2. Diszkrét állapottérben lezajló folyamatok

2.1 A master egyenlet szemléletes származtatása

Tekintsünk egy rendszert, melynek vizsgált állapotai diszkrét változókból alkotott vektorokkal $(\underline{n}, \underline{m}, \dots)$ indexelhetők. Adott esetben az index lehet például a rendszer kvantumszámainak összessége, de az alkalmazások nagy részében a teljes makroszkópikus rendszer helyett csak néhány lassan változó szabadsági fokot vizsgálunk /a többit háttérnek tekintjük/, s ilyenkor az állapot megadása is egyszerübb /kockarácson történő bolyongás esetén például három koordináta/. Tegyük fel, hogy a rendszer állapota — a háttérrel, vagy környezetével való kölcsönhatás következtében — bármelyik pillanatban megváltozhat, s hogy az $\underline{n} \rightarrow \underline{n}'$ $(\underline{n} \neq \underline{n}')$ átmenet Δt intervallum alatti bekövetkezésének valószinüsége

$$w_{\underline{n}'\underline{n}} \Delta t + o(\Delta t) \; .$$

A továbbiakban csak Markov-tipusu folyamatokkal foglalkozunk. Ilyenkor a $w_{\underline{n}'\underline{n}}$ átmeneti valószinüség nem függ attól, milyen állapotban volt korábban a rendszer, s igy jelölésünk valóban következetes. Ha feltesszük, hogy a folyamat invariáns az időbeli eltolásra nézve, akkor explicit időfüggés sem léphet fel $w_{\underline{n}'\underline{n}}$ -ben /homogén folyamat/.

Jelölje $P_{\underline{n},\underline{m}}(t)$ annak a valószinüségét, hogy a rendszer t idő alatt az $\underline{n}$ állapotba kerül, feltéve, hogy az $\underline{m}$ állapontból indult. Az az esemény, hogy a rendszer a $t+\Delta t$ időpontban az $\underline{n}$ állapotban legyen, több egymást kizáró módon valósulhat meg: előfordulhat, hogy t idő eltelte után valamelyik másik ($\underline{l}$) állapotban van, s utána Δt alatt beszóródik $\underline{n}$ -be, ill. előfordulhat, hogy már t idő alatt eléri az $\underline{n}$ állapotot, s azután nem szóródik ki onnét:

$$P_{\underline{n},\underline{m}}(t+\Delta t) = \sum_{\underline{l} \neq \underline{n}} w_{\underline{n},\underline{l}} P_{\underline{l},\underline{m}}(t)\Delta t + \Big(1-\sum_{\underline{l}\neq\underline{n}} w_{\underline{l},\underline{n}}\Delta t\Big) P_{\underline{n},\underline{m}}(t) + o(\Delta t) .$$

Átrendezés ill. a $\Delta t \to 0$ határérték elvégzése után az un. direkt master egyenletet kapjuk

$$\dot{P}_{\underline{n},\underline{m}}(t) = \sum_{\underline{l}\neq\underline{n}} w_{\underline{n},\underline{l}} P_{\underline{l},\underline{m}}(t) - P_{\underline{n},\underline{m}}(t) \sum_{\underline{l}\neq\underline{n}} w_{\underline{l},\underline{n}} , \qquad /2.1/$$

amely azt fejezi ki, hogy a valószinüség időegységre eső megváltozása a beszórási ill. kiszórási valószinüségek különbsége.

$P_{\underline{n},\underline{m}}(t)$ -re egy másik egyenletet is leszármaztathatunk. Tekintsük ugyanis azt a lehetőséget, hogy a rendszer az első Δt intervallumban eljut valamelyik $\underline{l}$ állapotba, vagy helyben marad, s az ezután következő t időtartam alatt kerül $\underline{n}$ -be:

$$P_{\underline{n},\underline{m}}(\Delta t + t) = \sum_{\underline{l}\neq\underline{m}} P_{\underline{n},\underline{l}}(t) w_{\underline{l},\underline{m}} \Delta t + P_{\underline{n},\underline{m}}(t)\Big(1-\sum_{\underline{l}\neq\underline{m}} w_{\underline{l},\underline{m}}\Delta t\Big) + o(\Delta t) .$$

Ebből az un. forditott master egyenlet adódik

$$\dot{P}_{\underline{n},\underline{m}}(t) = \sum_{\underline{l}\neq\underline{m}} w_{\underline{l},\underline{m}} P_{\underline{n},\underline{l}}(t) - P_{\underline{n},\underline{m}}(t) \sum_{\underline{l}\neq\underline{m}} w_{\underline{l},\underline{m}} . \qquad /2.2/$$

Mindkét master egyenlet a

$$P_{\underline{n},\underline{m}}(0) = \delta_{\underline{n},\underline{m}} \qquad /2.3/$$

kezdeti feltétel mellett vizsgálandó, hiszen zérus idő alatt nem történhet átmenet. Látni fogjuk, hogy a /2.1/ és /2.2/ egyenletek nem tul erős feltételek teljesülése esetén ekvivalensek, igy elég csak az egyikkel foglalkoznunk. Néhány kivételtől eltekintve a direkt master egyenletet használjuk majd.

A $P_{\underline{n},\underline{m}}(t)$ valószinüségeloszlás ismeretében az átmeneti valószinüségek könnyen megkonstruálhatók, hiszen

$$\dot{P}_{\underline{n},\underline{m}}(t=0)=w_{\underline{n},\underline{m}} \quad , \text{ ha } \quad \underline{m}\neq\underline{n} \quad .$$

A master egyenlet jelentősége éppen abban áll, hogy az átmeneti valószinüségeket mikroszkopikus számolások, vagy heurisztikus érvek alapján sokszor előre meg tudjuk adni, s ezen deriváltak ismeretében az egyenlet már meghatározza magát a függvényt.

Abban az esetben, ha a kezdeti állapot nem egyértelmü, hanem egy $P_{\underline{m}}$ eloszlás jellemzi ($\sum_{\underline{m}} P_{\underline{m}}=1$), akkor annak a valószinüsége, hogy a rendszer t idő mulva az $\underline{n}$ állapotban legyen

$$P_{\underline{n}}(t)=\sum_{\underline{m}} P_{\underline{n},\underline{m}}(t)\, P_{\underline{m}} \quad , \qquad /2.4/$$

ami azt tükrözi, hogy n-be több kezdeti állapotból is eljuthatunk. Könnyen látható, hogy a $P_{\underline{n}}(t)$ függvény is kielégiti a /2.1/ master egyenletet:

$$\dot{P}_{\underline{n}}(t)=\sum_{l\neq n} w_{\underline{n},\underline{l}}\, P_{\underline{l}}(t) - P_{\underline{n}}(t)\sum_{\underline{l}\neq\underline{n}} w_{\underline{l},\underline{n}} \quad . \qquad /2.5/$$

A $P_{\underline{m}'}=\delta_{\underline{m}',\underline{m}}$ kezdeti eloszlásnak megfelelő megoldás természetesen $P_{\underline{n},\underline{m}}(t)$. A forditott master egyenletnek $P_{\underline{n}}(t)$ nem megoldása.

Mivel a folyamat Markov-tipusu, $P_{\underline{m}}$ és $P_{\underline{n},\underline{m}}(t)$ ismerete elegendő a különböző többváltozós eloszlások meghatározásához is (l. /1.26 /).

$\boxed{\text{1. feladat}}$ A $t=0$ pillanatban kozmikus sugárzásból származó nagy energiáju nukleon éri légkörünket. Ez a részecske a légkör atomjaival ütközve ujabb nukleonokat hoz létre, s azok is hasonlóképpen sokszorózódnak. Tegyük föl, hogy annak a valószinüsége, hogy egy nukleon Δt idő alatt létrehoz egy másodlagos nukleont $\lambda \Delta t + o(\Delta t)$, s ez független a nukleon fajtájától és energiájától, valamint a korábbi eseményektől. Irjuk föl a folyamat master egyenletét!

$\boxed{\text{2. feladat}}$ Egy üzemben N számu egyforma munkagép áll rendelkezésre. Ezen eszközök igénybevétele véletlenszerüen történik. Ha az egyik gép áll, akkor időegység alatt Λ valószinüséggel kerül használatba függetlenül attól, hogy mennyi ideje áll már. Ha egy gép müködik, akkor időegység alatt μ valószinüséggel kapcsolják ki, a müködés idejétől függetlenül. Kezdetben m számu gépet használtak. Irjuk föl azt az egyenletet, amely meghatározza annak a valószinüségét, hogy t idő mulva n gép müködik.

2.2 A master egyenlet megoldásainak tulajdonságai

Röviden összefoglaljuk a /2.5/ master egyenlet megoldásainak legfontosabb általános tulajdonságait. A bizonyitások tisztán matematikai jellegüek, ezért azokkal nem foglalkozunk.

1./ Mindig létezik legalább egy stacionárius /időtől független/megoldás.

2./ A stacionárius megoldás egyértelmü, ha teljesül a következő feltétel: Rendeljük hozzá, a d-dimenziós tér /d az $\underline{n}$ vektor komponenseinek a száma/ különböző pontjaihoz a rendszer egyes állapotait! Minden pontpárt kössünk össze egy vonallal, amennyiben az azoknak megfelelő két állapot között lehetséges átmenet /legalább az egyik irányban/. Ha ezen gráf bármely két pontja között találunk legalább egy folytonos vonalat /a gráf összefüggő/, akkor a stacionárius megoldás egyértelmü. Olyan rendszerben tehát, amelyben bármelyik állapotból eljuthatunk akármelyik másikba a stacionárius megoldás egyértelmü.

3./ Ha a $P_{\underline{n}}^{*}$ stacionárius megoldás egyértelmü, akkor <u>tetszőleges</u> kezdeti eloszlás esetén az un. határeloszlás, vagyis a $P_{\underline{n}}(t)$ megoldás $t \to \infty$ határesete, a stacionárius megoldással egyezik meg:

$$\lim_{t \to \infty} P_{\underline{n}}(t) = P_{\underline{n}}^{*} \qquad /2.6/$$

/ergodikus tulajdonság/. Speciálisan $P_{\underline{n},\underline{m}}(\infty) = P_{\underline{n}}^{*}$, $\underline{m}$ -től függetlenül.

4./ Ha a 2. állitás feltétele teljesül, akkor adott $P_{\underline{m}}$ kezdeti eloszláshoz olyan egyértelmü időfüggő megoldás, $P_{\underline{n}}(t)$ tartozik, amelyben minden $t>0$ -ra

$$0 \le P_{\underline{n}}(t) \le 1 \qquad \text{és} \qquad \sum_{\underline{n}} P_{\underline{n}}(t) = 1 \, , \qquad /2.7/$$

tehát a $P_{\underline{n}}(t)$ függvény valóban valószinüség-eloszlásként értelmezhető az egész folyamat során. A /2.7/ összefüggések természetesen a $P_{\underline{n},\underline{m}}(t)$ feltételes valószinüségre is fennállnak, hiszen ez a $P_{\underline{m}'} = \delta_{\underline{m}',\underline{m}}$ kezdeti eloszláshoz tartozik. Ha a megoldás egyértelmü, a $P_{\underline{n},\underline{m}}(t)$ függvény mind a direkt, mind a forditott egyenletnek megoldása.

A fenti állitások szigoruan véve csak véges számu állapotot tartalmazó állapottérben lezajló folyamatokra érvényesek, de hasonló kijelentések tehetők végtelen állapottérben is, amennyiben további feltételek teljesülését is megköveteljük /például azt, hogy az egymástól távol eső állapotok között kicsi legyen az átmenet valószinüsége, lásd 9. feladat/.

2.3 Stacionárius megoldás, a részletes egyensuly

A P_n^* stacionárius megoldás egyik lehetséges meghatározása a /2.5/ egyenletből adódik, hiszen ilyenkor $\dot{P}_n(t)=0$. Természetesen ugyenez az eredmény kapható az időfüggő megoldás aszimptotikus viselkedéseként is /2.6/, amennyiben a megoldás egyértelmü.

Fontos speciális eset, ha az egyensulyi eloszlás eleget tesz az un. részletes egyensuly elvének. Ez azt jelenti, hogy bármelyik két állapot /pl. m és n / között ugyanannyi átmenet történik időegység alatt az egyik irányban, mint a forditott irányban. Matematikai megfogalmazásban:

$$w_{mn} P_n^* = w_{nm} P_m^* \quad \text{minden } n, m\text{-re} . \qquad /2.8/$$

Megmutatjuk, hogy amennyiben egy rendszer stacionárius megoldása eleget tesz a részletes egyensuly elvének, továbbá teljesülnek azok a 2.2-ben megadott feltételek, melyek a megoldás egyértelmüségét biztositják, akkor a P_n^* eloszlás egyszerüen megadható.

Válasszunk egy tetszőleges n_0 állapotot. Ezután keressünk egy átmenet-láncolatot n_0 -ból n -be. Feltételeink szerint legalább egy ilyen láncolat létezik. Tegyük föl, hogy ez a