# 5. Procese stocastice de relaxare

Să cercetăm procesul Markov în cazul particular când stările sistemului sunt caracterizate doar de un singur număr de particule $n(t)$ şi de ratele tranziţiilor $w_{-}(n)$. Acest proces este reprezentat schematic pe Figura 5.1. Fie în momentul iniţial de timp $n(t=0)=n_0$, iar traiectoria $n(t)=n_0$, $n_0$-1, …, 2, 1, 0 reprezintă salturi unitare la intervale aleatoare de timp. Procesul stocastic respectiv se mai numeşte procesul Poisson.

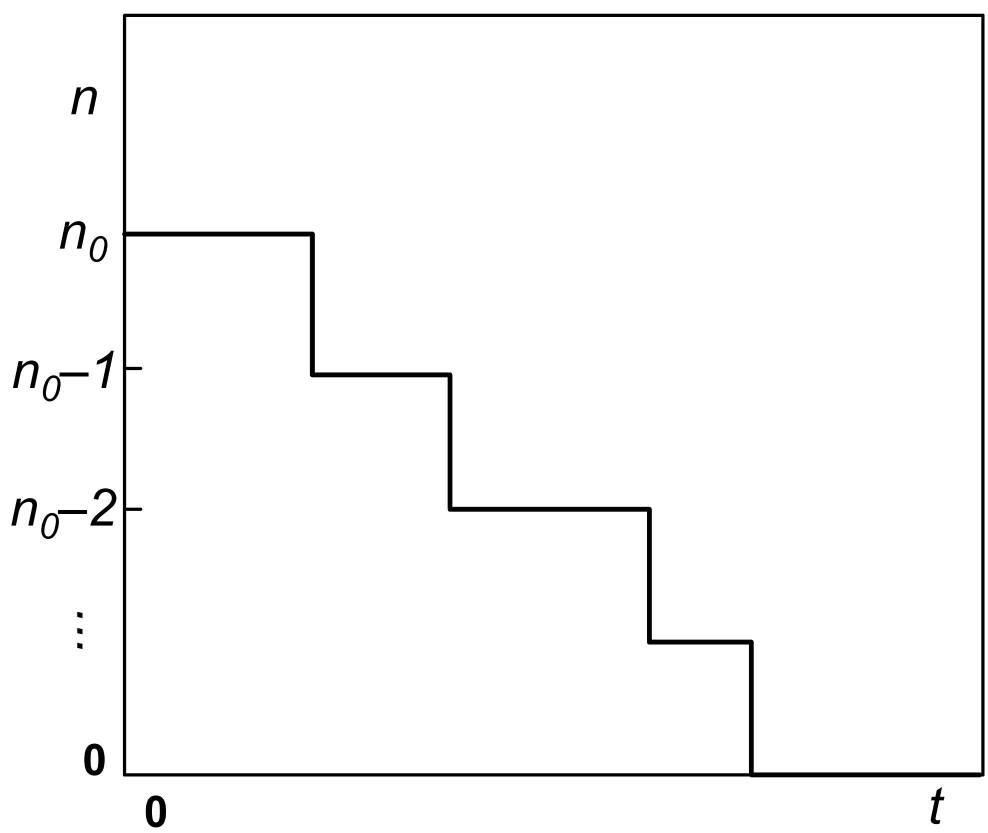


Figura 5.1. Reprezentarea schematică a procesului stocastic de relaxare/descompunere începând cu $n(t)=n_0$ pentru $t$=0.

Fie $p(n,t)$ probabilitatea de a avea un cluster cu dimensiunea $n$ în momentul de timp $t$. Atunci ecuaţia de bază este:

$$\frac{\partial p(n,t)}{\partial t} = w_-(n+1)p(n+1,t) - w_-(n)p(n,t), \qquad (5.1)$$

unde rata de tranzție

$$w(n',n) = w(n-1,n) \equiv w_-(n) = \frac{1}{\tau}. \qquad (5.2)$$

În diverse aplicații constanta $\tau$ este un parametru care se determină experimental. Pentru $n_0(t=0) \geq n \geq 0$, se obține următoarea ecuație cu condițiile de frontieră (vezi ecuațiile corespunzătoare (2.30)−(2.32)):

$$\frac{\partial p(n_0,t)}{\partial t} = -\frac{1}{\tau} p(n_0,t), \qquad (5.3)$$

$$\frac{\partial p(n,t)}{\partial t} = \frac{1}{\tau}\left[p(n+1,t) - p(n,t)\right], \; n_0 - 1 \geq n > 0, \qquad (5.4)$$

$$\frac{\partial p(0,t)}{\partial t} = \frac{1}{\tau} p(1,t), \qquad (5.5)$$

unde $p(n,t=0) = \delta_{n,n_0}$. Pentru a determina soluția analitică a problemei, vom rezolva setul de ecuații diferențiale (5.3)−(5.5). Din prima ecuație rezultă că $p(n_0,t) = \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right)$, care se va însera în următoarea ecuație pentru $p(n_0-1,t)$, se va rezolva şi, astfel, soluțiile precedente se folosesc la rezolvarea întregului sistem de ecuații până la $p(0,t)$. Soluția generală pentru probabilitatea $p(n,t)$ de a observa un cluster cu dimensiunea *n* în momentul de timp *t* este:

$$p(n,t) = \frac{(t/\tau)^{n_0-n}}{(n_0-n)!}\exp\left(-\frac{t}{\tau}\right), \; n_0 \geq n > 0, \qquad (5.6)$$

$$p(0,t) = 1 - \sum_{m=0}^{n_0-1}\frac{(t/\tau)^m}{m!}\exp\left(-\frac{t}{\tau}\right). \qquad (5.7)$$

Condiția de normare la unitate a probabilității, $\sum_{n=0}^{n_0} p(n,t) = 1$, poate fi ușor verificată sumând (5.6) și (5.7). Rezultatele simulării pentru $p(n,t=0) = \delta_{n,50}$ și $t/\tau$=5, 25 și 55 sunt prezentate pe Figura 5.2.

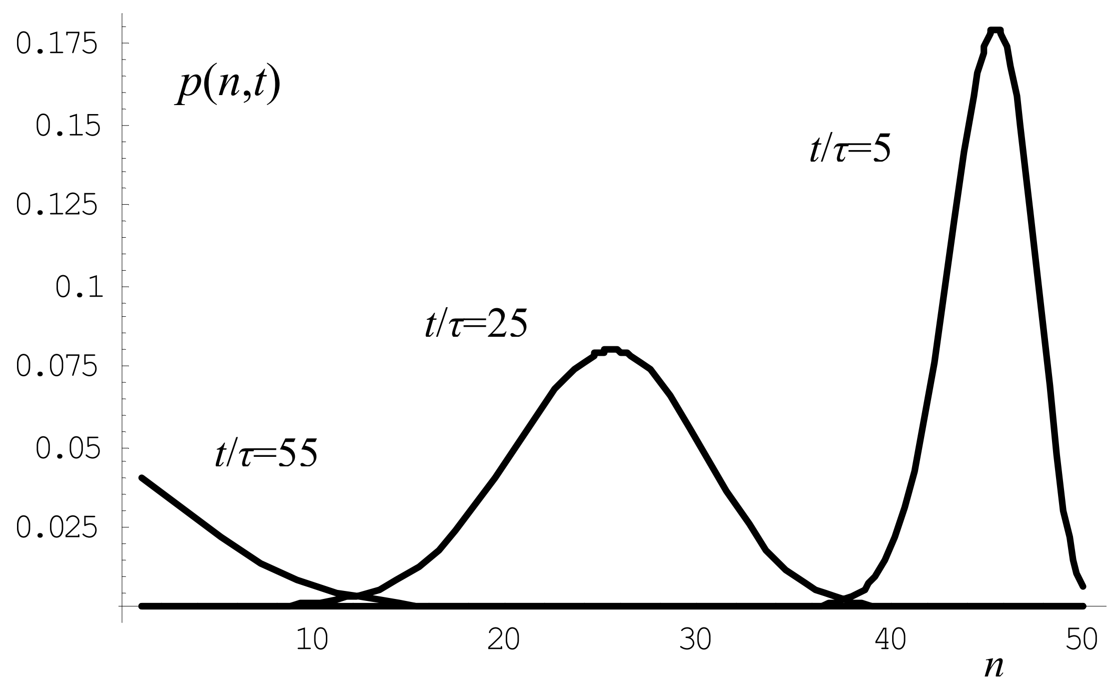


Figura 5.2. Distribuția de probabilitate $p(n,t)$ pentru $n_0$=50 și trei momente diferite de timp $t/\tau$=5, 25 și 55.

Valoarea medie a dimensiunii clusterului $\langle n \rangle$ se calculează conform ecuației:

$$\langle n \rangle(t) \equiv \sum_{n=0}^{n_0} n\, p(n,t) = \sum_{n=1}^{n_0} n\, p(n,t)\,. \tag{5.8}$$

Vom folosi în (5.8) probabilitățile cunoscute (5.6) pentru a obține rezultatul exact:

$$\langle n \rangle(t) = n_0 Q(n_0 - 1, t) - \frac{t}{\tau} Q(n_0 - 2, t)\,, \tag{5.9}$$

unde $Q(n,t)$ este o abreviere pentru termenul Poisson

$$Q(n,t) \equiv \sum_{m=0}^{n} \frac{(t/\tau)^m}{m!} \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right). \tag{5.10}$$

Dispersia $\sigma^2$, care caracterizează fluctuaţiile sistemului, se defineşte ca

$$\sigma^2 = \left\langle (n - \langle n \rangle)^2 \right\rangle = \left\langle n^2 \right\rangle - \langle n \rangle^2 \tag{5.11}$$

şi poate fi la fel calculată cu ajutorul termenului Poisson:

$$\sigma^2(t) = n_0\left[n_0 Q(n_0 - 1, t) - \frac{2t}{\tau} Q(n_0 - 2, t)\right](1 - Q(n_0 - 1, t))$$
$$+\left(\frac{t}{\tau}\right)^2 \left[Q(n_0 - 3, t) - Q^2(n_0 - 2, t)\right] + \frac{t}{\tau} Q(n_0 - 2, t). \tag{5.12}$$

Pentru aproximaţia $Q(n,t) \approx 1$, se obţine o dependenţă liniară de timp pentru ambele funcţii:

$$\langle n \rangle(t) \approx n_0 - \frac{t}{\tau} \tag{5.13}$$

şi
$$\sigma^2(t) \approx \frac{t}{\tau}. \tag{5.14}$$

În această aproximaţie timpul total de descompunere este

$$t_{total} = n_0 \tau. \tag{5.15}$$

Rezultatele exacte (5.9), (5.12) şi aproximaţiile liniare (5.13), (5.14) pentru valoarea medie a dimensiunii clusterului şi pentru dispersie sunt prezentate corespunzător pe Figurile 5.3 şi 5.4 pentru $n_0$=50.
Pentru limita $t \to \infty$ aplicată ecuaţiilor (5.6) şi (5.7) se obţine:

$$\lim_{t \to \infty} p(n,t) = \delta_{n,0}. \tag{5.16}$$

Atunci când $t << t_{total}$ (5.15), probabilitatea $p(0,t)$ că sistemul este deja descompus este foarte mică. Aceasta ne permite să obţinem rezultate corecte pentru $n$>0 cu ajutorul unei metode alternative. Să definim următoarea funcţie generatoare $G(z,t)$:

$$G(z,t) \equiv \sum_n z^n p(n,t). \tag{5.17}$$

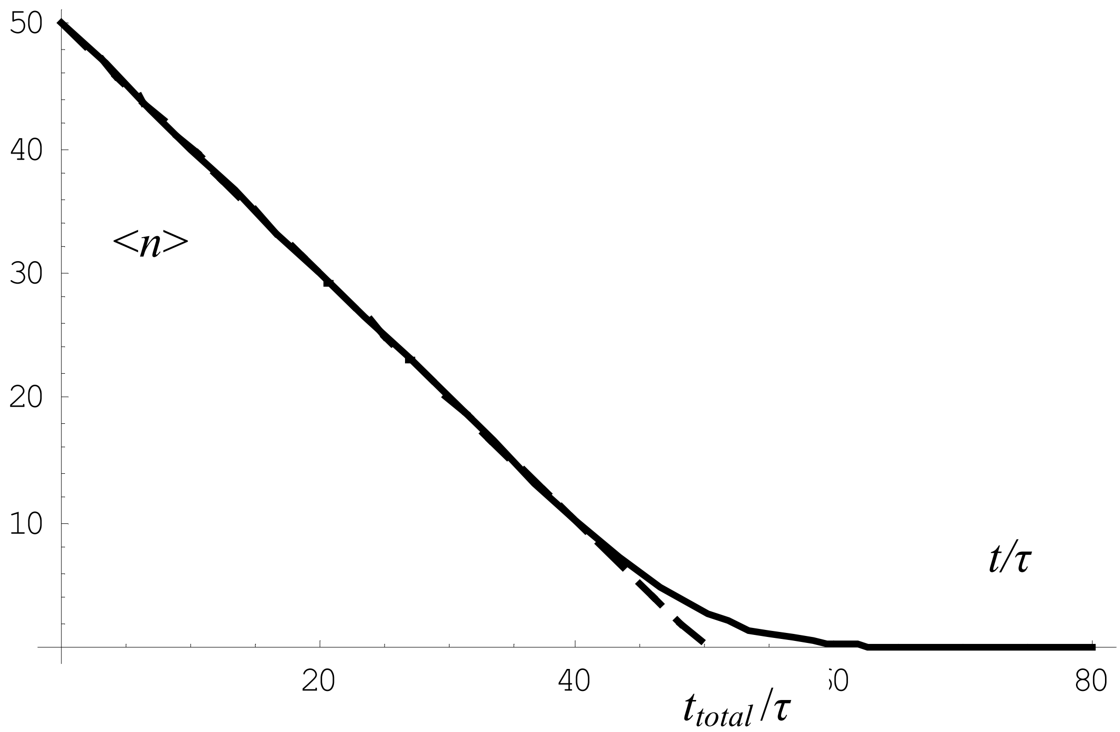


Figura 5.3. Valoarea medie a dimensiunii clusterului <*n*> ca funcție de timpul adimensional $t/\tau$ pentru valoarea inițială $n_0$=50. Aproximația liniară este reprezentată cu linia întreruptă.

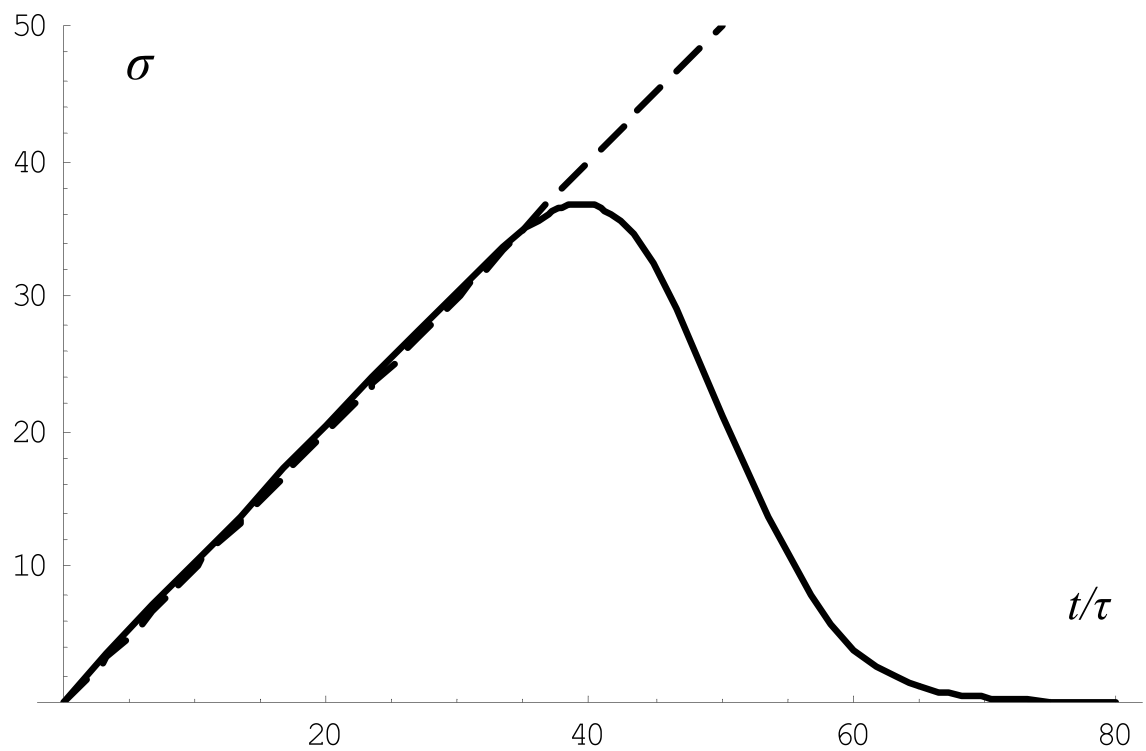


Figura 5.4. Dispersia $\sigma$ ca funcție de timpul adimensional $t/\tau$ pentru valoarea inițială a dimensiunii clusterului $n_0$=50. Aproximația liniară este reprezentată cu linia întreruptă.

În această sumă termenul particular $p(0, t)$ este negligibil, astfel încât limita inferioară de sumare poate fi considerată $n$=1 în locul lui $n$=0. Condiția inițială $p(0,t)=\delta_{n,n_0}$ se reprezintă astfel:

$$G(z,0)=z^{n_0}\,. \tag{5.18}$$

Ecuația pentru funcția generatoare se obține dacă ambele părți ale ecuației de bază (5.4) se înmulțesc la $z^n$ şi se sumează după $n$. Obținem:

$$\frac{\partial}{\partial t}G(z,t)=\frac{1}{\tau}\left(\frac{1}{z}-1\right)G(z,t)\,. \tag{5.19}$$

Soluția ecuației diferențiale (5.19) cu condiția inițială (5.18) este

$$G(z,t)=z^{n_0}\exp\left[\frac{t}{\tau}\left(\frac{1}{z}-1\right)\right]. \tag{5.20}$$

Distribuția precedentă (5.6) pentru $p(n,t)$, $n\geq 1$ se obține în rezultatul următoarelor transformări:

$$G(z,t)=z^{n_0}\exp\left(-\frac{t}{\tau}\right)\exp\left(\frac{t}{\tau}\frac{1}{z}\right). \tag{5.21}$$

$$\begin{aligned}G(z,t)\equiv\sum_n z^n p(n,t)&=z^{n_0}\exp\left(-\frac{t}{\tau}\right)\sum_m\frac{1}{m!}\left(\frac{t}{\tau z}\right)^m\\&=\exp\left(-\frac{t}{\tau}\right)\sum_m\frac{1}{m!}\left(\frac{t}{\tau}\right)^m z^{n_0-m}\\&=\exp\left(-\frac{t}{\tau}\right)\sum_n\frac{1}{(n_0-n)!}\left(\frac{t}{\tau}\right)^{n_0-n}z^n.\end{aligned} \tag{5.22}$$

Prin urmare, comparând termenii cu aceleaşi puteri, obținem:

$$p(n,t)=\frac{(t/\tau)^{n_0-n}}{(n_0-n)!}\exp\left(-\frac{t}{\tau}\right). \tag{5.23}$$

Modelul analizat în acest capitol poate fi generalizat în cazul când frecvența de tranziție (5.2) este funcție de dimensiunea clusterului.

Totodată, valoarea constantă $w_{-}(n)=\frac{1}{\tau}$ examinată aici este o aproximație bună pentru clusterii cu dimensiune mare. Există diverse aplicații ale acestei teorii, dintre cele mai recente fiind, de exemplu, modelarea traficului rutier [27].