1 Аналитическая часть

1.1 Понятие броуновского движения

Броуновское движение (иногда называют Брауновское движение) – беспорядочное движение малых частиц, взвешенных в жидкости или газе, происходящее под действием молекул окружающей среды. Исследовано в 1827 г. Броуном (Браун; Brown), который наблюдал в микроскоп движение цветочной пыльцы, взвешенной в воде.

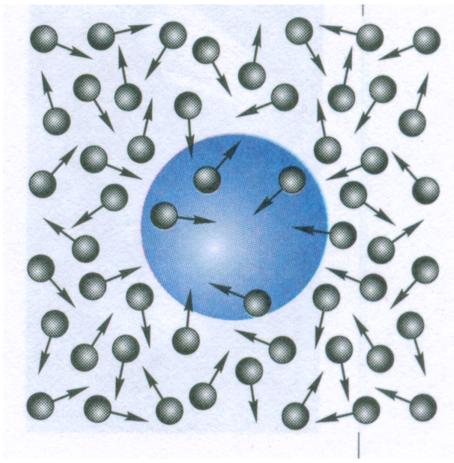

Рисунок 1.1 – Броуновское движение

Частицы размером около 1 мкм и менее совершают неупорядоченные независимые движения, описывая сложные зигзагообразные траектории. Интенсивность броуновского движения не зависит от времени, но возрастает с увеличением температуры, уменьшением вязкости и размеров частиц (независимо от их химической природы.)

Теория броуновского движения была построена независимо друг от друга Эйнштейном и Смолуховским в 1905-1906 гг. Причиной броуновского движения является тепловое движение молекул среды, проявляющееся в некомпенсированных ударах молекул о частицу, т.е. в флуктуациях давления. Эти удары приводят частицу в беспорядочное движение. Если отмечать положения частицы через равные небольшие промежутки времени, то траектория окажется сложной и запутанной.

Как показывают опытные данные, квадрат смещения частицы из начального положения в проекции на любую ось $\langle x^2 \rangle$ за время наблюдения τ, в отсутствие внешних сил определяется выражением $\langle x^2 \rangle = 2\mathrm{D}\tau$, где коэффициент диффузии броуновской (сферической) частицы $\mathrm{D} = \frac{kT}{6\pi\eta a}$, a – радиус частицы, η - коэффициент вязкости.

При описании броуновского движения частицы в одномерном случае можно считать, что на частицу действует сила случайная сила, среднее значение которой равно нулю $\langle F_x \rangle = \lim\limits_{t\to\infty}\{\frac{1}{t}\int_0^t F_x \mathrm{d}t\} = 0$ и сила сопротивления $F_c =$ rv_x, где r - коэффициент вязкого трения броуновской частицы в жидкости. Уравнение движения $ma_x = F_x$ - F_c при подстановке выражение для силы примет вид

$$m\ddot{x} + r\dot{x} = F_x \tag{1.1}$$

Умножим это урвнение на x и используем равенство $x\ddot{x} = \frac{\mathrm{d}(x\dot{x})}{\mathrm{d}t}$ - $\dot{x}^2$

$$m\frac{\mathrm{d}(x\dot{x})}{\mathrm{d}t} - m\dot{x}^2 + rx\dot{x} = xF_x \tag{1.2}$$

Проведем усреднение по времени

$$m\langle\frac{\mathrm{d}(x\dot{x})}{\mathrm{d}t}\rangle - m\langle\dot{x}^2\rangle + r\langle x\dot{x}\rangle = \langle xF_x\rangle \tag{1.3}$$

Тогда $\langle$ xF_x $\rangle = \lim\limits_{t\to\infty}\{\frac{1}{t}\int_0^t xF_x\mathrm{d}t\} = \lim\limits_{t\to\infty}\{x\frac{1}{t}\int_0^t F_x\mathrm{d}t - \frac{1}{t}\int_0^t(\int_0^t F_x\mathrm{d}t)\dot{x}\mathrm{d}t\} = 0$. Для одномерного движения по теореме о распределении энергии по степеням свободы $\frac{m\langle\dot{x}^2\rangle}{2} = \frac{kT}{2}$

Заменяем $\langle\ \frac{\mathrm{d}(x\dot{x})}{\mathrm{d}t}\ \rangle = \frac{\mathrm{d}\langle x\dot{x}\rangle}{\mathrm{d}t}$ и получаем уравнение m$\frac{\mathrm{d}\langle x\dot{x}\rangle}{\mathrm{d}t}$ + r$\langle$ x$\dot{x}$ $\rangle$ = kT, откуда

$$\langle x\dot{x}\rangle = \frac{kT}{r}(1 - e^{-\frac{m}{r}t}) \tag{1.4}$$

Для установившегося движения $\langle\ x\dot{x}\ \rangle = \frac{kT}{r}$. Так как x$\dot{x} = \frac{1}{2}\ \frac{\mathrm{d}(x^2)}{\mathrm{d}t}$, то $\frac{\mathrm{d}\langle x^2\rangle}{\mathrm{d}t} = \frac{kT}{r}$. После интеграрирования по времени получаем $\langle\ x^2\ \rangle = 2\frac{kT}{r}t$. Для сферической броуновской частицы, радиус которой равен a: $r = 6\pi\eta a$, поэтому $\mathrm{D} = \frac{kT}{6\pi\eta a}$.

Полученные выше формулы были экспериментально проверены в 1908 году Перреном, который измерял с помощью микроскопа перемещения броуновских частиц за одинаковые промежутки времени. Ему удалось на основании своих опытов с помощью этих формул определить постоянную Больцмана k и вычислить значение постоянной Авогадро N_A, совпадающие по величине с их значениями, полученными другими методами.

1.2 Моделирование броуновского движения

1.2.1 Классическое броуновское движение

Рассмотрим случайный процесс (случайную величину) *X(t)*, заданную на отрезке $[0, T]$.

Случайный процесс X(t) называется одномерным броуновским движением (или винеровским процессом) на интервале $[0, T]$, если он обладает следующими свойствами:

- $X(0) = 0$ почти наверное и *X(t)* - почти наверное непрерывная функция на $[0, T]$
- *X(t)* - процесс с независимыми приращениями
- *X(t)* - процесс с приращениями, распределёнными нормально.

Отметим следующие свойства броуновского движения:

- *X(t)* почти наверное нигде не дифференцируем
- *X(t)* - марковский процесс (не обладает памятью), т.е. если известна величина *X(t)*, то при $t_1 < t < t_2$ величины $X(t_1)$ и $X(t_2)$ независимы.
- Фрактальная размерность графика *X(t)* равна 1.5
- Приращение *X(t)* обладает свойством статистического самоподобия: для любого $r > 0$

$$X(t + \triangle t) = \frac{1}{\sqrt{r}}(X(t + r \triangle t) - X(t)) \tag{1.5}$$

- Стационарность приращений: дисперсия приращения зависит только от разности моментов времени

$$D(X(t_2) - X(t_1)) = \sigma^2 |t_2 - t_1| \tag{1.6}$$

- Математическое ожидание приращения равно

$$E(|X(t_2) - X(t_1)|) = \sqrt{\frac{2}{\pi}}\sigma\sqrt{|t_2 - t_1|} \tag{1.7}$$

Для моделрования броуновского движения можно воспользоваться разными алгоритмами. Рассмотрим 3 из них.

Проще всего реализовать дискретную реализацию броуновского движения, рассмотрев последовательность $x_0 = 0$, $x_{n+1} = x_n + g_n$, где g_n - случайная величина, имеющая нормальное распределение (например, $N(0, 1)$).

$array[N]$
$array[0] \leftarrow 0$
for i = 1,..., N **do**
    $array[i + 1] \leftarrow array[i] + randomNormal(0, 1)$
end for

1.2.2 Алгоритм срединных смещений

Метод случайного срединного смещения основан на работах Н.Виннера , он более сложен, чем метод из предыдущего параграфа, однако используется для конструктивного доказательства существования броуновского движения, а также для построения фрактальной интерполяции (когда необходимо чтобы кривая проходила через заданные точки интерполяции). Метод также может быть обобщен на случай n-мерных броуновских движений.

Алгоритм случайного срединного смещения вычисляет значения $X(t)$ в диадических рациональных точках вида $\frac{k}{2^n} \in$ [0,1]. Последовательно вычисляются значения в середине отрезка [0,1], а затем в серединах отрезков $[0, \frac{1}{2}]$ и $[\frac{1}{2}, 1]$ и т.д. На каждом шаге итерации должен выполнятьяс закон дисперсии для приращения (1.9) в вычисленных точках. Параметр σ определяет масщтаб по вертикальной оси, не влияя на фрактальную размерность графика.

Броуновское движение методом срединнго смещения (1)

Вход: N, σ // N - число шагов алгоритма, при этом всего $2^N + 1$ точек интерполяции, σ - параметр вертикального масштаба, коэффициент дисперсии

Выход: массив значений $\left\{X(\frac{k}{2^N})\right\}_{k=0}^{2^N}$ // реализация броуновского движения $X(t)$ на дискретном множестве точек вида $t_k = \frac{k}{2^N}$, k $\in [0, 2^N]$

$X(0) \leftarrow 0$

$X(1) \leftarrow \sigma g$ // g - случайная величина, распределенная нормально с параметрами $N(0,1)$

$X(\frac{1}{2}) \leftarrow \frac{1}{2}(\mathrm{X}(0) + \mathrm{X}(1)) + \frac{1}{2}\sigma\mathrm{g}$

$X(\frac{1}{4}) \leftarrow \frac{1}{2}(\mathrm{X}(0) + \mathrm{X}(\frac{1}{2})) + \frac{1}{2^{\frac{3}{2}}}\sigma\mathrm{g}$

$X(\frac{3}{4}) \leftarrow \frac{1}{2}(\mathrm{X}(\frac{1}{2}) + \mathrm{X}(1)) + \frac{1}{2^{\frac{3}{2}}}\sigma\mathrm{g}$

...

$X(\frac{1}{2^N}) \leftarrow \frac{1}{2}\ (\mathrm{X}(0) + \mathrm{X}(\frac{1}{2^{N-1}})) + \frac{1}{2^{(N+1)/2}}\sigma\mathrm{g}$

...

$X(\frac{2^N-1}{2^N}) \leftarrow \frac{1}{2}\ (\mathrm{X}(\frac{2^{N-1}-1}{2^{N-1}}) + \mathrm{X}(1)) + \frac{1}{2^{(N+1)/2}}\sigma\mathrm{g}$

Заметим, что точки t_k можно последовательно занумеровать номерами k. При этом если точка имеет вид $\frac{a}{2^b}$, то ее номер $k = a2^{N-b}$. Укажем алгорит, в котором точки t_k пронумерованы эфективно.

Броуновское движение методом срединнго смещения (2)

Вход: N, σ // N - число шагов алгоритма, при этом всего $2^N + 1$ точек интерполяции, σ - параметр вертикального масштаба, коэффициент дисперсии

Выход: массив значений $\left\{X(\frac{k}{2^N})\right\}_{k=0}^{2^N}$ // реализация броуновского движения $X(t)$ на дискретном множестве точек вида $t_k = \frac{k}{2^N}$, k $\in [0, 2^N]$

$X(0) \leftarrow 0$

$X(1) \leftarrow \sigma g$ // g - случайная величина, распределенная нормально с параметрами $N(0,1)$

for j = 1,..., N **do**

    for i = 1,..., 2^{N-1} **do**

        $X((2i-1)2^{N-j}) \leftarrow X((i-1)2^{N-j+1}) + X(i2^{N-j+1}) + \frac{1}{2^{(j+1)/2}}\sigma$ g

    end for

end for

1.2.3 Фрактальное броуновское движение

Фрактальное броуновское движение (ФБД) уже не является марковским процессом, а обладает некорой "памятью". Кроме того, вводя параметр $0 < H < 1$ можно получитьодномерное ФБД размерности $d = 2 - H$ и двумерное ФБД размерности $d = 3 - H$. Заметим, что классическое броуновское движение получается как частный случай при $H = 0.5$. Для апроксимации ФБД нет простого метода, вроде суммирования нормальных случайных величин, как в случае классического броуновского движения. Для апроксимации ФБД наиболее удобно использовать преобразования Фурье.

Рассмотрим случайный процесс (случайную величину) $X(t)$, заданную на отрезке $[0, T]$.

Случайный процесс $X(t)$ называется одномерным фрактальным броуновским движением на интервале $[0, T]$, если он обладает следующими свойствами:

- $X(0) = 0$ почти наверное и $X(t)$ - почти наверне непрерывная функция на $[0, T]$
- $X(t)$ - процесс с приращениями, распределенными нормально

Отметим следующие свойства фрактального броуновского движения:

- $X(t)$ почти наверное нигде не дифференцируем
- Фрактальная размерность графика $X(t)$ равна $2 - H$
- Процесс $x(t)$ не обладает свойством независимости приращений
- Приращение *X(t)* обладает свойством статистического самоподобия: для любого $r > 0$

$$X(t + \triangle t) = \frac{1}{\sqrt{r}}(X(t + r \triangle t) - X(t)) \tag{1.8}$$

- Стационарность приращений: дисперсия приращения зависит только от разности моментов времени

$$D(X(t_2) - X(t_1)) = \sigma^2 |t_2 - t_1|^{2H} \tag{1.9}$$

- Математическое ожидание приращения равно

$$E(|X(t_2) - X(t_1)|) = \sqrt{\frac{2}{\pi}}\sigma|t_2 - t_1|^H \tag{1.10}$$

Метод Фурье-фильтрации для построения ФБД

Теорема 1. *Если $X(t)$ - ФБД с параметром H, то его спектральная плотность*

$$S(f) \propto \frac{1}{f^{2H+1}} \tag{1.11}$$

Идея метода состоит в следующем. Строится преобразование Фурье для искомого ФБД в частной области, задавая случайные фазы и подбирая амплитуды, удовлетворяющие свойству из Теоремы 1. Затем получаем ФБД во временной области с помощью обратного преобразования Фурье.

Будем моделировать дискретный аналог ФБД, то есть наша цель- получить величины $\{X_n\}_{n=0}^{N-1}$, апроксимирующиеФБД в точках n. Воспользуемся формулой дискретного преобразования Фурье

$$\hat{X}_n = \sum_{k=0}^{N-1} X_k e^{-2\pi kn/N} \tag{1.12}$$

и обратного дискретного преобразования Фурье

$$X_n = \sum_{k=0}^{N-1} \hat{X}_k e^{2\pi kn/N} \tag{1.13}$$

Далее будем рассматривать только четные значения N, а для применения метода *быстрого дискретного преобразования Фурье* нужно, чтобы $N = 2^M$, $M \in \mathbb{N}$. Метод быстрого дискретного преобразования Фурье реализован во многих системах компьютерной алгебры. Он позволяет сократить вычисления в $\frac{2N}{\log_2 N}$ раз.

Для того, чтобы получающиеся величины X_n были вещественными мы наложим условие сопряженной симметрии:

$$\hat{X}_0, \hat{X}_{N/2} \in \mathbb{R}, \hat{X}_n = \hat{X}_{N-n}, n = 1, ..., N/2 - 1 \tag{1.14}$$

Фильтрация относится к той части моделирования, когда мы заставляем коэффициенты преобразования Фурье удовлетворять степенному закону из Теоремы 1:

$$|\hat{X}_n|^2 \propto \frac{1}{n^{2H+1}}, n = 1, ..., N/2 \tag{1.15}$$

Для этого возьмем

$$\hat{X}_n = \frac{ge^{2\pi iu}}{n^{H+0.5}} \tag{1.16}$$

где g - независимые значения нормально распределенной случайной величины с параметрами $N(0,1)$, а u - независимые значения равномерно распределенной на отрезке [0,1] случайной величины. Оставшиеся коэффициенты вечислим из сотношений 1.15.

Для вычисления искомой аппроксимации ФБД $\{X_n\}_{n=0}^{N-1}$ применим обратное дискретное преобразование Фурье к набору $\left\{\hat{X}_n\right\}_{n=0}^{N-1}$.

Кривая ФБД методом Фурье-фильтрации

Вход: $H \in (0,1)$, $N = 2^M$, $M \in \mathbb{N}$ // H - параметр ФБД, размерность графика равна $d = 2 - H$, N - параметр, определяющий количество точек дискретизации ФБД.

Выход: массив значений $\{X_n\}_{n=0}^{N-1}$ // дискретная апроксимация ФБД в последовательные моменты времени n.

$\hat{X}_0 \leftarrow g$
for j = 1,..., N/2-1 **do**
    $\hat{X}_j \leftarrow \frac{ge^{2\pi iu}}{j^{H+0.5}}$
end for
$\hat{X}_{N/2} \leftarrow \frac{g\cos(2\pi iu)}{(N/2)^{H+0.5}}$ // Здесь cos — вещественная часть комплексной экспоненты e
for j = N/2+1,..., N-1 **do**
    $\hat{X}_j \leftarrow \overline{\hat{X}_{N-j}}$
end for
$X \leftarrow convert(\hat{X})$ // Вектор $X = \{X_0, ..., X_{N-1}\}$ получается обратным дискретным преобразованием Фурье из вектора $\hat{X} = \left\{\hat{X}_0, ..., \hat{X}_{N-1}\right\}$.

Для построения апроксимации двумерного фрактального броуновского движения методом Фурье-фильтрации используются те же идеи, что и в одномерном случае. Вместо $\hat{X}_n$ используется $\hat{X}_{k,j}$, $k, j = \overline{0, N-1}$, условие Теоремы 1 примет вид:

$$|\hat{X}_{k,j}|^2 \propto \frac{1}{(k^2+j^2)^{H+1}}, n, k = 1, ..., N/2 \tag{1.17}$$

мы возьмем

$$\hat{X}_{k,j} = \frac{ge^{2\pi iu}}{(k^2+j^2)^{H/2+0.5}}, n, k = 1, ..., N/2 \tag{1.18}$$

Запишем обратное дискретное преобразование Фурье: для $m, n = \overline{0, N-1}$

$$\hat{X}_{m,n} = \sum_{k=0}^{N-1}\sum_{j=0}^{N-1} \hat{X}_{k,j} e^{-2\pi i \frac{kn+jm}{N}} = \hat{X}_{0,0} + \sum_{k=1}^{N-1} \hat{X}_{k,0} e^{-2\pi i \frac{kn}{N}} + \sum_{j+1}^{N-1} \hat{X}_{0,j} e^{-2\pi i \frac{jm}{N}} +$$
$$\sum_{k=1}^{N/2}\sum_{j=1}^{N/2} \hat{X}_{k,j} e^{-2\pi i \frac{kn+jm}{N}} + \sum_{k=\frac{N}{2}+1}^{N-1}\sum_{j=\frac{N}{2}+1}^{N-1} (...) + \sum_{k=1}^{N/2}\sum_{j=\frac{N}{2}+1}^{N-1} (...) + \sum_{k=\frac{N}{2}+1}^{N-1}\sum_{j=1}^{N/2} (...) \tag{1.19}$$

Из формулы (1.19) следует, что для вещественности всех величин $X_{m,n}$ достаточно выполнения следующих условий сопряженной симметрии:

$$\hat{X}_{N-k,N-j} = \overline{\hat{X}_{k,j}} \qquad k, j = \overline{1, N/2} \qquad \hat{X}_{N/2,N/2} \in \mathbb{R} \tag{1.20}$$
$$\hat{X}_{k,N-j} = \overline{\hat{X}_{N-k,j}} \qquad k, j = \overline{1, N/2-1} \qquad \hat{X}_{0,0} \in \mathbb{R} \tag{1.21}$$
$$\hat{X}_{0,N-j} = \overline{\hat{X}_{0,j}} \qquad j = \overline{1, N/2} \qquad \hat{X}_{0,N/2} \in \mathbb{R} \tag{1.22}$$
$$\hat{X}_{N-k,0} = \overline{\hat{X}_{k,0}} \qquad k = \overline{1, N/2} \qquad \hat{X}_{N/2,0} \in \mathbb{R} \tag{1.23}$$

Условия (1.22)-(1.23) обеспечивают вещественность первых двух сумм, а условия (1.20)-(1.21) - оставшихся четырех сумм.

Поверхность ФБД методом Фурье-фильтрации

Вход: $H \in (0,1)$, $N = 2^M$, $M \in \mathbb{N}$ // H - параметр ФБД, размерность графика равна $d = 3 - H$, N - параметр, определяющий количество точек

ФБД по каждому из двух измерений.

Выход: массив значений $\{X_{n,k}\}_{n,k=0}^{N-1}$ // дискретная апроксимация ФБД на решетке узлов.

for $j,k = 1,...,N/2$ **do**
  $\hat{X}_{j,k} \leftarrow \frac{ge^{2\pi iu}}{(j^2+k^2)^{H/2+0.5}}$
  $\hat{X}_{N-j,N-k} \leftarrow \overline{\hat{X}_{j,k}}$
end for
for $k = 1,...,N/2-1$ **do**
  $\hat{X}_{0,k} \leftarrow \frac{ge^{2\pi iu}}{(k^2)^{H/2+0.5}}$
  $\hat{X}_{k,0} \leftarrow \frac{ge^{2\pi iu}}{(k^2)^{H/2+0.5}}$
  $\hat{X}_{0,N-k} \leftarrow \overline{\hat{X}_{0,k}}$
  $\hat{X}_{N-k,0} \leftarrow \overline{\hat{X}_{k,0}}$
end for
for $j,k = 1,...,N/2-1$ **do**
  $\hat{X}_{N-j,k} \leftarrow \frac{ge^{2\pi iu}}{((N-j)^2+k^2)^{H/2+0.5}}$
  $\hat{X}_{j,N-k} \leftarrow \overline{\hat{X}_{N-j,k}}$
end for
$\hat{X}_{0,0} \leftarrow 0$
$\hat{X}_{N/2,0} \leftarrow \frac{g\cos(2\pi u)}{((N/2)^2)^{H/2+0.5}}$
$\hat{X}_{0,N/2} \leftarrow \frac{g\cos(2\pi u)}{((N/2)^2)^{H/2+0.5}}$
$\hat{X}_{N/2,N/2} \leftarrow \frac{g\cos(2\pi u)}{(2(N/2)^2)^{H/2+0.5}}$
$X \leftarrow convert(\hat{X})$ // Обратное дискретное преобразование Фурье матрицы $\hat{X} = \{X_{j,k}\}_{j,k=0}^{N-1}$.

Вывод