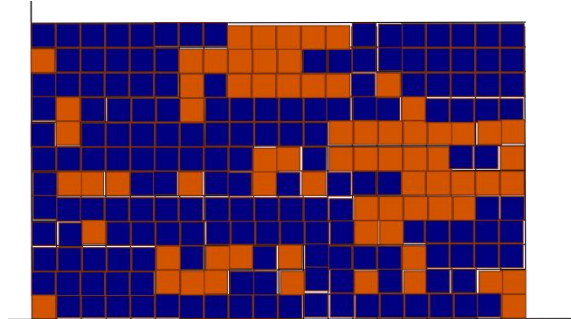


Διαδικασία τυχαιών διασπάσεων (the decay process model)
Κωνσταντίνος Παπαμιχάλης Δρ Θεωρητικής Φυσικής (ΕΚΠΑ)

Προσομοίωση του μοντέλου των τυχαιών διασπάσεων:
[A decay process model \(sch.gr\)](http://sch.gr)

Περιγραφή του μοντέλου των τυχαιών διασπάσεων

Θεωρώ ένα σύστημα N πανομοιότυπων αλλά διακριτών κελιών που συμβολίζονται με C_j , τοποθετημένα στις κορυφές ενός πλέγματος, όπως απεικονίζεται στο σχήμα 1. Ο δείκτης j παίρνει τιμές στο σύνολο $\{1,2,\dots,N\}$ και καθορίζει κάθε κελί με μονοσήμαντο τρόπο. Κάθε κελί μπορεί να βρίσκεται σε μία από δύο πιθανές εσωτερικές καταστάσεις A ή B . Εάν τη στιγμή t το κελί C_j βρίσκεται στην κατάσταση A , η πιθανότητα στο απειροστό διάστημα $[t,t+Dt]$ να μεταβεί στην κατάσταση B ισούται με wDt , όπου w είναι μια πραγματική σταθερά. Αν όμως τη στιγμή t το κελί C_j βρίσκεται στην κατάσταση B , παραμένει στην κατάσταση B με πιθανότητα 1. Υποθέτω ότι η πιθανότητα μετάβασης οποιουδήποτε κελιού από την A στη B στο χρονικό διάστημα $[t,t+Dt]$ είναι ανεξάρτητη του t και ανεξάρτητη του αριθμού των κελιών που βρίσκονται στην A ή στη B τη στιγμή t .



Σχήμα 1: Ένα πλέγμα πανομοιότυπων κελιών. Κάθε κελί μπορεί να βρεθεί σε μια από δύο διαθέσιμες καταστάσεις.

Αυτό το μοντέλο είναι κατάλληλο για να περιγράψει την εξέλιξη ενός συστήματος ασταθών πυρήνων που μεταβαίνουν σε κάποια σταθερή κατάσταση με τυχαίο τρόπο.

Σε αυτή την εργασία ασχολούμαι με τα ακόλουθα θέματα:

- α) Παράγω την αναλυτική έκφραση της πιθανότητας⁽¹⁾ του γεγονότος "Δεδομένου ότι τη χρονική στιγμή $t=0$ υπάρχουν N κελιά στην κατάσταση A , τη στιγμή $t>0$ υπάρχουν n ($n \leq N$) κελιά στην κατάσταση A ".
- β) Παράγω μια εξίσωση master που περιγράφει την εξέλιξη του συστήματος των κελιών.
- γ) Βρίσκω την αναλυτική έκφραση μιας συνάρτησης Lyapunov που αντιστοιχεί στην εξίσωση master που περιγράφει την εξέλιξη του συστήματος. Δείχνω ότι το σύστημα συγκλίνει στην κατάσταση ισορροπίας του ανεξάρτητα από τη μορφή της αρχικής του κατάστασης ^(1,2,3,4).

Λέξεις-κλειδιά και σχέσεις

Στοχαστική μεταβλητή - Δειγματικός χώρος - Στοχαστική διαδικασία - Γεγονότα - Πυκνότητα πιθανότητας - Κατανομή πιθανότητας - Υπό συνθήκη πιθανότητα (conditional probability) - Συνδυασμένη πιθανότητα (joint probability) - Διαδικασία Markov - Ταυτότητα Chapman Kolmogorov - Εξίσωση master - Κατάσταση ισορροπίας - Συνάρτηση Lyapunov

1. Μια "στατική" άποψη του προβλήματος: Παραγωγή της πυκνότητας πιθανότητας $PA(n,t)$ της στοχαστικής διαδικασίας $NA(t)$

Έστω $NA(t)$ η στοχαστική διαδικασία⁽¹⁾ που μετράει τον αριθμό των κελιών που βρίσκονται στην κατάσταση A στο χρονικό διάστημα $[0,t)$. Ο δειγματικός χώρος της $NA(t)$ είναι το σύνολο: $\Omega = \{0,1,2,\dots,N\}$

Έστω $P(A,t)$ η κατανομή πιθανότητας που προσδιορίζει την πιθανότητα του γεγονότος "Το k -κελί είναι στην κατάσταση A σε όλο το χρονικό διάστημα $[0,t)$, δεδομένου ότι τη στιγμή $t=0$ ήταν στην κατάσταση A ". Δέχομαι ότι η $P(A,t)$ είναι ίδια για κάθε κελί, που συνεπάγεται ότι η αναλυτική της έκφραση δεν εξαρτάται από τον δείκτη k . Σύμφωνα με την περιγραφή του μοντέλου των τυχαιών διασπάσεων, η πιθανότητα μετάβασης του k -κελιού από την κατάσταση A στην B , στο απειροστό χρονικό διάστημα $[t,t+Dt)$ ισούται με wDt . Συμπεραίνω ότι η πιθανότητα του γεγονότος "Το k -κελί είναι στην A σε όλο το χρονικό διάστημα $[0,t+Dt)$ " υπολογίζεται από τις σχέσεις:

$$P(A,t + Dt) = P(A,t)(1 - wDt) \Rightarrow \frac{dP}{dt} = -wP \Rightarrow P(A,t) = e^{-wt} \tag{1}$$

Υποθέτω ότι τη χρονική στιγμή $t=0$ κάθε κελί βρίσκεται στην κατάσταση A : $P_A(n,0) = \delta_{n,N}$. Ποια είναι η αναλυτική έκφραση της πιθανότητας $P_A(n,t)$ του γεγονότος "Τη στιγμή t η τιμή της στοχαστικής διαδικασίας $N_A(t)$ ισούται με n ";
 Δεδομένου ότι οι μεταβάσεις των κελιών από την κατάσταση A στη B είναι στοχαστικά ανεξάρτητα γεγονότα, ισχύει η σχέση⁽¹⁾:

$$P_A(n,t) = \frac{N!}{n!(N-n)!} (p_A(t))^n (1-p_A(t))^{N-n} = \binom{N}{n} (p_A(t))^n (1-p_A(t))^{N-n} \quad (1a)$$

όπου: $p_A(t) = P(A,t) = e^{-wt}$

Υπολογίζω τον μέσο αριθμό των κελιών που βρίσκονται στην κατάσταση A σε όλο το χρονικό διάστημα $[0,t]$:

$$\langle N_A(t) \rangle = \sum_{n=0}^N n P_A(n,t) = \sum_{n=0}^N n \binom{N}{n} (p_A(t))^n (1-p_A(t))^{N-n} = \sum_{n=0}^N n \binom{N}{n} p^n q^{N-n}$$

όπου: $p = p_A(t)$ και: $q = 1 - p_A(t)$

Από τη διωνυμική ταυτότητα: $(p+q)^N = \sum_{n=0}^N \binom{N}{n} p^n q^{N-n}$

...υπολογίζω την παράγωγο και των δύο πλευρών σε σχέση με τη μεταβλητή p και λαμβάνω τις ταυτότητες:

$$N(p+q)^{N-1} = \sum_{n=0}^N n \binom{N}{n} p^{n-1} q^{N-n} \Rightarrow N = \frac{1}{p} \sum_{n=0}^N n \binom{N}{n} p^n q^{N-n} \Rightarrow \sum_{n=0}^N n \binom{N}{n} p^n q^{N-n} = Np$$

Από την οποία προκύπτει ότι:

$$\langle N_A(t) \rangle = NP(A,t) = Ne^{-wt} \quad (2)$$

Από τις 1 και 1a συνεπάγεται ότι η υπό συνθήκη πιθανότητα: "τη χρονική στιγμή t_2 , n_2 κελιά βρίσκονται στην κατάσταση A , δεδομένου ότι τη στιγμή t_1 , n_1 κελιά βρίσκονται στην κατάσταση A , όπου $t_2 > t_1$ ", υπολογίζεται από την αναλυτική έκφραση:

$$P_{A|A}(n_2, t_2 | n_1, t_1) = \binom{n_1}{n_2} e^{-w(t_2-t_1)n_2} (1 - e^{-w(t_2-t_1)})^{n_1-n_2} \quad (3)$$

Παρατηρήσεις:

A) Η υπό συνθήκη πιθανότητα $P_{A|A}(n_2, t_2 | n_1, t_1)$ εξαρτάται μόνο από τη χρονική απόσταση $\tau = t_2 - t_1$ των γεγονότων $N_A(t_1)=n_1$ και $N_A(t_2)=n_2$:

$$P_{A|A}(n_2, t_1 + \tau | n_1, t_1) = \binom{n_1}{n_2} e^{-w\tau n_2} (1 - e^{-w\tau})^{n_1-n_2} \quad (4a)$$

B) Για $n_1=n_2$, από την 4a προκύπτει ότι η πιθανότητα του γεγονότος "ο αριθμός των κελιών στην κατάσταση A τη στιγμή t_1 είναι ίδιος με τον αριθμό των κελιών στην κατάσταση A τη στιγμή t_2 " δίνεται από την έκφραση:

$$P_{A|A}(n_1, t_1 + \tau | n_1, t_1) = e^{-w\tau n_1} (1 - e^{-w\tau})^0 = e^{-w\tau n_1} \quad (4\beta)$$

Γ) Από την 4a μπορεί ναδειχθεί ότι αληθεύει η σχέση:

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} P_{A|A}(n_2, t_1 + \tau | n_1, t_1) = \begin{cases} 1(1-0)^{n_0} = 1 & \text{για } 0=n_2 \leq n_1 \\ \binom{n_1}{n_2} e^{-w\tau n_2} (1 - e^{-w\tau})^{n_1-n_2} = 0 & \text{για } 0 < n_2 \leq n_1 \end{cases} = \delta_{n_2,0} \quad (4\gamma)$$

Δηλαδή, μετά από αρκετό χρόνο, όλα τα κελιά θα βρίσκονται στην κατάσταση B .

Δ) Για $\tau \rightarrow 0$ από την 4a συνεπάγεται ότι:

$$\lim_{\tau \rightarrow 0} P_{A|A}(n_2, t + \tau | n_1, t) = \begin{cases} \binom{n_1}{n_2} e^{-w\tau n_2} (1 - e^{-w\tau})^{n_1 - n_2} = 0 & \text{για } n_1 > n_2 \\ e^{-w\tau n_1} (1 - e^{-w\tau})^0 \rightarrow 1 & \text{για } n_1 = n_2 \end{cases} = \delta_{n_1, n_2} \quad (4\delta)$$

2. Διαδικασίες Markov και η ταυτότητα Chapman-Kolmogorov στο πλαίσιο του μοντέλου των τυχαίων διασπάσεων (decay process model)

Ορίζω τη χρονική ακολουθία:

$$t_0 = 0, t_1 = Dt, t_2 = 2Dt, \dots, t_\mu = \mu Dt, \dots \quad Dt > 0$$

Σύμφωνα με το μοντέλο μας, εάν κάποια στιγμή t_μ το j-κελί βρίσκεται στην κατάσταση A, η πιθανότητα να μεταβεί στην κατάσταση B στο απειροστό χρονικό διάστημα $[t_\mu, t_{\mu+1})$ ισούται με wDt , όπου: $wDt \ll 1$. Αντίθετα, εάν τη στιγμή t_μ το j-κελί βρίσκεται στην κατάσταση B, συνεχίζει να είναι στη B για κάθε $t_k \geq t_\mu$, με πιθανότητα ίση με 1. Επιπλέον, έχω θεωρήσει ότι ο αριθμός των κελιών που βρίσκονται στην κατάσταση A τη χρονική στιγμή $t_{\mu+1}$ εξαρτάται από τον αριθμό των κελιών που βρίσκονταν στην A την προηγούμενη χρονική στιγμή t_μ και μόνο: δεν εξαρτάται από το ιστορικό των μεταβάσεων που συνέβησαν στα διαστήματα $[t_0, t_1), [t_1, t_2), \dots, [t_{\mu-1}, t_\mu)$. Επομένως, η εξέλιξη του συστήματος περιγράφεται με μια **διαδικασία Markov**^(1,2).

Η εξέλιξη του συνόλου των κελιών καθορίζεται από τη στοχαστική διαδικασία $N_A(t)$, που έχει οριστεί στην παράγραφο 1: Η δράση της συνάρτησης $N_A(t)$ στη χρονική ακολουθία $t_0, t_1, \dots, t_\mu, \dots$ επιστρέφει τον αριθμό των κελιών που βρίσκονται στην κατάσταση A στο αντίστοιχο χρονικό διάστημα $[0, t_\mu)$.

Στη συνέχεια, διαμορφώνω μια εξίσωση master που περιγράφει την εξέλιξη του συστήματος. Η εξίσωση master είναι μια διαφορική εξίσωση πρώτης τάξης. Η πυκνότητα πιθανότητας⁽¹⁾ $P_A(n_k, t_k)$ της στοχαστικής διαδικασίας $N_A(t_k)$ προκύπτει ως λύση αυτής της εξίσωσης master.

Θερώ ένα **φυσικό** σύστημα που περιγράφεται από το μοντέλο των τυχαίων διασπάσεων. Η κατάσταση του φυσικού συστήματος τη στιγμή t_k σε μια πειραματική πραγματοποίησή του, καθορίζεται από την τιμή n_k της τυχαίας μεταβλητής $N_A(t_k)$ που μετράται τη στιγμή t_k .

Ας υποθέσουμε ότι τη στιγμή $t_0=0$ όλα τα κελιά βρίσκονται στην κατάσταση A:

$$N_A(t_0) = n_0 = N$$

Κατά την εξέλιξή του, το σύστημα ξεκινά από μια αρχική κατάσταση και διέρχεται από μια ακολουθία άπειρων καταστάσεων που, γενικά, είναι διαφορετικές σε κάθε πειραματική υλοποίηση. Μια πιθανή εξέλιξη του συστήματος συμβολίζεται:

$$\{n_0, t_0; n_1, t_1; \dots, n_\mu, t_\mu; \dots\} \quad \text{όπου: } t_0 < t_1 < \dots$$

Η πιθανότητα πραγματοποίησης μιας συγκεκριμένης άπειρης ακολουθίας καταστάσεων κατά τη χρονική μεταβολή του συστήματος είναι ίση με μηδέν. Μπορώ, ωστόσο, να ορίσω την πιθανότητα το σύστημα να διέρχεται από συγκεκριμένο, **πεπερασμένο** αριθμό καταστάσεων. Για παράδειγμα, ορίζω την συνδυασμένη (joint) πιθανότητα⁽¹⁾:

$$\bar{P}_3(n_k, t_k; n_\lambda, t_\lambda; n_\mu, t_\mu) \stackrel{\text{def}}{=} \Pr \{n_k, t_k; n_\lambda, t_\lambda; n_\mu, t_\mu\} \quad (5)$$

...που επιστρέφει την πιθανότητα του γεγονότος "Το σύστημα κατά την εξέλιξή του διέρχεται από τις καταστάσεις $(n_k, t_k), (n_\lambda, t_\lambda), (n_\mu, t_\mu)$ ". Στον ορισμό 5, οι χρονικές στιγμές t_k, t_λ, t_μ δεν υπόκεινται σε καμιά διάταξη, και η συνάρτηση $\bar{P}_3(n_k, t_k; n_\lambda, t_\lambda; n_\mu, t_\mu)$ είναι συμμετρική ως προς τα τρία ορίσματα $n_k, t_k; n_\lambda, t_\lambda; n_\mu, t_\mu$.

Η πιθανότητα μιας συγκεκριμένης διάταξης μεταξύ των χρονικών στιγμών t_k, t_λ, t_μ , για παράδειγμα της διάταξης: $t_k < t_\lambda < t_\mu$ είναι ίση με 1/3!. Επομένως, η πιθανότητα το σύστημα να περάσει διαδοχικά από τις καταστάσεις n_k, n_λ, n_μ τις χρονικές στιγμές $t_k < t_\lambda < t_\mu$, αντίστοιχα, υπολογίζεται από τη σχέση⁽¹⁾:

$$P_3(n_\kappa, t_\kappa; n_\lambda, t_\lambda; n_\mu, t_\mu) = \frac{1}{3!} \bar{P}_3(n_\kappa, t_\kappa; n_\lambda, t_\lambda; n_\mu, t_\mu) \quad (5a)$$

Η πιθανότητα το σύστημα τη χρονική στιγμή t_μ να περάσει από την κατάσταση n_μ δεδομένου ότι τις χρονικές στιγμές t_κ, t_λ πέρασε από τις καταστάσεις n_κ, n_λ αντίστοιχα, υπολογίζεται από την υπό συνθήκη πιθανότητα conditional probability⁽¹⁾:

$$P_{1|2}(n_\mu, t_\mu | n_\kappa, t_\kappa; n_\lambda, t_\lambda) = \frac{P_3(n_\kappa, t_\kappa; n_\lambda, t_\lambda; n_\mu, t_\mu)}{P_2(n_\kappa, t_\kappa; n_\lambda, t_\lambda)} \quad (6)$$

Διαδικασίες Markov

Μια στοχαστική διαδικασία ονομάζεται "διαδικασία Markov" εάν και μόνο εάν η υπό συνθήκη πιθανότητα $P_{1|2}(n_\mu, t_\mu | n_\kappa, t_\kappa; n_\lambda, t_\lambda)$, όπου: $t_\kappa < t_\lambda < t_\mu$ είναι ανεξάρτητη από τις καταστάσεις που βρισκόταν το σύστημα, πριν από το χρόνο t_λ . Επομένως σε μια διαδικασία Markov πρέπει και αρκεί να ικανοποιούνται οι συνθήκες:

$$P_{1|2}(n_\mu, t_\mu | n_\kappa, t_\kappa; n_\lambda, t_\lambda) = P_{1|1}(n_\mu, t_\mu | n_\lambda, t_\lambda) \quad (6a)$$

$$P_3(n_\kappa, t_\kappa; n_\lambda, t_\lambda; n_\mu, t_\mu) = P_{1|1}(n_\mu, t_\mu | n_\lambda, t_\lambda) P_2(n_\kappa, t_\kappa; n_\lambda, t_\lambda) = P_{1|1}(n_\mu, t_\mu | n_\lambda, t_\lambda) P_{1|1}(n_\lambda, t_\lambda | n_\kappa, t_\kappa) P_1(n_\kappa, t_\kappa) \quad (6\beta)$$

Η υπό συνθήκη πιθανότητα $P_{1|1}(n_\mu, t_\mu | n_\lambda, t_\lambda)$ ονομάζεται "**πιθανότητα μετάβασης (transition probability)**"⁽¹⁾.

Από τις 6α και 6β προκύπτει ότι σε μια διαδικασία Markov η συνδυασμένη (joint) πιθανότητα κάθε πεπερασμένης ακολουθίας καταστάσεων $|n_0, t_0; n_1, t_1; \dots; n_\mu, t_\mu; \dots\rangle$ $t_0 < t_1 < \dots$, μπορεί να υπολογιστεί συναρτήσει της πιθανότητας μετάβασης και της πυκνότητας πιθανότητας $P_A(n_0, t_0)$

Ακολουθώ τον φορμαλισμό της αναφοράς 1 και θέτω:

$$P_A(n_\mu, t_\mu) \equiv P_2(n_0, t_0; n_\mu, t_\mu) = P_{1|1}(n_\mu, t_\mu | n_0, t_0) P_1(n_0, t_0)$$

Ποιες είναι οι αναγκαίες συνθήκες που πρέπει να ικανοποιούν οι συναρτήσεις $P_1(n_\mu, t_\mu)$ και $P_{1|1}(n_\mu, t_\mu | n_\lambda, t_\lambda)$ εάν η εξέλιξη του συστήματος περιγράφεται με μια διαδικασία Markov;

Αθροίζω και τα δύο μέρη της 6β ως προς το n_λ και παράγω τις ακόλουθες ισότητες:

$$\sum_{n_\lambda=0}^N P_3(n_\kappa, t_\kappa; n_\lambda, t_\lambda; n_\mu, t_\mu) = \sum_{n_\lambda=0}^N P_{1|1}(n_\mu, t_\mu | n_\lambda, t_\lambda) P_2(n_\kappa, t_\kappa; n_\lambda, t_\lambda) \Rightarrow$$

$$P_2(n_\kappa, t_\kappa; n_\mu, t_\mu) = \sum_{n_\lambda=0}^N P_{1|1}(n_\mu, t_\mu | n_\lambda, t_\lambda) P_2(n_\kappa, t_\kappa; n_\lambda, t_\lambda) \quad (7a)$$

$$(7a) \Rightarrow P_2(n_\kappa, t_\kappa; n_\mu, t_\mu) = P_1(n_\kappa, t_\kappa) \sum_{n_\lambda=0}^N P_{1|1}(n_\mu, t_\mu | n_\lambda, t_\lambda) P_{1|1}(n_\lambda, t_\lambda | n_\kappa, t_\kappa) \Rightarrow$$

$$P_{1|1}(n_\mu, t_\mu | n_\kappa, t_\kappa) = \sum_{n_\lambda=0}^N P_{1|1}(n_\mu, t_\mu | n_\lambda, t_\lambda) P_{1|1}(n_\lambda, t_\lambda | n_\kappa, t_\kappa) \quad (7\beta)$$

Οι ισότητες 7a και 7β, που ισχύουν κάτω από την προϋπόθεση ότι οι 6a και 6β είναι αληθείς, ονομάζονται "**ταυτότητες Chapman-Kolmogorov**".

Μια άλλη ταυτότητα, που δεν προκύπτει από τις 7a ή το 7b, λαμβάνεται από τις επόμενες σχέσεις:

$$\sum_{n_\lambda=0}^N P_{1|1}(n_\mu, t_\mu | n_\lambda, t_\lambda) P_1(n_\lambda, t_\lambda) = \sum_{n_\lambda=0}^N \frac{P_{1|1}(n_\lambda, t_\lambda; n_\mu, t_\mu)}{P_1(n_\lambda, t_\lambda)} P_1(n_\lambda, t_\lambda) = \sum_{n_\lambda=0}^N P_{1|1}(n_\lambda, t_\lambda; n_\mu, t_\mu) = P_1(n_\mu, t_\mu)$$

$$P_1(n_\mu, t_\mu) = \sum_{n_\lambda=0}^N P_{1|1}(n_\mu, t_\mu | n_\lambda, t_\lambda) P_1(n_\lambda, t_\lambda) \quad (8)$$

Οι ταυτότητες 8 και 7a (ή η ισοδύναμή της 7β) είναι αναγκαίες συνθήκες που προκύπτουν από την υπόθεση ότι η εξέλιξη του συστήματος περιγράφεται με μια διαδικασία Markov. Θα δείξω ότι

είναι και ικανές συνθήκες, δηλαδή εάν είναι αληθείς, τότε το σύστημα εξελίσσεται σύμφωνα με μια διαδικασία Markov.

Έστω ότι οι $P_1(n_\mu, t_\mu)$ και $P_{1|1}(n_\mu, t_\mu | n_\lambda, t_\lambda)$ ικανοποιούν τις σχέσεις 7α, 7β και 8. Τότε, θα δείξω ότι η συνθήκη 6α είναι αληθής:

$$P_{1|2}(n_\mu, t_\mu | n_\kappa, t_\kappa; n_\lambda, t_\lambda) = P_{1|1}(n_\mu, t_\mu | n_\lambda, t_\lambda)$$

Απόδειξη:

Σε κάθε περίπτωση αληθεύουν οι ταυτότητες:

$$P_3(n_\kappa, t_\kappa; n_\lambda, t_\lambda; n_\mu, t_\mu) = P_{1|2}(n_\mu, t_\mu | n_\kappa, t_\kappa; n_\lambda, t_\lambda) P_2(n_\kappa, t_\kappa; n_\lambda, t_\lambda)$$

$$P_2(n_\kappa, t_\kappa; n_\mu, t_\mu) = \sum_{n_\lambda=0}^N P_3(n_\kappa, t_\kappa; n_\lambda, t_\lambda; n_\mu, t_\mu) = \sum_{n_\lambda=0}^N P_{1|2}(n_\mu, t_\mu | n_\kappa, t_\kappa; n_\lambda, t_\lambda) P_2(n_\kappa, t_\kappa; n_\lambda, t_\lambda)$$

$$P_{1|1}(n_\mu, t_\mu | n_\kappa, t_\kappa) = \sum_{n_\lambda=0}^N P_{1|2}(n_\mu, t_\mu | n_\kappa, t_\kappa; n_\lambda, t_\lambda) P_{1|1}(n_\lambda, t_\lambda | n_\kappa, t_\kappa) \quad (9)$$

Από τις 7 και 9 συνεπάγεται ότι για κάθε τιμή των κ και μ , η ακόλουθη συνθήκη είναι αληθής:

$$\sum_{n_\lambda=0}^N (P_{1|2}(n_\mu, t_\mu | n_\kappa, t_\kappa; n_\lambda, t_\lambda) - P_{1|1}(n_\mu, t_\mu | n_\lambda, t_\lambda)) P_{1|1}(n_\lambda, t_\lambda | n_\kappa, t_\kappa) = 0 \quad (9a)$$

Δεδομένου ότι για κάθε τιμή του n_λ ισχύει:

$$P_{1|2}(n_\mu, t_\mu | n_\kappa, t_\kappa; n_\lambda, t_\lambda) - P_{1|1}(n_\mu, t_\mu | n_\lambda, t_\lambda) \leq 0 \text{ και: } P_{1|1}(n_\lambda, t_\lambda | n_\kappa, t_\kappa) > 0$$

...από την 9α προκύπτει ότι η 6α είναι αληθής:

$$P_{1|2}(n_\mu, t_\mu | n_\kappa, t_\kappa; n_\lambda, t_\lambda) - P_{1|1}(n_\mu, t_\mu | n_\lambda, t_\lambda) = 0 \quad \text{ΟΕΔ}$$

3. Παραγωγή μιας εξίσωσης master στο πλαίσιο του μοντέλου των τυχαίων διασπάσεων Υπολογισμός της πυκνότητας πιθανότητας $P_A(n_\kappa, t_\kappa)$ της στοχαστικής διαδικασίας $N_A(t_\kappa)$

Η πιθανότητα ότι τη στιγμή t_κ υπάρχουν n_κ κελιά στην κατάσταση A, δεδομένου ότι τη στιγμή $t_0=0$ όλα τα κελιά βρίσκονται στην A ($n_0=N$), υπολογίζεται από την εξίσωση Charman-Kolmogorov (σχέση 7α):

$$P_2(n_0, t_0; n_\kappa, t_\kappa) = \sum_{n_\lambda=0}^N P_{1|1}(n_\kappa, t_\kappa | n_\lambda, t_\lambda) P_2(n_0, t_0; n_\lambda, t_\lambda) \text{ όπου: } t_\lambda < t_\kappa \quad (10)$$

$$\left. \begin{aligned} P_2(n_0, t_0; n_\kappa, t_\kappa) &= P_{1|1}(n_\kappa, t_\kappa | n_0, t_0) P_1(n_0, t_0) \\ P_1(n_0, t_0) &= \delta_{n_0, N} \end{aligned} \right\} \Rightarrow P_2(n_0, t_0; n_\kappa, t_\kappa) = P_{1|1}(n_\kappa, t_\kappa | n_0, t_0) \delta_{n_0, N} \equiv P_A(n_\kappa, t_\kappa)$$

...όπου: $P_A(n_0, t_0) = P_{1|1}(n_0, t_0 | n_0, t_0) \delta_{n_0, N} = \delta_{n_0, N}$

Έπεται ότι η εξίσωση 10 μπορεί να γραφεί:

$$P_A(n_\kappa, t_\kappa) = \sum_{n_\lambda=0}^N P_{1|1}(n_\kappa, t_\kappa | n_\lambda, t_\lambda) P_A(n_\lambda, t_\lambda) \text{ όπου: } P_A(n_0, t_0) = \delta_{n_0, N} \quad (10a)$$

Στη 10α θέτω: $\kappa \rightarrow \kappa + 1$, $\lambda \rightarrow \kappa$...και λαμβάνω τις ακόλουθες εξισώσεις:

$$P_A(n_{\kappa+1}, t_{\kappa+1}) = \sum_{n_\kappa=0}^N P_{1|1}(n_{\kappa+1}, t_{\kappa+1} | n_\kappa, t_\kappa) P_A(n_\kappa, t_\kappa)$$

$$P_A(n_{\kappa+1}, t_\kappa + Dt) = \sum_{n_\kappa=0}^N P_{1|1}(n_{\kappa+1}, t_\kappa + Dt | n_\kappa, t_\kappa) P_A(n_\kappa, t_\kappa) \quad (10\beta)$$

Στο μοντέλο των τυχαίων διασπάσεων η πιθανότητα μετάβασης $P_{1|1}(n_{\kappa+1}, t_\kappa + Dt | n_\kappa, t_\kappa)$ είναι ανεξάρτητη της χρονικής στιγμής t_κ . Εξαρτάται μόνον από το μήκος Dt του θεωρούμενου απειροστού χρονικού διαστήματος $[t_\kappa, t_\kappa + Dt)$. Απλοποιώ το φορμαλισμό, γράφοντας⁽¹⁾:

$$P_{1|1}(n_{\kappa+1}, t_{\kappa+1} | n_\kappa, t_\kappa) \equiv T_{Dt}(n_{\kappa+1} | n_\kappa) \quad (10\gamma)$$

Υπολογίζω την πιθανότητα μετάβασης $T_{Dt}(n_{\kappa+1} | n_\kappa)$ στο πλαίσιο του μοντέλου των τυχαίων διασπάσεων:

Για $wDt \ll 1$, η πιθανότητα ένα κελί να παραμένει στην κατάσταση A που ήταν τη στιγμή t_κ , είναι κοντά στο 1. Επομένως, η πιθανότητα μετάβασης του συστήματος από την κατάσταση n_κ που

βρισκόταν τη στιγμή t_k στην κατάσταση $n_{k+1} = n_k$ τη στιγμή t_{k+1} σε προσέγγιση 1ης τάξης ως προς το Dt , υπολογίζεται από την αναλυτική έκφραση:

$$n_{k+1} = n_k \Rightarrow T_{Dt}(n_{k+1} | n_k) = \delta(n_{k+1}, n_k)(1 - Dt a(n_k)) \quad (11)$$

$$\dots \text{όπου: } \delta(n_{k+1}, n_k) = \begin{cases} 1 & \text{για } n_{k+1} = n_k \\ 0 & \text{για } n_{k+1} \neq n_k \end{cases}$$

Η πιθανότητα μετάβασης ενός κελιού από την κατάσταση A στην B στο χρονικό διάστημα $[t_k, t_k + Dt)$ είναι ίση με wDt . Η μετάβαση από την κατάσταση B στην A δεν επιτρέπεται: η πιθανότητα μετάβασης από τη B στην A είναι πάντα ίση με μηδέν. Επομένως, η ακολουθία των τιμών της στοχαστικής διαδικασίας $N_A(t_k)$ σε κάθε υλοποίηση του μοντέλου μειώνεται:

$$n_{k+1} \leq n_k \text{ για } k = 0, 1, \dots$$

Ως εκ τούτου, αληθεύουν οι ακόλουθες σχέσεις:

$$a(n_k) = wn_k \quad (11\alpha)$$

$$n_{k+1} > n_k \Rightarrow T_{Dt}(n_{k+1} | n_k) = 0 \quad (11\beta)$$

$$n_{k+1} < n_k \Rightarrow T_{Dt}(n_{k+1} | n_k) = DtW(n_{k+1}, n_k)$$

Οι ποσότητες $W(n_{k+1}, n_k)$ ονομάζονται "πιθανότητες μετάβασης ανά μονάδα χρόνου", και ικανοποιούν τις συνθήκες (constrains):

$$W(n, m) \geq 0 \text{ και } \{W(n, m) = 0 \text{ για } n \geq m\}$$

Η αναλυτική έκφραση της πιθανότητας μετάβασης γράφεται:

$$T_{Dt}(n_{k+1} | n_k) = \delta(n_{k+1}, n_k)(1 - Dt wn_k) + DtW(n_{k+1}, n_k) \quad (11\gamma)$$

Από την 11γ και την ταυτότητα:

$$\sum_{n_{k+1}=0}^N T_{Dt}(n_{k+1} | n_k) = 1$$

...προκύπτουν οι σχέσεις:

$$\sum_{n_{k+1}=0}^N T_{Dt}(n_{k+1} | n_k) = 1 \Rightarrow \sum_{n_{k+1}=0}^{n_k} (\delta(n_{k+1}, n_k)(1 - Dt wn_k) + DtW(n_{k+1}, n_k)) = 1 \Rightarrow$$

$$wn_k = \sum_{n_{k+1}=0}^{n_k-1} W(n_{k+1}, n_k) \quad (11\delta)$$

Η πιθανότητα μετάβασης $T_{Dt}(n_{k+1} | n_k)$ μπορεί να υπολογιστεί συναρτήσει της πιθανότητας μετάβασης wDt κάθε κελιού από την A στη B , για διάφορες τιμές του n_{k+1} . Έτσι, για $n_{k+1} = n_k - 1$ ισχύει:

$$T_{Dt}(n_k - 1 | n_k) = n_k Dtw (1 - Dtw)^{n_k-1} \approx n_k Dtw + O(Dt), \lim_{Dt \rightarrow 0} \frac{O(Dt)}{Dt} = 0$$

...για: $n_{k+1} = n_k - 2$:

$$T_{Dt}(n_k - 2 | n_k) = \frac{n_k!}{(n_k - 2)!2!} (Dtw)^2 (1 - Dtw)^{n_k-2} \approx \frac{n_k!}{(n_k - 2)!2!} (Dtw)^2 + O(Dt^2), \lim_{Dt \rightarrow 0} \frac{O(Dt^2)}{Dt^2} = 0$$

...

Για $wDt \ll 1$, συμπεραίνω ότι ο κυρίαρχος όρος, σε προσέγγιση 1ης τάξης ως προς Dt , είναι ο $T_{Dt}(n_k - 1 | n_k)$, και η 11γ λαμβάνει τη μορφή:

$$T_{Dt}(n_{k+1} | n_k) = \delta(n_{k+1}, n_k - 1) T_{Dt}(n_k - 1 | n_k) = Dt \delta(n_{k+1}, n_k - 1) W(n_k - 1, n_k) \quad (11\epsilon)$$

Από τις 11ε and 11δ, συνεπάγεται ότι:

$$W(n_{k+1}, n_k) = \delta(n_{k+1}, n_k - 1) W(n_k - 1, n_k) + O(Dt), \lim_{Dt \rightarrow 0} \frac{O(Dt)}{Dt} = 0$$

$$wn_k = \sum_{n_{k+1}=0}^{n_k-1} W(n_{k+1}, n_k) \approx \sum_{n_{k+1}=0}^{n_k-1} \delta(n_{k+1}, n_k - 1) W(n_k - 1, n_k) = W(n_k - 1, n_k) \quad (11\zeta)$$

$$W(n_{k+1}, n_k) = \delta(n_{k+1}, n_k - 1) W(n_k - 1, n_k) = \delta(n_{k+1}, n_k - 1) wn_k \quad (11\eta)$$

Τελικά, διατηρώντας όρους μέχρι και πρώτης τάξης ως προς Dt , καταλήγω στην εξίσωση:

$$T_{Dt}(n_{k+1} | n_k) = \delta(n_{k+1}, n_k)(1 - Dtw n_k) + Dt \delta(n_{k+1}, n_k - 1) wn_k \quad (12)$$

Από τις 10β, 10γ και 12 διαμορφώνω την εξίσωση master που περιγράφει την ανέλιξη του συστήματος των κελιών στο πλαίσιο του μοντέλου των τυχαίων διασπάσεων:

$$P_A(n, t_k + Dt) = \sum_{n_k=0}^N T_{Dt}(n | n_k) P_A(n_k, t_k) = \sum_{n_k=0}^n (\delta(n, n_k) (1 - Dtw n_k) + Dt \delta(n, n_k - 1) w n_k) P_A(n_k, t_k) =$$

$$= ((1 - Dtw n) P_A(n, t_k) + Dtw (n + 1) P_A(n + 1, t_k)) \Rightarrow$$

$$P_A(n, t_k + Dt) - P_A(n, t_k) = Dtw (-n P_A(n, t_k) + (n + 1) P_A(n + 1, t_k)) \quad (13)$$

$$\frac{dP_A(n, t)}{dt} = w (-n P_A(n, t) + (n + 1) P_A(n + 1, t)) \quad (14)$$

Η υπό συνθήκη πιθανότητα $P_A(n, t) \equiv P_{11}(n, t | N, 0)$ είναι λύση της εξίσωσης master 14, κάτω από τον περιορισμό:

$$P_A(N + 1, t) = 0 \quad (14\alpha)$$

...και αρχική συνθήκη:

$$P_A(n, 0) = P_{11}(n, 0 | N, 0) = \delta_{n,N} \quad (14\beta)$$

Παρατηρήσεις:

A) Χρησιμοποιώντας τη 14, μπορώ να υπολογίσω την μέση τιμή της στοχαστικής διαδικασίας $N_A(t)$, ως συνάρτηση του χρόνου, χωρίς να επιλύσω τη διαφορική εξίσωση:

$$\langle N_A(t) \rangle = \sum_{n=0}^N n P_A(n, t) \Rightarrow \frac{d}{dt} \langle N_A(t) \rangle = \sum_{n=0}^N n \frac{dP_A(n, t)}{dt} = - \sum_{n=0}^N w n^2 P_A(n, t) + \sum_{n=1}^{N-1} w n (n + 1) P_A(n + 1, t) =$$

$$= - \sum_{n=0}^N w n^2 P_A(n, t) + \sum_{k=1}^N w (k - 1) k P_A(k, t) = -w \sum_{k=1}^N k P_A(k, t) = -w \langle N_A(t) \rangle \Rightarrow$$

$$\langle N_A(t) \rangle = N e^{-wt} \quad (15)$$

...που, όπως αναμένετο, είναι ίδια με τη 2.

B) Σύμφωνα με την παράγραφο 1, η συνάρτηση:

$$P_A(n, t) = \binom{n_0}{n} e^{-wnt} (1 - e^{-wt})^{n_0 - n} \quad (16)$$

...πρέπει να είναι λύση της διαφορικής εξίσωσης 14. Ελέγχω την εγκυρότητα αυτής της πρόβλεψης:

$$(16) \Rightarrow \frac{dP_A(n, t)}{dt} = w \left(-n P_A(n, t) + \binom{n_0}{n} (n_0 - n) e^{-w(n+1)t} (1 - e^{-wt})^{n_0 - (n+1)} \right) =$$

$$= w \left(-n P_A(n, t) + \binom{n_0}{n+1} \frac{n+1}{n_0 - n} (n_0 - n) e^{-w(n+1)t} (1 - e^{-wt})^{n_0 - (n+1)} \right) =$$

$$= w (-n P_A(n, t) + (n + 1) P_A(n + 1, t)) \quad \text{ΟΕΔ}$$

4. Παραγωγή μιας συνάρτησης Lyapunov που αντιστοιχεί στην εξίσωση master του συστήματος - Το σύστημα συγκλίνει στην κατάσταση ισορροπίας του ανεξάρτητα από τη μορφή της αρχικής του κατάστασης

Σύμφωνα με τη 14, η κατανομή ισορροπίας του συστήματος (εάν υπάρχει), πρέπει να ικανοποιεί την αναγκαία και ικανή συνθήκη^(1,2,3):

$$n P_{eq}(n) = (n + 1) P_{eq}(n + 1) \quad (17)$$

Από τη 17 προκύπτουν οι ακόλουθες ισότητες:

$$0 = P_{eq}(1) \rightarrow P_{eq}(1) = (1 + 1) P_{eq}(2) \Rightarrow P_{eq}(2) = 0 \rightarrow \dots$$

$$(N - 1) P_{eq}(N - 1) = N P_{eq}(N) \Rightarrow P_{eq}(N) = 0 \quad (17\alpha)$$

$$N P_{eq}(N) = (N + 1) P_{eq}(N + 1) \Rightarrow P_{eq}(N + 1) = 0$$

Από τις ισότητες 17α έπεται ότι η πυκνότητα πιθανότητας $P_{eq}(n)$ (που εκφράζει την πιθανότητα το n-κελί να είναι στην κατάσταση A στην κατάσταση ισορροπίας) ισούται με μηδέν για κάθε

$n=1,2,\dots,N$. Για $n=0$ ισχύει: $P_{eq}(0) = 1$ Αυτό είναι ένα εύλογο συμπέρασμα, δεδομένου ότι μόνο μεταβάσεις από την κατάσταση A στη B είναι επιτρεπτές, αλλά όχι το αντίθετο.

Υπάρχει συνάρτηση Lyapunov που αντιστοιχεί στο δυναμικό σύστημα 14, από την οποία μπορεί να φανεί ότι το σύστημα των κελιών συγκλίνει στην κατάσταση ισορροπίας του; Δηλαδή ότι ισχύει: $\lim_{t \rightarrow \infty} P_A(n, t) = P_{eq}(n)$

Ορίζω το συναρτησοειδές:

$$H[P_A(n, t)] = \sum_{n=0}^N n P_A(n, t) \quad (18)$$

Θα δείξω ότι το H έχει όλες τις ιδιότητες μιας συνάρτησης Lyapunov που αντιστοιχεί στο δυναμικό σύστημα 14 ^(1,2,3).

α) Θέτω $y = (y_0, y_1, \dots, y_N)$ όπου: $y_n = P_A(n, t)$

$$(18) \Rightarrow H[P_A(n, t)] \equiv H[y] = \sum_{n=0}^N n y_n$$

Κάθε y_n λαμβάνει τιμές στο διάστημα $[0,1]$. Επομένως, η μεταβλητή y λαμβάνει τιμές στο υποσύνολο $[0,1]^{N+1}$ του R^{N+1} :

$$[0,1]^{N+1} \equiv \underbrace{[0,1] \otimes [0,1] \otimes \dots \otimes [0,1]}_{N+1}$$

Δείχνω ότι $[0,1]^{N+1}$ είναι ένα συμπαγές (compact) σύνολο.

Ένα υποσύνολο A του R^{N+1} λέγεται συμπαγές τότε και μόνο αν είναι κλειστό και φραγμένο.

Το A είναι φραγμένο τότε και μόνο αν υπάρχει θετικός αριθμός b ώστε να ισχύει $|y_n| < b$ για κάθε $y = (y_0, y_1, \dots, y_N) \in A$ και κάθε $n=0,1,\dots,N$ ⁽⁵⁾.

Στο μοντέλο μας, $A = [0,1]^{N+1}$ άρα, αληθεύει ότι: $y \in A \Rightarrow |y_n| \leq 1$ Επομένως το σύνολο $[0,1]^{N+1}$ είναι φραγμένο.

Το A ορίζεται ως "κλειστό" τότε και μόνο αν περιέχει όλα τα οριακά του σημεία ⁽⁵⁾. Με άλλα λόγια, για κάθε ακολουθία $y^k = (y_0^k, y_1^k, \dots, y_N^k) \in A$, $k = 0,1,2,\dots$ που συγκλίνει στο σημείο $y_\infty \in R^{N+1}$ ισχύει: $y_\infty \in A$ ⁽⁵⁾

Έστω $y^k = (y_0^k, y_1^k, \dots, y_N^k)$, $k = 0,1,2,\dots$ ακολουθία σημείων του $[0,1]^{N+1}$ που συγκλίνει στο σημείο $y_\infty \in R^{N+1}$ Θα δείξω ότι $y_\infty \in [0,1]^{N+1}$:

Έστω $y_\infty = (\bar{y}_0, \bar{y}_1, \dots, \bar{y}_N)$ όπου: $\lim_{k \rightarrow \infty} y_n^k = \bar{y}_n$, $n = 0,1,\dots,N$

Κάθε ακολουθία y_n^k περιέχεται στο συμπαγές διάστημα $[0,1]$. Επομένως, το όριο της \bar{y}_n είναι επίσης σημείο του $[0,1]$. Συμπεραίνω ότι ισχύει: $y_\infty \in [0,1]^{N+1}$ ΟΕΔ

Το πεδίο ορισμού $[0,1]^{N+1}$ του συναρτησοειδούς H είναι ένα συμπαγές υποσύνολο του R^{N+1} .

Επιπλέον, από την αναλυτική έκφραση $H[y] = \sum_{n=0}^N n y_n$ συνεπάγεται ότι το H είναι συνεχής συνάρτηση του y . Αλλά είναι γνωστό από την Ανάλυση ⁽⁵⁾ ότι η εικόνα ενός συμπαγούς συνόλου μέσω μιας συνεχούς συνάρτησης είναι συμπαγές σύνολο. Συμπεραίνω ότι το σύνολο $H([0,1]^{N+1})$ είναι ένα συμπαγές υποσύνολο των πραγματικών αριθμών.

Ένα κάτω φράγμα του $H([0,1]^{N+1})$ προσδιορίζεται από τη συνθήκη:

$$H[y] = \sum_{n=0}^N n y_n \geq 0 \text{ για κάθε } y_n \in [0,1]$$

Ένα άνω φράγμα του $H([0,1]^{N+1})$ προσδιορίζεται από τη συνθήκη:

$$H[y] = \sum_{n=0}^N n y_n \leq \sum_{n=0}^N n = \frac{N(N+1)}{2} \text{ για κάθε } y_n \in [0,1]$$

β) Η συνάρτηση $H(t) = H[P_A(n, t)]$ είναι μια φθίνουσα συνάρτηση του χρόνου:

$$\frac{dH(t)}{dt} = \frac{d}{dt} H[P_A(n, t)] = \sum_{n=0}^N n \frac{dP_A(n, t)}{dt} = \sum_{n=0}^N n w (-nP_A(n, t) + (n+1)P_A(n+1, t)) =$$

$$\begin{aligned}
&= -w \sum_{n=0}^N n^2 P_A(n, t) + w \sum_{n=0}^{N-1} n(n+1) P_A(n+1, t) \Rightarrow \\
&\frac{d}{dt} H[P_A(n, t)] = -w \sum_{n=0}^N n^2 P_A(n, t) + w \sum_{k=0}^N k^2 P_A(k, t) - w \sum_{k=0}^N k P_A(k, t) \Rightarrow \\
&\frac{d}{dt} H[P_A(n, t)] = -w \sum_{k=0}^N k P_A(k, t) < 0 \Rightarrow \frac{d}{dt} H(t) = -wH(t) \leq 0 \quad (19)
\end{aligned}$$

Από τη σχέση 19 συνεπάγεται ότι η ακολουθία:

$$H(t_{\kappa+1}) = H(t_{\kappa}) - wH(t_{\kappa}), \text{ όπου: } H(t_{\kappa}) = H[P_A(n, t_{\kappa})], t_{\kappa+1} = t_{\kappa} + Dt \quad (19a)$$

...είναι φθίνουσα και φραγμένη και επομένως, συγκλίνει⁽⁵⁾. Από τη 19α προκύπτει ότι το όριο της είναι ίσο με το μηδέν:

$$\lim_{\kappa \rightarrow \infty} H(t_{\kappa}) = \lim_{\kappa \rightarrow \infty} H[P_A(n, t_{\kappa})] = 0$$

Ώστε:

$$\left. \begin{aligned}
\lim_{\kappa \rightarrow \infty} H[P_A(n, t_{\kappa})] &= \sum_{n=0}^N n \lim_{\kappa \rightarrow \infty} P_A(n, t_{\kappa}) = 0 \\
P_A(n, t_{\kappa}) &\in [0, 1]
\end{aligned} \right\} \Rightarrow \lim_{\kappa \rightarrow \infty} P_A(n, t_{\kappa}) = 0 \text{ για } n \neq 0, n = 1, 2, \dots, N$$

$$\dots \text{ και: } \sum_{n=0}^N P_A(n, t_{\kappa}) = 1 \Rightarrow \sum_{n=0}^N \lim_{\kappa \rightarrow \infty} P_A(n, t_{\kappa}) = 1 \Rightarrow \lim_{\kappa \rightarrow \infty} P_A(0, t_{\kappa}) = 1$$

$$\lim_{\kappa \rightarrow \infty} P_A(n, t_{\kappa}) = \delta_{n0} = P_{eq}(n) \quad (20)$$

Συμπέρασμα: Ανεξάρτητα από την αρχική του κατάσταση, το δυναμικό σύστημα συγκλίνει στην κατάσταση ισορροπίας του, η οποία στην περίπτωση του μοντέλου των τυχαίων διασπάσεων δίνεται από την κατανομή πιθανότητας 20.

Βιβλιογραφία

1. N.G. Van Kampen. Stochastic Processes in Physics and Chemistry. North-Holland Personal Library 1992
2. H. Haken. Synergetics, an Introduction. Springer-Verlag 3d edition 1983
3. E.R. Scheinerman. Invitation to Dynamical Systems. Dover publications 2012
4. [Boltzmann H-theorem: Approaching Equilibrium Model \(compadre.org\)](http://compadre.org)
5. Lynn H. Loomis and Shlomo Sternberg. Advanced Calculus. Jones and Bartlett Publishers Inc. Revised Edition 1990