie równania (3.67) spełniające warunek początkowy (3.50) jest postaci ilocynu dryfującego oraz stojącego rozkładu Gaussa,

$$\begin{aligned}
P(\vec{X}, t | \vec{X}_0, t_0) &= \frac{1}{\sqrt{4\pi(t-t_0)D_{\parallel}}} \exp\left(-\frac{((\vec{X} - \vec{X}_0)_{\parallel} - \langle \vec{V} \rangle(t-t_0))^2}{4(t-t_0)D_{\parallel}}\right) \\
&\times \frac{1}{(4\pi(t-t_0)D_{\perp})^{(d-1)/2}} \exp\left(-\frac{((\vec{X} - \vec{X}_0)_{\perp})^2}{4(t-t_0)D_{\perp}}\right). \quad (3.71)
\end{aligned}$$

Innymi słowy, widzimy, że w kierunku prostopadłym do kierunku dryfu ma miejsce jedynie "rozpływanie się" propagatora czyli jego poszerzanie się z jednoczesnym maleeniem amplitudy przy czym "środek ciężkości" (w tym przypadku maksimum) propagatora pozostaje przez cały czas nieruchomy - jest to efekt dyfuzji w czystej postaci. Natomiast, w kierunku równoległym do kierunku dryfu sytuacja jest bardziej skomplikowana. Obok powyżej wspomnianego efektu dyfuzji, ma miejsce zjawisko unoszenia (dryfu), które polega na przesuwaniu się środka ciężkości a zatem całego propagatora z (wypadkową) prędkością $\langle V \rangle$. Oczywiście, wyrażenie (3.71) nie jest

rozwiązaniem stacjonarnym równania (3.67) gdyż zmienia się wraz z upływem czasu. Rozwiązanie stacjonarne, a dokładniej mówiąc równowagowe, wyprowadzamy poniżej analizując równanie ciągłości.

Licząc teraz dyspersję zmiennej $\vec{X} - \vec{X}_0$ można wykazać, że oba współczynniki dyfuzji D_{\perp} oraz D_{\parallel} , otrzymane na dwóch różnych drogach (porównaj wyrażenia (3.63) i (3.64) z odpowiednio (3.68) i (3.69)) są identyczne.

3.10.1 Twierdzenie o fluktuacji i dysypacji

Równość przybliżona we wzorze (3.70) przedstawia, w przybliżeniu liniowym, związek pomiędzy prędkością a przyłożoną siłą. Współczynnik proporcjonalności jest, jak wiadomo, ruchliwością (którą często oznacza się przez B). A zatem,

$$B = \frac{D}{k_B T} \quad (3.72)$$

łącznie unczenie z dyfuzją co stanowi treść *twierdzenia o fluktuacji i dysypacji* (patrz, R. Kubo, M. Toda, N. Hashitsume, "Fizyka statystyczna. II. Mechanika statystyczna stanów nierównowagowych", PWN, Warszawa 1991) - jednego z najgłębszych twierdzeń fizyki statystycznej.

Przy okazji zauważmy, że wzory (3.68) oraz (3.69) wyznaczają stopień anizotropii współczynników dyfuzji. Mianowicie, można je przepisać odpowiednio w postaci,

$$\begin{aligned} \Delta D_{\perp} = D_{\perp} - D &\approx \frac{1}{2} \frac{(\vec{F})^2}{(2k_B T)^2} \\ &\times \frac{1}{2(d-1)} \sum_{\Delta \vec{X} \neq 0} (\Delta \vec{X}_{\perp})^2 (\Delta \vec{X}_{\parallel})^2 \Gamma(|\Delta \vec{X}|) \end{aligned} \quad (3.73)$$

oraz

$$\Delta D_{\parallel} = D_{\parallel} - D \approx \frac{1}{2} \frac{(\vec{F})^2}{(2k_B T)^2} \frac{1}{2} \sum_{\Delta \vec{X} \neq 0} (\Delta \vec{X}_{\perp})^2 (\Delta \vec{X}_{\parallel})^2 \Gamma(|\Delta \vec{X}|), \quad (3.74)$$

Jak widać, w przybliżeniu liniowym zarówno anizotropia poprzeczna ΔD_{\perp} jak i podłużna ΔD_{\parallel} znikają. Zauważmy, że znikanie anizotropii poprzecznej ΔD_{\perp} nie oznacza jeszcze znikania anizotropii podłużnej D_{\parallel} , co pokazemy na przykładzie błędzenia na sieci kwadratowej (patrz rys.1(3.10.1) oraz rys.2(3.10.1)). W tym miejscu należy podkreślić, że zastosowanie powyższych wywodów do takiego błędzenia wymaga jedynie doprecyzowania po jakich wektorach przemieszczenia $\Delta \vec{X}$ przeprowadzane jest sumowanie $\sum_{\Delta \vec{X}}(\dots)$ oraz zaznaczenia, że wektor położenia \vec{X} przyjmuje tylko wartości dyskretne oznaczające węzły sieci.

Przykład 1

Rozważamy błędzenie przypadkowe pojedynczej cząsteczki na sieci kwadratowej tak jak to pokazano na rys. 1(3.10.1). Zakładamy, że przesłoki zachodzą tylko do najbliższych sąsiadów (odległych o stałą sieci a) natomiast zewnętrzne pole jest przyłożone równoległe do horyzontalnej linii węzłów. Zatem

$$\Gamma(|\Delta\vec{X}|) = \begin{cases} \Gamma, & \text{dla } \Delta\vec{X} = (a, 0), (-a, 0), (0, a), (0, -a) \\ 0, & \text{dla innych } \Delta\vec{X}. \end{cases}$$

Korzystając z wyrażenia (3.73) otrzymujemy,

$$\Delta D_{\perp} = 0, \quad (3.75)$$

(gdyż w tym przypadku wektor przemieszczenia $\Delta\vec{X}$ albo posiada składową prostopadłą i nie posiada horyzontalnej albo odwrotnie), natomiast wyrażenie (3.74) daje po prostu wzór

$$\frac{\Delta D_{\parallel}}{D} = \frac{1}{2} \frac{(\vec{F})^2 a^2}{(2k_B T)^2}, \quad (3.76)$$

na względną anizotropię podłużną.

Rozważamy teraz następny przykład (patrz rys. 2(3.10.1) dotyczący sytuacji gdy $\Delta D_{\perp} = \Delta D_{\parallel} \neq 0$.

Przykład 2

W tym przypadku linia węzłów nie pokrywa się z kierunkiem przyłożonego pola. Ze wzorów (3.73) oraz (3.74) otrzymujemy,

$$\frac{\Delta D_{\perp}}{D} = \frac{\Delta D_{\parallel}}{D} = \frac{1}{8} \frac{(\vec{F})^2 a^2}{(2k_B T)^2}. \quad (3.77)$$

Zauważmy, że w obu przykładach krytyczne współczynniki dyfuzji znikają ponieważ ma miejsce symetria zwiarcia elementu przejścia względem kierunku przyłożonego pola.

3.10.2 Równanie ciągłości a liczba Avogadro - doświadczenie Perrina

Fenomenologiczna teoria transportu Onsagera słuszną dla stanów bliskich stanowi równowagi termodynamicznej, wprowadza liniową zależność pomiędzy prądem a siłą termodynamiczną - tego typu związki pojawiły się jako bezpośrednie wnioski z doświadczeń. W przypadku błędzenia pojedynczej cząsteczki w obecności zewnętrznego pola sprowadza się on do *pierwszego prawa Fick'a* postaci,

$$\vec{j}(\vec{X}, t | \vec{X}_0, t_0) = \vec{j}_D(\vec{X}, t | \vec{X}_0, t_0) + \vec{j}_V(\vec{X}, t | \vec{X}_0, t_0), \quad (3.78)$$

przy czym

$$\vec{j}_D(\vec{X}, t | \vec{X}_0, t_0) = -\hat{D} \nabla \mathcal{P}(\vec{X}, t | \vec{X}_0, t_0) \quad (3.79)$$

jest prądem dyfuzyjnym natomiast

$$\vec{j}_V(\vec{X}, t | \vec{X}_0, t_0) = \langle \vec{V} \rangle \mathcal{P}(\vec{X}, t | \vec{X}_0, t_0) \quad (3.80)$$

prądem unczenia, gdzie \hat{D} jest diagonalnym tensorem dyfuzji

$$\hat{D} = \begin{pmatrix} \hat{D}_\perp & 0 \\ 0 & D_\parallel \end{pmatrix} \quad (3.81)$$

i podobnie

$$\hat{D}_\perp = \begin{pmatrix} D_\perp & 0 \\ 0 & D_\perp \end{pmatrix}. \quad (3.82)$$

Jak widać prawo to stwierdza, że gęstość prądu dyfuzyjnego jest proporcjonalna do gradientu propagatora natomiast gęstość prądu unczenia do samego propagatora (przy stałej prędkości dryfu).

Można teraz postawić pytanie o warunek brzegowy przy którym uzyskuje się rozwiązanie równowagowe, tzn. takie które powstaje dzięki równoważeniu się prądu dyfuzyjnego i prądu unczenia - oczywiście w takiej sytuacji całkowity prąd w układzie znika. A zatem przyjmujemy, że

$$\vec{j}(\vec{X}, t | \vec{X}_0, t_0) = \vec{j}_D(\vec{X}, t | \vec{X}_0, t_0) + \vec{j}_V(\vec{X}, t | \vec{X}_0, t_0) = 0. \quad (3.83)$$

Cowięcej, postępujemy rozwiązaniem niezależnym od warunku początkowego, Zatem, równość (3.83) zapisujemy w postaci,

$$D_\parallel \frac{\partial}{\partial X_\parallel} \mathcal{P}(X_\parallel) = \langle V_\parallel \rangle \mathcal{P}(X_\parallel). \quad (3.84)$$

Przyjmujemy, że składowa połączenia X_\parallel jest skierowana ku górze natomiast składowa prędkości dryfu $\langle V_\parallel \rangle$ ku dołowi. Ponadto, $d - 1$ -wymiarowa (hiper) płaszczyzna zdefiniowana równaniem $X_\parallel = 0$ jest nieprzenikliwa i bezwzględnie nie zależy od czasu jedynie w górnej półprzestrzeni. Oznacza to, że rozwiązanie równania (3.84) jest postaci,

$$\mathcal{P}(\vec{X}) = \mathcal{P}(X_\parallel) = \mathcal{P}(X_\parallel = 0) \exp\left(\frac{\langle V_\parallel \rangle}{D} X_\parallel\right). \quad (3.85)$$

Oczywiście, rozwiązanie to musi spełniać warunek normalizacyjny

$$\begin{aligned} \int_0^\infty dX_\parallel \int_{\Omega_{d-1}} d\vec{X}_\perp \mathcal{P}(\vec{X}) &= 1 \equiv \Omega_{d-1} \mathcal{P}(X_\parallel = 0) \frac{D}{|\langle V_\parallel \rangle|} = 1 \\ \Rightarrow \mathcal{P}(X_\parallel = 0) &= \frac{|\langle V_\parallel \rangle|}{D \Omega_{d-1}}, \end{aligned} \quad (3.86)$$

gdzie Ω_{d-1} jest powierzchnią $d-1$ -wymiarowej (hiper)plaszczyny. Jak widać, zawieszina jest umieszczona w naczyniu ograniczonym ze wszystkich stron za wyjątkiem dodatniego kierunku składowej X_1 ⁷. Korzystając ze wzorów (3.70) oraz (3.72) i pamiętając, że zawieszina znajduje się w polu grawitacyjnym, czyli $F = -mg$, (gdzie m jest masą cząsteczki zawiesziny a g wartością przyspieszenia ziemskiego) otrzymujemy z (3.85) oraz (3.86) następujący wzór na rozkład prawdopodobieństwa dla cząsteczki zawiesziny w jednorodnym polu grawitacyjnym.

$$\mathcal{P}(X_1) = \frac{1}{\Omega_{d-1}} \frac{mg}{k_B T} \exp\left(-\frac{mg}{k_B T} X_1\right). \quad (3.87)$$

Jest to niezwykle ważny wzór, który umożliwił J. Perrin'owi przeprowadzenie doświadczenia, w którym wyznaczył liczbę Avogadro a tym samym podał po raz pierwszy doświadczalny dowód cząsteczkowej budowy materii.

Doświadczenie Perrina. Po pierwsze, J. Perrin zauważył, że wzór (3.87) pozwala na doświadczalne wyznaczenie stałej Boltzmanna k_B . Po drugie, ze znajomości stałej gazowej R wyznaczonej niezależnie na drodze czysto termodynamicznej oraz związku pomiędzy stałą gazową a stałą Boltzmanna postaci

$$R = N_A k_B \quad (3.88)$$

można wyznaczyć liczbę Avogadro N_A .

Na rys. 1(3.10.2) przedstawiono schematycznie istotę doświadczenia Perrina. Naczynie wypełnione zawiesziną umieszczono w jednorodnym polu grawitacyjnym o natężeniu $g_1 = -g$. Podzielono je myślowo na "plasterki" o grubości Δ . Wzór (3.87) pozwala na obliczenie względnej liczby cząsteczek zawartych w kolejnych plasterkach mianowicie,

$$\frac{N(X_1 + \Delta, X_1 + 2\Delta)}{N(X_1, X_1 + \Delta)} = \frac{\int_{X_1 + \Delta}^{X_1 + 2\Delta} dX'_1 \mathcal{P}(X'_1)}{\int_{X_1}^{X_1 + \Delta} dX'_1 \mathcal{P}(X'_1)} = \exp\left(-\frac{mg}{k_B T} \Delta\right) \quad (3.89)$$

Powyższy wzór wyprowadzono przy założeniu rozrzedzonej zawiesziny co pozwoliło na przyjęcie, że liczba cząsteczek $N(X_1)$ na poziomie X_1 jest, z dobrym przybliżeniem, proporcjonalna do prawdopodobieństwa $\mathcal{P}(X_1)$ tzn.

$$N(X_1) = N \mathcal{P}(X_1), \quad (3.90)$$

gdzie N jest całkowitą liczbą cząsteczek w układzie.

Lewa strona wzoru (3.89) została wyznaczona w doświadczeniu na drodze bezpośredniego pomiaru liczby cząsteczek w dwóch sąsiednich plasterkach; prawa strona wzoru zawiera tylko jedną niewiadomą tzn. stałą Boltzmanna k_B natomiast masa cząsteczkowa m cząsteczki zawiesziny oraz przyspieszenie ziemskie g na danej szerokości geograficznej są znane z bardzo dużą dokładnością.

⁷Ograniczenie także w tym kierunku jest możliwe ale skomplikowało by to postać nieistotnego czynnika przedwykładniczego we wzorze (3.88).

3.11 Równanie Fokkera-Plancka-Smoluchowskiego

W ogólnym przypadku niejednorodnych elementów przejścia z prerównania mistrza (3.43) można wyprowadzić ogólne równanie dyfuzji znane jako równanie Fokkera-Plancka bądź równanie Smoluchowskiego, używając wygodniejszej notacji

$$W(\vec{X}, t + \Delta t | \vec{X} - \Delta\vec{X}, t) = W(\Delta\vec{X}, \Delta t | \vec{X} - \Delta\vec{X}, t) \quad (3.91)$$

oraz analogicznie

$$W(\vec{X} - \Delta\vec{X}, t + \Delta t | \vec{X}, t) = W(-\Delta\vec{X}, \Delta t | \vec{X}, t). \quad (3.92)$$

Notacja ta pozwala na alternatywne określenie elementów $\{W\}$ na przykład, element przejścia $W(\Delta\vec{X}, \Delta t | \vec{X} - \Delta\vec{X}, t)$ jest prawdopodobieństwem przemieszczenia cząsteczki zawiesziny o wektor $\Delta\vec{X}$ w przedziale czasu Δt pod warunkiem, że o jedno przemieszczenie wcześniej w chwili t cząsteczka znajdowała się w położeniu $\vec{X} - \Delta\vec{X}$. Postępując analogicznie jak przy wyprowadzeniu równania (3.44) otrzymujemy ogólniejsze równanie różniczkowo-różnicowe

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{P}(\vec{X}, t | \vec{X}_0, t_0)}{\partial t} &= \sum_{\Delta\vec{X} \neq 0} [\Gamma(\Delta\vec{X} | \vec{X} - \Delta\vec{X}, t) \mathcal{P}(\vec{X} - \Delta\vec{X}, t | \vec{X}_0, t_0) - \\ &\quad \Gamma(-\Delta\vec{X} | \vec{X}, t) \mathcal{P}(\vec{X}, t | \vec{X}_0, t_0)], \end{aligned} \quad (3.93)$$

gdzie teraz użyliśmy ogólniejszej, niejednorodnej (w przestrzeni i czasie) postaci elementów przejścia. Analogicznie jak poprzednio, wprowadziliśmy tutaj definicję niejednorodnych intensywności procesu

$$\Gamma(\Delta\vec{X} | \vec{X} - \Delta\vec{X}, t) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{W(\vec{X}, t + \Delta t | \vec{X} - \Delta\vec{X}, t)}{\Delta t}, \quad (3.94)$$

oraz analogicznie zdefiniowaną intensywność $\Gamma(-\Delta\vec{X} | \vec{X}, t)$. Z równania (3.93) można wyprowadzić uogólnione równanie dyfuzji zwane najczęściej równaniem Fokkera-Plancka, rozwijając pierwszy składnik pod sumą w szereg Taylora w punkcie \vec{X} (analogicznie jak przy wyprowadzaniu równania dyfuzji Fick'a (3.46)). Otrzymujemy na tej drodze

$$\frac{\partial \mathcal{P}(\vec{X}, t | \vec{X}_0, t_0)}{\partial t} = \frac{\partial^2}{\partial X_j^2} [D_j(\vec{X}, t) \mathcal{P}(\vec{X}, t | \vec{X}_0, t_0)] - \frac{\partial}{\partial X_j} [V_j \mathcal{P}(\vec{X}, t | \vec{X}_0, t_0)] \quad (3.95)$$

gdzie $D_j(\vec{X}, t)$ to współczynniki zdefiniowane wzorem analogicznym do (3.69) dopuszczającym ich zależność od położenia cząsteczki oraz od czasu

$$D_j = \frac{1}{2} \sum_{\Delta\vec{X} \neq 0} (\Delta X_j)^2 \Gamma(\Delta\vec{X} | \vec{X}), \quad j = 1, \dots, d, \quad (3.96)$$

natomiast $\langle V_j \rangle$, $j = 1, \dots, d$, są składowymi prędkości dryfu

$$\langle V_j \rangle = \sum_{\Delta \vec{X} \neq 0} \Delta X_j \Gamma(\Delta \vec{X} | \vec{X}), \quad j = 1, \dots, d. \quad (3.97)$$

Równanie Fokkera-Plancka można przedstawić w postaci równania ciągłości gdyż prąd prawdopodobieństwa wynosi

$$\vec{j} = \vec{j}_D + \vec{j}_V \quad (3.98)$$

składając się z dyfuzyjnego prądu prawdopodobieństwa

$$\vec{j}_D = \left\{ \frac{\partial}{\partial X_1} [D_1(\vec{X}, t) \mathcal{P}(\vec{X}, t | \vec{X}_0, t_0)], \dots, \frac{\partial}{\partial X_d} [D_d(\vec{X}, t) \mathcal{P}(\vec{X}, t | \vec{X}_0, t_0)] \right\}, \quad (3.99)$$

oraz konwekcyjnego prądu prawdopodobieństwa

$$\vec{j}_V = \{ \langle V_1 \rangle \mathcal{P}(\vec{X}, t | \vec{X}_0, t_0), \dots, \langle V_d \rangle \mathcal{P}(\vec{X}, t | \vec{X}_0, t_0) \}. \quad (3.100)$$

3.11.1 Równanie Langevina

Równanie Langevina pozwala na dynamiczny opis ruchów Browna dzięki wprowadzeniu do klasycznego równania ruchu Newtona fluktuującej siły odpowiedzialnej za ryglawaty kształt toru cząsteczki zawieszyny.

3.12 Autokorelacje - złamanie centralnego twierdzenia granicznego

Rozpocznemy teraz omawianie sytuacji, w których ulega złamaniu centralne twierdzenie graniczne; wykażemy, że może to być związane z długoczasowymi autokorelacjami występującymi pomiędzy pojedynczymi przemieszczeniami cząsteczki. Istnienie autokorelacji oznacza, że pojedyncze przemieszczenia danej cząsteczki są od siebie statystycznie zależne. Typowym przykładem takiej sytuacji może być błędzenie ("glówki") usztywnionego polimeru zależne od orientacji wyjściowego monomeru zwane błędzeniem ukierunkowanym ("directed random walk") lub błędzenie polimeru bez samoprzecięć ("self-avoiding random walk") albo skorelowane błędzenie kanałowe (jednowymiarowe) jonów w sieci krystalicznej (któremu towarzyszą "back-jump correlations" lub "feed-back correlations").

Rozważmy sumaryczną funkcję autokorelacji wprowadzoną w rozdz.3.10 przez wyrażenie (3.61)

$$\mathcal{K}(n) = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^n K(i, j) = \sum_{i < j}^n K(i, j), \quad (3.101)$$

gdzie cząstkowa (parcjalna) funkcja autokorelacji

$$K(i, j) = \langle \vec{x}_i \cdot \vec{x}_j \rangle - \langle \vec{x}_i \rangle \cdot \langle \vec{x}_j \rangle \quad (3.102)$$

dotyczy dwóch dowolnie wybranych pojedynczych przemieszczeń danej cząsteczki (gdzie " \cdot " oznacza jak zwykle mnożenie skalarne wektorów).

Wzór (3.101) można przepisać w postaci

$$\mathcal{K}(n) = \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^n K(i, j) = \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i-1}^{n-i} K(i, j), \quad (3.103)$$

która będzie w dalszym ciągu przekształcana. Zakładając że wszystkie parcjalne funkcje autokorelacji są jednorodne (co wynika z jednorodności czasu wyrażonego liczbą pojedynczych przemieszczeń i jednorodności przestrzeni) i nie przejawiają asymptotycznych oscylacji, można zapisać

$$K(i, j) = K(j - i) \quad (3.104)$$

co razem z (3.103) daje

$$\mathcal{K}(n) = \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{m=1}^{n-i} K(m). \quad (3.105)$$

Należy podkreślić, że własność jednorodności jest cechą powszechnie występującą - obserwuje się ją nie tylko w stanach równowagowych czy ogólniej stacjonarnych układu ale nawet w przypadku relaksacji układu. Korzystając z wyrażenia (3.105) wykażemy, że funkcję autokorelacji $\mathcal{K}(n)$ można przekształcić do wygodnej postaci

$$\mathcal{K}(n) = \sum_{j=1}^n (n - j)K(j) = n \sum_{j=1}^n K(j) - \sum_{j=1}^n jK(j). \quad (3.106)$$

Wyprowadzenie wzoru (3.106) opiera się na zapisaniu sumy podwójnej (3.105) uzupełnionej o pomocniczą sumę $\sum_{j=1}^n jZ(j)$ (na razie elementy $Z(j)$, $j = 1, \dots, n$, są dowolne) w postaci tabelarycznej, gdzie na przecięciu każdego wiersza i kolumny stoi jeden element sumy. Sumując teraz elementy tabeli pionowo oraz przyjmując, że $Z(j) = K(j)$, $j = 1, \dots, n$, otrzymujemy

$$n \sum_{j=1}^n K(j) = \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{m=1}^{n-i} K(m) + \sum_{j=1}^n jK(j) \quad (3.107)$$

a stąd w oparciu o (3.105) poszukiwany wzór (3.106).

Tabela 3.1: Wyrażenie $\sum_{j=1}^{n-1} \sum_{m=1}^{n-i} K(m) + \sum_{j=1}^n jZ(j)$

$j = 1$	$K(1)$	$K(2)$	\dots	$K(n-2)$	$K(n-1)$	$Z(n)$
$j = 2$	$K(1)$	$K(2)$	\dots	$K(n-2)$	$Z(n-1)$	$Z(n)$
\dots	\dots	\dots	\dots	\dots	\dots	\dots
$j = n-1$	$K(1)$	$Z(2)$	\dots	$Z(n-2)$	$Z(n-1)$	$Z(n)$
$j = n$	$Z(1)$	$Z(2)$	\dots	$Z(n-2)$	$Z(n-1)$	$Z(n)$

3.12.1 Dyspersja a funkcja autokorelacji

Ze wzorów (3.61) oraz (3.106) wynika, że znalezienie zależności sumarycznej dyspersji σ_X od czasu dla długich czasów wymaga znajomości zależności sumarycznej funkcji autokorelacji \mathcal{K} od n dla dużych n a więc zależności cząstkowej funkcji autokorelacji K od n dla dużych n .

Istnieją co najwyżej trzy różne przypadki asymptotycznego (gdy $n \rightarrow \infty$), monotonicznego zanikania cząstkowej funkcji autokorelacji

- 1) zanikanie szybsze niż $1/n$ czyli, $K(n) \approx Cn^{-(1+\alpha)}$, $0 < \alpha$,
- 2) zanikanie wolniejsze niż $1/n$ czyli, $K(n) \approx Cn^{-\gamma}$, $0 < \gamma < 1$,
- 3) $K(n) \approx C/n$,

gdzie $C(> 0)$ jest pewną stałą. Przypadek 1) definiuje tzw. autokorelacje krótkozasięgowe, zaś przypadek 2) autokorelacje długozasięgowe; sytuacja 3) określa przypadek marginalny (przejściowy).

Przedstawmy teraz funkcję autokorelacji w postaci sumy dwóch następujących składników

$$\mathcal{K}(n) = \mathcal{K}(n_0) + \mathcal{K}_>(n), \quad (3.108)$$

gdzie

$$\mathcal{K}_>(n) = n \sum_{j=n_0+1}^n K(j) - \sum_{j=n_0+1}^n jK(j), \quad (3.109)$$

tutaj n_0 jest taką najmniejszą liczbą naturalną powyżej której oba sumowania w (3.108) można zastąpić całkowaniem. Zatem

$$\mathcal{K}_>(n) \approx n \int_{n_0}^n K(j) dj - \int_{n_0}^n jK(j) dj; \quad (3.110)$$

jak widać, $\mathcal{K}(n_0)$ jest stałą (nieistotną dla dalszych rozważań) - oznaczamy ją przez C_0 . Można teraz wyznaczyć asymptotyczne zachowanie sumarycznej funkcji autokorelacji $\mathcal{K}(n)$ dla trzech wspomnianych powyżej przypadków.

Przypadek 1. Rozważmy najpierw sytuację gdy $0 < \alpha \neq 1$. Wtedy, z (3.108) oraz (3.110) po wykonaniu prostego całkowania wynika, że dla $n \rightarrow \infty$

$$\mathcal{K}_>(n) \approx Cn \int_{n_0}^n \frac{1}{j^{1+\alpha}} dj - C \int_{n_0}^n \frac{1}{j^\alpha} dj = C'_0 + C_1 n^{1-\alpha} + C_2 \frac{1}{n^\alpha}, \quad (3.111)$$

gdzie C'_0 , C_1 i C_2 są stałymi (które łatwo można powiązać ze stałą C oraz wykładnikiem α).

Rozważmy teraz ten sam przypadek ale dla szczególnej sytuacji gdy $\alpha = 1$. Wówczas, analogicznie jak poprzednio, z (3.108) oraz (3.110) otrzymujemy

$$\mathcal{K}(n) \approx C'_0 + C_1 \ln(n) + C_2 n \approx C_2 n. \quad (3.112)$$

Jak widać (3.108), (3.111) oraz (3.112), w przypadku autokorelacji krótkozasięgowych sumaryczna funkcja autokorelacji jest (w obu sytuacjach) asymptotycznie liniową funkcją liczby pojedynczych przemieszczeń n . Zatem, z równania (3.61) na wariancję sumarycznego przemieszczenia cząsteczki otrzymujemy, że

$$(\sigma_X(n))^2 \approx n((\sigma_x)^2 + C_2) \sim n. \quad (3.113)$$

Zatem, korelacje krótkozasięgowe nie zmieniają brownowskiego charakteru błędów przypadkowych, zmieniając jedynie wielkość dyspersji.

Przypadek 2. Wykonując obliczenia analogicznie jak w poprzednim przypadku, otrzymujemy

$$\mathcal{K}(n) \approx C'_0 + C_1 n + C_2 n^{2-\gamma} \approx C_2 n^{2-\gamma}, \quad (3.114)$$

przy czym jak widać, wykładnik $2 - \gamma > 1$. Łącząc powyższe wyrażenie z (3.61) dostajemy

$$(\sigma_X(n))^2 \approx n((\sigma_x)^2 + C_1) + C_2 n^{2-\gamma} \sim n^{2-\gamma}. \quad (3.115)$$

Zatem dyspersja sumarycznego przemieszczenia rośnie superliniowo z całkowitą liczbą przemieszczeń. Wynik ten oznacza, że korelacje długozasięgowe zmieniają klasę uniwersalności. Mówimy teraz o superdyfuzji (a dokładniej supersamodyfuzji) cząsteczki. Zauważmy, że skrajnym przypadkiem superdyfuzji jest tzw. dyfuzja balistyczna odpowiadająca wykładnikowi $\gamma = 0$ co fizycznie oznacza, że wszystkie pojedyncze przemieszczenia są identyczne (tzn. o jednakowej długości i zwrócone w tę samą stronę) - może to opisywać skrajny przypadek "dyfuzji" polimeru o 100%-owej sztywności. Innymi słowy, może to być np. ruch jednostajny (ze stałą prędkością) sztywnego pręta.

Przypadek 3. Analogicznie jak w poprzednich przypadkach, z (3.108) oraz (3.110) otrzymujemy (dla asymptotycznie dużych n) po prostych obliczeniach,

$$(\sigma_X(n))^2 \approx n((\sigma_x)^2 + C_1) + C_2 n \ln(n) \sim n \ln(n). \quad (3.116)$$

Jak widać, jest to rezultat o jeszcze innym charakterze niż dwa poprzednie - istnienie korelacji niezwykle wzbogaca problematykę szeroko rozumianej dyfuzji.

Należy podkreślić, że autokorelacje długozasięgowe prowadzą w ogólności do rozkładów granicznych różniących się od rozkładu Gaussa (J.-P. Bouchaud and A. Georges, *Anomalous Diffusion in Disordered Media: Statistical Mechanisms, Models and Physical Applications*, Phys. Rep. 195 (1990) 127-293).

3.13 CTG a zanik potęgowy: "zderzenie dwóch światów"

Omawiamy przykład, który pozwoli zorientować się w sposobie funkcjonowania CTG w przypadku gdy dany rozkład zanika algebraicznie, czyli posiada algebraicznie zanikający "ogon", ale (pomimo to) skończoną wariancję (patrz D. Sornette: "Critical Phenomena in Natural Sciences. Chaos, Fractals, Selforganization and Disorder: Concepts and Tools", Springer-Verlag, Berlin 2000, oraz J.-P. Bouchaud, M. Potter: "Theory of Financial Risks. From Statistical Physics to Risk Management", Cambridge Univ. Press, Cambridge 2001). Zauważmy, że jest to sytuacja odmienna od tej z jaką mamy do czynienia np. w przypadku obciętego rozkładu Lévy'ego (patrz R.N. Mantegna, H.E. Stanley: "Ekonofizyka. Wprowadzenie", tłum. ang., Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa 2001), gdzie zmienna losowa podlega rozkładowi Lévy'ego jedynie w skończonym zakresie (poza którym rozkład po prostu zanika).

3.13.1 Przykład: rozkład Gaussa i rozkład potęgowy w jednym

W pierwszym etapie rozważmy jawną postać gęstości rozkładu Studenta (czyli W.S. Gosseta) dla trzech stopni swobody (tzn. $\mu = 3$)

$$p(x) = \frac{1}{\pi} \frac{2\sigma^3}{(\sigma^2 + x^2)^2}, \quad (3.117)$$

która jest scharakteryzowana skończoną wariancją równą po prostu σ^2 ; często w literaturze dla (wąsko rozumianego) rozkładu Studenta przyjmuje się, iż $\sigma^2 = 3$.

W dalszej części wykorzystujemy funkcję charakterystyczną gęstości rozkładu (3.117) czyli transformatę Fouriera tej gęstości $\tilde{p}(k)$, którą łatwo wyznaczyć (patrz np. H. Batemann, A. Erdélyi: "Tables of Integral Transforms", Vol.1, McGraw-Hill Book Comp. Inc., New York 1954) wiedząc, że

$$\mathcal{F}\left[\frac{1}{(\sigma^2 + x^2)(\sigma_1^2 + x^2)}\right] = \frac{\pi}{(\sigma^2 - \sigma_1^2)} \left[\frac{1}{\sigma_1} \exp(-(\sigma_1 - \sigma) |k|) - \frac{1}{\sigma} \exp(-\sigma |k|) \right] \quad (3.118)$$

i przyjmując $\sigma_1 \rightarrow \sigma$ (jak zwykle, $\mathcal{F}[f(x)]$ oznacza transformatę Fouriera funkcji $f(x)$). Stąd otrzymujemy, po uwzględnieniu (3.117), że

$$\tilde{p}(k) = (1 + \sigma |k|) \exp(-\sigma |k|). \quad (3.119)$$

Zauważmy, że dla $(x/\sigma)^2 \gg 1$ rozkład (3.117) przybiera postać

$$p(x) \approx \frac{1}{\pi} \frac{2\sigma^3}{|x|^{d+\mu}}, \quad (3.120)$$

gdzie $d = 1$. Tego typu algebraiczny zanik rozkładu $p(x)$ prowadzi do nieskończonych wartości momentów absolutnych zmiennej losowej x czyli

$$\langle |x|^m \rangle = \infty, \quad (3.121)$$

dla wykładnika $m \geq \mu$.

Natomiast, gdy $(x/\sigma)^2 \ll 1$,

$$p(x) \approx \frac{1}{\pi\sigma^2} [1 - 2(\frac{x}{\sigma})^2] \approx \frac{1}{\sqrt{\pi/2}} \cdot p_G(x; \sigma/2), \quad (3.122)$$

gdzie $p_G(x; \sigma/2)$ jest (centrowanym w zerze) rozkładem Gaussa zmiennej losowej x o odchyleniu standardowym $\sigma/2$.

Rys.3.3 jest podsumowaniem powyższych rozważań - przedstawiono na nim zarówno ścisły rozkład (3.117) jak też pozostałe, przybliżone jeden (3.120) i dwa w wyrażeniu (3.122). Jak widać, obszar wokół $x = \sigma$ można traktować jako przejściowy pomiędzy skrajnymi, omawianymi powyżej.

Przejdziemy teraz do drugiego etapu następnich rozważań. Zauważmy, że skończona wariancja wyjściowego rozkładu (3.117) pozwala na zastosowanie Centralnego Twierdzenia Granicznego. W tym celu wyrzucimy gęstość prawdopodobieństwa dla sumarycznej zmiennej losowej $X_n = x_1 + x_2 + \dots + x_n$, $n = 2, 3, \dots$, w postaci następującej konwencji

$$\begin{aligned} P_n(X_n) &= \overbrace{(p \otimes p \otimes \dots \otimes p)}^n(X_n) = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dX_{n-1} \int_{-\infty}^{\infty} dX_{n-2} \dots \int_{-\infty}^{\infty} dX_2 \int_{-\infty}^{\infty} dX_1 \\ &\quad p(X_n | X_{n-1}) p(X_{n-1} | X_{n-2}) \dots p(X_2 | X_1) p(X_1), \end{aligned} \quad (3.123)$$

gdzie $p(X_j | X_{j-1})$ jest gęstością prawdopodobieństwa wystąpienia określonej zmiennej sumarycznej X_j pod warunkiem pojawienia się sumarycznej zmiennej X_{j-1} , $j = 2, 3, \dots, n$. W dalszym ciągu, korzystając z warunku jednorodności (stacjonarności) procesu

$$p(X_j | X_{j-1}) = p(X_j - X_{j-1}), \quad j = 2, 3, \dots, n, \quad (3.124)$$

otrzymujemy z (3.123), że transformata Fouriera

$$\tilde{P}_n(k) = [\tilde{p}(k)]^n = (1 + \sigma |k|)^n \exp(-n\sigma |k|); \quad (3.125)$$

czyli funkcja charakterystyczna $\tilde{P}_n(k)$ prawdopodobieństwa $P_n(X_n)$ jest n -tą potęgą funkcji charakterystycznej $\tilde{p}(k)$ elementarnego prawdopodobieństwa $p(x)$. Rozkład spełniający taką własność nazywamy *nieskończenie podzielny*. Rozkłady nieskończenie podzielne nie muszą być stabilne (czyli mogą zmieniać swój kształt przy

przechodzeniu od pojedynczej do sumarycznej zmiennej losowej); na szczęście odwrotne twierdzenie jest prawdziwe. Niestety nie jest znana zamknięta postać rozkładu posiadającego funkcję charakterystyczną w postaci (3.125) dlatego dalej jesteśmy zmuszeni korzystać jedynie z odpowiednich przybliżeń.

Rozwijając działanie $\ln \tilde{P}_n(k)$ w szereg w otoczeniu punktu $k = 0$ i ograniczając się do wyrazów rzędu $|k|^3$, można przybliżyć funkcję charakterystyczną (3.125) w następujący sposób

$$\tilde{P}_n(k) \approx 1 - \frac{1}{2}n\sigma^2 k^2 + \frac{1}{3}n\sigma^3 |k|^3 \quad (3.126)$$

czyli także z dokładnością do wyrazów rzędu $|k|^3$. Podkreślmy, że wyrazy tego typu zależą od modułu k co oznacza, że trzecia pochodna funkcji charakterystycznej $\tilde{P}_n(k)$ po k w zerze nie istnieje (istnieją tylko pochodne lewo- i prawostronne, które są od siebie różne) a tym samym nie istnieje trzeci moment rozkładu, tak jak to ma miejsce dla potęgowo zanikającego rozkładu o wykładniku 4. Zauważmy, że niezależnie od wartości $n = 1, 2, \dots$, wyraz $\sim |k|^3$, który możemy nazwać singularnym, jest zawsze obecny tzn. funkcja charakterystyczna jest stabilna ze względu na ten wyraz lub inaczej algebraicznie zanikający "ogon" rozkładu jest stabilny ze względu na n . Wynika stąd, że dla dowolnego n istnieje zawsze na tyle duże X , że

$$P_n(X) \approx \frac{2n\sigma^\mu}{\pi X^{d+\mu}}. \quad (3.127)$$

Można łatwo sprawdzić, korzystając z (3.125), że wariancja $\sigma^2(n)$ rozkładu $P_n(X_n)$ wynosi

$$\sigma^2(n) \left(= -\frac{d^2 \tilde{P}_n(k)}{dk^2} \Big|_{k=0} \right) = n \cdot \sigma^2, \quad (3.128)$$

czyli jest skończona dla skończonego n . W oparciu o CTG otrzymujemy, dla dostatecznie dużego $n (\gg 1)$, że

$$P_n(X) \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi n\sigma^2}} \exp\left(-\frac{X^2}{2n\sigma^2}\right), \quad (3.129)$$

czyli jest asymptotycznie przybliżany rozkładem Gaussa o wariancji danej przez (3.128). Przybliżenie to jest tym lepsze, czyli zachodzi dla tym większego zakresu zmiennej losowej X , im większe jest n . Zatem możemy oczekiwać istnienia takiej charakterystycznej wartości $X_+(n)$ monotonicznie rosnącej ze wzrostem n , że jedynie dla $X \ll X_+(n)$ spełnione jest przybliżenie gaussowskie (3.129) natomiast dla $X \gg X_+(n)$ właściwym przybliżeniem $P_n(X_n)$ jest jakiś inny rozkład - kluczowym zadaniem niniejszych rozważań jest znalezienie tego rozkładu (na podstawie rozważań przeprowadzonych na wstępie niniejszego rozdziału przypuszczamy, że jest to rozkład potęgowy) oraz zależności $X_+(n)$ od n .

Teraz bez trudu znajdujemy to poszukiwane pośrednie X_{tr} , które najlepiej charakteryzuje obszar przejściowy; porównując (3.127) z (3.129)

$$\frac{2n\sigma^\mu}{\pi[X_{tr}(n)]^{d+\mu}} \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi n\sigma^2}} \exp\left(-\frac{[X_{tr}(n)]^2}{2n\sigma^2}\right), \quad (3.130)$$

otrzymujemy po prostych przekształceniach (zaniedbując poprawkę logarytmiczną i stałe składniki)

$$X_{tr}(n) \approx \sigma \sqrt{(\mu - 2)n \ln n}, \quad (3.131)$$

co, jak widać, ma sens tylko dla $\mu \geq 2$. Rys.3.4 dobrze ilustruje opisaną powyżej sytuację (dla $\mu = 3$): ze wzrostem n wzrasta szybciej niż liniowo rozmiar obszaru, w którym sumaryczna zmienna losowa podlega rozkładowi Gaussa. Innymi słowy, ze wzrostem n coraz dalej odsuwa się granica obszaru w którym zmienna losowa X posiada rozkład potęgowy czyli maleje prawdopodobieństwo $P(|X| >> X_{tr})$. Oszacujemy to prawdopodobieństwo

$$\begin{aligned} P(|X| \geq X_{tr}) &= P(X \geq X_{tr}) + P(X \leq -X_{tr}) \\ &\geq P(|X| >> X_{tr}) = P(X >> X_{tr}) + P(X << -X_{tr}), \end{aligned} \quad (3.132)$$

gdzie prawdopodobieństwo

$$\begin{aligned} P(X \geq X_{tr}) + P(X \leq -X_{tr}) &= 2 \int_{\sigma \sqrt{(\mu-2)n \ln n}}^{\infty} \frac{2n\sigma^\mu}{\pi X^{d+\mu}} dX \\ &= \frac{2}{\mu(\mu-2)^{\mu/2} \pi} \frac{1}{n^{\mu/2-1} \ln^{\mu/2} n}, \end{aligned} \quad (3.133)$$

dążąc, dla $\mu > 2$, do zera gdy $n \rightarrow \infty$. Tym samym prawdopodobieństwo $P(|X| >> X_{tr})$ dąży do zera nie wolniej niż $1/n^{\mu/2-1} \ln^{\mu/2} n$. Zauważmy, że dla $\mu \leq 2$ całe nasze postępowanie w niniejszym rozdziale opiera się - mamy wówczas do czynienia z rozkładem Lévy'ego a więc z odmiennym "światem statystycznym", któremu poświęcone są dalsze części niniejszej pracy.

3.14 Procesy multiplikatywne: rozkład logarytmiczno-normalny

Rozkład logarytmiczno-normalny pojawił się przy rozwiązywaniu wielu zagadnień probabilistycznych np. typu kruszenia (rozdrażniania) węgla, kamienia bądź rudy (R. Nowak: "Statystyka dla fizyków", Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa 2002). Wykażemy idąc za Kolmogorowem (E.W. Montroll, M.F. Shlesinger: "On the wonderful world of random walks" in "Nonequilibrium Phenomena II. From

Stochastics to Hydrodynamics, Studies in Statistical Mechanics XI, eds. E.W. Montroll, J.L. Lebowitz, North-Holland, Amsterdam 1984, pp.1-121), że tego typu procesy mają charakter multiplikatywny (iloczynowy). Dotychczas omawialiśmy procesy addytywne (sumaryczne) tzn. będące sumą niezależnych, pojedynczych zmiennych losowych (bądź też skorelowanych w sposób krótkozasięgowy); obecnie pochylimy się nad procesami multiplikatywnymi tzn. takimi, które są iloczynem tego typu zmiennych losowych czyli zachodzącymi np. w sposób sekwencyjny.

Przypuśćmy, że w wyniku wielostopniowego (sekwencyjnego) kruszenia liniowy rozmiar ziaren X tworzy ciąg zmiennych losowych $(X_0, X_1, X_2, \dots, X_{n-1}, X_n)$, gdzie X_n jest liniowym (średnim) rozmiarem pojedynczego ziarna na n -tym etapie (poziomie) kruszenia przy czym $0 < X_n < X_{n-1}$, $n = 1, 2, \dots$. Oczywiście, X_n jest zmienną losową posiadającą pewien (skończony) rozrzut statystyczny wokół średniego rozmiaru ziaren⁸ na danym etapie (czyli po pewnym czasie) kruszenia n . Kolejna różnica $X_n - X_{n-1} (< 0)$ jest jakąś przypadkową częścią (ułamkiem) wyjściowego rozmiaru ziarna X_{n-1}

$$X_n - X_{n-1} = R_n \cdot X_{n-1}, \quad n = 1, 2, \dots, \quad (3.134)$$

gdzie R_n jest zmienną losową z przedziału $-1 < R_n < 0$, o rozkładzie (dla prostoty) niezależnym od n . Z powyższego wyniku (poprzez wielokrotne wykorzystanie rekurencji (3.134) dla kolejnych n), że zmienna losowa X_n ma następującą reprezentację multiplikatywną

$$x_n \stackrel{\text{def.}}{=} \frac{X_n}{X_0} = \prod_{j=1}^n p_n, \quad n = 1, 2, \dots, \quad (3.135)$$

gdzie $p_n = 1 + R_n$ jest zmienną losową z przedziału $0 < p_n < 1$ (oczywiście, o rozkładzie także niezależnym od n). Zatem, logarytmując stronami to wyrażenie otrzymujemy addytywną reprezentację równania (3.135)

$$\ln(x_n) = \sum_{j=1}^n y_j, \quad n = 1, 2, \dots, \quad (3.136)$$

gdzie $y_n = \ln(p_n)$ jest zmienną losową o skończonej wartości przeciętnej $\langle y \rangle = \langle \ln p \rangle < 0$ i skończonej wariancji $\sigma^2 = \langle y^2 \rangle - \langle y \rangle^2 = \langle (\ln p)^2 \rangle - \langle \ln p \rangle^2$, (oczywiście, obie wielkości są teraz niezależne od n).

Zauważmy, że równanie (3.134) można, dla asymptotycznie dużych n , przepisać w postaci

$$X_n = \exp(-n |\langle \ln p \rangle|) X_0, \quad (3.137)$$

która pokazuje, że $|\langle p \rangle|$ pełni rolę współczynnika szybkości zaniku zmiennej X_n , tzn. mówi o tym jak szybko proces $\ln(x_n)$ oddala się nieograniczenie od stanu wyjściowego $\ln(x_0 = 1) = 0$. Jak widać, zmienna losowa $\ln(x_n)$ nie ma dolnego ograniczenia,

⁸Mowa tu o średniej $\langle X_n \rangle$ ze wszystkich średnich rozmiarów ziaren na danym etapie kruszenia n czyli jest to średnia średniej.

natomiast od góry jest ograniczona przez 0. Wynika stąd, że tylko wtedy gdy wpływ tego ograniczenia jest zaniedbywalny, tzn. gdy $|\langle y \rangle| \gg \sigma$, można przyjąć, iż sumaryczna zmienna losowa $\sum_{j=1}^n y_j$ spełnia Centralne Twierdzenie Graniczne⁹ czyli, że zmienna losowa $\ln(x_n)$ posiada rozkład asymptotycznie normalny

$$P(\ln(x_n))d\ln(x_n) \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_n^2}} \exp\left(-\frac{(\ln(x_n) - \mu_n)^2}{2\sigma_n^2}\right) d\ln(x_n) \quad (3.138)$$

gdzie średnia po wszystkich ciarnach na danym etapie kruszenia $\mu_n \stackrel{\text{def.}}{=} \langle \ln(x_n) \rangle = \sum_{j=1}^n \langle y_j \rangle = n\langle \ln p \rangle$ oraz sumaryczna wariancja $\sigma_n^2 = \sigma^2(\ln(x_n)) = \sum_{j=1}^n \sigma^2(y_j) = n\sigma^2$. Z rozkładu (3.138) otrzymujemy natychmiast rozkład logarytmicznie-normalny (czyli w skrócie log-normalny) dla zmiennej x_n

$$\mathcal{P}(x_n) \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_n^2}} \frac{1}{x_n} \exp\left(-\frac{(\ln(x_n) - \mu_n)^2}{2\sigma_n^2}\right), \quad (3.139)$$

lub dla zmiennej x_n/\bar{x}_n , gdzie $\ln \bar{x}_n \stackrel{\text{def.}}{=} \mu_n (= \langle \ln x_n \rangle)$,

$$\mathcal{P}\left(\frac{x_n}{\bar{x}_n}\right) \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_n^2}} \frac{1}{x_n/\bar{x}_n} \exp\left(-\frac{(\ln(x_n/\bar{x}_n))^2}{2\sigma_n^2}\right), \quad (3.140)$$

które stanowią podstawę naszej dalszej dyskusji w tym rozdziale.

Na przykład, łatwo sprawdzić, że rozkład $\mathcal{P}\left(\frac{x_n}{\bar{x}_n}\right)$ posiada maksimum dla

$$\frac{x_n}{\bar{x}_n} = \frac{x_n^{\text{max}}}{\bar{x}_n} = \exp(-\sigma_n^2) \quad (3.141)$$

oraz jest asymetryczny; na rys.3.5 przedstawiono ten rozkład dla zmiennej względnej $Z \stackrel{\text{def.}}{=} x_n/\bar{x}_n$ oraz dyspersji jednostkowej $\sigma_n = 1$ - widać, jak bardzo różni się on od odpowiadającego mu rozkładu normalnemu (Gaussa) o zerowej wartości oczekiwanej i jednostkowej wariancji.

Zauważmy, że maksimum $\ln(x_n^{\text{max}})$ rozkładu (3.139) przesuwają się w stronę liczb coraz bardziej ujemnych w miarę jak n rośnie czyli jest "odpychane" od zera w kierunku ujemnym ze względu na to, że $\langle \ln p \rangle$ jest mniejsze od zera - będzie to jeszcze dyskutowane w rozdz.3.14.4.

Rozkład log-normalny posiada jeszcze jedną charakterystyczną własność mianowicie, znajomość nawet wszystkich momentów tego rozkładu nie określa go jednoznacznie. Można łatwo sprawdzić, że rozkład postaci

$$\mathcal{P}'(Z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_n^2}} \frac{1}{Z} \exp\left(-\frac{\ln^2(Z)}{2\sigma_n^2}\right) [1 + a \sin(2\pi \ln(Z))], \quad -1 < a < 1, \quad (3.142)$$

ma identyczne momenty jak odpowiadający mu rozkład logarytmiczno-normalny (3.140).

⁹Interesującą sytuację, gdy wpływ tego ograniczenia nie jest zaniedbywalny rozważmy w rozdz.3.14.4.

3.14.1 Od rozkładu log-normalnego do potęgowego

Wykażemy teraz ważną własność rozkładu log-normalnego polegającą na imitowaniu rozkładu potęgowego w szerokim zakresie zmiennej niezależnej. Zauważmy w tym celu, że zachodzi następująca tożsamość

$$\exp(a \cdot \ln^2 x) \equiv x^{a \cdot \ln x}; \quad (3.143)$$

korzystając z niej możemy rozkład log-normalny (3.140) przepisać w postaci

$$\mathcal{P}(x_n) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_n^2}} \left(\frac{x_n}{\bar{x}_n} \right)^{-1-\alpha(x_n)}, \quad (3.144)$$

gdzie wolnozmienna funkcja $\alpha(x_n) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2\sigma_n^2} \ln \left(\frac{x_n}{\bar{x}_n} \right)$. Jak widać, gdy spełniony jest warunek

$$\alpha(x_n) \ll 1 \equiv \ln(x_n/\bar{x}_n) \ll 2\sigma_n^2, \quad (3.145)$$

wtedy mamy do czynienia z rozkładem potęgowym o wykładniku potęgi w przybliżeniu równym 1 co stanowi źródło szumu typu $1/f$, o którym jest mowa poniżej.

Na rys.3.6 porównaliśmy rozkład log-normalny (3.140) z odpowiadającym mu (czyli posiadającym tę samą wartość parametru σ_n) rozkładem potęgowym (3.144), który spełnia warunek (3.145) gdyż przyjęliśmy, że $\sigma_n = 10$ oraz $1 \leq Z (= x_n/\bar{x}_n) \leq 100$. Jak widać, rozróżnienie w tych warunkach obu rozkładów jest trudne tym bardziej gdy uwzględnimy (nieobecny na rysunku) nieunikniony rozrzut punktów doświadczalnych.

3.14.2 Log-normalne oraz potęgowe dochody jednostek w społeczeństwie

Równanie (3.134) opisujące proces multiplikatywny można interpretować tak jak to uczynił R. Gibrat w roku 1931 analizując statystykę osób o niskich i średnich dochodach (W. Souma: "Physics of Personal Income", arXiv:cond-mat/0202388 v1 22 Feb 2002); z tego powodu w analizie finansowej charakterystyczny współczynnik $\beta = 1/\sqrt{2\sigma_n^2}$ parametryzujący rozkład log-normalny (3.140) nosi nazwę indeksu Gibrata. Gibrat założył, że roczny przyrost dochodu jednostki $X_n - X_{n-1}$ jest jakimś losowym ułamkiem dochodu X_{n-1} w roku poprzedzającym a sam dochód X_n w dowolnym roku n jest nieujemny. Oznacza to, że czynnik losowy R_n w równaniu (3.134) można traktować (podobnie jak to ma miejsce we wcześniej omawianym procesie kruszenia) jako nie mniejszy od -1 ale nieograniczony od góry (gdyż może się zdarzyć, że w danym roku jednostka osiągnie znaczny zysk, w przeciwieństwie do procesu kruszenia) co nie wpływa na omawiane wyprowadzenie rozkładu log-normalnego.

Na rys.3.7 przedstawiono skumulowane prawdopodobieństwo dochodów osobistych obywateli Stanów Zjednoczonych w latach 1935-36 od najniższych po najwyższe dostępne (w skali $\log - \log$: gwiazdkami, *, zaznaczono dane empiryczne). Widać, że dane dla jednostek o niskich dochodach dają się opisać rozkładem log-normalnym (cienka czarna linia) o indeksie Gibrata $\beta = 1.63$ i wartości średniej $\bar{x}_n = 1100$ [\$], natomiast jednostki o dochodach przeciętnych a zwłaszcza wysokich (gruba czarna linia) opisują się rozkładem Pareto-Lévy'ego o indeksie $\alpha = 1.63$ (gdzie błąd jest na trzecim miejscu po kropce dziesiętnej). W oparciu o te dane stwierdzono, że rozkładowi Pareto podlega blisko 1% osób czynnych zawodowo podczas gdy pozostałe podlegają rozkładowi log-normalnemu. Zaskakującym może być fakt znikomej liczności grupy osób o przeciętnych dochodach osobistych.

Analogiczne wyniki badań przeprowadzonych nad społeczeństwem japońskim w okresie 44 lat od roku 1955 do 1998 zestawiono na rys.3.8, gdzie podano roczne wartości indeksów α and β . Jak widać, w niektórych latach indeks Pareto był większy od 2 co potraktowano jako rozrzut wokół wartości średniej indeksu $\bar{\alpha}$.

Aby wyznaczyć tę wartość średnią zebrano dane z okresu 112 lat od roku 1887 do 1998 i przedstawiono na rys.3.9. Z danych empirycznych dotyczących Japonii wynika, że $\bar{\alpha}$ równa się (z dobrym przybliżeniem) granicznej wartości 2.

3.14.3 Potęgowe dochody przedsiębiorstw

W roku 1999 opublikowana została wielce charakterystyczna praca (K. Okuyama, M. Takayasu, H. Takayasu: "Zipf's law in income distribution of companies", *Physica A* 269 (1999) 125- 131) dotycząca rozkładu rocznych dochodów przedsiębiorstw japońskich, które porównano z analogicznymi dla przedsiębiorstw włoskich - otrzymane wyniki przedstawiono na rys.3.10 Jak widać, gospodarka japońska znacznie lepiej daje się opisać prawem Zipfa niż włoska.

Ponadto, na rys.3.11 przedstawiono bardziej szczegółowe wyniki uzyskane na drodze analizy poszczególnych gałęzi gospodarki japońskiej. Jak widać budownictwo, które w największym stopniu podlega wolnej konkurencji, jest najlepiej opisywane prawem potęgowym w przeciwieństwie do energetyki, w której intrwencjonizm państwa jest największy.

3.14.4 Bardziej realistyczny stochastyczny proces multiplikatywny

Często w multiplikatywnych procesach stochastycznych, za pomocą których staramy się opisać rzeczywistość, zmienne losowe posiadają naturalne ograniczenie od dołu - są dodatnie. Na przykład, cena akcji na giełdzie czy też liczebność określonej populacji zwierząt na danym terytorium w rzeczywistości nigdy nie spada do zera gdyż w przypadku osiągnięcia ustalonego dolnego ograniczenia (na wartość akcji lub liczebność populacji) następuje interwencja z zewnątrz uniemożliwiająca przekroczenie

ustalonego progu. Zatem, rzeczywistość często nakłada na dynamikę stochastyczną prosty warunek brzegowy postaci $X_0 > 0$.

Przypuśćmy zatem, że równanie (3.134) opisuje teraz stochastyczną dynamikę ceny akcji $X_n (\geq X_0)$ w chwili n na giełdzie - przepiszmy to równanie w postaci

$$Y_{n+1} = Y_n + l_n, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (3.146)$$

która wskazuje, że mamy tutaj do czynienia z błędzeniem przypadkowym, w czasie dyskretnym n , gdzie aktualne położenie $Y_n = \ln(X_n)$ oraz aktualne przemieszczenie $l_n = \ln(p_n)$. W dalszym ciągu zakładamy (podobnie jak poprzednio), że zmienna p_n (a więc i l_n) jest losowana z rozkładu, który jest niezależny od n oraz, że $\langle \ln p \rangle < 0$ co nie oznacza, że zawsze $p_n < 1$ - czasami może się zdarzyć, że $p_n \geq 1$ co w sposób zasadniczy odróżnia tę sytuację od omawianej poprzednio¹⁰. Zauważmy, że ten ostatni warunek dopuszcza sytuację gdy od czasu do czasu (w wyniku fluktuacji) $\ln p_n > 0$. Jednakże po chwili następuje dryf w kierunku odpychającej bariery umieszczonej w Y_0 . Należy podkreślić, że istnienie bariery prowadzi do kumulowania się na niej tych wszystkich przemieszczeń, które w przypadku jej braku prowadziłyby do realizacji procesu na lewo od bariery. W ten sposób w pobliżu bariery może powstać dla asymptotycznie dużego n odpychająca siła termodynamiczna (a dokładniej chemiczna, proporcjonalna do gradientu potencjału chemicznego a stąd do gradientu prawdopodobieństwa) prowadząca do dyfuzji w kierunku dodatnim (na prawo od bariery). Istnienie dwóch przeciwnych prądów: dryfu $j_V = -|\langle \ln p \rangle| P_{\infty}(Y_n)$ w kierunku bariery, gdzie $-|\langle \ln p \rangle|$ jest (bezwymiarową) prędkością unoszenia V , i dyfuzji $j_D = -[\langle (\ln p)^2 \rangle - \langle \ln p \rangle^2] \frac{dP_{\infty}(Y_n)}{dY_n}$ w kierunku odwrotnym wywołanej istnieniem tejże bariery, gdzie $\langle (\ln p)^2 \rangle - \langle \ln p \rangle^2$ jest (bezwymiarowym) współczynnikiem dyfuzji D , może prowadzić do powstania (stabilnego) stanu równowagi procesu, w przeciwieństwie do sytuacji omawianej poprzednio (także w niniejszym rozdz.3.14); w następnym rozdz.3.14.5 dokładniej uzasadniamy powyższe rozważania wychodząc od równania mistrza.

Z warunku znikania sumarycznego prądu w stanie równowagi

$$j = j_V + j_D = 0, \quad (3.147)$$

otrzymujemy

$$\frac{dP_{\infty}(Y_n)}{dY_n} = -\frac{|V|}{D} P_{\infty}(Y_n), \quad (3.148)$$

skąd natychmiast wynika, że

$$P_{\infty}(Y_n) = \begin{cases} \alpha \exp(-\alpha(Y_n - Y_0)), & \text{dla } Y_n \geq Y_0 \\ 0, & \text{dla } Y_n < Y_0 \end{cases} \quad (3.149)$$

¹⁰Oczywiście, w obu przypadkach przemieszczenia l_n są z definicji statystycznie niezależne.

gdzie wprowadziliśmy oznaczenie $\alpha = \frac{|V|}{D}$ oraz wykorzystaliśmy warunek normalizacji

$$1 = \int_{Y_0}^{\infty} P_{\infty}(Y_n) dY_n. \quad (3.150)$$

Posługując się równaniem (3.149), powracamy w występującym tam rozkładzie do wyjściowej zmiennej X_n czyli

$$P_{\infty}(Y_n) dY_n = P_{\infty}(X_n) dX_n \Rightarrow P_{\infty}(X_n) = \frac{\alpha X_0^{\alpha}}{X_n^{1+\alpha}}, \quad (3.151)$$

a więc otrzymaliśmy rozkład potęgowy Pareto, o którym mówiliśmy na wstępie.

3.14.5 Równanie Fokkera-Plancka

Omawiany w poprzednim rozdz. 3.14.4 multiplikatywny proces stochastyczny (3.146) z warunkiem brzegowym w postaci blokującej bariery w Y_0 daje się opisać za pomocą równania mistrza dla procesu Markowa

$$\mathcal{P}(Y, t+1) = \int_{-\infty}^{\infty} \pi(l) P(Y-l, t) dl, \quad (3.152)$$

gdzie $\pi(l)$ jest rozkładem z którego losowane jest pojedyncze przemieszczenie l . W dalszym ciągu przyjmujemy, że rozkład $\pi(l)$ jest wąski tzn. jego dyspersja $\sigma = \sqrt{\langle l^2 \rangle - \langle l \rangle^2} \ll \langle l \rangle$. Rozwińmy w (3.152) gęstość prawdopodobieństwa $P(Y-l, t)$ tego, że w chwili t proces znajduje się w położeniu $Y-l$ w szeregu Taylora ograniczając się tylko do trzech pierwszych wyrazów

$$P(Y-l, t) \approx P(Y, t) - l \frac{\partial P(Y, t)}{\partial Y} + \frac{1}{2} l^2 \frac{\partial^2 P(Y, t)}{\partial Y^2}. \quad (3.153)$$

Z (3.152) i (3.153) otrzymujemy po prostych przekształceniach, dla $t \gg 1$, równanie Fokkera-Plancka-Smoluchowskiego

$$\frac{\partial \mathcal{P}(Y, t)}{\partial t} = - \frac{\partial j(Y, t)}{\partial Y}, \quad (3.154)$$

które jest po prostu równaniem ciągłości wyrażającym zasadę zachowania prawdopodobieństwa; tutaj strumień prawdopodobieństwa

$$j(Y, t) = j_V(Y, t) + j_D(Y, t), \quad (3.155)$$

gdzie dryf $j_V(Y, t)$ oraz prąd dyfuzyjny $j_D(Y, t)$ dane są odpowiednio przez

$$\begin{aligned} j_V(Y, t) &\approx V \mathcal{P}(Y, t), \\ j_D(Y, t) &\approx -D \frac{\partial \mathcal{P}(Y, t)}{\partial Y}, \end{aligned} \quad (3.156)$$

przy czym $V = \langle l \rangle$ oraz $D = \sigma^2$. Oczywiście z równań (3.155) i (3.156) i warunku znikania prądu otrzymujemy natychmiast wynik (3.151) z poprzedniego rozdz. 3.14.5.

3.14.6 Swobodne równanie Langevina

Równanie różnicowe (3.146) definiujące nasz proces stochastyczny można zapisać, dla $t \gg 1$, w postaci równania różniczkowego

$$\frac{dY(t)}{dt} = v + \eta(t), \quad (3.157)$$

gdzie δ -samokorelowany szum $\eta(t) \stackrel{\text{def}}{=} I(t) - \langle I \rangle$ posiada zerową wartość przeciętną oraz wariancję równą D . Powyższe równanie jest równoważne (dla sytuacji bezinercyjnej czyli dla tzw. przypadku przetłumienia), swobodnemu równaniu Langevina.

3.14.7 Multiplikatywno-addytywny proces stochastyczny a proces multiplikatywny z ograniczającą, odpychającą barierą

Jak widzieliśmy, każdemu procesowi (czysto) multiplikatywnemu o dodatnim szumie i dodatniej wartości początkowej procesu odpowiada proces addytywny i odwrotnie każdemu procesowi (czysto) addytywnemu odpowiada proces multiplikatywny. Relacja pomiędzy takimi procesami jest zbudowana za pomocą funkcji logarytm mianowicie, logarytmując stronami proces multiplikatywny otrzymujemy odpowiadający mu proces addytywny. Obecnie zajmijmy się procesem multiplikatywno-addytywnym i wskażemy w jakich okolicznościach prowadzi on do rozkładu potęgowego.

Zatem, niech będzie dany stochastyczny proces multiplikatywno-addytywny

$$X_{n+1} = p_n \cdot X_n + b_n, \quad n = 1, 2, \dots, \quad (3.158)$$

gdzie niezależne szumy multiplikatywny p_n i addytywny b_n są dodatnie i losowane odpowiednio z dwóch niezależnych rozkładów¹¹. Należy podkreślić, że w powyższym problemie nie zostały narzucone żadne dodatkowe warunki, np. brzegowe (w tym sensie jest to zagadnienie swobodne). Jak wiadomo (I. Koźniewska: "Równania rekurencyjne", PWN, Warszawa 1972), powyższe równanie posiada ściśle rozwiązanie w postaci

$$X_n = X_0 \exp(n \langle \ln p \rangle) + \sum_{j=1}^n b(j) \prod_{l=j+1}^n p(l), \quad (3.159)$$

gdzie dla wygody zdefiniowaliśmy $\prod_{l=n}^{n-1} p(l) = 1$. W dalszym ciągu dyskutujemy przypadek $\langle \ln p \rangle < 0$, który (jak wykażemy) jest analogiczny do dyskutowanego poprzednio dla procesu (czysto) multiplikatywnego przy czym rolę "siły odpychającej" pełni w powyższym rozwiązaniu dodatnia ("miękką") niejednorodność zbudowana

¹¹Warto wiedzieć, że proces (3.158) nosi także nazwę mapy afinicznej a zmienna X_n nosi w matematyce nazwę zmiennej Kestena.

z obu rodzajów szumu a nie, jak poprzednio, (sztywna) bariera odpychająca. Inny-
mi słowy, rywalizacja obu szumów może prowadzić do powstania asymptotycznie
stabilnego rozwiązania postaci

$$X_{n \rightarrow \infty} = \sum_{j=1}^{n \rightarrow \infty} b(j) \prod_{l=j+1}^{n \rightarrow \infty} p(l), \quad (3.160)$$

które różni się od wartości przeciętnej procesu

$$\langle X \rangle = \frac{\langle b \rangle}{1 - \langle p \rangle}, \quad (3.161)$$

gdzie $\langle p \rangle < 1$.

3.14.8 Równanie Langevina

Równanie rekurencyjne (3.158) można łatwo sprowadzić do postaci równania Lan-
gevina dla asymptotycznie długiego czasu. W tym celu przepisamy (3.158) w postaci

$$\frac{X_{n+1} - X_n}{X_n} = \frac{b_n}{X_n} + p_n - 1, \quad (3.162)$$

skąd otrzymujemy poszukiwane równanie

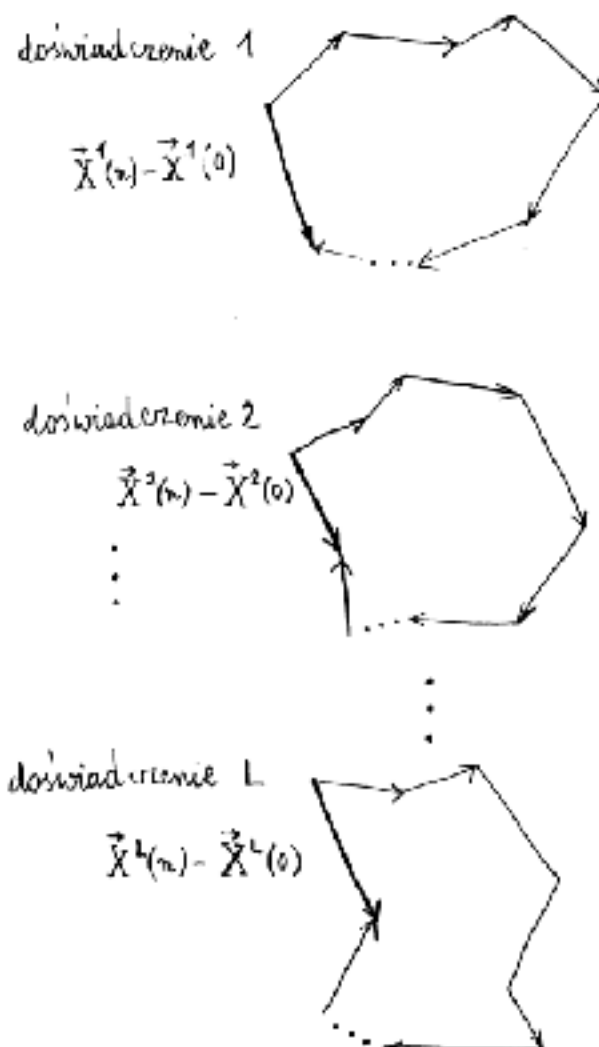
$$\begin{aligned} \frac{dY(t)}{dt} &= F(t) + V + \eta(t), \\ F(t) &\stackrel{\text{def}}{=} b(t) \exp(-Y(t)), \end{aligned} \quad (3.163)$$

gdzie dla wygody zastąpiliśmy dyskretny czas n przez ciągły (bezwymiarowy) t ,
 $Y(t) = \ln X(t)$, (bezwymiarowa) prędkość $V = \langle p \rangle - 1 \approx \langle \ln p \rangle$ oraz δ -samokorelowany
szum $\eta(t) = p(t) - \langle p \rangle$ i posiada wartość przeciętną zero oraz (bezwymiarową) wa-
riancję $D = \sigma^2 = \langle \eta^2 \rangle = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2$. Jak widać, $F(t)$ pełni rolę siły, która jest tym
większa im $Y(t)$ jest mniejsze, przeciwstawiając się osiągnięciu przez proces ujemnych
wartości $Y(t)$. Mamy tutaj do czynienia nie tylko z addytywnym szumem $\eta(t)$ (któ-
ry może przybierać zarówno wartości dodatnie jak i ujemne) ale także z dodatnią
stochastyczną siłą $F(t)$ odgrywającą kluczową rolę w tym problemie.

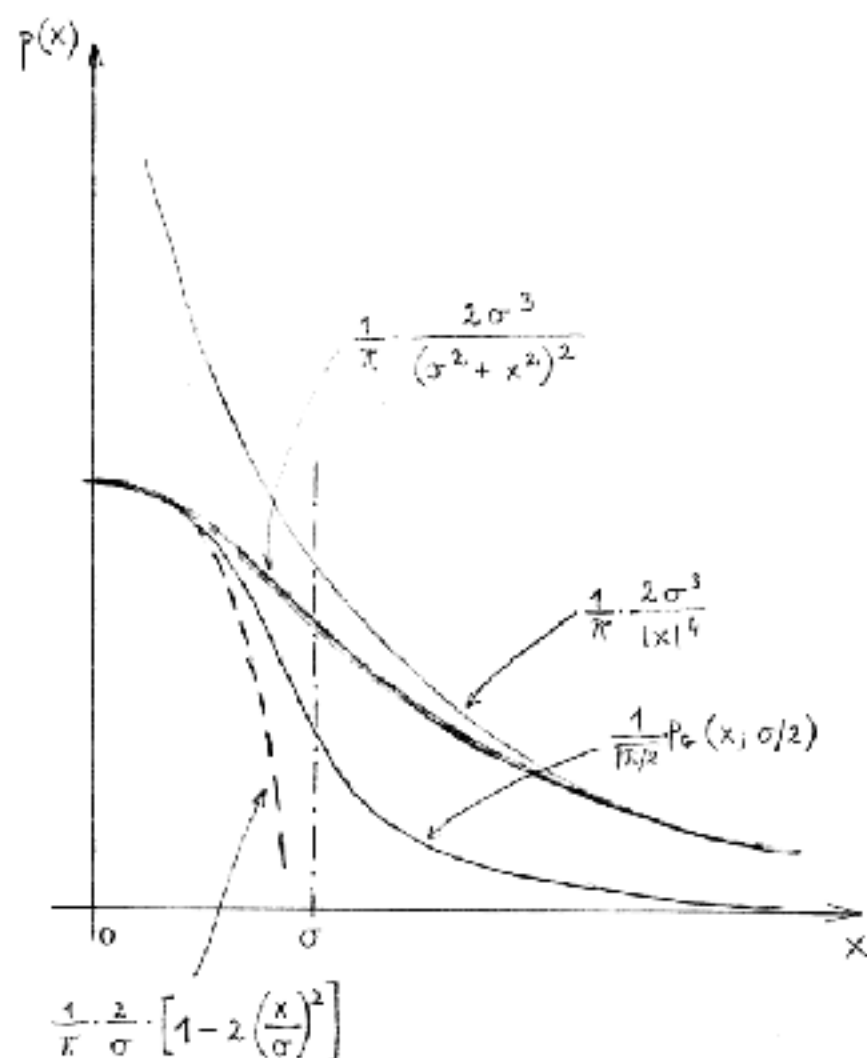
Równanie Fokkera-Plancka odpowiadające równaniu Langevina (3.163) przybie-
ra postać

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(Y, t)}{\partial t} &= -\frac{\partial j(Y, t)}{\partial Y}, \\ j(Y, t) &= [V + F(t)]P(Y, t) - D \frac{\partial P(Y, t)}{\partial Y}, \end{aligned} \quad (3.164)$$

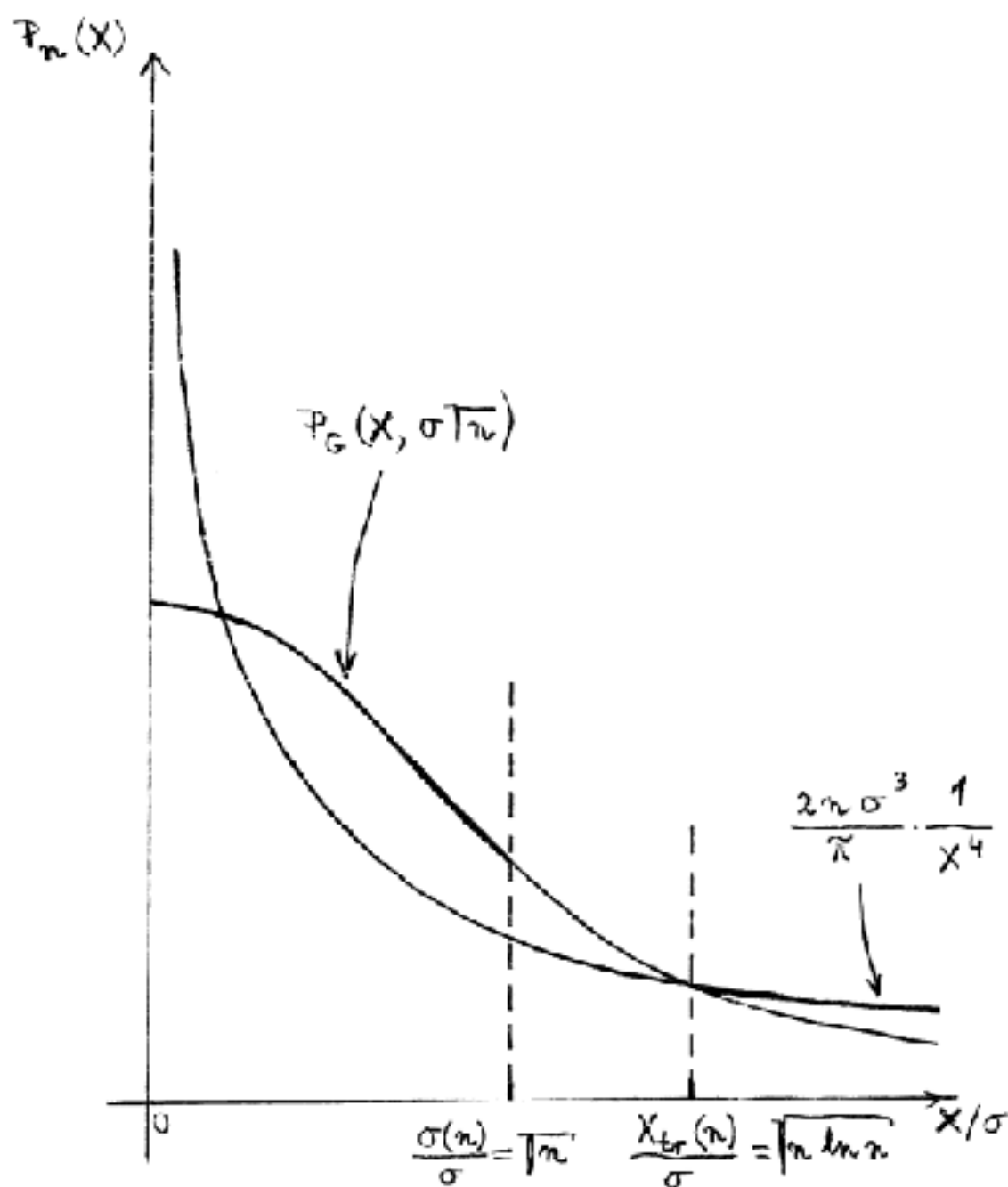
która posiada interesujące nas rozwiązanie równowagowe dla $Y \geq 0$.



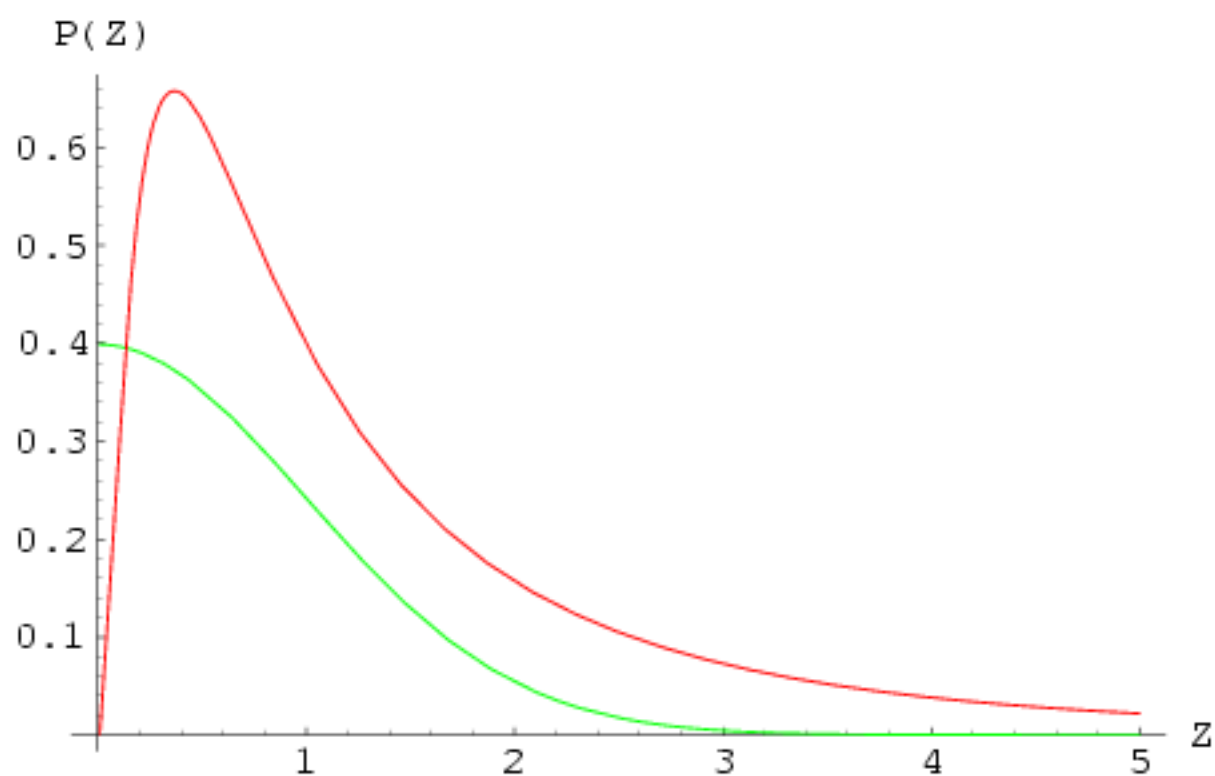
Rysunek 3.2: Zespół statystyczny L doświadczeń podobnych (realizacji czyli makrospowych replik) ruchów Browna pojedynczej makromolekuły.



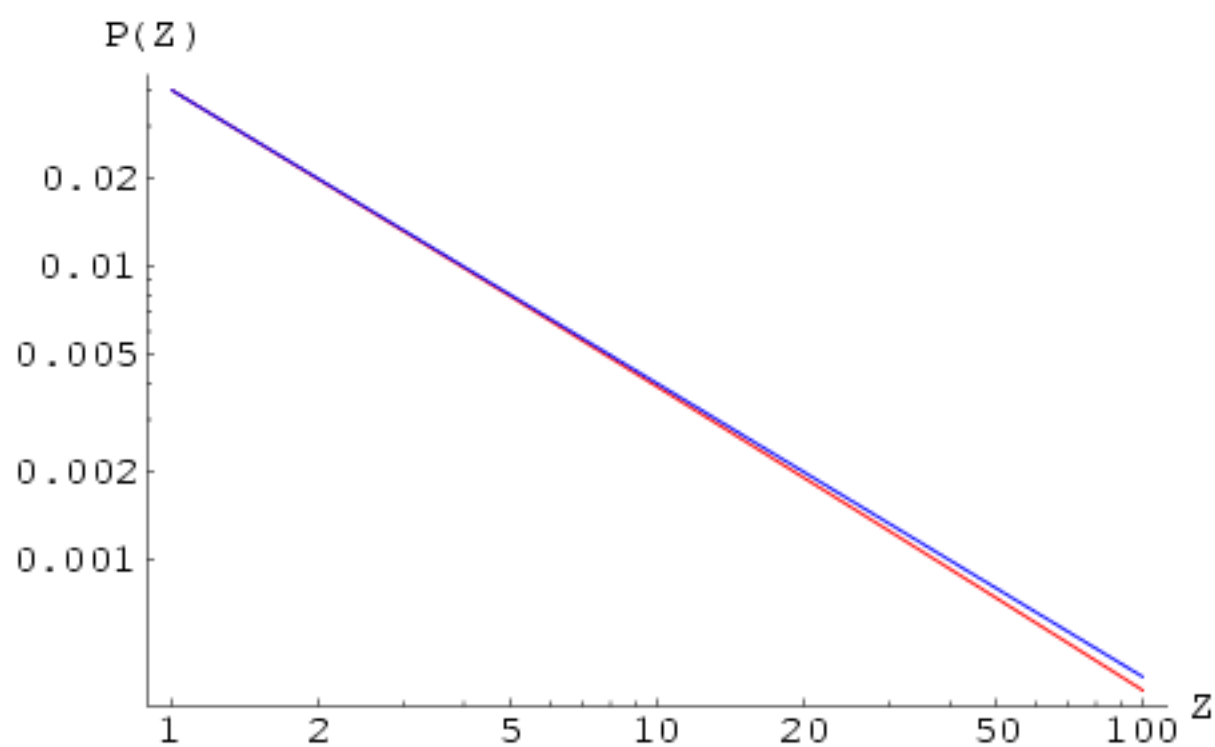
Rysunek 3.3: Ścisły rozkład (3.117) jak też pozostałe, przybliżone jeden (3.120) i dwa w wyrażeniu (3.122).



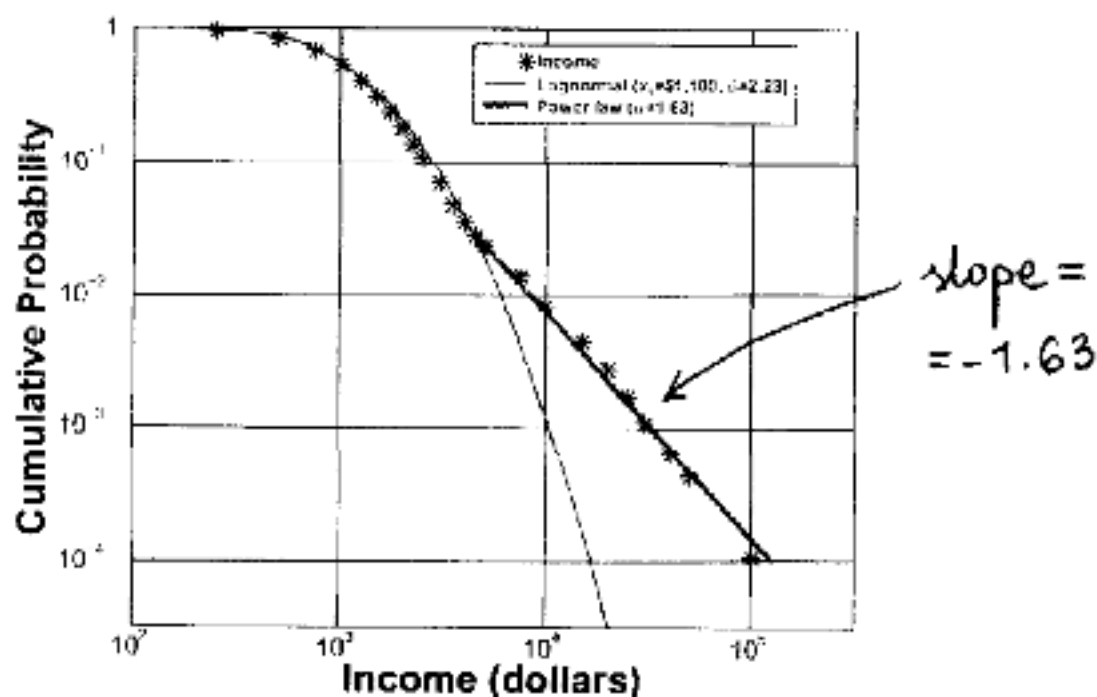
Rysunek 3.4: Ilustracja przejścia od rozkładu Gaussa dla $X \ll X_{tr}(n) = \sigma\sqrt{n \ln n}$ do rozkładu potęgowego dla $X \gg X_{tr}(n) = \sigma\sqrt{n \ln n}$.



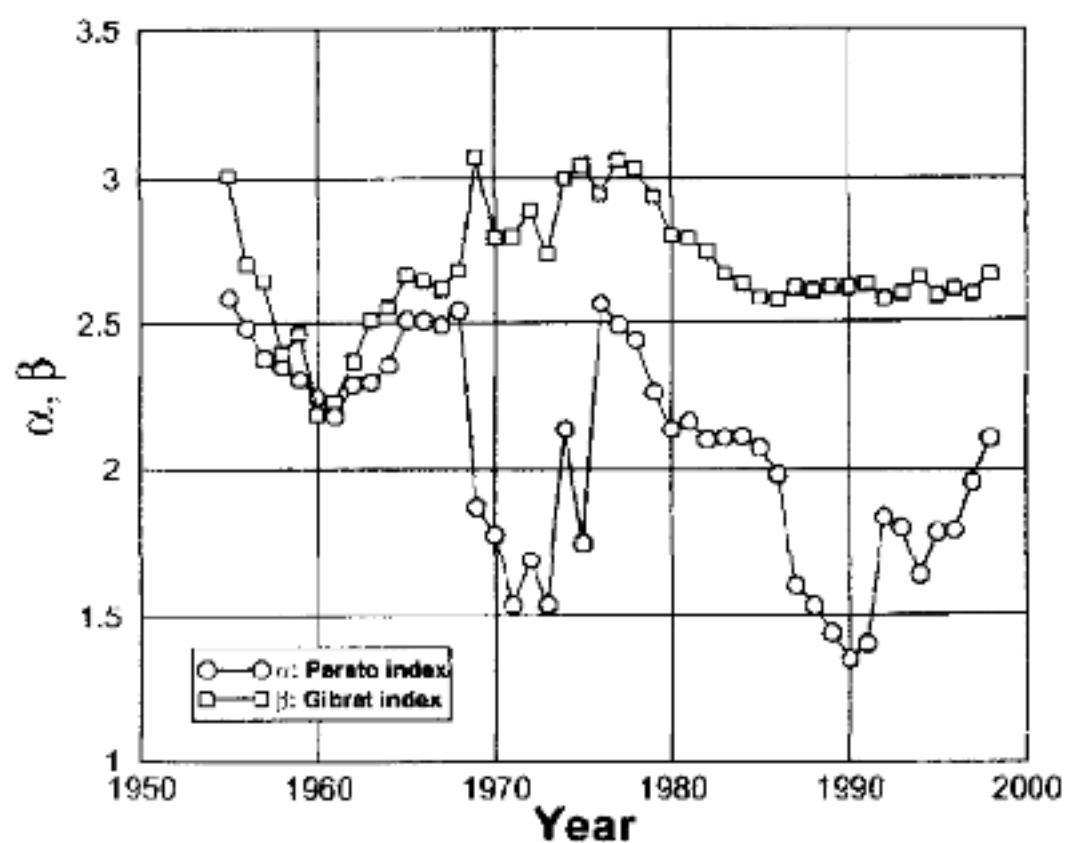
Rysunek 3.5: Porównanie rozkładu log-normalnego (to ten posiadający lokalne maksimum) z odpowiadającym mu rozkładem Gaussa.



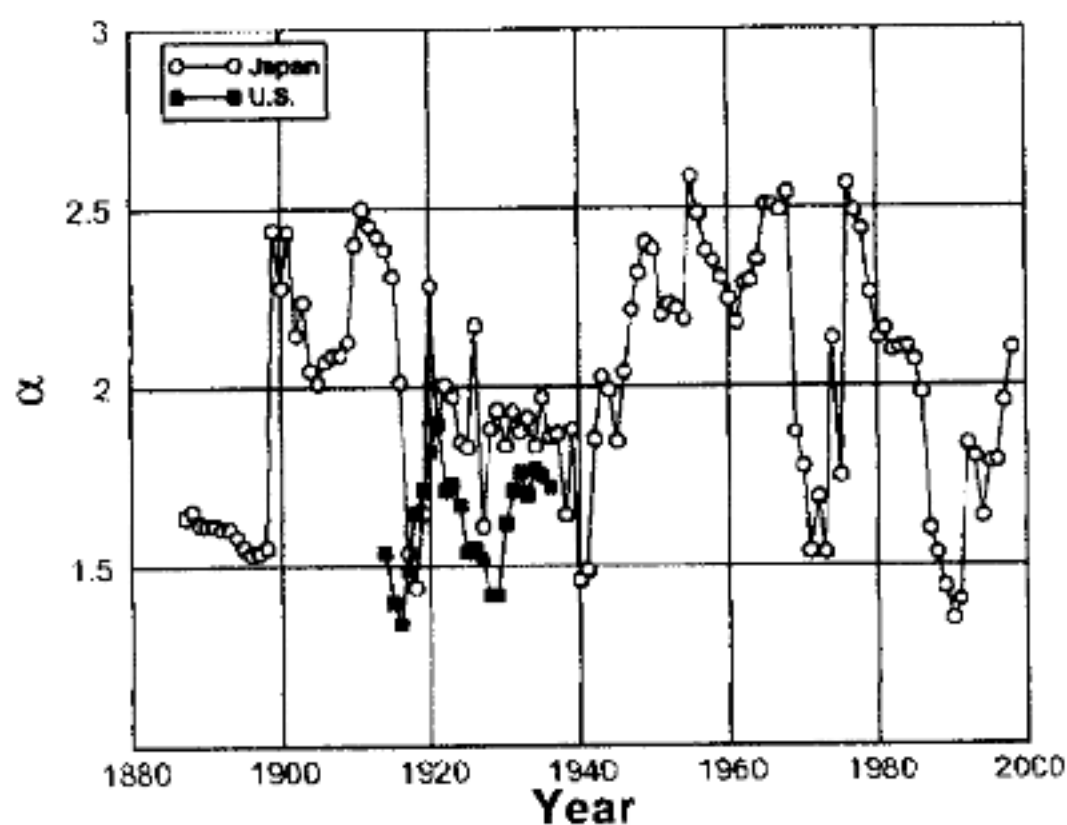
Rysunek 3.6: Porównanie rozkładu log-normalnego (to ten położony nieco niżej) z odpowiadającym mu rozkładem potęgowym w skali log-log.



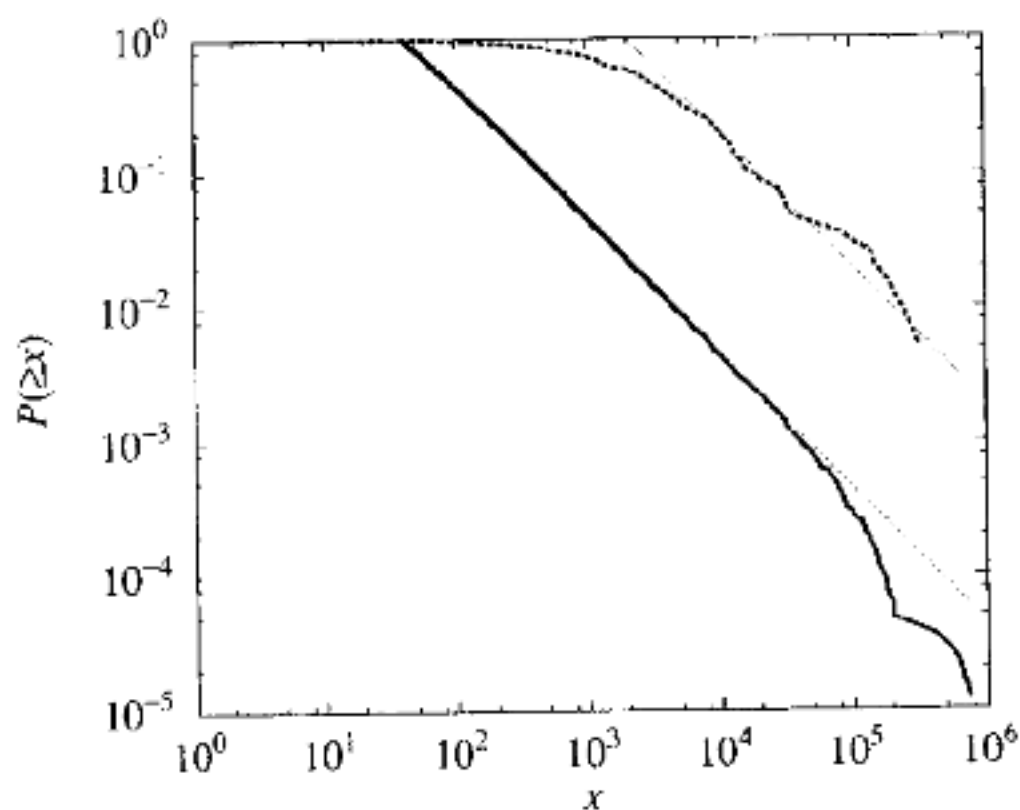
Rysunek 3.7: Porównanie (typu Gibrata) danych empirycznych (gwiazdki) z rozkładem log-normalnym (cienka czarna linia ciągła o indeksie Gibrata $\beta = 2.23$ i $\bar{x}_n = 1100$ [\$]) oraz z rozkładem Pareto-Lévy'ego (gruba linia ciągła o indeksie rozkładu $\alpha = 1.63$).



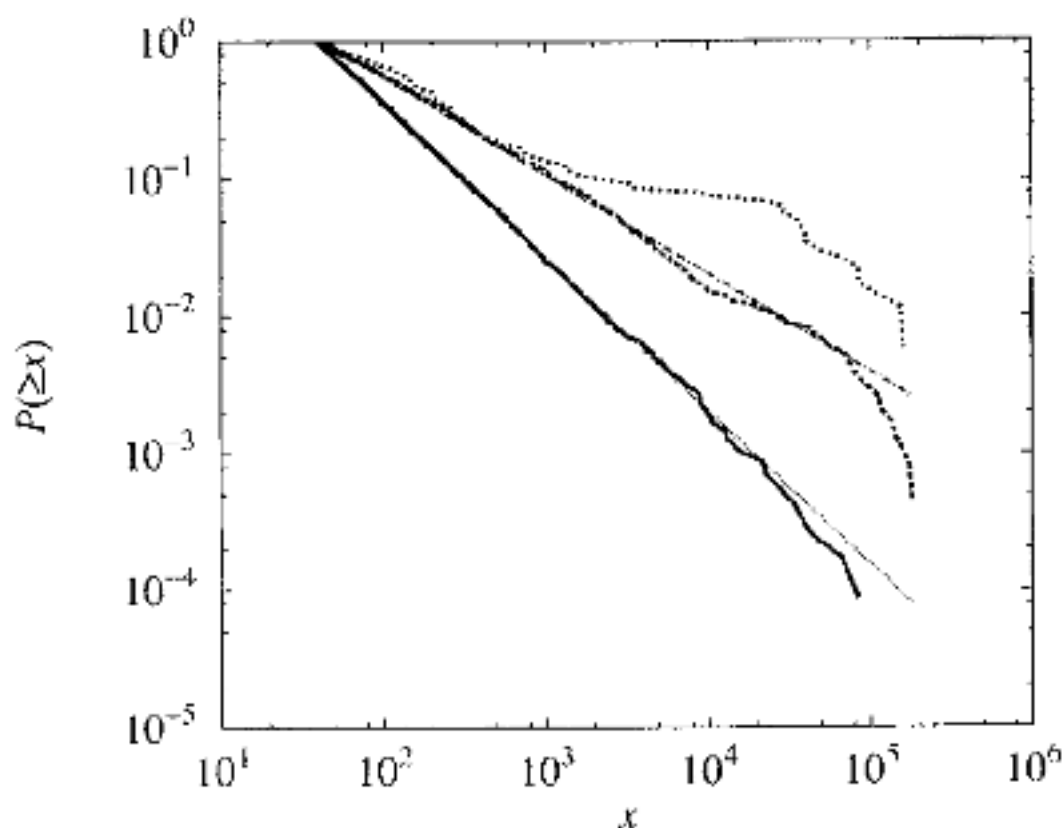
Rysunek 3.8: Wartości indeksów: Pareto α (kółka) i Gibrata β (kwadraciki) otrzymane z danych dotyczących społeczeństwa japońskiego w latach 1955-98.



Rysunek 3.9: Wartości indeksu Pareto α dla Japonii (puste kółka) i Stanów Zjednoczonych (czarne kwadraciki) otrzymane z danych dotyczących odpowiednio społeczeństwa japońskiego w latach 1887-98 i amerykańskiego w latach 1914-1936.



Rysunek 3.10: Skumulowane prawdopodobieństwo dochodów przedsiębiorstw japońskich (linia ciągła) oraz włoskich (linia przerywana) przedstawione w skali $\log - \log$. Widać, że prawo Zipfa (cienkie linie przerywane) jest spełnione znacznie lepiej dla gospodarki japońskiej niż dla włoskiej.



Rysunek 3.11: Skumulowane prawdopodobieństwo dochodów przedsiębiorstw japońskich w ramach trzech charakterystycznych gałęzi gospodarki w skali $\log - \log$: 1) budownictwa (linia ciągła), 2) wyroby elektryczne i elektrotechniczne (w tym oczywiście 'high-tech' - linia przerywana), 3) energetyka (linia kropkowana). Jak widać, chroniona przez państwo energetyka wykazuje największe odstępstwa od prawa potęgowego (linia prosta przerywano-kropkowana); budownictwo, podlegające w największym stopniu działaniu wolnej konkurencji, najlepiej daje się opisać prawem potęgowym (o wykładniku $\alpha = 1.13$ - linia prosta kropkowana); branża elektryczna i elektrotechniczna także daje się opisać (z niełym przybliżeniem) rozkładem potęgowym (o wykładniku $\alpha = 0.72$).

Rozdział 4

Analiza portfelowa

4.1 Opcje jako zasadniczy instrument na rynku finansowym

4.1.1 Kontrakty terminowe

Można powiedzieć, że kontrakty terminowe i ich "łagodniejsze" odmiany w postaci opcji, stanowią zasadnicze instrumenty pochodne obecne na rynkach znacznie zmniejszające ryzyko inwestycyjne. Kontrakt terminowy jest instrumentem finansowym zobowiązującym¹ obie zawierające go strony do realizacji w przyszłości transakcji na warunkach określonych w kontrakcie. Wystawiający kontrakt, czyli przyjmujący (otwierający) tzw. pozycję krótką (ang. 'short position'), przyjmuje na siebie zobowiązanie wystawienia do sprzedaży przedmiotu kontraktu w ustalonym terminie (tzw. terminie realizacji) po ustalonej cenie (czyli cenie umownej). Nabywca kontraktu określany jako przyjmujący (otwierający) pozycję długą (ang. 'long position') zobowiązuje się do zapłacenia ceny umownej po dostarczeniu przedmiotu kontraktu. Podkreślimy, że przedmiot kontraktu odgrywa rolę instrumentu pierwotnego (czyli bazowego).

Bieżąca cena instrumentu bazowego, na który opiewa kontrakt zmienia się w czasie zatem, jego rynkowa cena w terminie realizacji różni się na ogół od ceny umownej. Płatność z racji zawarcia takiego kontraktu jest albo dodatnia albo ujemna: zawsze to co jedna strona zyskuje to druga traci². Dwa zasadnicze rodzaje kontraktów to:

- 1) kontrakty 'forward' oraz
- 2) kontrakty 'futures'.

¹Tutaj tkwi istotna różnica pomiędzy kontraktem terminowym a opcją o czym powiemy szczegółowo w następnym rozdziale.

²Sytuacje remisowe czyli zrównania się ceny realnej z ceną umowną są bardzo rzadkie.

4.2 Dynamiczna wycena opcji - model Blacka-Scholesa a przewodnictwo ciepłe

Z chwilą dopuszczenia do obrotu na rynkach finansowych opcjami (ang. 'options') czyli pochodnymi (wtórnymi, ang. 'derivatives') instrumentami finansowymi, które stanowią łagodniejszą formę kontraktów terminowych gdyż dają prawo, ale nie zobowiązują ich posiadacza, do zakupu (ang. 'call options') lub sprzedaży (ang. 'put options') innego tzw. podstawowego (inaczej pierwotnego czyli bazowego instrumentu finansowego, ang. 'underlying instrument'), w szczególności papieru wartościowego, po ustalonej cenie umownej (inaczej cenie wykonania, ang. 'exercise price' lub 'striking price') K w ściśle określonym terminie realizacji czyli wykupu T (ang. 'expiration date', lub 'maturity'; opcja europejska ang. 'European option') lub w czasie $0 \leq t \leq T$ (ang. 'exercise date'; opcja amerykańska ang. 'American option'), pojawiło się *kluczowe zagadnienie wyceny opcji zwanej premią* (ang. 'option premium') (R.N. Mantegna, H.E. Stanley: *Ekonofizyka. Wprowadzenie*, Wydawnictwa Naukowe PWN, Warszawa 2001; K. Jajuga, T. Jajuga: *Inwestycje: instrumenty finansowe, ryzyko finansowe, inżynieria finansowa*, Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa 2004; A. Weron, R. Weron: *Inżynieria finansowa*, Wydanie drugie, Wydawnictwa Naukowo-Techniczne, Warszawa 1999).

Zauważmy iż ma miejsce charakterystyczna asymetria pomiędzy posiadaczem (ang. 'holder') a wystawcą (ang. 'writer') opcji. Wystawca opcji jest zobowiązany do realizacji czynności umownych gdy tylko posiadacz opcji wyrazi chęć jej wykonania. Oczywiście tego typu asymetrii nie ma w przypadku kontraktów terminowych (gdzie przecież obie strony kontraktu podejmują zobowiązanie).

Najczęściej spotyka się opcje na następujące instrumenty bazowe:

- 1) opcje akcyjne (ang. 'stock options'), których instrumentem pierwotnym są akcje,
- 2) opcje walutowe (ang. 'currency options'), których instrumentem bazowym jest kurs waluty jakiegoś innego kraju,
- 3) opcje procentowe (ang. 'interest rate options'), których instrumentem bazowym jest oprocentowane papiery wartościowe np. obligacje, których cena rynkowa oczywiście waha się.

Specyficznym rodzajem opcji akcyjnej jest 'warrant' - jest to opcja wystawiana przez daną firmę na akcje lub obligacje tej firmy.

Ponadto, dość popularne są opcje indeksowe różniące się od powyższych, których instrumentem bazowym są różnego rodzaju indeksy giełdowe. Nie występuje tutaj bowiem fizyczna dostawa instrumentu bazowego w momencie realizacji opcji a jedynie wypłata proporcjonalna do różnicy wartości (ceny) indeksu w tym momencie a (ustaloną w chwili otwierania opcji) ceną wykonania. Oczywiście, opcja kupna zostanie zrealizowana tylko wtedy gdy różnica ta jest dodatnia; w przeciwnym razie zrealizowana zostanie opcja sprzedaży.

Uwagi wstępne dotyczące wyceny opcji. Jeżeli zależną od czasu t cenę danego instrumentu finansowego oznaczmy przez $Y(t)$ to cenę opcji można zapisać w postaci $C(Y(t), t)$ umożliwiającą analizę jej dynamiki aż do chwili $t = T$ kiedy opcja traci ważność. W tym zapisie tkwi milczące założenie, które w dalszym ciągu będzie przez nas wykorzystywane, że *obrót instrumentami finansowymi jest ciągły w czasie*. Oczywiście, szczególnie ważne dla uczestników rynków finansowych (czyli inwestorów) jest cena opcji w chwili początkowej gdy inwestor stoi przed odpowiedzią na pytania: *jaką cenę umowną K wynegocjować i ewentualnie na jaką opłatę wstępną się zgodzić?* Na pytania te jako pierwsi konstruktywnej odpowiedzi udzielili Fisher Black, Myron Scholes i Robert Merton za co dwaj ostatni w roku 1997 otrzymali nagrodę Nobla w dziedzinie ekonomii; Fisher Black zmarł niestety dwa lata wcześniej w związku z tym nie mógł jej otrzymać pomimo, że to właśnie model Blacka-Scholesa stanowi punkt wyjścia nowej dziedziny zwanej niekiedy matematyką finansową czasem także inżynierią finansową a ostatnio nawet fizyką finansową.

4.2.1 Proces stochastyczny Itô

Wyjściowym elementem modelu Blacka-Scholesa (BS) jest założenie mówiące, że cena papieru wartościowego podlega procesowi stochastycznemu Itô czyli spełnia następujące stochastyczne równanie różniczkowe

$$dY(t) = a(Y, t)dt + b(Y, t)dW, \quad (4.1)$$

gdzie $a(Y, t)$ i $b(Y, t)$ są współczynnikami równania zapisanymi w najogólniejszej postaci natomiast dW jest procesem stochastycznym Wienera tzn. zmienna dW podlega rozkładowi Gaussa

$$G(dW) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2 dt}} \exp\left(-\frac{(dW)^2}{2\sigma^2 dt}\right); \quad (4.2)$$

często proces Itô nazywa się także procesem Wienera z dryfem lub procesem ruchu Browna. Korzystając z (4.2) można łatwo sprawdzić, że dla tego procesu

$$\langle (dW)^2 \rangle = \sigma^2 dt, \quad (4.3)$$

gdzie dyspersja σ procesu stochastycznego opisującego dynamikę walurow Y nosi także nazwę zmienności (ang. volatility). Relacja (4.3) oznacza, że bez szkody dla jego dynamiki można przyjąć, iż zależność zmiennej dW od czasu jest pierwiastkowa czyli z dobrym przybliżeniem

$$dW \approx \sigma \sqrt{t}. \quad (4.4)$$

Zależność (4.4) umożliwia wyprowadzenie wyjściowego równania modelu BS na infinitesimalną zmianę ceny opcji⁴.

³Odpowiedź na drugą część pytania wybiega poza rozważany kanoniczny model Blacka-Scholesa dla rynku idealnego. Pomimo to udzielimy tutaj przybliżonej odpowiedzi będącej wniosek z tego modelu.

⁴Zależność (4.4) stanowi zasadniczy punkt dowodu lematu Itô, który jest tutaj pośrednio wykorzystywany.

4.2.2 Dynamika infinitesimalnej zmiany ceny opcji

Możemy teraz wyprowadzić wzór na różniczkę zupełną ceny opcji

$$\begin{aligned} dC(Y(t), t) &= C(Y(t) + dY(t), t + dt) - C(Y(t), t) \\ &\approx \frac{\partial C(Y(t), t)}{\partial t} dt + \frac{\partial C(Y(t), t)}{\partial Y(t)} dY(t) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 C(Y(t), t)}{\partial (Y(t))^2} (dY(t))^2, \end{aligned} \quad (4.5)$$

gdzie dokonaliśmy rozwinięcia Taylora ceny opcji $C(Y(t) + dY(t), t + dt)$; w dalszej części ograniczymy się jedynie do wyrazów liniowych w dt korzystając z równań (4.1) i (4.4). Równanie (4.5) stanowi etap pośredni, który będziemy poniżej rozwijać poprzez analizę portfela pozbawionego ryzyka.

4.2.3 Portfel pozbawiony ryzyka - równanie Blacka-Scholesa

Rozważmy zatem portfel $\Phi(Y(t), t)$ (a dokładniej wartość portfela w przeliczeniu na jedną opcję) zawierający pewną liczbę (czyli udział) h papierów wartościowych $Y(t)$ i opcję $C(Y(t), t)$ na ten papier

$$\begin{aligned} \Phi(Y(t), t) &= -h(Y(t), t)Y(t) + C(Y(t), t) \Rightarrow \\ \Rightarrow d\Phi(Y(t), t) &= -hdY(t) + dC(Y(t), t), \end{aligned} \quad (4.6)$$

przy czym na razie nie zakładamy o znaku udziału co oznacza, że nie wykluczamy wielce popularnego sposobu obrotu walorami polegającego po prostu na pożyczaniu walorów bazowych przez inwestora (wtedy $h > 0$) i zwrocie ich w dogodnym terminie $t \geq T$ ⁶. Przy wyprowadzaniu drugiego wzoru w (4.6) przyjęliśmy, że udział h jest stały czyli

$$dh = 0 \quad (4.7)$$

co jest ważnym założeniem modelu BS; powyższy, istotny warunek wynika z braku arbitrażu na rynku idealnym tzn. inwestor posiadający ten portfel nie prowadzi gry giełdowej aż do chwili T wygaśnięcia opcji.

Konstrukcja portfela dana pierwszym równaniem w (4.6) oznacza, że nie ponosimy żadnych kosztów transakcyjnych (a w tym opłaty wstępnej obciążającej portfel) oraz nie uzyskujemy żadnych dywidend (zwiększających wartość portfela) przed upływem terminu ważności opcji.

⁶Inwestor może także zastosować np. krótką sprzedaż (ang. 'short sale'), która polega na pożyczaniu określonej puli h instrumentów pierwotnych, a następnie ich sprzedaży w dogodnej sytuacji rynkowej (np. właśnie w chwili realizacji opcji) i ponownym ich zakupie w tej samej wyjściowej liczbie w jakiejś chwili $t > T$, gdy stracą na wartości. Ostatecznie, inwestor zwraca pełną pulę zarabiając na niej dodatkowo. Oczywiście, tego typu aktywność nie jest już opisywana modelem BS.

Łącząc równania (4.5) i (4.6) otrzymujemy przybliżone równanie na zmianę wartości portfela

$$\begin{aligned} d\Phi(Y(t), t) &\approx \frac{\partial C(Y(t), t)}{\partial t} dt + \left[\frac{\partial C(Y(t), t)}{\partial Y(t)} - h(Y(t), t) \right] dY(t) \\ &+ \frac{1}{2} \frac{\partial^2 C(Y(t), t)}{\partial (Y(t))^2} (dY(t))^2. \end{aligned} \quad (4.8)$$

Zauważmy, że portfel pozbawiony ryzyka oznacza, że jego wartość nie maleje co można zagwarantować przyjmując, że w powyższym równaniu wyraz proporcjonalny do $dY(t)$ znika. Wynika stąd, że udział waloru bazowego w portfelu wyraża się wzorem

$$h = \frac{\partial C(Y(t), t)}{\partial Y(t)} \quad (4.9)$$

gdzie $h = \partial C(Y(t), t) / \partial Y(t)$ jest współczynnikiem zabezpieczenia portfela wolnego od ryzyka (ang. 'riskless hedge ratio', zwanym także współczynnikiem delta) i może przyjmować zarówno wartości dodatnie (dla posiadacza opcji kupna) jak i ujemne (dla wystawcy opcji kupna) o czym powiemy dokładniej w dalszej części; stąd równania (4.6) oraz (4.8) przyjmują prostszą postać, odpowiednio

$$d\Phi(Y(t), t) \approx \frac{\partial C(Y(t), t)}{\partial t} dt + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 C(Y(t), t)}{\partial (Y(t))^2} (dY(t))^2. \quad (4.10)$$

oraz

$$\begin{aligned} \Phi(Y(t), t) &= -\frac{\partial C(Y(t), t)}{\partial Y(t)} Y(t) + C(Y(t), t) \Rightarrow \\ \Rightarrow d\Phi(Y(t), t) &= -\frac{\partial C(Y(t), t)}{\partial Y(t)} dY(t) + dC(Y(t), t). \end{aligned} \quad (4.11)$$

Podkreślamy, że zależność ceny waloru $Y(t)$ oraz ceny opcji $C(Y(t), t)$ od czasu oznacza, że model BS dopuszcza obrót walorem $Y(t)$ w sposób ciągły przez dowolnych (pozostałych) uczestników rynku finansowego.

Co się tyczy udziału h to na mocy (4.9) jego stałość powinna być potwierdzona przez postać postukiwanego rozwiązania $C(Y(t), t)$ - jest to warunek samopodobności modelu Blacka-Scholesa, który dyskutujemy poniżej.

W dalszym ciągu przyjmujemy dla uproszczenia, że wolna od ryzyka krótkoterminowa stopa procentowa lub inaczej mówiąc stopa zwrotu z portfela pozbawionego ryzyka na jednostkę czasu r (np. miesięczna stopa zwrotu) jest stała

$$\frac{1}{dt} \frac{d\Phi(Y(t), t)}{\Phi(Y(t), t)} = \frac{d \ln(\Phi(Y(t), t))}{dt} = r. \quad (4.12)$$

Wynika to z faktu, że w modelu BS nie istnieje arbitraż a więc nie ma możliwości na uzyskiwanie dochodów innych niż tylko takie jakie uzyskuje się na instrumentach

finansowych pozbawionych ryzyka np. na różnego rodzaju lokatach bankowych (tu-
taj o stałym oprocentowaniu) lub gwarantowanych papierach dłużnych (np. bonach
skarbowych).

Podstawiając zysk z portfela $d\Phi(Y(t), t)$ wyznaczony z równania (4.12) do równa-
nia (4.10) oraz wykorzystując relacje (4.1) i (4.4) otrzymujemy równanie na ewolucję
ceny opcji w postaci

$$rC(Y(t), t) \approx \frac{\partial C(Y(t), t)}{\partial t} + rY(t) \frac{\partial C(Y(t), t)}{\partial Y(t)} + \frac{1}{2} \sigma^2 [b(Y(t), t)]^2 \frac{\partial^2 C(Y(t), t)}{\partial (Y(t))^2}, \quad (4.13)$$

gdzie ograniczyliśmy się (tak jak zapowiadaliśmy) jedynie do wyrazów liniowych w
dt co jest powodem braku wyrazów zawierających współczynnik $a(Y(t), t)$.

W modelu BS zakłada się, że dynamikę instrumentu bazowego (papieru warto-
ściowego) opisuje proces stochastyczny zwany geometrycznym (lub logarytmicznym)
ruchem Browna tzn. przyjmuje się, że

$$\begin{aligned} a(Y(t), t) &= \mu Y(t) \\ b(Y(t), t) &= Y(t), \end{aligned} \quad (4.14)$$

gdzie niezależny od czasu parametr μ jest zyskiem z tego waloru na jednostkę czasu
czyli tzw. stopą wzrostu (ang. growth rate) nazywaną także dryfem (ang. drift) pro-
cesu stochastycznego ceny walory Y . Podstawiając drugie równanie (4.14) do (4.13)
otrzymujemy ostatecznie poszukiwane liniowe (przybliżone) równanie różniczkowe
częstkowe drugiego rzędu o zmiennych współczynnikach na wycenę opcji Blacka-
Scholesa na rynku idealnym czyli pozbawionym możliwości arbitrażu i efektywnym
(tzn. takim gdzie wszyscy uczestnicy mają jednakowy dostęp do informacji) a po-
nadto, nieopodatkowanym, pozbawionym dywidend i kosztów transakcyjnych:

$$rC(Y(t), t) = \frac{\partial C(Y(t), t)}{\partial t} + rY(t) \frac{\partial C(Y(t), t)}{\partial Y(t)} + \frac{1}{2} \sigma^2 [Y(t), t]^2 \frac{\partial^2 C(Y(t), t)}{\partial (Y(t))^2}, \quad (4.15)$$

przy czym (na mocy (4.1) i (4.14)) powyższe równanie dopuszcza jedynie rozwiązania
dla $Y(t) > 0$.

Naszym celem jest znalezienie rozwiązań tego równania dla różnych warunków
brzegowych w każdej chwili czasu $t \leq T$. Oczywiście, rozwiązanie typu 'at-the-
money', czyli tożsamościowo równe zeru, jest trywialnym rozwiązaniem równania
BS.

Zauważmy, że powyższe równanie posiada symetrię z której wynika, jeżeli funk-
cja $C(Y(t), t)$ jest rozwiązaniem równania (4.15) to także funkcja "stowarzyszona"
 $-C(Y(t), t)$ jest jego rozwiązaniami. Na przykład, jeżeli $C(Y(t), t)$ jest ceną opcji
(potencjalnym dochodem) posiadacza opcji kupna, to przy odpowiednich warun-
kach brzegowych $-C(Y(t), t)$ jest ceną opcji wystawcy opcji kupna. Rozwiązania te,
a także dotyczące opcji sprzedaży, omawiamy w dalszej części.

Równanie BS umożliwia badanie dynamiki różnych kontraktów terminowych - oprócz opcji europejskich także amerykańskie, którymi można obracać na bieżąco a w tym zarówno typu kupna jak i sprzedaży dla posiadacza i wystawcy opcji. Z punktu widzenia opcji europejskich, którymi zajmujemy się w dalszym ciągu interesujące są przede wszystkim ich ceny w dwóch charakterystycznych chwilach: $C(Y(t=0), t=0)$ oraz $C(Y(t=T), t=T)$.

4.2.4 Formuła wyceny opcji kupna Blacka-Scholesa

Aby rozwiązać równanie (4.15) należy przyjąć odpowiednie warunki brzegowe (a więc umożliwiające znalezienie rozwiązania). W tym celu będziemy w dalszym ciągu przykładowo zajmować się opcją kupna czyli wyceną opcji dla nabywcy kontraktu czyli dla tzw. strategii długiej (zwanej też pozycją długą, (ang. 'long call'), dla której wspomniane warunki mogą mieć np. następującą prostą postać:

$$C(Y(t=T), t=T) = \max\{Y(t=T) - K, 0\} \quad (4.16)$$

oraz

$$C(Y(t)=0, t)=0. \quad (4.17)$$

Pierwszy warunek mówi, że opcja jest warta tyle ile wynosi zysk na papierze na który opiewa natomiast drugi warunek stwierdza, że oczywiście nic nie jest warta opcja na papier bezwartościowy. Dodatkowo wprowadza się dość oczywiste zastrzeżenie, że (nieujemny) współczynnik zabezpieczenia portfela przed ryzykiem $\partial C(Y(t), t)/\partial Y(t)$ musi być skończony.

W niniejszej części po prostu sprawdzamy, że poniższa formuła Blacka-Scholesa na opcję kupna

$$C(Y(t), t) = Y(t)\Phi(d_+) - K \exp(-r(T-t))\Phi(d_-), \quad (4.18)$$

jest rozwiązaniem równania (4.15) spełniającym wspomniane powyżej warunki brzegowe, przy czym $\Phi(z)$ jest dystrybucją rozkładu normalnego $N(0,1)$ oraz

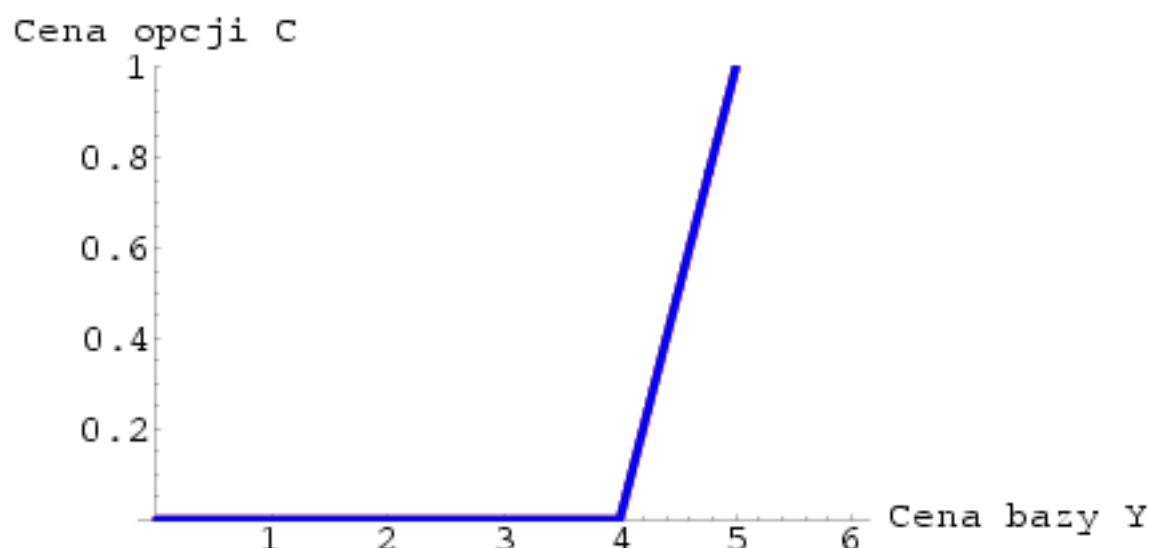
$$d_{\pm} = \frac{\ln\left(\frac{Y(t)}{K}\right) + (r \pm \frac{\sigma^2}{2})(T-t)}{\sigma\sqrt{T-t}}. \quad (4.19)$$

Zauważmy, że rozwiązanie to posiada asymptotę ukośną daną wzorem

$$C_{asympt}(Y(t), t) = Y(t) - K \exp(-r(T-t)), \quad (4.20)$$

która znika w punkcie $K' = Y(t) = K \exp(-r(T-t))$. Na rysunkach 4.1, 4.2 i 4.3 jest to ukośna niebieska linia dana wyrażeniem

$$C_{max}(Y(t), t) = \max[Y(t) - K \exp(-r(T-t)), 0]; \quad (4.21)$$



Rysunek 4.1: Wycena opcji kupna C dla jej posiadacza w zależności od ceny podstawowego instrumentu finansowego Y uzyskana w oparciu o formułę BS (4.18) dla czasu $t = T$ (czyli dla terminu wykupu opcji) oraz następujących wartości parametrów modelu: $K = 4$ [j.u.], $T = 10$ [mies.], $r = 0.1$ [1/mies.], $\sigma = 0.05$ [1/ $\sqrt{\text{mies.}}$]. Jak widać rozwiązanie równania zgadza się jak trzeba z przyjętym warunkiem brzegowym (4.16).

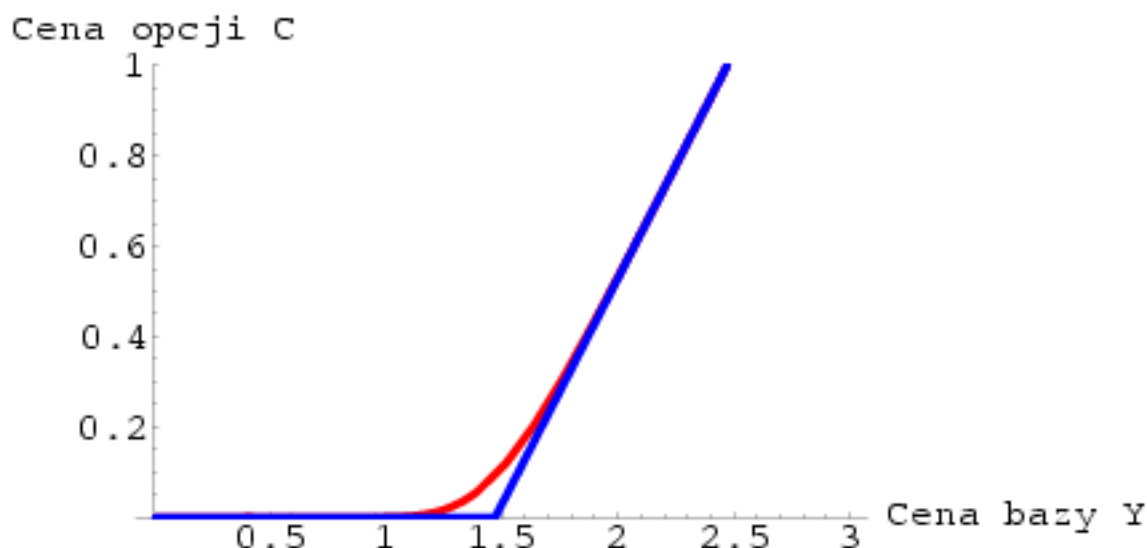
stanowi ona odniesienie dla rozwiązania (4.18) np. dla $t = T$ (czyli w chwili zamknięcia kontraktu) oba wyrażenia (4.18) i (4.21) pokrywają się jak należy co jest konsekwencją przyjętego warunku brzegowego (4.16) (z tego powodu linia czerwona na rys.4.1 nie jest niestety widoczna).

Na wspomnianych powyżej rysunkach przedstawiliśmy formułę BS dla trzech charakterystycznych chwil i typowych wartości parametrów charakteryzujących je. Jak widać, rozwiązanie to pozwala obserwować cenę opcji C w zależności od ceny Y instrumentu bazowego (np. w chwili otwierania i zamknięcia kontraktu) oraz ceny umownej co jest niezbędnym elementem podejmowania trafnych decyzji na rynku finansowym.

Dodatkowo, na rys.4.4, 4.5 i 4.6 porównaliśmy zależność współczynnika zabezpieczenia portfela pozbawionego ryzyka $h(Y(t), t)$ od walurowi $Y(t)$ z analogiczną zależnością majoryzującej go użytecznej wielkości

$$h_{\max}(Y(t), t) = \frac{\partial C_{\max}(Y(t), t)}{\partial Y(t)} = \begin{cases} 1, & \text{gdy } Y(t) > K' \\ 0, & \text{gdy } Y(t) < K', \end{cases} \quad (4.22)$$

uzyskanej bezpośrednio z wyrażenia (4.21). Jak widać, udział $h(Y(t), t)$ jest przedziałami stały jedynie dla czasu $t = T$ czyli najbardziej interesującej sytuacji, a w tym dla $Y \geq K$ przyjmuje wartość 1; zakresem $Y < K$ nie musimy się zajmować



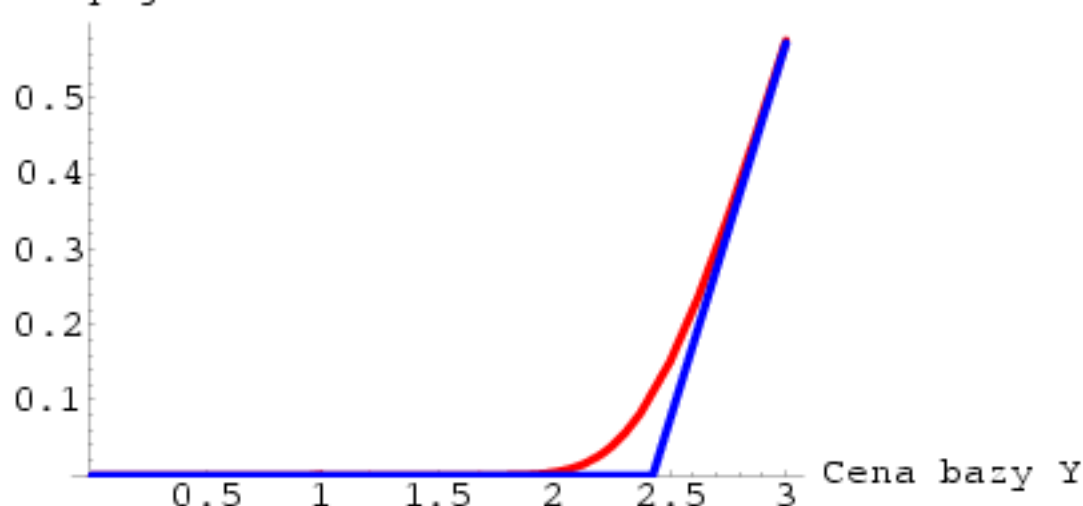
Rysunek 4.2: Wycena opcji kupna C dla jej posiadacza w zależności od ceny podstawowego instrumentu finansowego Y uzyskana w oparciu o formułę BS (4.18) dla czasu $t = 0$ (czyli dla chwili zawarcia kontraktu na tę opcję) oraz wartości parametrów modelu takich jak dla rozwiązania przedstawionego na poprzednim rysunku: $K = 1$ [j.u.], $T = 10$ [mies.], $r = 0.1$ [1/mies.], $\sigma = 0.05$ [1/ $\sqrt{\text{mies.}}$]. Jak widać rozwiązanie równania BS (linia czerwona) odbiega wyraźnie od swojej asymptotyki ukłonnej (linia niebieska) w części centralnej.

gdyż tam rozwiązanie $C(Y(t), t)$ znika. W tym sensie można mówić, że dla czasu realizacji opcji spełniony jest ściśle warunek samotgodności modelu BS. Dla czasów $t < T$ możemy mówić jedynie o przybliżonej samotgodności modelu, co nie ma oczywiście żadnego wpływu na decyzję inwestora w opcje europejskie, który w tym okresie czasu jest całkowicie pasywny.

Co więcej, na kolejnych trzech rysunkach rys.4.7, 4.8 i 4.9 przedstawiliśmy drugą pochodną $g(Y(t), t) = \partial h(Y(t), t) / \partial Y(t) = \partial^2 C(Y(t), t) / \partial Y(t)^2$ czyli tzw. współczynnik gamma, który pozwala określić tempo zmiany ceny opcji względem zmiany ceny waloru podstawowego Y . Co więcej, szerokość połówkowa zależności tego współczynnika od waloru bazowego definiuje obszar zmienności współczynnika zabezpieczenia portfela pozbawionego ryzyka czyli zakres, w którym model BS nie może być stosowany. Mówiąc prościej, tym zakresem jest to obszar zmienności instrumentu bazowego skoncentrowany wokół ceny umownej.

Spełnienie warunku brzegowego (4.16). Przypuśćmy, że $t = T$; rozważmy dwie różne sytuacje: najpierw gdy $Y(t = T) \leq K$. Wówczas, $d_+(t = T) = d_-(t = T) = \infty$ co daje $\Phi(d_+) = \Phi(d_-) = 1$ i w efekcie $C(Y(t = T), t = T) = Y(t = T) - K$, jak być powinno. Następnie odwrotnie, gdy $Y(t = T) \geq K$ wówczas $d_+(t = T) = d_-(t = T) = -\infty$, co daje $\Phi(d_+) = \Phi(d_-) = 0$ i w efekcie $C(Y(t = T), t = T) = 0$, jak

Cena opcji C



Rysunek 4.3: Wycena opcji kupna C dla jej posiadacza w zależności od ceny podstawowego instrumentu finansowego Y uzyskana w oparciu o formułę BS (4.18) dla czasu $t = T/2$ (czyli dla chwili pośredniej) oraz wartości parametrów modelu takich jak dla rozwiązania przedstawionego na dwóch poprzednich rysunkach: $K = 4$ [j.u.], $T = 10$ [mies.], $r = 0.1$ [1/mies.], $\sigma = 0.05$ [1/ $\sqrt{\text{mies.}}$]. Podobnie jak na rys.4.2 rozwiązanie równania BS (linia czerwona) odbiega wyraźnie od swojej asymptotyki ukośnej (linia niebieska) w części centralnej.

trzeba.

⁶Transformacja do nowych zmiennych. Wprowadzimy teraz nowe zmienne (X, τ) , które powiążane są z dotychczasowymi za pomocą następującej transformacji nieliniowej

$$\begin{aligned} X(\tau) &= \frac{2}{\sigma^2} \left(r - \frac{\sigma^2}{2} \right) \ln \left(\frac{Y(t)}{K} \right) + \tau \\ \tau &= \frac{2}{\sigma^2} \left(r - \frac{\sigma^2}{2} \right)^2 (T - t) \end{aligned} \quad (4.23)$$

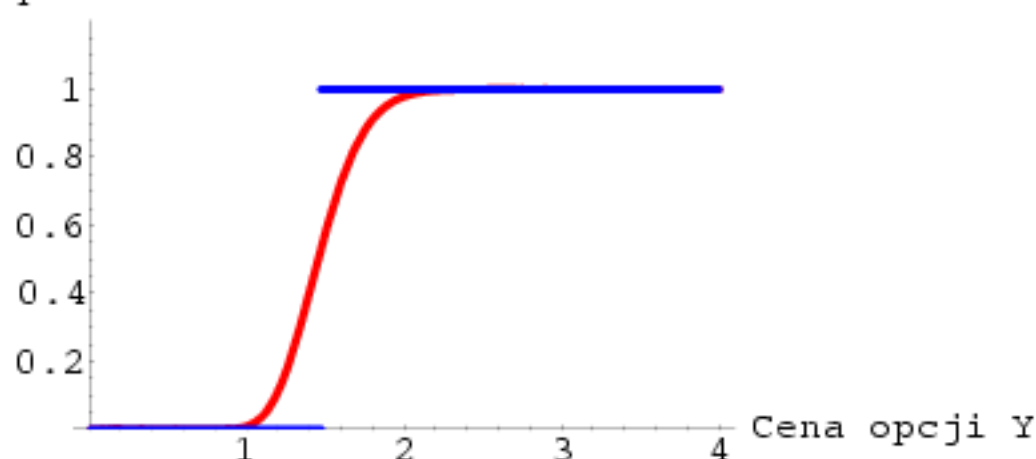
oraz podstawmy

$$C(Y(t), t) = \exp(-r(T - t))y(X, \tau). \quad (4.24)$$

Wykażemy, że dzięki temu podstawieniu równanie Blacka-Scholesa sprowadza się do znacznie prostszego równania różniczkowego cząstkowego typu parabolicznego, które w fizyce opisuje np. przewodnictwo cieplne (model przewodnictwa cieplnego

⁶Przy pierwszym czytaniu można te obliczenia pominąć.

Zabezpieczenie h



Rysunek 4.4: Porównanie współczynnika zabezpieczenia portfela wolnego od ryzyka $h(Y(t=0), t=0)$ z majoryzującą go wielkością $h_{max}(Y(t=0), t=0)$ w zależności od ceny bazowego instrumentu finansowego $Y(t=0)$ otrzymane dla takiej parametryzacji jaka została przedstawiona w opisie rys.4.2.

Fouriera):

$$\frac{\partial y(X(\tau), \tau)}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 y(X(\tau), \tau)}{\partial X(\tau)^2}, \quad (4.25)$$

gdzie $y(X(\tau), \tau)$ pełni tutaj rolę zależnego od czasu τ pola, które jest analogonem temperatury.

⁷Sprawdzenie, że równanie BS (4.15) jest równoważne "równaniu przewodnictwa cieplnego Fouriera" (4.25) przy podstawieniu (4.24). W tym celu wyrzucimy najpierw pochodną po czasie

$$\begin{aligned} \frac{\partial C(Y(t), t)}{\partial t} &= rC(Y(t), t) \\ &- \frac{\left(r - \frac{\sigma^2}{2}\right)^2}{\frac{\sigma^2}{2}} \exp(-r(T-t)) \left[\frac{\partial y(X(\tau), \tau)}{\partial X(\tau)} + \frac{\partial y(X(\tau), \tau)}{\partial \tau} \right] \end{aligned} \quad (4.26)$$

gdzie po drodze skorzystaliśmy z podstawienia (4.24) oraz prostych zależności

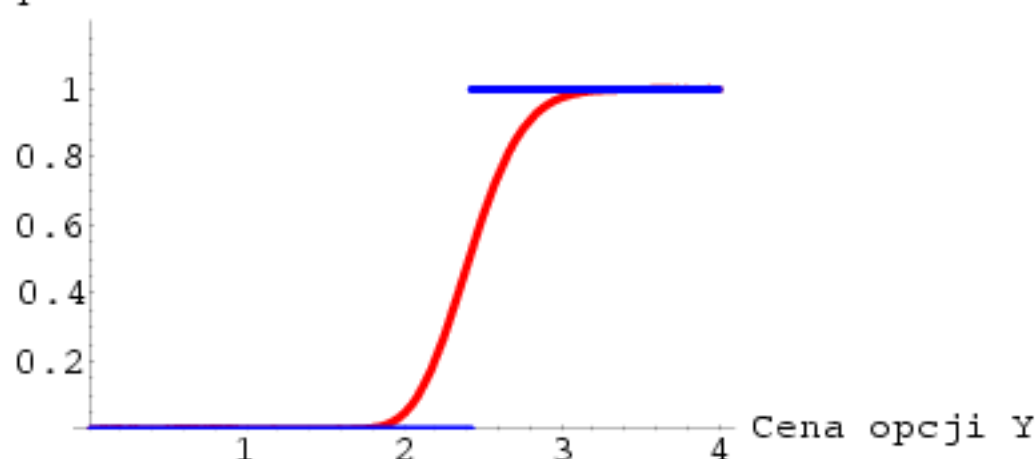
$$\frac{\partial y(X(\tau), \tau)}{\partial t} = \frac{\partial y(X(\tau), \tau)}{\partial X(\tau)} \frac{dX(\tau)}{dt} + \frac{\partial y(X(\tau), \tau)}{\partial \tau} \frac{d\tau}{dt} \quad (4.27)$$

oraz

$$\frac{dX(\tau)}{dt} = \frac{d\tau}{dt} = -\frac{\left(r - \frac{\sigma^2}{2}\right)^2}{\frac{\sigma^2}{2}}. \quad (4.28)$$

⁷Przy pierwszym czytaniu można te obliczenia pominąć.

Zabezpieczenie h



Rysunek 4.5: Porównanie współczynnika zabezpieczenia portfela wolnego od ryzyka $h(Y(t=5), t=5)$ z majoryzującą go wielkością $h_{\max}(Y(t=5), t=5)$ w zależności od ceny bazowego instrumentu finansowego $Y(t=5)$ otrzymane dla takiej parametryzacji jaka została przedstawiona w opisie rys.4.3.

Następnie, przekształcimy pochodną "przestrzenną" do postaci

$$\frac{\partial C(Y(t), t)}{\partial Y(t)} = \frac{1}{Y(t)} \frac{\left(r - \frac{\sigma^2}{2}\right)^2}{\frac{\sigma^2}{2}} \exp(-r(T-t)) \frac{\partial y(X(\tau), \tau)}{\partial X(\tau)} \quad (4.29)$$

przy czym skróciliśmy ze wzoru

$$\frac{\partial y(X(\tau), \tau)}{\partial X(\tau)} = \frac{\partial y(X(\tau), \tau)}{\partial X(\tau)} \frac{dX(\tau)}{dY(t)}, \quad (4.30)$$

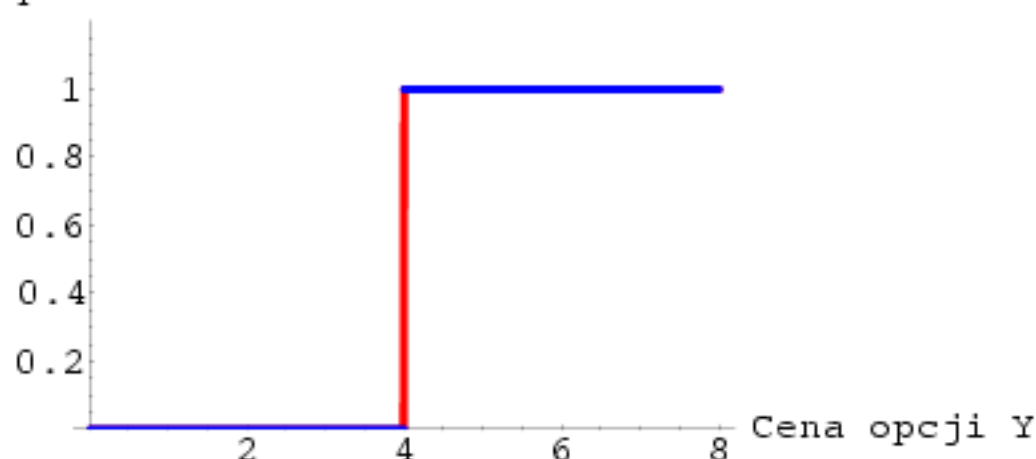
gdzie

$$\frac{dX(\tau)}{dY(t)} = \frac{1}{Y(t)} \frac{\left(r - \frac{\sigma^2}{2}\right)^2}{\frac{\sigma^2}{2}} \quad (4.31)$$

i odpowiednio drugą pochodną

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 C(Y(t), t)}{\partial Y(t)^2} &= \frac{\partial}{\partial Y(t)} \left(\frac{\partial C(Y(t), t)}{\partial Y(t)} \right) \\ &= \frac{1}{Y(t)^2} \frac{r - \frac{\sigma^2}{2}}{\frac{\sigma^2}{2}} \exp(-r(T-t)) \\ &\times \left(-\frac{\partial y(X(\tau), \tau)}{\partial X(\tau)} + \frac{r - \frac{\sigma^2}{2}}{\frac{\sigma^2}{2}} \frac{\partial^2 y(X(\tau), \tau)}{\partial X(\tau)^2} \right). \end{aligned} \quad (4.32)$$

Zabezpieczenie h



Rysunek 4.6: Porównanie współczynnika zabezpieczenia portfela wolnego od ryzyka $h(Y(t=10), t=10)$ z majorytującą go wielkością $h_{max}(Y(t=10), t=10)$ w zależności od ceny bazowego instrumentu finansowego $Y(t=10)$ otrzymane dla takiej parametryzacji jaka została przedstawiona w opisie rys.4.1.

Podstawiając (4.26), (4.31) i (4.32) do równania Blacka-Scholesa (4.15) otrzymujemy po prostych (algebraicznych) przekształceniach poszukiwane równanie "przewodnictwa cieplnego" (4.25).

⁸Rozwiązanie równania (4.25). Sprawdzimy teraz, że

$$y(X(\tau), \tau) = \exp(r(T-t))Y(t)\Phi(d_+) - K\Phi(d_-) \quad (4.33)$$

otrzymane z formuły wyceny opcji kupna BS (4.18) oraz podstawienia (4.24), gdzie na podstawie (4.23) $Y(t)$ i $T-t$ przybierają w zmiennych $X(\tau)$ i τ następującą postać

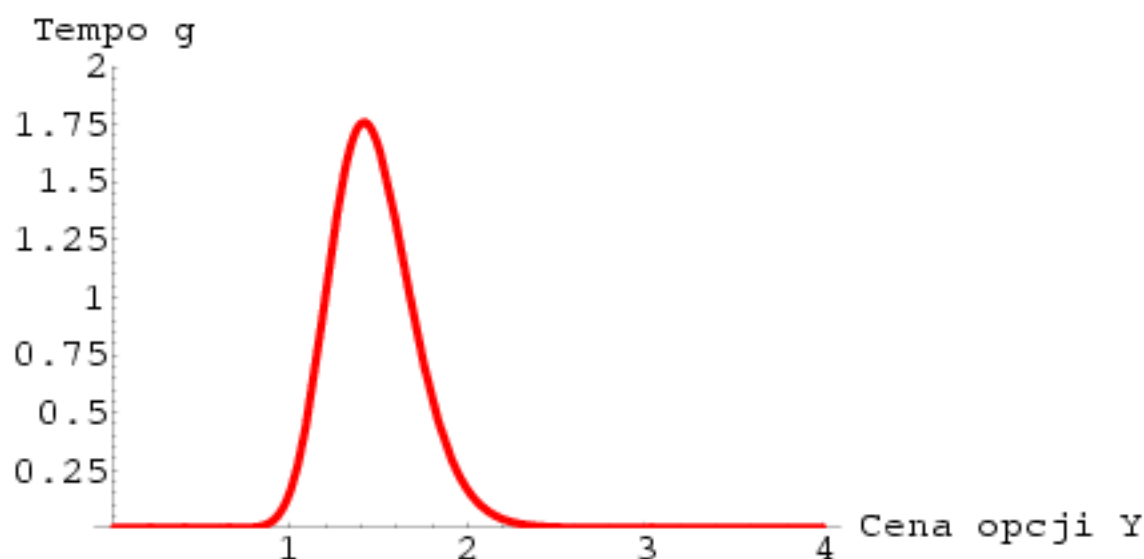
$$Y(X(\tau), \tau) = K \exp \left((X(\tau) - \tau) \left(\frac{\tau - \frac{\sigma^2}{2}}{\frac{\sigma^2}{2}} \right)^{-1} \right) \\ T - t = \tau \left(\frac{\tau - \frac{\sigma^2}{2}}{\frac{\sigma^2}{2}} \right)^{-1}, \quad (4.34)$$

jest rozwiązaniem równania (4.25).

⁹Oplacalność opcji kupna. Na rys.4.10 przedstawiliśmy cenę opcji dla dwóch charakterystycznych chwil: zakupu $t=0$ i realizacji $t=T$ (porównaj także wykresy zamieszczone na rysunkach 4.2 i 4.1). Podane na rys.4.10 oscacowanie na oplacalność

⁸Przy pierwszym czytaniu można te obliczenia pominąć.

⁹Alapit ten stanowi dygresję związaną z istnieniem opłaty wstępnej (prowizji) pobieranej przez biuro maklerskie i w pierwszym czytaniu może być pominięty.



Rysunek 4.7: Tempo g zmiany współczynnika zabezpieczenia portfela wolnego od ryzyka $h(Y(t=0), t=0)$ w zależności od ceny bazowego instrumentu finansowego $Y(t=0)$ otrzymane dla takiej parametryzacji jaka została przedstawiona w opisie rys.4.2.

opcji wynika bezpośrednio z porównania obu przebiegów C w zależności od Y , które dostarcza racjonalnego warunku na wysokość opłaty wstępnej. Warunek ten mówi, że wysokość prowizji M nie może być wyższa niż cena opcji $C(Y(0), 0)$ w chwili zawarcia kontraktu terminowego gdyż na inną nie zgodzi się racjonalny inwestor. Stąd cena opcji w chwili $t=0$ ma być mniejsza od ceny opcji w chwili $t=T$. Zatem,

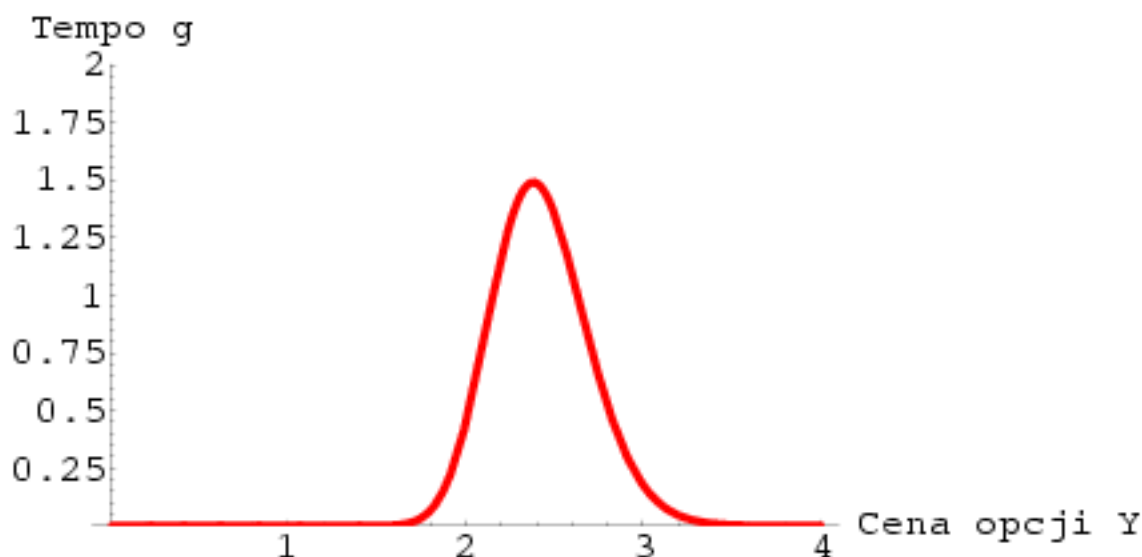
$$\begin{aligned} C(Y(T), T) &= Y(T) - K > C(Y(0), 0) = Y(0) - K' = M \\ &\Rightarrow Y(T) > Y(0) + K(1 - \exp(-rT)), \end{aligned} \quad (4.35)$$

gdzie po drodze skróciliśmy z relacji $K' = K \exp(-rT)$. Nasze rozważania dotyczą takiego zakresu ceny waloru bazowego, w którym cena opcji osiąga już (z dobrym przybliżeniem) wartość asymptotyczną. Dzięki temu prawa strona powyższej nierówności jest znana więc oszacowanie opłacalności opcji a stąd warunek na opłacalną cenę bazowego instrumentu finansowego jest natychmiastowe. Widać, że warunek (4.35) jest równoważny następującemu,

$$\frac{Y(T) - Y(0)}{Y(0)} = r_Y > \frac{K - K'}{Y(0)}, \quad (4.36)$$

który wykorzystamy poniżej.

Należy podkreślić, że wyrażenie (4.35) mówi tylko o opłacalnej cenie natomiast nie wskazuje jaka strategia jest bardziej opłacalna:



Rysunek 4.8: Tempo g zmiany współczynnika zabezpieczenia portfela wolnego od ryzyka $h(Y(t=5), t=5)$ w zależności od ceny bazowego instrumentu finansowego $Y(t=5)$ otrzymane dla takiej parametryzacji jaka została przedstawiona w opisie rys.4.3.

- A) realizacja kontraktu terminowego na opcje kupna czy po prostu
- B) obrót bazowym instrumentem finansowym.

Podamy teraz warunek na taką progową cenę bazowego instrumentu finansowego $Y_{prog}(T)$ powyżej której opłacalne staje się wykorzystywanie przez inwestora giełdowego strategii A. Mianowicie, opłacalność ta ma miejsce wtedy i tylko wtedy gdy stopa zwrotu r_C wynikająca z realizacji kontraktu terminowego jest większa od stopy zwrotu r_Y na instrumencie bazowym czyli:

$$r_C = \frac{Y(T) - K - M}{M} > r_Y = \frac{Y(T) - Y(0)}{Y(0)}, \quad (4.37)$$

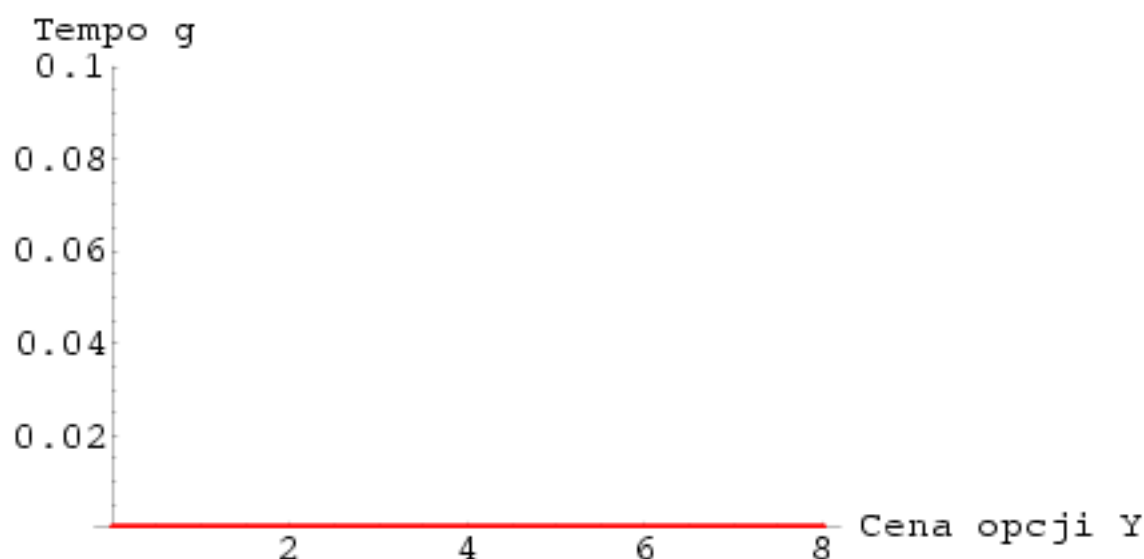
skąd natychmiast otrzymujemy, że poszukiwana cena

$$Y(T) > Y_{prog}(T) = \exp(rT)Y(0). \quad (4.38)$$

Zauważmy, że warunek ten jest równoważny następującemu szacującemu od dołu stopę zwrotu z akcji:

$$\frac{Y(T) - Y(0)}{Y(0)} = r_Y > \frac{K - K'}{K'} > \frac{K - K'}{Y(0)}, \quad (4.39)$$

gdzie przy wyprowadzaniu ostatniej nierówności skróciliśmy z oczywistego warunku istnienia prowizji tzn. $C(Y(0), 0) = Y(0) - K' = M > 0$. Zatem, z nierówności



Rysunek 4.9: Tempo g zmiany współczynnika zabezpieczenia portfela wolnego od ryzyka $h(Y(t=10), t=10)$ w zależności od ceny bazowego instrumentu finansowego $Y(t=10)$ otrzymane dla takiej parametryzacji jaka została przedstawiona w opisie rys.4.1.

(4.39) wynika (4.36) co oznacza, że opłacalności strategii A nie wystarczy nawet pobieranie przez biuro maklerskie maksymalnej prowizji M dopuszczanej przez oszacowanie (4.35).

Aby zilustrować powyższe rozważania przedyskutujmy następujący przykład.

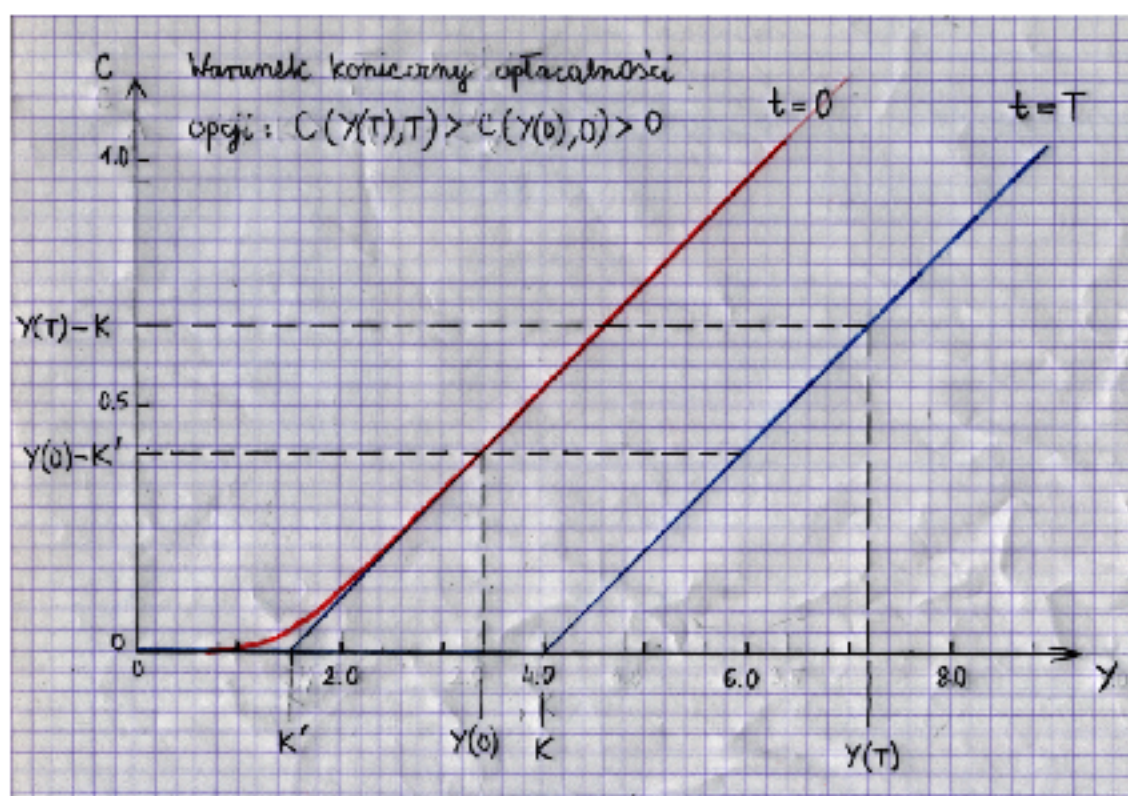
Przykład

Przypuśćmy, że inwestor decyduje się na zakup jakiejś akcji, której obecna wartość wynosi $Y(0) = 100 \text{ PLN}$ wierząc, że w przyszłości, powiedzmy po kwartale ($T = 3 \text{ mies.}$), jej wartość wzrośnie. Przyjmując wielkość stopy procentowej (czyli zwrotu na instrumentach finansowych pozbawionych ryzyka) r w tym okresie równą $0.1\%/mies.$ ¹⁰, inwestor łatwo wyznaczy w oparciu o wzór (4.38) poszukiwaną cenę progową

$$Y_{prog}(T = 3 \text{ mies.}) = 134.99 \text{ PLN.} \quad (4.40)$$

Porównamy teraz obie stopy zwrotu r_C i r_Y korzystając z (4.37) i przyjmując, że spełniony jest warunek dyskryminujący (4.38). W związku z tym ustalamy cenę

¹⁰Należy przypomnieć, że stopa procentowa jest ustalana kwartalnie przez Bank Centralny, np. NBP, czyli jest związana z danym rynkiem finansowym i w tym sensie nie jest swobodnym parametrem modelu BS.



Rysunek 4.10: Analiza opłacalności ceny dla posiadacza opcji kupna poprzez porównanie zależności jej ceny C od ceny waloru Y dla chwili realizacji opcji $t = T$ i chwili zawierania kontraktu $t = 0$.

umowną na $K = 110 \text{ PLN}$ czyli na taką aby $M > 0$; zatem, z (4.35) otrzymujemy, że przewija $M = Y(0) - K \exp(-rT) = 18.51 \text{ PLN}$. Zatem ostatecznie

$$r_C = 1.161 > r_Y = 0.5. \quad (4.41)$$

Jak widać, opłacalność strategii realizacji kontraktu terminowego na opcje kupna jest w tym przykładzie ponad dwukrotnie wyższa od strategii polegającej tylko na obrocie bazowym instrumentem finansowym. Zwróćmy uwagę, że ryzyko tej bardziej opłacalnej strategii (A) jest mniejsze gdyż w sytuacji niekorzystnej inwestor traci tylko przewagę (w naszym przykładzie kwotę $M = 18.51 \text{ PLN}$) podczas gdy w przypadku mniej opłacalnej strategii (B) inwestor może stracić wszystko czyli kwotę $Y(0)$ (w naszym przykładzie jest to kwota $Y(0) = 100 \text{ PLN}$; oczywiście, ma to miejsce wtedy gdy posiadany instrument finansowy stracił całkowicie swoją wartość).

Omawiana powyżej opłacalność opcji kupna jest jednym z elementów rzeczywistego (a nie idealnego) rynku finansowego gdyż uwzględnia opłatę wstępną, która nie jest brana pod uwagę w kanonicznym modelu Blacka-Scholesa. Do dynamiki opcji na rynku rzeczywistym jeszcze powrócimy na końcu tego rozdziału.

4.2.5 Dochód posiadacza opcji sprzedaży

Historycznie rzecz biorąc, model BS dotyczył dynamiki europejskiej opcji kupna czyli opcji 'call' zarówno dla nabywcy czyli znajdującego się w pozycji długiej (ang. 'long call') jak i wystawcy czyli znajdującego się w pozycji krótkiej (ang. 'short call') - poniżej zastosujemy ten model do opisu dynamiki opcji sprzedaży czyli opcji 'put' zarówno dla nabywcy (pozycja ang. 'long put') i wystawcy (pozycja 'short call').

Metoda parytetu sprzedaż-kupno (ang. 'put-call parity'). Można łatwo sprawdzić, że cena opcji sprzedaży

$$C(Y(t), t) = K \exp(-r(T - t))[1 - \Phi(d_-)] - Y(t)[1 - \Phi(d_+)], \quad (4.42)$$

spełniająca warunki brzegowe

$$\begin{aligned} C(Y(t=T), t=T) &= \max\{K - Y(t=T), 0\}, \\ C(Y(t)=0, t) &= 0 \end{aligned} \quad (4.43)$$

wymagane przez tego typu opcje¹¹, spełnia równanie BS (4.15).

¹²Aby sprawdzić, że (4.42) jest rozwiązaniem równania BS należy po pierwsze zauważyć, że

$$C(Y(t), t) = C_C(Y(t), t) + C_{PC}(Y(t), t), \quad (4.44)$$

gdzie

$$C_C(Y(t), t) = Y(t)\Phi(d_+) - K \exp(-r(T - t))\Phi(d_-), \quad (4.45)$$

jest poprzednio omawianą opcją kupna dla nabywcy a więc spełniającą równanie BS, natomiast

$$C_{PC}(Y(t), t) = K \exp(-r(T - t)) - Y(t) \quad (4.46)$$

jest konieczną korektą także spełniającą równanie BS o czym można się łatwo przekonać dokonując wymaganych w tym równaniu różniczkowań. Zauważmy, że

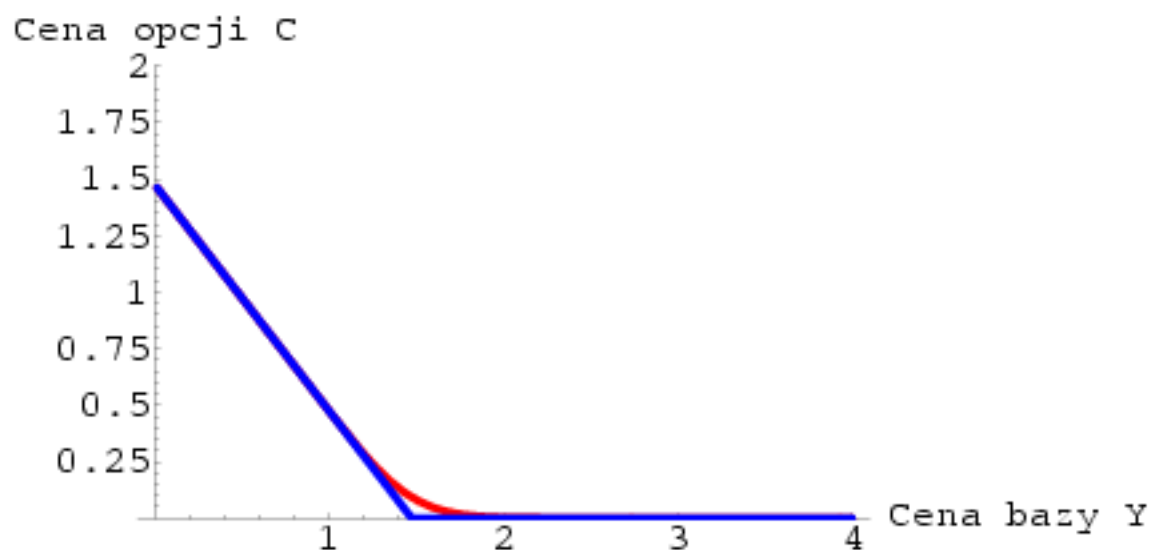
$$|C_{PC}(Y(t), t)| = |K \exp(-r(T - t)) - Y(t)| \quad (4.47)$$

możnaby interpretować jako uproszczoną opcję jednoczesnego kupna i sprzedaży dla jej nabywcy.

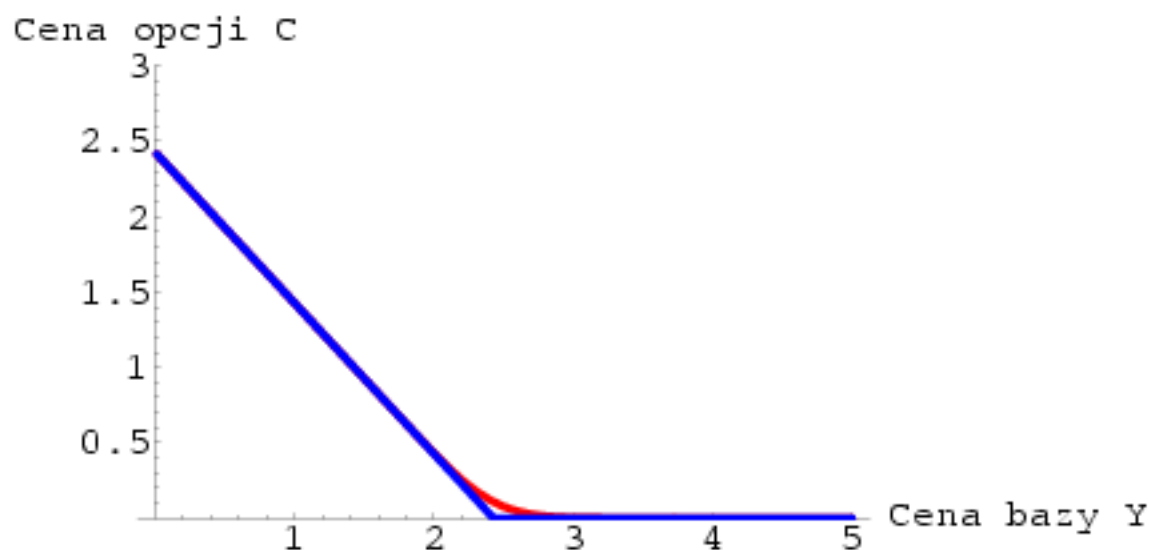
Na trzech kolejnych rysunkach rys.4.11, 4.12 i 4.13 przedstawiliśmy charakterystyczne przebiegi ceny opcji sprzedaży dla nabywcy; dla wystawcy są analogiczne ale z przeciwnym znakiem.

¹¹Raczej nie kontraktuje się nieliniowych warunków brzegowych.

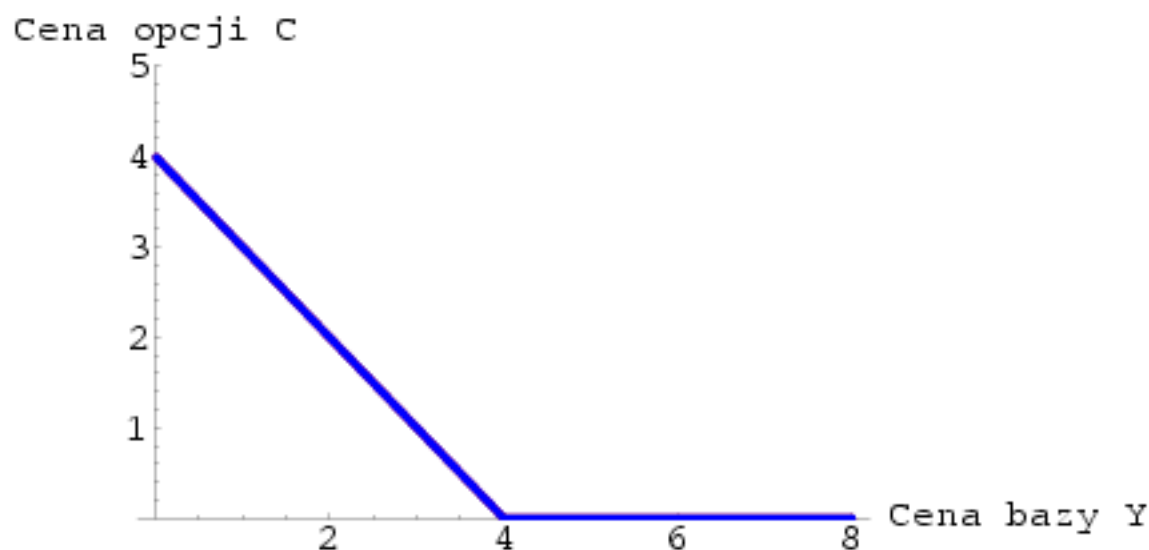
¹²Przy pierwszym czytaniu można ten akapit opuścić.



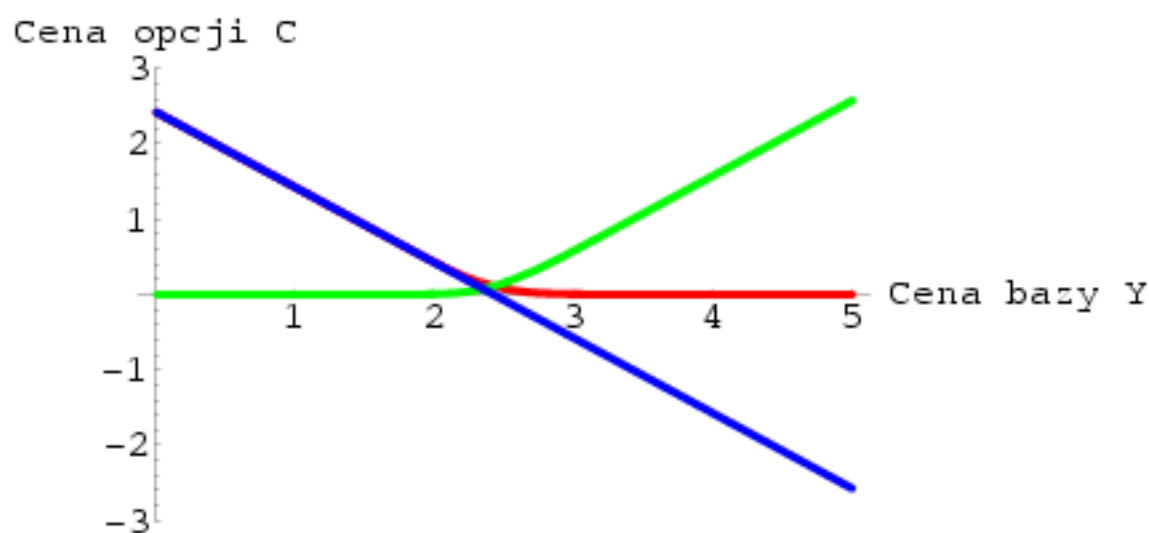
Rysunek 4.11: Dochód C posiadacza opcji sprzedaży w zależności od ceny podstawowego instrumentu finansowego Y uzyskana w oparciu o formułę (4.42) dla czasu $t = 0$ (czyli dla chwili pośredniej) oraz wartości parametrów modelu takich jak dla rozwiązania przedstawionego na dwóch poprzednich rysunkach: $K = 4$ [j.u.], $T = 10$ [mies.], $r = 0.1$ [1/mies.], $\sigma = 0.05$ [1/ $\sqrt{\text{mies.}}$]. Podobnie jak na rys.4.3 rozwiązanie równania BS (linia czerwona) odbiega wyraźnie w części centralnej od swojej asymptotyki ukośnej (linia niebieska).



Rysunek 4.12: Dochód C posiadacza opcji sprzedaży w zależności od ceny podstawowego instrumentu finansowego Y uzyskana w oparciu o formułę (4.42) dla czasu $t = T/2$ (czyli dla chwili pośredniej) oraz wartości parametrów modelu takich jak dla rozwiązania przedstawionego na dwóch poprzednich rysunkach: $K = 4$ [j.u.], $T = 10$ [mies.], $r = 0.1$ [1/mies.], $\sigma = 0.05$ [1/ $\sqrt{\text{mies.}}$]. Podobnie jak na rys.4.3 rozwiązanie równania BS (linia czerwona) odbiega wyraźnie w części centralnej od swojej asymptotyki ukośnej (linia niebieska).



Rysunek 4.13: Dochód C posiadacza opcji sprzedaży w zależności od ceny podstawowego instrumentu finansowego Y uzyskana w oparciu o formułę (4.42) dla czasu $t = T$ (czyli dla chwili pośrodkowej) oraz wartości parametrów modelu takich jak dla rozwiązania przedstawionego na dwóch poprzednich rysunkach: $K = 4$ [j.u.], $T = 10$ [mies.], $r = 0.1$ [1/mies.], $\sigma = 0.05$ [1/ $\sqrt{\text{mies.}}$]. Podobnie jak na rys.4.1 rozwiązanie równania BS (linia czerwona) pokrywa się ze swoją asymptotą ukośną (linia niebieska).



Rysunek 4.14: Analiza dochodu $C(Y(t), t)$ posiadacza opcji sprzedaży w zależności od ceny podstawowego instrumentu finansowego Y uzyskana w oparciu o formułę BS (??) dla czasu $t = T/2$ (czyli dla chwili pośredniej) oraz wartości parametrów modelu takich jak dla rozwiązania przedstawionego na dwóch poprzednich rysunkach: $K = 4$ [j.u.], $T = 10$ [mies.], $r = 0.1$ [1/mies.], $\sigma = 0.05$ [1/ $\sqrt{\text{mies.}}$]. Cena opcji (linia czerwona) został zdekomponowana na dwie składowe: linię zieloną opisującą składową ceny $C_C(Y(t), t)$ oraz linię niebieską opisującą składową $C_{PC}(Y(t), t)$.

Część III

Procesy niegaussowskie

Rozdział 5

Fraktale stochastyczne - charakterystyczne doświadczenia

Fraktale stochastyczne to obiekty jakie powstają przez wprowadzenie szumu (czyli zaburzeń statystycznych) do deterministycznych (tradycyjnych) struktur fraktalnych takich jak np. fraktale samopodobne lub samopokrewne. Innymi słowy, fraktale stochastyczne tym się różnią od deterministycznych, że zawierają element przypadku, który może modyfikować daną strukturę fraktalną - modyfikacja ta może być wieloraka. Otrzymane w ten sposób fraktale stochastyczne należą, na ogół, do klas uniwersalności różnych od tych do jakich należą ich deterministyczne pierwowzory. Oczywiście, *fraktale stochastyczne są znacznie bliższe obiektom występującym w przyrodzie*, takim jak np. materiały porowate oraz układy perkolujące bądź też obszary rozgraniczenia faz, *niż fraktale deterministyczne*; te ostatnie stanowią raczej wyidealizowany punkt odniesienia, ułatwiający wstępne rozważania.

Droga jaką obraliśmy składa się z dwóch etapów - najpierw omawiamy *fraktale przypadkowe* a następnie *fraktale statystyczne*. Te pierwsze powstają poprzez prostą modyfikację fraktali deterministycznych (patrz rozdz.5.2), bez naruszania wymiaru fraktalnego deterministycznych "rodziców" w przeciwieństwie do fraktali statystycznych, które w ogólności mają wymiary fraktalne różne od swoich deterministycznych pierwowzorów (patrz rozdz.5.3). Podejście tego typu dostarcza wskazówek pozwalających na rozwiązywanie niektórych zagadnień odwrotnych np. dotyczących makroskopowych statystycznych struktur fraktalnych¹.

5.1 Fraktale matematyczne a fraktale fizyczne

Zwykle, mówiąc o fraktalach (bez żadnych dodatkowych przymiotników) ma się na myśli matematyczne fraktale deterministyczne. Ale *fraktale matematyczne w przyrodzie nie występują*. Rodzi się zatem pytanie dlaczego fizycy się nimi zajmują? Należy

¹Zagadnienie odwrotne polega na znalezieniu wymiaru fraktalnego danej statystycznej struktury fraktalnej, dysponując jedynie pojedynczym egzemplarzem takiej struktury.

ono do tej samej kategorii co pytanie o przydatność rachunku różniczkowego i całkowego dla fizyki. Przecież w przyrodzie mamy do czynienia tylko ze skończonymi przyrostami a nie z wielkościami granicznymi, infinitesimalnie małymi. Na przykład, pomiar prędkości jest zawsze tylko pomiarem skończonego odcinka drogi przebytego przez dane ciało w skończonym czasie i nic więcej. Występujące w definicji prędkości przejście graniczne jest tylko matematyczną idealizacją - możliwość takiej idealizacji wynika z obserwacji co do wystarczająco regularnego zachowania się kolejnych coraz to mniejszych przyrostów drogi pokonywanych w odpowiednio krótszych odcinkach czasu. Mówimy o takiej procedurze, że jest ciekawa. Potwala to zatrać nasze pomiary na, siłą rzeczy, skończonym poziomie ziarnistości bowiem, nie ma sensu mierzyć prędkości pędzącego samochodu poprzez pomiar milimetrowych odcinków drogi pokonywanych w milisekundowych przedziałach czasu. Podobnie rzecz się ma z obiektami samopodobnymi lub samopokrewnymi, czy mówiąc ogólniej z fraktalami bądź multifraktalami. W rzeczywistości, możemy mówić zawsze tylko o skończonej liczbie pokoleń struktury samopodobnej czy samopokrewnej lub inaczej o skończonej liczbie skal czasoprzestrzennych. Innymi słowy, *fraktale fizyczne to w istocie prefraktale czy nawet premultifraktale stochastyczne*; pomimo tego, używając analizy fraktalnej możemy (z kontrolowaną dokładnością) przewidzieć zachowanie się realnego układu w wielu interesujących nas skalach.

5.2 Fraktale przypadkowe

Poniżej omawiamy dwa rodzaje struktur fraktalnych mianowicie ograniczone, których (całkowity) liniowy rozmiar L jest niezależny od poziomu ziarnistości (skali) oraz fraktale nieograniczone, których (całkowity) liniowy rozmiar rośnie w miarę przechodzenia do obrazu coraz bardziej gruboziarnistego (coraz większej skali). Krótko mówiąc, fraktale ograniczone to obiekty powstające poprzez odpowiednie zdefektowanie jednorodnej struktury w głąb, podczas gdy fraktale nieograniczone powstają przez odpowiednio zdefektowany wzrost. W niniejszym wykładzie badamy w zasadzie tylko wymiar samopodobieństwa oraz wymiar pudełkowy dla obu rodzajów struktur fraktalnych jako najbardziej przydatne.

5.2.1 Ograniczone fraktale samopodobne

Nasze rozważania rozpoczynamy od analizy obiektów, które powstały przez wprowadzenie najprostszego przypadkowego zaburzenia do samopodobnych (deterministycznych) struktur fraktalnych. Na rys.1(5.2.1) przedstawiono zespół statystyczny przypadkowo zdefektowanych dywanów Sierpińskiego (które w jednym wymiarze są zbiorami Cantora a w trzech wymiarach gąbkami Sierpińskiego; tutaj wymiar Euklidesowy przestrzeni d w której zanurzony jest dywan wynosi 2). Na rys.1a(5.2.1) pokazano pierwsze pokolenie ($k = 1$) powstałe przez usunięcie najmniejszego kwadratu (zdefektowanie $m = 1$), niekoniecznie centralnego (jak to ma miejsce dla determi-

nistycznego dywanu Sierpińskiego), z kwadratu większego o długości boku L (jak widać bok ten został podzielony tutaj na $n = 3$ równe części; zwykle $1/n$ nosi nazwę współczynnika redukcji a m/n^d współczynnika zdefektowania). Innymi słowy, usuwanie pojedynczego, mniejszego kwadratu ma miejsce zawsze, w każdym pokoleniu k natomiast, nie wiadomo który kwadrat zostanie usunięty, co jest właśnie dziełem przypadku. Widać to wyraźniej na przykładzie kolejnych pokoleń przedstawionych na rys.1b(5.2.1) oraz rys.1c(5.2.1). Tym samym został zdefiniowany *generator przypadkowej struktury fraktalnej* pozwalający na zbudowanie ograniczonego fraktalnego obiektu samopodobnego w sensie stochastycznym. Definicję tę można traktować jako określenie samopodobieństwa przypadkowej struktury fraktalnej. Bezpośredni wniosek jaki się nasuwa dotyczy wymiaru samopodobnego - w dalszym ciągu nazywamy go *fraktalnym* gdyż jest to wymiar ułamkowy (a nie całkowity jak wymiar Euklidesowy (topologiczny) przestrzeni) i oznaczamy przez d_s ; jest on identyczny z wymiarem fraktalnym deterministycznego dywanu Sierpińskiego (patrz np. artykuł w czasopiśmie "Delta" 2 (1985) 1, książka H.-O. Peitgen, H. Jürgens, D. Saupe, "Granice Chaosu. Fraktale", PWN, Warszawa 1997, lub książka T. Vicsek, "Fractal growth phenomena", World Scienc., Singapore 1989). Wynika to z faktu, że wymiar samopodobieństwa jest (tutaj) niewrażliwy na to który kwadrat jest usuwany, ważne aby w każdym pokoleniu jeden mniejszy kwadrat został usunięty.

Z jednej strony, dla tego typu przypadkowo zdefektowanych struktur można napisać równanie algebraiczne słuszne dla każdego pokolenia $k (= 1, 2, \dots)$

$$N(k) = (n^d - m)^k = (9 - 1)^k = 8^k, \quad (5.1)$$

gdzie $N(k)$ jest liczbą kwadratów jaka pozostała w pokoleniu k po przeprowadzeniu (powyżej opisanej) procedury przypadkowego defektowania. Równanie (5.1) ma charakter globalny i jest także słuszne dla deterministycznego dywanu Sierpińskiego.

Z drugiej strony, dzięki własności samopodobieństwa (tutaj w sensie statystycznym gdyż obarczonej dodatkowo elementem przypadkowości), można napisać kluczową relację pomiędzy liczbą kwadratów $N(k)$ a liczbą

$$n(k) = n^k = \frac{L}{l(k)} \quad (5.2)$$

na jaką został podzielony w pokoleniu k bok wyjściowego kwadratu o długości L ($l(k) (= L/n^k)$ jest długością boku małego kwadratu w pokoleniu k); mianowicie

$$N(k) = n(k)^{d_s} = \left(\frac{l(k)}{L}\right)^{-d_s}, \quad k = 1, 2, \dots \quad (5.3)$$

Jak widać, wymiar samopodobieństwa d_s jest niezależny od numeru pokolenia k co wynika z samopodobnego (tutaj dodatkowo w sensie statystycznym) charakteru struktury. Często, relację (5.3) zapisuje się w skrótowej postaci

$$N(k) \sim (l(k))^{-d_s}, \quad (5.4)$$

mówiąc, że liczba pokrywających kwadratów ("pudełek") jaka istnieje w k -tym pokoleniu skaluje się z liniowym rozmiarem pokrywającego kwadratu ("pudellka"). Tego typu zapis pozwala rozszerzyć analizę na przypadek struktur fraktalnych nie będących samopodobnymi.

Z (5.1), po uwzględnieniu (5.3), otrzymujemy że

$$d_s = \frac{\ln(N(k))}{\ln(L/l(k))} = \frac{\ln(n^d - m)}{\ln(n)} = \frac{\ln(8)}{\ln(3)} = 3 \frac{\ln(2)}{\ln(3)}, \quad (5.5)$$

gdzie oczywiście wykładnik

$$d_s < d \quad (5.6)$$

co wynika z faktu, że omawiana struktura jest zdefektowanym kwadratem tzn. jej pokrycie małymi kwadratami nie spełnia jednolite większego kwadratu; gdyby nasz kwadrat nie był dziurawy wtedy oczywiście $d_s = d$.

Zastanówmy się nad sensem wymiaru samopodobnego d_s , który, podobnie jak omawiany poniżej tzw. wymiar pudellkowy, jest szczególnym przypadkiem wymiaru Hausdorffa. W tym celu zauważmy, że $d(= 2)$ -wymiarowa objętość $V(k)$ (tutaj powierzchnia) obiektu w pokoleniu k wynosi,

$$V(k) = N(k)(l(k))^d. \quad (5.7)$$

Objętość $V(k)$ przyjmuje się za miarę danej struktury fraktalnej.

Z drugiej strony, na mocy równania (5.7) oraz (5.3) otrzymujemy, że

$$V(k) = L^{d_s}(l(k))^{d-d_s} = L^d \left(\frac{l(k)}{L}\right)^{d-d_s} \quad (5.8)$$

czyli

$$d_s = d - \frac{\ln(V(k)/L^d)}{\ln(l(k)/L)}. \quad (5.9)$$

Czasami wykładnik $\Delta_s = d - d_s$ z jakim skaluje się objętość nazywa się wymiarem Minkowskiego albo *deficytem wymiaru samopodobnego*.

Często, relację (5.8) zapisuje się krócej

$$\frac{V(k)}{L^d} \sim (l(k))^{\Delta_s}, \quad (5.10)$$

mówiąc, że (względna) miara danej struktury fraktalnej skaluje się z liniowym rozmiarem $l(k)$ pokrywającego kwadratu ("pudellka"). Tego typu zapis pozwala rozszerzyć analizę na przypadek struktur fraktalnych, które nie są samopodobne.

Łatwo zauważyć, że wyrażenia (5.5) oraz (5.9) są słuszne dla każdego pokolenia k tylko dlatego, że mamy do czynienia ze strukturą samopodobną (niezależnie od tego czy jest ona samopodobna w sensie deterministycznym czy też sensie statystycznym zdefiniowanym powyżej).

5.2.2 Graniczny paradoks - struktura prawie wszędzie pusta

W oparciu o (5.7), (5.3), (5.1) oraz (5.2) można wykonać następujące przejście graniczne

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{V(k)}{L^d} = \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{N(k)}{n(k)^d} = \lim_{k \rightarrow \infty} \left(1 - \frac{m}{n^d}\right)^k = 0. \quad (5.11)$$

Powyższy wynik jest paradoksalny gdyż, jak widać, w granicy $k \rightarrow \infty$ objętość struktury oraz liczba jej elementów (elementarnych pudelek) jest zaniedbywalnie mała; innymi słowy, liczba dziur dorównuje liczbie (prawie) wszystkich pudelek (kwadratów) tworzących jednorodny (niezdefektowany) obiekt. Wynik ten jest prawdziwy tylko w granicy $k \rightarrow \infty$ wskazując, że graniczna struktura samopodobna jest maksymalnie zdefektowana, czyli że wielkość obszaru dziur jest (prawie) równa wielkości całego obszaru struktury pomimo, że na każdym poziomie ziarnistości usunięto jedynie minimalną liczbę ($m = 1$) kwadratów potrzebną do zapewnienia (nietrywialnego) samopodobieństwa ograniczonego statystycznego dywanu Sierpińskiego.

Przy tworzeniu powyższej struktury, należy wziąć pod uwagę zasadnicze ograniczenie - aby struktura mogła istnieć wszystkie jej elementy muszą być ze sobą powiązane tzn. muszą się dotykać. Oznacza to, że każde dwa elementy struktury można połączyć ze sobą linią należącą całkowicie do tej struktury.

5.2.3 Dolny wymiar samopodobieństwa

Wskazujemy na zależność oszacowania wielkości dolnego ograniczenia wymiaru samopodobnego od stopnia zdefektowania m/n^d fraktalnej struktury samopodobnej. W tym celu korzystamy z wyrażenia (5.5) pozwalającego zanalizować np. nierówność postaci

$$d - j < d_s = \frac{\ln(N(k))}{\ln(L/l(k))} = \frac{\ln(n^d - m)}{\ln(n)} = d - \Delta_s (< d), \quad j = 1, 2, \dots, d, \quad (5.12)$$

gdzie deficyt wymiaru

$$\Delta_s = \frac{\ln(1 - \frac{m}{n^d})}{\ln(1/n)} > 0 \quad (5.13)$$

wyraża się za pomocą współczynnika zdefektowania oraz współczynnika redukcji; z powyższych dwóch zależności otrzymujemy bezpośredni warunek na współczynnik zdefektowania

$$\frac{m}{n^d} < 1 - \frac{1}{n^j}, \quad j = 1, 2, \dots, d. \quad (5.14)$$

Postępując analogicznie w pozostałych przypadkach, czyli gdy $d_s < d - j$ oraz $d_s = d - j$, $j = 1, 2, \dots, d - 1$, otrzymujemy następujące zbiorcze wyrażenie

$$d_s \begin{cases} > d - j, & \text{dla } m/n^d < 1 - 1/n^j, \quad j = 1, 2, \dots, d \\ = d - j, & \text{dla } m/n^d = 1 - 1/n^j, \quad j = 1, 2, \dots, d - 1 \\ < d - j, & \text{dla } m/n^d > 1 - 1/n^j, \quad j = 1, 2, \dots, d - 1. \end{cases}$$

Jak widać, wyrażenie $1 - 1/n^d$ określa marginalne wartości współczynnika zdefektowania, dla których wymiar samopodobny jest liczbą naturalną. Z powyższego wynika, że możliwe jest "rośnięcie" w przestrzeni d wymiarowej struktur $d - 1$ wymiarowych (gdy $m/n^d = 1 - 1/n$), $d - 2$ wymiarowych (gdy $m/n^d = 1 - 1/n^2$), itd., wreszcie struktur jednowymiarowych (gdy $m/n^d = 1 - 1/n^{d-1}$) a nawet subliniowych (o wymiarze mniejszym od 1 gdy $m/n^d > 1 - 1/n^{d-1}$).

5.2.4 Gęstość struktury

Zauważmy, że gęstość liczbowa struktury $\rho(l)$ skaluje się w tych warunkach identycznie jak struktura niezdefektowa mianowicie,

$$\rho(l) = \frac{N(l)}{V(l)} = (l)^{-d}, \quad (5.15)$$

czyli jest niewrażliwa na operację defektowania układu. Zatem, gęstość liczbowa $\rho(l)$ jest jej niezmiennikiem i nie nadaje się do opisu struktur fraktalnych.

5.2.5 Wymiar pudełkowy ograniczonych struktur fraktalnych

Wymiar samopodobny jest tylko szczególnym przypadkiem wymiaru fraktalnego Hausdorffa. Dla struktur, które nie są samopodobne wyrażenia (5.5) oraz (5.9) należy zapisać w postaci ogólniejszej, mianowicie

$$d_b = \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\ln(N(k))}{\ln(L/l(k))} \quad (5.16)$$

lub

$$d_b = d - \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\ln(V(k)/L^d)}{\ln(l(k)/L)}. \quad (5.17)$$

Wzory (5.16) oraz (5.17) uzyskano w wyniku pokrycia danej struktury fraktalnej takimi pudełkami (patrz rys.2(5.2.1), których liniowy rozmiar $l(k)$ maleje potęgowo z wykładnikiem k , analogicznie jak dla struktur samopodobnych (czyli $l(k) = L/n^k$). Uzyskana w ten sposób wielkość d_b nosi nazwę wymiaru pudełkowego.

Ogólnie mówiąc, z wymiarem pudełkowym mamy do czynienia wtedy i tylko wtedy, gdy dla znikającej ciastności l (czyli liniowego rozmiaru pudełka, który w ogólności jest zmienną niezależną),

$$d_b = \lim_{l \rightarrow 0} \frac{\ln(N(l))}{\ln(L/l)} \quad (5.18)$$

lub

$$d_b = d - \lim_{l \rightarrow 0} \frac{\ln(V(l)/L^d)}{\ln(l/L)}. \quad (5.19)$$

Jak widać minimalna objętość $V(l)$, w której daje się zamknąć daną strukturę fraktalną skaluje się (ze znikającą ciarnistością l) jak

$$V(l) \sim (l)^{d-d_b} \quad (5.20)$$

natomiast minimalna liczba pudełek $N(l)$ skaluje się jak

$$N(l) \sim (l)^{-d_b}. \quad (5.21)$$

Zauważmy, że często jest wygodniej operować wielkościami bezwymiarowymi - w tym celu wprowadźmy ciarnistość bezwymiarową zdefiniowaną jako ułamek

$$\epsilon = \frac{l}{L}. \quad (5.22)$$

Korzystając z definicji (5.22) można wyrażenia (5.3) oraz (5.8) przedstawić w postaci

$$N(\epsilon) = \epsilon^{-d_b} \quad (5.23)$$

oraz

$$\frac{V(\epsilon)}{L^d} = \epsilon^{d-d_b}. \quad (5.24)$$

Stąd, wymiar pudełkowy d_b można zapisać następująco

$$d_b = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\ln(N(\epsilon))}{\ln(1/\epsilon)} \quad (5.25)$$

lub

$$d_b = d - \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\ln(V(\epsilon)/L^d)}{\ln(\epsilon)}, \quad (5.26)$$

co ułatwia dalsze uogólnienia (np. na pokrycia inne od pudełkowego), pozwalające na wprowadzenie pojęcia wymiaru Hausdorffa (patrz Dodatek A0). Należy podkreślić, że wymiar samopodobny d_s oraz wymiar pudełkowy d_b dla struktur samopodobnych nie są tożsame; można to zrozumieć na przykładzie obiektów zanurzonych w przestrzeni dwuwymiarowej gdyż wtedy wymiar pudełkowy nigdy nie jest większy od dwóch, w przeciwieństwie do wymiaru samopodobnego. W przypadku tego ostatniego, można podać przykłady struktur, których poszczególne elementy zachodzą na siebie, co prowadzi do wymiaru samopodobnego większego od dwóch.

Jako przykład omawiamy doświadczenie numeryczne, w którym wyznaczyliśmy wymiar pudełkowy płaskiej trajektorii powstałej w wyniku ruchów Browna pojedynczej cząsteczki (patrz rozdz.X). Oczywiście, trajektoria ta jest skończona nie mniej na tyle długa, że będziemy w stanie wyznaczyć jej wymiar pudełkowy z zadowalającą dokładnością. Na rys.1a-c(5.2.5) przedstawiono poszczególne etapy metody - jak widać, budujemy siatkę o stopniowo (np. w postępie geometrycznym) malejącej

stałej sieci $l(k) = L/n^k$, licząc tylko te pudełka w których znajdują się elementy trajektorii (liczbę tych pudełek oznaczamy przez $N(k)$). Na rys. 2(5.2.5) przedstawiliśmy zależność $N(k)$ od $L/l(k)$ w skali $\ln - \ln$. Jak widać nachylenie linii na wykresie stabilizuje się już w pokoleniu $k \approx 5$; uzyskane "asymptotyczne" nachylenie daje z dobrym przybliżeniem wartość wymiaru pudełkowego $d_b = 2$, tak jak należało oczekiwać. Podobnie, badamy w dalszej części wymiar pudełkowy błędzi Weierstrassa a w tym przeLOTów Lévy'ego.

5.2.6 Nieograniczone fraktale samopodobne

Analogicznie jak w rozdz. 5.2.1, rozważamy samopodobny fraktal przypadkowy czyli strukturę samopodobną w sensie statystycznym, powstającą przez odpowiednie powielanie obiektu wyjściowego tak jak to przedstawiono na rys. 1(5.2.6). Pomimo że istnieje wiele rzucających się w oczy analogii pomiędzy oboma typami struktur, zdecydowaliśmy się na ich systematyczne, oddzielne omówienie ze względu na fakt iż wykład jest przeznaczony przede wszystkim dla początkujących studentów. Ponadto takie podejście pozwala, w zasadzie, na niezależne zapoznanie się z wybranymi fragmentami tekstu.

Przedstawiona na rys. 1(5.2.6) struktura jest to nieograniczenie rosnący, przypadkowy (indeterministyczny) dywan Sierpińskiego zbudowany z elementarnych kwadratów o długości boku $l (= 1)$. Bezwymiarowy współczynnik (liniowego) powiększenia dywanu wynosi przykładowo $n = L/l = 3$ (często używa się zamiennie współczynnika ziarnistości $\epsilon = 1/n$), a każdy większy kwadrat jest zbudowany z $(n^d - m)^k$ mniejszych, gdzie $d (= 2)$ jest wymiarem przestrzeni Euklidesowej w której jest konstruowany dywan Sierpińskiego, $m (= 1)$ jest liczbą usuniętych mniejszych kwadratów, natomiast $k (= 1)$ numerem pokolenia (skali lub poziomu ziarnistości struktury) w którym prowadzi się obliczenia. Jak widać, na każdym poziomie ziarnistości defektowanie może wyglądać inaczej tzn. z kwadratu na poziomie ziarnistości k usuwany jest z dowolnego miejsca kwadrat o skali $k - 1$.

Możemy teraz postawić inicjujące pytanie: jaka jest liczba $N(k)$ podstawowych kwadratów (o długości boku l) zawartych w dużym kwadracie w k -tym pokoleniu (lub inaczej mówiąc, na k -tym poziomie ziarnistości)? Z jednej strony, z przedstawionej na rys. 1(5.2.6) konstrukcji wynika poprzez bezpośrednie zliczanie, że postulowana liczba wyraża się prostym wzorem

$$N(k) = (n^d - m)^k = (3^2 - 1)^k = 8^k, \quad k = 1, 2, \dots, \quad (5.27)$$

czyli jest taka sama jak dla ograniczonego, przypadkowego dywanu Sierpińskiego (patrz równanie (5.1)); co więcej jest ona równa analogicznym liczbom dla deterministycznych (ograniczonych i nieograniczonych) dywanów Sierpińskiego.

Z drugiej strony, analogicznie jak w przypadku ograniczonego dywanu Sierpińskiego, stawiamy pytanie o istnienie takiej liczby d , niezależnej od numeru pokolenia k , która spełnia kluczową relację

$$N(k) = n(k)^{d_s} = \epsilon(k)^{-d_s} = \{L(k)/l\}^{d_s}, \quad k = 1, 2, \dots, \quad (5.28)$$

gdzie wprowadziliśmy wielkość,

$$L(k) = n(k)l, \quad k = 1, 2, \dots, \quad (5.29)$$

będącą liniowym rozmiarem kwadratu w k -tym pokoleniu, gdzie identycznie jak dla struktur ograniczonych

$$n(k) = n^k, \quad k = 1, 2, \dots, \quad (5.30)$$

a ponadto

$$\epsilon(k) = \epsilon^k, \quad k = 1, 2, \dots \quad (5.31)$$

Zależność (5.28) zapisuje się często w postaci,

$$N(k) \sim \{L(k)\}^{d_s}, \quad k = 1, 2, \dots, \quad (5.32)$$

mówiąc, że "masa" $N(k)$ struktury widoczna na k -tym poziomie ziarnistości skaluje się potęgowo z jej rozmiarem liniowym $L(k)$; występujący w równaniu (5.32) wykładnik nosi nazwę wymiaru samopodobnego - w dalszej części zobaczymy, że jest on szczególnym przypadkiem wymiaru fraktalnego (a dokładniej, fraktalnego wymiaru Hausdorffa).

Ponadto, w oparciu o nierówność

$$n^{d_s} < n^d \quad (5.33)$$

(wynikającą z konstrukcji dywanu) otrzymujemy, że

$$d_s < d. \quad (5.34)$$

Oczywiście, gdyby struktura była jednorodna (czyli nie pozbawiano by jej w każdym pokoleniu niektórych elementów) wówczas mielibyśmy, po prostu, $d_s = d$. Fakt, że udało się znaleźć wspólny dla wszystkich pokoleń wykładnik d_s jest kluczowy dla niniejszych rozważań i wynika z samopodobnej natury konstruowanych obiektów przy czym nie jest tutaj ważne czy samopodobieństwo to ma statystyczny czy deterministyczny charakter.

Ze wzoru (5.28) wynika, że

$$d_s = \frac{\ln(N(k))}{\ln(n(k))} = \frac{\ln(N(k))}{\ln(L(k)/l)} = \frac{\ln(n^d - m)}{\ln(n)} = d_s - \Delta_s, \quad k = 1, 2, \dots, \quad (5.35)$$

gdzie, podobnie jak dla fraktali ograniczonych, deficyt wymiaru samopodobnego Δ_s dany jest wzorem

$$\Delta_s = \frac{\ln(1 - \frac{m}{n^d})}{\epsilon}, \quad (5.36)$$

i tak jak trzeba nie zależy od numeru pokolenia k .

Różnica pomiędzy oboma rodzajami struktur (ograniczoną i nieograniczoną) jest widoczna dopiero we wzorach na objętość, która w pierwszym przypadku maleje zgodnie ze wzorem (5.8) w miarę przechodzenia do coraz starszych pokoleń a w drugim rośnie. Mianowicie, wynosi ona

$$V(k) = l^d N(k) = l^d n(k)^{d_s} = l^d \left\{ \frac{L(k)}{l} \right\}^{d_s}, \quad k = 1, 2, \dots, \quad (5.37)$$

co często zapisuje się w postaci

$$V(k) \sim \{L(k)\}^{d_s}, \quad k = 1, 2, \dots, \quad (5.38)$$

mówiąc, że objętość $V(k)$ rosnącej struktury samopodobnej skaluje się potęgowo z jej rozmiarem liniowym $L(k)$. Ponadto,

$$d_s = \frac{\ln(V(k)/l^d)}{\ln(L(k)/l)}, \quad k = 1, 2, \dots \quad (5.39)$$

i nie zależy od k , jak być powinno.

W oparciu o (5.37) widzimy, że gęstość liczbowa

$$\rho = \frac{N(k)}{V(k)} = \frac{1}{l^d}, \quad k = 1, 2, \dots, \quad (5.40)$$

czyli nie ulega zmianie przy przechodzeniu od struktury regularnej do fraktalnej podobnie jak to ma miejsce dla struktur ograniczonych.

Widać na podstawie (5.27), (5.29) oraz (5.37), że

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{V(k)}{\{L(k)\}^d} = \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{l^d N(k)}{l^d n(k)^d} = \lim_{k \rightarrow \infty} \left(1 - \frac{m}{n^d}\right)^k = 0, \quad (5.41)$$

lub inaczej, w oparciu o (5.28), (5.29) oraz (5.37)

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{V(k)}{\{L(k)\}^d} = \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{l^d N(k)}{l^d n(k)^d} = \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{n(k)^{d_s}}{n(k)^d} = \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{1}{n^{k(d-d_s)}} = 0. \quad (5.42)$$

Powyższy wynik jest prawdziwy tylko w granicy $k \rightarrow \infty$ pokazując, że graniczna struktura samopodobna jest maksymalnie zdefektowana gdyż obszar dziur dorównuje wielkością całemu obszarowi struktury pomimo, że na każdym poziomie ciernistości usunięto jedynie minimalną liczbę ($m = 1$) kwadratów potrzebną do zapewnienia (nietrywialnego) samopodobieństwa nieograniczonego statystycznego dywanu Sierpińskiego.

Aby lepiej zrozumieć wynik (5.41) obliczamy w granicy $k \rightarrow \infty$ liczbę $N(k)$ elementarnych kwadratów oraz dziur $M(k)$. Zgodnie z (5.27)

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{N(k)}{n(k)^d} = \lim_{k \rightarrow \infty} \left(1 - \frac{m}{n^d}\right)^k = 0 \quad (5.43)$$

oraz

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{M(k)}{n(k)^d} = \lim_{k \rightarrow \infty} (1 - (1 - \frac{m}{n^d})^k) = 1. \quad (5.44)$$

Powyższy wynik jest paradoksalny gdyż, jak widać, w granicy $k \rightarrow \infty$ liczba dziur dorównuje liczbie wszystkich pudełek (kwadratów) tworzących jednorodny obiekt.

Wyznaczamy teraz dolne oszacowanie wymiaru samopodobnego d_s dla nieograniczonego (deterministycznego bądź przypadkowego) dywanu Sierpińskiego. Rozważamy w tym celu wyrażenia

$$\begin{aligned} \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{V(k)}{\{L(k)\}^{d-1}} &= \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{l^d N(k)}{l^{d-1} n(k)^{d-1}} = l \lim_{k \rightarrow \infty} n^{k(1+d_s-d)} = l \lim_{k \rightarrow \infty} (n - \frac{m}{n^{d-1}})^k \\ &= \begin{cases} \infty, & \text{dla } m < n^{d-1}(n-1) \\ l, & \text{dla } m = n^{d-1}(n-1) \\ 0, & \text{dla } m > n^{d-1}(n-1), \end{cases} \end{aligned}$$

z których wynika, że

$$d_f \begin{cases} > d-1, & \text{dla } m < n^{d-1}(n-1) \\ = d-1, & \text{dla } m = n^{d-1}(n-1) \\ < d-1, & \text{dla } m > n^{d-1}(n-1). \end{cases}$$

W naszym przypadku, przyjęliśmy na wstępie dla prostoty, że $m = 1$ (oraz $n = 3$ i $d = 2$) co prowadzi do tego, że $d-1 < d_s$. Jednakże moglibyśmy, równie dobrze, rozważać przypadki dla których $1 \leq m < n$. Z powyższego wynika, że np. kryształ rosnący w trzech wymiarach może być faktycznie dwuwymiarowy co odpowiadałoby (dla $n = 3$ oraz $d = 3$) czynnikowi zdefektowania $m = 18 (< n^d = 27)$. Oczywiście, do pomyslenia są także kryształy jednowymiarowe (wtedy $m > 18$).

Ponadto, gdybyśmy rozważali analogiczne struktury, które powstają przez odpowiednie dodawanie elementów na każdym poziomie ziarnistości k (dobrym przykładem może być krzywa Kocha) wówczas mielibyśmy, zamiast równości (5.27), analogiczne wyrażenie

$$N(k) = (n^d + m)^k = (3^2 + 1)^k = 10^k, \quad k = 1, 2, \dots, \quad (5.45)$$

prowadzące, w oparciu o (5.28) oraz zachodzącą w tym przypadku nierówność

$$n(k)^{d_s} > n(k)^d, \quad k = 1, 2, \dots, \quad (5.46)$$

do wymiaru fraktalnego

$$d_s > d, \quad (5.47)$$

przewyższającego wymiar przestrzeni Euklidesowej, w której jest zanurzony wyjściowy, niezdefektowany obiekt.

Oszacujemy górne ograniczenie wymiaru samopodobnego d_s . W tym celu rozważamy wyrażenia

$$\begin{aligned} \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{V(k)}{\{L(k)\}^{d+1}} &= \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{l^d N(k)}{l^{d+1} n(k)^{d+1}} = \frac{1}{l} \lim_{k \rightarrow \infty} n^{k(d_s - d - 1)} = \frac{1}{l} \lim_{k \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{n} + \frac{m}{n^{d+1}} \right)^k \\ &= \begin{cases} \infty, & \text{dla } m > n^d(n-1) \\ \frac{1}{l}, & \text{dla } m = n^d(n-1) \\ 0, & \text{dla } m < n^d(n-1), \end{cases} \end{aligned}$$

z których wynika, że

$$d_s \begin{cases} > d+1, & \text{dla } m > n^d(n-1) \\ = d+1, & \text{dla } m = n^d(n-1) \\ < d+1, & \text{dla } m < n^d(n-1). \end{cases}$$

Na przykład, wspomniana powyżej krzywa Kocha ($d=1$, $n=3$, $m=1$) posiada, zgodnie z powyższymi wzorami wymiar samopodobieństwa $d < d_s (= \ln(4)/\ln(3)) < d+1$.

5.2.7 Pudełkowy wymiar fraktalny

Dotychczas rozważaliśmy fraktale samopodobne, stanowiące najprostszy przykład. W niniejszym paragrafie rozważamy struktury, które nie są samopodobne a mimo tego ich pudełkowy wymiar fraktalny jest ułamkowy.

5.3 Fraktale statystyczne

W niniejszym rozdziale omawiamy statystyczne struktury ograniczone i nieograniczone zwane *fraktalami statystycznymi* na przykładzie statystycznego zbioru Cantora (omówienie deterministycznego zbioru Cantora można znaleźć np. w książce H.-O. Peitgen, H. Juergens, D. Saupe, "Granice Chaosu. Fraktale", PWN, Warszawa 1997).

5.3.1 Ograniczone fraktale statystyczne

Na rys.1a(5.3) przedstawiono zespół statystyczny złożony z $N_{k(=1)}$ odcinków podzielonych na trzy równe części; jak widać, niektóre odcinki centralne zostały usunięte - zakładamy, że nastąpiło to z prawdopodobieństwem p . Można teraz postawić dotyczące nieusuniętych odcinków a mianowicie, jaka jest ich średnia liczba ($< N(k(=1)) >$) w danym pokoleniu k (tutaj pierwszym gdyż $k=1$)? Odpowiedź jest natychmiastowa - jest to granica następującej średniej ważonej nazywanej także *średnią po zespole statystycznym*,

$$\begin{aligned} < N(k(=1)) > &= \lim_{N_{k(=1)} \rightarrow \infty} \left(2 \frac{N_{k(=1)}^2}{N_{k(=1)}} + 3 \frac{N_{k(=1)}^3}{N_{k(=1)}} \right) = 2p + 3(1-p) \\ &= 3 - p, \end{aligned} \tag{5.48}$$

gdzie $N_{k(-1)}^2$ oznacza całkowitą liczbę odcinków pozbawionych części centralnej, a $N_{k(-1)}^3$ odcinków, które ją posiadają.

W następnym pokoleniu ($k = 2$), z każdym odcinkiem zdefektowanym, składającym się z dwóch odsuniętych od siebie krótszych, bądź niezdefektowanym zbudowanym z trzech odcinków krótszych, wiążemy osobny zespół statystyczny (rys.1b(5.3)). Analogicznie jak dla pokolenia pierwszego, każdy z krótszych odcinków jest także defektowany statystycznie. W celu łatwiejszego przedstawienia istoty rzeczy, wprowadzamy synchronizację polegającą na tym, że np. zdarzenie defektowania zachodzi jednocześnie dla wszystkich krótszych odcinków danego pokolenia (o numerze k), składających się na jeden odcinek dłuższy poprzedniego pokolenia (o numerze $k - 1$). Wyznaczamy teraz średnią liczbę $\langle N(k=2) \rangle$ odcinków jaka pozostała po przeprowadzeniu procedury defektowania w drugim pokoleniu,

$$\begin{aligned} \langle N(k=2) \rangle &= \lim_{N_{k(-1)} \rightarrow \infty} \lim_{N_{k(-2)} \rightarrow \infty} \left\{ 2 \frac{N_{k(-1)}^2}{N_{k(-1)}} \times \left(2 \frac{N_{k(-2)}^2}{N_{k(-2)}} + 3 \frac{N_{k(-2)}^3}{N_{k(-2)}} \right) \right. \\ &\quad \left. + 3 \frac{N_{k(-1)}^3}{N_{k(-1)}} \times \left(2 \frac{N_{k(-2)}^2}{N_{k(-2)}} + 3 \frac{N_{k(-2)}^3}{N_{k(-2)}} \right) \right\} \\ &= (2p + 3(1 - p))^{k(-2)} = (3 - p)^{k(-2)}. \end{aligned} \quad (5.49)$$

Postępując analogicznie dla następnych pokoleń, uzyskujemy ogólne, proste wyrażenie na średnią liczbę odcinków jaka pozostała po przeprowadzeniu k -pokoleniowej statystycznej procedury defektowania

$$\langle N(k) \rangle = (2p + 3(1 - p))^k = (3 - p)^k. \quad (5.50)$$

Wyrażenie (5.50) pozwala wyznaczyć wymiar fraktalny d_f statystycznej struktury fraktalnej mianowicie, z definicji

$$\langle N(k) \rangle = (3^k)^{d_f} \quad (5.51)$$

oraz z wyrażenia (5.50) wynika natychmiast, że

$$d_f = \frac{\ln(3 - p)}{\ln(3)}. \quad (5.52)$$

Często interpretuje się równość (5.51) jako związek pomiędzy (bezwymiarową) "objętością" stochastycznej struktury fraktalnej (lewa strona równania) a (bezwymiarową) "masą" zawartą w niej w k -tym pokoleniu (prawa strona tegoż równania); jest to wyraźniej widoczne poniżej. Oczywiście, statystyczna struktura fraktalna przechodzi w deterministyczną tylko wtedy gdy $p = 1$; wówczas jej wymiar fraktalny $d_f = \ln(2)/\ln(3)$. Gdy $p = 0$ mamy do czynienia z drugim przypadkiem skrajnym dotyczącym odcinka niezdefektowanego - wówczas $d_f = d (= 1)$ czyli wymiar samopodobny jest równy po prostu wymiarowi przestrzeni.

5.3.2 Różne sposoby defektowania struktur

Dalsze uogólnienie wzoru (5.50) jest związane ze sposobem defektowania czyli sposobem w jaki dana struktura fraktalna została uzyskana ze struktury jednolitej oraz minimalnym wymiarem przestrzeni w jakiej jest zanurzona. Na przykład, jeżeli zamiast usuwać środkowy odcinek zastąpimy go "deszką" złożonym z dwóch odcinków, jak to pokazano na rys.2(5.3), wówczas w poniższym wzorze $m = +2$ a nie -1 jak to ma miejsce dla zbioru Cantora (porównaj wyrażenie (5.50)). Zatem,

$$\langle N(k) \rangle = ((b^d + m)p + b^d(1 - p))^k = (b^d + mp)^k = (b^k)^{d_f}, \quad (5.53)$$

gdzie b stanowi wyjściową, liniową miarę wyjściowej, defektowanej struktury jednolitej natomiast d jest minimalnym wymiarem Euklidesowym przestrzeni w której zanurzona jest ta struktura. Z trzeciej równości w (5.53) otrzymujemy, że

$$d_f = \frac{\ln(b^d + mp)}{\ln(b)}, \quad (5.54)$$

bezpośrednie uogólnienie wzoru (5.52).

Wskazujemy na zależność oszacowania wielkości dolnego ograniczenia wymiaru samopodobnego d_f od stopnia statystycznego zdefektowania $-pm/n^d$ fraktalnej struktury samopodobnej. W tym celu korzystamy z wyrażenia (5.53) pozwalającego zanalizować np. nierówność postaci

$$d - j < d_f = \frac{\ln \langle N(k) \rangle}{\ln(L/l(k))} = \frac{\ln(n^d - pm)}{\ln(n)} (< d), \quad j = 1, 2, \dots, d, \quad (5.55)$$

skąd otrzymujemy bezpośredni warunek na współczynnik statystycznego zdefektowania

$$p \frac{m}{n^d} < 1 - \frac{1}{n^j}, \quad j = 1, 2, \dots, d. \quad (5.56)$$

Postępując analogicznie w pozostałych przypadkach, czyli gdy $d_f < d - j$ oraz $d_f = d - j$, $j = 1, 2, \dots, d - 1$, otrzymujemy następujące zbiorcze wyrażenie

$$d_f \begin{cases} > d - j, & \text{dla } pm/n^d < 1 - 1/n^j, \quad j = 1, 2, \dots, d \\ = d - j, & \text{dla } pm/n^d = 1 - 1/n^j, \quad j = 1, 2, \dots, d - 1 \\ < d - j, & \text{dla } pm/n^d > 1 - 1/n^j, \quad j = 1, 2, \dots, d - 1. \end{cases}$$

Jak widać, wyrażenie $1 - 1/n^j$ określa marginalne wartości współczynnika statystycznego zdefektowania, dla których wymiar samopodobny jest liczbą naturalną. Z powyższego wynika, że możliwe jest "rośnięcie" w przestrzeni d wymiarowej struktur $d - 1$ wymiarowych (gdy $pm/n^d = 1 - 1/n$), $d - 2$ wymiarowych (gdy $pm/n^d = 1 - 1/n^2$), itd., wreszcie struktur jednowymiarowych (gdy $pm/n^d = 1 - 1/n^{d-1}$) a nawet subliniowych (o wymiarze mniejszym od 1 gdy $pm/n^d > 1 - 1/n^{d-1}$).

5.3.3 Zespolone wymiary fraktalne

W dotychczasowych naszych rozważaniach poszukiwaliśmy jedynie rzeczywistych rozwiązań $d_f^{(0)}$ równań typu

$$(b^k)^{d_f} = (b^d + mp)^k. \quad (5.57)$$

Znajdziemy teraz pełne rozwiązanie powyższego równania, w liczbach zespolonych. Można je łatwo odnaleźć o ile równanie (5.57) przepiszemy w następującej postaci

$$(\exp(d_f \cdot \ln(b)))^k = (\exp(\ln(b^d + mp) + 2\pi i \cdot j))^k \quad (5.58)$$

skąd natychmiast otrzymujemy poszukiwane wyrażenie na zespolony wymiar fraktalny rzędu j

$$d_f^{(j)} = d_f^{(0)} + i \cdot j \cdot \frac{2\pi}{\ln(b)}, \quad (5.59)$$

gdzie obecnie używane rzeczywiste $d_f^{(0)}$ jest równe poprzednio używanemu d_f (poprzednio rozważaliśmy tylko rzeczywisty wymiar fraktalny). Jak widać pełna charakterystyka wymiaru samopodobnego fraktali jest dana nieskończonym ciągiem wymiarów zespolonych. Do zagadnienia tego powrócimy analizując przejście od fraktali dyskretnych do odpowiadających im fraktali ciągłych czyli analizując przejście od skalowania dyskretnego do ciągłego.

5.3.4 Dyskretne a ciągle prawa skalowania

5.4 Statystyczne struktury multifraktalne

Powyższe rozważania można rozszerzyć na statystyczne struktury multifraktalne - statystyczność, skończona liczba pokoleń oraz multifraktalność to podstawowe własności przypisywane realnym strukturom fraktalnym. Multifraktale wprowadzimy teraz w najprostszym znanym nam sposób po prostu uśredniając wielkość $\langle N(k) \rangle^q$ z miarą (wagą) gaussowską, gdzie q jest dowolnym rzeczywistym wykładnikiem potęgi. Średniowanie to oznacza, że poszczególne pokolenia odcinków zostały rozmieszczone na podłożu zgodnie ze wspomnianą powyżej wagą - wyjaśniamy to dokładniej poniżej.

Wprowadzimy zatem rozkład Gaussa

$$P(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{(k - \langle k \rangle)^2}{2\sigma^2}\right), \quad (5.60)$$

mówiący o jakim prawdopodobieństwie obserwator może wylosować pokolenie k w zespole statystycznym przygotowanych już wcześniej statystycznie zdefektowanych struktur (np. odcinków ze zbioru Cantora); tutaj $\langle k \rangle$ oznacza średnią wartość losowanych pokoleń natomiast σ jest ich dyspersją. Przyjmujemy (co pozwala zachować

normalizację rozkładu), że $k = 0, 1, \dots, 2\langle k \rangle$, oraz $\sigma = \sqrt{\langle k \rangle/2}$; założenia te będą dyskutowane w dalszej części przy okazji omawiania multifraktałnych błędów przypadkowych.

Zatem, wyrażenie na moment rzędu q średniej liczby odcinków w pokoleniu k jaka pozostała po zakończeniu procedury defektowania (cantoryzacji) odcinków z pokolenia wcześniejszego $k - 1$ wynosi

$$\langle \langle N(k) \rangle^q \rangle = \sum_{k=0}^{2\langle k \rangle} P(k) \langle N(k) \rangle^q = \sum_{k=0}^{2\langle k \rangle} \exp(G(k)), \quad (5.61)$$

gdzie

$$\begin{aligned} G(k) = & - \frac{1}{2\sigma^2} \{k - [\langle k \rangle + q\sigma^2 d_f \ln(b)]\}^2 + \frac{1}{2} q^2 [d_f \sigma \ln(b)]^2 \\ & + q d_f \langle k \rangle \ln(b) - \frac{1}{2} \ln(2\pi\sigma^2), \end{aligned} \quad (5.62)$$

co wynika bezpośrednio z wyrażeń (5.60), (5.53) i (5.54).

Dobierając wystarczająco małą wartość σ można uzyskać ostre maksimum wyrażenia (5.62) dla

$$k = k^* = \langle k \rangle + q d_f \sigma^2 \ln(b), \quad (5.63)$$

co oznacza, że szereg stojący w wyrażeniu (5.61) jest, z dobrym przybliżeniem, zdominowany przez jego składnik o maksymalnej wartości² czyli $\exp(G(k^*))$. Oczywiście, ma to miejsce tylko wtedy gdy k^* znajduje się w przedziale $[0, 2\langle k \rangle]$, czyli dla q spełniającego nierówność

$$-q_0 \leq q \leq q_0, \quad (5.64)$$

gdzie $q_0 = 2/d_f \ln(b)$, przy czym wykorzystaliśmy tutaj przyjętą wcześniej zależność pomiędzy wartością oczekiwaną a dyspersją zmiennej k . Stąd³,

$$\langle \langle N(k^*) \rangle^q \rangle \approx C \exp(G(k^*)) = C P(k^*) \langle N(k^*) \rangle^q = \exp(-\tau(q)), \quad (5.65)$$

przy czym

$$\begin{aligned} P(k^*) &= \exp(f(\eta(q))), \\ \langle N(k^*) \rangle &= \exp(-\eta(q)), \end{aligned} \quad (5.66)$$

²W takiej sytuacji mamy po prostu do czynienia z gaussowską reprezentacją delty Diraca centrowaną w punkcie $k = k^*$

³W fizyce statystycznej tego typu podejście jest często wykorzystywane nosząc nazwę metody punktu siodłowego.

gdzie

$$\begin{aligned}
-6\sigma^2 \leq \tau(q) &= q\eta(q) - f(\eta(q)) \\
&= -\frac{1}{2}[\sigma d_f \ln(b)]^2 q^2 - \langle k \rangle q d_f \ln(b) \\
&= -\frac{1}{2}[q\sigma d_f \ln(b) + \frac{\langle k \rangle}{\sigma}]^2 + \frac{1}{2}(\frac{\langle k \rangle}{\sigma})^2 \leq 2\sigma^2 \\
-2\sigma^2 \leq f(\eta(q)) &= -\frac{1}{2}[d_f \sigma \ln(b)]^2 q^2 = -\frac{1}{2\sigma^2}[\frac{\eta(q)}{d_f \ln(b)} + \langle k \rangle]^2 \leq 0, \\
\frac{-8\sigma^2}{q_0} \leq \eta(q) &= -[d_f \sigma \ln(b)]^2 q - \langle k \rangle d_f \ln(b) \leq 0.
\end{aligned} \tag{5.67}$$

Stała $C(= 1/\sqrt{2\pi\sigma^2})$ pozwala zachować normalizację do jedności wyrażenia (5.65) dla $q = 0$.

Funkcję $f(\eta(q))$ nazywa się bardzo różnie - czasami widmem wykładników skalujących, widmem lokalnych wykładników, widmem singularności a także widmem multifraktalnym (czy też po prostu widmem multifraktala) - tutaj jest ona niedodatnia i kwadratowo zależna od wykładnika $\eta(q)$ a także kwadratowo od samego q . Posiada ona maksimum dla $\eta(q) = -\langle k \rangle \ln(b^d + mp)$ czyli dla $q = 0$; widmo wykładników skalujących zostało schematycznie przedstawione na rysunku ... - jak widać, jest ono funkcją wklęsłą zarówno zmiennej q jak i zmiennej złożonej $\eta(q)$. Co więcej, podobnie wykładnik $\tau(q)$ jest wklęsłą funkcją q . Są to warunki niezbędne do wprowadzenia transformacji Legendre'a a tym samym do wprowadzenia odpowiedniczości pomiędzy multifraktalami a termodynamiką statystyczną. Dalsze własności wykładników (5.67) omawiamy poniżej.

5.4.1 Formalny związek multifraktali z termodynamiką statystyczną

Ważne własności wykładników

Widmo lokalnych wykładników $f(\eta(q))$ można traktować jako (ujemną) transformatę Legendre'a (zwaną czasami transformatą kontaktową) wykładnika $\tau(q)$ a mianowicie,

$$f(q) = -\tau(q) + q\eta(q), \tag{5.68}$$

gdyż na mocy zależności (5.67) otrzymujemy

$$\begin{aligned}
\frac{df(\eta)}{d\eta} &= q, \\
\frac{d\tau(q)}{dq} &= \eta(q).
\end{aligned} \tag{5.69}$$

Tabela 5.1: Odpowiedniość pomiędzy multifraktalami a termodynamiką

Wielkości multifrakalne	Wielkości termodynamiczne
q	β
$\langle\langle N(k) \rangle\rangle^q$	$Z(\beta)$
$\eta(q)$	$E(\beta)$
$f(\eta(q))$	$S(E(\beta))/k_B$
$\tau(q)$	$\beta F(\beta)$

Zauważmy, że, wykładniki spełniające relacje (5.68) i (5.69) określone są z dokładnością do dowolnej stałej multiplikatywnej A . Oznacza to także, iż relacje (5.65) i (5.66) można zapisać w następującej, równoważnej postaci

$$\begin{aligned}
 \langle\langle N(k^*) \rangle\rangle^q &\approx CP(k^*)\langle N(k^*) \rangle^q = CJ^{-\tilde{\tau}(q)}, \\
 P(k^*) &= CJ^{\tilde{\tau}(q)}, \\
 \langle N(k^*) \rangle &= J^{-\tilde{\eta}(q)},
 \end{aligned} \tag{5.70}$$

gdzie $J = \exp(A)$, natomiast tilda $\tilde{\cdot}$ oznacza wykładnik pomnożony przez stałą $1/A$. Łatwo można sprawdzić, że np. dla $A = \ln(b)$ podstawa potęgi $J = b$, tzn. $\langle\langle N(k) \rangle\rangle^q$ skaluje się, jak można było przypuszczać, z rozmiarem liniowym wyjściowego układu natomiast wykładniki przyjmują nieco prostszą postać. Oczywiście, liniowe relacje (5.68) i (5.69) są także spełnione przez te nowe, przeoczkowane wykładniki.

Analogia wykładników do potencjałów termodynamicznych

Powyższe własności wykładników pozwalają na wprowadzenie jednoznacznej odpowiedności pomiędzy nimi a wielkościami termodynamiki statystycznej co zostało przedstawione w tabli 5.1. Łatwo teraz sprawdzić, że relacja (5.68) jest równoważna poniższej

$$\frac{1}{\beta} \frac{S(E(\beta))}{k_B} = -F(\beta) + E(\beta). \tag{5.71}$$

a relacje (5.69) są równoważne odpowiednio

$$\begin{aligned}
 \frac{dS(E(\beta))/k_B}{dE(\beta)} &= \beta, \\
 \frac{d[\beta F(\beta)]}{d\beta} &= -\frac{d\ln(Z(\beta))}{d\beta} = E(\beta).
 \end{aligned} \tag{5.72}$$

odgrywającym kluczową rolę w termodynamice statystycznej. Należy podkreślić, że powyżej wskazana odpowiedność nie sięga poziomu mikroskopowego tzn. wykładnika $G(k)$ w wyrażeniu (5.61) nie należy w żadnym razie utożsamiać z wielkością

$-\beta E(k)$, gdzie $E(k)$ pełni w termodynamice statystycznej rolę energii konkretnego stanu mikroskopowego układu termodynamicznego indeksowanego tutaj liczbą k (znajdującego się w stanie równowagi statystycznej).

Rozdział 6

Transport dyspersyjny - doświadczenia Sharfe'a, Gilla i Pfistera

Piękne doświadczenie, w którym zaobserwowano anomalny, dyspersyjny transport zostało wykonane po raz pierwszy w roku 1970 przez M.E. Sharfe'a ("Transient Photoconductivity in Vitreous As_2Se_3 ", Phys. Rev. B 2, 5025-5034); w roku 1974 G. Pfister podjął dalsze badania nad tym zjawiskiem, analizując zależność anomalous transportu od ciśnienia przyłożonego do próbki ("Pressure-Dependence Electronic Transport in Amorphous As_2Se_3 ", Phys. Rev. Lett. 33, 1474-1477). Oba autorzy badali zależne od częstotliwości fotoprzewodnictwo w amorficznym As_2Se_3 , mierząc zanikanie w czasie fotoprądu wywołanego krótkotrwałym impulsem świetlnym. Układ pomiarowy przedstawiono schematycznie na rys.6.1. Jak widać, jego zasadniczym elementem jest próbka zbudowana ze wspomnianego powyżej światłoczułego półprzewodnika o przewodnictwie dziurowym umieszczona pomiędzy dwiema elektrodami, z których jedna (złota) jest półprzezroczysta; jej impulsowe oświetlenie pozwala na wygenerowanie w próbce przewodzących dziur które, dzięki przyłożonej do elektrod (niewielkiej) różnicy potencjałów, wędrują do przeciwnej elektrody, dając zanikający w czasie prąd dziurowy - natężenie tego prądu $I(t)$ jest mierzone w funkcji czasu. Wynik (w skali $\ln - \ln$) przedstawiono na rys.6.2 - widać dwa różne obszary potęgowej zależności prądu od czasu.

Dla porównania na rys.6.3 (górna część) zamieszczono zależność pokazującą zanikanie prądu dla sytuacji normalnej, gdy dyfuzja i dryf opisana jest biegnącym rozkładem Gaussa. Dolna część rysunku dotyczy rozkładu Pareto-Lévy'ego i jest przez nas omawiana poniżej. Warto dodać, iż otrzymany efekt ma charakter ogólniejszy a mianowicie, w 1972 roku W.D. Gill (J.Appl.Phys. 43, 5033-5040) zaobserwował go także dla organicznego kompleksu trinitrofluorenone i poly-n-vinylcarbazole. Jednym z zasadniczych celów niniejszego wykładu jest wyjaśnienie zaobserwowanego efektu, który jest kluczowym dla zrozumienia tzw. dyfuzji anomalnej.

6.1 Błądzenie w czasie ciągłym

W niniejszym rozdziale przedstawiamy model skokowego błądzenia pojedynczego atomu w *czasie ciągłym*; różni się on od poprzednio omawianych prostszych modeli, które były asymptotycznie równoważne modelowi skokowego błądzenia atomu w *czasie dyskretnym*. Rozważamy dwie sytuacje:

- 1) pod nieobecność zewnętrznego pola (przykładowy potencjał przedstawiono na rys.1(6.1)),
- 2) w obecności zewnętrznego pola (rys.2(6.1)) wywołującego dryf.

To właśnie wprowadzenie formalizmu matematycznego¹ pozwalającego opisać dowolne błądzenie w każdej chwili stanowiło przełomowy krok w teorii procesów przypadkowych. Wyprowadziło to badania poza *Centralne Twierdzenie Graniczne*, czyli rozszerzyło je na procesy niegaussowskie, tzn. wychodzące poza ruchy Browna, a w tym zwłaszcza na procesy z pamięcią, które umożliwiły wprowadzenie do fizyki procesów *Lévy'ego*. Potencjał przedstawiony na rys.1(6.1) oraz 2(6.1) jest podstawą popularnego *dolinowego modelu błądzeń przypadkowych*, który w dalszym ciągu analizujemy pod nieobecność oraz w obecności zewnętrznej stałej siły F wywołującej dryf.

6.1.1 Podstawowe wielkości

Ilościowe sformułowanie modelu rozpoczynamy od wprowadzenia

- 1) gęstości prawdopodobieństwa $\Phi_{\mathcal{E}}(t)$ przetrwania cząsteczki w danej dolinie potencjału o głębokości \mathcal{E} przynajmniej przez okres czasu t , czyli przetrwania od chwili początkowej w której cząsteczka pojawiła się w niej, przynajmniej do chwili t (tzn. cząsteczka może przetrwać dłużej w danej dolinie potencjału ale na pewno nie krócej),

oraz powiązanej z nią

- 2) funkcji rozkładu czasów oczekiwania cząsteczki w dolinie potencjału, $\phi_{\mathcal{E}}(t)$.

Funkcja $\phi_{\mathcal{E}}(t)$ jest zdefiniowana jako gęstość prawdopodobieństwa, że cząsteczka przetrwa w (dowolnie) wybranej dolinie potencjału o głębokości \mathcal{E} dokładnie do chwili t tzn. dokładnie w chwili t opuści tę dolinę. Z powyższych dwóch definicji wynika następujący związek pomiędzy obiema funkcjami,

$$\Phi_{\mathcal{E}}(t) = \int_t^{\infty} dt' \phi_{\mathcal{E}}(t') = 1 - \int_0^{\infty} dt' \phi_{\mathcal{E}}(t'), \quad (6.1)$$

gdzie przy zapisaniu drugiej równości skrótyliśmy z warunku normalizacji

$$\int_0^{\infty} dt \phi_{\mathcal{E}}(t) = 1. \quad (6.2)$$

¹W literaturze anglosaskiej nosi on nazwę *Continuous-time random walk model*.

Warunek ten mówi, że w danej dolinie potencjału cząstka z pewnością przetrwa dowolnie długi okres czasu. Funkcja $\phi_{\mathcal{E}}$ jest wygodniejszą do dalszego operowania dlatego traktujemy ją w naszym modelu jako wyjściową; często jednak, zwłaszcza na etapach pośrednich, posługujemy się także obiema funkcjami. W całym niniejszym wykładzie przyjmujemy, funkcję rozkładu czasów oczekiwania w postaci Poissona

$$\phi_{\mathcal{E}}(t) = \nu^0(\mathcal{E}) \exp(-\nu^0(\mathcal{E})t), \quad (6.3)$$

gdzie $\nu^0(\mathcal{E})$ jest częstością przeskoków cząsteczki pomiędzy sąsiednimi dolinami potencjału (w przypadku jednowymiarowym mogą to być dwaj najbliżsi sąsiedzi, patrz rys.1(6.1)) w nieobecności zewnętrznej siły wywołującej dryf. Z powyższego wzoru oraz relacji (6.1) otrzymujemy, że

$$\Phi_{\mathcal{E}}(t) = \exp(-\nu^0(\mathcal{E})t). \quad (6.4)$$

Możemy teraz przystąpić do skonstruowania separowalnej, cząstkowej funkcji rozkładu czasów oczekiwania, którą oznaczymy przez $\psi_{\mathcal{E}}(x, t)$ (zapis ten nie ma nic wspólnego z analogicznym, oznaczającym funkcję falową w mechanice kwantowej). W tym celu musimy dodatkowo wprowadzić

3) przestrenny rozkład przemieszczeń $p(x)$

zdefiniowany jako gęstość prawdopodobieństwa przemieszczenia się cząsteczki o wektor x (ponieważ ruch cząsteczki jest jednowymiarowy dlatego dla uproszczenia opuściliśmy oznaczenie \cdot). Oczywiście, spełnia on warunek normalizacyjny postaci

$$\int_0^{\infty} dx p(x) = 1. \quad (6.5)$$

Przykładowo, rozkład $p(x)$ można przyjąć w postaci,

$$p(x) = \frac{1}{2}[\delta(x - b_0) + \delta(x + b_0)] \quad (6.6)$$

gdzie b_0 jest stałą odległością pomiędzy sąsiednimi dolinami potencjału. Tego typu rozkład dopuszcza, jak widać, jedynie przeskoki pomiędzy dolinami oddalonymi o b_0 .

Teraz możemy zapisać

$$\psi_{\mathcal{E}}(x, t) = p(x)\phi_{\mathcal{E}}(t); \quad (6.7)$$

jak widać, *cząstkowa funkcja rozkładu czasów oczekiwania* jest gęstością prawdopodobieństwa następującej sekwencji zdarzeń: najpierw cząsteczka przetrwa w danym miejscu (tzn. dolinie potencjału) aż do chwili t a następnie, dokładnie w chwili t , przemieści się (a dokładniej dokona przeskoku) o wektor x . Seperowalność cząstkowej funkcji rozkładu jest tutaj narucona separowalnością obu zmiennych stochastycznych tj. przemieszczenia x oraz czasu t . (Zauważmy, że czas występuje tutaj

jako zmienna losowa co, jak zobaczymy, w niczym nie zmienia jego roli.) Zakładając separowalność funkcji $\psi_{\mathcal{E}}(x, t)$ przyjmujemy tym samym, że dwa zasadniczo różne zdarzenia takie jak oczekiwanie oraz przemieszczenie się cząsteczki są od siebie statystycznie niezależne. Założenie to wydaje się całkiem naturalne dla tak elementarnych procesów o jakich tutaj mówimy. W drugiej części niniejszej pracy omówimy także błędzenia nieseparowalne.

Z warunków normalizacyjnych (6.2), (6.5) oraz definicji (6.7) wynika bezpośrednio niezbędny warunek normalizacyjny

$$\int_0^{\infty} dt \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_{\mathcal{E}}(x, t) = 1; \quad (6.8)$$

w przypadku ogólniejszym, gdyby funkcja rozkładu $\psi_{\mathcal{E}}(x, t)$ nie była separowalna, wówczas musielibyśmy warunek (6.8) po prostu narzucić jako wymaganą normalizację. Ponadto, z definicji (6.1) i (6.7) oraz z warunku normalizacyjnego (6.5) otrzymujemy, że

$$\Psi_{\mathcal{E}}(t) = \int_t^{\infty} dt' \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_{\mathcal{E}}(x, t') = 1 - \int_0^t dt' \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_{\mathcal{E}}(x, t'), \quad (6.9)$$

gdzie definicja funkcji $\Psi_{\mathcal{E}}(t)$ oraz $\Phi_{\mathcal{E}}(t)$ są identyczne, a w przypadku separowalnym (który dotyczy zarówno błędzenia pod nieobecność jak też w obecności pola co zostanie wykazane poniżej), uzyskujemy $\Psi_{\mathcal{E}}(t) = \Phi_{\mathcal{E}}(t)$. Warto podkreślić, że równości występujące w (6.9) mają charakter ogólny, niezależny od własności separowalności funkcji rozkładu $\psi_{\mathcal{E}}(x, t)$, i wynikają tylko z jej definicji oraz z warunku normalizacyjnego (6.8).

6.1.2 Funkcja rozkładu czasów oczekiwania w obecności dryfu

Występowanie systematycznego dryfu (wywołanego zewnętrzną siłą działającą na wędrujący atom, patrz rys.2(6.1)) zmienia, jak zobaczymy, postać funkcji rozkładu czasów oczekiwania $\psi_{\mathcal{E}}(x, t)$ oraz wymaga rozszerzenia relacji (6.1). Jednak nadal, jako podstawową funkcję rozkładu, można używać $\psi_{\mathcal{E}}(x, t)$.

W pierwszym kroku, wprowadzamy częstość $\nu^{\pm}(\mathcal{E})$ przeskoku atomu pomiędzy sąsiednimi dolinami potencjału (patrz, rys.2(6.1)) w kierunku odpowiednio zgodnym z dryfem (znak +) oraz przeciwnym do niego (znak -). Zgodnie z interpretacją funkcji rozkładu przybiera ona teraz postać

$$\psi_{\mathcal{E}}(x, t) = \psi_{\mathcal{E}}^{+}(x, t) + \psi_{\mathcal{E}}^{-}(x, t), \quad (6.10)$$

gdzie wprowadziliśmy oznaczenie

$$\psi_{\mathcal{E}}^{\pm}(x, t) = \nu^{\pm}(\mathcal{E}) \delta(x \mp b_0) \exp(-\nu(\mathcal{E})t), \quad (6.11)$$

wynikające z istnienia dryfu przy czym sumaryczna częstość

$$\nu(\mathcal{E}) = \nu^+(\mathcal{E}) + \nu^-(\mathcal{E}) \quad (6.12)$$

oraz częstości kierunkowe

$$\nu^\pm(\mathcal{E}) = p^\pm \nu^0(\mathcal{E}) \quad (6.13)$$

gdzie waga

$$p^\pm = \frac{\exp(\pm Fb_0/2k_B T)}{\exp(Fb_0/2k_B T) + \exp(-Fb_0/2k_B T)} = \frac{1}{2} \frac{\exp(\pm Fb_0/2k_B T)}{\cosh(Fb_0/2k_B T)}, \quad (6.14)$$

jest prawdopodobieństwem wyboru jednej z dwóch orientacji pojedynczego przesko-
ku - jak widać, ma miejsce niezbędna normlizacja $p^+ + p^- = 1$; z (6.13) oraz (6.14)
wynika niezwykle pożyteczna relacja,

$$\nu(\mathcal{E}) = \nu^0(\mathcal{E}) \quad (6.15)$$

co oznacza w oparciu o wyrażenie (6.11), że

$$\psi_\mathcal{E}^\pm(x, t) = p^\pm \delta(x \mp b_0) \nu^0(\mathcal{E}) \exp(-\nu^0(\mathcal{E})t) = p^\pm \delta(x \mp b_0) \phi_\mathcal{E}(t). \quad (6.16)$$

Tym samym, cząstkową funkcję rozkładu czasów oczekiwania można przedstawić w
postaci separowalnej

$$\psi_\mathcal{E}(x, t) = p(x) \phi_\mathcal{E}(t); \quad (6.17)$$

analogicznej do tej dla przypadku niewystępowania zewnętrznego pola, gdzie

$$p(x) = p^+ \delta(x - b_0) + p^- \delta(x + b_0) \quad (6.18)$$

jest uogólnieniem wyrażenia (6.6) na przypadek uwzględniający istnienie zewnętrznego
pola.

W przypadku słabego pola zewnętrznego czyli $Fb_0/2 \ll k_B T$, wyrażenie (6.14)
upraszcza się do postaci liniowej,

$$p^\pm \approx \frac{1}{2} \left(1 \pm \frac{Fb_0}{2k_B T} \right), \quad (6.19)$$

szczególnie przydatnej w teorii liniowej odpowiedzi (przy obliczaniu podatności i
przewodnictwa).

W drugim kroku, dysponując wzorem (6.10) na funkcję rozkładu $\psi_\mathcal{E}(x, t)$ oraz
pomocniczymi określeniami (6.11) - (6.19) możemy już skorzystać z rozszerzonej
definicji (6.9) gęstości prawdopodobieństwa $\Psi_\mathcal{E}(t)$ przetrwania cząsteczki (przynaj-
mniej) przez czas t w danej dolinie potencjału o głębokości \mathcal{E} , otrzymując postać

$$\Psi_\mathcal{E}(t) = \exp(-\nu^0(\mathcal{E})t) = \Phi_\mathcal{E}(t) \quad (6.20)$$

identyczną jak w przypadku braku zewnętrznego pola. Oba zasadnicze wzory, zarówno (6.17) jak i (6.20) wynikają z separowalności cząstkowej funkcji rozkładu czasów oczekiwania oraz niezależności sumarycznej częstości przeskoków $\nu(\mathcal{E})$ od zewnętrznego pola.

Dysponując wprowadzonymi powyżej gęstościami prawdopodobieństw, przystępujemy do obliczenia propagatora opisującego proces błędzenia przypadkowego zarówno pod nieobecność jak też w obecności zewnętrznego pola wywołującego dryf.

6.1.3 Propagator jednocząstkowy

Zasadniczym celem niniejszego rozdziału jest wyznaczenie propagatora $\mathcal{P}(X, t | X_0, t_0)$ lub inaczej mówiąc, jednocząstkowej funkcji autokorelacji zdefiniowanej jako gęstość prawdopodobieństwa znalezienia cząsteczki w położeniu X w chwili t pod warunkiem, że początkowo cząsteczka ta znajdowała się w położeniu X_0 w chwili t_0 . Cząsteczka mogła pojawić się w danej dolinie potencjału w położeniu X w chwili t w wyniku następujących procesów:

- 1) mogła trwać w danej dolinie potencjału w położeniu $X (= X_0)$ od samego początku aż do chwili t , o ile tak się złożyło, że położenie to było początkowym - takie trwanie opisujemy za pomocą propagatora $P_{\mathcal{E}}^{(0)}(X, t | X_0, t_0)$,
- 2) mogła się znaleźć w położeniu X w wyniku pojedynczego przelotu - proces ten opisujemy propagatorem $P_{\mathcal{E}_0, \mathcal{E}}^{(1)}(X, t | X_0, t_0)$, lub
- 3) w wyniku dwóch kolejnych przelotów przedzielonych oczekiwaniem w jakiejś dolinie potencjału - proces ten opisujemy propagatorem $P_{\mathcal{E}_0, \mathcal{E}_1, \mathcal{E}}^{(2)}(X, t | X_0, t_0)$,
- 4) itd., itp., ogólnie rzecz biorąc,
- 5) cząsteczka mogła pojawić się w danej dolinie potencjału w położeniu X w chwili t w wyniku $n (\geq 1)$ przelotów, z których każdy był poprzedzony (krótszym lub dłuższym) oczekiwaniem w jakiejś dolinie potencjału - proces ten opisujemy za pomocą cząstkowego propagatora $P_{\mathcal{E}_0, \mathcal{E}_1, \dots, \mathcal{E}_{n-1}, \mathcal{E}}^{(n)}(X, t | X_0, t_0)$.

Reasumując, powyższe procesy ujmujemy za pomocą sumarycznego propagatora,

$$\begin{aligned} P_{\mathcal{E}_0, \mathcal{E}_1, \mathcal{E}_2, \dots, \mathcal{E}}(X, t | X_0, t_0) &= P_{\mathcal{E}}^{(0)}(X, t | X_0, t_0) \\ &+ \sum_{n=1}^{\infty} P_{\mathcal{E}_0, \mathcal{E}_1, \dots, \mathcal{E}_{n-1}, \mathcal{E}}^{(n)}(X, t | X_0, t_0), \end{aligned} \quad (6.21)$$

opisującego gęstość prawdopodobieństwa znalezienia cząsteczki w położeniu X w chwili t w wyniku dowolnego procesu tzn. trwania w położeniu początkowym (jeżeli $X = X_0$ - składnik o indeksie $n = 0$ w wyrażeniu (6.21)) bądź też jako rezultat procesu składającego się z dowolnej liczby występujących na przemian oczekiwań i przelotów (wyrazy z $n \geq 1$).

Można teraz postawić pytanie o związek wcześniej wprowadzonego propagatora $\mathcal{P}(X, t | X_0, t_0)$ z powyżej zdefiniowanym $P_{\mathcal{E}_0, \mathcal{E}_1, \mathcal{E}_2, \dots, \mathcal{E}}(X, t | X_0, t_0)$? Aby znaleźć ten związek zapiszmy w jawnej postaci propagatory cząstkowe $P_{\mathcal{E}_0, \mathcal{E}_1, \dots, \mathcal{E}_{n-1}, \mathcal{E}}^{(n)}(X, t | X_0, t_0)$, $n = 0, 1, 2, \dots$, wprowadzając dogodniejszą notację. Mianowicie,

$$P_{\mathcal{E}}^{(0)}(X, t) (\equiv P_{\mathcal{E}}^{(0)}(X, t | X_0, t_0)) = \delta(X - X_0) \Psi_{\mathcal{E}}(t - t_0), \quad (6.22)$$

następnie

$$P_{\mathcal{E}_0, \mathcal{E}}^{(1)}(X, t) (\equiv P_{\mathcal{E}_0, \mathcal{E}}^{(1)}(X, t | X_0, t_0)) = \int_0^t dt_1 \psi_{\mathcal{E}_0}(X - X_0, t_1 - t_0) \Psi_{\mathcal{E}}(t - t_1), \quad (6.23)$$

oraz

$$P_{\mathcal{E}_0, \mathcal{E}_1, \mathcal{E}}^{(2)}(X, t) (\equiv P_{\mathcal{E}_0, \mathcal{E}_1, \mathcal{E}}^{(2)}(X, t | X_0, t_0)) = \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \int_0^t dt_2 \int_0^{t_2} dt_1 \psi_{\mathcal{E}_0}(x_1 - X_0, t_1 - t_0) \psi_{\mathcal{E}_1}(X - x_1, t_2 - t_1) \Psi_{\mathcal{E}}(t - t_2), \quad (6.24)$$

itd., w ogólności zapisujemy

$$\begin{aligned} P_{\mathcal{E}_0, \mathcal{E}_1, \dots, \mathcal{E}_{n-1}, \mathcal{E}}^{(n)}(X, t) (\equiv P_{\mathcal{E}_0, \mathcal{E}_1, \dots, \mathcal{E}_{n-1}, \mathcal{E}}^{(n)}(X, t | X_0, t_0)) \\ = \int_{-\infty}^{\infty} dx_{n-1} \dots \int_{-\infty}^{\infty} dx_2 \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \int_0^t dt_n \int_0^{t_n} dt_{n-1} \dots \int_0^{t_2} dt_1 \\ \psi_{\mathcal{E}_0}(x_1 - X_0, t_1 - t_0) \psi_{\mathcal{E}_1}(x_2 - x_1, t_2 - t_1) \dots \psi_{\mathcal{E}_{n-1}}(X - x_{n-1}, t_n - t_{n-1}) \\ \Psi_{\mathcal{E}}(t - t_n), \quad n = 1, 2, 3, \dots; \end{aligned} \quad (6.25)$$

Wyrażenia (6.23), (6.24) i (6.25) opierają się w istocie rzeczy na założeniu, że funkcja rozkładu $\psi_{\mathcal{E}}(x_2 - x_1, t_2 - t_1)$ opisuje stan równowagi cząstkowej (lokalnej) zatem zależy od różnicy zmiennych przestrzennych i czasowych tak jak to ma miejsce w stanie równowagi zupełnej - dyskusji tej sytuacji poświęcamy więcej miejsca w dalszej części. Co więcej, wyrażenia te zostały skonstruowane przy założeniu, że pierwsze oczekiwanie i następujący po nim przełot są opisywane tą samą funkcją rozkładu co i następne tego typu pary zderzeń - także i ten subtelny aspekt procesu błędzeń omawiamy w dalszej części.

Jak widać, propagatory typu P zawierają w sobie dodatkowo informacje o głębokościach odwiedzonych przez cząsteczkę dolinach potencjału; dopiero uśrednienie tych propagatorów po "krajobrazie" energetycznym daje propagatory typu \mathcal{P} . Poniżej omawiamy tę procedurę średniowania.

Po pierwsze zakładamy, że głębokości dolin potencjału są od siebie statystycznie niezależne co oznacza, że rozkład $p(\mathcal{E}_0, \mathcal{E}_1, \dots, \mathcal{E}_n, \dots)$ z którym średniujemy propagatory cząstkowe $P_{\mathcal{E}_0, \mathcal{E}_1, \dots, \mathcal{E}_n}^{(n)}(X, t)$, $n = 0, 1, 2, \dots$, (a stąd propagator sumaryczny $P_{\mathcal{E}_0, \mathcal{E}_1, \dots, \mathcal{E}_n, \dots}(X, t)$) faktoryzuje się tzn.

$$p(\mathcal{E}_0, \mathcal{E}_1, \dots, \mathcal{E}_n, \dots) = p(\mathcal{E}_0) p(\mathcal{E}_1) \dots p(\mathcal{E}_n) \dots \quad (6.26)$$

Na mocy powyższego, średniując równości (6.22) oraz (6.25), otrzymujemy odpowiednio

$$\begin{aligned}\mathcal{P}^{(0)}(X, t) &= (\equiv \mathcal{P}^{(0)}(X, t | X_0, t_0)) = \delta(X - X_0) \Psi(t - t_0), \\ \mathcal{P}^{(n)}(X, t) &(\equiv \mathcal{P}^{(n)}(X, t | X_0, t_0)) = \int_{-\infty}^{\infty} dx_{n-1} \dots \int_{-\infty}^{\infty} dx_2 \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \\ &\int_0^t dt_n \int_0^{t_n} dt_{n-1} \dots \int_0^{t_2} dt_1 \psi(x_1 - X_0, t_1 - t_0) \psi(x_2 - x_1, t_2 - t_1) \dots \\ &\psi(X - x_{n-1}, t_n - t_{n-1}) \Psi(t - t_n), \\ &n = 1, 2, 3, \dots,\end{aligned}\quad (6.28)$$

gdzie wprowadziliśmy następujące oznaczenia wielkości średnich

$$\begin{aligned}\psi(x, t) &= \int_0^{\infty} d\mathcal{E} p(\mathcal{E}) \psi_{\mathcal{E}}(x, t), \\ \Psi(t) &= \int_0^{\infty} d\mathcal{E} p(\mathcal{E}) \Psi_{\mathcal{E}}(t), \\ \mathcal{P}^{(n)}(X, t) &= \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} \dots \int_0^{\infty} d\mathcal{E}_0 d\mathcal{E}_1 \dots d\mathcal{E}_n \\ &p(\mathcal{E}_0) p(\mathcal{E}_1) \dots p(\mathcal{E}_n) \mathcal{P}_{\mathcal{E}_0, \mathcal{E}_1, \dots, \mathcal{E}_n}^{(n)}(X, t), \quad n = 1, 2, \dots,\end{aligned}\quad (6.29)$$

które w dalszym ciągu interpretujemy, wskazując na sposób ich realizacji. Ostatecznie, z (6.28) oraz (6.21) otrzymujemy wyrażenie,

$$\mathcal{P}(X, t) = \sum_{n=0}^{\infty} \mathcal{P}^{(n)}(X, t) \quad (6.30)$$

które pozwala rozpocząć postępowanie umożliwiające skonstruowanie odpowiedzi na pytanie dlaczego, na poziomie makroskopowym, niektóre rodzaje błędów postrzegamy jako posiadające charakter singularny (fraktalny)?

6.1.4 Postać zamknięta propagatora

Narzuca się teraz zasadnicze, techniczne pytanie mianowicie, jak zapisać (o ile to jest możliwe) propagator (6.30) w postaci zamkniętej? Na szczęście, odpowiedź na to pytanie jest pozytywna wymaga jednak przejścia do transformat Fouriera oraz Laplace'a. Wtedy równanie (6.30) przybiera postać

$$\tilde{\mathcal{P}}(k, s) = \sum_{n=0}^{\infty} \tilde{\mathcal{P}}^{(n)}(k, s), \quad (6.31)$$

gdzie skorzystaliśmy z definicji transformaty Fouriera-Laplace'a postaci

$$\tilde{\mathcal{F}}(k, s) = \int_{-\infty}^{\infty} dX \exp(-ikX) \int_0^{\infty} dt \exp(-st) \mathcal{F}(X, t) \quad (6.32)$$

tutaj \mathcal{F} jest dowolną funkcją spełniającą twierdzenie o odwracaniu transformat Fouriera oraz Laplace'a (patrz I.M. Ryzżyk i I.S. Gradsztajn, "Tablice całek, sum, szeregów i iloczynów", PWN, Warszawa 1964). Korzystając z definicji (6.28) propagatora $\mathcal{P}^{(0)}$ i (6.28) propagatora $\mathcal{P}^{(n)}$ oraz transformaty Fouriera-Laplace'a (6.32) można obliczyć (patrz Dodatek ...), że

$$\tilde{\mathcal{P}}^{(n)}(k, s) = \tilde{\Psi}(s) [\tilde{\psi}(k, s)]^n, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (6.33)$$

Stąd oraz z (6.31) otrzymujemy poszukiwaną, zamkniętą postać sumarycznego propagatora w przestrzeni odwrotnej (czyli w zmiennych Fouriera-Laplace'a),

$$\tilde{\mathcal{P}}(k, s) = \frac{\tilde{\Psi}(s)}{1 - \tilde{\psi}(k, s)} = \frac{1}{s} \frac{1 - \tilde{\psi}(k=0, s)}{1 - \tilde{\psi}(k, s)}, \quad (6.34)$$

gdzie, przy wyprowadzeniu drugiej równości, skrótyliśmy dodatkowo z uśrednionej po \mathcal{E} transformaty Laplace'a formuły (6.9).

Zauważmy, że do wyprowadzenia powyższej formuły nie było potrzebne założenie o separowalności funkcji rozkładu $\psi(x, t)$ - w takim przypadku formuła (6.34) przyjmuje postać

$$\tilde{\mathcal{P}}(k, s) = \frac{\tilde{\Psi}(s)}{1 - \tilde{\phi}(s)\tilde{p}(k)} = \frac{1}{s} \frac{1 - \tilde{\phi}(s)}{1 - \tilde{\phi}(s)\tilde{p}(k)}, \quad (6.35)$$

gdzie podobnie jak dla (6.34), skrótyliśmy z (uśrednionej po \mathcal{E}) transformaty Laplace'a formuły (6.1).

Teraz możemy już bardzo precyzyjnie sformułować zasadniczy cel niniejszej pracy mianowicie, jest nim analiza propagatora danego wyrażeniem (6.35) poprzez analizę funkcji rozkładu czasów oczekiwania ϕ oraz czynnika strukturalnego przełotów p .

6.1.5 Uogólnione równanie mistrza

Równanie (6.35) pozwala na wprowadzenie tzw. całkowego jądra pamięci (w skrócie po prostu pamięci). Aby to wykazać, prawą stronę tego równania zapiszmy jako $1/[s - \tilde{\mathcal{K}}(k, s)]$ skąd po prostych, algebraicznych przekształceniach otrzymujemy, że

$$\tilde{\mathcal{K}}(k, s) = [\tilde{p}(k) - 1]\tilde{\varphi}(s) \quad (6.36)$$

jest dane także w postaci separowalnej przy czym,

$$\tilde{\varphi}(s) = s \frac{\tilde{\psi}(s)}{1 - \tilde{\psi}(s)} \quad (6.37)$$

jest, jak wykażemy, poszukiwaną pamięcią. Możemy teraz przepisać równanie (6.35) następująco,

$$s\tilde{\mathcal{P}}(k, s) - \tilde{\mathcal{P}}(k=0, s) = \tilde{\mathcal{K}}(k, s)\tilde{\mathcal{P}}(k, s) = [\tilde{p}(k) - 1]\tilde{\varphi}(s)\tilde{\mathcal{P}}(k, s), \quad (6.38)$$

co pozwala na przejście do postaci różniczkowo-calkowej; przy wyprowadzaniu (6.38) z (6.35) skorzystaliśmy z warunku początkowego

$$\mathcal{P}(X, t=0) = \delta(X) \equiv \tilde{\mathcal{P}}(k, t=0) \quad (6.39)$$

jaki musi spełniać propagator. Zauważmy, że lewa strona równania (6.38) jest transformatą Laplace'a pochodnej po czasie propagatora $\tilde{\mathcal{P}}(k, t)$ a prawa transformatą Laplace'a konwolucji czasowej wielkości $\tilde{\mathcal{K}}$ oraz $\tilde{\mathcal{P}}$. Zatem,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\mathcal{P}}(k, t) &= \int_0^t dt' \tilde{\mathcal{K}}(k, t-t') \tilde{\mathcal{P}}(k, t') \\ &= \int_0^t dt' [\tilde{p}(k) - 1] \varphi(t-t') \tilde{\mathcal{P}}(k, t'). \end{aligned} \quad (6.40)$$

Jak widać, funkcja φ pełni rolę pamięci gdyż (w ogólności) pozwala na uzależnienie aktualnego zachowania propagatora od jego zachowania w przeszłości (tzn. dla czasu $t' < t$).

6.1.6 Pierwszy moment

Aby wyjaśnić, wspomniane na wstępie, doświadczenia Sharfe'a, Gill'a i Pfister'a musimy obliczyć pierwszy moment $\langle X(t) \rangle$. W tym celu zauważmy, że

$$\langle \tilde{X}(s) \rangle = -i \nabla_k \tilde{\mathcal{P}}(k, s) |_{k=0} = -\frac{i}{s} \frac{1}{1 - \tilde{\psi}(k=0, s)} \nabla_k \tilde{\psi}(k, s) |_{k=0}, \quad (6.41)$$

gdzie skorzystaliśmy po drodze ze wzoru (6.34). Dla separowalnej funkcji rozkładu $\tilde{\psi}(k, s)$ powyższy wzór upraszcza się do postaci

$$\langle \tilde{X}(s) \rangle = -i \nabla_k \tilde{\mathcal{P}}(k, s) |_{k=0} = -\frac{i}{s} \frac{\tilde{\phi}(s)}{1 - \tilde{\phi}(s)} \nabla_k \tilde{p}(k) |_{k=0}, \quad (6.42)$$

gdzie teraz zastosowaliśmy wzór (6.35). W dalszej części, wykorzystamy jawną postać $\tilde{p}(k)$ oraz $\tilde{\phi}(s)$ aby przedstawić *explicite* wyrażenie (6.42) i tym samym wyjaśnić pierwszą część wykresu zamieszczonego na rys.2(6).

Przykład. Przypuśćmy, że $p(x)$ dane jest wzorem (6.18); zatem czynnik strukturalny błędzenia przypadkowego przybiera postać

$$\tilde{p}(k) = (p^+ + p^-) \cos(k) + i(p^+ - p^-) \sin(k). \quad (6.43)$$

Stąd i ze wzoru (6.42) otrzymujemy proste wyrażenie,

$$\langle \tilde{X}(s) \rangle = (p^+ - p^-) \frac{1}{s} \frac{\tilde{\phi}(s)}{1 - \tilde{\phi}(s)}, \quad (6.44)$$

do którego powrócimy w dalszej części, po wyznaczeniu jawnej zależności $\tilde{\phi}$ od zmiennej s .

6.1.7 Rola pierwszego oczekiwania oraz przelotu

Rozważymy teraz sytuację ogólniejszą, w której pierwsze wyzeczkiwanie i przelot opisane są inną funkcją rozkładu (oznaczymy ją przez $h(x, t)$) niż pozostałe pary tego typu zdarzeń. Przypadek $h = \psi$ omówiony powyżej, dotyczy sytuacji gdy początek procesu zbiega się z początkiem jego obserwacji. Innymi słowy, w momencie pojawienia się cząsteczki w układzie rozpoczyna się zarówno proces jej błędzenia jak też obserwacja tego procesu. Oczywiście w ogólności tak być nie musi, tzn. obserwacja może rozpocząć się (i na ogół rozpoczyna się) znacznie później; tym samym układ posiada już pewną historię, którą należy uwzględnić przy opisie pierwszego oczekiwania. Wprowadza to modyfikacje polegające na tym, że

- 1) we wzorze (6.22), definiującym propagator cząstkowy $P_{\mathcal{E}}^{(0)}(X, t)$, należy zastąpić rozkład $\Psi_{\mathcal{E}}(t)$ przez ogólniejszy $\Xi_{\mathcal{E}}(t)$, zdefiniowany poniżej
- 2) w pozostałych wzorach (6.23), (6.24) i (6.25) definiujących propagatory wyższych rzędów $P_{\mathcal{E}_0, \mathcal{E}_1, \dots, \mathcal{E}_n, \mathcal{E}}^{(n)}(X, t)$ (gdzie $n \geq 1$) należy funkcję rozkładu $\psi_{\mathcal{E}_0}(x_1 - X_0, t_1 - t_0)$ zastąpić ogólniejszą $h_{\mathcal{E}_0}(x_1 - X_0, t_1 - t_0)$;

oczywiście, pomiędzy rozkładami $h(x, t)$ oraz $\Xi(t)$ zachodzi relacja analogiczna do (6.9) czyli relacji pomiędzy $\Psi_{\mathcal{E}}(t)$ oraz $\psi_{\mathcal{E}}(x, t)$

$$\Xi_{\mathcal{E}}(t) = \int_t^{\infty} dt' \int_{-\infty}^{\infty} dx h_{\mathcal{E}}(x, t') = 1 - \int_0^t dt' \int_{-\infty}^{\infty} dx h_{\mathcal{E}}(x, t'). \quad (6.45)$$

Możemy teraz przepisać równanie (6.34) w ogólniejszej postaci

$$\begin{aligned} \bar{\mathcal{P}}(k, s) &= \bar{\Xi}(s) + \bar{h}(k, s) \frac{\bar{\Psi}(s)}{1 - \bar{\psi}(k, s)} \\ &= \frac{1}{s} \left\{ 1 - \bar{h}(k=0, s) + \bar{h}(k, s) \frac{1 - \bar{\psi}(k=0, s)}{1 - \bar{\psi}(k, s)} \right\}. \end{aligned} \quad (6.46)$$

Analogicznie jak w paragrafie 6.1.4, separowalność $h(x, t) (= q(x)\chi(t))$ oraz $\psi(x, t) (= p(x)\phi(t))$ upraszcza wzór (6.46) do postaci

$$\bar{\mathcal{P}}(k, s) = \frac{1}{s} \left\{ 1 - \bar{\chi}(s) + \bar{q}(k)\bar{\chi}(s) \frac{1 - \bar{\phi}(s)}{1 - \bar{p}(k)\bar{\phi}(s)} \right\}. \quad (6.47)$$

Oczywiście, w przypadku gdy $h(x, t) = \psi(x, t)$ oba powyższe wzory przechodzą w wyprowadzone wcześniej odpowiednio (6.34) i (6.35). Ogólność wzorów (6.46) i (6.47) podważa na badanie zarówno układów znajdujących się w stanie równowagi jak też z dala od niej.

6.1.8 Niejednorodne uogólnione równanie mistrza

W dalszym ciągu wykażemy, że analogicznie jak to miało miejsce w paragrafie 6.1.5, równanie (6.46) można zapisać w postaci różniczkowo-całkowej. W tym celu, przepisujemy pierwszą równość w (6.46) w następującej pośredniej postaci,

$$\frac{1 - \bar{\psi}(k, s)}{\bar{\Psi}(s)} \bar{P}(k, s) = \{ \bar{\Xi}(s) \frac{1 - \bar{\psi}(k, s)}{\bar{\Psi}(s)} + \bar{h}(k, s) \} \bar{P}(k, t = 0) \quad (6.48)$$

którą można skrótowo zapisać w dogodniejszej do dalszych przekształceń formie,

$$[s - \bar{K}(k, s)] \bar{P}(k, s) = \bar{P}(k, t = 0) + \bar{I}(k, s), \quad (6.49)$$

gdzie jądro całkowe pamięci

$$\bar{K}(k, s) = s \frac{\bar{\psi}(k, s) - \bar{\psi}(k = 0, s)}{1 - \bar{\psi}(k = 0, s)}, \quad (6.50)$$

co jest uogólnieniem wprowadzonego wcześniej dla przypadku separowalnego (porównaj (6.36) i (6.37)) a niejednorodność

$$\begin{aligned} \bar{I}(k, s) &= \frac{\bar{h}(k, s) - \bar{\psi}(k, s) - \bar{h}(k = 0, s) + \bar{\psi}(k = 0, s)}{1 - \bar{\psi}(k = 0, s)} \\ &+ \frac{\bar{h}(k = 0, s) \bar{\psi}(k, s) - \bar{h}(k, s) \bar{\psi}(k = 0, s)}{1 - \bar{\psi}(k = 0, s)}; \end{aligned} \quad (6.51)$$

jak widać niejednorodność znika jak należy gdy $h(x, t) = \psi(x, t)$. Wreszcie, analogicznie jak poprzednio, równanie to można zapisać w postukowanej formie

$$\frac{\partial}{\partial t} \bar{P}(k, t) = \int_0^t dt' \bar{K}(k, t - t') \bar{P}(k, t') + \bar{I}(k, t). \quad (6.52)$$

Jest to właśnie niejednorodne, uogólnione równanie mistrza. W przypadku separowalnym, gdy ponadto $h(x, t) = \psi(x, t)$ równanie to przechodzi w wyprowadzone wcześniej (6.40).

6.2 Przypadkowe pułapkowanie

Rozważania przeprowadzone w niniejszym rozdziale składają się z dwóch etapów. W pierwszym konstruujemy *ciągłą funkcję rozkładu czasów oczekiwania* jako średnią ważoną, uwzględniającą "krajobraz" energetyczny ośrodka; w drugim analizujemy funkcje pokrewne, ściśle z nią związane np. jej pierwszy moment, który jest *średnim czasem oczekiwania* i pozwala na łatwe odróżnienie procesu Poissona od procesu Lévy'ego

6.2.1 Ciągła funkcja rozkładu czasów oczekiwania

Rozważmy błędzenie słokowe pojedynczej cząsteczki w potencjale przedstawionym na rys....; błędzenie tego typu nosi nazwę *przypadkowego pułapkowania* lub alternatywnie *modelu dolinowego*. Zakładamy, że gęstość prawdopodobieństwa pojawienia się doliny o określonej głębokości \mathcal{E} lokalnego minimum potencjału podlega prawu wykładniczego zaniku (czyli jest typu *Poissona*),

$$p(\mathcal{E}) = A \exp(-\frac{\mathcal{E}}{\bar{\mathcal{E}}}), \quad (6.53)$$

gdzie A jest stałą normalizacyjną, którą można łatwo obliczyć z warunku normalizacyjnego

$$\int_0^{\infty} p(\mathcal{E}) d\mathcal{E} = 1; \quad (6.54)$$

podstawiając wyrażenie (6.53) do tego warunku i wykonując proste przekształcenia otrzymujemy, że $A = 1/\bar{\mathcal{E}}$. Oczywiście, warunek normalizacyjny (6.54) bierze się stąd, że $p(\mathcal{E})$ jest gęstością prawdopodobieństwa, tego że wybrana na chybił trafił dolina potencjału będzie miała określoną głębokość \mathcal{E} ; zatem prawdopodobieństwo, że będzie ona miała dowolną głębokość jest pewnością. W tym miejscu uzasadnionym jest pytanie o sens fizyczny stałej $\bar{\mathcal{E}}$. Aby go dostrzec zauważmy, że

$$\bar{\mathcal{E}} = \int_0^{\infty} \mathcal{E} p(\mathcal{E}) d\mathcal{E}, \quad (6.55)$$

co oznacza, że $\bar{\mathcal{E}}$ jest średnią głębokością doliny potencjału. W powyższych rozważaniach milcząco przyjmowaliśmy, że głębokości dolin są nieograniczone. Powinniśmy uwzględnić fakt, że w rzeczywistości tak nie jest i przyjmować, że głębokość doliny jest zawarta w przedziale $0 < \mathcal{E} \leq \mathcal{E}_{\text{max}}$, gdzie \mathcal{E}_{max} oznacza maksymalną głębokość jaką może mieć dowolnie wybrana dolina potencjału. Nieco bardziej skomplikowane podejście, uwzględniające ten bardziej realny punkt widzenia przedstawiliśmy w Dodatku Jednakże zasadnicze wnioski płynące z obu podejść są identyczne.

Wyrażenie (6.53) na rozkład $p(\mathcal{E})$ jest jednym z dwóch jakie najczęściej stosuje się do statystycznego opisu "krajobrazu" energetycznego układów nieuporządkowanych a w tym amorficznych czy szklanych; innym jest po prostu rozkład Gaussa. Nieuporządek widoczny w rozrzucie głębokości dolin potencjału może być wywołany przez rozmieszczenie w sposób losowy różnych atomów (budujących sieć krystaliczną) w węzłach danej sieci czyli jest związane z nieuporządkowaniem składu a nie geometrii sieci (tzn. stała sieci nie ulega zmianie od węzła do węzła). Oba rozkłady opisują statyczne własności krajobrazu energetycznego i związane są z własnościami samych materiałów a nie błędzącej cząsteczki. Rozkład (6.53) jest łatwiejszy w zastosowaniach gdyż jest jednoparametrowy w przeciwieństwie do rozkładu Gaussa (który obok wartości średniej zawiera także dyspersję a ponadto, zawiera kwadrat zmiennej losowej; rolę rozkładu Gaussa omówiliśmy w Dodatku ...). W niniejszym rozdziale

zajmujemy się materiałami nieuporządkowanymi scharakteryzowanymi rozkładem wykładniczym (6.53).

W dalszym ciągu przyjmujemy, że *proces błędzenia ma charakter ponadbarierowy* - termicznie aktywowany co oznacza, że prawdopodobieństwo przeskoku cząsteczki na jednostkę czasu z jednej doliny potencjału do drugiej, czyli częstość przeskoków tutaj pomiędzy sąsiednimi dolinami dane jest wzorem

$$\nu^0(\mathcal{E}) = \gamma_0 \exp\left(-\frac{\mathcal{E}}{k_B T}\right) = \gamma_0 \gamma^{\frac{\mathcal{E}}{\Delta}} \quad (6.56)$$

gdzie γ_0 jest częstością drgań (podstawowych) w danej dolinie potencjału, natomiast

$$\gamma = \exp\left(-\frac{\Delta}{k_B T}\right), \quad (6.57)$$

Δ jest tutaj jednostką energii, k_B jak zwykle stałą Boltzmanna, a

$$T = \begin{cases} T, & \text{dla prawa Hopfa-Arrheniusa (HA)} \\ T - T_g, & \text{przy } T > T_g, \text{ dla prawa Vogela-Tammanna-Fulchera (VTF)}, \end{cases}$$

co jak widać, dotyczy dwóch klas materiałów - prawo HA takich, które nie są szklami bądź są w stanie dalekim od zeszklenia natomiast prawo VTF materiałów w pobliżu punktu zeszklenia; wielkość T oznacza jak zwykle temperaturę absolutną a T_g temperaturę przejścia do stanu szklistego. Ze wzoru (6.56) wynika, że średni czas oczekiwania (przebywania) cząsteczki w wybranej dolinie potencjału wynosi

$$\tau^0(\mathcal{E}) = \frac{1}{\nu^0(\mathcal{E})}. \quad (6.58)$$

Z powyższego wzoru wynika jak być powinno, że im głębsza jest dolina potencjału tym dłuższy jest czas przebywania w niej cząsteczki.

Trzecim założeniem jest *poissonowski kształt funkcji rozkładu czasów oczekiwania* $\phi_{\mathcal{E}}(t)$, która jest zdefiniowana jako gęstość prawdopodobieństwa, tego że błędząca cząsteczka przetrwa w danej dolinie potencjału o głębokości \mathcal{E} dokładnie przez czas t (tzn. po tym czasie na pewno ją opuści) czyli, że

$$\phi_{\mathcal{E}}(t) = \nu^0(\mathcal{E}) \exp(-\nu^0(\mathcal{E})t). \quad (6.59)$$

Jak widać w oparciu o (6.56), funkcja $\phi_{\mathcal{E}}(t)$, traktowana jako funkcja zmiennej \mathcal{E} , jest tzw. rozciągniętym eksponentem ("stretch exponent").

Nastym celem jest obliczenie następującej średniej ważonej w postaci zamkniętej,

$$\phi(t) = \int_0^{\infty} p(\mathcal{E}) \phi_{\mathcal{E}}(t) d\mathcal{E}, \quad (6.60)$$

która jest, oczywiście, średnią funkcją rozkładu czasów oczekiwania spełniającą, jak widać, warunek normalizacyjny

$$\int_0^{\infty} dt \phi(t) = 1, \quad (6.61)$$

i odgrywającą zasadniczą rolę w modelu błędzeń w czasie ciągłym (patrz rozdz.6.1) w układach amorficznych lub nieuporządkowanych a także np. w procesie starzenia się szkieł (Cécile Mounthus, Jean-Philippe Bouchaud, "Models of traps and glass phenomenology", J.Phys. A: Math. Gen. 29 (1966) 3847-3869). Powyższa funkcja rozkładu oznacza średnią gęstość prawdopodobieństwa, że błędząca cząsteczka prze-trwa w jakiegokolwiek dolinie dokładnie przez czas t . Średniowanie po głębokościach dolin (czyli po zmiennej \mathcal{E}) można zrealizować przynajmniej w dwóch różnych podejściach. Pierwsze polega na rozpatrywaniu zachowania się wielu niezależnych cząsteczek w próbie (co odpowiada rozrzedzonemu gazowi sieciowemu) a następnie średniowaniu po zespole złożonym z tych cząsteczek. Podejście to jest bliższe doświadczalnej realizacji niż podejście drugie. Drugie podejście polega na (myślowym) utworzeniu ogromnej liczby replik stochastycznych, czyli układów podobnych do wyjściowego ale nie identycznych z nim, składających się z pojedynczej błędzącej cząsteczki oraz krajobrazu energetycznego stanowiącego jej środowisko a wylosowanego z zadanego rozkładu $p(\mathcal{E})$. Średniowanie po \mathcal{E} w wyrażeniu (6.60) można teraz po prostu wykonać po tak zbudowanym zespole statystycznym.

Podstawmy zatem wyrażenie (6.53) oraz (6.59) do (6.60) wykorzystując (6.56),

$$\phi(t) = \frac{1}{\bar{\mathcal{E}}} \int_0^\infty d\mathcal{E} \exp(-\frac{\mathcal{E}}{\bar{\mathcal{E}}}) \gamma_0 \exp(-\frac{\mathcal{E}}{k_B T}) \exp(-\gamma_0 \exp(-\frac{\mathcal{E}}{k_B T})t). \quad (6.62)$$

Powyższą całkę można obliczyć na trzy istotnie różne sposoby.

Pierwszy sposób (obliczenia wprost) polega na przeprowadzeniu pomocniczej zamiany zmiennych

$$\begin{aligned} y &= \gamma_0 \exp(-\frac{\mathcal{E}}{k_B T})t, \\ dy &= -\frac{d\mathcal{E}}{k_B T}, \end{aligned} \quad (6.63)$$

która w połączeniu z równaniem (6.62) prowadzi do następującego ciągu przekształceń

$$\begin{aligned} \phi(t) &= -\frac{k_B T}{\bar{\mathcal{E}}} \frac{1}{t} \int_{\gamma_0 t}^\infty dy \exp(-\frac{\mathcal{E}}{\bar{\mathcal{E}}}) \exp(-y) \\ &= \frac{\gamma_0 \alpha}{(\gamma_0 t)^{1+\alpha}} \int_0^{\gamma_0 t} dy (\gamma_0 \exp(-\frac{\mathcal{E}}{k_B T})t)^\alpha \exp(-y) \\ &= \frac{\gamma_0 \alpha}{(\gamma_0 t)^{1+\alpha}} \int_0^{\gamma_0 t} dy y^\alpha \exp(-y) = \frac{\gamma_0 \alpha}{(\gamma_0 t)^{1+\alpha}} \gamma(1+\alpha, \gamma_0 t), \end{aligned} \quad (6.64)$$

gdzie wykładnik $\alpha = k_B T / \bar{\mathcal{E}} > 0$, natomiast $\gamma(1+\alpha, \gamma_0 t)$ jest niekompletną funkcją gamma (tutaj zależną od argumentu $\gamma_0 t$), która posiada następującą decydującą dla niniejszego wyprowadzenia własność

$$\gamma(1+\alpha, \gamma_0 t \rightarrow \infty) = \Gamma_{Euler}(1+\alpha). \quad (6.65)$$

Innymi słowy, w przypadku gdy $\gamma_0 t \gg \max(\alpha, 1)$ otrzymujemy asymptotyczną postać rozkładu $\phi(t)$

$$\phi(t) \approx \gamma_0 \frac{\alpha \Gamma_{\text{Euler}}(1+\alpha)}{(\gamma_0 t)^{1+\alpha}}, \quad (6.66)$$

która jest kluczową dla następnych dalszych rozważań. Należy podkreślić, że dopiero uwzględnienie wszystkich trzech elementów (6.53), (6.56) oraz (6.59) daje potęgowe w czasie zanik funkcji rozkładu (6.66). Potęgowe zanikanie w czasie (6.66) funkcji rozkładu zachodzi dla dowolnego $0 \leq \alpha$ (patrz Dodatek A1) ale, jak zobaczymy, *fascynującym jest jedynie przypadek $\alpha < 1$.*

Drugi sposób przedstawiony w Dodatku A2, polega na wyrażeniu funkcji wykładniczej zmiennej t za pomocą transformaty Mellina (patrz, Harry Bateman, Arthur Erdélyi, "Tables of Integral Transforms", Vol.I, McGraw-Hill Book Comp., Inc., New York 1954) a następnie zastosowaniu metody obliczania całek konturowych w płaszczyźnie zespolonej przez residua (patrz, Krzysztof Maurin, "Analiza. Cz.II. Wstęp do analizy globalnej", PWN, Warszawa 1971). Podejście tego typu zostało także wykorzystane w trzecim sposobie traktującym odwrotną transformatę Laplace'a funkcji rozkładu czasów oczekiwania; omówiliśmy go w rozdz.6.2.3.

Rozważmy teraz zachowanie funkcji rozkładu $\phi(t)$ dla krótkich czasów tzn. dla przypadku gdy $\gamma_0 t \ll 1$. Rozwijając w szereg funkcję eksponens w funkcji podcałkowej wyrażenia (6.64), następnie wykonując całkowanie wyraz po wyrazie i ograniczając się do wyrazów kwadratowych w $\gamma_0 t$, otrzymujemy $\phi(t)$ w postaci wykładniczej (patrz Dodatek C),

$$\phi(t) \approx \gamma_0 \frac{\alpha}{1+\alpha} \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{1+\alpha}{2+\alpha} \gamma_0 t\right); \quad (6.67)$$

wynika stąd natychmiast, że $\phi(t=0) = \gamma_0 \frac{\alpha}{1+\alpha}$.

6.2.2 Wielkości pokrewne

Nietypowo użyteczną w następnych dalszych rozważaniach jest transformata Laplace'a

$$\tilde{\phi}(s) (\equiv \mathcal{L}_s(\phi(t))) = \int_0^\infty dt \exp(-ts) \phi(t), \quad (6.68)$$

którą rozważamy dla $s \rightarrow 0$ co, zgodnie z twierdzeniem Tauberina (patrz Dodatek ...), odpowiada właśnie sytuacji asymptotycznie długich czasów. Obliczenia przeprowadzone w Dodatku ... dały, w przypadku gdy $\alpha < 1$, niehomogeniczną zależność od s w otoczeniu $s=0$ zarówno dla

$$\tilde{\phi}(s) \approx 1 - \frac{1}{\gamma_f} \left(\frac{s}{\gamma_0}\right)^\alpha, \quad (6.69)$$

jak też dla

$$\tilde{\Phi}(s) \approx \frac{1}{\gamma_0 \gamma_f'} \left(\frac{\gamma_0}{s}\right)^{1-\alpha}. \quad (6.70)$$

Jak wykazaliśmy wcześniej, obie funkcje odgrywają zasadniczą rolę w modelu błędzi w czasie ciągłym. Zauważmy, że z (6.70) otrzymujemy natychmiast asymptotyczną zależność czasową postaci

$$\Phi(t) \approx \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)\gamma_f'} \frac{1}{(\gamma_0 t)^\alpha}, \quad (6.71)$$

co stanowi najkrótszą drogę uzyskania asymptotyki funkcji $\Phi(t)$. Uogólnienie wyrażenia (6.69), obejmujące zarówno postać normalną jak i anomálną wyprowadzimy poniżej.

6.2.3 Równanie skalowania

Równanie skalowania danej funkcji powstaje w wyniku:

- 1) operacji liniowego przeskalowania zmiennej niezależnej,
- 2) liniowej odpowiedzi samej funkcji na to przeskalowanie.

Zauważmy, że transformata Laplace'a $\tilde{\phi}(s)$ spełnia niejednorodne równanie skalowania

$$\tilde{\phi}(\gamma^{-1}s) = M\tilde{\phi}(s) - M \ln(M) \int_0^1 d\xi \frac{1}{M^\xi} \frac{1}{1 + \frac{s}{\gamma_0 \gamma^\xi}}, \quad (6.72)$$

gdzie $M = \exp(\Delta/\bar{\mathcal{E}})$ a γ jest dana wzorem (6.57). W dalszym ciągu zakładamy, że $\Delta/\bar{\mathcal{E}} \ll 1$ i analogicznie $\Delta/k_B T \ll 1$ co pozwoli nam wykazać, że, niejednorodność całkowa sprowadza się do algebraicznej i nie zależy od γ tzn. od czynnika skalowania zmiennej niezależnej s . Rozważamy tylko przypadek asymptotyczny w czasie co odpowiada (na mocy twierdzenia Tauberina) $s \rightarrow 0$. Stąd, niejednorodność przybiera przybliżoną, prostszą postać

$$\begin{aligned} M \ln(M) \int_0^1 d\xi \frac{1}{M^\xi} \frac{1}{1 + \frac{s}{\gamma_0 \gamma^\xi}} &\approx M \ln(M) \int_0^1 d\xi \frac{1}{M^\xi} \left(1 - \frac{s}{\gamma_0 \gamma^\xi}\right) \\ &= M - 1 - \frac{s}{\gamma_0} \frac{\ln(M)}{\ln(M\gamma)} M \left(1 - \frac{1}{M\gamma}\right) \\ &\approx (M - 1) \left(1 - \frac{s}{\gamma_0}\right), \end{aligned} \quad (6.73)$$

gdyż w tym przypadku $s/\gamma_0 \gamma \ll 1$. Dzięki (6.73) niejednorodne równanie skalowania (6.72) można przepisać w postaci

$$\tilde{\phi}(\gamma^{-1}s) = M\tilde{\phi}(s) - (M - 1) \left(1 - \frac{s}{\gamma_0}\right), \quad (6.74)$$

która jest znacznie łatwiejsza do rozwiązania

Rozwiązanie równania (6.74) poszukujemy w postaci sumy

$$\tilde{\phi}(s) = \tilde{\phi}_{\text{reg}}(s) + \tilde{\phi}_{\text{sing}}(s), \quad (6.75)$$

gdzie $\tilde{\phi}_{\text{reg}}(s)$ jest rozwiązaniem ogólnym, regularnym równania niejednorodnego (6.72) natomiast $\tilde{\phi}_{\text{sing}}(s)$ jest rozwiązaniem szczególnym, singularnym równania jednorodnego

$$\tilde{\phi}_{\text{sing}}(\gamma^{-1}s) = M\tilde{\phi}_{\text{sing}}(s). \quad (6.76)$$

Postać rozwiązania ogólnego jest narzucona przez niejednorodność równania (6.72). Ponieważ niejednorodność tą traktujemy w sposób przybliżony (patrz (6.73) zatem, z dokładnością do wyrazów kwadratowych w zmiennej s ,

$$\tilde{\phi}_{\text{reg}}(s) \approx 1 - \frac{1}{\gamma'} \frac{s}{\gamma_0} \quad (6.77)$$

gdzie współczynnik

$$\gamma' = \frac{1 - \frac{1}{M\gamma}}{1 - \frac{1}{M}}. \quad (6.78)$$

Można sprawdzić (przez podstawienie do równania (6.75)), że rozwiązanie singularne jest postaci

$$\tilde{\phi}_{\text{sing}}(s) \approx -\frac{1}{\gamma'_f} \left(\frac{s}{\gamma_0}\right)^\alpha, \quad (6.79)$$

gdzie wykładnik $\alpha = -\ln(M)/\ln(\gamma)$ ($= k_B T/\bar{\epsilon}$), natomiast γ'_f jest tutaj nieznanym współczynnikiem; systematyczną metodę znalezienia rozwiązania singularnego, a zatem i tego współczynnika² podaliśmy w Dodatku A2. Jest on postaci

$$\gamma'_f = \frac{\sin(\pi\alpha)}{\pi\alpha}. \quad (6.80)$$

Ostatecznie, rozwiązanie równania (6.72) dla $s \rightarrow 0$ przybiera następującą, przybliżoną postać,

$$\tilde{\phi}(s) \approx 1 - \frac{1}{\gamma'_f} \left(\frac{s}{\gamma_0}\right)^\alpha - \frac{1}{\gamma'} \frac{s}{\gamma_0}, \quad (6.81)$$

która jest poszukiwanym uogólnieniem wyrażenia (6.69). Gdyby uwzględnić wszystkie wyrazy rozwinięcia Taylora funkcji podcałkowej w niejednorodności równania skalowania (6.72) (dla $|s| < \gamma_0\gamma$), wówczas rozwiązanie regularne $\tilde{\phi}_{\text{reg}}(s)$ byłoby

²Dokładniej rzecz biorąc, nie jest to stały współczynnik a cykliczna funkcja $\ln(s)$ o okresie równym $-\ln(\gamma)$ - podany tutaj współczynnik jest jedynie zerowym przybliżeniem wyrażenia zależnego od zmiennej $\ln(s)$, o czym jest mowa w Dodatku A2.

szeregiem potęgowym zmiennej s . Oznacza to, że ścisłe rozwiązanie $\tilde{\phi}(s)$ można by zapisać (symbolicznie) w postaci,

$$\tilde{\phi}(s) = 1 - \frac{1}{\gamma_f'} \left(\frac{s}{\gamma_0}\right)^\alpha - \frac{1}{\gamma' \gamma_0} s + \Theta(s^2), \quad (6.82)$$

gdzie $\Theta(s^2)$ jest resztą (szeregiem potęgowym) rzędu nie mniejszego niż s^2 . Rozwiązanie (6.82) a tym samym (6.81) wymaga omówienia.

6.2.4 Rozkład Lévy'ego a rozkład Poissona

Rozważmy dwa zasadnicze przypadki, które przedstawimy w następujący sposób

$$\tilde{\phi}(s) \approx \begin{cases} 1 - \frac{1}{\gamma_f'} \left(\frac{s}{\gamma_0}\right)^\alpha \approx \frac{1}{1 + \frac{1}{\gamma_f'} \left(\frac{s}{\gamma_0}\right)^\alpha} \approx \\ \exp\left(-\frac{1}{\gamma_f'} \left(\frac{s}{\gamma_0}\right)^\alpha\right), & \text{dla sytuacji singularnej czyli } \alpha < 1; \\ 1 - \frac{1}{\gamma'} \frac{s}{\gamma_0} \approx \frac{1}{1 + \frac{1}{\gamma'} \frac{s}{\gamma_0}} \approx \exp\left(-\frac{1}{\gamma'} \frac{s}{\gamma_0}\right), & \text{dla sytuacji regularnej czyli } \alpha > 1. \end{cases} \quad (6.83)$$

Jak widać, uzyskane rozwiązanie singularne jest identyczne z otrzymanym wcześniej (patrz rozdz.6.2.2, wyrażenie (6.69)). Tym samym, asymptotyczna zależność czasowa funkcji rozkładu jest dana wzorem (6.66) z rozdz.6.2.1. W dalszym ciągu, asymptotyczne w czasie rozwiązanie regularne uzyskuje się poprzez bezpośrednie odwrócenie transformaty Laplace'a w wyrażeniu (6.83) dla przypadku $\alpha > 1$ (patrz I.M. Rzytyk i I.S. Gradshtajn, "Tablice, sum, szeregów i iloczynów", PWN, Warszawa 1964); prowadzi to do rozkładu Poissona

$$\phi(t) \approx \gamma_0 \gamma \exp(-\gamma_0 \gamma t). \quad (6.84)$$

Uzyskaliśmy tym samym dwa różne typy rozkładów. Możemy powiedzieć, że w przypadku pierwszego z nich zjawiska najistotniejsze opisuje długoczasowy ogon funkcji rozkładu. Natomiast w drugim przypadku korpus funkcji rozkładu a wartość parametru $\alpha = 1$ stanowi próg oddzielający te dwa zasadniczo różne światy.

Uzyskany wynik pozwala wyrazić w tych dwóch przypadkach pierwszy moment w jawnej postaci; najpierw jego transformatę Laplace'a

$$\langle \tilde{X}(s) \rangle \approx \begin{cases} (p^+ - p^-) \frac{\gamma_f'}{\gamma_0} \left(\frac{1}{\gamma_0}\right)^{\frac{1}{1+\alpha}}, & \text{dla sytuacji singularnej czyli } \alpha < 1; \\ (p^+ - p^-) \frac{\gamma_f'}{\gamma_0} \left(\frac{1}{\gamma_0}\right)^{\frac{1}{\alpha}}, & \text{dla sytuacji regularnej czyli } \alpha > 1. \end{cases} \quad (6.85)$$

a stąd, w zależności od czasu

$$\langle X(t) \rangle \approx \begin{cases} (p^+ - p^-) \gamma'_f (\gamma_0 t)^\alpha, & \text{dla sytuacji singularnej czyli } \alpha < 1; \\ (p^+ - p^-) \gamma' \gamma_0 t, & \text{dla sytuacji regularnej czyli } \alpha > 1. \end{cases} \quad (6.86)$$

Wreszcie z (6.86) można wyznaczyć prędkość uniesienia

$$\frac{d}{dt} \langle X(t) \rangle = \langle V(t) \rangle \approx \begin{cases} (p^+ - p^-) \frac{\gamma'_f \gamma_0}{(\gamma_0 t)^{(1-\alpha)}}, & \text{dla } \alpha < 1; \\ (p^+ - p^-) \gamma' \gamma_0, & \text{dla } \alpha > 1. \end{cases} \quad (6.87)$$

Tym samym, wyjaśniona została pierwsza część potęgowego zaniku fotoprądu od czasu; pozostała jeszcze do wyjaśnienia zależność w której istotną rolę odgrywa absorbujący wpływ katody.

6.2.5 Średni czas oczekiwania

Postukujemy odpowiedzi na zasadnicze pytanie: *jaki jest średni czas oczekiwania (życia),*

$$\langle t \rangle = \int_0^\infty t \phi(t) dt, \quad (6.88)$$

błądzącej cząsteczki w jakiejkolwiek dolinie (minimum) potencjału? Rozważmy kluczowy dla naszych rozważań przypadek $\alpha < 1$. Łatwo dostrzec, podstawiając (6.66) do (6.88) (oraz korzystając z faktu, że funkcja $\phi(t)$ jest ograniczona), że $\langle t \rangle = \infty$. Podobnie można sprawdzić, że także dowolny moment $\langle t^m \rangle = \infty$, $m = 2, 3, \dots$. Oznacza to, że średni czas oczekiwania (życia) cząsteczki w dowolnej dolinie (minimum) potencjału oraz jego dyspersja (rozrzut statystyczny) są nieskończone.

Rodzi to szereg pytań - jednym z najważniejszych jest *w jaki sposób powyższy wynik teoretyczny może przejawiać się w realnym doświadczeniu?* Aby odpowiedzieć na to pytanie rozważmy dowolnie wybrany przedział czasu Δt w którym będziemy obserwować błądzenie cząsteczki. Przypuśćmy, że w tym przedziale czasu cząsteczka $n (\gg 1)$ razy zmieniała swoje miejsce pobytu co pozwoliło nam dokonać n -krotnego pomiaru jej czasu życia t_j , $j = 1, 2, \dots$, w kolejno odwiedzanych dolinach potencjału. Na tej podstawie możemy wyznaczyć średni czas oczekiwania cząsteczki jako $\langle t(\Delta t) \rangle = 1/n \sum_{j=1}^n t_j$. Oczywiście, wielkość ta zależy od długości przedziału Δt w którym prowadzono obserwacje. Zależność ta może być dwojakiego rodzaju. Jeżeli wykładnik $\alpha \geq 1$ wówczas *średni czas oczekiwania jest skończony* i, zgodnie z prawem wielkich liczb Bernoulliego, w miarę wzrostu długości przedziału czasu Δt

powyższa średnia $\langle t(\Delta t) \rangle$ dąży do osiągnięcia skończonego plateau czyli ulega stabilizacji. Jeżeli $\alpha < 1$ wówczas *średni czas oczekiwania jest nieskończony* i wzrost długości czasu obserwacji nie prowadzi do stabilizowania się uzyskiwanych wyników a wprost przeciwnie, dłuższy przedział obserwacji Δt oznacza większą szansę pojawienia się rzadkiego zdarzenia w postaci bardzo długiego czasu oczekiwania w jakimś lokalnym minimum potencjału co może prowadzić do drastycznego wzrostu średniej $\langle t(\Delta t) \rangle$; tego typu zależność przedstawiono na rys.... i omówiono w rozdz.... (przy okazji omówiono tam także o przypadek marginalny gdy $\alpha = 1$ wymagający osobnego traktowania). Innymi słowy, nieskończony średni czas oczekiwania przejawia się w postaci rosnącej nieograniczenie wartości $\langle t(\Delta t) \rangle$ ze wzrostem Δt . Ponadto, w przypadku $\alpha < 1$ rodzi się *kluczowe pytanie dotyczące istnienia i osiągania przez układ stanu równowagi*; ten niezwykle istotny problem dyskutujemy w dalszej części.

6.2.6 Oczekiwanie Weierstrassa–Mandelbrota

Dalsze rozważania, dotyczące fraktalizacji czasów oczekiwania, łatwiej przeprowadzić korzystając z funkcji Weierstrassa-Mandelbrota, czyli z dyskretnej reprezentacji funkcji rozkładu czasów oczekiwania.

6.2.7 Dyskretna funkcja rozkładu czasów oczekiwania

Wprowadźmy w tym celu następującą wyjściową definicję, która daje poszukiwaną funkcję rozkładu w postaci nieskończonej superpozycji funkcji Poissona

$$\phi(t) = \sum_{j=0}^{\infty} v_j \gamma_j \exp(-\gamma_j t), \quad (6.89)$$

przy czym

$$\tau_j = \frac{1}{\gamma_j} \quad (6.90)$$

jest średnim czasem przebywania cząsteczki w dolinie potencjału o numerze j (oczywiście danej głębokości od powiada jeden i tylko jeden wskaźnik j niezależnie od tego w którym miejscu taka dolina się znajduje), natomiast wagi v_j spełniają warunek normalizacyjny

$$\sum_{j=0}^{\infty} v_j = 1. \quad (6.91)$$

Jak widać, wprowadzenie reprezentacji dyskretnej jest związane z ponumerowaniem dolin potencjału w kolejności od najpłytszej do najgłębszej. Jednak, jak to już wskazaliśmy w poprzednim paragrafie, głębokość minimów potencjałów jest ograniczona zatem sumowanie w (6.89) powinno być skończone, co niestety komplikuje rozważania matematyczne (patrz Dodatek B) chociaż zasadnicze wnioski płynące z obu podejść są identyczne.

Tabela 6.1: Relacje pomiędzy reprezentacjami

Reprezentacja ciągła	Reprezentacja dyskretna
$\int_0^\infty d\mathcal{E}/\Delta$	$\sum_{j=0}^\infty$
\mathcal{E}/Δ	j
$\exp(\Delta/\mathcal{E})$	M
Δ/\mathcal{E}	$1 - \frac{1}{M}$
$\exp(-\Delta/k_B T)$	γ
$\gamma_0(\exp(-\Delta/k_B T))^{\mathcal{E}/\Delta}$	$\gamma_0 \gamma^j$

Z (6.91) wynika bezpośrednio warunek normalizacyjny dla funkcji rozkładu postaci

$$\int_0^\infty \phi(t) dt = 1. \quad (6.92)$$

Aby łatwiej uchwycić sens fizyczny superpozycji (6.89) zauważmy, że ma miejsce odpowiednicie pomiędzy reprezentacją ciągłą (6.62) i dyskretną (6.89), która została przedstawiona w Tabeli 1 (gdzie wprowadziliśmy *explicite* jednostkę energii oznaczoną przez Δ).

W dalszym ciągu, pod wpływem reprezentacji (6.62) dopuszczamy wariant najprostszy, w którym stosunek wag w kolejnych rzędach $j = 0, 1, 2, \dots$, jest funkcją malejącą i niezależną od rzędu, czyli

$$\frac{v_{j+1}}{v_j} = \frac{1}{M} < 1; \quad (6.93)$$

oznacza to, że parametr M pełni rolę współczynnika podobieństwa stochastycznego (tutaj współczynnika stochastycznego osłabienia) czasowej struktury stochastycznej. Z (6.91) oraz (6.93) wynika bezpośrednio, że

$$v_j = \left(1 - \frac{1}{M}\right) \frac{1}{M^j}. \quad (6.94)$$

Ponadto, zgodnie z duchem zależności (6.93), przyjmujemy, że stosunek

$$\frac{\gamma_{j+1}}{\gamma_j} = \gamma < 1, \quad (6.95)$$

jest niezależny od rzędu (pokolenia) j ; bezwymiarowy współczynnik γ pełni rolę współczynnika podobieństwa czasowego natomiast, γ_0 jest częstością charakteryzującą proces na poziomie wyjściowego, zerowego pokolenia. Z (6.95) wynika natychmiast, że

$$\gamma_j = \gamma_0 \gamma^j, \quad j = 0, 1, 2, \dots, \quad (6.96)$$

oraz na mocy (6.90)

$$\tau_0 \tau^j = \frac{1}{\gamma_0 \gamma^j}. \quad (6.97)$$

Podstawiając wyrażenie (6.94) oraz (6.96) do definicji (6.89) otrzymujemy następującą, przygotowaną do dalszej analizy, postać funkcji rozkładu czasów oczekiwania,

$$\phi(t) = \gamma_0 \left(1 - \frac{1}{M}\right) \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{M^j} \gamma^j \exp(-\gamma_0 \gamma^j t). \quad (6.98)$$

Zauważmy, iż warunek (6.93) oraz (6.95) gwarantują, że dla każdej chwili t funkcja $\phi(t)$ ma wartość skończoną dzięki temu, że

$$\frac{\gamma}{M} < 1. \quad (6.99)$$

Nieskończony ciąg stałych czasowych (6.97) charakteryzujący we wszystkich rodach (pokoleniach) omawiany proces stochastyczny rodzi pytanie o istnienie *efektywnej (wypadkowej) jednostki czasowej* - zagadnienie to analizujemy poniżej. Tutaj zauważmy jedynie, że regularność procesu stochastycznego na każdym poziomie j z osobna nie oznacza jeszcze, że sumaryczny proces ma charakter regularny czyli, że jest scharakteryzowany jednym, skończonym średnim czasem oczekiwania cząsteczki.

6.2.8 Czasowe równanie skalowania

Wprowadźmy transformatę Laplace'a funkcji rozkładu czasów oczekiwania

$$\tilde{\phi}(s) = \int_0^{\infty} dt \exp(-ts) \phi(t) = \left(1 - \frac{1}{M}\right) \gamma_0 \sum_{j=0}^{\infty} \left(\frac{\gamma}{M}\right)^j \frac{1}{s + \gamma_0 \gamma^j}, \quad (6.100)$$

dzięki temu łatwo zauważyć, że spełnione jest następujące równanie skalowania

$$\tilde{\phi}(\gamma^{-1}s) = M\tilde{\phi}(s) - (M-1)\frac{\gamma_0}{s + \gamma_0}. \quad (6.101)$$

Rozwiązanie tego równania można postuluwać w postaci sumy

$$\tilde{\phi}(s) = \tilde{\phi}_{\text{reg}}(s) + \tilde{\phi}_{\text{sing}}(s), \quad (6.102)$$

gdzie $\tilde{\phi}_{\text{reg}}(s)$ jest rozwiązaniem ogólnym, regularnym równania niejednorodnego (6.101) natomiast $\tilde{\phi}_{\text{sing}}(s)$ jest rozwiązaniem szczególnym, singularnym równania jednorodnego

$$\tilde{\phi}_{\text{sing}}(\gamma^{-1}s) = M\tilde{\phi}_{\text{sing}}(s). \quad (6.103)$$

Postać rozwiązania ogólnego jest narzucona przez niejednorodność równania (6.101). Rozwijając ją w szereg Taylora otrzymujemy naprzemienny szereg potęgowy w zmiennej s , pozwalający na wyznaczenie współczynników szeregu potęgowego (także w zmiennej s) jakim jest rozwiązanie regularne. Z dokładnością do wyrazów liniowych możemy napisać, z dobrym przybliżeniem dla $|s| \ll \gamma_0$,

$$\bar{\phi}_{\text{reg}}(s) \approx 1 - \frac{s}{\gamma'}, \quad (6.104)$$

gdzie uogólnione prawdopodobieństwo przesłoku na jednostkę czasu

$$\gamma' = \gamma_0 \frac{1 - \frac{1}{M\gamma}}{1 - \frac{1}{M}}. \quad (6.105)$$

Zauważmy, że $\gamma' > 0$ wtedy i tylko wtedy gdy $M\gamma > 1$ co odpowiada sytuacji, dla której istnieje wartość oczekiwana

$$\langle t \rangle = \int_0^\infty t\phi(t)dt = (1 - \frac{1}{M}) \frac{1}{\gamma_0} \sum_{j=0}^\infty \frac{1}{(M\gamma)^j} = \frac{1}{\gamma'}. \quad (6.106)$$

Sytuację przeciwną, gdy $M\gamma < 1$, omawiamy poniżej.

Można łatwo sprawdzić, korzystając z równania jednorodnego (6.103), że postulkowany kształt rozwiązania singularnego jest następujący

$$\bar{\phi}_{\text{sing}}(s) \approx -\frac{s^\eta}{\gamma_f}, \quad (6.107)$$

gdzie wykładnik

$$\eta = -\frac{\ln(M)}{\ln(\gamma)} = \alpha; \quad (6.108)$$

wyznaczenie współczynnika proporcjonalności, czyli fraktalnego elementu przejścia na jednostkę czasu, γ_f w równaniu (6.107) wymaga subtelniejszego podejścia stosującego transformatę Mellina oraz metodę residuów do obliczania całek (w płaszczyźnie zespolonej).

Wreszcie, korzystając z (6.102), (6.104) oraz (6.107) otrzymujemy dla $s \rightarrow 0$,

$$\bar{\phi}(s) \approx 1 - \frac{s^\eta}{\gamma_f} - \frac{s}{\gamma'} \approx \frac{1}{1 + \frac{s^\eta}{\gamma_f} + \frac{s}{\gamma'}}. \quad (6.109)$$

Uproszczenie powyższego wzoru zależy od wartości wykładnika α mianowicie,

$$\bar{\phi}(s) \approx \begin{cases} 1 - \frac{s}{\gamma'} \approx \frac{1}{1 + \frac{s}{\gamma'}}, & \text{dla sytuacji regularnej czyli } \alpha > 1 \\ 1 - \frac{s^\eta}{\gamma_f} \approx \frac{1}{1 + \frac{s^\eta}{\gamma_f}}, & \text{dla sytuacji anomalnej czyli } \alpha < 1; \end{cases}$$

przypadek marginalny gdy $\alpha = 1$ wymaga innego, bardziej zaawansowanego podejścia (wykorzystującego transformatę Mellina oraz całkowanie przez residua) i zostało omówione w dalszej części.

Jak widać, dla sytuacji regularnej ($\alpha > 1$) $\bar{\phi}(s) \approx \bar{\phi}_{reg}(s)$ tzn. dla małych s dominiuje rozwiązanie regularne w przeciwieństwie do sytuacji anomalnej (wymagającej omówienia). Rozwiązanie regularne oznacza, że po dokonaniu odwrotnej transformaty Laplace'a funkcja rozkładu

$$\phi(t) \approx \gamma' \exp(-\gamma' t) \quad (6.110)$$

jest dana, dla asymptotycznie długich czasów t , funkcją Poissona (patrz pierwsza część Dodatku C).

W sytuacji anomalnej ($\alpha < 1$), po dokonaniu odwrotnej transformacji Laplace'a funkcja rozkładu dla asymptotycznie długich czasów zanika potęgowo (patrz wyprowadzenie w drugiej części Dodatku C) tzn.,

$$\phi(t) \approx \frac{\alpha}{\Gamma(1-\alpha)} \frac{1}{\gamma_f' t^{1+\alpha}}. \quad (6.111)$$

Łatwo sprawdzić (w oparciu o (6.111) oraz o fakt, że $\phi(t)$ jest ograniczone), że w tym przypadku wartość oczekiwana $\langle t \rangle = \infty$. Jak widać, rozkład dany wzorem (6.110) oraz (6.111) różni się zasadniczo - naszym celem jest omówienie tego ostatniego.

6.2.9 Gra petersburska

Istnienie zmiennych losowych nie posiadających skończonych wartości oczekiwanych zostało po raz pierwszy zauważone przez Daniela Bernoulli'ego w zaproponowanej przez niego tzw. *grze petersburskiej* (przejrzyste omówienie tej gry można znaleźć w książce Williama Feller'a, "Wstęp do rachunku prawdopodobieństwa", wyd.II zmieniłone, rozdz.X4, PWN, Warszawa 1966). Gra ta jest związana z rzucaniem żetonem przy czym szansa, że w wyniku pojedynczego rzutu wypadnie awers wynosi $1/M$ natomiast rewers $1 - 1/M$, (gdzie $M > 1$). Należy zaznaczyć, że w oryginalnej grze petersburskiej żeton jest symetryczny czyli $M = 2$.) Zasada gry polega na tym, iż gracz może rzucać żetonem do pierwszego pojawienia się rewersu; o ile $j (= 0, 1, 2, \dots)$ razy pod rząd wypadł awers grający wygrywa kwotę równą f_j . Należy, oczywiście przyjąć, że wygranie większej kwoty powinno być mniej prawdopodobne zatem, stawka f_j powinna rosnąć z j a poza tym może być dowolna; zauważmy, że przypadek $f_j = M^j$, jaki ma miejsce w oryginalnej grze petersburskiej, prowadzi do sytuacji, w której wartość oczekiwana wygranej dana nieskończoną sumą $(1 - \frac{1}{M}) + (1 - \frac{1}{M})\frac{M}{M} + (1 - \frac{1}{M})\frac{M^2}{M^2} + \dots + (1 - \frac{1}{M})\frac{M^j}{M^j} + \dots$ jest nieograniczona, co uniemożliwia zastosowanie prawa wielkich liczb. W naszym przypadku stawka wynosi $f_j = 1/(\gamma_0 \gamma^j)$ co prowadzi do wyrażenia (6.106) na wartość oczekiwaną wygranej, która jedynie dla $M\gamma < 1$ przyjmuje wartość skończoną. Jak widać, naszym zasadniczym celem jest analiza gry petersburskiej prowadzącej do nieograniczonej wygranej.

6.3 Dalsze charakterystyczne doświadczenia

Istnieje już znaczna lista doświadczeń w których obserwuje się transport dyspersyjny - są to przede wszystkim doświadczenia przeprowadzone na materiałach amorficznych, w których występuje relaksacja potęgowa a nie wykładnicza.

6.3.1 Anomalna dyfuzja wodoru w amorficznych metalach

6.3.2 Eksperyment kserograficzny

6.3.3 Rekombinacja w epitaksjalnym półprzewodniku

6.3.4 Starzenie się szkieł

6.4 Błądzenia fraktalne

Zrozumienie tzw. *błądzeń fraktalnych* wymagało od nas omówienia w pierwszym rozdziale obiektów zwanych fraktalami statystycznymi (probabilistycznymi). Błądzenia fraktalne rozważamy na przykładzie wielce charakterystycznych tzw. *błądzeń Weierstrassa*³, które pozwalają na dostrzeżenie zasadniczej przyczyny powodującej istnienie algebraicznie zanikających, długozasięgowych "ogonów" zarówno w rozkładach prawdopodobieństw jak i w funkcjach korelacji. Jak wykazujemy, tą przyczyną są *rzadkie, ekstremalne zdarzenia* które, w określonych warunkach, są generowane przez *stochastycznie samopodobną strukturę trajektorii* błądzącej cząsteczki. Mówiąc ogólniej, trajektoria ta tworzy stochastyczną strukturę fraktalną - stąd wzięła się nazwa tych błądzeń.

Istnienie rzadkich, ekstremalnych zdarzeń otwiera inny od tradycyjnego, i mimo znacznych osiągnięć będący wciąż w fazie początkowej, kierunek dociekań fizyki statystycznej oraz dynamiki chaotycznej.

6.5 Przeloty Weierstrassa

Przeloty Weierstrassa stanowią szczególny przypadek *błądzeń Weierstrassa* czyli procesu stochastycznego, który potrafi opisać zarówno sytuacje gdy

- 1) przemieszczenia pojedynczej cząsteczki można traktować jako natychmiastowe jak też takie, w których
- 2) prędkość przemieszczania się jest skończona tzw. *spacery Weierstrassa*.

³Termin 'błądzenia Weierstrassa' został wprowadzony w pracy E.W.Montrolla i M.F.Shlesingera pt.: "On the Wonderful World of Random Walks" zamieszczonej w "Nonequilibrium Phenomena II. From Stochastics to Hydrodynamics", SSM XI, eds, J.L.Lebowitz i E.W.Montroll (North-Holland, Amsterdam 1984)

Ten pierwszy przypadek, znacznie łatwiejszy do opisania (dzięki mniejszej liczbie stopni swobody charakteryzującej układ), dotyczy właśnie *przełotów Weierstrassa* - od niego zaczynamy nasz wywód. Proces stochastyczny typu przełotów nosi także nazwę *hoppingu (jumpingu)* bądź po prostu procesu *skokowego* i jest szeroko stosowany w materii skondensowanej a zwłaszcza w fizyce ciała stałego np. do opisu dyfuzji oraz przewodnictwa jonowego.

6.5.1 Definicje i interpretacje

Zdefiniujemy część przestrzenną, $p(x)$, gęstości prawdopodobieństwa przemieszczenia się cząsteczki o wektor x w wyniku pojedynczego przełotu. Dla uproszczenia wstępnych wywodów matematycznych omawiamy *przełoty jednowymiarowe*; przełoty w przestrzeniach o większej liczbie wymiarów omawiamy w Dodatku A (dokładniej rzecz biorąc, dyskutujemy sferycznie symetryczne przełoty Weierstrassa, zwane także błędzeniem Rayleigha-Pearsona, będące bezpośrednim uogólnieniem przypadku jednowymiarowego).

Wprowadzamy następującą wyjściową definicję opisującą kinetykę przemieszczenia cząstki o wektor x ,

$$p(x) = \frac{1}{2} \sum_{j=0}^{\infty} w_j [\delta(x - b_j) + \delta(x + b_j)], \quad (6.112)$$

gdzie waga w_j , $j = 0, 1, 2, \dots$, spełniająca warunek normalizacyjny

$$\sum_{j=0}^{\infty} w_j = 1, \quad (6.113)$$

oznacza prawdopodobieństwo τ jakim cząsteczka przemieszcza się na odległość b_j . Oczywiście, τ warunku (6.113) wynika natychmiast warunek normalizacji gęstości prawdopodobieństwa $p(x)$,

$$\int_{-\infty}^{\infty} p(x) dx = 1. \quad (6.114)$$

Zauważmy, że czynnik $1/2$ stojący przed sumą jest prawdopodobieństwem wybrania przez cząstkę jednej z dwóch dowolnych orientacji wektora przemieszczenia; ponieważ każda z orientacji jest równie prawdopodobna więc $p(x)$ opisuje błędzenie w nieobecności zewnętrznego pola. W dalszym ciągu dopuszczamy jedynie najprostszemu wariantowi, w którym stosunek wag w kolejnych rzędach $j = 0, 1, 2, \dots$, jest funkcją malejącą i niezależną od rzędu, tzn.

$$\frac{w_{j+1}}{w_j} = \frac{1}{N} < 1, \quad (6.115)$$

co oznacza, że parametr N pełni rolę współczynnika podobieństwa stochastycznego (tutaj współczynnika stochastycznego osłabienia) struktury stochastycznej; τ (6.113)

oraz (6.115) wynika natychmiast, że

$$w_j = (1 - \frac{1}{N}) \frac{1}{Nj} \quad (6.116)$$

maleje potęgowo z rzędem j . W dalszym ciągu, zgodnie z duchem zależności (6.115), przyjmujemy, że

$$\frac{b_{j+1}}{b_j} = b > 1, \quad (6.117)$$

gdzie b pełni rolę współczynnika podobieństwa geometrycznego (zwanego też czasami współczynnikiem geometrycznego wzmocnienia struktury stochastycznej); podobnie jak dla wag, z (6.117) wynika natychmiast zależność potęgowa

$$b_j = b_0 b^j, \quad (6.118)$$

gdzie b_0 jest stałą, jednostkową długością przelotu rzędu zerowego; w dalszym ciągu kładziemy dla uproszczenia wywodów matematycznych $b_0 = 1$ przyjmując, że przeloty dłuższe są mniej prawdopodobne np. ze względu na opory ruchu tzn. zakładając, że $b > 1$. Sytuację przeciwną, gdy $b < 1$, rozważamy w dalszej części w kontekście błędzenia trajektorii w przestrzeni fazowej w obszarze hierarchicznych pułapek istniejących w wielu nieliniowych zagadnieniach dynamicznych przejawiających zachowania chaotyczne.

Z wyrażenia (6.116) oraz (6.118) wynika, że przeloty cząsteczki można grupować w rzędy zarówno według częstości ich występowania jak i długości przelotów, co pozwala przepisać wyjściowy wzór (6.201) w postaci

$$p(x) = \frac{1}{2} (1 - \frac{1}{N}) \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{Nj} [\delta(x - b^j) + \delta(x + b^j)]. \quad (6.119)$$

Jak widać, wzór (6.119) dopuszcza dowolnie długie przeloty cząsteczki. Omawiane tutaj błędzenie pojedynczej cząsteczki nosi nazwę przelotów dlatego że zarówno ogólna definicja (6.201) jak i wzór (6.119) określają natychmiastowe przemieszczanie się błędzącej cząsteczki pomiędzy kolejnymi punktami zwrotnymi (przystankami wyznaczającymi oczywiście początek i koniec pojedynczego przelotu). Należy podkreślić, iż wszystkie wnioski formułowane w tym rozdziale odnoszą się także do wspomnianych już sferycznych przelotów Weierstrassa omówionych w Dodatku A. Na przykład, prowadzona tutaj dyskusja dotycząca wzorów (6.201) oraz (6.119) odnosi się jednocześnie do wzoru (I.1) oraz towarzyszących mu definicji zamieszczonych w Dodatku A.

Istnieje ważny powód, dla którego nasze rozważania rozpoczęliśmy od analizy pojedynczego przemieszczenia cząsteczki. Otóż, jak zobaczymy przeloty Weierstrassa mają charakter samopodobny dlatego należy oczekiwać, że już elementarne przemieszczenie będzie w sobie zawierać istotne informacje dotyczące całej trajektorii;

aspekt ten był już zresztą widoczny dla ruchów Browna, dla których współczynnik samodyfuzji dał się wyrazić za pomocą parametrów mikroskopowych charakteryzujących jedynie pojedyncze przemieszczenie cząsteczki.

Interpretacja wzoru (6.119) jest szczególnie prosta gdy parametr N jest liczbą naturalną większą od 1. Mianowicie, już ze wzoru (6.115) wynika, że przeloty o długości $b_0 b^{j+1}$ są N razy mniej prawdopodobne niż przeloty o długości $b_0 b^j$. Można zatem powiedzieć, że średnio rzecz biorąc zanim cząsteczka wykona przelot rzędu $j+1$ musi wykonać N przelotów rzędu j . Zaniedbując na razie nieuniknione fluktuacje sekwencji przelotów oraz fluktuacje proporcji pomiędzy liczbami przelotów o różnych długościach, można to przedstawić schematycznie w postaci graficznej, przyjmując dla przykładu, że $N = 3$ oraz $b = 2$.

Poniższy (dwuczęściowy) rysunek przedstawia, dla większej poglądowości, błądzenie w przestrzeni dwuwymiarowej; nie narusza to w niczym ogólnych zasad (6.115) i (6.117) definiujących przeloty Weierstrassa. Uderzającą cechą tak uporządkowanej trajektorii błądzącej cząsteczki jest jej samopodobny charakter co widać już przez zwykłe porównanie rysunku a i b.

Na rysunku a zamieszczone są wszystkie szczegóły trajektorii, tzn. aby wykonać przelot o długości $b^1 = 2$ cząsteczka musi wykonać najpierw $N = 3$ przelotów o długości jednostkowej (rzędu zerowego); aby wykonać przelot o długości $b^2 = 4$ musi analogicznie wykonać $N = 3$ przelotów rzędu $j = 1$, itd, itp. A zatem, zanim zostanie wykonany przelot rzędu $j = 2$ musi być zrealizowanych $N^{j-2} = 9$ przelotów o długości jednostkowej (rzędu zerowego). Zatem ogólnie mówiąc, N^j można traktować jako średnią liczbę przelotów rzędu zerowego, które muszą zostać wykonane aby mógł się pojawić przelot o długości b^j . Ten pojedynczy przelot rozpoczynający j -e pokolenie w hierarchii przelotów stanowi w zbiorze złożonym z $(N^{j+1} - 1)/(N - 1) (= N^j + N^{j-1} + \dots + N^1 + N^0)$ przelotów tzw. rzadkie, ekstremalne zdarzenie o ile spełniony jest dodatkowy warunek, który wprowadzamy poniżej. Jak wykażemy, zdarzenia takie odgrywają zasadniczą rolę w tzw. dyfuzji anormalnej. To właśnie z powodu tego typu zdarzeń zwykła dyfuzja traci swój normalny charakter; jak zobaczymy, właśnie to jest np. przyczyną zamiany relaksacji wykładniczej na potęgową.

Z grubsza rzecz biorąc, rzadkie, ekstremalne zdarzenie a tutaj rzadki, ekstremalny przelot, jest unikalnym w stosunku do tych, które już się pojawiły i przynajmniej o rząd wielkości większym - jak pokazujemy, jest to warunek konieczny ale nie wystarczający. W tym sensie stochastyczna trajektoria samopodobna może, w pewnych warunkach, wygenerować rzadkie, ekstremalne zdarzenia, natomiast (jak zobaczymy) rzadkie, ekstremalne zdarzenia zawsze budują stochastyczną trajektorię samopodobną. W dalszym ciągu prowadzimy rozważania pozwalające na wprowadzenie uściślonej definicji rzadkiego, ekstremalnego zdarzenia.

Wielkość N^j można formalnie traktować jak elementarną "masę" błądzenia Weierstrassa (całkowitą "masę" jest wielkość $(N^{j+1} - 1)/(N - 1)$) nagromadzoną w obszarze scharakteryzowanym przez liniowy rozmiar b^j ; wykażemy, że zależność pomiędzy nagromadzoną "masą" a liniowym rozmiarem prowadzi do istnienia uniwer-

salnego wykładnika, który w dalszym ciągu nazywamy *wymiarem samopodobieństwa* i oznaczamy przez d_s .

Rysunek b jest tą samą trajektorią "sfotografowaną" już z pewnej odległości mianowicie takiej, że zdolność rozdzielcza "zdjęcia" nie pozwala na rozróżnienie niektórych jego szczegółów. Ta nierozróżnialność szczegółów sprowadza się do traktowania każdej grupy składającej się tutaj z trzech jednostkowych przemieszczeń jak pojedynczego punktu. Dlatego właśnie najmniejsza rozróżnialna grupa składa się (przy takiej a nie innej zdolności rozdzielczej zdjęcia) z trzech przemieszczeń o długości b^1 . Jak widać, trajektoria zamieszczona na rysunku b nie różni się niczym od tej jaka znajduje się na rysunku a za wyjątkiem,

- 1) skali - jest narysowana w skali b razy większej
- 2) przypadkowych różnic co do orientacji kolejnych, odpowiadających sobie na obu rysunkach, wektorów przemieszczeń.

Każda trajektoria stochastyczna spełniająca powyższe własności nosi nazwę *samopodobnej trajektorii stochastycznej* czyli, średnio rzecz biorąc, jest *niezmiennicza ze względu na skalowanie*. Oczywiście, oddalając się jeszcze bardziej (czyli przechodząc na coraz niższy poziom ziarnistości obrazu) doprowadzili byśmy do tego, że takie grupy złożone z trzech przemieszczeń o długości b^1 widoczne byłyby jedynie w postaci punktów, co znowu nie zmienia w niczym istotnym wyjściowego rysunku a, itd, itp; postępowanie to można kontynuować bez przeszkód gdyż jest ono ograniczone jedynie rozmiarem samej trajektorii.

Powyższe postępowanie można sformalizować pisząc dla każdego poziomu ziarnistości $k (= 0, 1, 2, \dots, j)$ następującą relację wynikania

$$N^{j-k}(b^k) \Rightarrow b^{j-k}(b^k); \quad (6.120)$$

przy czym k -ty poziom ziarnistości oznacza, że przelot o długości b^k jest traktowany jak jednostkowy a wszystkie pozostałe przeloty o długościach krótszych, które go poprzedzają są (w tej zdolności rozdzielczej) traktowane po prostu jak punkt. Tym samym, N^{j-k} przemieszczeń o długości b^k poprzedza (w średniej) przemieszczenie o długości b^{j-k} razy większe.

Można wykazać (patrz rozdz. ...), że nie tylko trajektoria jako całość tworzy rosnącą strukturę samopodobną ale także zbiór wszystkich punktów zwrotnych (oznaczonych na rysunku przez pełne kółka). Co więcej, wymiar fraktalny tego zbioru punktów wynosi $d_f = \beta$.

Wskazana tutaj własność samopodobieństwa w sensie stochastycznym jest podstawową cechą tzw. stochastycznych struktur fraktalnych, o których jest mowa w dalszej części. Zauważmy, że własność samopodobieństwa udało nam się łatwo dostrzec tylko dlatego, że zrezygnowaliśmy z nieuniknionych w rzeczywistości wspomnianych już fluktuacji przelotów. Innymi słowy, że stochastyczną strukturą samopodobną, bądź ogólniej fraktalną, mamy do czynienia wtedy gdy po przeprowadzeniu procedury regularyzacji (porządkowania) czyli po pozbyciu się fluktuacji (nieporządku)

struktura staje się samopodobna w sensie deterministycznym, bądź ogólniej mówiąc, staje się fraktalem deterministycznym, przynajmniej w granicy dużej liczby pokoleń. I odwrotnie, ze struktury deterministycznej można uzyskać stochastyczną przez wprowadzenie nieporządku, np. typu fluktuacji czyli w taki sposób aby w średniej nie traciły własności samopodobieństwa. Zatem, dla rzeczywistych błędów należy budować statystykę długości przelotów (mówiąc o częstoci występowania przelotów o poszczególnych długościach) i na tej podstawie wyznaczyć stosunek odpowiednich wag; budowanie takiej statystyki w postaci zamkniętej (a nie w postaci nieskończonej sumy) jest zasadniczym celem niniejszych rozważań.

Można teraz zadać fundamentalne pytanie: jak elementarna "masa" omawianej struktury stochastycznej skaluje się z liniowym rozmiarem obszaru w którym jest nagromadzona? Na pytanie to można odpowiedzieć bez trudu, korzystając z relacji (6.120) dla rzędu j oraz poziomu czarnistości k (traktując oczywiście b^k jako jednostkę). Mianowicie, ma miejsce równość

$$N^{j-k} = (b^{j-k})^\beta, \quad (6.121)$$

z której można wyznaczyć wykładnik β w postaci niezależnej od j oraz k

$$\beta = \frac{\ln(N)}{\ln(b)} \quad (6.122)$$

będącej bezpośrednią konsekwencją samopodobnego charakteru struktury; to właśnie wykładnik β nazywa się *wymiar samopodobieństwa* i oznacza d_s . Tym samym wymiar samopodobieństwa d_s , można traktować jako unikalną charakterystykę struktury samopodobnej. Jest to stwierdzenie słuszne nie tylko w tym konkretnym przypadku ale dla wszelkiego typu struktur fraktalnych (zarówno o charakterze stochastycznym jak też deterministycznym) dla których wymiar fraktalny jest zawsze dany w postaci ilorazu dwóch logarytmów.

W paragrafie 1.1.4 wskazujemy na progowy charakter błędów tzn. pokazujemy dla jakich wartości wykładnika β struktura jest trwała i nie ulega zamazaniu nawet po wykonaniu przez cząsteczkę wielkiej liczby przelotów.

6.5.2 Czynniki strukturalny przelotów Weierstrassa

Czynnik strukturalny przelotów Weierstrassa, $\bar{p}(k)$, zwany także *funkcją charakterystyczną przelotów Weierstrassa* jest zdefiniowany jako transformata Fouriera

$$\bar{p}(k) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp(-ikx) p(x) \quad (6.123)$$

przybierając (po podstawieniu formuły (6.119) i scałkowaniu) postać sumy szeregu geometryczno-trygonometrycznego

$$\bar{p}(k) = \left(1 - \frac{1}{N}\right) \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{N^j} \cos(kb^j); \quad (6.124)$$

czynnik strukturalny błędzenia Weierstrassa dany wyrażeniem (6.202) nosi nazwę funkcji Weierstrassa lub częściowej funkcji Weierstrassa-Mandelbrota. Funkcja ta posiada szereg istotnych własności matematycznych, które omówiliśmy w Dodatku B.

6.5.3 Przestrzenne równanie skalowania

W tym miejscu rodzi się zasadnicze pytanie o warunki w jakich $\bar{p}(k)$, wyrażone wzorem (6.202), daje się przedstawić (z dobrym przybliżeniem) w postaci zamkniętej? Odpowiedź na to pytanie jest dwuetapowa. Po pierwsze zauważmy, że $\bar{p}(k)$ spełnia następujące, niejednorodne równanie skalowania

$$\bar{p}(bk) = N\bar{p}(k) - (N-1)\cos(k), \quad (6.125)$$

co pozwala na poszukiwanie jego rozwiązania $\bar{p}(k)$ w postaci sumy rozwiązania ogólnego (regularnego, normalnego), $\bar{p}_n(k)$, równania niejednorodnego (6.125) oraz rozwiązania szczególnego (singularnego), $\bar{p}_s(k)$, równania jednorodnego

$$\bar{p}_s(bk) = N\bar{p}_s(k). \quad (6.126)$$

Kształt rozwiązania ogólnego jest już narzucony przez niejednorodność równania (6.125) tzn. $\cos(k)$; jest to zatem szereg potęgowy zawierający tylko parzyste potęgi zmiennej k , którego współczynniki musimy wyznaczyć. Robimy to standardowo, podstawiając ten szereg do równania (6.125) i przyrównując do siebie wyrażenia stojące przy tych samych potęgach k znajdujemy poszukiwane współczynniki. Stąd rozwiązanie ogólne otrzymujemy w postaci

$$\bar{p}_n(k) \approx 1 - D'k^2, \quad (6.127)$$

gdzie tzw. uogólniony współczynnik dyfuzji

$$D' = \frac{1}{2} \frac{1 - \frac{1}{N}}{1 - \frac{b^2}{N}}. \quad (6.128)$$

(Dokładniej rzecz biorąc, o współczynniku dyfuzji można mówić wtedy gdy zdefiniowany został średni czas potrzebny na wykonanie pojedynczego przelotu - tutaj przyjęliśmy go milcząco jako jednostkowy; będzie o tym obszernie mowa w dalszej części.) Ta postać współczynnika D' posłuży nam do dalszej analizy a zwłaszcza klasyfikacji rodzajów dyfuzji. Ograniczyliśmy się tutaj tylko do dwóch pierwszych wyrazów rozwinięcia gdyż zarówno rozwiązanie regularne jak i singularne interesuje nas tylko dla przypadku gdy $|k| \ll 1$ co oznacza, że poszukujemy rozwiązań opisującego przede wszystkim długie przeloty.

Po drugie, rozwiązanie singularne $\bar{p}_s(k)$ równania (6.126) projektujemy w postaci

$$\bar{p}_s(k) \approx -Q(|k|) |k|^{\beta'}, \quad (6.129)$$

przy czym funkcja przedwykładnicza posiada następującą własność,

$$Q(|bk|) = Q(|k|), \quad (6.130)$$

czyli może być wyrażona np. w postaci,

$$Q(|k|) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} A_n \exp(2\pi i n \frac{\ln(|k|)}{\ln(b)}), \quad (6.131)$$

funkcji cyklicznej zmiennej $\ln(|k|)$ o okresie $\ln(b)$, a więc w szczególności może być stałą, którą oznaczamy przez $D'_f (= A_0)$ - w niniejszym rozdziale, dla prostoty rozważań, ograniczymy się tylko do tego szczególnego przypadku; najogólniejszą postać funkcji Q a także jawną postać *fraktalnego współczynnika dyfuzji* D'_f wprowadziliśmy w Dodatku ..., korzystając z transformaty Mellina (patrz, Harry Bateman, Arthur Erdélyi, "Tables of Integral Transforms", Vol.I, McGraw-Hill Book Comp., Inc., New York 1954) oraz metody residuów (patrz, Krzysztof Maurin, "Analiza. Cz.II. Wstęp do analizy globalnej", PWN, Warszawa 1971) obliczania całek na płaszczyźnie zespolonej.

Wykładnik β' znajdujemy podstawiając wyrażenie (6.200) do równania (6.126). W ten sposób otrzymujemy, że

$$\beta' = \frac{\ln(N)}{\ln(b)} = \beta; \quad (6.132)$$

niestety, na tej drodze nie udaje się wyznaczyć fraktalnego współczynnika dyfuzji D'_f . Jest charakterystyczne, że ten wcześniej wprowadzony wykładnik β jest *de facto* odpowiedzialny za nieanalityczny charakter rozwiązania singularnego. Z kolei pojawienie się tego wykładnika było spowodowane samopodobnym charakterem przełotów Weierstrassa więc to *własność samopodobieństwa jest przyczyną istnienia rozwiązania singularnego*. Zatem wykładnik β może być traktowany jako podstawowy we wszelkiego rodzaju analizach a w tym klasyfikacjach.

Ostatecznie, łącząc (6.127) i (6.200) wraz z (6.132), znajdujemy strukturalny czynnik przełotów Weierstrassa w postaci,

$$\begin{aligned} \bar{p}(k) = \bar{p}_s(k) + \bar{p}_n(k) &\approx 1 - D'k^2 - D'_f |k|^\beta \\ &\approx \exp(-D'k^2 - D'_f |k|^\beta). \end{aligned} \quad (6.133)$$

Dalsze uproszczenie powyższego wzoru zależy od wartości wykładnika β . Mianowicie (pamiętając, że $|k| \ll 1$) otrzymujemy,

$$\bar{p}(k) \approx \begin{cases} 1 - D'k^2 \approx \exp(-D'k^2), & \text{dla sytuacji normalnej czyli } \beta > 2 \\ 1 - D'_f |k|^\beta \approx \exp(-D'_f |k|^\beta), & \text{dla sytuacji anomalnej czyli } \beta < 2; \end{cases}$$

przypadek marginalny gdy $\beta = 2$ wymaga innego, bardziej zaawansowanego podejścia (wykorzystującego transformatę Mellina oraz całkowanie przez residua) które omawiamy w dalszej części. Powyższa postać czynnika strukturalnego przełotów

Weierstrassa jest słuszną dla dowolnego wymiaru przestrzeni euklidesowej, w której zachodzą przełoty. Postać ta umożliwia znalezienie (w postaci funkcji a nie dystrybucji jak to ma miejsce we wzorach (6.201) oraz (6.119)) asymptotycznej postaci rozkładu $p(x)$.

6.5.4 Dyfuzja anomalna

W pierwszym kroku zbadamy w jakich warunkach średnia długość pojedynczego przełotu jest skończona a w jakich tak nie jest. Przeanalizujemy w tym celu wyrażenie

$$\langle |x| \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx p(x) |x| = (1 - \frac{1}{N}) \sum_{j=0}^{\infty} (\frac{b}{N})^j, \quad (6.134)$$

gdzie skorzystaliśmy z wzoru (6.119) i (6.123). Wyróżnić można tutaj dwa istotnie różne przypadki

$$1) \langle |x| \rangle < \infty$$

$$2) \langle |x| \rangle = \infty.$$

Z wyrażenia (6.134) wynika, że w przypadku 1) mamy do czynienia wtedy i tylko wtedy gdy $b/N < 1$ czyli gdy $\beta > 1$ podczas gdy w przypadku 2) wtedy i tylko wtedy gdy $b/N \geq 1$ czyli gdy $\beta \leq 1$. Jest interesującym rozważaniem obu sytuacji w połączeniu z analizą własności średniej z kwadratu pojedynczego przełotu $\langle x^2 \rangle$.

Zauważmy, że

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx p(x) x^2 = -\frac{d^2 \tilde{p}(k)}{dk^2} \Big|_{k=0} = (1 - \frac{1}{N}) \sum_{j=0}^{\infty} (\frac{b^2}{N})^j, \quad (6.135)$$

gdzie, tak jak poprzednio wykorzystaliśmy definicję (6.201) oraz wyrażenie (6.123). Analogicznie jak poprzednio, rozważmy dwie istotnie różne sytuacje,

$$1) \text{ normalną, gdy } \langle x^2 \rangle < \infty$$

$$2) \text{ anomalną, gdy } \langle x^2 \rangle = \infty;$$

Z sytuacją pierwszą mamy do czynienia wtedy i tylko wtedy gdy suma szeregu geometrycznego stojąca w wyrażeniu (6.135) jest zbieżna czyli gdy

$$\frac{b^2}{N} < 1 \equiv \beta > 2. \quad (6.136)$$

W rezultacie otrzymujemy, że

$$\langle x^2 \rangle = \frac{1 - \frac{1}{N}}{1 - \frac{b^2}{N}} = 2D' < \infty. \quad (6.137)$$

Powyższy związek jest ważny ponieważ umożliwia wyrażenie uogólnionego współczynnika dyfuzji, który jest wielkością makroskopową za pomocą wielkości mikroskopowej jaką jest średnia z kwadratu pojedynczego przelotu; jest to możliwe dzięki temu, że struktura przelotów ma charakter samopodobny (czyli przeloty zachodzące w różnych skalach tworzą zbiory podobne).

Zauważmy, że z istnienia ogólnej nierówności

$$\langle |x| \rangle^2 < \langle x^2 \rangle, \quad (6.138)$$

wynika, że w tym przypadku także

$$\langle |x| \rangle < \infty, \quad (6.139)$$

tzn. oba te przypadki są ze sobą ściśle skorelowane.

Należy zdawać sobie sprawę, że skończona wartość drugiego momentu $\langle x^2 \rangle$ (w związku ze skończoną wartością czynnika strukturalnego $\bar{p}(k)$ dla dowolnego wektora k) to warunek dostateczny i konieczny na istnienie rozkładu $p(x)$ w postaci gaussowskiej dla asymptotycznie dużych wartości $|x|$ (patrz Dodatek ...). Zatem, nie jest konieczne aby były skończone wyższe momenty zmiennej losowej x . Innymi słowy, w takim przypadku proces Weierstrassa jest równoważny procesowi Gaussa-Wienera czyli po prostu opisuje błędzenie przypadkowe zwane ruchami Browna.

Sytuacja druga ma miejsce wtedy i tylko wtedy gdy

$$\frac{b^2}{N} \geq 1 \equiv \beta \leq 2 \quad (6.140)$$

i w konsekwencji

$$\langle x^2 \rangle = \infty. \quad (6.141)$$

Powyższa sytuacja jest całkowicie zdekorrelowana z zachowaniem się pierwszego momentu absolutnego tzn. może on być w tej sytuacji zarówno skończony jak też nieskończony. Jednakże sytuacja gdy pierwszy moment absolutny jest nieskończony pociągga za sobą oczywiście (na mocy nierówności (6.138)) wniosek, że także drugi moment jest nieskończony. Analiza zachowania wyższych momentów nie jest już tutaj istotna.

Rysunek przedstawia przykładowe przeloty Weierstrassa: dwa dla przypadku 1) tzn. rysunek a dotyczy sytuacji gdy $2 < \beta (\approx 2.32)$, podczas gdy rysunek b dotyczy zasadniczo innej sytuacji gdy $1 < \beta (\approx 1.585) < 2$, wreszcie rysunek c dotyczy przypadku 2) gdy $\beta (\approx 0.9) < 1$. Widać, że są to trzy istotnie różne sytuacje reprezentujące kolejno, ruchy Browna (gdyż $\langle |x| \rangle < \infty$ oraz $\langle x^2 \rangle < \infty$, bardziej szczegółowe omówienie patrz Dodatek A), ograniczone przeloty Weierstrassa (gdyż $\langle |x| \rangle < \infty$ oraz $\langle x^2 \rangle = \infty$, patrz Dodatek B) oraz nieograniczone przeloty Weierstrassa (gdyż $\langle |x| \rangle = \infty$ oraz $\langle x^2 \rangle = \infty$, patrz Dodatek B).

W tym miejscu można postawić pytanie: *jak w realnym doświadczeniu będzie przejawiać się nieograniczony charakter średniej długości bądź dyspersji elementarnego przelotu?* Zauważmy, że pytanie to ma dużo ogólniejszy charakter i może dotyczyć dowolnej zmiennej losowej a nie tylko wektora elementarnego przelotu. Odpowiedź na nie jest dzisiaj stosunkowo prosta chociaż do środowiska fizyków docierała zaskakująco powoli (patrz Benoit B. Mandelbrot, "The Paul Lévy I knew" in "Lévy Flights and Related Topics in Physics", LNP Vol.450, eds. Michael F. Shlesinger, George M. Zaslavsky, Uriel Frisch (Springer, Berlin 1995) p.VIII - XII). Mianowicie, dokonajmy pierwszej serii o określonej liczbie pomiarów $n_1 \gg 1$ zmiennej losowej x i wyznaczmy dla tej serii pomiarów średnią długość $\langle |x| \rangle_1$ oraz kwadrat dyspersji $\langle x^2 \rangle_1$, następnie kontynuujmy nasze pomiary wydłużając serię pomiarową do $n_2 \gg n_1$ i obliczając ponownie te obie średnie, analogicznie obliczmy tę średnią dla następnych, silą rzeczy coraz dłuższych, serii pomiarowych (tzn. $n_1 \ll n_2 \ll \dots \ll n_j \ll \dots$). Otrzymaliśmy ciąg wyników, który przedstawiliśmy na rysunku a oraz b w funkcji n_j . (Przedstawione wyniki uzyskaliśmy na drodze symulacji Monte Carlo przelotów Weierstrassa sparametryzowanych przykładowo przez $N = 3$ oraz $b = 2$ co daje wykładnik $\beta \approx 1.585$; algorytm tej symulacji został omówiony w dalszej części.) Jak widać, w miarę wzrostu liczebności serii wzrasta też, miejscami nawet gwałtownie, średnia $\langle |x| \rangle$ oraz $\langle x^2 \rangle$. Zwiększanie liczby pomiarów nie stabilizuje średnich a wprost przeciwnie - im większa jest liczba pomiarów tym większa jest szansa, że w danej serii wystąpi tzw. *rzadkie zdarzenie* czyli ogromna wartość zmiennej losowej $|x|$ oraz x^2 w istotny sposób wpływająca na wynik końcowy pomiaru, że jej częstość występowania jest znikoma. To właśnie rzadkie zdarzenia (czyli z grubsza mówiąc, przeloty przynajmniej o rząd wielkości dłuższe od aktualnie wykonywanych) chronią trajektorię błędzącej cząsteczki przed zamazywaniem się w wyniku ogromnej liczby przelotów, wyrzucając cząsteczkę daleko poza obszar aktualnie wityzowany. Tym samym następuje separacja błędzeń realizowanych w różnych skalach długości - będzie o tym dokładniej mowa w dalszej części.

Dla porównania na rysunku b przedstawiono w taki sam sposób sytuację normalną uzyskaną analogicznie dla przelotów Weierstrassa ale sparametryzowanych przez większą wartość $N = 5$ przy tej samej wartości $b (= 2)$ co daje $\beta = 2.32$ (wyraźnie większe od progowej wartości $\beta = 2$). Jak widać, wartości średnie $\langle |x| \rangle$ oraz $\langle x^2 \rangle$ szybko się stabilizują osiągając przewidywaną wartość teoretyczną równą odpowiednio $4/3$ oraz 4 .

6.5.5 Rzadkie, ekstremalne zdarzenia

Korzystając z wcześniejszych rozważań, które doprowadziły do wzorów (6.121) oraz (6.122), można odpowiedzieć na głębsze pytanie *jak wielkość (długość), $|x_{max}|$, tego rzadkiego, pojedynczego zdarzenia (przelotu) skaluje się z całkowitą liczbą przelotów L ?* Zauważmy, że $|x_{max}|$ jest wartością maksymalną jaka pojawiła się w trakcie

tych L przelotów. Zatem dla dużej liczby przelotów L zachodzą relacje,

$$L = \sum_{j=0}^{j_{max}} N^j = \frac{N^{j_{max}+1} - 1}{N - 1} \approx \frac{1}{1 - \frac{1}{N}} N^{j_{max}}, \quad (6.142)$$

gdyż $N^{j_{max}} \gg 1$, przy czym j_{max} jest największą wartością j -ego pokolenia jaka pojawiła się w trakcie tych $L(\gg 1)$ przelotów, oraz

$$|x_{max}| = b_0 b^{j_{max}}, \quad (6.143)$$

z których, po wyeliminowaniu pomocniczej wielkości j_{max} , otrzymujemy poszukiwaną zależność

$$|x_{max}| \approx A L^{1/\beta}, \quad (6.144)$$

gdzie współczynnik $A = b_0(1 - 1/N)^{1/\beta}$.

Zauważmy przy okazji, że ze wzoru (6.142) wynika iż prawdopodobieństwo, $w(x_{max})$, wystąpienia pojedynczego przelotu o maksymalnej długości $|x_{max}|$ jest równe, z dobrym przybliżeniem, $1/L$. Zatem, na podstawie powyższego określenia prawdopodobieństwa $w(x_{max})$ oraz wzoru (6.144) otrzymujemy, że

$$w(x_{max}) \approx \frac{B}{|x_{max}|^\beta}, \quad (6.145)$$

gdzie współczynnik $B = A^\beta$.

Bez trudu można wykazać (korzystając z prostego wyrażenia, $L_1 = N^{j_{max}}$ na całkowitą liczbę elementarnych przelotów L_1), że $|x_{max}|$ skaluje się analogicznie z L_1 przy czym współczynnik proporcjonalności jest równy jedności. Z tego powodu czasami L_1 a nie L nazywa się "masą" błędzenia przypadkowego.

Powyższe rozważania, a w tym zwłaszcza wzór (6.144), są słuszne tylko dla $\beta < 2$ (co nie wynika wprost z przeprowadzonego oszacowania) gdyż tylko wtedy rzadkie zdarzenie może odegrać ważną rolę, w przeciwnym razie jego częstota występowania jest zbyt mała w porównaniu z częstotą występowania krótszych przelotów (przypadek marginalny $\beta = 2$ wymaga osobnego potraktowania).

Zwróćmy uwagę na dwa rodzaje średnich z jakimi mamy do czynienia w tym paragrafie - w następnym omawiamy trzeci rodzaj. Pierwszy rodzaj średnich to momenty (absolutne) $\langle |x|^n \rangle_L$, $n = 1, 2, \dots$, liczone wzdłuż trajektorii błędzącej cząsteczki i zależne od całkowitej liczby przelotów L , przy czym $\langle \dots \rangle_L$ oznacza po prostu średnią arytmetyczną ze wszystkich L przelotów. W przypadku asymptotycznie dużej liczby przelotów (dla każdego n) zachodzi związek

$$\langle |x|^n \rangle_{L \rightarrow \infty} = \langle |x|^n \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx p(x) |x|^n, \quad (6.146)$$

gdzie $\langle |x|^n \rangle$ jest drugim rodzajem średniej, który dla $n = 1$ oraz $n = 2$ był już dyskutowany w poprzednim paragrafie. W ogólności równość średnich

$$\langle \dots \rangle_{L \rightarrow \infty} = \langle \dots \rangle, \quad (6.147)$$

to nic innego jak *własność samośredniowania*.

W niniejszym rozdziale odpowiemy na istotne pytania dotyczące pierwszego rodzaju średnich, a mianowicie *jak momenty liczone wzdłuż trajektorii skalują się z L* ? W tym celu skorzystamy z przybliżonej zależności słusznej dla dużych wartości L usprawiedliwiającej zaniedbanie zarówno fluktuacji sekwencji przelotów jak też fluktuacji proporcji pomiędzy liczebnościami przelotów w poszczególnych rządach. Otrzymujemy,

$$\begin{aligned} \langle |x|^n \rangle_L &\approx \frac{(b^n)^0 N^{j_{\max}} + (b^n)^1 N^{j_{\max}-1} + (b^n)^2 N^{j_{\max}-2} + \dots + (b^n)^{j_{\max}} N^0}{L} \\ &= \frac{N^{j_{\max}}}{L} \sum_{j=0}^{j_{\max}} \left(\frac{b^n}{N}\right)^j = \frac{N^{j_{\max}}}{L} \left| \frac{\left(\frac{b^n}{N}\right)^{j_{\max}+1} - 1}{\frac{b^n}{N} - 1} \right| \\ &\approx \frac{N^{j_{\max}}}{L} \frac{\left(\frac{b^n}{N}\right)^{j_{\max}+1}}{\left| \frac{b^n}{N} - 1 \right|} \approx \frac{1}{L} \frac{1}{\left| 1 - \frac{N}{b^n} \right|} (b^n)^{j_{\max}}, \end{aligned} \quad (6.148)$$

gdzie indeks j_{\max} jest największą wartością rzędu (pokolenia) o numerze j jaka pojawiła się w trakcie L przelotów (patrz (6.142)); ponadto przyjąłmy tutaj, że $j_{\max} \gg 1$ (co jest nieco mocniejszym założeniem od $L \gg 1$). Zauważmy przy okazji, że ułamek $N^{j_{\max}-j}/L$, $j = 0, \dots, j_{\max}$, jest po prostu prawdopodobieństwem wystąpienia (wśród L przemieszczeń) takiego, które ma długość b^j .

Korzystając z powyższego wzoru oraz z wyrażenia (6.142) otrzymujemy po prostych przekształceniach,

$$\langle |x|^n \rangle_L \approx C_n L^{n/\beta-1} \approx \frac{C'_n}{L} |x_{\max}|^n, \text{ dla } \beta < n \quad (6.149)$$

gdzie współczynnik $C_n = A^n [1/(1 - N/b^n)]$ a $C'_n = C_n/A^n$. Warto zdawać sobie sprawę, że zainteresowani jesteśmy przede wszystkim przypadkiem $n = 1$ oraz $n = 2$.

6.5.6 Średnia po zespole statystycznym

Omówimy teraz dwie niezwykle ważne konsekwencje relacji skalowania (6.149). Mianowicie, odpowiemy na dwa pytania: 1) *Jak skaluje się z L średnia długość drogi jaką pokonuje cząsteczka w wyniku L przelotów?* 2) *Jak skaluje się z L średnia z kwadratu wypadkowego przemieszczenia cząsteczki w wyniku jej L przelotów?* Aby odpowiedzieć na te pytania należy najpierw określić z jakimi średnimi mamy tutaj do czynienia. W tym celu wprowadzimy *zespół statystyczny* złożony z ogromnej liczby L trajektorii (podobnych czyli stochastycznych replik), z których każda składa się z L przelotów. Mówiąc tutaj o średnich mamy na myśli średnie arytmetyczne po zespole statystyczny, które uzyskujemy w następujący sposób. Obliczamy w wyniku L przelotów, w przypadku 1), długość przebytej drogi, a przypadku 2) kwadrat wypadkowego przemieszczenia dla pierwszej trajektorii, potem dla drugiej, itd, wreszcie dla ostatniej trajektorii o numerze L i następnie obliczamy po prostu średnie arytmetyczne uzyskanych wyników. Istotnym tutaj jest to, że liczebność zespołu

statystycznego trajektorii jest taka sama jak liczba przelotów z których składa się każda trajektoria. Zbudowaliśmy w ten sposób *trzeci rodzaj średniej* - wszystkie trzy są niezwykle przydatne w naszych rozważaniach.

Rozważmy przypadek 1), oznaczając przez $S(L)$ długość pojedynczej trajektorii cząsteczki; wspomnianą powyżej średnią możemy zapisać w postaci następującej relacji skalowania,

$$\begin{aligned}\langle S(L) \rangle_L &= \langle |x_1| \rangle_L + \langle |x_2| \rangle_L + \dots + \langle |x_L| \rangle_L \\ &= L \langle |x| \rangle_L \approx C_1 L^{1/\beta} \approx C'_1 |x_{\max}|, \text{ dla } \beta < 1,\end{aligned}\quad (6.150)$$

przy czym skorzystaliśmy: a) z relacji skalowania (6.149) b) z definicji długości drogi $S(L) = |x_1| + |x_2| + \dots + |x_L|$, gdzie $|x_l|$, $l = 1, 2, \dots, L$, są długościami pojedynczych przelotów, będących oczywiście jakimiś potęgami współczynnika podobieństwa b , dalej z c) niemal oczywistej zależności $\langle |x_l| \rangle = \langle |x_{l'}| \rangle$, $l, l' = 1, 2, \dots, L$, (co pozwala na opuszczenie w tego typu średnich indeksu numerującego pojedynczy przelot) oraz z d) założenia, że średnia po ensemble statystycznym o liczebności L z dowolnej potęgi długości pojedynczego przelotu jest z dobrym przybliżeniem równa średniej z tej wielkości liczonej po dowolnie wybranej trajektorii składającej się z tej samej liczby L pojedynczych przelotów. Oczywiście, ze względu na nieuchronne fluktuacje, założenie to tym lepiej funkcjonuje im większa jest wartość L . To jest także powód dla którego oba typy średnich (pierwszego i trzeciego rodzaju) zostały oznaczone w taki sam sposób.

Rozważmy przypadek 2), oznaczając przez $X(L) = x_1 + x_2 + \dots + x_L$ wypadkowe przemieszczenie cząsteczki w wyniku L pojedynczych przelotów. W dalszym ciągu skorzystamy z założenia, że pojedyncze przeloty są statystycznie niezależne co prowadzi (po skorzystaniu z (6.149)) do następującej relacji skalowania,

$$\langle [X(L)]^2 \rangle_L = L \langle |x|^2 \rangle_L \approx C_2 L^{2/\beta} \approx C'_2 (x_{\max})^2 \quad (6.151)$$

gdzie $X(L) = x_1 + x_2 + \dots + x_L$. Oba powyższe przykłady jeszcze raz wskazują na zasadniczą rolę jaką pełni wymiar samopodobieństwa β w przelotach Weierstrassa. Wreszcie, co jest może najistotniejsze, pokazują że za tymi relacjami skalowania kryje się jedno i to samo, *kluczowe zjawisko występowania rzadkich, ekstremalnych zdarzeń* otwierające nowe pole badań w dziedzinie fizyki statystycznej i jej zastosowań.

6.5.7 Rozkład Pareto-Lévy'ego

Udowodnimy teraz następujące, kluczowe

Twierdzenie Lévy'ego: Niech dana będzie funkcja postaci (6.134) dla sytuacji anormalnej ($\beta < 2$) wówczas,

$$p(x \rightarrow \pm\infty) \sim \frac{1}{|x|^{d+\beta}}, \quad (6.152)$$

gdzie d jest wymiarem euklidesowym przestrzeni, w której zachodzą błędzenia.

Dowód jest trzyczęściowy a mianowicie dla trzech różnych zakresów β . Przytaczamy go tutaj w całości ze względu na jego centralne znaczenie dla naszego wykładu. Dla tych wszystkich zakresów naszym celem jest obliczenie transformaty Fouriera postaci,

$$p(x \rightarrow \pm\infty) \approx \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \exp(-ikx) \exp(-D'_f |k|^\beta). \quad (6.153)$$

Zauważmy, że do znalezienia *asymptotycznej* postaci $p(x)$ wystarczy skorzystać jedynie ze znajomości czynnika strukturalnego $\tilde{p}(k)$ dla $D'_f |k| \ll 1$; pozwala to na formalne rozciągnięcie granic całkowania od plus do minus nieskończoności (czyli to co się dzieje daleko w przestrzeni odwrotnej nie ma istotnego wpływu na to co się dzieje daleko w przestrzeni prostej), ułatwiając znacznie przeprowadzenie obliczeń.

Część I: $\beta < 1$

Przekształcimy stopniowo prawą stronę wyjściowego wyrażenia (6.153)

$$\begin{aligned} p(x \rightarrow \pm\infty) &\approx \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} dk \cos(k|x|) \exp(-D'_f |k|^\beta) \\ &= \frac{1}{\pi} \frac{1}{|x|} \int_0^{\infty} dk \left(\frac{d}{dk} \sin(k|x|) \right) \exp(-D'_f |k|^\beta) \\ &= \frac{1}{\pi} \frac{D'_f \beta}{|x|} \int_0^{\infty} dk |k|^{\beta-1} \sin(k|x|) \exp(-|k|^\beta) \\ &= \frac{1}{\pi} \frac{D'_f \beta}{|x|^{1+\beta}} \int_0^{\infty} dy y^{\beta-1} \sin(y) \exp(-D'_f (\frac{y}{|x|})^\beta). \end{aligned} \quad (6.154)$$

Aby wyznaczyć poszukiwaną, asymptotyczną postać $p(x)$ skorzystamy ze znanej relacji

$$\int_0^{\infty} dy y^{\beta-1} \sin(y) = \Gamma(\beta) \sin(\frac{\pi}{2}\beta). \quad (6.155)$$

Zatem ostatecznie (dodatkowe szczegóły patrz Dodatek ...),

$$p(x \rightarrow \pm\infty) \approx \frac{1}{\pi} \frac{D'_f}{|x|^{1+\beta}} \Gamma(1+\beta) \sin(\frac{\pi}{2}\beta) \quad (6.156)$$

przybierając tym samym postać Pareto-Lévy'ego.

Część II: $\beta = 1$

W tym marginalnym przypadku wyrażenie (6.153) przybiera prostszą postać,

$$p(x \rightarrow \pm\infty) \approx \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \exp(-ikx) \exp(-D'_f |k|). \quad (6.157)$$

Następnie, dzięki parzystości funkcji $\exp(-D'_f |k|)$, otrzymujemy

$$\begin{aligned} p(x \rightarrow \pm\infty) &\approx \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty dk \exp(-ikx) \exp(-D'_f |k|) \\ &+ \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty dk \exp(ikx) \exp(-D'_f |k|) \\ &= \frac{1}{\pi} \frac{D'_f}{(D'_f)^2 + x^2} \approx \frac{1}{\pi} \frac{D'_f}{x^2}, \text{ dla } |x| \gg (D'_f)^{1/2}. \end{aligned} \quad (6.158)$$

W tym przypadku, jak widać, rozkład $p(x)$ przybiera asymptotycznie postać Lorentzianu tożsamą z rozkładem Pareto-Lévy'ego.

Część III: $1 < \beta < 2$

Podobnie jak w poprzednich dwóch przypadkach, można zapisać

$$p(x \rightarrow \pm\infty) \approx \frac{1}{\pi} \int_0^\infty dk \cos(k|x|) \exp(-D'_f |k|^\beta). \quad (6.159)$$

W dalszym ciągu, po zamianie zmiennych, otrzymujemy

$$p(x \rightarrow \pm\infty) \approx \frac{1}{\pi} \int_0^\infty dy \cos(y) \exp(-D'_f v y^\beta), \quad (6.160)$$

gdzie podstawiliśmy $y = |x| k$ oraz $v = |x|^{-\beta}$; zauważmy, $D'_f v$ jest wielkością małą umożliwiającą rozwinięcie w szereg Taylora. Mianowicie,

$$\begin{aligned} p(x \rightarrow \pm\infty) &\approx \frac{1}{\pi} \int_0^\infty dy \exp(-D'_f v y) \cos(y) \exp(-D'_f v (y^\beta - y)) \\ &= \frac{1}{\pi} \int_0^\infty dy \exp(-D'_f v y) \cos(y) [1 - D'_f v (y^\beta - y) \\ &+ \frac{1}{2} (D'_f v)^2 (y^\beta - y)^2 + \dots] ; \end{aligned} \quad (6.161)$$

w dalszym ciągu skorzystamy z zależności

$$\int_0^\infty dy \exp(-D'_f v y) \cos(y) y^{\nu-1} = \frac{\Gamma(\nu)}{((D'_f v)^2 + 1)^{\nu/2}} \cos(\nu \arctg(\frac{1}{D'_f v})),$$

dla $\nu \geq 1$, (6.162)

która pozwala wyrazić rozkład $p(x)$ w następującej postaci asymptotycznej

$$\begin{aligned} p(x \rightarrow \pm\infty) &\approx -\frac{1}{\pi} \frac{1}{|x|} \left[\frac{D'_f v \Gamma(1+\beta)}{((D'_f v)^2 + 1)^{(1+\beta)/2}} \cos((1+\beta)\frac{\pi}{2}) + \mathcal{O}((D'_f v)^2) \right] \\ &\approx \frac{1}{\pi} \frac{D'_f}{|x|^{1+\beta}} \Gamma(1+\beta) \sin(\frac{\pi}{2}\beta), \end{aligned} \quad (6.163)$$

gdzie po drodze skorzystaliśmy także z równoważnej postaci

$$\int_0^{\infty} dy \exp(-D'_f v y) \cos(y) = \frac{D'_f v}{(D'_f v)^2 + 1}, \text{ dla } v = 1, \quad (6.164)$$

oraz z przybliżenia $\arctan(z \rightarrow \infty) \approx \pi/2$. W podsumowaniu tego twierdzenia zauważmy, że dla wszystkich zakresów β (sytuacją marginalną dla $\beta = 2$ zajmujemy się w dalszej części) otrzymaliśmy w końcu identyczną asymptotyczną postać rozkładu $p(x)$; uzyskaliśmy także coś więcej wykazując nie tylko, że $p(x)$ przybiera postać Pareto-Lévy'ego w granicy dużych wartości $|x|$ ale także znajdując wyrażenia na współczynniki przedwykładniczy co ma znaczenie wtedy gdy np. porównujemy przewidywania teoretyczne z danymi doświadczalnymi.

6.6 Spacery Weierstrassa-Mandelbrota

6.7 Multifraktalne błędzenie w czasie ciągłym

Przypuśćmy, że mamy do czynienia tylko z nieporządkiem wywołanym przez losowe głębokości lokalnych minimów energii potencjalnej substratu; niech głębokości te będą losowane z "wąskiego" rozkładu Gaussa

$$\rho(\mathcal{E}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(\mathcal{E} - \bar{\mathcal{E}})^2}{2\sigma^2}\right), \quad (6.165)$$

gdzie $\sigma \ll \bar{\mathcal{E}}$ oraz z dobrym przybliżeniem

$$\int_0^{2\bar{\mathcal{E}}} d\mathcal{E} \rho(\mathcal{E}) \approx \int_0^{\infty} d\mathcal{E} \rho(\mathcal{E}) \approx 1. \quad (6.166)$$

Stąd, rozkład wykładniczy (6.53) występujący w uśrednionej funkcji rozkładu czasów wycielkiwania (6.60) należy zastąpić przez powyższy (6.165). Wówczas wyrażenie (6.62) przechodzi w następujące

$$\begin{aligned} \phi(t) &= \int_0^{\infty} d\mathcal{E} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(\mathcal{E} - \bar{\mathcal{E}})^2}{2\sigma^2}\right) \\ &\times \gamma_0 \exp\left(-\frac{\mathcal{E}}{k_B T}\right) \exp\left(-\gamma_0 \exp\left(-\frac{\mathcal{E}}{k_B T}\right) t\right). \end{aligned} \quad (6.167)$$

Nastym zadaniem jest obliczenie momentu $\langle t^q \rangle$ rzędu q , gdzie q jest dowolną liczbą rzeczywistą; wykorzystamy w tym celu powyższe wyrażenie (6.167).

Zatem,

$$\langle t^q \rangle = \int_0^{\infty} d\mathcal{E} \rho(\mathcal{E}) \langle t^q \rangle_{\mathcal{E}}, \quad (6.168)$$

gdzie

$$\langle t^q \rangle_{\mathcal{E}} = \int_0^{\infty} dt t^q \phi_{\mathcal{E}}(t) = \Gamma(1+q) \cdot [\gamma_0 \exp(-\frac{\mathcal{E}}{k_B T})]^{-q}, \quad (6.169)$$

przy czym $\Gamma(1+q)$ jest funkcją gamma Eulera zdefiniowaną (przypomnijmy) następująco

$$\Gamma(1+q) = \int_0^{\infty} dy y^q \exp(-y). \quad (6.170)$$

Stąd,

$$\frac{\langle (\gamma_0 t)^q \rangle}{\Gamma(1+q)} = \int_0^{\infty} d\mathcal{E} \rho(\mathcal{E}) \left(\frac{1}{\gamma}\right)^{q\frac{\mathcal{E}}{\sigma}} = \int_0^{\infty} d\mathcal{E} \exp(G(\mathcal{E})), \quad (6.171)$$

przy czym skorzystaliśmy z oznaczenia (6.57) kładąc $\Delta = \sigma$ oraz

$$G(\mathcal{E}) = -\frac{(\mathcal{E} - \bar{\mathcal{E}})^2}{2\sigma^2} + q\frac{\bar{\mathcal{E}}}{k_B T} - \frac{1}{2} \ln(2\pi\sigma^2); \quad (6.172)$$

funkcję $G(\mathcal{E})$ można łatwo przekształcić do wygodniejszej postaci:

$$\begin{aligned} G(\mathcal{E}) &= -\frac{1}{2\sigma^2}(\mathcal{E} - \mathcal{E}^*)^2 + q\frac{\bar{\mathcal{E}}}{k_B T} + \frac{1}{2}q^2\left(\frac{\sigma}{k_B T}\right)^2 \\ &\quad - \frac{1}{2} \ln(2\pi\sigma^2), \end{aligned} \quad (6.173)$$

gdzie

$$\bar{\mathcal{E}} \leq \mathcal{E}^* = \bar{\mathcal{E}} + q\frac{\sigma^2}{k_B T} \leq 2\bar{\mathcal{E}}, \quad (6.174)$$

co nakłada proste ograniczenia na wykładnik potęgi q

$$q_{min} = 0 \leq q \leq \bar{\mathcal{E}}\frac{k_B T}{\sigma^2} = q_{max}. \quad (6.175)$$

Jak widać, funkcja $G(\mathcal{E})$ jest odwróconą parabolą posiadającą ostre maksimum dla $\mathcal{E} = \mathcal{E}^*$. Tym samym, dominującym wyrazem w całce po prawej stronie wyrażenia (6.171) będzie ten zawierający $G(\mathcal{E}^*)$ gdyż mamy tutaj po prostu do czynienia z gaussowską reprezentacją delty Diraca w punkcie \mathcal{E}^* . Zatem, wyrażenie (6.171) można zapisać, z dobrym przybliżeniem, w postaci

$$\frac{\langle (\gamma_0 t)^q \rangle}{\Gamma(1+q)} \approx \exp(G(\mathcal{E}^*)) = \rho(\mathcal{E}^*) \left(\frac{1}{\gamma}\right)^{q\frac{\mathcal{E}^*}{\sigma}} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \left(\frac{1}{\gamma}\right)^{-q}; \quad (6.176)$$

tego typu podejście nosi w literaturze nazwę "przybliżenia punktu siodłowego" i jest często używane w fizyce statystycznej. Skorzystaliśmy tutaj z jawnej postaci \mathcal{E}^* co

pozwoliło wyrazić $\rho(\mathcal{E}^*)$ i $(1/\gamma)^{\mathcal{E}^*_{\sigma}}$ w dogodnej formie, którą wprowadziliśmy już w rozdz.5.4.1 gdzie analizowaliśmy związek multifraktali stochastycznych z formalizmem termodynamiki

$$\begin{aligned}\rho(\mathcal{E}^*) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \left(\frac{1}{\gamma}\right)^{f(\eta(q))}, \\ \left(\frac{1}{\gamma}\right)^{\mathcal{E}^*_{\sigma}} &= \left(\frac{1}{\gamma}\right)^{-q\eta(q)},\end{aligned}\quad (6.177)$$

gdzie

$$\tau(q) = q\eta(q) - f(\eta(q)) = \frac{q^2}{2} \frac{\sigma}{k_B T} + q \frac{\bar{\mathcal{E}}}{\sigma} \quad (6.178)$$

oraz wprowadziliśmy oznaczenia

$$\begin{aligned}\eta(q) &= -q \frac{\sigma}{k_B T} - \frac{\bar{\mathcal{E}}}{\sigma} \\ f(\eta(q)) &= -\frac{q^2}{2} \frac{\sigma}{k_B T} = -\frac{1}{2} \frac{k_B T}{\sigma} \left(\eta(q) + \frac{\bar{\mathcal{E}}}{\sigma}\right)^2.\end{aligned}\quad (6.179)$$

Zauważmy, że mamy tutaj do czynienia z transformacją Legendre'a (stosowaną już w rozdz.5.4.1)

$$\begin{aligned}\frac{df(\eta)}{d\eta} &= q, \\ \frac{d\tau(q)}{dq} &= \eta.\end{aligned}\quad (6.180)$$

Wykładnik $\tau(q)$ jest związany bezpośrednio z wymiarem Renyi'ego; aby wyznaczyć ten wymiar należy dokonać transformacji $q \rightarrow q' = -q$ oraz $q' \rightarrow \bar{q} = 1$. Wówczas

$$D(\bar{q}) = \frac{\tau(\bar{q})}{1 - \bar{q}} = \frac{\bar{\mathcal{E}}}{\sigma} + \frac{1}{2} \frac{\sigma}{k_B T} - \frac{\bar{q}}{2} \frac{\sigma}{k_B T} \quad (6.181)$$

gdzie

$$1 - \frac{k_B T}{\sigma} \cdot \frac{\bar{\mathcal{E}}}{\sigma} \leq \bar{q} = 1 - q \leq 1 \quad (6.182)$$

W szczególnych przypadkach otrzymujemy

$$\begin{aligned}D(\bar{q} = 1 - \frac{k_B T}{\sigma} \cdot \frac{\bar{\mathcal{E}}}{\sigma}) &= \frac{3}{2} \frac{\bar{\mathcal{E}}}{\sigma} \\ D(\bar{q} = 0) &= \frac{\bar{\mathcal{E}}}{\sigma} + \frac{1}{2} \frac{\sigma}{k_B T} \\ D(\bar{q} = 1) &= \frac{\bar{\mathcal{E}}}{\sigma}.\end{aligned}\quad (6.183)$$

Należy podkreślić, że zarówno $\tau(q)$ jak też widmo lokalnych wymiarów fraktalnych $f(\eta(q))$ niesą identyczną informację o układzie gdyż są one powiązane transformacją Legendre'a. Zaletą używania widma $f(\eta(q))$ jest jego prosta "fizyczna" interpretacja mówiąca o tym jak skaluje się gęstość stanów $\rho(\eta)$. Mianowicie, korzystając z (6.174), (6.177) i (6.179) otrzymujemy natychmiast

$$\rho(\eta) = \gamma^{-f(\eta)}; \quad (6.184)$$

innymi słowy, skalowanie f pełni rolę wykładnika fraktalnego zbioru punktów posiadających wspólną cechę (lokalny czynnik skalujący) η .

6.8 Różne rozkłady potencjału w modelu dolinowym i ich wpływ na błędzenie przypadkowe

Podamy teraz alternatywną, prostą metodę umożliwiającą konstrukcję funkcji rozkładu czasów oczekiwania, $\phi(t)$, dla potencjału dolinowego, którego minima, \mathcal{E} , podlegają dowolnemu rozkładowi $p(\mathcal{E})$ (a nie tylko rozkładowi wykładniczemu (6.53)). Metodę tą zastosujemy do kilku charakterystycznych przykładów.

Podkreślamy, iż w dalszym ciągu rozważamy klasyczne (ponadbarierowe) przemieszczania błądzącej cząsteczki tzn. jej międziodolinowa częstość przeskoków jest dana w postaci wyrażenia (6.56). Metoda polega na posługiwaniu się rozkładem nie dla zmiennej \mathcal{E} ale dla zmiennej złączonej $\nu(\mathcal{E})$ czyli, po prostu, polega na zamianie zmiennych. Mianowicie, dzięki niezmienniczości prawdopodobieństwa dysponujemy równaniem

$$f(\nu) = p(\mathcal{E}) \left[\frac{d\nu(\mathcal{E})}{d\mathcal{E}} \right]^{-1} = -k_B T \cdot p \left(-k_B T \ln \left(\frac{\nu}{\nu_0} \right) \right) \frac{1}{\nu}, \quad (6.185)$$

z którego wyznaczamy poszukiwany rozkład $|f(\nu)|$. Korzystając z tego rozkładu oraz z pierwszego wzoru (6.29) i wyrażenia (6.17) otrzymamy dla modeli typu dolinowego, że

$$\begin{aligned} \phi(t) &= \int_{\nu_0}^0 d\nu f(\nu) \nu \exp(-\nu t) = k_B T \int_0^{\nu_0} d\nu p \left(-k_B T \ln \left(\frac{\nu}{\nu_0} \right) \right) \exp(-\nu t) \\ &= \frac{k_B T}{t} \int_0^{\nu_0 t} dy p \left(-k_B T \ln \left(\frac{y}{\nu_0 t} \right) \right) \exp(-y), \end{aligned} \quad (6.186)$$

gdzie ponownie dokonaliśmy prostej zamiany zmiennej $\nu \Rightarrow y = \nu t$. Otrzymaliśmy wzór, który zastosujemy do analizy charakterystycznych przykładów dotyczących różnych rodzajów modelu dolinowego.

Przykład 1

Przypuśćmy, że rozkład prawdopodobieństwa wystąpienia doliny potencjału o jakiejś głębokości \mathcal{E} jest zadany (w omawianej wcześniej) postaci wykładniczej (6.53);

wynika stąd, że

$$\phi(t) = \frac{1}{t^{1+\alpha}} \frac{\alpha}{(\nu_0)^\alpha} \int_0^{\nu_0 t} dy y^\alpha \exp(-y), \quad (6.187)$$

czyli dla asymptotycznie długich czasów

$$\phi(t \rightarrow \infty) \approx \frac{1}{t^{1+\alpha}} \frac{\alpha}{(\nu_0)^\alpha} \Gamma_{Euler}(1+\alpha). \quad (6.188)$$

Jest to wynik, który już uzyskaliśmy wcześniej (patrz (6.66)) a tutaj posłużył nam do przetestowania metody.

Dla porównania przeprowadzimy teraz analogiczne obliczenia dla modelu barierowego. Należy podkreślić, że w modelu barierowym (patrz rys.??) wysokości lewej i prawej bariery są od siebie niezależne co prowadzi do nieco innego sposobu uśredniania w wyrażeniu na $\phi(t)$ w porównaniu z modelem dolinowym. Mianowicie,

$$\phi(t) = \int_0^\infty d\mathcal{E} \int_0^\infty d\mathcal{E}' p(\mathcal{E}) p(\mathcal{E}') \phi_{\mathcal{E}\mathcal{E}'}(t), \quad (6.189)$$

gdzie

$$\phi_{\mathcal{E}\mathcal{E}'}(t) = [\nu_1(\mathcal{E}) + \nu_1(\mathcal{E}')] \exp(-[\nu_1(\mathcal{E}) + \nu_1(\mathcal{E}')]t), \quad (6.190)$$

przy czym teraz $\nu_1(\mathcal{E})$ oznacza jednostronną częstość przeskoków. Przechodząc w (6.189) od zmiennych całkowania typu \mathcal{E} do zmiennych typu ν_1 otrzymujemy wzór,

$$\begin{aligned} \phi(t) &= \int_0^{\nu_{0,1}} d\nu_1 \int_0^{\nu_{0,1}} d\nu'_1 f(\nu_1) f(\nu'_1) (\nu_1 + \nu'_1) \\ &= (k_B T)^2 \int_0^{\nu_{0,1}} d\nu_1 \int_0^{\nu_{0,1}} d\nu'_1 p\left(-k_B T \ln\left(\frac{\nu}{\nu_{0,1}}\right)\right) p\left(-k_B T \ln\left(\frac{\nu'}{\nu_{0,1}}\right)\right) \\ &\times \left(\frac{1}{\nu_1} + \frac{1}{\nu'_1}\right) \exp(-(\nu_1 + \nu'_1)t) \\ &= \frac{(k_B T)^2}{t} \int_0^{\nu_{0,1} t} dy \int_0^{\nu_{0,1} t} dy' p\left(-k_B T \ln\left(\frac{y}{\nu_{0,1} t}\right)\right) p\left(-k_B T \ln\left(\frac{y'}{\nu_{0,1} t}\right)\right) \\ &\times \left(\frac{1}{y} + \frac{1}{y'}\right) \exp(-(y + y')), \end{aligned} \quad (6.191)$$

który zostanie przez nas zastosowany do obliczenia rozkładu $\phi(t)$ dla różnych wariantów modelu barierowego.

Przykład 2

Przypuścimy, że wysokości barier \mathcal{E} są zadane rozkładem wykładniczym (6.53) gdzie teraz \mathcal{E} oznacza wysokość bariery potencjału - lewą bądź prawą (patrz rys.??).

Stąd i z ogólnego wzoru (6.191) otrzymujemy wyrażenie

$$\begin{aligned}\phi(t) &= \frac{1}{t^{1+2\alpha}} \left(\frac{\alpha}{(\nu_{0,1})^\alpha} \right)^2 \int_0^{\nu_{0,1}t} dy \int_0^{\nu_{0,1}t} dy' y^\alpha y'^\alpha \\ &\times \left(\frac{1}{y} + \frac{1}{y'} \right) \exp(-(y+y')), \end{aligned} \quad (6.192)$$

które dla asymptotycznie długiego czasu przybiera postać

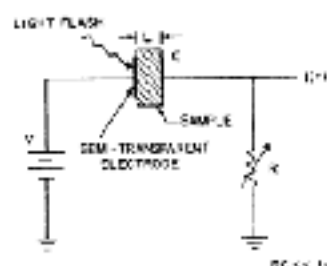
$$\phi(t \rightarrow \infty) \approx \frac{2}{t^{1+2\alpha}} \left(\frac{\alpha}{(\nu_{0,1})^\alpha} \right)^2 \Gamma_{Euler}(\alpha) \Gamma_{Euler}(1+\alpha). \quad (6.193)$$

Jak widać oba Przypadki 1A i 2A dają potęgową zależność rozkładu $\phi(t)$ dla asymptotycznie długich czasów różniąc się zarówno wykładnikami potęg jak i czynnikami przedpotęgowymi.

EXPERIMENTAL BASIS OF ANOMALOUS TRANSPORT AND DIFFUSION IN CONDENSED MATTER

Scharfe: PR B (1970), Pfister: PRL (1974, 1976),
Pfister and Scher: PR B (1977)

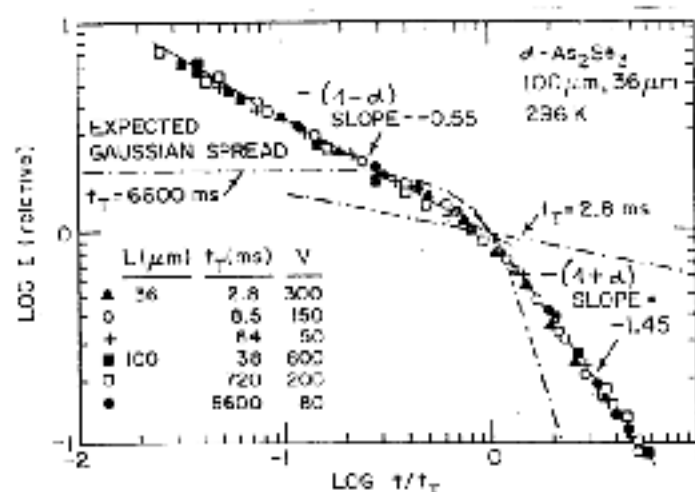
**Experimental setup for xerographic copying process:
transient photoconductivity measurement**



Measurement of time dependent current $I(t)$
induced by holes moving across the sample

Rysunek 6.1: Schematyczny układ elektryczny do pomiaru relaksacji fotoprądu w amorficznych filmach.

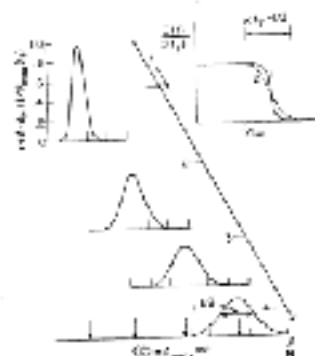
Universality of current shape for amorphous binary chalcogenide $\alpha\text{-As}_2\text{Se}_3$: transient current vs. time



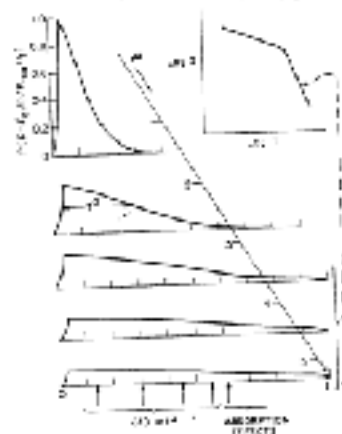
Log log plots of (relative) hole transient current $I(t)/I(t_T)$ vs. (relative) time t/t_T .

Rysunek 6.2: Relaksacja fotoprądu zmierzona w amorficznym $\alpha\text{-As}_2\text{Se}_3$.

Gaussian and non-Gaussian carrier propagators in an electric field

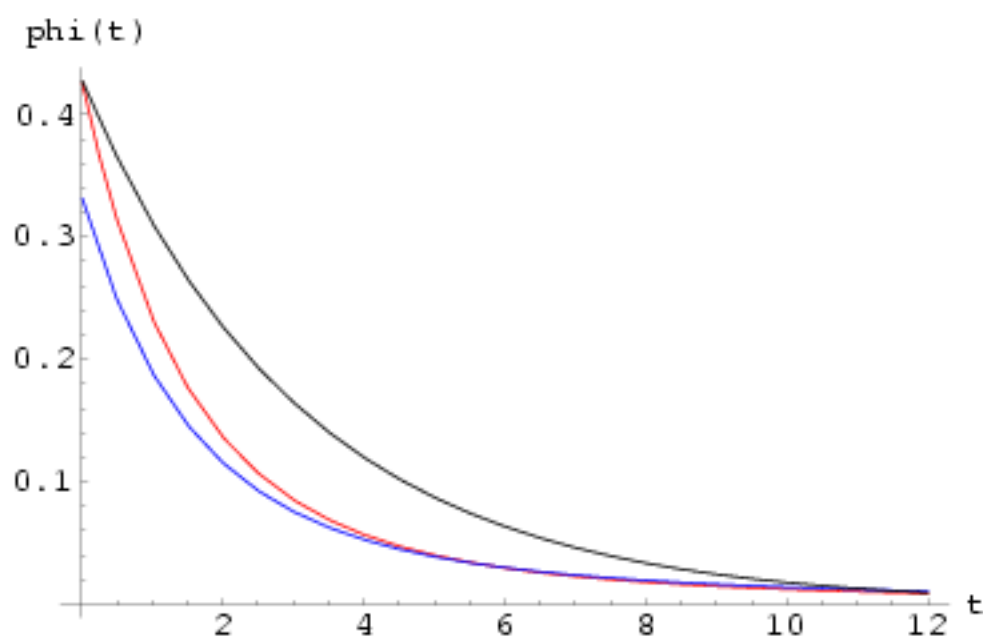


Spatial-temporal Gaussian distribution (based on the Poisson waiting-time distribution)

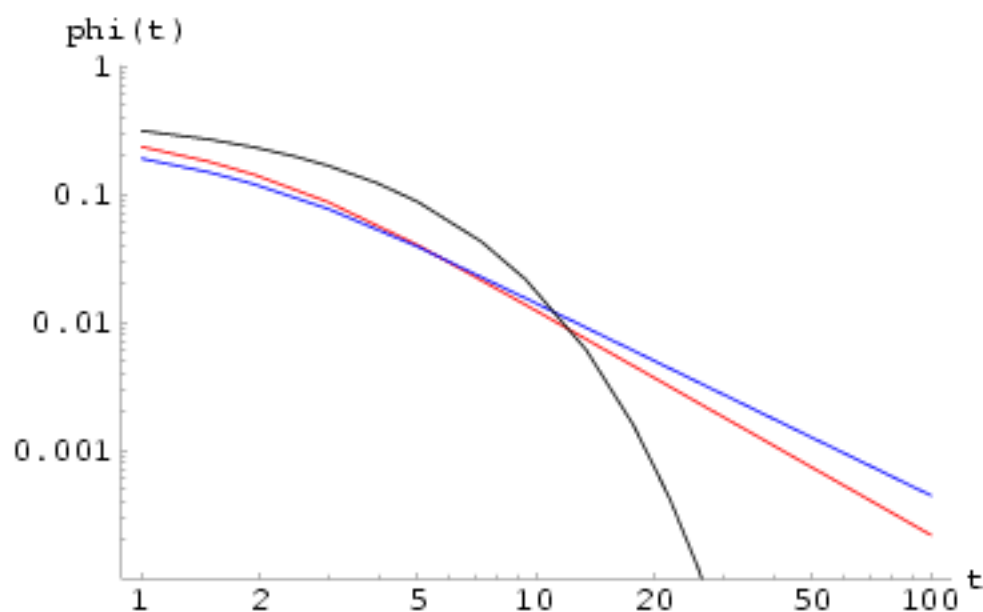


Spatial-temporal non-Gaussian distribution (based on broad waiting-time distribution)

Rysunek 6.3: Relaksacja fotoprądu dla rozkładu Gaussa (górną część rysunku) oraz dla rozkładu Pareto-Lévy'ego (dolną część).



Rysunek 6.4: Potęgowa zależność rozkładu prawdopodobieństwa czasów oczekiwania ϕ od czasu t dana wzorem (6.66) dla wykładników $\alpha = 0.75$ (linia czerwona) i $\alpha = 0.50$ (linia niebieska) oraz $\gamma_0 = 1$. Zauważmy, że dla $t = 0$ rozkład $\phi(t = 0) = \frac{\alpha}{1+\alpha}$ czyli dla $\alpha = 0.75$ wynosi około 0.43 natomiast dla $\alpha = 0.50$ około 0.33. Dla porównania przedstawiono wykładniczą zależność ϕ od czasu t daną wyrażeniem (6.67) (czarna linia) dla $\alpha = 0.75$.



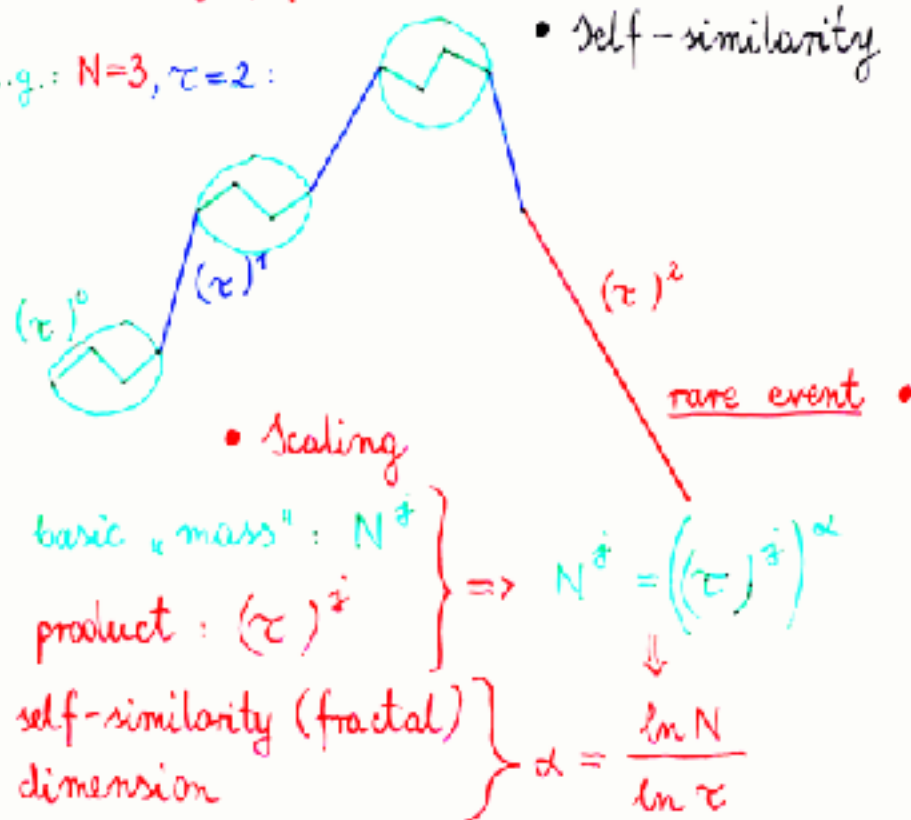
Rysunek 6.5: Potęgowa zależność rozkładu prawdopodobieństwa czasów oczekiwania ϕ od czasu t dana wzorem (6.66) a przedstawiona w skali $\log - \log$ dla przypadków przedstawionych na rys.6.4 tzn. dla wykładników $\alpha = 0.75$ (linia czerwona) i $\alpha = 0.50$ (linia niebieska) oraz $\gamma_0 = 1$. Dla porównania przedstawiono wykładniczą zależność ϕ od czasu t daną wyrażeniem (6.67) (czarna linia) dla $\alpha = 0.75$.

• Hierarchical WTD $\phi(t)$

$$\phi(t) = \sum_{j=0}^{\infty} \underbrace{g''(j)}_{\left(1-\frac{1}{N}\right) \cdot \frac{1}{N^j}} \cdot \underbrace{\frac{1}{\tau_0 \cdot (\tau)^j} \cdot e^{-\frac{t}{\tau_0(\tau)^j}}}_{\phi_j(t)}$$

$$\frac{g''(j+1)}{g''(j)} = \frac{1}{N}$$

e.g.: $N=3, \tau=2$:



Rysunek 6.6: Schematycznie przedstawiona uporządkowana hierarchia średnich czasów wycieknięcia opisana dyskretyzowaną funkcją rozkładu $\phi(t)$ przykładowo dla $N = 3$ i $\tau = 2$. Ponadto, przedstawiono własności samopodobieństwa i skalowania oraz zdefiniowano pojęcie rzadkiego zdarzenia.

Część IV

Extreme Value Theory

In the present work we match the biased Hierarchical Continuous-Time Random Flight (HCTRF) on a regular lattice (based on hierarchical waiting-time distribution) and the Extreme Event Theory (EVT). This approach extends the understanding of the anomalous transport and diffusion (for example, found in some amorphous, vitreous solids as well as in conducting and light-emitting organic polymers). Both independent approaches were developed in terms of random-trap or valley model where the disorder of energy landscape is exponentially distributed while the corresponding mean residence times in traps obey the power-law. This type of disorder characterizes several amorphous (even used commercially) materials which makes it possible to apply the HCTRF formalism. By using the EVT we additionally show that the rare (stochastic) events are indeed responsible for the transport and diffusion in these materials.

6.9 Introduction and motivation

The variety of observed relaxation phenomena in condensed and soft matter are related to transport and/or diffusion of atoms, particles, carriers, defects, excitons and complexes [1] (and refs. therein). In fact, the transport and diffusion are regarded as a paradigm of irreversible behaviour of many ordered and disordered systems. A universal feature of a disordered system is the temporal complex pattern, where the Debye-relaxation is no longer obeyed. The sentence which we quote after Scher and Montroll [2] characterizes well the straightforward link between physics of anomalous transient-time dispersion in an amorphous substance and its application. *The development of modern photocopying machines has motivated experimental work on amorphous materials, some of which display anomalous transport properties.*

The theory of carrier transport in some amorphous insulators (such as the commercially used vitreous As_2Se_3) and in some amorphous charge-transfer complexes of organic polymers (as the commercially used trinitrofluorenone mixed with polyvinylcarbazole, TNF-PVK) provides canonical examples of

- (i) continuous-time random flights and walks, and
- (ii) broad- or long-tailed waiting-time distribution between steps.

More precisely, the generic description of the dispersive transport and diffusion [3] found in the canonical experiments on transient current in an amorphous medium (induced by flash-light [4, 5, 6, 2, 7] or voltage pulse [9] and refs. therein) is given indeed by the Hierarchical Continuous-Time Random Flight formalism⁴ [10, 11, 12, 13, 14]. The principal aim of my lecture is to express this description in terms of the Extreme Value Theory (EVT) [15, 16, 17]. Such an approach shows that rare (stochastic) events are indeed responsible for the transport and diffusion in these materials.

⁴We distinguish between particle flights and walks as the former are instantaneous while the latter ones need some time to move between the traps.

The paper consists of two parts. The first part (Sec.6.10) includes remarks considering the basic elements of HCTRF and particularly, the averaged over disorder, hierarchical waiting-time distribution and its scale-invariance as the main property. In the second part (Sec.6.11) we develop the EVT in the context of the random-trap or valley model where disorder is due to the energetic depth of the traps (which are exponentially distributed) and by the corresponding mean residence times (which obey then the power-law).

6.10 Basic elements of the biased Hierarchical Continuous-Time Random Flight

The most spread models describing transport and diffusion in disordered substrates are based on the Continuous-Time Random Walk formalism. The major simplification in these models is that the disordered energetic landscape of the substrate can be described by an exponential distribution and incorporated into a regular lattice. In this work we consider single particle random instantaneous hops (flights) between regularly displaced valleys which have, however, different depths; the mountain peaks have all at the same energy level when a bias is absent (which justifies the name of the model), cf. Fig6.7

In the case when biased (constant) force F is present the potential is simply modified as it is shown in Fig.6.8.

Waiting-time distribution. The pausing or residence time t in a given trap (between the successive hops) is a stochastic variable whose statistics is defined by the normalized waiting-time distribution $\psi_\varepsilon(t)$. This basic quantity here is the sharp probability density that the particle will perform its next hop exactly at time t after having waited until this instant in a trap of depth ε . The simplest but realistic example is provided by the exponential waiting-time distribution of a local in space Poisson process

$$\psi_\varepsilon(t) = \frac{1}{\tau(\varepsilon)} \exp\left(-\frac{t}{\tau(\varepsilon)}\right) \quad (6.194)$$

where the factor $1/\tau(\varepsilon)$ is the probability density per unit time or rate of transition to a neighbouring site; the second factor is the probability that no hop has occurs until time t .

As we consider here only thermally activated over-barrier hops in the presence of a constant external bias, we can use asymmetric transition rates in the form

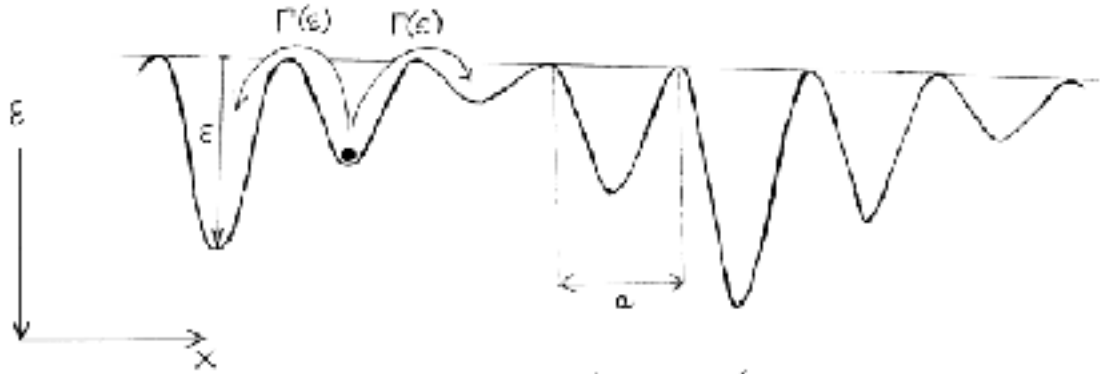
$$\Gamma_\pm(\varepsilon) = \Gamma_0 \cdot \exp\left(-\beta' \cdot \left(\varepsilon \mp \frac{1}{2}Fa\right)\right), \quad (6.195)$$

where

$$\beta' = \begin{cases} (k_B T)^{-1}, & \text{for the Hopf-Arrhenius (HA) law} \\ (k_B \Theta)^{-1}, & \text{for the Vogel-Tamm-Vulcher (VTF) law} \end{cases} \quad (6.196)$$

Random-trap or valley model

- $\Gamma(\varepsilon) = \Gamma_0 \cdot \exp(-\varepsilon/k_B T)$



- $g(\varepsilon) = \frac{1}{\langle \varepsilon \rangle} \cdot \exp(-\varepsilon/\langle \varepsilon \rangle)$

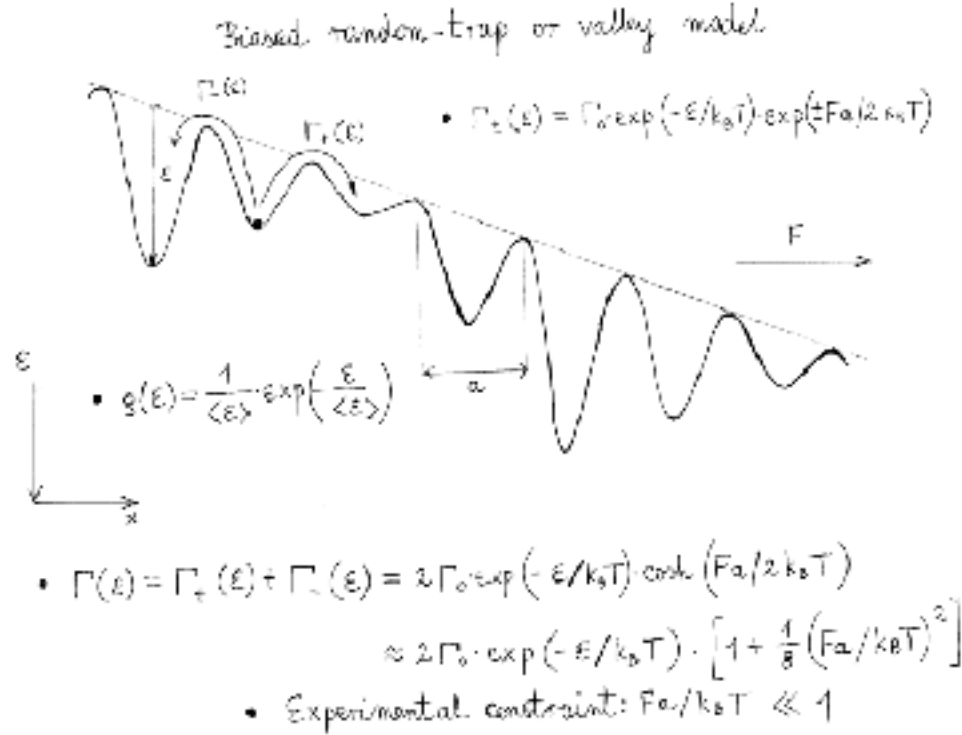
Rysunek 6.7: Schematic representation of the valley or random-trap model when bias is absent. All valleys are equally spaced, but have different depths. The mountain peaks are all the same energy.

where k_B is the Boltzmann constant, T is the absolute temperature, and $\Theta = T - T_g > 0$, where T_g is the transition temperature to the glass phase. Note that in expression (6.195) the external force is denoted by F , the lattice constant by a and Γ_+ is the transition rate along the direction of external force while Γ_- is the one in the opposite direction. Hence, the approximate equality (in the second line) in expression

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau(\varepsilon)} &= \Gamma_-(\varepsilon) + \Gamma_+(\varepsilon) = 2\Gamma_0 \cdot \exp(-\beta'\varepsilon) \cosh(\beta'Fa) \\ &\approx 2\Gamma_0 \cdot \exp(-\beta'\varepsilon) \left[1 + \frac{1}{8}(\beta'Fa)^2 \right], \end{aligned} \quad (6.197)$$

gives the second-order effect in the applied field, i.e. quadratically depends on the small quantity $\beta'Fa$. Fortunately, in all our discussions we have $\beta'Fa \ll 1$ as this is an obvious experimental constraint justifying the restriction only to the first-order effect in the applied field in all our considerations.

Sojourn probability. It is useful to introduce the sojourn probability $\Psi_\varepsilon(t)$ that the particle remains at a lattice site at least until time t without any hop; and is



Rysunek 6.8: Schematic representation of the valley model shown in Fig.6.7 when biased, constant force F is present. All mountain peaks are now displaced along a tangent straight line.

defined by using the waiting-time distribution

$$\Psi_{\varepsilon}(t) = \int_0^{\infty} dt' \psi_{\varepsilon}(t') \quad (6.198)$$

which in the case of a local Poisson process described by (6.194) assumes the simple exponential form

$$\Psi_{\varepsilon}(t) = \exp\left(-\frac{t}{\tau(\varepsilon)}\right). \quad (6.199)$$

In our model the averaging of this distribution over disorder is required to calculate the full propagator. How to perform this averaging is the essential problem considered below.

The structure factor of the biased random walk. Before we calculate the propagator we need to define the structure factor of the biased random walk. This definition requires the knowledge of the (stationary) spatial (single-hop) transition probabilities, p_{\pm} , along and against the applied force, respectively, and includes here (for

simplicity) the transitions only to the nearest-neighbours. Then

$$p_{\pm} = \frac{\Gamma_{\pm}(\varepsilon)}{\Gamma_{-}(\varepsilon) + \Gamma_{+}(\varepsilon)} \approx \frac{1}{2} \left(1 \pm \frac{1}{2} \beta' F a \right), \quad (6.200)$$

and the corresponding spatial probability density

$$p(x) = p_{+} \delta(x - a) + p_{-} \delta(x + a). \quad (6.201)$$

Hence, the structure factor of the biased random walk is defined as the Fourier transform of $p(x)$

$$\bar{p}(k) = \cos(ak) - i \cdot (p_{+} - p_{-}) \sin(ak) \approx \cos(ak) - \frac{i}{2} \beta' F a \cdot \sin(ak); \quad (6.202)$$

here again only the first-order effect in the applied field was taken into account.

The propagator. The waiting-time distribution and sojourn probability averaged over disorder are, together with the structure factor, the relevant quantities to construct the full propagator considered in this paragraph.

The motion of the particle consists of a sequence of alternative events defined by the waiting in a given trap and next the hop to the neighbouring one. Correspondingly, the propagator consists of an unrestricted superposition of the n -step partial propagators

$$P_{\varepsilon_0, \varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon}(X, t) = P_{\varepsilon \leftarrow \varepsilon_0}(X, t; n = 0) + \sum_{n=1}^{\infty} P_{\varepsilon_0 \varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_{n-1}, \varepsilon}(X, t; n) \quad (6.203)$$

where the multi-step propagators (defined as the probability density of finding a particle at position X at time t within n steps over a sequence of traps which have depths $\varepsilon_0, \varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_{n-1}, \varepsilon$) can be expressed as follows,

$$\begin{aligned} P_{\varepsilon_0 \leftarrow \varepsilon}(X, t; n = 0) &= \delta(X) \cdot \Psi_{\varepsilon_0 \leftarrow \varepsilon}(t), \\ P_{\varepsilon_0, \varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_{n-1}, \varepsilon}(X, t; n) &= \int_0^t dt_n \int_0^{t_n} dt_{n-1} \dots \int_0^{t_2} dt_2 \int_0^{t_1} dt_1 \\ &\int_{-\infty}^{\infty} dx_n \int_{-\infty}^{\infty} dx_{n-1} \dots \int_{-\infty}^{\infty} dx_2 \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \\ &\psi_{\varepsilon_0}(x_1, t_1) \psi_{\varepsilon_1}(x_2 - x_1, t_2 - t_1) \dots \\ &\psi_{\varepsilon_{n-1}}(x_n - x_{n-1}, t_n - t_{n-1}) \delta(X - x_n) \Psi_{\varepsilon}(t - t_n), \\ n &= 1, 2, 3, \dots \end{aligned} \quad (6.204)$$

where the full waiting-time distribution, $\psi_{\varepsilon}(x, t) \stackrel{\text{def}}{=} p(x) \cdot \psi_{\varepsilon}(t)$, means the sharp probability density of a single displacement x just at time t when the particle stayed whole the time (from 0 to t) at a given trap. As it is seen, the terms with $n \geq 1$ are n -fold convolutions. I.e., for the n -step partial propagator the walker performs exactly n single steps while the last n th one is just under way (in general it is not finished).

It should be admitted that the initial condition is not visible here because it is the same for each partial propagator. This condition has a non-stationary character and says that initially the particle was surely at the origin.

The average propagator. Now, to obtain the average propagator we should average the above expression by using the distribution $\rho_{\varepsilon_0, \varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_{n-1}, \varepsilon}$ in the factorized form, i.e. $\rho(\varepsilon_0, \varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_{n-1}, \varepsilon) = \rho(\varepsilon_0)\rho(\varepsilon_1) \dots \rho(\varepsilon_{n-1})\rho(\varepsilon)$, as the depths of traps are, by definition, statistically independent. The key point of our consideration is given by the exponential form of the single-trap distribution

$$\rho(\varepsilon) = \frac{1}{\langle \varepsilon \rangle} \cdot \exp\left(-\frac{\varepsilon}{\langle \varepsilon \rangle}\right). \quad (6.205)$$

By applying waiting-time distribution ψ_ε and $\rho_{\varepsilon_0, \varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_{n-1}, \varepsilon}$ in the factorized form together with expression (6.205) into (6.204) we get the average propagator in the form

$$P(X, t) = \sum_{n=0}^{\infty} P(X, t; n) \quad (6.206)$$

where the partial, average n -step propagators are

$$\begin{aligned} P(X, t; n=0) &= \delta(X)\Psi(t), \\ P(X, t; n) &= \int_0^t dt_n \int_0^{t_n} dt_{n-1} \dots \int_0^{t_2} dt_2 \int_0^{t_1} dt_1 \\ &\quad \int_{-\infty}^{\infty} dx_n \int_{-\infty}^{\infty} dx_{n-1} \dots \int_{-\infty}^{\infty} dx_2 \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \\ &\quad \psi(x_1, t_1) \psi(x_2 - x_1, t_2 - t_1) \dots \\ &\quad \psi(x_n - x_{n-1}, t_n - t_{n-1}) \delta(X - x_n) \Psi(t - t_n), \\ n &= 1, 2, 3, \dots \end{aligned} \quad (6.207)$$

and the average waiting-time distributions and sojourn probability are given by

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= p(x) \cdot \psi(t), \quad \psi(t) = \int_0^{\infty} d\varepsilon \rho(\varepsilon) \cdot \psi_\varepsilon(t), \\ \Psi(t) &= \int_0^{\infty} d\varepsilon \rho(\varepsilon) \cdot \Psi_\varepsilon(t). \end{aligned} \quad (6.208)$$

After the Fourier and Laplace transformations of the convolutions (6.207) we get the geometric series which can be written in a simple, closed form

$$\begin{aligned} \tilde{P}(k, s) &= \frac{\tilde{\Psi}(s)}{1 - \tilde{\psi}(k, s)}, \\ \tilde{\psi}(k, s) &= \tilde{p}(k) \cdot \tilde{\psi}(s), \quad \tilde{\Psi}(s) = \frac{1 - \tilde{\psi}(s)}{s}, \end{aligned} \quad (6.209)$$

where $\tilde{f}(\dots)$ means the Fourier and/or Laplace transform of function $f(\dots)$. We should find now an explicit asymptotic form of the waiting-time distribution.

6.10.1 Scaling relation obeyed by the waiting-time distribution

It can be easily found that the average waiting-time distribution, given by the second relation in (6.208) combined with (6.194), has an approximate form

$$\psi(t) \approx \left(1 - \frac{1}{N}\right) \cdot \int_0^\infty d\xi \frac{1}{N\xi} \cdot \frac{1}{\tau_0 \cdot (\tau')^\xi} \cdot \exp\left(-\frac{t}{\tau_0 \cdot (\tau')^\xi}\right) \quad (6.210)$$

or

$$\tilde{\psi}(s) \approx \left(1 - \frac{1}{N}\right) \cdot \int_0^\infty d\xi \frac{1}{N\xi} \cdot \frac{1}{1 + \tau_0 \cdot (\tau')^\xi \cdot s}, \quad (6.211)$$

where we introduced a convenient notation

$$\xi \stackrel{\text{def.}}{=} \frac{\varepsilon}{\Delta}, \quad N \stackrel{\text{def.}}{=} \exp\left(\frac{\Delta}{\langle \varepsilon \rangle}\right), \quad 1 - \frac{1}{N} \approx \frac{\Delta}{\langle \varepsilon \rangle}, \quad \tau' = \exp(\beta' \Delta), \quad (6.212)$$

and assumed (for simplicity) $\Delta \ll \langle \varepsilon \rangle$.

Expression (6.211) obeys the convenient scaling relation

$$\begin{aligned} \tilde{\psi}(\tau' \cdot s) &= N \cdot \tilde{\psi}(s) - (N-1) \cdot \int_0^1 d\xi \frac{1}{N\xi} \cdot \frac{1}{1 + \tau_0 \cdot (\tau')^\xi \cdot s} \\ &\approx N \cdot \tilde{\psi}(s) - (N-1) \cdot (1 - \tau_0 \cdot s), \end{aligned} \quad (6.213)$$

which can be solved by assuming, as usual for an equation of this type, that the solution is composed of the sum of two essentially different terms, i.e. $\tilde{\psi}(s) = \tilde{\psi}_s(s) + \tilde{\psi}_r(s)$, where the singular (general) term $\tilde{\psi}_s(s)$ obeys the homogeneous part of eq.(6.213), and the regular (particular) one $\tilde{\psi}_r(s)$ obeys the (full) homogeneous eq.(6.213).

6.10.2 Explicit asymptotic form of the waiting-time distribution

For $|s| \ll 1$ we obtain the singular term

$$\tilde{\psi}_s(s) \approx -Q\left(\frac{\ln(s)}{\ln(\tau')}\right) \cdot (\tau_0 \cdot s)^\alpha, \quad (6.214)$$

where the exponent $\alpha = \ln(N)/\ln(\tau') = (\beta' \cdot \langle \varepsilon \rangle)^{-1}$ and the *log-periodic* function (whose period is equal to 1) reduces, in the lowest approximation (or zero-order in s -variable), to the form⁵

$$Q\left(\frac{\ln(s)}{\ln(\tau')}\right) \approx C_s^0 = \frac{1 - \frac{1}{N}}{\ln(N)} \cdot \frac{\pi\alpha}{\sin(\pi\alpha)}. \quad (6.215)$$

⁵The derivation of the detailed form of coefficient C_s^0 by using the Mellin transformation, is given, e.g., in [11].

The regular term (controlled by an approximate form of the inhomogeneity in eq.(6.213)) reduces, within the linear approximation in s -variable, into the form

$$\bar{\psi}_+(s) \approx 1 - C_+^1 \cdot \tau_0 \cdot s, \quad C_+^1 = \frac{1 - \frac{1}{N}}{1 - \frac{1}{N}}. \quad (6.216)$$

Finally, we obtain the sought waiting-time distribution in the Laplace domain for $|s| \ll 1$

$$\begin{aligned} \bar{\psi}(s) &\approx 1 - C_s^0 \cdot (\tau_0 \cdot s)^\alpha - C_+^1 \cdot \tau_0 \cdot s \\ &\approx \begin{cases} 1 - C_s^0 \cdot (\tau_0 \cdot s)^\alpha, & \text{for } \alpha < 1 \\ 1 - C_+^1 \cdot \tau_0 \cdot s, & \text{for } \alpha > 1 \end{cases} \end{aligned} \quad (6.217)$$

and in the asymptotic-time domain

$$\psi(t) \approx \begin{cases} \frac{1}{\tau_0} \cdot \frac{1 - \frac{1}{N}}{\ln(N)} \cdot \alpha \cdot \Gamma_{Euler}(1 + \alpha) \cdot \left(\frac{t}{\tau_0}\right)^{-1-\alpha}, & \text{for } \alpha < 1 \\ \langle t \rangle^{-1} \cdot \exp\left(-\frac{t}{\langle t \rangle}\right), & \text{for } \alpha > 1, \end{cases} \quad (6.218)$$

(here $\langle t \rangle = \tau_0 \cdot C_+^1$) which makes it possible to consider the propagator and hence the asymptotic mean- as well as mean-square displacement in an explicit form⁶. (Note that for the derivation of the first expression in (6.218) for $\alpha < 1$ we used relations (6.209), (6.208), (6.198) and (6.215).)

6.10.3 Asymptotic form of the propagator

For $|\tau_0 \cdot s| \ll 1$ and $|k \cdot a| \ll 1$ the propagator (given by (6.209)) can assume the following explicit form

$$\begin{aligned} \bar{P}(k, s) &= \frac{1}{s + [1 - \bar{p}(k)] \cdot \frac{s \cdot \bar{\psi}(s)}{1 - \bar{\psi}(s)}} \\ &\approx \begin{cases} \frac{1}{s + [1 - p(k)] \cdot \frac{1}{C_s^0 (\tau_0 \cdot s)^\alpha}}, & \text{for } \alpha < 1 \\ \frac{1}{s + [1 - p(k)] \cdot \frac{1}{\langle t \rangle}}, & \text{for } \alpha > 1. \end{cases} \end{aligned} \quad (6.219)$$

where we used the explicit asymptotic form of the waiting-time distribution (6.217). In the Fourier and time domain the above relation transforms still into the relatively simple form

$$\bar{P}(k, t) \approx \begin{cases} E_\alpha\left(-\frac{[1 - p(k)]}{C_s^0} \cdot \left(\frac{t}{\tau_0}\right)^\alpha\right), & \text{for } \alpha < 1 \\ \exp\left(-[1 - p(k)] \cdot \frac{t}{\langle t \rangle}\right), & \text{for } \alpha > 1. \end{cases} \quad (6.220)$$

where $E_\alpha(\dots)$ is the well known Mittag-Leffler function [3]. The Fourier transformation of the second relation in (6.220) into the real space gives the well known shifted Gaussian. The analogous transformation for $\alpha < 1$ is unknown in a closed form although it can be expressed in the integral form in terms of the (non-shifted) Gaussian and the weight given by the corresponding Fox H -function as the integrand (for details see [3] and refs. therein).

⁶In the paper we do not consider the marginal case defined by the threshold $\alpha = 1$.

6.10.4 Explicit asymptotic form of the first and second moments

The mean displacement. Now, we are able to obtain the general formula for the average time-dependent displacement of the particle along the direction of the external field. This is the essential quantity which characterizes the drift of each particle. From (6.209) we obtain in the Laplace domain

$$\langle \tilde{X} \rangle(s) = i \frac{d}{dk} \tilde{P}(k, s) |_{k=0} = \langle x \rangle \cdot \frac{1}{s} \cdot \frac{\tilde{\psi}(s)}{1 - \tilde{\psi}(s)}, \quad (6.221)$$

where the single-hop mean displacement $\langle x \rangle = a \cdot (p_+ - p_-)$. From (6.221) and (6.217) we obtain for $|s| \ll 1$

$$\begin{aligned} \langle \tilde{X} \rangle(s) &\approx \langle x \rangle \cdot \frac{1}{s} \cdot \frac{1}{C_s^0 \cdot (\tau_0 \cdot s)^\alpha + C_r^1 \cdot \tau_0 \cdot s} \\ &\approx \begin{cases} \frac{\langle x \rangle}{C_s^0} \cdot \frac{1}{\tau_0^\alpha} \cdot \frac{1}{s^{\alpha+1}}, & \text{for } \alpha < 1 \\ \frac{\langle x \rangle}{C_r^1} \cdot \frac{1}{\tau_0} \cdot \frac{1}{s^2}, & \text{for } \alpha > 1. \end{cases} \end{aligned} \quad (6.222)$$

From the above relation we easily obtain for the asymptotic time, i.e. for $t_0 \gg \tau_0$,

$$\langle X \rangle(t) \approx \begin{cases} \frac{\langle x \rangle}{C_s^0} \cdot \frac{1}{\Gamma_{\text{Euler}}(1+\alpha)} \cdot \left(\frac{t}{\tau_0}\right)^\alpha, & \text{for } \alpha < 1 \\ \frac{\langle x \rangle}{\langle \dot{x} \rangle} \cdot t, & \text{for } \alpha > 1. \end{cases} \quad (6.223)$$

where $\Gamma_{\text{Euler}}(\dots)$ denotes the well-known Gamma-Euler function. Although the time-dependence of the drift below and above the threshold $\alpha = 1$ differ essentially the transition between both cases is smooth; nevertheless, we obtain for these cases essentially different drift velocities

$$V(t) = \frac{d}{dt} \langle X \rangle(t) \approx \begin{cases} \frac{\langle x \rangle}{C_s^0} \cdot \frac{1}{\Gamma_{\text{Euler}}(\alpha)} \cdot \frac{1}{\tau_0} \cdot \frac{1}{(t/\tau_0)^{1-\alpha}}, & \text{for } \alpha < 1 \\ \frac{\langle x \rangle}{\langle \dot{x} \rangle}, & \text{for } \alpha > 1. \end{cases} \quad (6.224)$$

Indeed, this quantity is proportional to the transient photocurrent measured in experiments made on amorphous materials mentioned in Sec.6.9.

The mean-square displacement. The mean-square displacement, involving infinitely many steps of the walker or a time-dependent variance of displacement, is the main stochastic characteristics of the diffusion process. At first, we derive this quantity in the Laplace domain

$$\begin{aligned} \langle \tilde{X}^2 \rangle(s) &= -\frac{d^2 \tilde{P}(k, s)}{dk^2} |_{k=0} = \frac{1}{s} \cdot \frac{\tilde{\psi}(s)}{1 - \tilde{\psi}(s)} \cdot (\langle x^2 \rangle + \langle x \rangle^2 \cdot \frac{\tilde{\psi}(s)}{1 - \tilde{\psi}(s)}) \\ &\approx \langle x^2 \rangle \cdot \frac{1}{s} \cdot \frac{1}{C_s^0 \cdot (\tau_0 \cdot s)^\alpha + C_r^1 \cdot \tau_0 \cdot s} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \langle x \rangle^2 \cdot \frac{2}{s} \cdot \left(\frac{1}{C_s^0 \cdot (\tau_0 \cdot s)^\alpha + C_r^1 \cdot \tau_0 \cdot s} \right)^2 \\
& \approx \begin{cases} \frac{\langle x^2 \rangle}{C_s^0} \cdot \frac{1}{\tau_0^\alpha} \cdot \frac{1}{s^{\alpha+1}} + \left(\frac{\langle x \rangle}{C_s^0} \right)^2 \cdot \frac{2}{\tau_0^\alpha} \cdot \frac{1}{s^{\alpha+1}}, & \text{for } \alpha < 1 \\ \frac{\langle x^2 \rangle}{C_r^1} \cdot \frac{1}{\tau_0} \cdot \frac{1}{s^2} + \left(\frac{\langle x \rangle}{C_r^1} \right)^2 \cdot \frac{2}{\tau_0} \cdot \frac{1}{s^2}, & \text{for } \alpha > 1. \end{cases} \quad (6.225)
\end{aligned}$$

Next, from (6.225) and (6.223) we obtain for the asymptotic time (i.e. for $t_0 \gg \tau_0$)

$$\langle \tilde{X}^2 \rangle(t) - [\langle X \rangle(t)]^2 \approx \begin{cases} \frac{\langle x^2 \rangle}{C_s^0} \cdot \frac{1}{\tau_0^\alpha} \cdot \frac{1}{\Gamma_{\text{Walker}}(\alpha)} \cdot \left(\frac{t}{\tau_0} \right)^\alpha + \\ \left(\frac{\langle x \rangle}{C_s^0} \right)^2 \frac{1}{\alpha} \left\{ \frac{2}{\Gamma_{\text{Walker}}(2\alpha)} - \frac{1}{\alpha \cdot [\Gamma_{\text{Walker}}(\alpha)]^2} \right\} \cdot \left(\frac{t}{\tau_0} \right)^{2\alpha}, & \text{for } \alpha < 1 \\ \frac{\langle x^2 \rangle}{C_r^1} \cdot t, & \text{for } \alpha > 1. \end{cases} \quad (6.226)$$

As it is seen, the time-dependence of the mean-square displacement below and above the threshold $\alpha = 1$ differ essentially. For $\alpha < 1$ the diffusion is controlled by the drift while for the opposite case it is not.

6.11 Statistics of extremes

The central values and typical fluctuations are not sufficient to characterize natural systems which exhibit rare but extreme events often dominating the long-term behaviour. Therefore the statistics of extrema is a classical subject of great interest in mathematics, physics and economical and social sciences [15, 16, 17]. In physics, extreme events have been studied in a number of fields [18] (and refs. therein) including self-organized fluctuations and critical phenomena, material fracture, disordered systems at low temperatures, and turbulence. Knowledge of extreme event statistics is of fundamental importance to predict and estimate the risk in a variety of natural and man-made phenomena such as earthquakes, changes in climate conditions, floods and large movement in financial markets. A new field where extreme statistics is of interest are complex networks [18].

6.11.1 General derivation

If one observes a series of L independent realizations of the same random phenomenon (or its stochastic replica), the central question of the Extreme Value Theory (EVT) imposes how to characterize the maximum observed value of random variables⁷ $x_{\max} \stackrel{\text{def.}}{=} \max\{x_i\}_{i=1,\dots,L}$. For example, the maximum value could be the deepest trap encountered by the walker in a disordered medium (then we would have $x \equiv \varepsilon$, where ε is the energetic depth of the trap) or the longest mean residence time (called also the sojourn time of the walker) in such a trap (then we would have $x \equiv \tau$, where τ is the mean residence time).

⁷We developed the Extreme Value Theory by considering continuous variables.

The main goal of the EVT is to characterize x_{\max} by determination of the probability distribution, $P(x_{\max} = \Lambda)$, of the maximal value x_{\max} , where Λ is an arbitrary threshold. In the case of dispersive transport and diffusion we apply the EVT to characterize, the mentioned above two, related, stochastic variables (ε and τ).

First, we calculate the cumulative probability distribution $P(x_{\max} < \Lambda)$ of the random variable x_{\max} by noting that if the maximum x_{\max} is smaller than Λ then all x_i 's are also smaller than this threshold and vice versa. As these random variables are independent and identically distributed (iid), we can put

$$P(x_{\max} < \Lambda) = [\rho_{<}(\Lambda)]^L = [1 - \rho_{>}(\Lambda)]^L, \quad (6.227)$$

by assuming the cumulative probability distribution of random variable x

$$\rho_{<}(\Lambda) = \int_{x_{\text{down}}}^{\Lambda} \rho(x) dx, \quad (6.228)$$

where $\rho(x)dx$ is the probability that the random variable x can be found in the interval $x, x + dx$, and x_{down} is the lowest value which this variable can assume. Of course, the second equality in expression (6.227) comes from the normalization of the probability density (or distribution) $\rho(\dots)$ where

$$\rho_{>}(\Lambda) = \int_{\Lambda}^{x_{\text{up}}} \rho(x) dx, \quad (6.229)$$

here x_{up} is the largest value which the variable x can assume. We set here $x_{\text{down}} \ll \Lambda \ll x_{\text{up}}$ so that the strong inequality $\rho_{>}(\Lambda) \ll 1$ is obeyed. Therefore, the second equality in expression (6.227) takes, with a good approximation, the useful form

$$P(x_{\max} < \Lambda) \approx \exp(-L \cdot \rho_{>}(\Lambda)). \quad (6.230)$$

In this way, we reached our second step, namely the intermediate formula useful for further transformations

$$P(x_{\max} = \Lambda) = \frac{dP(x_{\max} < \Lambda)}{d\Lambda} \approx L \cdot \rho(\Lambda) \cdot \exp(-L \cdot \rho_{>}(\Lambda)), \quad (6.231)$$

where the notation $\rho(\Lambda) = \rho(x = \Lambda)$ and definition (6.229) have been introduced.

In the third step, we relate the number of observations (L) to the rare event. The law of large numbers tells us that one can expect to observe (typically) such events which have a probability at least equal to $1/L$. Hence, it would be surprising to encounter an event which has a probability much smaller than $1/L$. The largest event Λ_{\max} , observed in a series of $L \gg 1$ iid random variables (which we call indeed the rare one), is thus given by relation

$$\rho_{>}(\Lambda_{\max}) = \frac{1}{L}. \quad (6.232)$$

We can call the above definition of the rare event the *weak* one; the stronger definition (which seems to be even easier to interpret) could have the form

$$\rho(\Lambda_{max}) = \frac{1}{L}, \quad (6.233)$$

which is, however, less convenient (from the technical point of view of the general approach)⁸. Since now we operate with two types of max-variables our aim is to find the probabilistic relation between them.

By combining eqs.(6.230), (6.231) and (6.232) we finally find the general formula for the searched distribution

$$P(x_{max} = \Lambda) \approx \frac{\rho(\Lambda)}{\rho_{\geq}(\Lambda_{max})} \cdot \exp\left(-\frac{\rho_{>}(\Lambda)}{\rho_{\geq}(\Lambda_{max})}\right). \quad (6.234)$$

It is just the above formula that we use to get the Gumbel and Fréchet distributions as well as to find a relation between them.

6.11.2 The Gumbel distribution versus the Fréchet one

We assume that disordered substrate (medium) is characterized by the random-trap or valley model defined on a regular lattice. Therefore, all valleys are equally spaced but have different (energetic) depths, $\{\varepsilon > 0\}$, while the mountain peaks are all at the same energy level. It is assumed that the distribution of depths is exponential

$$\rho(\varepsilon) = \frac{1}{\langle \varepsilon \rangle} \exp\left(-\frac{\varepsilon}{\langle \varepsilon \rangle}\right) \quad (6.235)$$

which was done by many authors. The visible aspect of the random-trap model is its symmetry where (in absence of a bias) there is no tendency for the carrier to drift from any configuration of traps. Hence the carrier hops in any possible direction have an equal probability and the different hops between valleys are, of course, uncorrelated. We use the above given distribution as a basis for further considerations.

The Gumbel distribution. As we already mentioned in Sec.6.11.1, we can identify the random variables $x \equiv \varepsilon$. Moreover, from expression (6.235) we find

$$\begin{aligned} \rho(\Lambda) &= \frac{1}{\langle \varepsilon \rangle} \exp\left(-\frac{\Lambda}{\langle \varepsilon \rangle}\right), \\ \rho_{>}(\Lambda) &= \exp\left(-\frac{\Lambda}{\langle \varepsilon \rangle}\right), \quad \rho_{\geq}(\Lambda_{max}) = \exp\left(-\frac{\Lambda_{max}}{\langle \varepsilon \rangle}\right), \end{aligned} \quad (6.236)$$

required to express formula (6.234) in an explicit form. Note that the third expression (6.236) together with (6.233) gives an explicit, unique relation between the value of

⁸Note that for most cases analytically solvable both definitions give identical shapes of distributions of random variables which require only rescaling by additive and/or multiplicative constants.

the rare event Λ_{\max} and the number of observations L

$$\frac{\Lambda_{\max}}{\langle \varepsilon \rangle} = \ln(L), \quad (6.237)$$

which points to a slow (logarithmic) growth⁹ with increasing L .

By using (6.236), formula (6.234) takes an intermediate form

$$P(\varepsilon_{\max} = \Lambda) \approx \frac{1}{\langle \varepsilon \rangle} \exp\left(-\frac{\Lambda - \Lambda_{\max}}{\langle \varepsilon \rangle}\right) \exp\left(-\exp\left(-\frac{\Lambda - \Lambda_{\max}}{\langle \varepsilon \rangle}\right)\right). \quad (6.238)$$

To obtain the searched distribution in a closed, explicit form the following transformation of variable ε_{\max} or Λ should be made

$$u \stackrel{\text{def.}}{=} \frac{\varepsilon_{\max} - \Lambda_{\max}}{\langle \varepsilon \rangle} = \frac{\Lambda - \Lambda_{\max}}{\langle \varepsilon \rangle} \Rightarrow du = \frac{\Lambda}{\langle \varepsilon \rangle}; \quad (6.239)$$

hence and by expression (6.238) we finally obtain the well known Gumbel distribution

$$P(u) = \exp(-u) \exp(-\exp(-u)) \quad (6.240)$$

of the u random variable, where we tacitly use the invariance of the probability under the monotonic transformation of random variable (invariant measure); thus we used the equality

$$P(\varepsilon_{\max} = \Lambda) d\Lambda = P(u) du. \quad (6.241)$$

Note that the most probable value of this distribution is $u = 0$ which shows that, paradoxically, the rare event Λ_{\max} is the most probable value among ε_{\max} 's. On the other hand, when $u \rightarrow \infty$ the Gumbell distribution $P(u \rightarrow \infty) \rightarrow \exp(-u)$. Hence, the distribution of random variable ε and the analogous (although asymptotic) one of variable ε_{\max} are exponential. We can say that the exponential distribution is asymptotically stable with respect to the 'max' operation.

The Fréchet distribution. Now we are ready to answer the question concerning the distribution of sojourn times of the walker in traps and find (by using formula (6.234)) the distribution of its longest values present within a given series of observations. Then (as we mentioned at the beginning of Sec.6.11.1) we assume that the random variable $x \equiv \tau$.

Accordingly, we perform as the first step we perform the transformation

$$\begin{aligned} \varepsilon \Rightarrow \tau(\varepsilon) &= \tau_0 \cdot (\tau')^{\varepsilon/\Delta}, \\ \rho(\varepsilon) \Rightarrow \rho'(\tau(\varepsilon)) &= \frac{1}{\tau_0} \frac{\alpha}{(\tau/\tau_0)^{\alpha+1}} \end{aligned} \quad (6.242)$$

⁹For the stronger definition of the rare event (6.233) we obtain $\Lambda_{\max}/\langle \varepsilon \rangle = \ln(L/\langle \varepsilon \rangle)$ while the Gumbel distribution (6.240) of variable u defined by (6.239) is unaffected.

where we set $\tau' = \exp(\beta' \cdot \Delta)$, as we consider over-barrier jumps of a carrier (here Δ denotes the energy unit), and the exponent

$$\alpha = \frac{\ln(N)}{\ln(\tau')} = \frac{1}{\beta' \cdot \langle \varepsilon \rangle}. \quad (6.243)$$

To derive of the second equality in (6.242) we used again the invariance of the probability under the monotonic transformation of random variable (as given by the first equation of (6.242)), i.e. we used the equality

$$\rho'(\tau)d\tau = \rho(\varepsilon)d\varepsilon. \quad (6.244)$$

Note that the exponential transformation of the random variable leads to the transformation of its (invariant) probability distribution from the exponential one to the power-law. Conversely, the logarithmic transformation of random variable leads to the transformation of its probability distribution from the power-law to exponential ones.

From the second relation in (6.242) and definition (6.229) we can easily calculate the probability

$$\rho'_{>}(\Lambda) = \frac{1}{(\Lambda/\tau_0)^\alpha}. \quad (6.245)$$

and hence

$$\rho'_{\geq}(\Lambda_{max}) = \frac{1}{(\Lambda_{max}/\tau_0)^\alpha}. \quad (6.246)$$

necessary to obtain probability distribution (6.234) in an explicit form¹⁰. Note that by using eq.(6.232) we obtain Λ_{max} as a power-law function of L ¹¹

$$\frac{\Lambda_{max}}{\tau_0} = L^{1/\alpha}. \quad (6.247)$$

It should be noted that the same result is obtained if we use the rare event of energy depth of traps (6.237) as a power (divided by Δ) of τ' which gives self-consistency of the approach.

By introducing formulae (6.245) and (6.246) into (6.234) we obtain after straightforward calculations

$$P(\tau_{max} = \Lambda) = \frac{1}{\Lambda_{max}} \cdot \frac{\alpha}{(\Lambda/\Lambda_{max})^{\alpha+1}} \exp(-1/(\Lambda/\Lambda_{max})^\alpha) \quad (6.248)$$

Hence we finally obtain the Fréchet distribution

$$P(u) = \frac{\alpha}{u^{\alpha+1}} \exp(-\frac{1}{u^\alpha}) \quad (6.249)$$

¹⁰The Λ variable used here relates to τ and not ε one.

¹¹By using the stronger definition (6.233) of the rare event one gets a related scaling law $\Lambda_{max}/\tau_0 = (L/(\tau_0 \cdot \alpha))^{1/(\alpha+1)}$.

of $u \stackrel{\text{def}}{=} \Lambda/\Lambda_{\max}$ variable, where as usual we used the invariance of the probability under the monotonic transformation of random variable, i.e. we used the equality

$$P(\tau_{\max} = \Lambda)d\Lambda = P(u)du. \quad (6.250)$$

It can be easily found that the most probable value of τ_{\max} is proportional to the value of the rare event Λ_{\max} ¹².

As it is seen, for $u \gg 1$ the Fréchet distribution is the power-law of exponent $1 + \alpha$ with the power-law correction to the scaling of exponent α since

$$P(u) \approx \frac{\alpha}{u^{\alpha+1}} \left(1 - \frac{1}{u^{\alpha}}\right). \quad (6.251)$$

Analogously to the Gumbel distribution, we can again say that the power-law tail is asymptotically stable with respect to the 'max' operation.

Relation between the Gumbel and Fréchet distributions. The above considerations show that, when we made the transformation from the random variable ε to its exponential representation $\tau(\varepsilon)$ (cf. the first relation in (6.242)) as a result we transformed the Gumbel to the Fréchet distributions. In other words, the Gumbel distribution characterizes an additive stochastic process while the multiplicative one is characterized by the Fréchet distribution (where relation between both processes is given by the *log* operation).

6.11.3 Pictorial analysis of rank ordering

The main goal of this section is to show the decisive role of rare events in Hierarchical Continuous-Time Random Walk (HCTRW) for asymptotic many time-steps. To make our analysis more convenient we treat variable ε/Δ as a discrete one which is possible as Δ can be always assumed to be sufficiently small (i.e. by assuming $\Delta \ll \bar{\varepsilon}$). Again, we assume that $x \equiv \tau$ is our random variable distributed according to the power-law defined by the second expression in (6.242). Now, we introduce the discrete notation $j = \frac{\varepsilon}{\Delta}$, $j = 0, 1, 2, \dots$, and define $N = \exp(\frac{\Delta}{\bar{\varepsilon}})$; hence, with a good approximation, $\frac{\Delta}{\bar{\varepsilon}} \approx 1 - \frac{1}{N}$, which makes the transformation to the discrete distribution

$$\rho(\varepsilon) \Rightarrow \rho''(j) = \left(1 - \frac{1}{N}\right) \cdot \frac{1}{N^j}, \quad j = 0, 1, 2, \dots, \quad (6.252)$$

and the definition of the rare event

$$\rho''(j_{\max}) = \left(1 - \frac{1}{N}\right) \cdot \frac{1}{N^{j_{\max}}}, \quad (6.253)$$

clear¹³.

¹²More precisely, $\tau_{\max} = (\alpha/(1+\alpha))^{1/\alpha} \cdot \Lambda_{\max}$ and only for $\alpha \rightarrow \infty$ variable $\tau_{\max} = \Lambda_{\max}$.

¹³In the above derivation we simply exchanged $d(\frac{\varepsilon}{\Delta})$ for 1. Note that the distribution has still an exponential form and its normalization is conserved, as it should be.

Hierarchical waiting-time distribution in a discrete representation. Note that our hierarchical waiting-time distribution, $\psi(t)$ (which is the basic function of the HCTRW) assumes, within the above introduced discrete representation, the following useful form

$$\psi(t) = \sum_{j=0}^{\infty} \rho''(j) \cdot \psi_j(t), \quad (6.254)$$

where the conditional Poisson waiting-time distribution

$$\psi_j(t) = \frac{1}{\tau_0(\tau')^j} \cdot \exp\left(-\frac{t}{\tau_0 \cdot (\tau')^j}\right), \quad (6.255)$$

and $\rho''(j)$ is the weight which plays a fundamental role in these considerations. (Of course, this discretized $\psi(t)$ conserves the normalization and scaling). For example, the sojourn time can be easily calculated by using the weight,

$$\langle t \rangle = \sum_{j=0}^{\infty} \rho''(j) \cdot \langle t \rangle_j, \quad \langle t \rangle_j = \tau(j) = \int_0^{\infty} t \cdot \psi_j(t) dt = \tau_0 \cdot (\tau')^j. \quad (6.256)$$

Note that the partial residence time $\langle t \rangle_j$, $j = 0, 1, 2, \dots$, is always finite but the total residence time is finite only when $\alpha > 1$ and equal to

$$\langle t \rangle = \tau_0 \cdot \frac{1 - \frac{1}{N}}{1 - \frac{\tau'}{N}}; \quad (6.257)$$

otherwise it diverges which fully agrees with the result shown in Sec. 2.2. Hence, to obtain $\langle t \rangle$ finite the weight $\rho''(j)$ must converge sufficiently quickly with the increase of variable j .

It is decisive for our present considerations that the ratio of successive weights

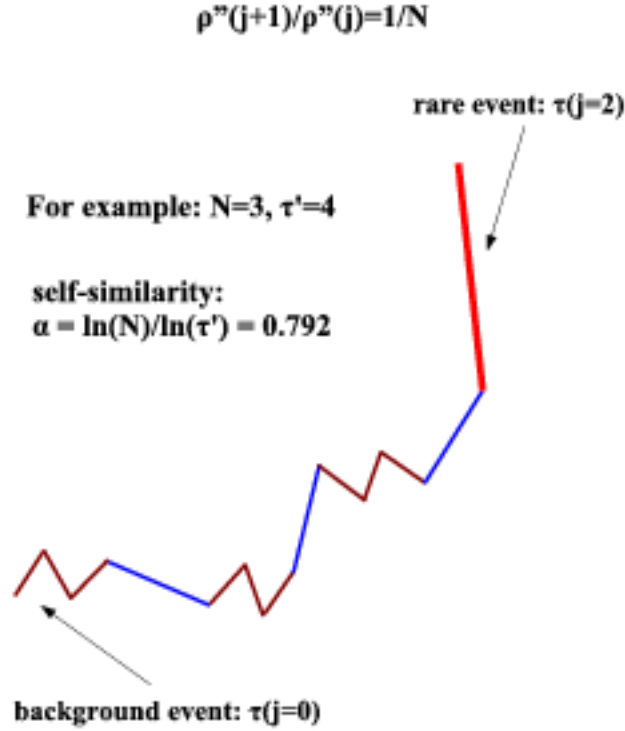
$$\frac{\rho''(j+1)}{\rho''(j)} = \frac{1}{N}, \quad (6.258)$$

be already j -independent. This means that in each single-step the residence of a carrier in a trap with sojourn time $\tau_0 \cdot (\tau')^j$ or in state (or hierarchy level) j is N times more likely than those of the next larger order $j+1$. Hence, one expects (on the average) that the walker will visit N^j traps having the shortest sojourn time τ_0 before he encounters a sufficiently deep trap with a mean residence time $\tau(j) = \tau_0 \cdot (\tau')^j$, $j = 1, 2, \dots$

Practical aims. In Fig. 6.9 the schematic illustration of this essential observation is given in the form of one-dimensional hierarchically ordered time-intervals or mean residence (sojourn) times in the corresponding traps. Here

- (i) we neglect (due to the Bernoulli law of large numbers) the fluctuation of the number of hierarchy levels as well as their succession (as we calculate the summarized quantities), and

Hierarchical ordering of mean residence times



Rysunek 6.9: The part of the stochastic hierarchy of the carrier residence times in random traps presented in the form of ordered two-dimensional zig-zag intervals (the art-view) where the length of each interval is given by $\tau(j) = \tau_0 \cdot (\tau')^j$, $j = 0, 1, 2, \dots$

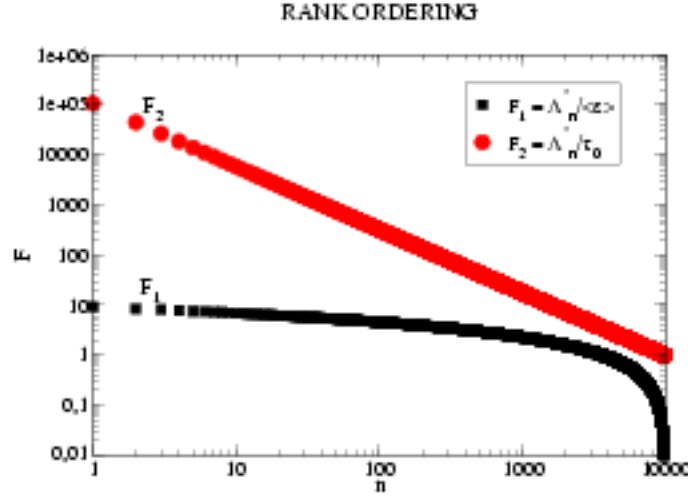
- (ii) plot only the length of the average time-intervals $\langle t \rangle_j$, $j = 0, 1, 2, \dots$

As it is seen, we made the transformation from the stochastic hierarchy to its deterministic representation. This makes it easier to realize our practical aims, namely to discuss

- (1) the rank ordering of residence times,
- (2) the finite-size effect as scaling of characteristic quantities with the size of the hierarchy.

From Fig.6.9 one gets the useful relation between the size of hierarchy L and the number of its levels $j (\gg 1$ and $\tau', N > 1$),

$$L(j) = N^j + N^{j-1} + \dots + N^1 + N^0 \approx \frac{1}{1 - 1/N} \cdot N^j. \quad (6.259)$$



Rysunek 6.10: The rank ordering of residence times and depths of traps described by the power-law (function F_1 , where Λ_n^* is given by eq.(6.276)) and logarithmic (F_2 , where Λ_n^* is given by eq.(6.275)) dependences, respectively.

The quantity $L(j)$ is also the total number of steps after which the walker encountered the trap with sojourn time $\tau_0 \cdot (\tau')^j$.

Now, we can set the rank $n = L(j)$ and look for the corresponding sojourn time as a function of n ranked according to its decreasing amplitude. Hence, we can write the one-to-one correspondence in the form: $n = L(j) \Leftrightarrow (\tau')^{j_{max}-j}$, where j_{max} is related to the total number of observations L ; by using relation (6.259) we can write

$$L = L(j_{max}) \approx \frac{1}{1 - 1/N} \cdot N^{j_{max}}. \quad (6.260)$$

From expressions (6.259) and (6.260) we calculate exponent $j_{max} - j$ and by introducing it into the formula for n given the above, we finally find the searched rank dependence

$$\tau(n) = \tau_0 \cdot (\tau')^{j_{max}-j} = \tau_0 \cdot \left(\frac{L}{n}\right)^{1/\alpha}, \quad (6.261)$$

which is (for large L) the power-law with exponent $-1/\alpha$. In Fig.6.11 we presented this dependence, for example, for $\alpha = 0.792$ (or $N = 3$ and $\tau' = 4$) and $L = 9841$. Eq.(6.261) shows that hierarchically organized encountered random variables lead to the power-law rank of their amplitudes. Speaking more precisely, we obtained a kind of descending devil's staircase whose average slope is asymptotically given by exponent $-1/\alpha$.

Empirical verification of the tail. The rank relation (6.261) is very useful in identifying the nature of the tails of probability distributions. The single-step procedure is as follows: one sorts in decreasing order the series of observed random variables

(for example, τ 's) and one simply draws Λ_n (here equal to $\tau(n)$) as a function of n . If variables are power-law distributed, this graph should be a straight line in a log-log plot, with a slope given by exponent $-1/\alpha$ (as shown, e.g., by expression (6.261)).

Decisive role of rare events. Our second aim is realized in connection with rare events. Now, we can prove that the (average) total time for which carrier stays in the traps encountered during L steps obeys the same scaling law with L as a rare event.

First, from (6.252) and (6.253) we easily obtain

$$\begin{aligned}\rho''_{\geq}(\Lambda) &= \sum_{j=\Lambda}^{\infty} \rho''(j) = \frac{1}{N\Lambda} \Rightarrow \rho''_{\geq}(\Lambda_{max}) = \frac{1}{N\Lambda_{max}} = \frac{1}{L} \\ &\equiv \Lambda_{max} = \frac{\ln(L)}{\ln(N)},\end{aligned}\quad (6.262)$$

where the second relation defines the rare event in agreement with weaker definition (6.233). Hence, we have

$$(\tau')^{\Lambda_{max}} = L^{1/\alpha}. \quad (6.263)$$

By using relations (6.260) and (6.253), we find that just j_{max} is the rare event in the stronger sense given by (6.233); thus,

$$(\tau')^{j_{max}} = [(1 - \frac{1}{N}) \cdot L]^{1/\alpha}, \quad (6.264)$$

which means that the difference $\Lambda_{max} - j_{max} = \ln N / \ln(1 - 1/N)$ is an unimportant constant.

The total time mentioned above is given by the following sum

$$\begin{aligned}\frac{t}{\tau_0} &\approx N^0(\tau')^{j_{max}} + N^1(\tau')^{j_{max}-1} + \dots + N^{j_{max}-1}(\tau')^1 + N^{j_{max}}(\tau')^0 \\ &= N^{j_{max}} \frac{(\frac{\tau'}{N})^{j_{max}+1} - 1}{\frac{\tau'}{N} - 1} \approx \begin{cases} \frac{1}{1-\frac{\tau'}{N}} \cdot (\tau')^{j_{max}}, & \text{for } \alpha < 1 \\ \frac{1}{1-\frac{\tau'}{N}} \cdot N^{j_{max}}, & \text{for } \alpha > 1, \end{cases}\end{aligned}\quad (6.265)$$

By introducing eq.(6.264) and eq.(6.260) into (6.265) we obtain the important relations

$$\frac{t}{\tau_0} \approx \begin{cases} \frac{(1-\frac{1}{N})^{1/\alpha}}{1-\frac{\tau'}{N}} \cdot L^{1/\alpha}, & \text{for } \alpha < 1 \\ \frac{1-\frac{1}{N}}{1-\frac{\tau'}{N}} \cdot L, & \text{for } \alpha > 1. \end{cases}\quad (6.266)$$

Note that both relations (6.265) and (6.266) distinguish two essentially different ranges of exponent α (the marginal case $\alpha = 1$ is not considered here). For the first range ($\alpha < 1$) we found t proportional to the rare event, i.e. it scales with the number of steps L in the same manner as the rare event; this is the main result of

this section. The proportionality coefficient is called the (dimensionless) fractional residence time. For the opposite, regular case the analogous coefficient is simply the residence time given above (cf. eq.(6.257) and second relation (6.226)).

Now, it is easy to calculate the dependence of the mean-time, $\langle t \rangle$, used by the walker for a single step, on L . For the asymptotic long L one can write the following average calculated along the L -step trajectory

$$\begin{aligned} \frac{\langle t \rangle}{\tau_0} &\approx \frac{N^{j_{max}}}{L} (\tau')^0 + \frac{N^{j_{max}-1}}{L} (\tau')^1 + \dots + \frac{N^0}{L} (\tau')^{j_{max}} \\ &\approx \begin{cases} \frac{(1-\frac{1}{N})^{1/\alpha}}{1-\frac{1}{N}} L^{\frac{1}{\alpha}-1}, & \text{for } \alpha < 1 \\ \frac{1-\frac{1}{N}}{1-\frac{\tau'}{N}}, & \text{for } \alpha > 1, \end{cases} \end{aligned} \quad (6.267)$$

Of course, this result can be obtained straightforward from expression (6.266) by deviding it simply by L .

Additional properties of rare events. It is useful to have a list of several simple properties of the rare events. The first question which we can easily answer is: how many potential rare events, l_{max} , typically appear within $L (\gg 1)$ events¹⁴? From (6.259) we immediately get (exchanging simply j for l_{max}): $l_{max} \approx \frac{\ln(L(l_{max}))}{\ln(N)}$.

The second question is: how the distance between the successive rare events increases with L ? Again from (6.259) we obtain

$$\Delta L(j) = L(j+1) - L(j) = N^{j+1} \approx (N-1) \cdot L(j); \quad (6.268)$$

i.e. this distance increases linearly with L .

The third question concerns the ratio of the value of the potential rare events and their difference. Directly from Fig.6.9 we find that this ratio is simply equal to τ' independently of L while their difference

$$\tau_0 \cdot [(\tau')^{l_{max}+1} - (\tau')^{l_{max}}] \approx \tau_0 \cdot (\tau' - 1) \cdot L^{1/\alpha}, \quad (6.269)$$

scales with L as a single rare event.

6.11.4 Rank ordering of random variables. General approach

In this section we ask a more general question than in Sec.6.11.1 although we consider again a series of L independent observations of random, identically distributed phenomena. We can rank variables x_l , $l = 1, 2, \dots, L$, in decreasing order of their amplitude. We denote by Λ_n the n^{th} encountered value among these random variables. Hence, for example, $\Lambda_1 = x_{max}$ and $\Lambda_L = x_{min}$ (i.e. the minimal value of the variables x_l).

¹⁴The potential rare event is such an event which is the maximal one but within the given number of steps smaller than L .

As the first step we are interested in the probability distribution $P_n(\Lambda_n)$ of the random variable Λ_n . We can write the exact formula

$$P_n(\Lambda_n) = L \cdot C_{L-1}^{n-1} \cdot \rho(x = \Lambda_n) [\rho_>(\Lambda_n)]^{n-1} [\rho_<(\Lambda_n)]^{L-n}, \quad (6.270)$$

where C_{L-1}^{n-1} denotes the combinatorial (or Newton binomial) factor. The product $L \cdot C_{L-1}^{n-1}$ gives the total number of ways to set Λ_n within all possible configurations of $L-1$ which remain random variables of the series. Note that for $n=1$ the above formula simplifies to expression (6.231), as it is expected be.

In the second step we find the most probable value of Λ_n^* (for a given rank n). By differentiating probability distribution (6.270) and setting it equal to zero we obtain the formula

$$\begin{aligned} \frac{1}{L} \cdot \frac{d\rho(\Lambda_n)}{d\Lambda_n} \cdot \rho_>(\Lambda_n) \cdot \rho_<(\Lambda_n) - \frac{n-1}{L} \cdot [\rho(\Lambda_n)]^2 \cdot \rho_<(\Lambda_n) \\ + (1 - \frac{n}{L}) \cdot [\rho(\Lambda_n)]^2 \cdot \rho_>(\Lambda_n) = 0 \end{aligned} \quad (6.271)$$

useful for further considerations particularly when $n, L \rightarrow \infty$ with fixed ratio n/L . Then the first term in (6.271) vanishes and we obtain the formula

$$\rho_>(\Lambda_n^*) \approx \frac{n}{L}. \quad (6.272)$$

which generalizes (6.232)¹⁵.

To complete information about distribution $P_n(\Lambda_n)$ in the vicinity of Λ_n^* we calculate, as our third step, its width σ_n . We find σ_n by using the saddle-point (or Gaussian) approximation from the second derivative of $\ln P_n(\Lambda_n)$ calculated at Λ_n^* since in this approximation one can use

$$\frac{d^2}{d\Lambda_n^2} \ln P_n(\Lambda_n) |_{\Lambda_n^*} = -\frac{1}{\sigma_n^2}. \quad (6.273)$$

Hence and from (6.270), we obtain immediately the width of the probability distribution $P_n(\Lambda_n)$ in the form

$$\sigma_n \approx \frac{1}{\sqrt{L}} \cdot \frac{\sqrt{\frac{n}{L} \cdot (1 - \frac{n}{L})}}{\rho(\Lambda_n^*)} \quad (6.274)$$

which is more and more sharply peaked around its most probable value Λ_n^* as L tends to infinity (with fixed ratio n/L).

Two useful cases. Let's assume the case of exponential tail (given in Sec.6.11.2 by eq.(6.235)). By applying the second relation of eq.(6.236) to eq.(6.271) we obtain that

$$\Lambda_n^* \approx \langle \varepsilon \rangle \cdot \ln\left(\frac{L}{n}\right). \quad (6.275)$$

¹⁵We used here the normalization condition $\rho_<(\Lambda_n) = 1 - \rho_>(\Lambda_n)$ which is valid for the continuous random variable.

In the case of the power-law tail (given again in Sec.6.11.2 by the second equation in (6.242)) we obtain

$$\Lambda_n^* \approx \tau_0 \cdot \left(\frac{L}{n}\right)^{1/\alpha}, \quad (6.276)$$

which was already derived in Sec.6.11.3 by the simplified approach (of course, Λ_n^* present in the above formula is equivalent to $\tau(n)$ in formula (6.261)).

In Fig.6.11 we compare both the above derived results in the log-log plot (where we used $L = 9841$ and $\alpha = 0.792$). For the exponential distribution we observe an effective slope which is smaller and smaller as the rank variable n increases, i.e. the remarkable difference between both rank plots is well seen.

6.11.5 Concluding remarks

In the paper we present, in the context of amorphous materials, two essentially different types of transport and diffusion: above the temperature threshold $1/\beta' = \langle \varepsilon \rangle$ they are regular (normal) while below they are anomalous (i.e. non-Gaussian). We discuss, for these two regions, the asymptotic form of the spatial-temporal propagator, the time-dependent drift and the variance emphasizing their subdiffusive character. Moreover, we were able to show the decisive role of rare events in these anomalous types of transport and diffusion by matching the biased Hierarchical Continuous-Time Random Flight model and the Extreme Value Theory. We hope that this approach makes possible a deeper understanding of the transport and diffusion phenomena.

Bibliografia

- [1] G. Zumofen, J. Klafter, and A. Blumen, Models for Anomalous Diffusion; in: Disorder Effects on Relaxational Processes. Glasses, Polymers, Proteins. R. Richert, A. Blumen (Eds.). Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York 1994. p.251 - 278.
- [2] H. Scher and E.W. Montroll, Anomalous transient-time dispersion in amorphous solids. Phys. Rev. B15 (1975) 2455 - 2477.
- [3] R. Metzler and J. Klafter, The Random Walk's Guide to Anomalous Diffusion: A Fractional Dynamics Approach. Phys. Rep. 339 (2000) 1 - 77.
- [4] M.E. Scharfe, Transient Photoconductivity in Vitreous As_2Se_3 . Phys. Rev. B2 (1974) 5025 - 5034.
- [5] W.D. Gill, Drift mobilities in amorphous charge-transfer complexes of trinitrofluorenone and poly-*n*-vinylcarbazole. J.Appl. Phys. 43 (1972) 5033 - 5040.
- [6] G. Pfister, Pressure-Dependent Electronic Transport in Amorphous As_2Se_3 . Phys. Rev. Lett 33 (1974) 1474 - 1477.
- [7] G. Pfister, Dispersive Low-Temperature Transport in α -Selenium. Phys. Rev. Lett. 36 (1976) 271 - 273.
- [8] G. Pfister and H. Scher, Time-dependent electrical transport in amorphous solids: As_2Se_3 . Phys. Rev. B15 (1977) 2062 - 2083.
- [9] A.J. Campbell, D.D.C. Bradley, and D.G. Lidzey, Space-charge limited conduction with traps in poly(phenylene vinylene) light emitting diodes. J. Appl. Phys. 82 (1997) 6326 - 6342.
- [10] G.H. Weiss and R.J. Rubin, Random Walks: Theory and Selected Applications; in Advances in Chemical Physics Vol.LII. I. Prigogine and S.A. Rice (Eds.). J. Wiley & Sons, New York, Chichester, Brisbane, Toronto, Singapore 1983. p.364 - 505.
- [11] E.W. Montroll and M.F. Shlesinger, On the wonderful world of random walks; in: Nonequilibrium Phenomena II. From Stochastic to Hydrodynamics. SSM XI.

- J.L. Lebowitz and E.E. Montroll (Eds.). North-Holland, Amsterdam, Oxford, New York, Tokyo 1984. p.1 - 121.
- [12] J.W. Haus and K.W. Kehr, Diffusion in Regular and Disordered Lattices. Phys. Rep. Phys. Rep. 150 (1987) 263 - 416.
 - [13] J.-P. Bouchaud and A. Georges, Anomalous Diffusion in Disordered Media: Statistical Mechanics, Models and Physical Applications. Phys. Rep. 195 (1990) 127 - 293.
 - [14] G.H. Weiss, A Primer of Random Walkology; in: Fractals in Science. A. Bunde and S. Havlin (Eds.). Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, London, Paris, Tokyo, Hong Kong, Barcelona, Budapest, 1995. p.119 - 161.
 - [15] D. Sornette, Critical Phenomena in Natural Sciences. Chaos, Fractals, Selforganization and Disorder: Concepts and Tools. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York 2000.
 - [16] J.-P. Bouchaud and M. Potters, From Statistical Physics to Risk Management. Cambridge Univ. Press, Cambridge 2001.
 - [17] Kutner R.: Extreme events as foundation of Lévy walks with varying velocity. Chem. Phys. 284 (2002) 481 - 505.
 - [18] A.A. Moreira, J.S. Andrade, Jr., and L.A.N. Amaral, Extremum Statistics in Scale-Free Network Models, Phys. Rev. Lett. 89 (2002) 268703-1 - 4.

Część V

Współczesna teoria oceny ryzyka rynkowego

Istnieje przynajmniej kilka powodów, dla których dotychczasowe teorie oceniające ryzyko rynkowe¹⁶ są niewystarczające. Teorie te bazują na Centralnym Twierdzeniu Granicznym (CTG) czyli na analizie zmienności ('volatility') rozumianej jako typowy rozrzut cen akcji bądź wielkości indeksów giełdowych wokół ich wartości przeciętnych wyrażony np. za pomocą dyspersji σ lub kurtozy κ . Tego typu podejście oznacza, że najistotniejsze informacje statystyczne zawarte są w tzw. przedziale trzysignowym ($\pm 3\sigma$). Innymi słowy, "ogon" rozkładu nie zawiera wtedy istotnych informacji statystycznych - jest to gaussowski punkt widzenia, w którym nie ma miejsca na procesy stochastyczne typu Lévy'ego czyli na zdarzenia rzadkie.

Procesy Lévy'ego są przeciwieństwem procesów gaussowskich gdyż mamy w nich do czynienia z tzw. rozkładami poszczerzonymi gdzie najistotniejsza informacja o układzie statystycznym zawarta jest właśnie w pogrubionym "ogonie" funkcji rozkładu; prowadzi to natychmiast do nieskończonej dyspersji i kurtozy a tym samym do bezużyteczności oceny ryzyka opartej na tego typu tradycyjnych zmiennościach. Jak widać, właściwa analiza ryzyka rynkowego wymaga innej definicji ryzyka.

Istotą współczesnej teorii ryzyka rynkowego jest traktowanie zdarzeń ekstremalnych jako posiadających decydujący wpływ na charakter i wielkość ponieszonego ryzyka. Jest to zasadnicza różnica w stosunku do podejść tradycyjnych, w których tego typu zdarzenia są po prostu ignorowane. Prowadzi to bezpośrednio do nowej, współczesnej definicji ryzyka rynkowego wyrażonego za pomocą statystyki maksymalnych strat określanej po prostu mianem "oceny ryzyka" (po angielsku 'Value at Risk').

6.12 Tradycyjna analiza poziomu ryzyka

Przjrzyjmy się nieco dokładniej roli CTG w tradycyjnej ocenie poziomu ryzyka, analizując zależną od czasu chwilową stopę zwrotu

$$\Delta \mathcal{R}(t) \stackrel{\text{def.}}{=} \frac{X(t + \Delta t) - X(t)}{X(t)} = \frac{\Delta X(t)}{X(t)}, \quad (6.277)$$

jakiegoś papieru wartościowego, którego cena w chwili t wynosi $X(t)$ a w chwili późniejszej $t + \Delta t$ jest $X(t + \Delta t)$; tutaj Δt jest ustalonym horyzontem czasowym czyli czas $t = n \cdot \Delta t$, $n = 0, 1, 2, \dots$. Stopa zwrotu może być zarówno dodatnia jak i ujemna - w tym ostatnim przypadku powinniśmy myśleć o stopie zwrotu, oczywiście, jak o relatywnej stracie.

W dalszym ciągu zakładamy, że zmiana ceny w zadanym horyzoncie czasu Δt jest relatywnie niewielka, tzn. $|\Delta X(t)| \ll X(t)$, stąd zależna od czasu chwilowa

¹⁶Jak wiadomo, ryzyko inwestycyjne można podzielić na rynkowe czyli podstawowe związane z dynamiką cen akcji emitera na giełdzie i pozarynkowe, za które odpowiedzialna jest sytuacja w firmie emitującej akcje oraz jej zewnętrzne uwarunkowania. W dalszym ciągu zajmujemy się wyłącznie ryzykiem rynkowym zakładając, że te dwa rodzaje ryzyka są ze sobą nieskorelowane. Ryzyko rynkowe traktować będziemy całościowo pomimo tego, że można je podzielić na wiele składników, na które wpływ ma szereg różnych czynników nie tylko natury ekonomicznej.

stopa zwrotu

$$\Delta \mathcal{R}(t) \approx \ln \left(\frac{X(t + \Delta t)}{X(t)} \right) = \ln(X(t + \Delta t)) - \ln(X(t)), \quad (6.278)$$

czyli jest, z dobrym przybliżeniem zmianą logarytmów cen. Jest to jeden z powodów dla których wygodnie jest się w wielu różnych sytuacjach posługiwać logarytmem ceny a nie samą ceną. Wyrażenia (6.277) oraz (6.278) pozwalają na stosowanie zamiennie (w zależności od potrzeb) jednej z trzech definicji chwilowej stopy zwrotu.

Ponieważ ma miejsce następująca dekompozycja

$$X(n \cdot \Delta t) = X(0) + \sum_{j=0}^{n-1} \Delta X(j \cdot \Delta t), \quad (6.279)$$

więc sumaryczna stopa zwrotu (zwana dalej po prostu stopą zwrotu) dana jest w postaci sumy chwilowych stóp zwrotu

$$\begin{aligned} \mathcal{R}(t) &= \frac{X(t) - X(0)}{X(0)} \approx \ln \left(\frac{X(t)}{X(0)} \right) = \ln \left(\prod_{j=0}^{n-1} (1 + \Delta \mathcal{R}(j \cdot \Delta t)) \right) \\ &\approx \sum_{j=0}^{n-1} \Delta \mathcal{R}(j \cdot \Delta t), \end{aligned} \quad (6.280)$$

przy czym mileżaćco założyliśmy, że także wartość sumarycznej zmiany ceny $|X(t) - X(0)| \ll X(0)$. Wynik (6.280) ma charakter zasadniczy, czyniący celowym wprowadzenie kluczowego założenia tradycyjnej analizy ryzyka traktującej chwilowe stopy zwrotu jak niezależne zmienne losowe o identycznym, niekoniecznie gaussowskim rozkładzie wymagającym jedynie aby wariancja chwilowej stopy zwrotu była skończona i niezależna od czasu

$$\sigma^2 = \langle [\Delta \mathcal{R}(t) - \langle \Delta \mathcal{R}(t) \rangle]^2 \rangle = \langle [\Delta \mathcal{R}(t)]^2 \rangle - m^2 < \infty, \quad (6.281)$$

podobnie jak i sama wartość średnia

$$m = \langle \Delta \mathcal{R}(t) \rangle < \infty, \quad (6.282)$$

(innymi słowy, czas jest tutaj traktowany jako jednorodny czyli w sposób stacjonarny).

W związku z powyższym, do stopy zwrotu $\mathcal{R}(t)$ można zastosować CTG. Oznacza to, że dla $n \rightarrow \infty$ centrowana zmienna losowa $\mathcal{R}(n \cdot \Delta t) - \langle \mathcal{R}(n \cdot \Delta t) \rangle$ staje się zmienną gaussowską (czyli podlegającą rozkładowi Gaussa) o wariancji

$$\sigma_{\mathcal{R}}^2(n \cdot \Delta t) = n \cdot \sigma^2 \quad (6.283)$$

i wartości średniej

$$m_{\mathcal{R}}(n \cdot \Delta t) = n \cdot m. \quad (6.284)$$

Zatem jakkolwiek miara poziomu ryzyka, $-\Lambda_G$, (gdzie $\Lambda_G \geq 0$) np. rozrzut trzysigmowy

$$-\Lambda_G = -3 \cdot \sigma_R(t) \quad (6.285)$$

lub rozrzut względny czyli tzw. współczynnik zmienności

$$-\Lambda_G = -\frac{\sigma_R(t)}{|m_R(t)|} = -\frac{\sigma}{|m|} \cdot \sqrt{n}, \quad (6.286)$$

bazuje w tym podejściu na dyspersji σ (gdyż skośność dla rozkładu Gaussa znika a kurtota jest po prostu stała). Wyrażenie (6.286) nazywa się często "jakością inwestycji" a także "stosunkiem sygnał-szum" jak też "stosunkiem Sharpe'a", który oznacza się przez S i zwykle określa w skali roku. Zauważmy, że miary poziomu ryzyka (6.285) i (6.286) należy traktowane komplementarnie. W takim podejściu (które siłą rzeczy jest tutaj dwuparametrowe) straty i zyski są rozłożone symetrycznie wokół wielkości średniej $m_R(t)$.

Zakres stosowalności

Poświęćmy teraz nieco więcej uwagi zakresowi stosowalności powyższego, tradycyjnego podejścia do oceny poziomu ryzyka.

1. Jak już powiedzieliśmy, straty i zyski podlegają tutaj rozkładowi symetrycznemu dlatego występują, średnio rzecz biorąc, z jednakową częstością co na ogół nie ma miejsca dla sytuacji rzeczywistych. Inaczej mówiąc, model taki jest nierealistyczny.
2. Inna niedogodność modelu opiera się na założeniu relatywnie małych zmian ceny waloru co pozostaje w sprzeczności z często obserwowanymi (zwłaszcza w ostatnich dwóch dekadach) znacznymi, skokowymi zmianami cen walorów wykraczającymi znacznie poza obszar trzysigmowy.
3. Ponadto, samo założenie o skończonej wartości dyspersji może być kwestionowane ze względu na istnienie zdarzeń rzadkich. Objawia się to w postaci niestabilnego zachowania estymaty dyspersji ze wzrostem rozmiaru okna czasowego (czyli liczby danych empirycznych budujących dyspersję). Zamiast stabilizowania się tej wielkości, jak to przewiduje Prawo Wielkich Liczb Bernoulliego, obserwuje się co jakiś czas uskoki, których amplituda wyraźnie wzrasta ze wzrostem wielkości okna czasowego z którego biera się dane. Inymi słowy, gdy wzrasta wielkość okna czasowego to tym samym wzrasta prawdopodobieństwo wystąpienia zdarzenia rzadkiego destabilizującego estymatę dyspersji.

6.12.1 Twierdzenia graniczne na giełdzie

Tytułem wielce pouczającego przykładu, postawimy pytanie kluczowe dla tradycyjnej analizy dynamiki walorów, a mianowicie: czy przewidywania CTG są czy też nie są obserwowane na giełdzie? Odpowiedź na to pytanie jest złożona i zależy od tego jaki papier wartościowy lub indeks a także jaki horyzont czasowy i czasokres rozpatrujemy. Mianowicie, dla indeksu Standard & Poor 500 notowanego na Nowojorskiej Giełdzie Papierów Wartościowych (NYSE) - jednej z największych giełd świata, dla horyzontów czasowych od $\Delta t = 1$ [min.] do rzędu $\Delta t = 1$ [td]¹⁷ dane empiryczne przeskalowane za pomocą czynnika $(\Delta t)^{-1/\alpha}$ kolapsują, z dobrym przybliżeniem, do stabilnego, symetrycznego rozkładu Lévy'ego (o ile ich statystyki przeskalujemy za pomocą czynnika odwrotnego), gdzie α jest indeksem rozkładu Lévy'ego. Własność tą nazywa się Uogólnionym Centralnym Twierdzeniem Granicznym (UCTG) lub granicznym twierdzeniem Lévy'ego-Khintchine'a (TLK). Wyniki te zostały uzyskane przez R.N. Mantegna i H.E.Stanley'a (patrz praca pt.: "Scaling behaviour in the dynamics of an economic index", *Nature*, Vol.376, No.6 (1995) 46-49 oraz książka tych samych autorów pt.: "Ekono fizyka. Wprowadzenie", Wydawnictwa Naukowe PWN SA, Warszawa 2001). Analogiczne rezultaty otrzymali B.H.Wang i P.M.Hui dla indeksu Hang Seng giełdy w Hong Kongu (patrz praca pt.: "The distribution and scaling of fluctuations for Hang Seng index in Hong Kong stock market", *The European Physical Journal* Vol. 20, No.20 (2001) 573-579).

Oczywiście, istnieją także walory, których np. dzienne zmiany podlegają rozkładowi Gaussa (patrz rys.6.11) i w związku z tym dają się testandaryzować co umożliwia gaussowski kolaps danych czyli zasadniczo różny od wspomnianego powyżej.

Poniżej omawiamy wnioski płynące z analizy oba rodzajów twierdzeń granicznych jakim mogą podlegać dane empirycznych dostarczane przez rynki finansowe.

6.12.2 Uogólnione Centralne Twierdzenie Graniczne na NYSE

Jak już powiedzieliśmy, złamanie Centralnego Twierdzenia Granicznego czyli zachodzenie Uogólnionego Centralnego Twierdzenia Granicznego dla rynków finansowych pierwsi zaobserwowali Mantegna i Stanley badając indeks S&P 500 notowany dla danych szybkozmiennych o wspomnianych powyżej horyzontach czasowych oraz wspomnianym zakresie. Przedstawiono to na rys.6.12 w postaci odpowiednich rozkładów prawdopodobieństw przy czym, w miarę wzrostu horyzontu czasowego, jak należało się spodziewać, wartość początkowa rozkładu maleje ale za to (zgodnie z normalizacją) rozwartość ramion krzywej dwonowej rośnie. To co było zaskakujące to wzrost spłaszczenia (leptokurtyczności) czyli wzrost nadmiarowej kurtozy ze wzrostem horyzontu czasowego (np. najbardziej leptokurtyczna jest krzywa dla

¹⁷Skrót "td" jest akronimem angielskiej nazwy "trading day" czyli "dzień transakcyjny".

$\Delta t = 1000$ [min.] a najmniej dla $\Delta t = 1$ [min.]) co stoi w jawnej sprzeczności z przewidywaniem CTG, które mówi, że w miarę wzrostu horyzontu czasowego rozkład sumarycznej zmiennej losowej coraz bardziej upodabnia się do rozkładu Gaussa a więc jego leptokurtyczność maleje do zera¹⁸. Był to wynik, który wstrząsnął fizykami analizującymi notowania giełdowe i stał się faktycznym początkiem ekonofizyki czyli początkiem ogromnego wzrostu zainteresowania fizyków finansowymi szeregi czasowymi.

Na rys.6.13 przedstawiono rozkład prawdopodobieństwa znormalizowanej zmiany tego indeksu Z/σ , gdzie $Z(t) \equiv Z_{\Delta t}(t) = Y(t + \Delta t) - Y(t)$, przy czym $Y(t + \Delta t)$ oraz $Y(t)$ są wartościami indeksu S&P 500, odpowiednio, w chwilach $t + \Delta t$ i t natomiast $\sigma \equiv \sigma(\Delta t)$ jest estymatą dyspersji obliczoną na podstawie przedstawionych na rysunku danych empirycznych dla wybranego horyzontu czasowego $\Delta t = 1$ [min.].

Wreszcie, na rys.6.14 przedstawiono wspomiane na wstępie, przeskalowane statystyki indeksu S&P 500 w zależności od przeskalowanej zmiennej losowej \tilde{Z} .

$$P_{\Delta t}(Z) \Rightarrow \tilde{P}(\tilde{Z}) = (\Delta t)^{1/\alpha} \cdot P_{\Delta t}(Z), \quad \tilde{Z} \Rightarrow \frac{Z}{(\Delta t)^{1/\alpha}}, \quad (6.287)$$

gdzie indeks α , wspólny dla wszystkich statystyk $P_{\Delta t}(Z)$, został wyznaczony z ich wartości dla $Z = 0$ czyli z prawdopodobieństwa powrotu do początku a dokładniej z nachylenia prostej $P_{\Delta t}(Z = 0)$ (w skali $\log - \log$) w funkcji Δt (patrz rys.6.15).

6.12.3 Stabilny, symetryczny rozkład Lévy'ego

Kolaps danych uzyskany dzięki skalowaniu (6.287) (patrz rys.6.14), gdzie indeks α uzyskano analizując prawdopodobieństwo powrotu do początku $P_{\Delta t}(Z = 0)$ (patrz rys.6.15) wskazuje, że statystyki dla omawianych horyzontów czasowych można wyrazić za pomocą stabilnego, symetrycznego rozkładu Lévy'ego o indeksie α

$$P_{\Delta t}(Z) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \chi_{\Delta t}(q) \cos(qZ) dq, \quad (6.288)$$

gdzie

$$\chi_{\Delta t}(q) \stackrel{\text{def}}{=} \exp(-\gamma \Delta t |q|^\alpha) \quad (6.289)$$

jest jego funkcją charakterystyczną. Z wyrażeń (6.288) i (6.289) otrzymujemy (po dokonaniu prostej zmiany zmiennych $q \Rightarrow \bar{q} = (\gamma \Delta t)^{1/\alpha} q$), że

$$P_{\Delta t}(Z = 0) = \frac{1}{\pi} \Gamma_{\text{Euler}}\left(\frac{1}{\alpha}\right) \cdot \frac{1}{\alpha \cdot (\gamma \Delta t)^{1/\alpha}}, \quad (6.290)$$

gdyż

$$\Gamma_{\text{Euler}}\left(\frac{1}{\alpha}\right) = \alpha \int_0^\infty \exp(-|\bar{q}|^\alpha) d\bar{q} = \int_0^\infty \exp(-y) \cdot y^{1/\alpha-1} dy, \quad (6.291)$$

¹⁸Oczywiście, o ile wyjściowo mieliśmy także do czynienia z rozkładem Gaussa to nadmiarowa kurtოza cały czas jest równa zero niezależnie od wielkości horyzontu czasowego Δt .

gdzie dokonaliśmy zamiany zmiennych $y = |\bar{q}|^\alpha$. Dysponując konkretną wartością α , wyznaczamy czynnik skalujący γ z wyrażenia (6.290) i wielkości przesunięcia linii prostej (białe kółka) na wykresie (6.15).

Zauważmy, że zarówno eksponent α jak też czynnik skalujący γ zmieniają się w czasie - tutaj z miesiąca na miesiąc; te miesięczne wahania przedstawiono na rys.6.16 i rys.6.17. Jak widać, nawet największa wartość α jest znacznie mniejsza od 2 (typowy błąd pojedynczej wartości wykładnika α dla danego miesiąca podano w opisie rys.6.15).

Podobnie, dokonując zamiany zmiennej $Z \Rightarrow \bar{Z} = Z/(\gamma\Delta t)^{1/\alpha}$ w całość (6.288) otrzymujemy poszukiwane wyrażenie

$$\bar{P}(\bar{Z}) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \exp(-|\bar{q}|^\alpha) \cos(\bar{q}\bar{Z}) d\bar{q} \quad (6.292)$$

niezależne od Δt przy czym jest ono powiązane z wyjściowym prawdopodobieństwem $P(Z)$ pierwszą relacją w (6.287). Zatem, opis zasadniczej części danych empirycznych za pomocą rozkładu Lévy'ego jest dowiedziony chociaż problem opisu kształtu samych "ogonów" jak też znaczny rozrzut danych na "ogonach" (patrz rys.6.14 dla $|\bar{Z}| \gtrsim 0.5$) jest wciąż zagadnieniem otwartym budzącym wielkie zainteresowanie. Warto podkreślić, że np. prawdopodobieństwo powrotu do początku dla rozkładu Gaussa skaluje się z wykładnikiem $\alpha = 2$ co definiuje zupełnie inny (normalny w przeciwieństwie do anomalnego) "świat statystyczny", w którym nie ma miejsca na zdarzenia rzadkie.

6.13 Kolaps danych a Uogólnione Centralne Twierdzenie Graniczne na NYSE

W roku 2006 ukazała się praca (K. Kiyono, Z.R. Struzik, Y. Yamamoto: "Criticality and Phase Transition in Stock-Price Fluctuations", Phys.Rev. Lett. 96 (2006) 068701-1-068701-4), która porównuje ze sobą przebieg indexu S&P 500 w dwóch istotnie różnych przedziałach czasowych:

- (1) zawierającym tzw. "czarny poniedziałek" ("black Monday") czyli poniedziałek 19 października 1987 roku, w którym index stracił niespodziewanie, w przeciągu ok. 10 min. blisko 1/3 swojej wartości (patrz rys.6.18),
- (2) w obszarze nie zawierającym czarnego poniedziałku.

Na rys.6.18 przedstawiono (w skali półlogarytmicznej) przebieg dziennych wartości (na zamknięciu $Z(t)$) indexu S&P 500 w latach 1984-1995. Okres ten jest szczególnie interesujący gdyż zawiera nie tylko tzw. czarny poniedziałek ("black Monday") 19 października 1987 roku, w którym wartość indeksu spadła o blisko 1/3, ale także przejawia wpływ wojny w Zatoce Perskiej. Oprócz tego, na rysunku tym zamieszczono wariogram pokazujący wysokoczęściowe, w 10 min. odstępach

czasu, zmiany logarytmu indeksu, $Y(t) = \ln Z(t)$. Oczywiście, analiza przedstawionego tam szeregu czasowego wymaga jego wcześniejszego detrendowania¹⁹.

Na rys.6.19 przedstawiono (także w skali półlogarytmicznej) statystykę, $P_s(\Delta_s Z)$, detrendowanych zmian

$$\Delta_s Z(t) \stackrel{\text{def}}{=} Y^*(t+s) - Y^*(t), \quad (6.293)$$

(gdzie s jest horyzontem czasowym a gwiazdką oznaczono właśnie wielkość detrendowaną) dla jednego roku nie zawierającego wspomnianych powyżej szczególnych wydarzeń. Widoczne jest przejście od rozkładu niegaussowskiego do rozkładu Gaussa w miarę wzrostu horyzontu czasowego.

Na rys.6.20 porównano statystykę $P_s(\Delta_s Z)$ dla dwóch kolejnych kwartałów roku 1987: rysunek po lewej stronie dotyczy kwartału bezpośrednio poprzedzającego czarny poniedziałek, natomiast rysunek po prawej stronie dotyczy czwartego kwartału tego roku zawierającego czarny poniedziałek. Jak widać, w drugim przypadku brak jest przejścia do rozkładu Gaussa - widoczne są tylko rozkłady niegaussowskie, które można (na drodze odpowiedniego przeskalowania) doprowadzić do tzw. kolapsu danych (patrz rys.6.21); potwierdza to tym samym fakt, że mamy tutaj do czynienia z rozkładem stabilnym a więc, że na NYSE spełnione jest Uogólnione Centralne Twierdzenie Graniczne.

6.14 Nowoczesne podejście do oceny ryzyka

Przypuśćmy, że chcemy ocenić stratę $\Delta X < 0$ jaką moglibyśmy ponieść w horyzoncie czasowym τ , czyli np. na koniec dnia transakcyjnego (wówczas $\tau = 1$ [td]). W tym celu wprowadźmy bazowy rozkład prawdopodobieństwa strat, $P_\tau(\Delta X)$, dla ustalonego horyzontu czasowego τ , dzięki któremu możemy określić prawdopodobieństwo straty nie mniejszej niż jakaś (dowolnie) ustalona przez nas dopuszczalna wielkość progowa $-\Lambda$:

$$P(\Delta X \leq -\Lambda) = P_\leq(-\Lambda) = \int_{-\Lambda_{down}}^{-\Lambda} P_\tau(\Delta X) d\Delta X, \quad (6.294)$$

gdzie prawdopodobieństwo $P_\leq(-\Lambda)$ (wyrażane najczęściej w procentach) nosi nazwę oceny ryzyka lub poziomu ufności, wartość Λ nazywana jest poziomem strat, poziomem ryzyka lub po prostu ryzykiem, wartość Λ_{down} jest maksymalną stratą jaką możemy ponieść, przy czym zakładamy, że $\Lambda \ll \Lambda_{down}$; w związku z tym można przyjąć, że $\Lambda_{down} \approx \infty$ co upraszcza obliczenia nie wpływając na (przybliżoną) postać ostatecznych wzorów. W dalszym ciągu wprowadźmy w równaniu (6.294) jakąś konkretną wartość "poziomu strat" (po angielsku 'level of loss') i oznaczmy ją przez Λ_{VaR} (skrót 'VaR' jest akronimem nazwy 'Value at Risk'); niech będzie to taki poziom strat, który odpowiada zadanej ocenie (poziomu) ryzyka

$$P_{VaR} \stackrel{\text{def}}{=} P_\leq(-\Lambda_{VaR}), \quad (6.295)$$

¹⁹O omówieniu metod detrendowania szeregów czasowych poświęcono osobny rozdział.

równej np. 1%. Oznacza to, że wartość straty większej lub równej stracie progowej Λ_{VaR} wystąpi (średnio rzecz biorąc) raz na $N = 100$ [td]. Zatem, z dobrym przybliżeniem, dla $N \gg 1$, można przyjąć, że

$$\mathcal{P}_{VaR} \approx \frac{1}{N}. \quad (6.296)$$

Ogólnie rzecz biorąc, im większy jest poziom ufności tym mniejszy jest poziom strat. Nastym celem jest wyznaczenie poziomu ryzyka Λ_{VaR} przy zadanej wielkości poziomu ufności \mathcal{P}_{VaR} , tzn. odwrócenie równości (6.295)

$$\Lambda_{VaR} = -\mathcal{P}_{\leq}^{-1}(\mathcal{P}_{VaR}). \quad (6.297)$$

W ogólności jest to zagadnienie rozwiązywalne tylko na drodze numerycznej jednakże dla kilku charakterystycznych przypadków można uzyskać rozwiązanie analityczne o czy mówimy poniżej. Zauważmy, że równanie (6.297) zależy w sposób globalny (sumaryczny) od nieznanego bazowego rozkładu prawdopodobieństwa - jego postać jest wynikiem przyjętego modelu i musi, rzecz jasna podlegać weryfikacji empirycznej.

6.14.1 Zasadnicze pytania

Możemy teraz postawić pytanie charakterystyczne dla Teorii Zdarzeń Ekstremalnych (po angielsku 'Extreme Value Theory') (patrz rozdz.IV) mianowicie, jakie jest prawdopodobieństwo wystąpienia największej pojedynczej straty o zadanej wartości Λ w czasie równym N dni transakcyjnych? Odpowiedź na to pytanie uzyskujemy (analogicznie jak w rozdz.IV) w oparciu o założenie mówiące o statystycznej niezależności strat. Zatem,

$$\begin{aligned} P(\Lambda; N) &= N \cdot [\mathcal{P}_{>}(-\Lambda)]^{N-1} \cdot \mathcal{P}_{>}(-\Lambda) \\ &\approx N \cdot \mathcal{P}_{>}(-\Lambda) \cdot \exp(-N \cdot \mathcal{P}_{\leq}(-\Lambda)), \end{aligned} \quad (6.298)$$

gdzie przy wyprowadzeniu przybliżonej równości w (6.298) przyjęliśmy, że prawdopodobieństwo $\mathcal{P}_{\leq}(-\Lambda)$ jest co najwyżej rzędu 10% tzn., że mamy do czynienia ze stosunkowo dużym ryzykiem czyli stosunkowo niskim poziomem ufności. Wyrażenie (6.298) można zapisać w alternatywnej postaci, którą wykorzystamy w dalszej części

$$P(\Lambda; N) \approx \frac{\mathcal{P}_{>}(-\Lambda)}{\mathcal{P}_{VaR}} \cdot \exp\left(-\frac{\mathcal{P}_{\leq}(-\Lambda)}{\mathcal{P}_{VaR}}\right). \quad (6.299)$$

Postawmy zasadnicze pytanie: dla jakiej wartości Λ prawdopodobieństwo $P(\Lambda; N)$ osiąga maximum? Czyli poszukujemy najbardziej prawdopodobnej wielkości strat. Z równości w (6.298) otrzymujemy konieczny warunek, różniczkując ją stronami po Λ i przyrównując otrzymane wyrażenie do zera

$$(N-1) \cdot \mathcal{P}_{>}(-\Lambda_{max}) = -\mathcal{P}_{>}(-\Lambda_{max}) \cdot \frac{d \ln(\mathcal{P}_{>}(-\Lambda))}{d\Lambda} \Big|_{max}, \quad (6.300)$$

który wykorzystamy do analizy wielce użytecznych przykładów.

6.14.2 Charakterystyczne przykłady

Omówimy teraz trzy charakterystyczne, niezwykle użyteczne przykłady dotyczące, różniących się w sposób istotny, bazowych rozkładów prawdopodobieństw. Zakładamy przy tym dla prostoty, że ograniczamy się tylko do statystyki strat czyli przyjmujemy, że Λ jest nieujemna. Dwa pierwsze przykłady dostarczą nam rozwiązań analitycznych równania (6.297).

Przykład 1.

Przypuśćmy, że bazowy rozkład prawdopodobieństwa

$$P_r(-\Lambda) = \frac{1}{\langle \Lambda \rangle} \cdot \exp\left(-\frac{\Lambda}{\langle \Lambda \rangle}\right), \quad \Lambda \geq 0, \quad (6.301)$$

gdzie przeciętna wielkość strat $\langle \Lambda \rangle (> 0)$ jest możliwa do bezpośredniej estymacji na drodze empirycznej. Stąd,

$$\mathcal{P}_\leq(-\Lambda) = \exp\left(-\frac{\Lambda}{\langle \Lambda \rangle}\right). \quad (6.302)$$

Podstawiając wyrażenia (6.301) i (6.302) do warunku (6.300) otrzymujemy, że

$$\mathcal{P}_\leq(-\Lambda_{max}) = \frac{1}{N} \approx \mathcal{P}_{VaR} = \mathcal{P}_\leq(-\Lambda_{VaR}), \quad (6.303)$$

czyli, że

$$\Lambda_{max} = \Lambda_{VaR} = -\langle \Lambda \rangle \cdot \ln(\mathcal{P}_{VaR}) = \langle \Lambda \rangle \cdot \ln(N), \quad (6.304)$$

co stanowi poszukiwane rozwiązanie równania (6.297). Jak widać, przy zadanej ocenie ryzyka odpowiadający jej poziom ryzyka jest w tym przypadku najbardziej prawdopodobną stratą spośród wszelkich możliwych strat jakie mogą mieć miejsce w przeciągu N dni transakcyjnych i wolno (logarytmicznie) rośnie ze wzrostem N .

Jak już wspomnieliśmy, próg Λ pełni rolę zdarzenia ekstremalnego dlatego jest celowym pytaniem o jego rozkład. Podstawiając wyrażenia (6.301) i (6.302) do wzoru (6.299) otrzymujemy, że

$$P(\Lambda; N) \approx \frac{1}{\langle \Lambda \rangle} \cdot \exp\left(-\frac{\Lambda - \Lambda_{VaR}}{\langle \Lambda \rangle}\right) \exp\left(-\exp\left(-\frac{\Lambda - \Lambda_{VaR}}{\langle \Lambda \rangle}\right)\right), \quad (6.305)$$

czyli ostatecznie, po dokonaniu zamiany zmiennych $(\Lambda - \Lambda_{VaR})/\langle \Lambda \rangle \Rightarrow u$, otrzymujemy, że

$$P(\Lambda; N) \Rightarrow P(u) \approx \exp(-u) \cdot \exp(-\exp(-u)), \quad (6.306)$$

czyli rozkład Gumbela zdarzeń ekstremalnych, który omawialiśmy w rozdz. IV. Oczywiście taki rozkład jest wynikiem wykładniczego charakteru rozkładu bazowego.

Przykład 2.

Załóżmy teraz, że prawdopodobieństwo $P_r(-\Lambda)$ jest zadane (dla dużych wartości Λ) w postaci potęgowego rozkładu Pareto-Lévy'ego

$$P_r(-\Lambda) = \frac{\beta A^\beta}{\Lambda^{1+\beta}}. \quad (6.307)$$

Stąd

$$\mathcal{P}_\leq(-\Lambda) = \frac{A^\beta}{\Lambda^\beta}, \quad (6.308)$$

a więc poziom ryzyka

$$\Lambda_{VaR} = A \cdot \mathcal{P}_{VaR}^{-1/\beta} = A \cdot N^{1/\beta} \quad (6.309)$$

jest potęgową funkcją poziomu ufności o wykładniku $-1/\beta$.

Podstawiając wyrażenia (6.307) i (6.308) do równości (6.300) oraz korzystając z (6.309), otrzymujemy, dla $\beta \cdot N \gg 1$, że

$$\Lambda_{max} = \left(\frac{\beta}{1+\beta} \right)^{1/\beta} \cdot \Lambda_{VaR} \quad (6.310)$$

W przeciwieństwie do poprzedniego przykładu, tylko dla $\beta \gg 1$ wielkość progowa Λ_{VaR} jest najbardziej prawdopodobną wielkością straty. Widać więc jak ważny jest wybór modelu czyli bazowego rozkładu prawdopodobieństwa.

Odpowiemy teraz na pytanie dotyczące zamkniętej postaci rozkładu $P(\Lambda; N)$. Podstawmy w tym celu (6.307) i (6.308) do wyrażenia (6.299)

$$P(\Lambda; N) \approx \frac{1}{\Lambda_{VaR}} \cdot \frac{\beta}{\Lambda/\Lambda_{VaR}} \exp(-\Lambda/\Lambda_{VaR}), \quad (6.311)$$

co po prostej zamianie zmiennych $\Lambda \Rightarrow u = \Lambda/\Lambda_{VaR}$, tak jak to miało miejsce w rozdz.IV, otrzymujemy dyskutowany tam rozkład Fréchéta

$$P(\Lambda; N) \approx P(u) = \frac{\beta}{u^{\beta+1}} \exp(-\frac{1}{u^\beta}) \quad (6.312)$$

dla zdarzeń ekstremalnych. Zatem nawet w przypadku, gdy mamy do czynienia z rozkładem (6.307) posiadającym "pogrubiony ogon" pojęcia "oceny ryzyka" i "poziomu ryzyka" są dobrze określone i pozwalają na prowadzenie skutecznej analizy danych rynkowych. Jest to właśnie zasadnicza korzyść płynąca z takiego podejścia do problemu ryzyka rynkowego.

Aby dokładniej rozważyć otrzymane wyniki wprowadzimy bazowy rozkład prawdopodobieństwa w postaci, której transformata Fouriera jest funkcją Weierstrassa, czyli

$$P_r(\Delta X) = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{1}{M}\right) \cdot \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{M^j} \delta(|\Delta X| - b_0 b^j), \quad M, b > 1, \quad (6.313)$$

dyskutowaną przez nas w rozdz. 6.5 w kontekście przebiegów Weierstrassa. Stąd po podstawieniu do definicji (6.294) otrzymujemy natychmiast, że

$$\mathcal{P} \leq (-\Lambda) = \frac{(b_0)^\beta}{\Lambda^\beta}, \quad \beta \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\ln(M)}{\ln(b)}, \quad (6.314)$$

gdzie milcząc przyjęliśmy, iż rozważamy tylko takie wartości Λ , dla których zachodzi równość $\Lambda(j) = b_0 b^j$. W dalszym ciągu przyjmujemy, że $\frac{1}{\beta M} - \frac{1}{\beta M + 1} \ll 1$ co odpowiada dużym wartościom indeksu j pozwalając, z dobrym przybliżeniem, uciągnąć zmienną Λ w wyrażeniu (6.314) i wykonać różniczkowanie po zmiennej $-\Lambda$. W rezultacie otrzymujemy bazowy rozkład prawdopodobieństwa dla dużych wartości Λ

$$P_r(-\Lambda) \approx \frac{\beta (b_0)^\beta}{\Lambda^{\beta+1}}. \quad (6.315)$$

Jak widać, otrzymaliśmy wyrażenia równoważne odpowiednio (6.307) i (6.308), przy czym stała $A = b_0$. Zauważmy, że operowanie bazowym rozkładem prawdopodobieństwa w postaci (6.313) umożliwia wprowadzenie wariancji zmiennej ΔX dla horyzontu czasowego τ

$$\begin{aligned} \sigma^2(\tau) &= \int_{-\infty}^{\infty} P_r(\Delta X) d\Delta X = (b_0)^2 \left(1 - \frac{1}{M}\right) \sum_{j=0}^{\infty} \left(\frac{b^2}{M}\right)^j \\ &= \begin{cases} (b_0)^2 \frac{1 - \frac{1}{M}}{1 - \frac{b^2}{M}}, & \text{gdy } \beta > 2 \\ \infty, & \text{gdy } \beta < 2 \end{cases} \end{aligned} \quad (6.316)$$

w przeciwieństwie do rozkładu (6.307), który takiej możliwości nie daje. Zostanie ona wykorzystana w dalszej części do porównania zależności poziomu ryzyka od poziomu ufności dla różnych postaci bazowego rozkładu prawdopodobieństwa.

Przykład 3.

Rozważymy teraz bazowy rozkład prawdopodobieństwa zadany w postaci funkcji Gaussa

$$P_r(\Delta X) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\sigma(\tau)} \cdot \exp \left(-\frac{1}{2} \cdot \left(\frac{\Delta X - \langle \Delta X \rangle}{\sigma(\tau)} \right)^2 \right), \quad (6.317)$$

gdzie $\langle \Delta X \rangle$ jest przeciętną wielkością straty (przy czym teraz ΔX może być zarówno wielkością ujemną jak też dodatnią czyli może być zarówno stratą jak też zyskiem),

natomiast wariancja $\sigma^2(\tau) = \sigma_0^2 \cdot \tau$ czyli jest (na mocy CTG) liniową funkcją czasu (σ_0 jest dyspersją szybkozmiennej, elementarnej np. jednonominutowej, straty). Podstawiając (6.317) do równania (6.297) otrzymujemy, że poszukiwany poziom ryzyka

$$\Lambda_{VaR} = \sqrt{2}\sigma_0\sqrt{\tau} \cdot \operatorname{erfc}^{-1}(2P_{VaR}) - \langle \Delta X \rangle \quad (6.318)$$

i wolno wtrącać że wzrostem wielkości horyzontu czasowego. Jak widać, w przybliżeniu gaussowskim poziom ten, jak należało się spodziewać, jest proporcjonalny do dyspersji $\sigma(\tau)$ oraz maleje w sposób monotoniczny ze wzrostem poziomu ufności P_{VaR} - zależność tą w sposób jawny można uzyskać tylko na drodze numerycznej²⁰, w przeciwieństwie do omawianych powyżej przykładów. Co więcej, zarówno prawdopodobieństwo $P(\Lambda; N)$ dane ogólnym wyrażeniem (6.299) jak też wyrażenie na Λ_{max} wynikające bezpośrednio z równania (6.300) przybierają skomplikowane postacie; mianowicie, $P(\Lambda; N)$ nie daje się wyrazić za pomocą funkcji elementarnych natomiast uzyskanie Λ_{max} w jawnej postaci jest możliwe tylko na drodze numerycznego rozwiązywania równania przestępnego. Komplikuje to w tym przypadku analizę poziomu ryzyka z punktu widzenia zdarzeń ekstremalnych.

6.14.3 Poziom ryzyka a zmienność

Należy podkreślić, że w ogólności nie istnieje liniowa zależność pomiędzy poziomem ryzyka Λ_{VaR} a zmiennością $\sigma(\tau)$ nawet jeżeli ta ostatnia wielkość jest skończona i to pomimo, że spełniona jest nierówność Czebyszewa

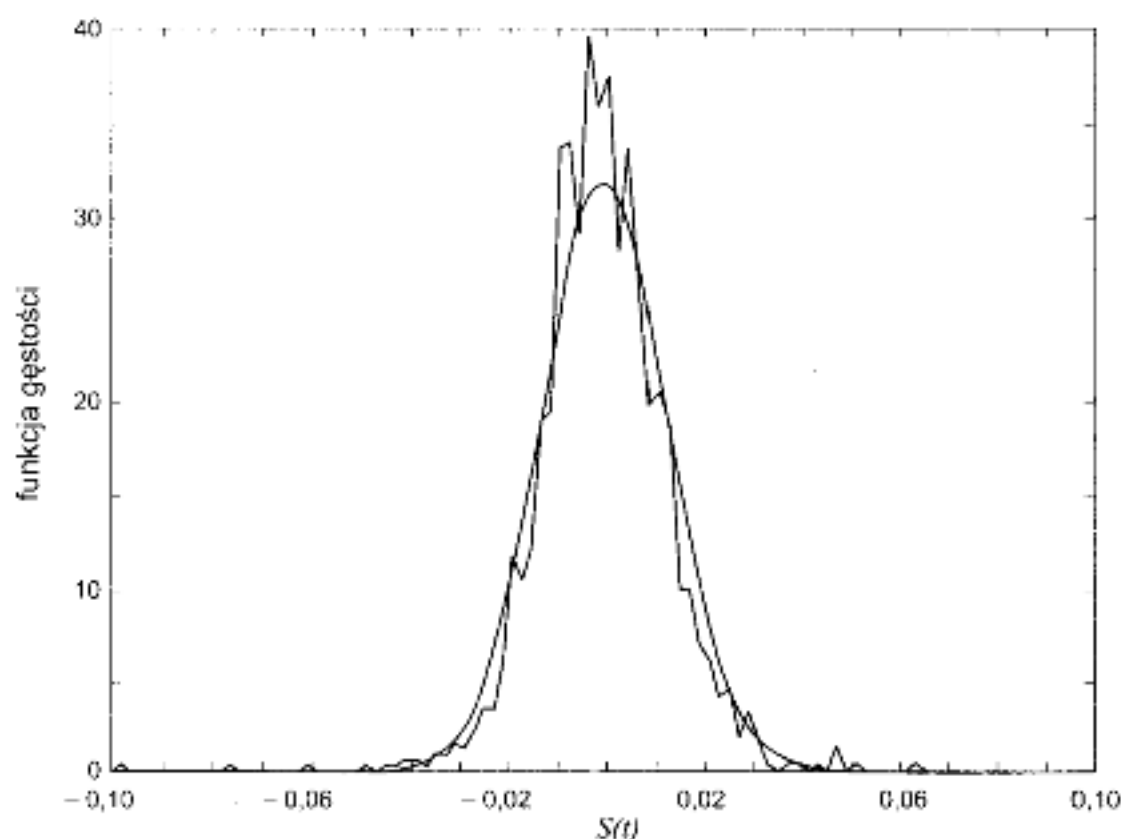
$$P_{VaR} \leq \frac{\sigma^2(\tau)}{(\Lambda_{VaR})^2}, \quad (6.319)$$

gdzie wyrażenie $(\Lambda_{VaR})^2 \cdot P_{VaR}$ jest na ogół nieliniową funkcją Λ_{VaR} .

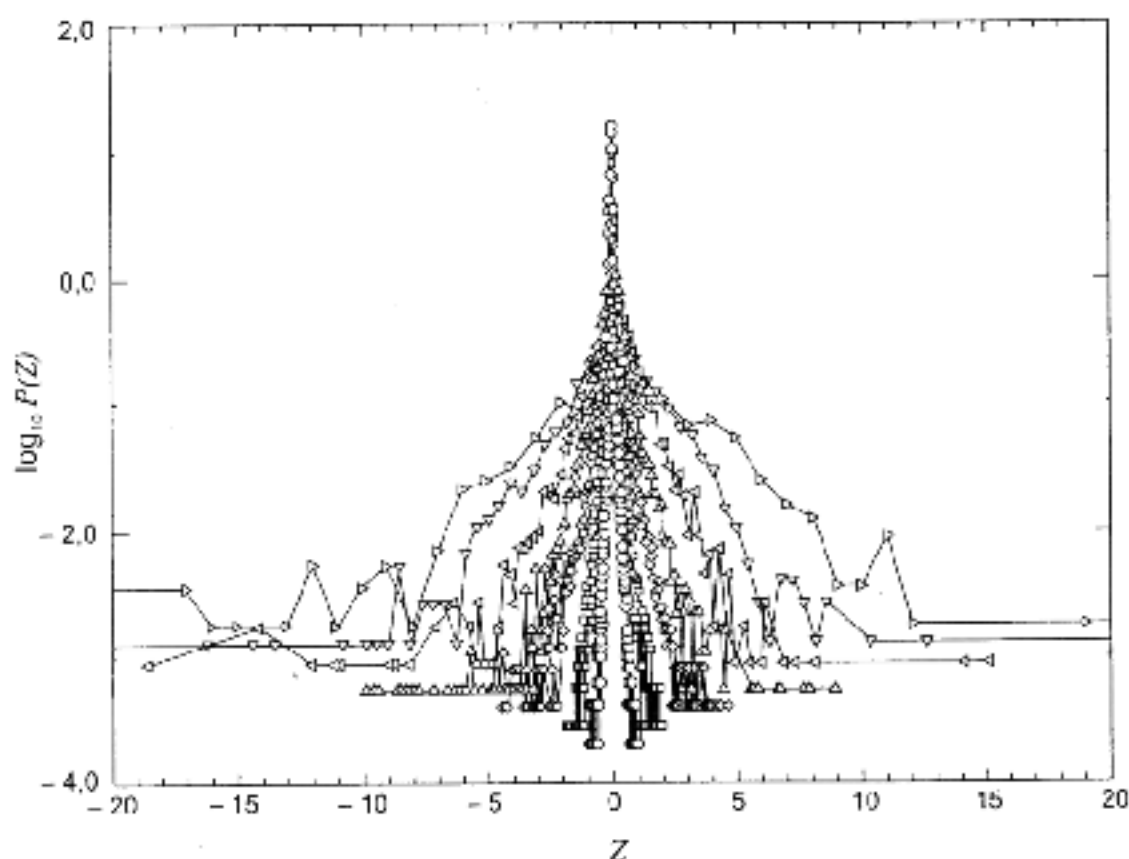
Aby to zilustrować wróćmy do przykładów rozważanych w rozdz.6.14.2. Na rysunku X porównaliśmy ze sobą zależność poziomu ryzyka Λ_{VaR} od N daną wyrażeniami (6.304), (6.309)²¹ dla $\beta = 3$ i (6.318) przy założeniu, że wszystkie trzy rozkłady bazowe $P_r(\Delta X)$ mają jednakową dyspersję $\sigma(\tau)$.

²⁰Przypomnijmy, funkcja $\operatorname{erfc}(x) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \cdot \int_x^\infty \exp(-y^2) dy$.

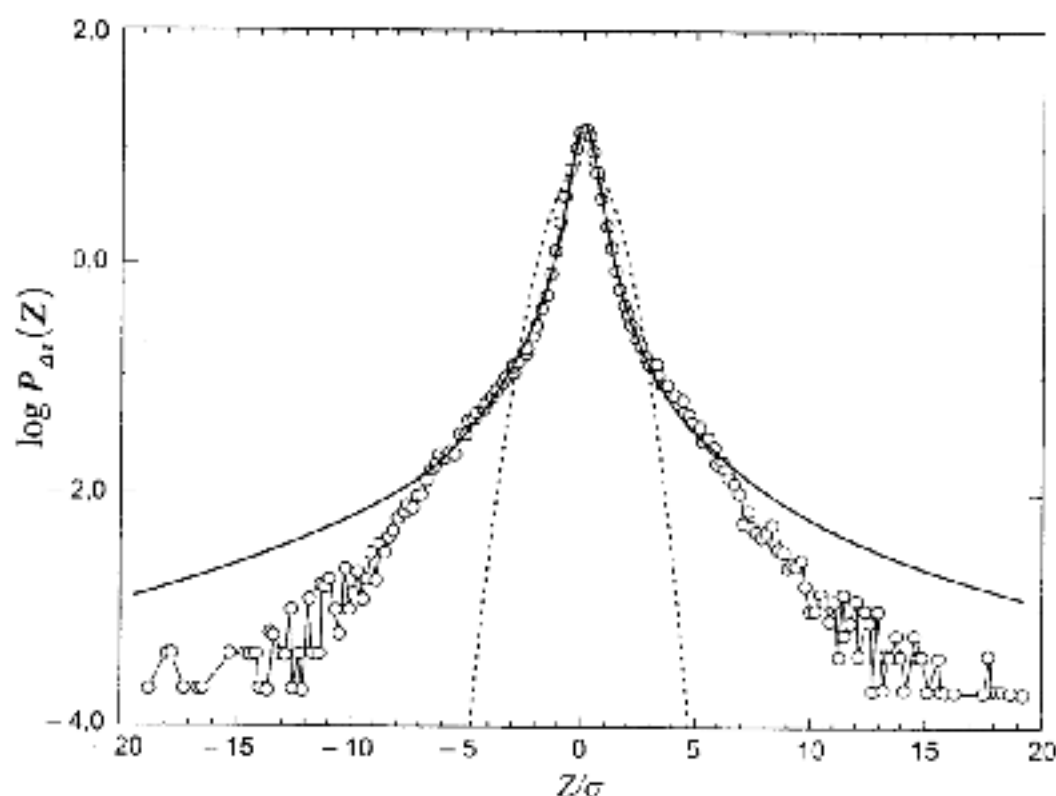
²¹Dokładniej rzecz biorąc, rozważaliśmy wyrażenie $P_r(\Delta X) = \frac{1}{\tau} \exp\left(-\frac{\sigma(\tau)^2}{4\sigma(\tau)^2}\right)$, $\Delta X \leq 0$.



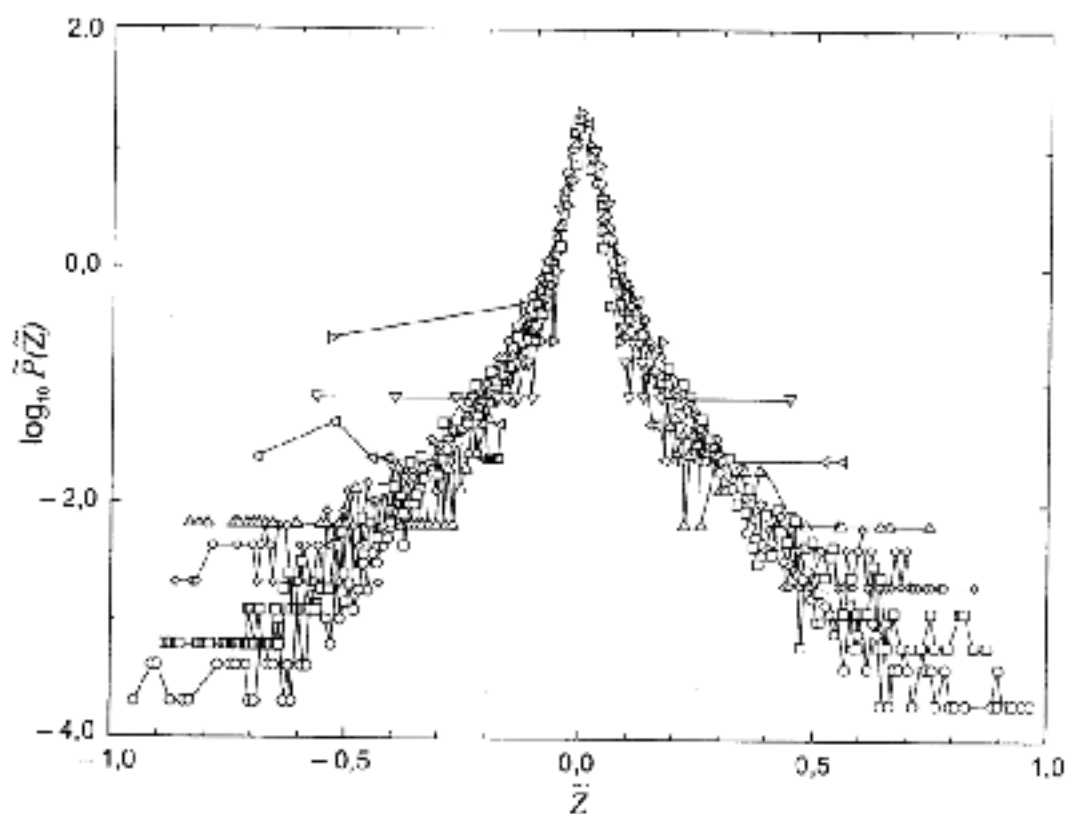
Rysunek 6.11: Empiryczny rozkład prawdopodobieństwa logarytmu dziennych zmian ceny akcji $S(t) = \ln Y(t + \Delta t) - \ln Y(t)$, gdzie $Y(t + \Delta t)$ oraz $Y(t)$ są cenami akcji firmy Chevron notowanej na giełdzie nowojorskiej w okresie od 1989 do 1995 roku, przy czym tutaj $\Delta t = 1$ [td]. Gładka linia jest krzywą Gaussa o odchyleniu standardowym wyznaczonym z danych empirycznych (połączonych linią tygrykową). Jest to rozkład typowy dla tej firmy zarówno dla znacznie mniejszych jak i znacznie większych horyzontów czasowych.



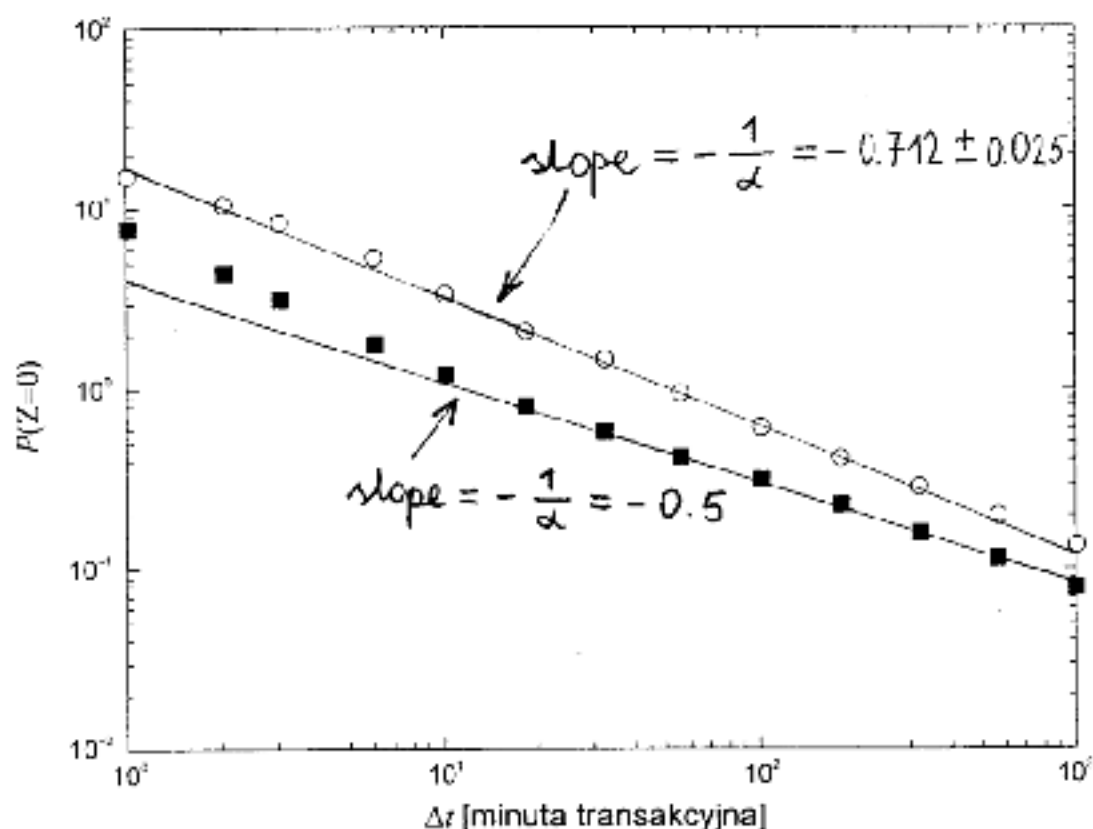
Rysunek 6.12: Porównanie rozkładów prawdopodobieństw otrzymanych dla szybkozmennych danych empirycznych dotyczących indeksu S&P 500 dla horyzontu czasowego $\Delta t = 1, 3, 10, 32, 100, 316, 1000$ [min.], przy czym $Z(t) \equiv Z_{\Delta t}(t) = Y(t + \Delta t) - Y(t)$, gdzie $Y(t + \Delta t)$ oraz $Y(t)$ są wartościami indeksu S&P 500, odpowiednio, w chwilach $t + \Delta t$ i t . Zauważmy, że w zasadzie nadmiarowa kurtocza rozkładu wzrasta czyli maksimum obniża się i trochę spłaszcza (co niestety nie jest dostatecznie widoczne w przyjętej skali rysunku) a ramiona rozkładu rozchylają się w miarę wzrostu horyzontu czasowego Δt .



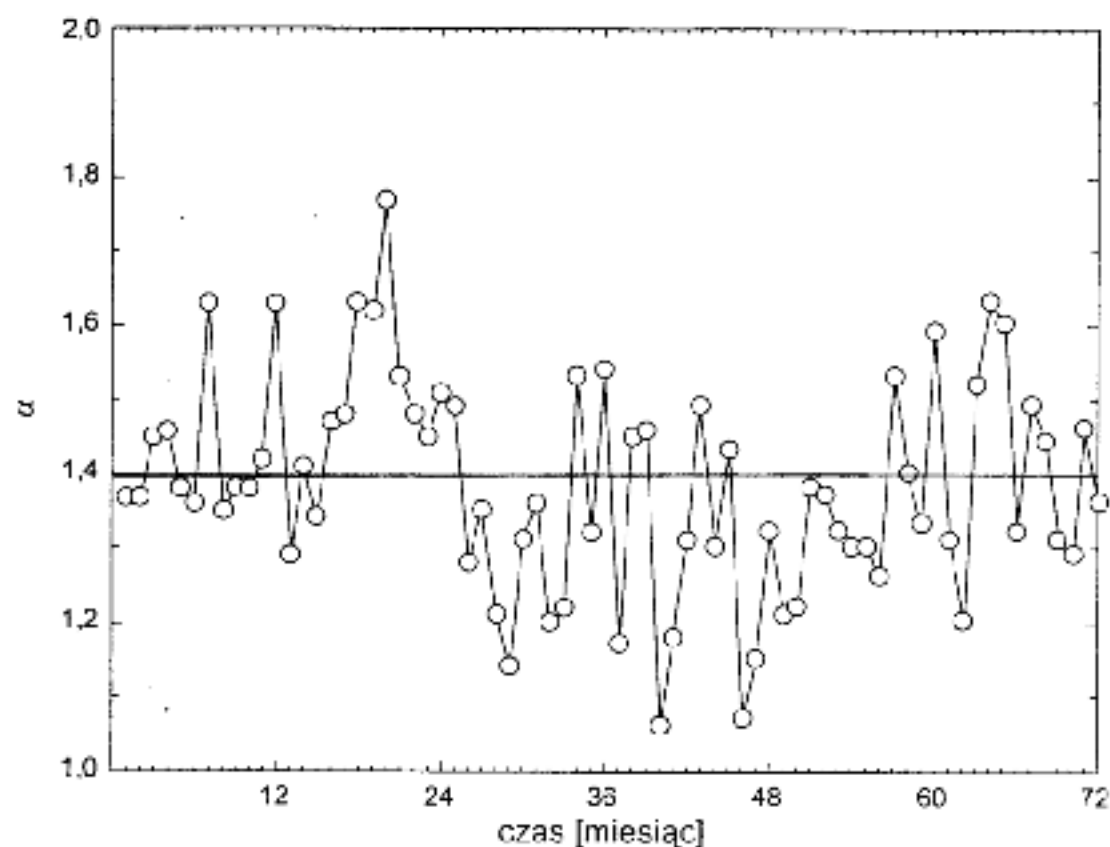
Rysunek 6.13: Przykładowe porównanie rozkładów prawdopodobieństw otrzymanych dla szybkozmennych danych empirycznych dotyczących indeksu S&P 500 dla horyzontu czasowego $\Delta t = 1$ [min.], przy czym $Z(t) \equiv Z_{\Delta t}(t) = Y(t + \Delta t) - Y(t)$, gdzie $Y(t + \Delta t)$ oraz $Y(t)$ są wartościami indeksu S&P 500, odpowiednio, w chwilach $t + \Delta t$ i t natomiast σ jest estymatą dyspersji obliczoną na podstawie wszystkich przedstawionych na rysunku danych empirycznych. Linia ciągła przedstawia rozkład Lévy'ego o wykładniku $\alpha = 1.40$ i czynniku skalowania $\gamma = 0.00375$, natomiast linia kropkowana jest rozkładem Gaussa centrowanym w $Z/\sigma = 0$ i sparametryzowanym wspomnianą powyżej estymatą dyspersji σ .



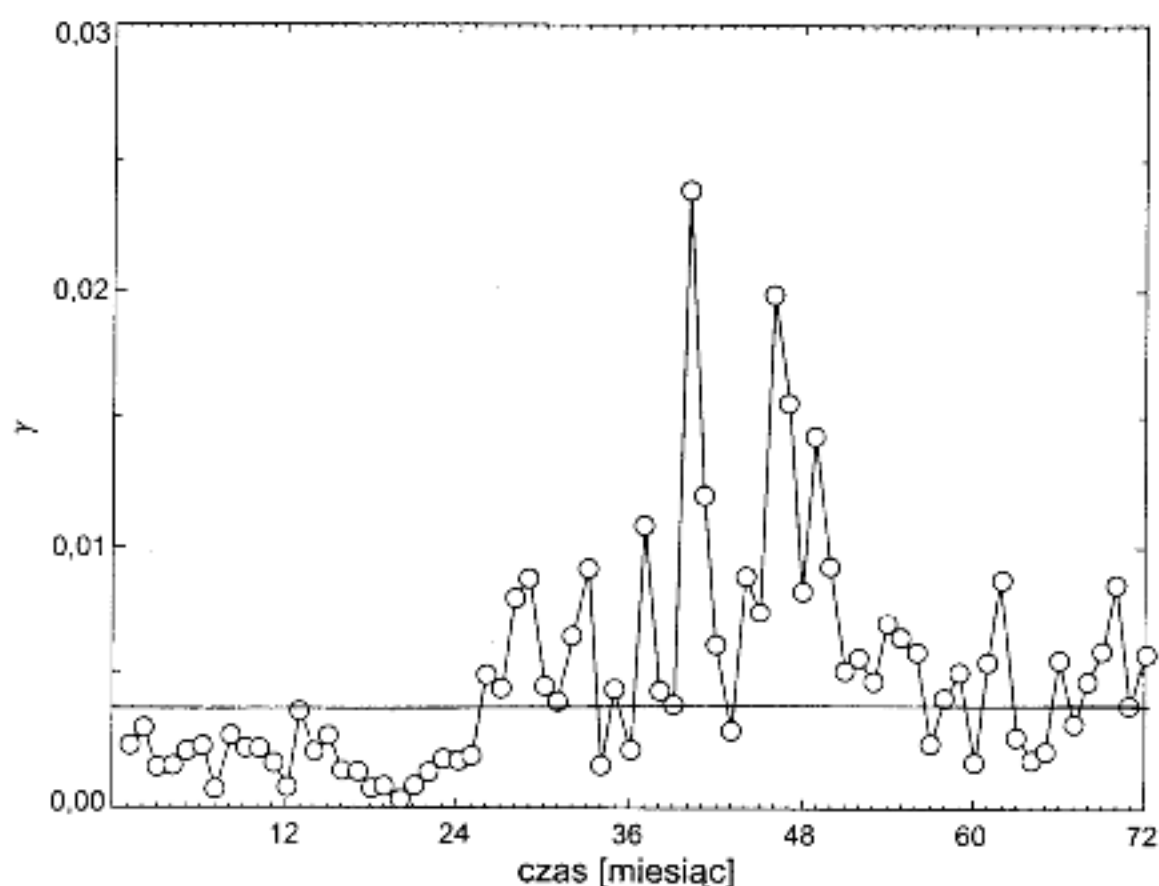
Rysunek 6.14: Porównanie rozkładów prawdopodobieństw otrzymanych dla szybko-
zmiennych danych empirycznych dotyczących indeksu S&P 500 dla horyzontu cza-
sowego $\Delta t = 1, 3, 10, 32, 100, 316, 1000$ [min.], przy czym $\tilde{Z}(t)$ jest standaryzowaną
zmienną losową.



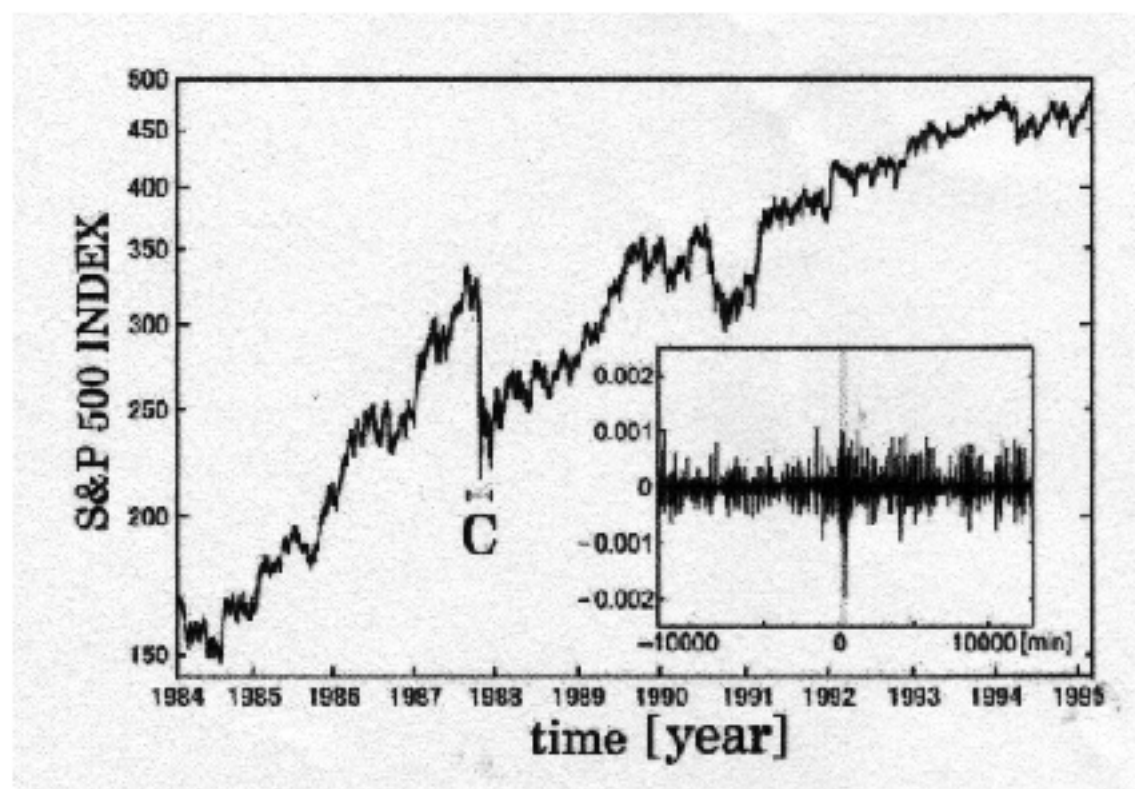
Rysunek 6.15: Prawdopodobieństwo powrotu do początku $P_{\Delta t}(Z=0)$ (białe kółka) w funkcji horyzontu czasowego Δt . Nachylenie prostej (w skali $\log-\log$) utożsamiamy z wykładnikiem $1/\alpha = 0.712 \pm 0.025$ co daje $\alpha = 1.40 \pm 0.05$. Dla porównania zamieszczono wyniki dla analogicznego prawdopodobieństwa $P_G(Z=0)$ (czarne kwadraty) otrzymanego z rozkładu Gaussa; wariancję takiego procesu wyznaczono z dostępnych danych empirycznych dla każdej wartości Δt osobno.



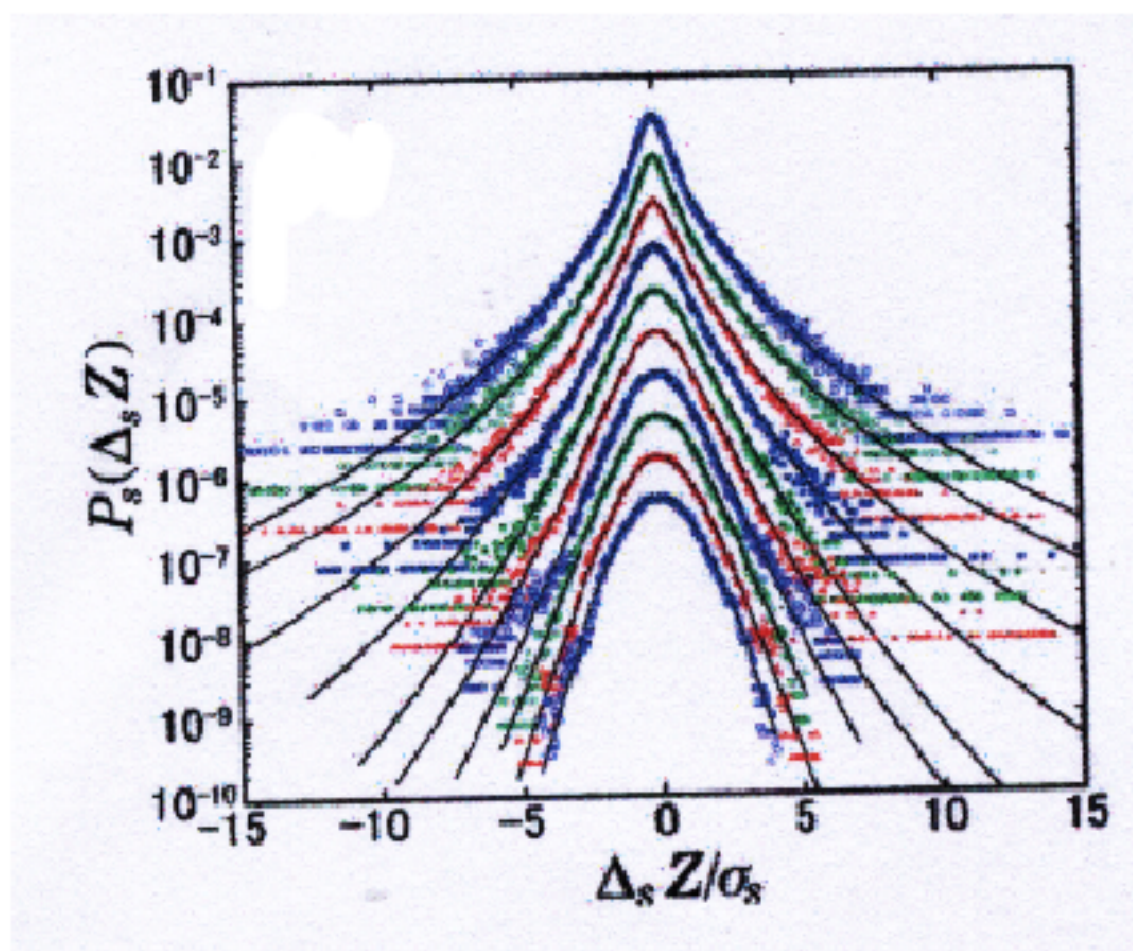
Rysunek 6.16: Zależność czasowa wykładnika α wyznaczona na podstawie zależności prawdopodobieństwa powrotu do początku od wielkości horyzontu czasowego (liczonego w miesiącach). Pozioma ciągła linia została poprowadzona dla przeciętnej wartości $\alpha = 1.40$.



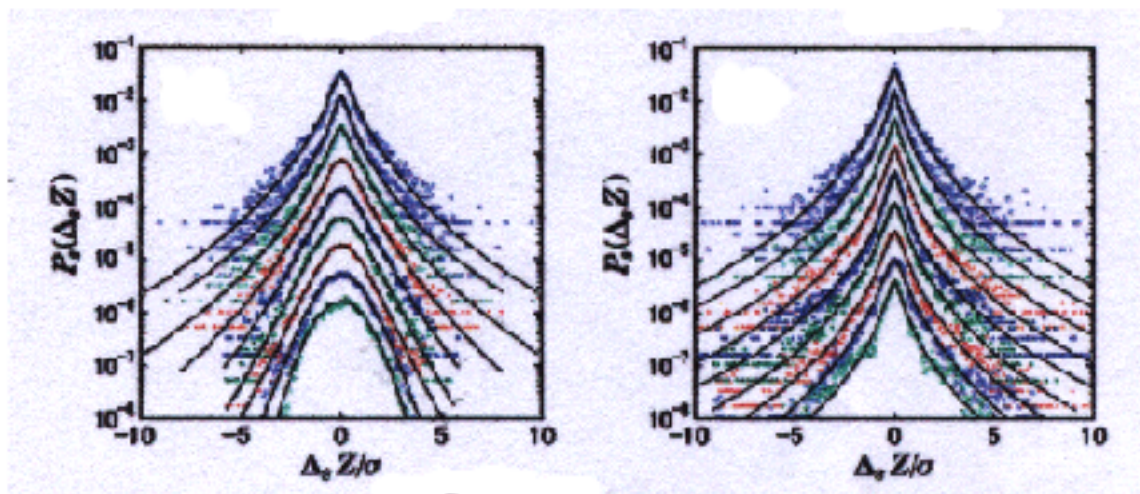
Rysunek 6.17: Zależność czasowa czynnika skalującego γ wyznaczona na podstawie zależności prawdopodobieństwa powrotu do początku od wielkości horyzontu czasowego (liczonego w miesiącach). Pozioma ciągła linia została poprowadzona dla przeciętnej wartości $\gamma = 0.00375$.



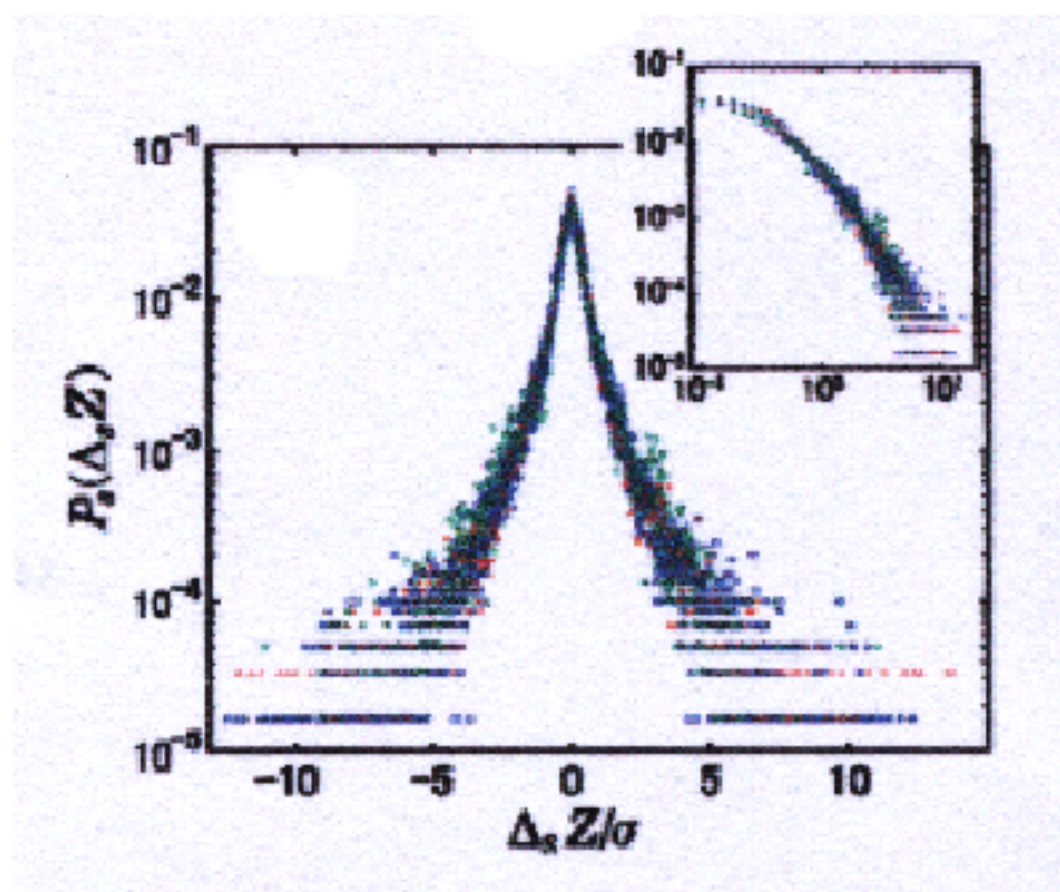
Rysunek 6.18: Dzielne wartości indeksu S&P 500 w latach 1984-1996, przy czym w prawej dolnej części zamieszczono powiększony wariogram przedziału C , w którym znajduje się czarny poniedziałek widoczny w postaci najdłuższego odcinka leżącego po stronie ujemnej; stary pasek znajdujący się w centrum wariogramu ciągnący się poprzez całą jego wysokość oznacza po prostu pełny dzień transakcyjny czarny poniedziałek 19 października 1987 roku.



Rysunek 6.19: Statystyka $P_s(\Delta_s Z)$ detrendowanych zmian $\Delta_s Z$ w zależności od wielkości tych zmian po standaryzacji $\Delta_s Z / \sigma_s$ dla różnych horyzontów czasowych (idąc od góry $s = 8, 16, 32, 64, 128, 256, 512, 1024, 2048, 4096 \text{ min.}$).



Rysunek 6.20: Statystyka $P_s(\Delta_s Z)$ odetrendowanych zmian $\Delta_s Z$ w zależności od wielkości tych zmian po standaryzacji $\Delta_s Z/\sigma_s$ dla różnych horyzontów czasowych (idąc od góry $s = 8, 16, 32, 64, 128, 256, 512, 1024, 2048$ min.) dla kwartału poprzedzającego czarny poniedziałek (rysunek po lewej stronie) i dla kwartału zawierającego czarny poniedziałek (rysunek po prawej stronie).



Rysunek 6.21: Kolaps danych czyli statystyka $P_s(\Delta_s Z)$ detrendowanych zmian $\Delta_s Z$ w zależności od wielkości tych zmian po przeskalowaniu zmiennej $\Delta_s Z/\sigma_s$ i tegoż rozkładu dla kolejnych horyzontów czasowych (idąc od góry $s = 8, 16, 32, 64, 128, 256, 512, 1024, 2048 \text{ min.}$) dla kwartału zawierającego czarny poniedziałek.

Część VI

Fraktalne równanie dyfuzji oraz fraktalne równanie Fokkera-Plancka (w przygotowaniu)

Część VII

**Dyfuzja anomalna a dynamika
chaotyczna (w przygotowaniu)**

Dynamika nieliniowa prowadząca do zachowań chaotycznych potrafi także doprowadzić do statystyk posiadających algebraicznie zanikające "ogony". Z tego punktu widzenia, badano zwłaszcza ruch w tzw. potencjale typu "kartonu na jajka" oraz ruch okresowo uderzanego rotora.

6.15 Potencjał typu "kartonu na jajka"

Periodyczny potencjał typu "kartonu na jajka" dany jest wzorem

$$V(x, y) = A + B[\cos(x) + \cos(y)] + C \cos(x) \cos(y) \quad (6.320)$$

Na rys.1(6.15) przedstawiono potencjał typu "kartonu na jajka" w funkcji x, y . Jak widać, charakteryzuje się on dużą liczbą punktów siodłowych. Ruch pojedynczego punktu materialnego (o masie jednostkowej) opisany jest następującymi równaniami dynamiki Newtona

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= v_x, \\ \frac{dy}{dt} &= v_y, \\ \frac{dv_x}{dt} &= \sin(x)[B + C \cos(y)], \\ \frac{dv_y}{dt} &= \sin(y)[B + C \cos(x)], \end{aligned} \quad (6.321)$$

gdzie, jak zwykle (x, y) jest wektorem położenia punktu materialnego a (v_x, v_y) jego wektorem prędkości.

Rozdział 7

Dyfuzja anomalna w chaotycznej adwekcji

Kluczową rolę w zaobserwowaniu zjawiska anomalnej sub- oraz superdyfuzji odgrywają wiry. Innymi słowy, dyfuzja anomalna może pojawić się tylko wtedy gdy ma miejsce turbulencja.

7.1 Doświadczenie Swinney’a i inn.

Rozdział 8

Channeling a ujemny efekt Halla

Rozdział 9

Bilard Sinai'a oraz bilard Cassiniego - demon Maxwella w akcji

Rozdział 10

Hierarchiczne wysepki na powierzchni Poincaré - złamanie ergodyczności

Część VIII

Ewoluuujące sieci (w przygotowaniu)

Część IX

Dodatki

Dodatek A

Pochodna fraktalna dowolnego stopnia - definicja Riemanna Liouville'a

W niniejszym dodatku przedstawimy definicję Riemanna-Liouville'a pochodnej fraktalnej (czyli ułamkowej). Podejście składa się z trzech kroków.

Krok pierwszy: definicja ujemnej pochodnej całkowitej stopnia $-n$.

Jak już wspomnieliśmy w rozdz.2.4 ujemna pochodna stopnia -1 to po prostu pojedyncza całka Riemanna (patrz wzór (2.25)). Naturalnie, pochodna stopnia całkowitego $-n$ (gdzie n jest liczbą naturalną) to całka n -krotna; zatem,

$$\frac{d^{-n}f(t)}{dt^{-n}} = \int_0^t dt_{n-1} \int_0^{t_{n-1}} dt_{n-2} \dots \int_0^{t_1} dt_0 f(t_0) = \frac{1}{(n-1)!} \int_0^t dt' \frac{f(t')}{(t-t')^{1-n}}, \quad (\text{A.1})$$

co stanowi punkt wyjścia ogólniejszej definicji.

Krok drugi: definicja ujemnej pochodnej fraktalnej stopnia $-\alpha$.

Bezpośrednim uogólnieniem pochodnej stopnia $-n$ na pochodną dowolnego ujemnego stopnia $-\alpha$ (gdzie α jest dodatnią liczbą rzeczywistą) jest zastąpienie w ostatniej całce po prawej stronie wyrażenia (A.1) znajdującej się tam silni $(n-1)!$ przez $\Gamma_{\text{Eulera}}(\alpha)$ oraz wykładnika n przez α . Wówczas możemy wprowadzić definicję

$$\frac{d^{-\alpha}f(t)}{dt^{-\alpha}} \stackrel{\text{def.}}{=} \frac{1}{\Gamma_{\text{Eulera}}(\alpha)} \int_0^t dt' \frac{f(t')}{(t-t')^{1-\alpha}}; \quad (\text{A.2})$$

warto wiedzieć, że w przypadku ogólniejszym, gdy dolna granica całkowania może być różna od zera, stosuje się oznaczenie

$${}_a D_t^{-\alpha} f(t) \stackrel{\text{def.}}{=} \frac{1}{\Gamma_{\text{Eulera}}(\alpha)} \int_a^t dt' \frac{f(t')}{(t-t')^{1-\alpha}}, \quad (\text{A.3})$$

skąd dla $\alpha = 0$ mamy oczywiście

$${}_0D_t^{-\alpha} f(t) = \frac{d^{-\alpha} f(t)}{dt^{-\alpha}}. \quad (\text{A.4})$$

Teraz możemy już odpowiedzieć na pytanie: jak zdefiniować pochodną fraktalną stopnia α ?

Krok trzeci: definicja pochodnej fraktalnej stopnia $\alpha > 0$.

Odpowiedź na postawione powyżej pytanie jest już bardzo prosta. Wystarczy bowiem n razy zróżniczkować pochodną fraktalną stopnia $\alpha - n (< 0)$

$${}_aD_t^{\alpha} f(t) \stackrel{\text{def.}}{=} \frac{d^n}{dt^n} ({}_aD_t^{\alpha-n} f(t)), \quad (\text{A.5})$$

co stanowi definicję Riemanna-Liouville'a pochodnej fraktalnej (dodatniego stopnia rzeczywistego). W dalszym ciągu używać będziemy tej pochodnej jedynie dla $\alpha = 0$. Inny wykorzystywany szczególny przypadek to gdy $\alpha = \infty$ - wtedy nazywa się ona pochodną fraktalną Weyla. Oczywiście, z tego punktu widzenia zarówno równanie relaksacji fraktalnej (2.28) jak i dyfuzji fraktalnej (2.50) są niejednoznaczne ze względu na dowolność wyboru dolnej granicy całkowania.

A.1 Podstawowe własności pochodnej fraktalnej

Podamy teraz szereg własności pochodnej fraktalnej, które umożliwią nam operowanie tym narzędziem wielce użytecznym w analizie procesów niegaussowskich.

Po pierwsze, zauważmy, że dowolna pochodna fraktalna funkcji potęgowej wynosi

$${}_0D_t^{\alpha} t^{\mu} = \frac{\Gamma_{\text{Euler}}(\mu + 1)}{\Gamma_{\text{Euler}}(\mu + 1 - \alpha)} t^{\mu - \alpha} \quad (\text{A.6})$$

skąd

$$\begin{aligned} {}_0D_t^{\alpha} \exp(t) &= {}_0D_t^{\alpha} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{t^m}{\Gamma_{\text{Euler}}(m+1)} = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{t^{m-\alpha}}{\Gamma_{\text{Euler}}(m+1-\alpha)} \\ &= \frac{t^{-\alpha}}{\Gamma_{\text{Euler}}(1-\alpha)} {}_1F_1(1, 1-\alpha, t). \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

Przy okazji warto zaznaczyć, że pochodna fraktalna Weyla daje (podobnie jak zwykła pochodna)

$${}_{\infty}D_t^{\alpha} \exp(t) = \exp(t), \quad (\text{A.8})$$

dla dowolnego rzeczywistego α .

Po drugie, pokażemy czemu równa jest transformata Laplace'a pochodnej fraktalnej.

Dodatek B

Własności średniej po zespole

Wyprowadzimy dwie niezbędne własności średniej po zespole statystycznym dotyczące pojedynczych przemieszczeń błądzącej cząstki - są to *addytywność* i *multiplikatywność*.

Własność addytywności wynika bezpośrednio z addytywności granicy w definicji (3.6) co dotyczy zarówno skończonych jak i nieskończonych wartości średnich.

Własność multiplikatywności dotyczy przypadku niezależnych (nieskorelowanych) pojedynczych przemieszczeń tej samej cząsteczki. Mówi ona, że *średnia z iloczynu niezależnych zmiennych losowych jest równa iloczynowi średnich tych zmiennych*. Aby wykazać tę własność rozważmy zespół statystyczny złożony z L doświadczeń podobnych, z których każde składa się z n pojedynczych przemieszczeń cząsteczki. (Pod pojęciem 'doświadczeń podobnych' rozumie się takie, które są przeprowadzane w identycznych warunkach termodynamicznych.) Rozważmy przykładowo średnią po zespole statystycznym z iloczynu dwóch pierwszych przemieszczeń $\langle \vec{x}_1 \cdot \vec{x}_2 \rangle$. Na mocy definicji (3.6)

$$\langle \vec{x}_1 \cdot \vec{x}_2 \rangle \approx \frac{1}{L} \sum_{l=1}^L \vec{x}_1^l \cdot \vec{x}_2^l. \quad (\text{B.1})$$

Wybermy teraz z całego zespołu statystycznego tylko takie doświadczenia w których wektor pierwszego przemieszczenia cząsteczki jest taki sam jak w pierwszym doświadczeniu ($l = 1$). Mamy wówczas,

$$\vec{x}_1^l = \vec{x}_1^1, \quad (\text{B.2})$$

gdzie wskaźnik l_1 numeruje wspomniane powyżej doświadczenia. Liczebność zespołu L przyjmujemy tak dużą, aby liczba tych doświadczeń L' była wystarczająca do zbudowania następującej średniej

$$\vec{x}_1^1 \cdot \left\{ \frac{1}{L'} \sum_{l_1} \vec{x}_2^{l_1} \right\} \approx \vec{x}_1^1 \cdot \langle \vec{x}_2 \rangle. \quad (\text{B.3})$$

Oczywiście, pozostała liczba doświadczeń w tym zespole statystycznym jest wystarczająca dla skonstruowania analogicznych średnich skojarzonych ze wszystkimi

pozostałymi, różnymi wektorami pierwszego przemieszczenia. A zatem sumę w (B.1) możemy, z dobrym przybliżeniem, wyrazić następująco,

$$\frac{1}{L} \sum_{i=1}^L \vec{x}_1^i \cdot \vec{x}_2^i \approx \left\{ \frac{1}{L'} \sum_{i'=1}^{L'} \vec{x}_1^{i'} \right\} \cdot \langle \vec{x}_2 \rangle \approx \langle \vec{x}_1 \rangle \cdot \langle \vec{x}_2 \rangle \quad (\text{B.4})$$

gdzie, z dobrym przybliżeniem, przyjęliśmy, że $L = (L')^2$; wynika to z faktu, że wektory \vec{x}_1^i i \vec{x}_1^j są od siebie niezależne, więc należy oczekiwać, że liczba różnych wektorów pierwszego przemieszczenia składających się na średnią $\langle \vec{x}_1 \rangle$ jest także, z dobrym przybliżeniem, równa L' . Poszukiwana własność wynika z porównania wyrażenie (B.1) z (B.4).

Dodatek C

Asymptotyka funkcji rozkładu czasów oczekiwania

Po pierwsze, rozważamy sytuację dla krótkich czasów tzn. gdy $\gamma_0 t \ll 1$; wówczas funkcję wykładniczą w funkcji podcałkowej można rozwinąć w szereg potęgowy, ograniczając się tylko do trzech pierwszych wyrazów,

$$\begin{aligned}\phi(t) &\approx \frac{\alpha}{(\gamma_0)^\alpha} \frac{1}{t^{1+\alpha}} \int_0^{\gamma_0 t} y^\alpha (1 - y + \frac{1}{2}y^2) dy \\ &= \gamma_0 \alpha \left[\frac{1}{1+\alpha} - \frac{1}{2+\alpha} \gamma_0 t + \frac{1}{2} \frac{1}{3+\alpha} (\gamma_0 t)^2 \right].\end{aligned}\quad (C.1)$$

Widać, że $\phi(t=0) = \gamma_0 \frac{\alpha}{1+\alpha}$ jest nieznikającą, skończoną wartością. Ponadto, z (C.1) wynika, że trzeci wyraz rozwinięcia jest znacznie mniejszy od drugiego co oznacza, że funkcja $\phi(t)$ maleje (z dobrym przybliżeniem) liniowo z czasem dla krótkich czasów.

Po drugie zauważmy, że dla $0 \leq \alpha \leq 1$ oraz $y \geq 1$ funkcja podcałkowa podlega prostemu oszacowaniu

$$\exp(-y) \leq y^\alpha \exp(-y) \leq y \exp(-y), \quad (C.2)$$

przy czym dla $\alpha \neq 0, 1$, obie równości zachodzą jednocześnie tylko dla skrajnych wartości $y = 1$ albo $y = \infty$. W ogólności dla $m \leq \alpha \leq m+1$, $m = 0, 1, 2, \dots$, ma miejsce oszacowanie

$$y^m \exp(-y) \leq y^\alpha \exp(-y) \leq y^{m+1} \exp(-y); \quad (C.3)$$

dalsze rachunki prowadzimy tylko dla przypadku $m = 0$, pozostawiając sytuację dowolnego naturalnego m zainteresowanemu Czytelnikowi. Należy zaznaczyć, przypadki marginalne $\alpha = m$, $m = 0, 1, 2, \dots$, można obliczyć wprost (patrz poniżej, na zakończenie przykładowy rachunek dla $\alpha = 1$).

Z relacji (C.2) otrzymujemy dla $\gamma_0 t \geq 1$ oszacowanie całkowe,

$$\int_{\gamma_0 t}^{\infty} \exp(-y) dy \leq \int_{\gamma_0 t}^{\infty} y^\alpha \exp(-y) dy \leq \int_{\gamma_0 t}^{\infty} y \exp(-y) dy, \quad (C.4)$$

przy czym dla $\alpha \neq 0, 1$, obie równości zachodzą jednocześnie tylko w granicy $\gamma_0 t \rightarrow \infty$; z (C.4) wynika poszukiwane oszacowanie

$$\exp(-\gamma_0 t) \leq \int_{\gamma_0 t}^{\infty} y^{\alpha} \exp(-y) dy \leq 2 \exp(-\gamma_0 t). \quad (\text{C.5})$$

Co więcej, zgodnie z definicją funkcji Γ mamy,

$$\int_0^{\gamma_0 t} y^{\alpha} \exp(-y) dy = \Gamma(1 + \alpha) - \int_{\gamma_0 t}^{\infty} y^{\alpha} \exp(-y) dy. \quad (\text{C.6})$$

Dalej, korzystając z oszacowania (C.5) oraz równości (C.6), otrzymujemy

$$\begin{aligned} \Gamma(1 + \alpha) - 2 \exp(-\gamma_0 t) &\leq \int_0^{\gamma_0 t} y^{\alpha} \exp(-y) dy \\ &\leq \Gamma(1 + \alpha) - \exp(-\gamma_0 t). \end{aligned} \quad (\text{C.7})$$

Stąd, dla asymptotycznie długiego czasu (czyli $\gamma_0 t \gg 1$) mamy z dobrym przybliżeniem

$$\int_0^{\gamma_0 t \gg 1} y^{\alpha} \exp(-y) dy \approx \Gamma(1 + \alpha). \quad (\text{C.8})$$

Zatem, przy tych warunkach uzyskujemy z dobrym przybliżeniem, że

$$\phi(t) \approx \gamma_0 \alpha \Gamma(1 + \alpha) \frac{1}{(\gamma_0 t)^{1+\alpha}}. \quad (\text{C.9})$$

Zauważmy, że zależność (C.9) jest spełniona dla dowolnego, nieujemnego wykładnika α przy czym w dalszym ciągu główny nurt naszych zainteresowań dotyczy przypadku $\alpha < 1$.

Przypadek marginalny $\alpha = 1$. Całkując przez części całkę stojącą (w trzeciej równości) w wyrażeniu (6.64) otrzymujemy, że

$$\int_0^{\gamma_0 t} y^{\alpha-1} \exp(-y) dy = 1 - \exp(-\gamma_0 t). \quad (\text{C.10})$$

Zatem dla $\gamma_0 t \gg 1$, $\phi(t)$ przybiera natychmiast asymptotyczną postać

$$\phi(t) \approx \frac{\gamma_0}{(\gamma_0 t)^2}, \quad (\text{C.11})$$

która wynika także z wyrażenia (C.9) (uzyskanego na znacznie dłuższej drodze).

Po trzecie, omawiamy przypadek pośredni gdy $\alpha \lesssim \gamma_0 t \lesssim 1$ (w dalszym ciągu rozważamy sytuacje dla których $\alpha < 1$). Ze wzoru (6.66) widać, że funkcja ϕ jest iloczynem funkcji malejącej (potęgowo w czasie) i rosnącej (w czasie, danej w postaci całkowitej). Można zatem poszukiwać takiego czasu, dla którego funkcja rozkładu ϕ posiada lokalne maksimum.

Dodatek D

Ścisła funkcja rozkładu czasów oczekiwania

Punktem wyjścia jest przedstawienie poniższej funkcji wykładniczej za pomocą transformaty Mellina (patrz, Harry Bateman, Arthur Erdélyi, "Tables of Integral Transforms", Vol. I, McGraw-Hill Book Comp., Inc., New York 1954),

$$\exp(-\gamma_0 \exp(-\frac{\mathcal{E}}{k_B T})t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} ds (\gamma_0 t)^{-s} \Gamma(s) \exp(\frac{\mathcal{E}}{k_B T} s),$$

$$0 < c = \Re s < 1. \quad (D.1)$$

Następnie, podstawiając (D.1) do (6.62) otrzymujemy,

$$\begin{aligned} \phi(t) &= \frac{1}{2\pi i} \gamma_0 \alpha \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} ds (\gamma_0 t)^{-s} \Gamma(s) \int_0^\infty d(\frac{\mathcal{E}}{k_B T}) \exp(-\frac{\mathcal{E}}{k_B T} (1 + \alpha - s)) \\ &= \frac{1}{2\pi i} \gamma_0 \alpha \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} ds (\gamma_0 t)^{-s} \frac{\Gamma(s)}{1 + \alpha - s}, \quad 0 < c = \Re s < 1. \end{aligned} \quad (D.2)$$

Wprowadzając powiększający się kontur K przedstawiony na rys. ..., którego góra (K_u), prawy bok (K_r) oraz podstawa (K_d) odsuwają się do nieskończoności, można całkę w (D.2) zamienić na całkę konturową

$$\int_{c-i\infty}^{c+i\infty} ds (\gamma_0 t)^{-s} \frac{\Gamma(s)}{1 + \alpha - s} = -\frac{1}{2\pi i} \gamma_0 \alpha \oint_{K^\infty} ds (\gamma_0 t)^{-s} \frac{\Gamma(s)}{1 + \alpha - s} \quad (D.3)$$

gdzie K^∞ jest konturem K , który uległ nieskończonemu powiększeniu (orientacja całki konturowej jest ujemna stąd znak " - " stojący po prawej stronie równości). Skorzystaliśmy tutaj z faktu, że gdy $x \rightarrow \infty$ (gdzie $s = x + iy$) wówczas,

$$\int_{K_r} ds (\gamma_0 t)^{-s} \frac{\Gamma(s)}{1 + \alpha - s} \rightarrow 0, \quad (D.4)$$

gdyż $(\gamma_0 t)^{-x-iy} \rightarrow 0$ (gdy $x \rightarrow \infty$) dla $\gamma_0 t > 1$; czyli powyższa całka na prawym brzegu (boku) konturu (prostokąta) K_r zanika gdy brzeg ten oddala się do nieskończoności. Ponadto skorzystaliśmy z własności mówiącej, że gdy $|y| \rightarrow \infty$ wówczas,

$$\int_{K_u} ds (\gamma_0 t)^{-s} \frac{\Gamma(s)}{1 + \alpha - s} \rightarrow 0. \quad (D.5)$$

Dowód powyższej własności wynika bezpośrednio z asymptotycznego przedstawienia funkcji $\Gamma(s(=x+iy))$ dla $|y| \rightarrow \infty$ (patrz, I.M. Ryzik i I.S. Gradshtajn, "Tablice całek, sum, szeregów i iloczynów", PWN, Warszawa 1964),

$$|\Gamma(x+iy)| \rightarrow (2\pi)^{1/2} |y|^{x-1/2} \exp(-\frac{\pi}{2} |y|), \quad (\text{D.6})$$

w którym czynnik wykładniczy decyduje o zanikaniu ze wzrostem $|y|$ przy ustalonym x .

Zatem, nastym zadaniem jest teraz obliczenie całki konturowej po prawej stronie równości (D.3); można to przeprowadzić korzystając z metody residuów (patrz, Krzysztof Maurin, "Analiza. Cz.II. Wstęp do analizy globalnej", PWN, Warszawa 1971). Zauważmy w tym celu, że jedyny biegun funkcji podcałkowej (oznaczymy ją przez F) jaki znajduje się na dodatniej osi rzeczywistej to zero mianownika $1+\alpha-s$ tzn. biegun funkcji F jest w punkcie $s_0 = 1+\alpha$. Ponadto, jak widać biegun ten jest rzędu pierwszego.

Metoda residuów mówi, że wspomniana powyżej całka konturowa

$$\oint_{K^\infty} ds (\gamma_0 t)^{-s} \frac{\Gamma(s)}{1+\alpha-s} = -2\pi i \operatorname{Res} F(s_0), \quad (\text{D.7})$$

gdzie $\operatorname{Res} F(s_0)$ to residuum funkcji podcałkowej F w punkcie s_0 . Metoda residuów podaje przepis pozwalający wyznaczyć residuum w punkcie będącym np. biegunem rzędu pierwszego mianownika, jest to następująca granica

$$\operatorname{Res} F(s_0) = \lim_{s \rightarrow s_0} ((s-s_0)F(s)). \quad (\text{D.8})$$

Obliczenie powyższej granicy jest natychmiastowe i daje

$$\lim_{s \rightarrow s_0} (s-s_0)F(s) = -(\gamma_0 t)^{-1-\alpha} \Gamma(1+\alpha). \quad (\text{D.9})$$

Wreszcie, podstawiając kolejno (D.9) do (D.8), następnie (D.8) do (D.7) a to do (D.3) możemy za pomocą takiego przekształconego wyrażenia zapisać ostatecznie (D.2) w postaci (C.9)

$$\phi(t) \approx \gamma_0 \frac{\alpha \Gamma(1+\alpha)}{(\gamma_0 t)^{1+\alpha}}, \quad (\text{D.10})$$

wyprowadzonej na alternatywnej drodze w Dodatku C.

Dodatek E

Nieporządek gaussowski oraz poissonowski

Omówimy rolę dwóch zasadniczo różnych typów nieporządku na funkcję rozkładu czasów oczekiwania.

Dodatek C: Wykładnicza oraz potęgowa asymptotyka funkcji rozkładu

Omówimy dwa zasadniczo różne rodzaje zaniku funkcji rozkładu czasów oczekiwania. Pierwszy dotyczy zaniku wykładniczego typu Poissona drugi zaniku wykładniczego typu Lévy'ego - te ostatnie nazywane są także rozkładami postertowymi. Oba przypadki analizujemy dla $t \rightarrow \infty$ oraz $s \rightarrow 0$.

Dodatek F

Ścisła funkcja rozkładu czasów oczekiwania

I. Metoda bezpośrednia. Wyprowadzimy ścisłą postać funkcji rozkładu czasów oczekiwania Weierstrassa-Mandelbrota, korzystając z transformaty Mellina oraz metody całkowania przez residua. Takie podejście pozwoli na bezpośrednie uzyskanie potęgowego zaniku funkcji rozkładu $\phi(t)$ w zależności od czasu t bez potrzeby wykonywania dwukrotnej transformaty Laplace'a, raz wyjściowej prostej do przestrzeni odwrotnej i drugi raz (na zakończenie procedury) powrót do przestrzeni prostej za pomocą odwrotnej transformaty Laplace'a. Jest to podejście oryginalne, alternatywne w stosunku do istniejącego już w literaturze.

Nasz wywód rozpoczniemy od funkcji rozkładu danej wyrażeniem (6.98)

$$\phi(t) = \gamma_0(1 - \frac{1}{M}) \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{M^j} \gamma^j \exp(-\gamma_0 \gamma^j t). \quad (\text{F.1})$$

Korzystając z transformaty Mellina funkcji wykładniczej (patrz, Harry Bateman, Arthur Erdélyi, "Tables of Integral Transforms", Vol. I, McGraw-Hill Book Comp., Inc., New York 1954),

$$\exp(-\gamma_0 \gamma^j t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} ds (\gamma_0 t)^{-s} \Gamma(s) \gamma^{-js}, \quad 0 < \Re s = c < 1, \quad (\text{F.2})$$

można funkcję rozkładu daną wyrażeniem (F.1) przekształcić do postaci

$$\phi(t) = \gamma_0(1 - \frac{1}{M}) \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} ds (\gamma_0 t)^{-s} \Gamma(s) \sum_{j=0}^{\infty} (\frac{\gamma^{1-s}}{M})^j, \quad (\text{F.3})$$

którą dalej przekształcamy korzystając z faktu, iż dla $\gamma < 1$ oraz $M > 1$ zawsze można dobrać liczbę $0 < c < 1$ tak aby wartość ilorazu kolejnych składników szeregu geometrycznego (występującego w (F.3)), czyli $|\gamma^{1-s}/M| = \gamma^{1-c}/M$, była mniejsza od jedności. Zatem, wyrażenie (F.3) przybiera postać

$$\phi(t) = \gamma_0(1 - \frac{1}{M}) \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} ds (\gamma_0 t)^{-s} \frac{\Gamma(s)}{1 - \frac{\gamma^{1-s}}{M}}, \quad (\text{F.4})$$

którą w dalszym ciągu przekształcamy korzystając z metody residuów (patrz, Krzysztof Maurin, "Analiza. Cz. II. Wstęp do analizy globalnej", PWN, Warszawa 1971). Zatem, wprowadzimy kontur prostokątny $K (= K_l + K_u + K_r + K_d)$ na płaszczyźnie zespolonej schematycznie przedstawiony na rys.... Wykażemy, że

$$\int_{c-i\infty}^{c+\infty} ds (\gamma_0 t)^{-s} \frac{\Gamma(s)}{1 - \frac{\gamma^{1-s}}{M}} = - \oint_{K^\infty} ds (\gamma_0 t)^{-s} \frac{\Gamma(s)}{1 - \frac{\gamma^{1-s}}{M}}, \quad (\text{F.5})$$

gdzie całkowanie po prawej stronie powyższej równości przeprowadzono wzdłuż konturu K , którego prawy bok oraz podstawa i górna krawędź oddalają się do nieskończoności (stąd oznaczenie K^∞) ponadto, orientacja całki konturowej jest ujemna (stąd znak " - " przed nią). Po pierwsze zauważmy, że gdy $x \rightarrow \infty$ wówczas,

$$\int_{K_r} ds (\gamma_0 t)^{-s} \frac{\Gamma(s)}{1 - \frac{\gamma^{1-s}}{M}} \rightarrow 0, \quad (\text{F.6})$$

gdzie $s = x + iy$, gdyż $\gamma_0 t > 1$ i $(\gamma_0 t)^{-x-iy} \rightarrow 0$ gdy $x \rightarrow \infty$; czyli powyższa całka na prawym brzegu (boku) konturu (prostokąta) K_r zanika gdy brzeg ten oddala się do nieskończoności.

Po drugie wykażemy, że gdy $|y| \rightarrow \infty$ wówczas,

$$\int_{K_{u,d}} ds (\gamma_0 t)^{-s} \frac{\Gamma(s)}{1 - \frac{\gamma^{1-s}}{M}} \rightarrow 0. \quad (\text{F.7})$$

Dowód powyższego twierdzenia wynika bezpośrednio z asymptotycznego przedstawienia funkcji Γ dla $|y| \rightarrow \infty$ (patrz, I.M. Ryżyk i I.S. Gradsztajn, "Tablice całek, sum, szeregów i iloczynów", PWN, Warszawa 1964),

$$|\Gamma(x + iy)| \rightarrow (2\pi)^{1/2} |y|^{x-1/2} \exp(-\frac{\pi}{2} |y|). \quad (\text{F.8})$$

Zatem, naszym zadaniem jest teraz obliczenie całki konturowej po prawej stronie równości (F.5); można to przeprowadzić korzystając z metody residuów. Zauważmy w tym celu, że jedyne bieguny funkcji podcałkowej jakie znajdują się po dodatniej stronie osi rzeczywistej to zero mianownika $1 - \frac{\gamma^{1-s}}{M}$ czyli

$$1 - \frac{\gamma^{1-s}}{M} = 0 \Rightarrow s_n = 1 + \alpha - \frac{2\pi i}{\ln(\gamma)} n, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \quad (\text{F.9})$$

gdzie przez s_n , $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, oznaczono postulowane bieguny. Ponadto, jak wiadać bieguny te są rzędu pierwszego. Metoda residuów mówi, że wspomniana powyżej całka konturowa

$$- \oint_{K^\infty} ds (\gamma_0 t)^{-s} \frac{\Gamma(s)}{1 - \frac{\gamma^{1-s}}{M}} = 2\pi i \sum_{n=-\infty}^{\infty} \text{Res } F(s_n), \quad (\text{F.10})$$

gdzie $\text{Res } F(s_n)$ to residuum funkcji podcałkowej, którą oznaczyliśmy tutaj przez F , w punkcie s_n . Metoda residuów podaje m.in. przepis jak wyznaczyć residuum w punkcie będącym biegunem rzędu pierwszego mianowicie, jest to następująca granica

$$\text{Res } F(s_n) = \lim_{s \rightarrow s_n} [(s - s_n)F(s)]. \quad (\text{F.11})$$

W naszym przypadku, obliczenie tej granicy sprowadza się w zasadzie do obliczenia granicy poniższego wyrażenia,

$$\begin{aligned} \lim_{s \rightarrow s_n} \frac{s - s_n}{1 - \frac{\gamma^{1-s}}{M}} &= \lim_{s \rightarrow s_n} \frac{s - s_n}{1 - \frac{1}{M} \exp((1 - s_n) \ln(\gamma)) \exp((s_n - s) \ln(\gamma))} \\ &= \lim_{s \rightarrow s_n} \frac{s - s_n}{1 - \exp((s_n - s) \ln(\gamma))} = \frac{1}{\ln(\gamma)}. \end{aligned} \quad (\text{F.12})$$

Stąd oraz ze (F.11), (F.10), (F.5) i (F.4) otrzymujemy wreszcie,

$$\begin{aligned} \phi(t) &= -\gamma_0 \left(1 - \frac{1}{M}\right) \oint_{R^\infty} ds (\gamma_0 t)^{-s} \frac{\Gamma(s)}{1 - \frac{\gamma^{1-s}}{M}} \\ &= -\frac{\gamma_0}{\ln(\gamma)} \left(1 - \frac{1}{M}\right) (\gamma_0 t)^{-1-\alpha} \times \sum_{n=-\infty}^{\infty} \Gamma(s_n) (\gamma_0 t)^{\frac{2\pi i}{\ln(\gamma)} n} \\ &= -\frac{\gamma_0}{\ln(\gamma)} \left(1 - \frac{1}{M}\right) (\gamma_0 t)^{-1-\alpha} \times \{ \Gamma(s_0) \\ &\quad + \sum_{n=1}^{\infty} [\Gamma(s_n) (\gamma_0 t)^{\frac{2\pi i}{\ln(\gamma)} n} + \Gamma(s_{-n}) (\gamma_0 t)^{\frac{-2\pi i}{\ln(\gamma)} n}] \}. \end{aligned} \quad (\text{F.13})$$

Można wykazać na drodze numerycznej, że (dla $\gamma_0 t > 1$)

$$\Gamma(s_0) \gg \sum_{n=1}^{\infty} [\Gamma(s_n) (\gamma_0 t)^{\frac{2\pi i}{\ln(\gamma)} n} + \Gamma(s_{-n}) (\gamma_0 t)^{\frac{-2\pi i}{\ln(\gamma)} n}]; \quad (\text{F.14})$$

dowód analityczny, jak dotychczas, nie jest znany. Rys... przedstawia ... Zatem, z dobrym przybliżeniem można zapisać

$$\phi(t) \approx -\frac{\gamma_0}{\ln(\gamma)} \left(1 - \frac{1}{M}\right) \Gamma(1 + \alpha) (\gamma_0 t)^{-1-\alpha}. \quad (\text{F.15})$$

Dodatek G

Użyteczne transformaty Laplace'a

Wyprowadzimy wzór na transformatę Laplace'a $\tilde{\phi}(s) \stackrel{\text{ozn}}{=} \mathcal{L}_s(\phi(t))$ funkcji rozkładu czasów oczekiwania. W tym celu skorzystamy z pomocniczej relacji,

$$\mathcal{L}_s\left(-\frac{d}{dt}\Phi(t)\right) = \Phi(0) - s\tilde{\Phi}(s), \quad (\text{G.1})$$

spełnionej dla dowolnej, różniczkowalnej funkcji Φ posiadającej transformatę Laplace'a $\tilde{\Phi}(s)$ (patrz, I.M. Ryzżyk i I.S. Gradsztajn, "Tablice, sum, szeregów i iloczynów", PWN, Warszawa 1964).

Z (6.66) widać, że dla $t \rightarrow \infty$,

$$\begin{aligned} \phi(t) &\approx \frac{k_B T \Gamma(1+\alpha)}{\gamma_0^\alpha \bar{\mathcal{E}}} \frac{1}{t^{1+\alpha}} = -\frac{k_B T \Gamma(1+\alpha)}{\alpha \gamma_0^\alpha \bar{\mathcal{E}}} \frac{d}{dt}(t^{-\alpha} + \text{const}) \\ &= -\frac{d}{dt}\Phi(t), \end{aligned} \quad (\text{G.2})$$

gdzie asymptotyczna postać funkcji

$$\Phi(t) \approx \frac{k_B T \Gamma(1+\alpha)}{\alpha \gamma_0^\alpha \bar{\mathcal{E}}} (t^{-\alpha} + \text{const}), \quad (\text{G.3})$$

posiada transformatę Laplace'a daną wzorem (patrz, I.M. Ryzżyk i I.S. Gradsztajn, "Tablice, sum, szeregów i iloczynów", PWN, Warszawa 1964),

$$\tilde{\Phi}(s) \approx \frac{k_B T \Gamma(1+\alpha)}{\alpha \gamma_0^\alpha \bar{\mathcal{E}}} \left(\frac{\Gamma(1-\alpha)}{s^{1-\alpha}} + \frac{\text{const}}{s} \right), \quad (\text{G.4})$$

Z relacji (G.1), (G.2) oraz (G.4) wynika, że

$$\tilde{\phi}(s) = \mathcal{L}_s\left(-\frac{d}{dt}\Phi(t)\right) = \Phi(0) - \frac{k_B T \Gamma(1+\alpha)}{\alpha \gamma_0^\alpha \bar{\mathcal{E}}} (\Gamma(1-\alpha)s^\alpha + \text{const}). \quad (\text{G.5})$$

Stałą *const* należy wybrać tak aby funkcja rozkładu ϕ spełniała warunek normalizacji (6.61), który można wyrazić w postaci

$$\tilde{\phi}(s=0) = 1. \quad (\text{G.6})$$

Stąd oraz z (G.5) wynika, że

$$const = (\Phi(0) - 1) \left(\frac{k_B T \Gamma(1 + \alpha)}{\alpha \gamma_0^s \bar{\mathcal{E}}} \right)^{-1} \quad (\text{G.7})$$

Z powyższego oraz ze (G.5) otrzymujemy ostatecznie, że

$$\bar{\phi}(s) = 1 - \frac{\pi \alpha}{\sin(\pi \alpha)} \left(\frac{s}{\gamma_0} \right)^\alpha, \quad (\text{G.8})$$

gdzie mileczko skortystaliśmy z pomocniczych wzorów

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{k_B T}{\bar{\mathcal{E}}}, \\ \Gamma(1 + \alpha) &= \alpha \Gamma(\alpha), \\ \Gamma(\alpha) \Gamma(1 - \alpha) &= \frac{\pi}{\sin(\pi \alpha)}. \end{aligned} \quad (\text{G.9})$$

Wprowadzając bezwymiarowy współczynnik

$$\gamma'_f = \frac{\sin(\pi \alpha)}{\pi \alpha}, \quad (\text{G.10})$$

możemy (G.8) zapisać następująco,

$$\bar{\phi}(s) = 1 - \frac{1}{\gamma'_f} \left(\frac{s}{\gamma_0} \right)^\alpha. \quad (\text{G.11})$$

Przy okazji zauważmy, że ze (G.2) otrzymujemy

$$\Phi(t) = \Phi(0) - \int_0^t dt' \phi(t'). \quad (\text{G.12})$$

Wybierając stałą $\Phi(0) = 1$ (co na mocy (G.7) daje $const = 0$) oraz korzystając z warunku normalizacji (6.61), otrzymujemy, że

$$\Phi(t) = \int_t^\infty dt' \phi(t'), \quad (\text{G.13})$$

stając się tym samym gęstością prawdopodobieństwa przetrwania cząsteczki w jakiejś dolinie potencjału przynajmniej przez czas t ; jest to funkcja, która odgrywa wspomagającą, ważną rolę w modelu błędzenia cząsteczki w czasie ciągłym. Z (G.12) oraz (G.11) wynika bezpośrednio (patrz, I.M. Ryzik i I.S. Gradshtajn, "Tablice, sum, szeregów i iloczynów", PWN, Warszawa 1964), że transformata Laplace'a

$$\bar{\Phi}(s) = \frac{1 - \bar{\phi}(s)}{s} = \frac{1}{\gamma_0 \gamma'_f} \left(\frac{\gamma_0}{s} \right)^{1-\alpha}. \quad (\text{G.14})$$

Z powyższego oraz z (6.88) widać, że średni czas oczekiwania

$$\langle t \rangle = \bar{\Phi}(s = 0) \quad (\text{G.15})$$

jest, dla $\alpha < 1$, nieskończony.

Dodatek H

Ścisły czynnik strukturalny dla błędzenia Weierstrassa

Wyprowadzimy, korzystając z transformaty Mellina oraz całkowania przez residua, ścisłą postać czynnika strukturalnego dla błędzenia Weierstrassa.

Sferyczne błędzenie Weierstrassa

$$p(\vec{x}) = \frac{1}{S_d |\vec{x}|^{d-1}} p_0(|\vec{x}|), \quad (1.1)$$
$$\int d\vec{x} p(\vec{x}) = \int_0^\infty d|\vec{x}| p_0(|\vec{x}|) = 1 \quad (1.2)$$
$$p_b(|\vec{x}|) = \frac{N-1}{N} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{N^j} \delta(|\vec{x}| - b^j); \quad (1.3)$$
$$\begin{aligned}
\tilde{p}(k) &= \int d\vec{x} \exp(-i\vec{k} \cdot \vec{x}) p(\vec{x}) \\
&= \frac{2\pi}{S_d} \int_0^\infty d|\vec{x}| \int_0^\pi d\vartheta \sin(\vartheta) \exp(-i|\vec{x}| |\vec{k}| \cos(\vartheta)) p_0(|\vec{x}|) \\
&= \int_0^\infty d|\vec{x}| \left(\frac{\pi}{2|\vec{x}| |\vec{k}|} \right)^{1/2} J_{1/2}(|\vec{x}| |\vec{k}|) p_0(|\vec{x}|) \\
&= \Gamma\left(\frac{d}{2}\right) \int_0^\infty d|\vec{x}| \left(\frac{1}{2} |\vec{x}| |\vec{k}| \right)^{1-d/2} J_{d/2-1}(|\vec{x}| |\vec{k}|) p_0(|\vec{x}|) \\
&= \frac{N-1}{N} \Gamma\left(\frac{d}{2}\right) \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{N^j} \left(\frac{|\vec{k}| |\vec{b}^j|}{2} \right)^{1-d/2} J_{d/2-1}(|\vec{k}| |\vec{b}^j|), \quad (I.4)
\end{aligned}$$

przy czym pośrednie kroki obliczeń (linia druga i trzecia) wykonano przykładowo dla $d = 3$; przez $J_d(z)$ oznaczono, jak zwykle, walcową funkcję Bessela pierwszego rodzaju. Wynik końcowy uzyskaliśmy wykorzystując definicję (I.3).

W tym miejscu, podobnie jak dla przypadku jednowymiarowego, rodzi się pytanie o warunki w jakich uzyskana powyżej postać czynnika strukturalnego da się przedstawić w postaci zamkniętej? Aby odpowiedzieć na to pytanie zauważmy, podobnie jak w rozdz.1.1.3, że $\bar{p}(\vec{k})$ spełnia niejednorodne równanie skalowania postaci,

$$\bar{p}(b\vec{k}) = N\bar{p}(\vec{k}) - (N-1)\Gamma\left(\frac{d}{2}\right)\left(\frac{1}{2}|\vec{k}|\right)^{1-d/2}J_{d/2-1}\left(\frac{1}{2}|\vec{k}|\right). \quad (1.5)$$

Rozwiązanie tego równania (podobnie jak to robiliśmy dla równania (6.125) z rozdz.1.1.3) poszukujemy w postaci sumy $\bar{p}(\vec{k}) = \bar{p}_n(\vec{k}) + \bar{p}_s(\vec{k})$ przy czym rozwiązanie normalne (ogólne) $\bar{p}_n(\vec{k})$ spełnia równanie niejednorodne (1.5) a rozwiązanie singularne $\bar{p}_s(\vec{k})$ jednorodną część tego równania. Jak zwykle, postać rozwiązania ogólnego jest narzucona przez niejednorodność. Korzystając z rozwinięcia funkcji Bessela pierwszego rodzaju

$$J_{d/2-1}\left(\frac{1}{2}|\vec{k}|\right) = \frac{|\vec{k}|^{d/2-1}}{2^{d/2-1}} \sum_{l=0}^{\infty} (-1)^l \frac{|\vec{k}|^{2l}}{2^{2l}l!\Gamma\left(\frac{d}{2}+l\right)} \quad (1.6)$$

możemy przyjąć $\bar{p}(\vec{k})$ w postaci szeregu potęgowego zawierającego także tylko parzyste potęgi zmiennej $|\vec{k}|$. Podstawiając (1.6) do (1.5) otrzymujemy (po przekształceniach analogicznych do tych jakie przeprowadziliśmy w rozdz.1.1.3) wyrażenie,

$$\bar{p}(|\vec{k}|) \approx 1 - D'|\vec{k}|^2, \quad (1.7)$$

stanowiące uogólnienie (6.127) na dowolną liczbę wymiarów przy czym nadal D' dane jest wzorem (6.128). Rozwiązanie singularne można od razu zapisać w postaci analogicznej do (6.200) z wykładnikiem danym wzorem (6.132) (gdyż spełnia ono równanie analogiczne do (6.126)),

$$\bar{p}_s(\vec{k}) \approx -D'_f|\vec{k}|^{\beta}, \quad (1.8)$$

gdzie fraktalny współczynnik dyfuzji D'_f dla procesu zachodzącego w przestrzeni o dowolnej liczbie wymiarów zostanie wyznaczony w dalszej części.

Dodatek J

Twierdzenie Abeliana i twierdzenie Tauberina

Twierdzenie Abeliana

I. Przypadek $\alpha > -1$

Przypuśćmy, że dla $t \rightarrow \infty$ funkcja ma przebieg potęgowy, tzn.

$$f(t) \approx t^\alpha F(t), \quad (\text{J.1})$$

gdzie $F(t)$ jest funkcją asymptotycznie jednorodną tzn.

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{F(ct)}{F(t)}, \quad (\text{J.2})$$

dla każdego $c > 0$ (np. $F(t) = \ln(t)$) oraz nie malejącą szybciej niż $t^{-(1+\alpha)}$. Wówczas, transformata Laplace'a $f(s)$ funkcji $f(t)$ dla $s \rightarrow 0$ przyjmuje postać

$$\tilde{f}(s) \approx \frac{\Gamma(1+\alpha)}{s^{1+\alpha}} F\left(\frac{1}{s}\right). \quad (\text{J.3})$$

Dowód tego twierdzenia składa się z dwóch części. Po pierwsze, zapisujemy transformatę Laplace'a $\tilde{f}(s)$ w postaci

$$\begin{aligned} \tilde{f}(s) &= \int_0^\infty f(t) \exp(-st) dt \\ &\approx \int_0^{t_{\max}} [f(t) - t^\alpha F(t)] \exp(-st) dt + \int_0^\infty t^\alpha F(t) \exp(-st) dt, \end{aligned} \quad (\text{J.4})$$

gdzie t_{\max} jest czasem powyżej którego funkcja $f(t)$ przyjmuje, z dobrym przybliżeniem, swoją postać asymptotyczną. Po drugie, używamy zmiennej s spełniającej

warunek $\Re st_{max} \ll 1$ (czyli posiadającej znikomo małą część rzeczywistą) wówczas, powyższe wyrażenie można przekształcić do postaci,

$$\begin{aligned}\tilde{f}(s) &\approx \int_0^{t_{max}} [f(t) - t^\alpha F(t)] dt - s \int_0^{t_{max}} [f(t) - t^\alpha F(t)] t dt \\ &+ \frac{1}{s^{1+\alpha}} \int_0^\infty y^\alpha F\left(\frac{y}{s}\right) \exp(-y) dy \\ &\approx const_0 - s \times const_1 + \frac{1}{s^{1+\alpha}} F\left(\frac{1}{s}\right) \int_0^\infty y^\alpha \exp(-y) dy,\end{aligned}\quad (J.5)$$

gdzie stałe $const_0$ (pierwszy wyraz w pierwszym rzędzie) oraz $const_1$ (wyrażenie całkowe stojące w drugim wyrazie także w pierwszym rzędzie) są skończone (co jest dodatkowym warunkiem narzuconym na funkcję F) i zależą od parametru t_{max} ; ponadto, podstawiliśmy $y = st$ oraz skorzystaliśmy po drodze z asymptotycznej postaci (J.1) funkcji $f(t)$ i z własności (J.2) (a także z definicji funkcji Γ). Oczywiście, dla $s \rightarrow 0$ w wyrażeniu (J.5) dominuje trzeci składnik zatem,

$$\tilde{f}(s) \approx \frac{\Gamma(1+\alpha)}{s^{1+\alpha}} F\left(\frac{1}{s}\right). \quad (J.6)$$

II. Przypadek $\alpha = -1 - \beta$, $0 < \beta < 1$

Przypuśćmy, że dla $t \rightarrow \infty$ funkcja f zanika w sposób potęgowy, tzn.

$$f(t) \approx t^{-(1+\beta)} F(t), \quad (J.7)$$

gdzie $F(t)$ jest funkcją asymptotycznie jednorodną tzn.

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{F(ct)}{F(t)}, \quad (J.8)$$

dla każdego $c > 0$ (np. $F(t) = \ln(t)$) oraz malejącą wolniej od $t^{-(1+\beta)}$; ponadto, dla $t \rightarrow 0$ funkcja $F(t)$ maleje nie wolniej niż t . Wówczas, transformata Laplace'a $\tilde{f}(s)$ funkcji $f(t)$ dla $s \rightarrow 0$ przyjmuje postać

$$\tilde{f}(s) \approx const + s^\beta \Gamma(-\beta) F\left(\frac{1}{s}\right). \quad (J.9)$$

Pierwszy krok dowodu jest analogiczny jak w poprzednim przypadku zatem,

$$\begin{aligned}\tilde{f}(s) &= \int_0^\infty f(t) \exp(-st) dt \\ &\approx \int_0^{t_{max}} [f(t) - t^{-(1+\beta)} F(t)] \exp(-st) dt + \int_0^\infty t^{-(1+\beta)} F(t) \exp(-st) dt,\end{aligned}\quad (J.10)$$

gdzie t_{max} jest czasem powyżej którego funkcja $f(t)$ przyjmuje, z dobrym przybliżeniem, swoją postać asymptotyczną. Po drugie, używamy zmiennej s spełniającej warunek $\Re st_{max} \ll 1$ (czyli posiadającej nilkomo małą część rzeczywistą) wówczas, powyższe wyrażenie można przekształcić do postaci (wykorzystując całkowanie przez części),

$$\begin{aligned}\tilde{f}(s) &\approx \int_0^{t_{max}} [f(t) - t^{-(1+\beta)} F(t)] dt - s \int_0^{t_{max}} [f(t) - t^{-(1+\beta)} F(t)] t dt \\ &+ s^\beta \int_0^\infty y^{-(1+\beta)} F\left(\frac{y}{s}\right) \exp(-y) dy \\ &\approx const - s \times const_1 + s^\beta \Gamma(-\beta) F\left(\frac{1}{s}\right) \\ &\approx const + s^\beta \Gamma(-\beta) F\left(\frac{1}{s}\right),\end{aligned}\tag{J.11}$$

gdzie stałe $const$ (pierwszy wyraz w pierwszym rzędzie) oraz $const_1$ (wyrażenie całkowe stojące w drugim wyrazie w tym samym rzędzie) są skończone (co jest, analogicznie jak w poprzedni przypadku, dodatkowym warunkiem narzuconym na funkcję F) i zależą od parametru t_{max} ponadto, podstawiliśmy $y = st$ oraz skrótyliśmy po drodze z asymptotycznej postaci (J.1) funkcji $f(t)$ i z własności (J.2) (a także z definicji funkcji Γ). Oczywiście, dla $s \rightarrow 0$ w wyrażeniu (J.11) dominuje wyraz rzędu zerowego w s oraz wyraz subliniowy w s .

Skorowidz

- bąbel giełdowy, 11, 12
- chłodzenie laserowe, 12
- ekonofizyka, 11
- fotoprąd, 12
- fraktalne równanie relaksacji, 23
- funkcja Foxa, 23
- kondensat Bosego-Einsteina, 12
- krach giełdowy, 11, 12
- kształt linii widmowej, 13
- lorentzian, 13
- materiał amorficzny, 12
- niedelbe’owska relaksacja, 12
- proces gaussowski, 11
- proces multiplikatywno-addytywny, 11
- relaksacja potęgowa, 13
- rozkład typu rozciągniętego eksponensa,
11
- rozkład Cauchy’ego-Lorentza, 13
- rozkład Gaussa, 11
- rozkład logarytmiczno-normalny, 11
- rozkład Pareto-Lévy’ego, 13
- rozkład potęgowy, 11
- rzadkie zdarzenia, 12
- socjofizyka, 11
- spowolniona relaksacja, 12
- stochastyczny proces niegaussowski, 11
- szum addytywny, 11
- szum multiplikatywny, 11
- wartość asymptotyczna, 11
- zmienna losowa, 11