3. Timpul mediu de relaxare

În cazul multor aplicații este necesar să se determine timpul mediu pentru care sistemul trece în starea staționară străpungând bariera de potențial datorită fluctuațiilor stocastice. În particular, aceasta se referă la diverse fenomene-*breakdown*. Problema, în general, constă în a calcula timpul mediu pentru care un sistem stocastic trece dintr-o stare în alta, iar acest timp se mai numeşte timpul mediu al primei tranziții (*mean first passage time*), $\langle T(n) \rangle$.

Vom considera ecuația Chapman-Kolmogorov (2.3) pentru variabile discrete:

$$p(n,t \mid n',t') = \sum_{n''} p(n,t \mid n'',t'')\, p(n'',t'' \mid n',t')\,, \qquad (3.1)$$

unde $p(n,t \mid n',t')$ reprezintă probabilitatea că sistemul se află în starea n în momentul de timp t, dacă în momentul t' acesta era în starea n', unde $t' < t'' < t$. Vom nota $t'' = t' + \Delta t$. Conform condiției (2.7),

$$\sum_{n''} p(n'',t' + \Delta t \mid n',t') = 1 \qquad (3.2)$$

şi folosind relația

$$p(n,t \mid n',t' + \Delta t) = \sum_{n''} p(n,t \mid n',t' + \Delta t)\, p(n'',t' + \Delta t \mid n',t')\,, \quad (3.3)$$

se obține:

$$p(n,t \mid n',t' + \Delta t) - p(n,t \mid n',t')$$
$$= \sum_{n''} p(n'',t' + \Delta t \mid n',t')\big[p(n,t \mid n',t' + \Delta t) - p(n,t \mid n'',t' + \Delta t)\big]\,. \qquad (3.4)$$

Împărțind ambele părți ale ecuației (3.4) la Δt şi luând limita $\Delta t \to 0$, se obține ecuația de bază reversată (*backward master equation*):

$$\frac{\partial p(n,t\,|\,n',t')}{\partial t'} = \sum_{n''} w(n'',n',t')\left[p(n,t\,|\,n',t') - p(n,t\,|\,n'',t')\right],$$

(3.5)

care descrie evoluția probabilităților $p(n,t\,|\,n',t')$ în raport cu momentul inițial de timp t'. Aici

$$w(n'',n',t') = \lim_{\Delta t\to 0}\frac{p(n'',t'+\Delta t\,|\,n',t')}{\Delta t} \qquad (3.6)$$

este rata de tranziție din starea n' în n'' în momentul t'. Condiția inițială pentru (3.5) este

$$p(n,t'=0\,|\,n',t'=0) = \delta_{n,n'}. \qquad (3.7)$$

Conform expresiei (3.7), sistemul nu poate fi simultan în două stări diferite. Pentru tranzițiile vecine, presupunând că nu există nici o dependență explicită de timp a ratelor de tranziție $w_+(n) = w(n+1,n,t)$ şi $w_-(n) = w(n-1,n,t)$, ecuația (3.5) poate fi scrisă:

$$\begin{aligned}\frac{\partial p(n,t\,|\,n',t')}{\partial t'} &= w_+(n')\left[p(n,t\,|\,n',t') - p(n,t\,|\,n'+1,t')\right]\\ &+ w_-(n')\left[p(n,t\,|\,n',t') - p(n,t\,|\,n'-1,t')\right]\end{aligned}. \qquad (3.8)$$

În calitate de condiții de frontieră, vom considera că variabila stocastică n variază în intervalul [$a \le n \le b$] în momentul inițial de timp $t'=0$, iar $w_-(a)=0,\ n=a,$ şi $w_-(b+1)=0,\ n=b$. În ecuația (3.8) se va efectua substituția formală:

$$p(n,t\,|\,a-1,t') = p(n,t\,|\,a,t'), \qquad (3.9)$$

iar condiția de frontieră superioară poate fi scrisă ca

$$p(n,t\,|\,b+1,t') = 0, \qquad (3.10)$$

conform căreia tranziția din starea $n=b+1$ în $n \le b$ este interzisă.

Probabilitatea cumulativă $G(n,t)$ că în momentul de timp t sistemul se mai află în intervalul [a, b] este

$$G(n,t) = \sum_{n'=a}^{b} p(n',t\,|\,n,0). \qquad (3.11)$$

Funcția (3.11) satisface ecuația

$$-\frac{\partial G(n,t)}{\partial t} = w_+(n)\left[G(n,t) - G(n+1,t)\right] \\ + w_-(n)\left[G(n,t) - G(n-1,t)\right] , \tag{3.12}$$

iar condițiile de frontieră sunt:

$$G(a-1,t) = G(a,t) , \tag{3.13}$$

$$G(b+1,t) = 0 . \tag{3.14}$$

Aceasta reiese din ecuațiile (3.8)-(3.10) şi definiției (3.11), iar, datorită faptului că probabilitatea $p(n,t \mid n',t')$ este funcție de diferența de timp $t-t'$, derivata în raport cu t' este derivata negativă față de *t*.

Conform definiției lui $G(n,t)$, probabilitatea de a depăşi limita superioară într-un interval mic de timp $\left[t, t+dt\right]$ este $G(n,t) - G(n,t+dt) = -(\partial G/\partial t)\, dt$, iar, prin urmare,

$$\langle T(n) \rangle = -\int_0^\infty t \frac{\partial G}{\partial t} dt = \int_0^\infty G(n,t)\, dt , \tag{3.15}$$

unde ultima expresie se obține integrând prin părți. Ținând cont de (3.15), ecuația pentru $\langle T(n) \rangle$ rezultă din integrarea după timp în (3.12)-(3.14):

$$1 = w_+(n)\left[\langle T(n) \rangle - \langle T(n+1) \rangle\right] + w_-(n)\left[\langle T(n) \rangle - \langle T(n-1) \rangle\right], \tag{3.16}$$

cu condițiile de frontieră

$$\langle T(a-1) \rangle = \langle T(a) \rangle , \tag{3.17}$$

$$\langle T(b+1) \rangle = 0 . \tag{3.18}$$

Vom scrie ecuația (3.16) în variabile noi:

$$w_+(n)\phi(n)\left[S(n) - S(n-1)\right] = -1 , \tag{3.19}$$

unde $\phi(a) = 1$ şi

$$\phi(n) = \prod_{m=a+1}^{n} \frac{w_-(m)}{w_+(m)} , \tag{3.20}$$

$$S(n)=\frac{\langle T(n+1)\rangle-\langle T(n)\rangle}{\phi(n)}. \tag{3.21}$$

Ecuațiile (3.20) şi (3.21) sunt definite corespunzător pentru intervalele $n\in[a+1,b]$ şi $n\in[a,b]$, $S(a-1)=0$. Se obține:

$$\phi(k)\,S(k)=-\phi(k)\sum_{m=a}^{k}\left[w_+(m)\,\phi(m)\right]^{-1}=\langle T(k+1)\rangle-\langle T(k)\rangle. \tag{3.22}$$

Ținând cont de condiția de frontieră (3.18), putem reprezenta $\langle T(n)\rangle$ ca următoarea sumă de la *k*=*n* la *k*=*b*:

$$\langle T(n)\rangle=\sum_{k=n}^{b}\phi(k)\sum_{m=a}^{k}\left[w_+(m)\,\phi(m)\right]^{-1}. \tag{3.23}$$

Relația (3.23) poate fi exprimată în termenii distribuției staționare $p^{st}(n)$ (2.36) astfel:

$$\langle T(n)\rangle=\sum_{k=n}^{b}\left[w_+(k)\,p^{st}(k)\right]^{-1}\sum_{m=a}^{k}p^{st}(m). \tag{3.24}$$

Pe baza formulei (3.24) se poate calcula $\langle T(n)\rangle$ dacă sunt cunoscute rata w_+ şi distribuția p^{st}, iar $1/\langle T(n)\rangle$ corespunde ratei medii de a depista sistemul pentru prima dată în starea *b*+1, atunci când evoluția acestuia a început în starea *k*=*n*.