УДК 530.145+535.33

ПРОЦЕССЫ СО СКАЧКАМИ И УШИРЕНИЕ СПЕКТРАЛЬНЫХ ЛИНИЙ

А. Л. Шелепин, Л. А. Шелепин

Дано описание марковских процессов со скачками на основе псевдодифференциальных уравнений. Рассмотрены их приложения к релятивистским частицам и к теории уширения спектральных линий.

В физических приложениях теории марковских процессов система обычно описывается дифференциальными уравнениями второго порядка. Это уравнение Фоккера – Планка в классической физике, уравнение Шредингера в квантовой механике. Как показано в [1], дифференциальные уравнения, описывающие марковские процессы – это либо уравнения не выше второго порядка, либо уравнения бесконечного порядка (псевдодифференциальные). Первому случаю соответствуют процессы без скачков (диффузионные процессы), для которых вероятность перехода из точки x в x' при конечной разности $|x - x'| \geq \delta > 0$ стремится к нулю быстрее, чем Δt при $\Delta t \to 0$, т.е.

$$\lim_{\Delta \to 0} \frac{1}{\Delta t} \int\limits_{|x-x'|\geq\delta} u(x, t + \Delta t \mid x', t) dx = 0, \tag{1}$$

где $u(x, t + \Delta t \mid x', t)$ – плотность вероятности перехода; второму – процессы со скачками, обычно описываемые интегральными уравнениями Колмогорова – Феллера. В отличие от детально изученных уравнений для процессов диффузионного типа псевдодифференциальные уравнения для процессов со скачками – новая, практически неисследованная область. Отметим, что условие отсутствия скачков (1) в литературе имеет различные названия (условие Линдеберга, условие усиленной непрерывности, условие малости приращений).

В теории амплитуд вероятности ситуация во многом аналогична случаю обычных вероятностей [2, 3]. В [3] решалось псевдодифференциальное уравнение Шредингера для амплитуды вероятности ψ,

$$\hat{E}_\psi = c\sqrt{\hat{p}^2 + (mc)^2}\,\psi, \tag{2}$$

которое отвечает свободной релятивистской частице. Подобно уравнению Дирака оно возникает путем "извлечения корня" из известного соотношения между энергией и массой $(E/c)^2 = p^2 + (mc)^2$. Уравнение (2) можно переписать в виде:

$$i\partial\psi(x,t)/\partial t = (c/\lambda)\sqrt{1 - \lambda^2\partial^2/\partial x^2}\,\psi(x,t). \tag{3}$$

Здесь $\lambda = \hbar/mc$ – комптоновская длина волны. Вид решения зависит от соотношения между λ, координатой x и расстоянием до светового конуса ct. При δ-образном начальном условии $\psi(x,0) = \delta(x)$ и малых временах $ct \ll \lambda$ частица ведет себя подобно частице с нулевой массой, а при $ct \gg \lambda$ и $x \ll ct$ справедлива нерелятивистская формула для амплитуды перехода [3].

Теория, основанная на уравнении (3), очевидно, является нелокальной. Естественным масштабом нелокальности служит комптоновская длина волны λ, определяющая границу области скачков.

Решения (3), как и других релятивистских уравнений, удовлетворяют уравнению Клейна – Гордона, но в отличие от уравнения Дирака ассиметрия пространственной и временной координат (при сохранении релятивистской инвариантности) приводит к существованию решений только с положительной энергией.

Для релятивистских уравнений существует альтернатива: либо уравнение не выше второго порядка, но тогда ψ уже не амплитуда вероятности; либо ψ – амплитуда вероятности, но система описывается уравнениями бесконечного порядка. Значение применения псевдодифференциальных уравнений состоит в том, что здесь мы вступаем на второй путь, альтернативный стандартному.

Наряду с процессами для амплитуд вероятности псевдодифференциальные уравнения описывают также процессы со скачками в классической физике, где используются обычные вероятности. По аналогии с (3) запишем уравнение для плотности вероятности $f(x,t)$,

$$\partial f(x,t)/\partial t = (c/\lambda)[1 - \sqrt{1 - (\lambda\partial/\partial x)^2}]\,f(x,t), \tag{4}$$

где λ имеет смысл максимальной величины скачков, c/λ – частоты скачков. Предельным случаям отвечают хорошо известные процессы. При $\lambda \to \infty$ имеем

$$\partial f(x,t)/\partial t = c\,|\,\partial/\partial x\,|\,f(x,t). \tag{5}$$

Амплитуда скачков не ограничена, что соответствует процессу Коши [4]. При $\lambda \to 0$, $c \to \infty$ имеем

$$\partial f(x,t)/\partial t = \\ = (c/\lambda)[1 - 1 + (1/2)(\lambda\partial/\partial x)^2 - ...]f(x,t) = \tfrac{1}{2}\lambda c\partial^2 f(x,t)/\partial x^2, \tag{6}$$

что соответствует гауссову процессу с коэффициентом диффузии $D = \lambda c$. Гауссов процесс, таким образом, отвечает пределу бесконечно частых бесконечно малых скачков.

Чтобы найти решение (4), перейдем к уравнению на характеристическую функцию $f(k,t)$:

$$\partial f(k,t)/\partial t = (c/\lambda)[1 - \sqrt{1 + \lambda^2 k^2}]f(k,t), \\ f(k,t) = \exp[(ct/\lambda)(1 - \sqrt{1 + \lambda^2 k^2})]. \tag{7}$$

При $\lambda \to \infty$ имеем характеристическую функцию распределения Коши $\exp(-ct \times \times \mid k \mid)$. Плотность вероятности находится с помощью обратного преобразования Фурье $f(x,t) = (1/2\pi) \int \exp(-ikx)f(k,t)dt$,

$$f(x,t) = K_x(ct,\lambda) \equiv \\ \equiv \tfrac{1}{\pi}\tfrac{ct}{\lambda} \exp \tfrac{ct}{\lambda} [(ct)^2 + x^2]^{-1/2} K_1[((ct)^2 + x^2)^{1/2}/\lambda], \tag{8}$$

где K_1 – функция Макдональда. Используя безразмерные параметры $x_0 = x/\lambda$ и $t_0 = ct/\lambda$, распределение (8) (мы будем называть его К-распределением) можно переписать как

$$f(x,t) = \frac{t_0}{\pi\lambda} \exp(t_0)(t_0^2 + x_0^2)^{-1/2} K_1[(t_0^2 + x_0^2)^{1/2}]. \tag{9}$$

Из (9) видно, что форма графика плотности функции распределения $K_x(ct,\lambda)$ зависит от одного параметра $t_0 = ct/\lambda$; λ задает естественный масштаб по x. Дисперсия σ^2 находится из формулы для математического ожидания x^2, $iM[x^2] = \partial^2 f(k^2,t)/\partial k^2 \mid_{k=0}$

$$\sigma^2 = ct\lambda. \tag{10}$$

Рассмотрим предельные случаи.

1. $((ct)^2 + x^2)^{1/2} \gg \lambda$. Используя асимптотическую формулу для функции Макдональда, имеем:

$$K_x(ct,\lambda) = \frac{ct}{\sqrt{2\pi\lambda}}((ct)^2 + x^2)^{-3/4} \exp\left[\frac{ct}{\lambda}(1-(1+x^2/c^2t^2)^{1/2})\right]. \qquad (11)$$

В частности, при малых x $(x/ct \ll 1)$ получаем нормальное распределение $(2\pi\lambda ct)^{-1/2} \times \exp(-x^2/2\lambda ct)$, а при больших x экспоненциальное убывание $ct(2\pi\lambda x^3)^{-1/2} \times$ $\times \exp(-\mid x \mid /\lambda)$. Нормальное распределение может быть использовано при любых $x \gg \lambda$, так как отклонения от него становятся существенными лишь в далеких крыльях распределения, где плотность $K_x(ct,\lambda)$ фактически равна нулю.

2. $((ct)^2 + x^2)^{1/2} \ll \lambda$. Используя формулу $K_1(z) \approx 1/z$, при $z \ll 1$ получим распределение Коши

$$K_x(ct,\infty) = \frac{1}{\pi}\frac{ct}{(ct)^2 + x^2}.$$

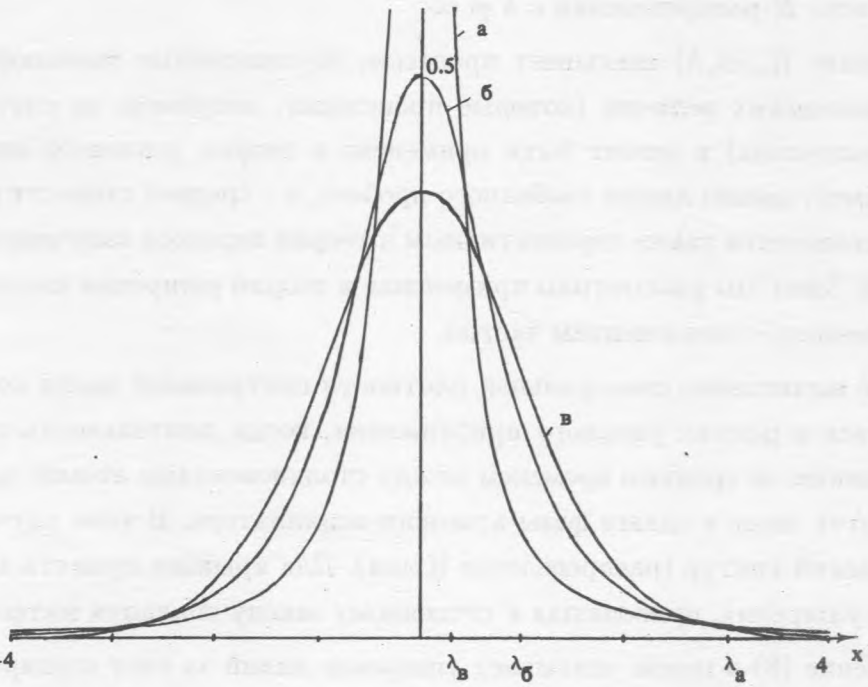

Рис. 1. *K-распределение при фиксированных дисперсии $\sigma^2 = \lambda ct = 1$ и $t = 1$. а) $t_0 = 1/9$; б) $t_0 = 1$; в) $t_0 = 9$; в масштабе рисунка это распределение практически неотличимо от нормального.*

На рис. 1 приведена плотность функции распределения (9) для трех значений параметра $t_0 = ct/\lambda$: а) $t_0 \ll 1$, б) $t_0 \approx 1$, в) $t_0 \gg 1$. В случае а) справедливо распределение Коши с полушириной (половиной расстояния между точками x_1, x_2, для которых $f(x) = f_{max}/2)ct$, крылья до значений $x \approx \lambda$ соответствуют убыванию по закону $1/x^2$. В случае б) распределение Коши описывает центральную часть, крылья убывают по степенному закону типа $1/x^n$, промежуточному между $1/x^2$ и экспоненциальным. В случае в) справедливо нормальное распределение со среднеквадратичным отклонением $\sqrt{\lambda ct}$. Таким образом, предельным случаям скачков неограниченной амплитуды и отсутствию скачков отвечают устойчивые распределения с показателями 1 (Коши) и 2 (нормальное).

Случайной величине $\sum X_i/n$, где $X_1, ..., X_n$ – независимые случайные величины с плотностями $K_x(ct, \lambda)$, отвечает характеристическая функция $M[\exp(ik\sum X_i/n] = \exp[(ct/\lambda_1)(1 - \sqrt{1 + \lambda_1^2 k^2})]$, $\lambda_1 = \lambda/n$, т.е. распределение того же типа с плотностью $K_x(ct, \lambda/n)$ и дисперсией $ct\lambda/n$. Отсюда следует, что K-распределение является безгранично делимым. При фиксированном t и достаточно больших n параметр $t_0 = ct/\lambda_1 = ctn/\lambda \gg 1$. Следовательно, нормальное распределение является предельным для всех K-распределений с $\lambda \neq \infty$.

Распределение $K_x(ct, \lambda)$ описывает процессы, обусловленные скачкообразными изменениями физических величин (которые происходят, например, за счет соударений частиц или излучения) и может быть применено в теории теплового движения (λ в этом случае имеет смысл длины свободного пробега, c – средней скорости); его использование представляется также перспективным в теории переноса излучения, в кинетике заселенностей. Здесь мы рассмотрим применение в теории уширения спектральных линий, обусловленного столкновением частиц.

Обычно [5] вычисление спектральной плотности центральной части контура линии $I(\omega)$ проводится в рамках ударного приближения, когда длительность столкновения мала по сравнению со средним временем между столкновениями атомов τ_0. Столкновения проявляются лишь в сдвиге фазы атомного осциллятора. В этом случае теория [5] дает лоренцевский контур (распределение Коши). Для крыльев принята модель квазистатического уширения, приводящая к степенному закону спадания интенсивности.

Распределение (8) в целом описывает уширение линий за счет соударений, $I(\omega) = K_\omega(1/\tau_0, \lambda)$, где $1/\tau_0$ – частота соударений, $1/\tau_0 = Nv\sigma \sim N\sigma\sqrt{T}$, (где N – концентрация, v – средняя скорость, σ – эффективное сечение, которое как функция температуры T зависит от конкретного вида взаимодействия), а λ задает величину максимального скачка (переданной при соударении энергии), $\lambda \approx E/\hbar = mv^2/2\hbar \sim T$. Форма

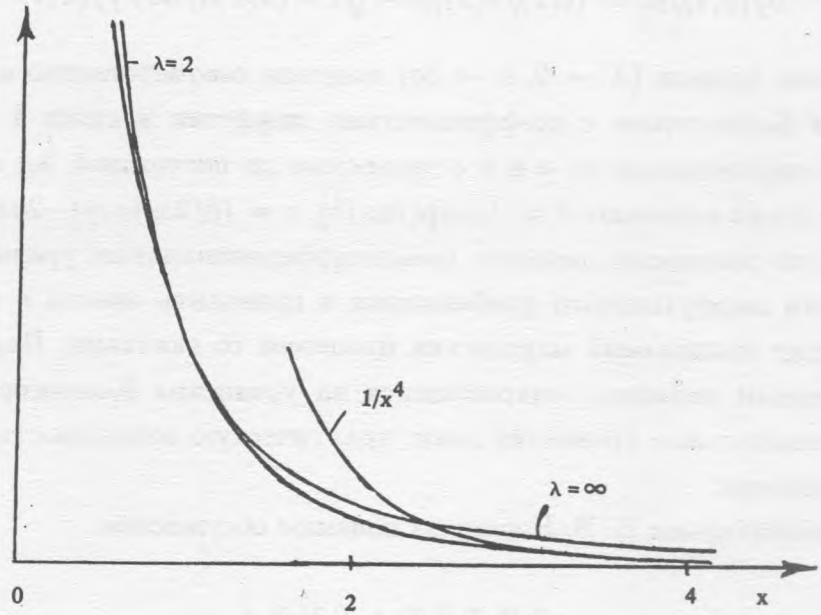

Рис. 2. *Крыло K-распределения при* $t_0 = 1/4(\lambda = 2, ct = 1/2)$ *и крыло распределения Коши* $(\lambda = \infty, ct = 1/2)$.

линии определяется значением параметра $t_0 = 1/\tau_0\lambda$, т.е. отношением частоты соударений и частоты (энергии) скачка, $t_0\lambda = \sqrt{2mkT}/2\pi\hbar\sigma N$. Распределение Коши (рис. 1а) отвечает $\tau_0\lambda \gg 1$ - большим температурам и малым концентрациям, нормальное распределение (рис. 1в) отвечает $\tau_0\lambda \ll 1$ – низким температурам и большим концентрациям. В промежуточном случае (рис. 1б и рис. 2) имеем три области: центральная, отвечающая распределению Коши, крылья – степенному закону и асимптотика – экспоненциальному спаду.

Уравнения (3) и (4) допускают обобщение на случай зависящего от x оператора в правой части. Для амплитуд вероятности ψ оператор эрмитов,

$$i\partial\psi(x,t)/\partial t = c[\sqrt{1 + \lambda^2(i\partial/\partial x - A(x))^2} + A_0(x)]\psi(x,t) \tag{12}$$

в прямом же и обратном уравнениях для процессов со скачками в случае обычных вероятностей операторы сопряжены друг другу,

$$\partial f(x,t)/\partial t = [1 - \sqrt{1 - (\partial\lambda(x)/\partial x)^2}]\,(c(x)/\lambda(x))f(x,t),$$

$$\partial f(x,t)/\partial t = (c(x)/\lambda(x))[1 - \sqrt{1 - (\lambda(x)\partial/\partial x)^2}]\, f(x,t). \tag{13}$$

В диффузионном пределе ($\lambda \to 0$, $c \to \infty$) получим соответственно прямое и обратное уравнения Колмогорова с коэффициентами диффузии и сноса $b = 2c\lambda$ и $a = c(\partial\lambda/\partial x)$. λ и c определяются по a и b с точностью до постоянной λ_0; в частности, не зависящим от x a и b отвечают $\lambda = \lambda_0 \exp(2ax/b)$, $c = (b/2\lambda_0)\exp(-2ax/b)$.

Как видно из сказанного, решение псевдодифференциальных уравнений позволяет выйти за рамки диффузионного приближения и проводить анализ в новых нетривиальных областях приложений марковских процессов со скачками. Наряду с интегро-дифференциальным подходом, опирающимся на уравнения Колмогорова – Феллера, псевдодифференциальные уравнения дают практическую возможность для исследования таких процессов.

Авторы признательны Н. В. Норину за полезное обсуждение.

ЛИТЕРАТУРА

[1] Pawula R. F. Trans. IEEE, **IT-3**, 33 (1967).

[2] Сморолинский Я. А., Шелепин А. Л., Шелепин Л. А. УФН, **162**, 1 (1992).

[3] Шелепин А. Л. Краткие сообщения по физике ФИАН, N 5–6, 60 (1993).

[4] Феллер В. Введение в теорию вероятностей и ее приложения, т. 2, М., Наука, 1967.

[5] Вайнштейн Л. А., Собельман И. И., Юков Е. А. Возбуждение атомов и уширение спектральных линий. М., Наука, 1979.

Поступила в редакцию 10 ноября 1993 г.