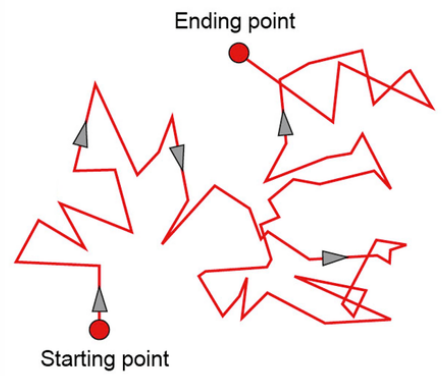
Тепловое и активное броуновское движение



Случайное блуждание микроскопических частиц, обусловленное тепловым движением молекул окружающей среды, может быть описано с помощью стохастического дифференциального уравнения Ланжевена. Мы познакомимся с этим подходом и воспроизведем известные результаты, характеризующие тепловое броуновское движение. Затем мы рассмотрим простейшее обобщение на случай активной броуновской частицы. В рамках модели частица будет двигаться с постоянной скоростью, но направление ее движения будет изменяется стохастическим образом. Мы обсудим характер движения активной частицы и определим его некоторые статистические характеристики.

Список литературы:

1. David Tong, "Lectures on Kinetic Theory", Chapter 3: Stochastic Processes.
2. Urna Basu, Satya N. Majumdar, Alberto Rosso, and Grégory Schehr, "Active Brownian motion in two dimensions", PRE 98, 062121 (2018).

Введение

Всем нам хорошо знакомо броуновское движение – случайное дрожание микроскопических частиц, помещенных в жидкость или газ. Известно, что это движение обусловлено столкновениями с молекулами окружающей среды вследствие их теплового движения. Цель предстоящей лекции – представить математический формализм, который позволяет моделировать такое случайное поведение.

Уравнение Ланжевена

Движение микроскопической частицы массы m происходит в соответствии со вторым законом Ньютона

$$m\ddot{\vec{x}} = -\gamma\dot{\vec{x}} + \vec{F}. \tag{1}$$

Здесь первое слагаемое в правой части описывает вязкую силу трения, пропорциональную скорости частицы, а второй член учитывает влияние остальных внешних сил. Коэффициент сопротивления γ определяется динамической вязкостью среды η и формой частицы. Например, для сферической частицы радиуса a коэффициент сопротивления $\gamma = 6\pi\eta a$ (формула Стокса). Обратная величина $1/\gamma$ называется *подвижностью* частицы. Это название обусловлено тем, что в случае постоянной силы $\vec{F}$ стационарное решение уравнения движения соответствует движению частицы с постоянной скоростью $\dot{\vec{x}} = \vec{F}/\gamma$.

Оставшуюся внешнюю силу $\vec{F}$ мы представим в виде суммы двух членов

$$\vec{F} = -\nabla V(\vec{x}) + \vec{f}(t). \tag{2}$$

Первое слагаемое соответствует некоторому постоянному потенциальному полю, в котором частица движется. Это может быть поле силы тяжести или поле электростатических сил, если наша частица заряжена. Эти силы хорошо определены и в них нет ничего случайного. Второе слагаемое напротив представляет из себя случайную силу, которую частица испытывает из-за столкновений с молекулами окружающей среды. Часто этот вклад называют *шумом*. Именно благодаря шуму траектории броуновских частиц выглядят хаотическими. Мы будем считать, что интенсивность шума не зависит от положения частицы в пространстве. Существуют обобщения и на более сложные системы (мультипликативный шум, зависящий от координат, и внешняя сила, зависящая от времени), но они выходят за рамки текущей лекции.

В итоге уравнение движения принимает вид

$$m\ddot{\vec{x}} = -\gamma\dot{\vec{x}} - \nabla V(\vec{x}) + \vec{f}(t). \tag{3}$$

Его особенность состоит в том, что явный вид зависимости $\vec{f}(t)$ нам не известен. Возможны различные реализации случайной силы $\vec{f}(t)$, которые будут приводить к различным траекториям броуновской частицы. Дифференциальные уравнения такого типа называют уравнениями Ланжевена. Для стохастических систем возникает естественный запрос на статистическое описание. Типичная постановка задачи выглядит так: зная статистические характеристики случайного шума (например, что его среднее значение равно нулю), определить статистические характеристики движения броуновских частиц (например, найти среднее значение координаты). В дальнейшем усреднение по реализациям шума мы будем обозначать угловыми скобками $\langle \ldots \rangle$.

Диффузия в сильно вязкой среде

Упростим задачу – будем считать, что потенциал внешних сил $V = 0$, а также будем предполагать, что наша частица имеет малую массу и/или движение происходит в сильно вязкой среде. Тогда случайная сила, действующая на частицу, будет уравновешиваться вязкой силой трения, а не слагаемым с ускорением. Другими словами, мы будем рассматривать уравнение

$$\dot{\vec{x}} = \vec{\xi}(t), \tag{4}$$

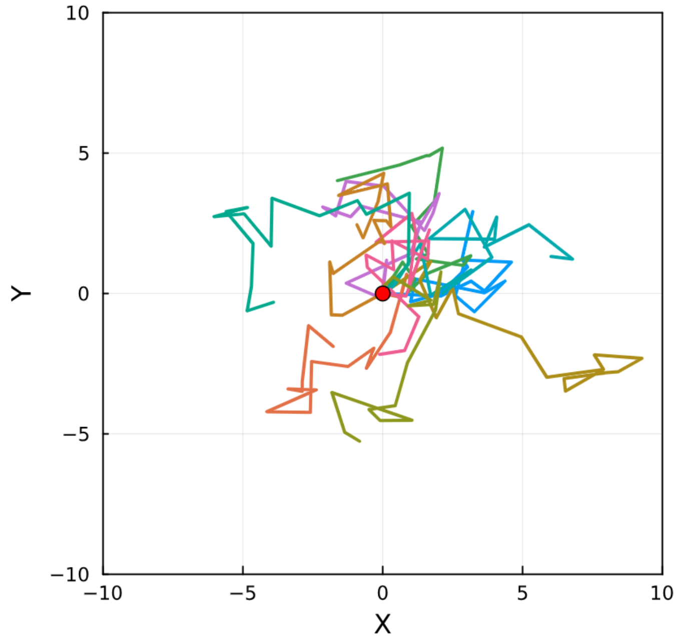
где $\vec{\xi}(t) \equiv \vec{f}(t)/\gamma$. Это уравнение можно проинтегрировать по времени и записать формальное решение

$$\vec{x}(t) = \vec{x}(0) + \int_0^t dt' \vec{\xi}(t'). \tag{5}$$

Далее, нам нужно задать статистические свойства $\vec{\xi}(t)$. Наше первое предположение будет состоять в том, что среднее значение шума в любой момент времени равно нулю

$$\langle \vec{\xi}(t) \rangle = 0. \tag{6}$$

Тогда, усредняя соотношение (5) по статистике шума, мы находим $\langle \vec{x}(t) \rangle = \vec{x}(0)$. Подчеркнем, что этот результат не означает, что частица неподвижна. Она движется, но если мы повторим эксперимент много раз, помещая частицу каждый раз в точку $\vec{x}(0)$, а потом усредним по всем реализациям шума/траекториям, то обнаружим, что среднее значение координаты частицы совпадает с исходной точкой.



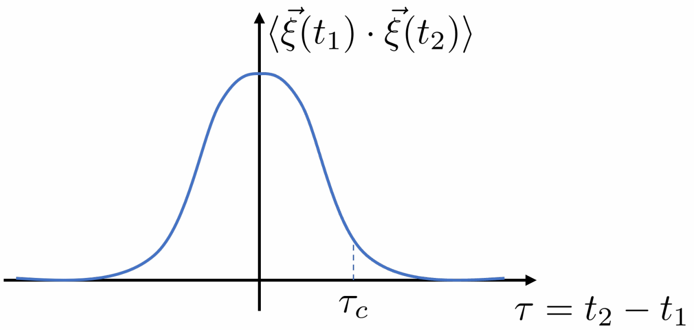
Про это еще можно думать в других терминах. Представим, что в начальный момент времени у нас есть ансамбль частиц в точке с координатой $\vec{x}(0)$, причем на каждую из частиц действует свой шум, никак не скоррелированный с шумом, который действует на другие частицы. Тогда облако частиц будет со временем расползаться, но его центр масс будет совпадать с исходной точкой.

Чтобы определить типичное смещение частицы (или размер облака), нам следует вычислить величину

$$\langle[\vec{x}(t)-\vec{x}(0)]^2\rangle = \int_0^t dt' \int_0^t dt'' \langle\vec{\xi}(t')\cdot\vec{\xi}(t'')\rangle, \tag{7}$$

где мы снова воспользовались соотношением (5). Эта величина определяется парной корреляционной функцией шума $\langle\xi_i(t_1)\xi_j(t_2)\rangle$. Латинские индексы могут принимать значения $\{x, y, z\}$ и обозначают соответствующие направления в пространстве. Парная корреляционная функция описывает насколько согласованно действие шума в различные моменты времени.

Во многих случаях, которые представляют интерес, толчки, связанные с шумом, можно считать быстрыми и независимыми. Пусть столкновение микроскопической частицы с молекулой окружающей среды происходит за характерное время τ_c. Тогда, если нас интересуют времена $|t_2 - t_1| \le \tau_c$, то значения шума $\xi(t_1)$ и $\xi(t_2)$ будут взаимосвязаны между собой, поскольку они вызываются одним и тем же физическим процессом. Однако, если мы переходим к временам $|t_2 - t_1| \gg \tau_c$, то эти корреляции исчезают, поскольку внешняя сила, действующая на нашу частицу в эти моменты времени, будет вызвана столкновениями с различными молекулами. Поскольку рассматриваемая система однородна во времени, то значение корреляционной функции $\langle\xi_i(t_1)\xi_j(t_2)\rangle$ будет зависеть только от разности времен $\tau = t_2 - t_1$. Схематичный график этой зависимости показан ниже.



То, что столкновения происходят быстро означает, что нас интересует предел $\tau_c \to 0$. В этом случае корреляционную функцию шума можно заменить на дельта-функцию

$$\langle\xi_i(t_1)\xi_j(t_2)\rangle = 2D\delta_{ij}\delta(t_2 - t_1), \tag{8}$$

где коэффициент D – это некоторая константа, которая описывает интенсивность случайного внешнего воздействия, а дельта-символ Кронекера δ_{ij} означает отсутствие корреляций у ударов в различных направлениях. Наше предположение по сути означает, что окружающая среда релаксирует к своему положению равновесия гораздо быстрее, чем изучаемая микроскопическая частица. Пока она пытается отреагировать на предыдущий удар, окружение успевает забыть все, что было раньше, и наносит новый удар столь же случайный, как и в первый раз.

Теперь мы готовы вычислить интегралы в выражении (7). Окончательный результат для трехмерного пространства имеет вид

$$\langle[\vec{x}(t)-\vec{x}(0)]^2\rangle = 6Dt, \tag{9}$$

то есть среднеквадратичное смещение частицы растет пропорционально $\sqrt{t}$. Такое поведение называют диффузионным, причем константа D имеет специальное название – *коэффициент диффузии*.

Из приведенного рассмотрения ясно, что величины более высокого порядка (например, $\langle[\vec{x}(t)-\vec{x}(0)]^4\rangle$) определяются корреляционными функциями шума соответствующего порядка, и их необходимо определить явным образом. В дальнейшем мы будем предполагать, что шум обладает гауссовой статистикой с нулевым средним. Эта модель случайного воздействия универсальна. Действительно, если динамика нашей частицы медленная в сравнении с шумом, то любое ее заметное смещение обусловлено столкновениями с большим числом окружающих молекул. Как бы ни был устроен каждый отдельный удар, суммарный эффект от взаимодействия с большим числом молекул должен характеризоваться распределением Гаусса в силу центральной предельной теоремы. Формально это означает, что, во-первых, произведения вида $\langle\xi_i(t_1)\xi_j(t_2)\xi_k(t_3)\ldots\rangle$, содержащие нечетное число сомножителей, равны нулю, а во-вторых, что произведения с четным числом сомножителей выражаются через сумму всех возможных произведений парных корреляционных функций. Например,

$$\begin{aligned}\langle\xi_i(t_1)\xi_j(t_2)\xi_k(t_3)\xi_l(t_4)\rangle = \langle\xi_i(t_1)\xi_j(t_2)\rangle\langle\xi_k(t_3)\xi_l(t_4)\rangle+\\ \langle\xi_i(t_1)\xi_k(t_3)\rangle\langle\xi_j(t_2)\xi_l(t_4)\rangle+\langle\xi_i(t_1)\xi_l(t_4)\rangle\langle\xi_j(t_2)\xi_k(t_3)\rangle.\end{aligned} \tag{10}$$

Шум, который коротко коррелирован во времени (8), имеет нулевое среднее значение и обладает свойством типа (10) называется *белым шумом*. В силу своей универсальности и простоты эта модель случайного воздействия находит широкое применение в различных областях.

> **Упражнение 1.** Броуновская частица совершает одномерное движение в сильно вязкой среде, ее коэффициент диффузии равен D. В начальный момент времени частица находилась в начале координат. Найдите $\langle x^4(t)\rangle$.

Уравнение Фоккера-Планка

Выше мы продемонстрировали как можно вычислять моменты случайной величины $\vec{x}(t)$ – положения броуновской частицы в заданный момент времени. Теперь мы покажем, как можно найти функцию распределения этой величины $P(\vec{x},t)$. Формально мы можем записать

$$P(\vec{x},t)=\langle\delta(\vec{x}-\vec{x}_\xi(t))\rangle, \tag{11}$$

где $\vec{x}_\xi(t)$ – это решение уравнения Ланжевена для конкретной реализации шума (одна из возможных траекторий), а угловые скобки обозначают усреднение по всем возможным реализациям шума/траекториям.

Рассмотрим изменение функции распределения за время Δt, которое мало по сравнению с характерным временем эволюции броуновской частицы, но велико по сравнению с временем корреляции шума τ_c. Тогда, в соответствии с определением,

$$P(\vec{x},t+\Delta t)-P(\vec{x},t)=\langle\delta(\vec{x}-\vec{x}_\xi-\Delta\vec{x}_\xi)\rangle-\langle\delta(\vec{x}-\vec{x}_\xi)\rangle, \tag{12}$$

где $\Delta\vec{x}_\xi$ – изменение координаты частицы за время Δt. Для уравнения Ланжевена (4), находим

$$\Delta\vec{x}_\xi=\int_t^{t+\Delta t}dt'\vec{\xi}(t'). \tag{13}$$

Далее, разложим первую дельта-функцию в ряд Тейлора по малому приращению координаты

$$\begin{aligned}\langle\delta(\vec{x}-\vec{x}_\xi-\Delta\vec{x}_\xi)\rangle=\langle\delta(\vec{x}-\vec{x}_\xi)\rangle-\frac{\partial}{\partial x_i}\langle\delta(\vec{x}-\vec{x}_\xi)\Delta x_\xi^i\rangle+\\+\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x_i\partial x_j}\langle\delta(\vec{x}-\vec{x}_\xi)\Delta x_\xi^i\Delta x_\xi^j\rangle+\cdots.\end{aligned} \tag{14}$$

Здесь мы удержали члены до второго порядка включительно. Теперь выполним усреднение по статистике шума. Важно отметить, что усреднение величины Δx_ξ^i происходит по реализациям шума в моменты времени $[t,t+\Delta t]$, в то время как усреднение дельта-функции происходит на промежутке до момента времени t. Поскольку интервал Δt намного больше, чем время τ_c корреляции шума, то эти усреднения независимы друг от друга. Используя соотношения $\langle\Delta\vec{x}_\xi\rangle=0$ и

$$\langle\Delta x_\xi^i\Delta x_\xi^j\rangle=\int_t^{t+\Delta t}dt_1\int_t^{t+\Delta t}dt_2\langle\xi_i(t_1)\xi_j(t_2)\rangle=2D\delta_{ij}\Delta t, \tag{15}$$

находим

$$P(\vec{x},t+\Delta t)-P(\vec{x},t)=D\nabla^2P(\vec{x},t)\cdot\Delta t+\cdots. \tag{16}$$

Отметим, что члены третьего порядка в ряде Тейлора при усреднении дадут нулевой вклад, а вклад от слагаемых четвертого порядка будет пропорционален $\propto(\Delta t)^2$.

Теперь нам осталось разделить обе части полученного выражения на Δt и перейти к пределу $\Delta t\to 0$, чтобы получить хорошо знакомое уравнение диффузии

$$\partial_t P(\vec{x},t)=D\nabla^2P(\vec{x},t). \tag{17}$$

В силу линейности решение этого уравнения в неограниченном пространстве может быть записано с помощью функции Грина (покажите это самостоятельно, решив уравнение в Фурье-пространстве с произвольным начальным условием и выполнив обратное преобразование Фурье)

$$P(\vec{x},t)=\int d\vec{x}'G(\vec{x}-\vec{x}',t)P(\vec{x}',0), \tag{18}$$

где функция Грина

$$G(\vec{x},t)=\left(\frac{1}{4\pi Dt}\right)^{3/2}\exp\left(-\frac{\vec{x}^2}{4Dt}\right) \tag{19}$$

описывает эволюцию функции распределения частицы, которая в момент времени $t=0$ находилась в начале координат, $P(\vec{x},0)=\delta(\vec{x})$.

Распределение Больцмана

Проделанный выше анализ можно обобщить на случай движения броуновской частицы в стационарном потенциальном поле. Для простоты рассмотрим одномерное движение. В этом случае уравнение Ланжевена имеет вид

$$\dot{x} = -V'(x)/\gamma + \xi(t), \tag{20}$$

где штрих обозначает производную по координате. Для приращения координаты частицы за малое время Δt можно записать

$$\Delta x_\xi \approx -\frac{V'(x_\xi)}{\gamma}\Delta t + \int_t^{t+\Delta t} dt'\xi(t'), \tag{21}$$

где мы воспользовались тем, что координата частицы изменяется за время Δt на малую величину. Подставим этот результат в выражение (14). Квадратичное по Δx_ξ слагаемое останется фактически без изменений, поскольку поправка, связанная с внешним потенциалом, даст вклад пропорциональный $(\Delta t)^2$. А вот линейное слагаемое произведет новый вклад

$$\frac{\Delta t}{\gamma}\cdot\partial_x\langle\delta(x-x_\xi)V'(x_\xi)\rangle = \frac{\Delta t}{\gamma}\cdot\partial_x\langle\delta(x-x_\xi)V'(x)\rangle = \frac{\Delta t}{\gamma}\cdot\partial_x\left(P(x,t)V'(x)\right). \tag{22}$$

В итоге уравнение Фоккера-Планка приобретет вид

$$\partial_t P(x,t) = \partial_x\left(P(x,t)\frac{V'(x)}{\gamma}\right) + D\partial_x^2 P(x,t). \tag{23}$$

Отметим, что в отсутствии шума $D = 0$, а скорость частицы $\dot{x} = v = -V'(x)/\gamma$. В этом случае уравнение Фоккера-Планка совпадает с уравнением непрерывности $\partial_t P + \mathrm{div}(\vec{v}P) = 0$, которое вам хорошо знакомо.

Найдем теперь стационарное решение уравнения (23), предполагая, что функция распределения и ее производные стремятся к нулю на бесконечности. Приравнивания к нулю правую часть выражения (23) и интегрируя полученное соотношение, находим

$$P(x) = C\exp\left(-\frac{V(x)}{\gamma D}\right). \tag{24}$$

Константа C определяется из условия нормировки

$$\int_{-\infty}^{+\infty} P(x)dx = 1. \tag{25}$$

Этот результат должен совпадать с распределением Больцмана $P(x) \propto e^{-V(x)/k_BT}$, знакомым вам из курса общей физики. Сравнивая ответы друг с другом, можно установить соотношение Эйнштейна

$$D = \frac{k_BT}{\gamma}. \tag{26}$$

Здесь интересны две особенности. Во-первых, мы получили, что интенсивность шума и коэффициент диффузии пропорциональны температуре, что логично, поскольку броуновское движение обусловлено тепловым движением молекул. Во-вторых, мы увидели, что коэффициент диффузии связан с коэффициентом сопротивления среды γ. Это обусловлено тем, что на микроскопическом уровне оба процесса вызваны столкновениями с молекулами окружающей среды. Соотношение Эйнштейна является частным случаем флуктуационно-диссипационной теоремы. На качественном уровне она выражает тот факт, что случайные силы и сила трения имеют одинаковую природу – тепловую.

Теперь мы можем переписать выражение (9) для среднеквадратичного смещения сферической частицы радиуса a, изначально помещенной в начало координат, в виде

$$\langle \vec{x}^2 \rangle = \frac{k_B T}{\pi \eta a} t, \tag{27}$$

где мы воспользовались формулой Стокса $\gamma = 6\pi\eta a$. Полученный результат позволяет экспериментально определить константу Больцмана k_B. Такой эксперимент был проведен в 1909 году французским физиком Жаном Перреном, за что он был награжден Нобелевской премией в 1926 году.

> **Упражнение 2.** Рассмотрите одномерное движение броуновской частицы с коэффициентом диффузии $D = k_B T/\gamma$ в потенциальном поле $V(x) = \alpha x^2$, где $1/\gamma$ – подвижность частицы, а T – температура окружающей среды. Запишите уравнение Фоккера-Планка и найдите его стационарное решение.

Численное моделирование

Теперь на простейшем примере (4) обсудим, как стохастические дифференциальные уравнения можно решать числено. В компьютерных симуляциях шум $\xi(t)$ обычно имеет конечное время корреляций, которое совпадает с шагом интегрирования по времени dt. Значение координаты в следующий момент времени получается из предшествующего путем

$$x_{i+1} = x_i + \xi_i \cdot dt, \tag{28}$$

где $x_i = x(i \cdot dt)$, а ξ_i – значение шума в указанный промежуток времени. На практике случайные величины ξ_i часто выбирают из гауссового распределения $g(\xi_i) = (2\pi\sigma^2)^{-1/2} \exp(-\xi_i^2/2\sigma^2)$, конкретный вид функции распределения не очень важен в силу центральной предельной теоремы.

Пусть для простоты $x_0 = 0$, тогда

$$\begin{aligned} \langle x_n \rangle &= dt \sum_{i=0}^{n-1} \langle \xi_i \rangle = 0, \\ \langle x_n^2 \rangle &= (dt)^2 \sum_{i=0}^{n-1} \sum_{j=0}^{n-1} \langle \xi_i \xi_j \rangle = (dt)^2 \sum_{i=0}^{n-1} \sum_{j=0}^{n-1} \delta_{ij} \sigma^2 = n\sigma^2 (dt)^2. \end{aligned} \tag{29}$$

На больших временах наш процесс должен соответствовать диффузии с коэффициентом D, поэтому $\langle x_n^2 \rangle = 2Dn \cdot dt$ и соответсвенно $\sigma^2 = 2D/dt$, то есть дисперсия наших случайных величин зависит от шага по времени dt численной схемы.

Отметим также, что в практических реализациях удобно генерировать случайные величины $\zeta_i \sim N(0,1)$, обладающие стандартным нормальным распределением. В их терминах эволюционное уравнение имеет вид:

$$x_{i+1} = x_i + \sqrt{2D \cdot dt}\, \zeta_i. \tag{30}$$

Активная броуновская частица

В последнее время большое внимание привлекают исследования, направленные на изучение активной материи. Речь идет про неравновесные среды, состоящие из большого числа агентов, которые постоянно потребляют энергию и за счет этого все время находятся в движении. В качестве примеров можно привести стаи птиц, стада животных или суспензии бактерий. За счет взаимодействия между различными агентами в таких системах при определенных условиях может наблюдаться коллективное синхронное поведение. Описание коллективных явлений выходит за рамки нашей лекции, но мы познакомимся с простейшей моделью агента – активной броуновской частицей.

Рассмотрим частицу, совершающую движение на плоскости с постоянной по модулю скоростью v_0. Угол отклонения ϕ мгновенной скорости частицы от направления оси X изменяется стохастическим образом и описывается уравнением

$$\dot{\phi} = \xi(t), \tag{31}$$

где $\xi(t)$ – гауссов шум с нулевым средним и парной корреляционной функцией $\langle \xi(t_1)\xi(t_2) \rangle = 2D\delta(t_2 - t_1)$. Уравнения движения частицы имеют вид

$$\dot{x} = v_0 \cos\phi, \quad \dot{y} = v_0 \sin\phi, \tag{32}$$

и их необходимо дополнить начальными условиями. Для простоты выберем систему координат так, чтобы $x(0) = 0$, $y(0) = 0$ и $\phi(0) = 0$.

Определим средние значения координат частицы в произвольный момент времени. Из соображений симметрии понятно, что $\langle y \rangle = 0$, так как направление "вверх" ничем не отличается от направления "вниз". Что касается $\langle x \rangle$, то здесь симметрия нарушена: в начальный момент времени частица движется "вправо". Для нахождения $\langle x \rangle$ проинтегрируем уравнение движения и усредним результат по реализациям шума

$$\langle x \rangle = v_0 \int_0^t dt' \langle \cos\phi(t') \rangle. \tag{33}$$

Среднее значение косинуса угла ϕ можно найти, если знать его функцию распределения $P(\phi, t)$. Этот объект должен удовлетворять уравнению Фоккера-Планка

$$\partial_t P = D\partial_\phi^2 P, \qquad P(\phi, 0) = \delta(\phi). \tag{34}$$

Его решение имеет вид распределения Гаусса

$$P(\phi, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi D t}} \exp\left(-\frac{\phi^2}{4Dt}\right), \tag{35}$$

и здесь мы считаем, что переменная ϕ изменяется в пределах от $(-\infty, +\infty)$. Теперь мы можем вычислить

$$\langle \cos\phi(t')\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} d\phi \, \cos\phi \, P(\phi, t') = e^{-Dt'}, \tag{36}$$

поэтому

$$\langle x \rangle = v_0 \int_0^t dt' e^{-Dt'} = \frac{v_0}{D}(1 - e^{-Dt}). \tag{37}$$

На малых временах $Dt \ll 1$ движение происходит баллистическим образом $\langle x\rangle \approx v_0 t$, а на больших временах $Dt \gg 1$ среднее значение координаты выходит на константу $\langle x\rangle \approx v_0/D$. За время порядка $1/D$ угол ϕ успевает забыть свое начальное положение $\phi(0) = 0$ и становится случайным, но за это время частица успевает переместиться на некоторое расстояние вдоль оси X.

Несколько сложнее вычислить средний квадрат смещения частицы, $\langle r^2\rangle = \langle x^2\rangle + \langle y^2\rangle$. Интегрируя уравнения движения, находим

$$\begin{aligned} \langle r^2 \rangle = v_0^2 \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \langle \cos\phi(t_1)\cos\phi(t_2) + \sin\phi(t_1)\sin\phi(t_2)\rangle = \\ = v_0^2 \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \langle \cos(\phi(t_1) - \phi(t_2))\rangle. \end{aligned} \tag{38}$$

Чтобы вычислить этот интеграл, нам сперва предстоит усреднить функцию, которая зависит от значения углов $\phi_1 = \phi(t_1)$ и $\phi_2 = \phi(t_2)$ в различные моменты времени. Формально, мы можем записать

$$\langle \cos(\phi_1 - \phi_2)\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} d\phi_1 \int_{-\infty}^{+\infty} d\phi_2 P(\phi_2, t_2; \phi_1, t_1 | \phi(0) = 0) \cos(\phi_1 - \phi_2), \tag{39}$$

где $P(\phi_2, t_2; \phi_1, t_1 | \phi(0) = 0)$ описывает плотность вероятности того, что в момент времени t_1 значение угла равно ϕ_1, в момент времени t_2 – значение равно ϕ_2, и все это при условии, что в начальный момент значение угла было равно нулю. Пусть для определенности $t_2 > t_1$, тогда мы можем записать

$$P(\phi_2, t_2; \phi_1, t_1 | \phi(0) = 0) = P(\phi_1, t_1 | \phi(0) = 0) P(\phi_2, t_2 | \phi(t_1) = \phi_1). \tag{40}$$

Первый множитель мы находили ранее, смотри выражение (35), второй множитель может быть найден аналогично в силу однородности уравнений

$$P(\phi_2, t_2 | \phi(t_1) = \phi_1) = P(\phi_2 - \phi_1, t_2 - t_1 | \phi(0) = 0). \tag{41}$$

В итоге получаем

$$P(\phi_2, t_2; \phi_1, t_1 | \phi(0) = 0) = \frac{1}{4\pi D\sqrt{t_1(t_2 - t_1)}} \exp\left(-\frac{\phi_1^2}{4Dt_1} - \frac{(\phi_2 - \phi_1)^2}{4D(t_2 - t_1)}\right) \tag{42}$$

при условии $t_2 > t_1$, и после несложного интегрирования находим

$$\langle \cos(\phi_1 - \phi_2) \rangle = e^{-D|t_2 - t_1|}. \tag{43}$$

В последней формуле мы поставили знак модуля, и теперь она справедлива также и для случая $t_1 \geq t_2$, который может быть рассмотрен аналогично. В итоге получаем окончательный ответ

$$\langle r^2 \rangle = v_0^2 \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 e^{-D|t_2 - t_1|} = \frac{2v_0^2}{D^2} \left(Dt - 1 + e^{-Dt} \right). \tag{44}$$

На малых временах $Dt \ll 1$, как и следовало ожидать, движение баллистическое $\langle r^2 \rangle \approx v_0^2 t^2$. В противоположном случае $Dt \gg 1$ получаем диффузионный режим $\langle r^2 \rangle \approx 2v_0^2 t/D$.

> **Задача 1.** Рассмотрим частицу, совершающую движение на плоскости с постоянной по модулю скоростью v_0. Угол отклонения ϕ мгновенной скорости частицы от направления оси X является стохастической переменной и описывается уравнением
>
> $$\dot{\phi} = \xi(t), \tag{45}$$
>
> где $\xi(t)$ – гауссов шум с нулевым средним и парной корреляционной функцией $\langle \xi(t_1)\xi(t_2) \rangle = 2D\delta(t_2 - t_1)$. Кроме того, угол ϕ случайным образом сбрасывается к исходному нулевому значению $\phi(0) = 0$ со средней частотой r. Сброс угла к нулевому значению может быть описан на языке уравнения Фоккера-Планка как
>
> $$\partial_t P = D\partial_\phi^2 P - rP + r\delta(\phi). \tag{46}$$
>
> 1. Решите уравнение Фоккера-Планка и вычислите среднее смещение частицы в горизонтальном направлении $\langle x(t) \rangle$ в произвольный момент времени t. Проанализируйте полученный результат в пределе $t \to \infty$ и определите среднюю скорость дрейфа частицы вдоль оси X в установившемся режиме.
> 2. Проведите численное моделирование рассматриваемой системы. Сгенерируйте большое число стохастических траекторий, а затем проведите по ним усреднение для нахождения $\langle x(t) \rangle$. Сравните результат с аналитическим ответом при различных параметрах системы.
>
>   **Указание:** промежутки времени $T \geq 0$ между двумя последовательными сбросами угла являются случайными величинами, имеющими функцию распределения $\rho(T) = r \exp(-rT)$.