# 8. Dinamica formării clusterilor

Vom considera că într-un oarecare interval de timp o structură de tipul $i$ poate trece în categoria $j$, iar ratele de tranziție $w(i, j)$ determină intensitatea acestor transformări şi necesită a fi specificate pentru toate tranzițiile posibile din sistem, $w \equiv \left\{ \overline{a} : \sum_i i a_i = n, \sum_i a_i = k \right\}$. Procesele de creştere cu un element de structură sau *singleton* [11] sunt caracterizate de $w(\overline{a}, \overline{a} + \overline{e}_1) = \nu\lambda$, unde $\nu$ şi $\lambda$ sunt constante pozitive. Totodată un cluster cu dimensiunea $j$ poate creşte în rezultatul anexării acestei unități, dimensiunea rezultantă fiind $j$+1, iar $w(\overline{a}, \overline{a} + \overline{u}_{j+1}) = \lambda\, j\, a_j$, unde $\overline{u}_{j+1} \equiv \overline{e}_{j+1} - \overline{e}_j$, dat fiind faptul că numărul clusterilor cu dimensiunea $j$+1 creşte cu 1, iar cel al clusterilor cu dimensiunea $j$ scade cu o unitate. Prin definiție, vectorii $\overline{u}_1 \equiv \overline{e}_1$. Micşorarea dimensiunii cu o unitate este descrisă de $w(\overline{a}, \overline{a} - \overline{u}_j) = \mu\, j\, a_j$ pentru $j \geq 1$, unde $\overline{e}_0 = 0$. Distribuția de echilibru este

$$\pi(\overline{a}) = \left(1 - \frac{\lambda}{\mu}\right)^{\nu} \prod_{j=1}^{\infty} \frac{\beta_j^{a_j}}{a_j!}, \tag{8.1}$$

unde $\beta_j = \frac{\nu}{j}\left(\frac{\lambda}{\mu}\right)^j$, iar "!" este simbolul factorialului.

În continuare vom nota $w(\overline{a}, \overline{a} + \overline{e}_i) = f$ în calitate de rată de tranziție pentru procesul de anexare a singletonului la un cluster cu dimensiunea $i$=1, 2,… sau $i$-cluster. Procesul se consideră a fi reversibil, $w(\overline{a}, \overline{a} - \overline{e}_i) = \beta$. Se va considera un proces Markov $\overline{a}$

pentru care $w(\overline{a},\overline{a}-\overline{e}_1-\overline{e}_i+\overline{e}_{i+1})=\alpha\, a_1\, a_i\,, i\geq 2$, când o unitate se anexează la un $i$-cluster formând astfel un cluster nou cu dimensiunea $i+1$, iar numărul monomerilor şi al $i$-clusterilor scade respectiv cu o unitate. Atunci când doi monomeri formează un cluster cu dimensiunea 2, se poate scrie $w(\overline{a},\overline{a}-2\overline{e}_1+\overline{e}_2)=\alpha\, a_1\,(a_1-1)$. Divizarea unui $i$-cluster într-un singleton şi un cluster cu dimensiunea $i$-1 se reprezintă ca $w(\overline{a},\overline{a}+\overline{e}_1+\overline{e}_{i-1}-\overline{e}_i)=i\,\beta\, a_i\,, i\geq 2$. În cazul particular al unui dimer $w(\overline{a},\overline{a}+2\overline{e}_1-\overline{e}_2)=2\,\beta\, a_2$. Într-un cadru mai general, procesul de formare a unui $u$-cluster de către un $r$-cluster şi un $s$-cluster, se poate reprezenta ca $w(\overline{a},\overline{a}-\overline{e}_r-\overline{e}_s+\overline{e}_u)=\lambda_{rsu}\, a_r\, a_s$, unde $r\neq s$. Când $r$=$s$, atunci $w(\overline{a},\overline{a}-2\overline{e}_r+\overline{e}_u)=\lambda_{rru}\, a_r\,(a_r-1)$. Procesul este reversibil, adică un $u$-cluster se poate fragmenta intr-un $r$-cluster şi un $s$-cluster, $w(\overline{a},\overline{a}-\overline{e}_u+\overline{e}_r+\overline{e}_s)=\mu_{rsu}\, a_u$, unde $\lambda_{1,i,i+1}=\alpha$, $\mu_{1,i-1,i}=i\beta, i\geq 2$, iar $\lambda_{rsu}=\lambda_{sru}$ şi $\mu_{rsu}=\mu_{sru}$. Distribuția de echilibru este

$$\pi(\overline{a})=B\prod_r\frac{c_r^{a_r}}{a_r!}, \tag{8.2}$$

unde $B$ este constantă de normare şi $c_1$, $c_2$, … sunt numere pozitive care satisfac egalitatea $c_r c_s\lambda_{rsu}=c_u\mu_{rsu}$. Expresia dată pentru distribuția de echilibru poate fi uşor verificată cercetând respectarea condițiilor de echilibru

$$\begin{aligned}&\pi(\overline{a})\, w(\overline{a},\overline{a}-\overline{a}_r-\overline{a}_s+\overline{a}_u)=\\&\pi(\overline{a}-\overline{a}_r-\overline{a}_s+\overline{a}_u)\, w(\overline{a}-\overline{a}_r-\overline{a}_s+\overline{a}_u,\overline{a})\end{aligned}, \tag{8.3}$$

iar relația pentru $c_r$ este $c_r=\dfrac{\beta}{\alpha\, r!}$. Astfel pentru un sistem închis format din $n$ elemente se obține

$$\pi(\overline{a})=B\prod_{i=1}^{n}\frac{1}{a_i!}\left(\frac{\beta}{\alpha\, i!}\right)^{a_i}. \tag{8.4}$$

Folosind funcția generatoare $F(x)=\sum_{r\geq 1} c_r x^r$ se calculează coeficientul lui $x^n$. Se obține $B_n^{-1}=\sum\prod_r \frac{c_r^{a_r}}{a_r!}$, unde suma se calculează după toate stările existente supuse restricției pentru un sistem închis $\sum_r ra_r=n$. Fie $G(x)=\exp\left(F(x)\right)$. Relația de recurență pentru această constantă se obține comparând coeficienții egalității $xG'(x)=\sum_r rc_r x^r G(x)$. Se obține $nB_n^{-1}=\sum_{r=1}^{n} rc_r B_{n-r}^{-1}$, unde $B_0$=1. Numărul mediu de cluster cu dimensiunea $j$ este:

$$E(a_j)=\sum a_j B_n \prod_r \frac{c_r^{a_r}}{a_r!}=\sum a_j B_n \frac{c_j^{a_j}}{a_j!}\prod_{r\neq j}\frac{c_r^{a_r}}{a_r!}=B_n c_j B_{n-j}^{-1}, \tag{8.5}$$

unde s-a ținut cont de egalitatea $\sum_{r\neq j} ra_r + j(a_j-1)=n-j$.

Vom analiza în continuare modelul pentru un sistem deschis. Astfel $n$ se consideră o variabilă aleatoare, iar fluxurile în sistem în acest model se vor constitui din singletoni. Se obține $w(\overline{a},\overline{a}+\overline{e}_1)=\nu$ şi $w(\overline{a},\overline{a}-\overline{e}_1)=\mu a_1$. Dacă esistă numere pozitive $c_1$, $c_2$, … pentru care $\nu=c_1\mu$ şi $c_r c_s \lambda_{rsu}=c_u\mu_{rsu}$, atunci pentru condiția de echilibru $\pi(\overline{a})\nu=\pi(\overline{a}+\overline{e}_1)\,\mu(a_1+1)$ se obține:

$$\pi(\overline{a})=\prod_r e^{-c_r}\frac{c_r^{a_r}}{a_r!}. \tag{8.6}$$

Astfel expresia obținută are forma distribuției Poisson, iar numărul clusterilor $a_1$, $a_2$, … sunt variabile aleatoare independente cu media $c_r$.

Pentru a generaliza acest model, se va presupune că intrările şi ieşirile în/din sistem sunt formate din $r$-clusteri. Prin urmare, $w(\overline{a},\overline{a}+\overline{e}_r)=\nu_r$ şi $w(\overline{a},\overline{a}-\overline{e}_r)=\mu a_r$. Fie $u$=$r$+$s$, iar $\lambda_{rsu}$ şi $\mu_{rsu}$ se abreviază respectiv cu $\lambda_{rs}=\alpha$ şi $\mu_{rs}=\beta\ {}_{r+s}C_r$. Ultimul termen reprezintă numărul de posibilități de fragmentare a unui cluster cu dimensiunea $r+s$ în doi clusteri separați cu dimensiunile $r$ şi $s$, adică ${}_{r+s}C_r \equiv \begin{pmatrix} r+s \\ r \end{pmatrix} \equiv \frac{(r+s)!}{s!r!}$. Astfel $\nu_r = c_r \mu_r$ şi $c_r c_s \lambda_{rs} = c_{r+s} \mu_{rs}$, iar constantele pozitive $c_r$ se vor defini ca $c_r = \frac{\beta}{\alpha} \frac{\theta^r}{r!}$. Relația $c_r c_s \lambda_{rs} = c_{r+s} \mu_{rs}$ este satisfăcută pentru $\theta$ arbitrar, care se determină pentru sistemul deschis de către $\nu_r = c_r \mu_r$, unde $r$ este dimensiunea clusterilor care intră în sistem şi a celor care se divizează. Fie $\lambda_r \equiv \lambda_{1,r-1,r} = \alpha r$ şi $\mu_r \equiv \mu_{1,r-1,r} = \beta r$. Atunci într-un sistem închis când $\sum_r r a_r = n$ şi pentru $c_r = \frac{\beta}{\alpha r}$, distribuția de echilibru este

$$\pi(\overline{a}) = B_n^{-1} \prod_r \frac{1}{a_r!} \left( \frac{\beta}{\alpha r} \right)^{a_r}, \tag{8.7}$$

unde constanta de normare $B_n = {}_{\beta/\alpha+n-1}C_n$.

Alte combinații simple pentru expresii constante sau liniare pentru $\lambda$ şi $\mu$ pot fi analizate similar [11].