

Pal

I.

### Bevezetés

A sok szabadsági fokú rendszerekben lezajló időfüggő jelenségek vizsgálatakor gyakran alkalmazunk stochasztikus módszereket. Ez azt jelenti, hogy leválasztunk néhány kiszemelt változót, miközben a többi szabadsági fokot háttérnek /zajnak/ tekintjük, melynek dinamikáját nem követjük pontosan, hanem statisztikus tulajdonságait adjuk meg. Ezért a kiválasztott szabadsági fokokra vonatkozóan is csak valószínűségi kijelentéseket tehetünk. Alapvető szerepet játszik az a föltevés, hogy a kiszemelt szabadsági fokok nem befolyásolják a háttér viselkedését. Az ilyen jellegű problémák matematikai leírása az ún. véletlen /stochasztikus/ folyamatok segítségével történik.

A stochasztikus megközelítés általában olyan rendszerekben alkalmazható, melyekben a karakterisztikus idők élesen szétválnak. Ilyenkor rendszerint a lassu változók viselkedése az érdekes, s a gyorsan változó szabadsági fokokat tekintjük háttérnek. A Brown-mozgás esetén például a folyadék-részecskék ütközései között eltelt átlagos idő jóval kisebb, mint a kolloid szemcse átlagos négyzetes elmozdulásának karakterisztikus ideje. Ezért kezelhetjük zajként a folyadék-részecskékkel való ütközések hatását.

Az utóbbi időben a stochasztikus leírásmód jelentősége megnövekedett. Igen jól használható módszert nyújt a nem-li-

## II

neáris irreverzibilis folyamatok leírására. Különösen érdekesek az instabilitási pontok közelében tapasztalható jelenségek. Az ilyen, ún. fázisátalakulás-szerű jelenségek időfüggő tulajdonságainak leírására a determinisztikus egyenletek nem lehetnek elegendők, hiszen a fluktuációk szerepe ilyenkor rendkívül jelentős.

A stochasztikus folyamatok egyre szélesebb körű alkalmazása indokolta, hogy az Eötvös Loránd Fizikai Társulat Statisztikus Fizikai Szakcsoportja 1977. évi Őszi Iskoláját erről a témakörrel rendezte. Az ott elhangzott előadások átdolgozott változatai alkották a gerincét a Fizikus Diákkörök 1978. évi, XIII. Nyári Iskolájának. Kiadványunk a Nyári Iskola anyagát tartalmazza kisebb módosításokkal. Az első rész a véletlen folyamatok általános tulajdonságaival foglalkozik, a második rész pedig az alkalmazásokról kíván /távolról sem teljes/ áttekintést nyújtani. Az ajánlott irodalom megadásával néhány további, itt nem érintett témakörre szeretnénk felhívni a figyelmet. A kidolgozott példák és feladatok az új fogalmakkal és módszerekkel való könnyebb ismerkedést segítik.

Végül köszönetet mondunk a Nyári Iskola előadóinak, hogy előadásuk anyagát írásos formában rögzítették, a Nyári Iskola gyakorlatvezetőinek, Kürti Jenőnek és Herényi Leventének a példák és feladatok összeállításáért, Hársné Ta-

## III

kács Ilonának és Sulyok Attilának a kézirat gépeléséért ill. a képletek beírásáért. Köszönet illeti az Eötvös Fizikai Társulatot és az ELTE Dékáni Hivatalát azért az anyagi támogatásért, mellyel lehetővé tette a kiadvány megjelentetését.

Budapest, 1979. július.

ELTE Fizikus Diákkör

Tartalomjegyzék

## I. Általános rész

1. Markov-folyamatok /Sasvári László/	
1.1 Véletlen változók, véletlen folyamatok	1
1.2 Markov-folyamatok	7
1.3 Az infinitezimális operátor és a Kolmogorov-egyenletek	11
1.4 A Markov-folyamatok néhány típusa	15
2. Diszkrét állapotterben lezajló folyamatok /Tél Tamás/	
2.1 A master egyenlet szemléletes származtatása	20
2.2 A master egyenlet megoldásainak tulajdonságai	23
2.3 Stacionárius megoldás, a részletes egyensúly	25
2.4 Az általános megoldás	29
2.5 A születési-kihalási folyamat	35
2.6 Korlátozott folyamatok	44
2.7 Az első elérés ideje	49
2.8 A folytonos határeset	54
3. Diffúziós folyamatok /Sasvári László/	
3.1 A Fokker-Planck-egyenlet	57
3.2 A növekmények eloszlása	60
3.3 A Wiener-folyamat	62
3.4 Az Ornstein-Uhlenbeck-folyamat	64
3.5 A fehér zaj és a Langevin-egyenlet	69
3.6 Az Ito-féle stochasztikus differenciál-egyenlet	76
3.7 A Stratonovich-SDE és a Langevin-egyenlet regularizálása	83

3.8 A stacionárius eloszlás és a stacionárius áramsűrűség	90
3.9 Brown-mozgás	93
4. Zajmérés /Gesztli Tamás/	
4.1 A zajmérés sémája, a Wiener-Hincsin-tétel	99
4.2 Egyensúlyi zaj	104
4.3 Modulációs zaj	106
II. Alkalmazások	
5. A nehézion fizika újabb eredményei /Boschán Péter/	
5.1 Bevezetés	113
5.2 Nehézion folyamatok általános jellemzése	115
5.3 Mélyen rugalmatlan ütközések	121
5.4 Elméleti megfontolások	126
6. Neutronfluktuációk atomreaktorokban /Pázsit Imre/	139
7. A kinetikus Ising-modell és a kristálynövekedés stochasztikus modellje /Hegyi György/	
7.1 Bevezetés	152
7.2 Az Ising-modell	153
7.3 Az egydimenziós kinetikus Ising-modell	154
7.4 A kinetikus Ising-modell mágneses térben	162
7.5 A három-dimenziós kinetikus Ising-modell közelítő megoldása	164
7.6 A kristálynövekedés kinetikája	167
8. Kritikus dinamika /Sasvári László/	
8.1 Kritikus jelenségek	179
8.2 A konvencionális elmélet	181
8.3 Tul a konvencionális elméleten	187

## VI

9. Kémiai reakciók stochasztikus leírása /Tél Tamás/	
9.1 Bevezetés	190
9.2 Nem-lineáris reakciók	193
9.3 A diffúzió figyelembevétele	199
9.4 Enzim kinetika	204
10. Stochasztikus modellek a biológiában /Tél Tamás/	
10.1 A DNS szerkezetének megváltozása	210
10.2 Makromolekulák bioszintézise	220
10.3 Bakteriofág fertőzés	225
10.4 Az idegsejt ingerületvezetése	229
Függelék	
A Boltzmann-egyenlet	241
A feladatok megoldása	245
Ajánlott irodalom	273

## I. ÁLTALÁNOS RÉSZ

## 1. Markov-folyamatok

### 1.1 Véletlen változók, véletlen folyamatok

Egy véletlen változót lehetséges értékeinek halmaza és az ezen definiált valószínűségi eloszlás határoz meg. A fizikai alkalmazásoknak megfelelően mi a következő esetekkel fogunk foglalkozni:

A./ A véletlen változó lehetséges értékei a természetes számok:  $1, 2, \dots, n, \dots, m, \dots$ . Annak valószínűségét, hogy a véletlen változó értéke  $n$  legyen, jelölje  $P_n$ . A  $\{P_n\}$  számsorozat valószínűség eloszlást határoz meg, ha  $P_n \geq 0$  és  $\sum_{n=1}^{\infty} P_n = 1$  /normált eloszlás/.

B./ A véletlen változó lehetséges értékei a valós számok:  $-\infty < x < \infty$ . Olyan valószínűség eloszlásokkal fogunk foglalkozni, amelyeknek van sűrűségfüggvényük. Ezt  $P(x)$ -szal jelöljük. Annak valószínűsége, hogy a véletlen változó értéke az  $(a, b)$  intervallumba essen:

$$\int_a^b P(x) dx .$$

Egy  $P(x)$  függvény valószínűségi eloszlás sűrűségfüggvénye, ha

$P(x) \geq 0$  és

$$\int_{-\infty}^{+\infty} P(x) dx = 1$$

/normált eloszlás/.

A két eset általános tárgyalása sok tekintetben párhuzamosan történhet. Ezért a felesleges ismétlések elkerülése vé-

gett ebben a fejezetben csak a B./ esettel fogunk foglalkozni. Az A./ esetre vonatkozó összefüggéseket, a gondolatmenet megismétlése nélkül, formálisan megkaphatjuk, ha a  $P(x)$  sűrűségfüggvényt  $P_n$  -re, az integrálást pedig összegezésre cseréljük ( $\int dx \rightarrow \sum_n$ ). Hasonlóképpen egyszerűen elvégezhető az általánosítás azokra az esetekre, amikor a véletlen változó értékészletét vektorok alkotják, melyek komponensei egész ill. valós számok.

Legyen  $I$  egy indexhalmaz és tekintsük a véletlen változók egy  $\{x(t); t \in I\}$  családját. Ha  $I$  véges, akkor tulajdonképpen egy vektor-értékkészletű véletlen változóval van dolgunk. Véletlen sorozatnak /láncnak/ nevezzük azt az esetet, amikor  $I$  megszámlálható. Véletlen /stochasztikus/ folyamat-ról beszélünk akkor, ha  $I$  a számegeyes, és véletlen /stochasztikus/ mezőről, ha  $I$  a  $d$ -dimenziós euklideszi tér ( $d > 1$ ).

Most a véletlen folyamatokkal foglalkozunk. A  $t$  paramétert a leggyakoribb alkalmazásoknak megfelelően időnek nevezzük. A folyamat rögzített  $t$  mellett valós értékű véletlen változó. A folyamat egésze úgy is fölfogható, mint egyetlen véletlen "változó", amelynek értékészlete a valós függvények halmaza. E függvények a folyamat trajektóriái /realizációi/.

A véletlen folyamatot értékészlete mellett a véges dimenziós valószínűségi eloszlások sűrűségfüggvényeinek rendszere határozza meg:

$$\begin{aligned} P_1(x, t) & , \\ P_2(x_1, t_1; x_2, t_2) & , \\ \vdots & \\ P_n(x_1, t_1; x_2, t_2; \dots x_n, t_n) & , \end{aligned} \quad /1.1/$$

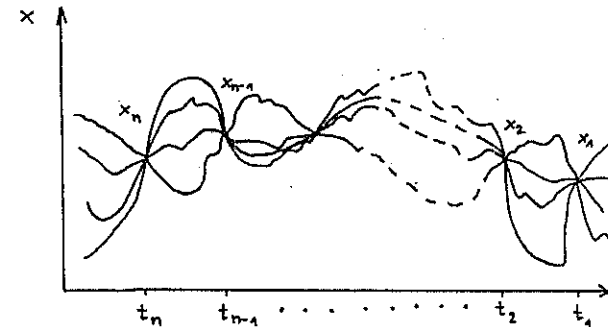
Az általánosság megszorítása nélkül kiköthetjük, hogy

$$t_1 > t_2 > t_3 \dots > t_n .$$

A  $P_n$  véges dimenziós sűrűségfüggvény jelentése a következő:

$$P_n(x_1, t_1; x_2, t_2; \dots x_n, t_n) dx_1 dx_2 \dots dx_n$$

adja meg annak valószínűségét, hogy a véletlen folyamat trajektóriájának értéke a  $t_1, t_2, \dots t_n$  időkből az  $(x_1, x_1 + dx_1), (x_2, x_2 + dx_2), \dots (x_n, x_n + dx_n)$  intervallumokba essen, vagy lazán fogalmazva, annak valószínűségét, hogy a trajektória az  $(x, t)$  síkon az  $(x_1, t_1), (x_2, t_2) \dots (x_n, t_n)$  pontokon átmenjen.



A véges dimenziós valószínűségi sűrűségfüggvények normaltak,

$$\int P_n(x_1, t_1; \dots x_n, t_n) dx_1 \dots dx_n = 1 \quad (n \geq 1) \quad /1.2/$$

és nyilvánvalóan ki kell elégíteniük az un. kompatibilitási feltételt:

$$\int P_n(\dots; x_i, t_i; \dots) dx_i = P_{n-1}(\dots; x_{i-1}, t_{i-1}; x_{i+1}, t_{i+1}; \dots) /1.3/$$

$$(n > 1, n \geq i \geq 1).$$

Az  $x(t)$  véletlen folyamat és az  $f(u_1, u_2, \dots u_n)$   $n$ -változós

függvény segítségével képzett  $f(x(t_1), \dots, x(t_n))$  véletlen változó várható értékének nevezzük az

$$\langle f \rangle = \int f(x_1, \dots, x_n) P_n(x_1, t_1; \dots, x_n, t_n) dx_1 \dots dx_n \quad /1.4/$$

mennyiséget.

A véletlen folyamat karakterisztikus függvényeit

$$\Phi_n(y_1, t_1; \dots, y_n, t_n) \equiv \left\langle e^{i \sum_{j=1}^n y_j x(t_j)} \right\rangle \quad /1.5/$$

definiálja.  $\Phi_n$  a  $P_n$  valószínűségi sűrűség Fourier-transzformáltja. A karakterisztikus függvények megadása így egyenértékű a valószínűségi sűrűségfüggvények megadásával. /1.2/ és /1.3/ felhasználásával belátható, hogy

$$\Phi_n(y_1, t_1; \dots, y_n, t_n) \Big|_{y_1=y_2=\dots=y_n=0} = 1 \quad /1.6/$$

$$\Phi_n(\dots; y_i, t_i; \dots) \Big|_{y_i=0} = \Phi_{n-1}(\dots; y_{i-1}, t_{i-1}; y_{i+1}, t_{i+1}; \dots) \quad /1.7/$$

A  $\Phi_n$  karakterisztikus függvényeket momentum-generátorfüggvényeknek is szokás nevezni, mivel deriváltjaiknak origóbeli értékei megadják a folyamat momentumait:

$$m_{l_1, l_2, \dots, l_n}(t_1, t_2, \dots, t_n) \equiv \langle x^{l_1}(t_1) x^{l_2}(t_2) \dots x^{l_n}(t_n) \rangle = (-i)^{l_1+l_2+\dots+l_n} \frac{\partial^{l_1+l_2+\dots+l_n} \Phi_n}{(\partial y_1)^{l_1} (\partial y_2)^{l_2} \dots (\partial y_n)^{l_n}} \quad /1.8/$$

A véletlen folyamat kumulánsait a

$$k_{l_1, l_2, \dots, l_n}(t_1, t_2, \dots, t_n) \equiv (-i)^{l_1+l_2+\dots+l_n} \frac{\partial^{l_1+l_2+\dots+l_n} \ln \Phi_n}{(\partial y_1)^{l_1} (\partial y_2)^{l_2} \dots (\partial y_n)^{l_n}} \quad /1.9/$$

egyenlettel definiáljuk. Az  $l_1+l_2+\dots+l_n$  számot a szóban forgó momentum vagy kumuláns rendjének nevezzük. Az /1.9/ egyenlet jobboldalán a differenciálásokat elvégezve és az /1.6/ egyenletet felhasználva a kumulánsokat momentumok segítségével fejezhetjük ki. Például:

$$k_{1,1}(t) = (-i) \frac{1}{\Phi_1} \frac{\partial \Phi_1}{\partial y_1} \Big|_{y_1=0} = m_1(t) = \langle x(t) \rangle \quad /1.10/$$

$$k_{1,1}(t_1, t_2) = (-i)^2 \left\{ \frac{1}{\Phi_2} \frac{\partial^2 \Phi_2}{\partial y_1 \partial y_2} - \frac{1}{\Phi_2^2} \frac{\partial \Phi_2}{\partial y_1} \frac{\partial \Phi_2}{\partial y_2} \right\} \Big|_{y_1=y_2=0} =$$

$$= m_{1,1}(t_1, t_2) - m_1(t_1) m_1(t_2) = \langle (x(t_1) - \langle x(t_1) \rangle) (x(t_2) - \langle x(t_2) \rangle) \rangle \quad /1.11/$$

Általában

$$k_{l_1, l_2, \dots, l_n} = m_{l_1, l_2, \dots, l_n} + \{ \text{alacsonyabb rendű momentumok szorzatai} \} \quad /1.12/$$

és fordítva,

$$m_{l_1, l_2, \dots, l_n} = k_{l_1, l_2, \dots, l_n} + \{ \text{alacsonyabb rendű kumulánsok szorzatai} \} \quad /1.13/$$

A  $k_{1,1}(t_1, t_2)$  másodrendű kumulánst kovarianciának vagy korrelációs függvénynek nevezzük. Ha  $k_{1,1}(t_1, t_2) = 0$ , akkor azt mondjuk, hogy a  $t_1$  és  $t_2$  időpillanatokban lejátszódó események között nincs korreláció.

Stacionárius folyamatnak nevezzük azt a folyamatot, amelynek valószínűségi sűrűségfüggvényei invariánsak az időbeli eltolással szemben, azaz tetszőleges  $\tau$  esetén

$$P_n(x_1, t_1; \dots; x_n, t_n) = P_n(x_1, t_1 + \tau; \dots; x_n, t_n + \tau) \quad /1.14/$$

A stacionárius folyamat egydimenziós sűrűségfüggvénye az időtől független, az egynél több időargumentumu sűrűségfüggvények, momentumok es kumulánsok pedig csak az időargumentumok különbségeitől függenek. Például:

$$k_{A_1}(t_1, t_2) = C(t_1 - t_2) \quad /1.15/$$

A  $C(t)$  korrelációs függvény

$$f(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega t} C(t) dt \quad /1.16/$$

Fourier-transzformáltja a stacionárius folyamat spektrális sűrűsége.

A véletlen folyamatok konstrukcióját megnehezíti, hogy a véges dimenziós sűrűségfüggvényeknek ki kell elégíteniük az /1.5/ kompatibilitási feltételt. Három konstrukciót fogunk bemutatni: a független, a Gauss- és a Markov-folyamatokat.

A független folyamatok esetében a különböző időben lejátszódó események egymástól függetlenek:

$$P_n(x_1, t_1; \dots; x_n, t_n) = \prod_{i=1}^n P_1(x_i, t_i) \quad /1.17/$$

Az így megadott sűrűségfüggvények a kompatibilitási feltételt nyilvánvalóan teljesítik.

Gauss-folyamatoknak nevezzük azokat a folyamatokat, amelyek kettőnél magasabb rendű kumulánsai azonosan eltűnnek. A Gauss-folyamatok esetében  $\ln \phi_n$  másodfoku polinom:

$$\ln \phi_n(y_1, t_1; \dots; y_n, t_n) = i \sum_{l=1}^n k_l(t_l) y_l - \frac{1}{2} \sum_{l, l'=1}^n k_{A_1}(t_l, t_{l'}) y_l y_{l'} \quad /1.18/$$

ahol —az/1.11/ egyenletnek megfelelően—

$$k_{A_1}(t_l, t_{l'}) \quad /1.19/$$

nem-negatív definit mátrix.

A valószínűségi sűrűségfüggvényt Fourier-transzformálással kapjuk meg:

$$P_n(x_1, t_1; \dots; x_n, t_n) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2} \sqrt{K}} e^{-\frac{1}{2} \sum_{l=1}^n K_{l,l'}^{-1}(x_l - k_l(t_l))(x_{l'} - k_{l'}(t_{l'}))} \quad /1.20/$$

ahol  $K_{l,l'}^{-1}$  a  $K_{l,l'} = k_{A_1}(t_l, t_{l'})$  mátrix inverze,  $K$  pedig a  $K_{l,l'}$  mátrix determinánsa.

### 1.2 Markov-folyamatok

A Markov-tulajdonság a klasszikus fizika kauzalitási elvének atvitele a stochasztikus folyamatokra. Azt jelenti, hogy a folyamat "jövője" független a "multjától", ha ismerjük a folyamat "jelenét". Azaz, ha ismerjük a folyamat értékét a  $t$ . időpontban /jelen/, akkor a folyamat korábbi ( $t < t_0$ ) viselkedéséről /mult/ szerzett értesüléseink nem befolyásolják a folyamat későbbi ( $t > t_0$ ) viselkedésére /jövő/ vonatkozó valószínűségi kijelentéseinket. Természetesen a "mult" és a "jövő" szerepe fölcserélhető, s így a Markov-tulajdonságot úgy is megfogalmazhatjuk, hogy a folyamat "multja" és "jövője" statisztikusan függetlenek, fölteve, hogy "jelenét" ismerjük.

A Markov-tulajdonsággal rendelkező folyamatokat nevezzük Markov-folyamatoknak.

Az előző fejezetben bemutatott független folyamatok szolgáltatják a legegyszerűbb példát a Markov-folyamatokra. A Gauss-folyamatok között is van olyan, amely egyben Markov-folyamat / l. 3. fejezet/



A Markov-tulajdonság formális definícióját a feltételes valószínűségek segítségével adhatjuk meg. annak valószínűsége, hogy a folyamat értéke a  $t_1$  időpillanatban  $x_1$  legyen, feltéve, hogy a korábbi  $t_2 > t_3 > \dots > t_n$  pillanatokban  $x_2, x_3, \dots, x_n$  volt,

$$P(x_1, t_1 | x_2, t_2, \dots, x_n, t_n) = \frac{P_n(x_1, t_1; x_2, t_2; \dots; x_n, t_n)}{P_{n-1}(x_2, t_2; \dots; x_n, t_n)} \quad /1.21/$$

Az /1.21/ kompatibilitási feltételből következik, hogy a feltételes valószínűségi eloszlás sűrűségfüggvénye normált:

$$\int P(x_1, t_1 | x_2, t_2, \dots, x_n, t_n) = 1. \quad /1.22/$$

A Markov-tulajdonság azt jelenti, hogy a folyamat /1.21/-ben definiált feltételes valószínűségei csak a legnagyobb időargumentumhoz tartozó feltételtől függenek, azaz

$$P(x_1, t_1 | x_2, t_2; \dots; x_n, t_n) = P(x_1, t_1 | x_2, t_2). \quad /1.23/$$

A  $P(x_1, t_1 | x_2, t_2)$  feltételes valószínűséget a Markov-folyamat átmeneti valószínűségének nevezzük.

A feltételes valószínűség definíciójából következik, hogy

$$P(x_1, t_1 | x_2, t_2) = \delta(x_1 - x_2). \quad /1.24/$$

Az átmeneti valószínűség és az egydimenziós valószínűségi eloszlás a Markov-folyamat véges dimenziós eloszlásainak teljes rendszerét meghatározzák, ugyanis /1.21/ értelmében

$$P_n(x_1, t_1; x_2, t_2; \dots; x_n, t_n) = P(x_1, t_1 | x_2, t_2) P_{n-1}(x_2, t_2; \dots; x_n, t_n), \quad /1.25/$$

és így

$$P_n(x_1, t_1; x_2, t_2; \dots; x_n, t_n) = P(x_1, t_1 | x_2, t_2) P(x_2, t_2 | x_3, t_3) \dots P(x_{n-1}, t_{n-1} | x_n, t_n) P_1(x_n, t_n). \quad /1.26/$$

Az /1.26/ kompatibilitási feltétel akkor és csak akkor teljesül, ha az átmeneti valószínűség kielégíti az ún. Chapman-Kolmogorov-egyenletet:

$$P(x_1, t_1 | x_3, t_3) = \int P(x_1, t_1 | x_2, t_2) P(x_2, t_2 | x_3, t_3) dx_2. \quad /1.27/$$

Ezt könnyen beláthatjuk, ha  $P_n$  /1.26/-ban megadott alakját az /1.26/ egyenletbe helyettesítjük. A Chapman-Kolmogorov-egyenlet igen szemléletesen fejezi ki azt, hogy egy Markov-folyamat esetében az egymást követő intervallumokban lejátszódó események egymástól függetlenek.

Ha az  $n=2$  esetben a /1.25/ egyenlet mindkét oldalát  $x_2$  szerint integráljuk, a kompatibilitási feltételt felhasználva és a változókat átjelölve azt kapjuk, hogy

$$P_1(x, t) = \int P(x, t | x', t') P_1(x', t') dx'. \quad /1.28/$$

Ha ismerjük a Markov-folyamat egydimenziós eloszlását a  $t'$  időpillanatban, akkor az átmeneti valószínűség segítségével bármely  $t > t'$  időpillanatban is kiszámíthatjuk. A  $[t_0, \infty)$  intervallumon definiált Markov-folyamatot tehát egyértelműen jellemzi a kezdeti és az átmeneti valószínűségi eloszlása.

A Chapman-Kolmogorov-egyenletet /1.28/-cal összehasonlítva láthatjuk, hogy az /1.28/ egyenletet az átmeneti valószínűség is kielégíti.

A Markov-folyamat homogén, ha átmeneti valószínűsége invariáns az időbeli eltolással szemben, azaz, ha az átmeneti valószínűség csak az időargumentumok különbségétől függ:

$$P(x, t | x^1) = P(x, t - t^1 | x^1) \quad /1.29/$$

A Chapman-Kolmogorov-egyenlet ekkor így írható:

$$P(x, t + s | x^1) = \int P(x, t | x^s) P(x^s, s | x^1) dx^s \quad /1.30/$$

A stacionárius Markov-folyamat egyben homogén is, és egydimenziós eloszlása időtől független megoldása az /1.28/ egyenletnek.

A  $P(x, t | x^1)$  átmeneti valószínűség ergodikus Markov-folyamatot határoz meg, ha az egydimenziós eloszlások (az /1.28/ egyenlet megoldásai)  $t \rightarrow \infty$  -re tetszőleges kezdeti eloszlás esetén ugyanahhoz az un. határeloszláshoz tartanak.

A  $P(x, t | x^1)$  átmeneti valószínűség akkor és csak akkor határoz meg ergodikus Markov-folyamatot, ha  $\lim_{t \rightarrow \infty} P(x, t | x^1)$  létezik és  $x^1$ -től független:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} P(x, t | x^1) = P^*(x) \quad /1.31/$$

Tegyük fel ugyanis, hogy az átmeneti valószínűség rendelkezik az /1.31/ egyenletben megadott tulajdonsággal. Az /1.28/ egyenletben a  $t \rightarrow \infty$  határátmenetet elvégezve azt kapjuk, hogy

$$\lim_{t \rightarrow \infty} P_1(x, t) = P^*(x) \int P_1(x^1, t) dx^1 = P^*(x) \quad /1.32/$$

a kezdeti eloszlástól függetlenül, tehát a Markov-folyamat ergodikus. Fordítva, ha a Markov-folyamat ergodikus, jelölje a határeloszlást  $P^*(x)$ . Az /1.28/ egyenlet  $P_1(x, 0) = \delta(x - x^1)$  kezdeti feltételt kielégítő megoldása

$$P_1(x, t) = P(x, t | x^1) \quad /1.33/$$

ezért az átmeneti valószínűség eleget tesz az /1.31/ feltételnek.

### 1.3 Az infinitezimális operátor és a Kolmogorov-egyenletek

Az /1.27/ Chapman-Kolmogorov-egyenlet többszöri alkalmazásával a  $P(x, t | x^1)$  átmeneti valószínűséget egyre rövidebb intervallumokra vonatkozó átmeneti valószínűségekre vezethetjük vissza. Ezért az várjuk, hogy a Markov-folyamat jellemzéséhez elegendő lesz, ha az infinitezimális időintervallumra vonatkozó átmeneti valószínűséget ismerjük.

Tekintsük a folytonos és korlátos függvények terét. Ez lineáris normált tér, az  $\|f\| = \sup |f|$  normával. Defináljuk a  $T_{t,t^1}$  operátorokat a következő módon:

$$T_{t,t^1} f(x) = \int f(x^1) P(x, t | x^1, t^1) dx^1 \quad , \quad (t^1 < t) \quad /1.34/$$

A  $T_{t,t^1}$  operátor az  $f(x)$  függvényhez hozzárendeli az  $f(x(t))$  véletlen változó feltételes várható értékét, az  $x(t^1) = x^1$  feltétel mellett. Ha az átmeneti valószínűség a feltétel folytonos függvénye, akkor a  $T_{t,t^1}$  operátorok a folytonos és korlátos függvények terét önmagára képezik le. A  $T_{t,t^1}$  operátorok lineáris, pozitív, kontrakciós operátorok.

(Pozitív:

$$T_{t,t^1} f(x) \geq 0 \quad , \text{ ha } f(x) \geq 0 \quad /1.35/$$

Kontrakciós:

$$\|T_{t,t^1} f\| = \sup \left| \int f(x^1) P(x, t | x^1, t^1) dx^1 \right| \leq \sup |f| \int P(x, t | x^1, t^1) dx^1 = \|f\| \quad /1.36/$$

A kontrakciós operátor egyben folytonos is.)

A  $T_{t,t}$  operátor az egységoperátor:

$$T_{t,t} = I \quad /1.37/$$

Bontsuk fel az átmeneti valószínűséget /1.34/-ben a Chapman-Kolmogorov-egyenlet segítségével. Ekkor

$$T_{t,t} f(x) = \int \{f(x') P(xt|x't') P(x't'|x't)\} dx' dx \quad (t' < t' < t), \quad /1.38/$$

amelyből leolvashatjuk a Chapman-Kolmogorov-egyenletnek a  $T_{t,t}$  operátorokkal felírt alakját:

$$T_{t,t} = T_{t,t'} T_{t',t} \quad (t' < t' < t) \quad /1.39/$$

A Markov-folyamat infinitezimális operátorainak nevezzük

az

$$A_t f = \lim_{s \rightarrow 0} \frac{1}{s} (T_{t,t+s} f - f) \quad /1.40/$$

összefüggéssel definiált  $A_t$  operátorokat. (Itt  $\lim$  a normában való konvergenciát /egyenletes konvergenciát / jelenti.)

/1.40/ értelmében, ha  $s \ll 1$ ,

$$T_{t,t+s} = I + A_t s + o(s) \quad /1.41/$$

Az infinitezimális operátorok segítségével a  $T_{t,t}$  operátorokat megntarozó differenciálegyenleteket vezethetünk le. Az /1.39/ egyenlet felhasználásával vegezzük el a következő átalakítást:

$$T_{t,t+s} - T_{t,t} = T_{t',t} (T_{t',t+s} - I) \quad /1.42/$$

Az egyenlet mindkét oldalát  $s$ -sel osztjuk, és végrehajtjuk az  $s \rightarrow 0$  határátmenetet:

$$\frac{d}{dt} T_{t,t} = T_{t,t} A_t \quad /1.43/$$

\* $o(s)$  olyan mennyiséget jelöl, amely  $s$ -sel osztva is 0-hoz tart, ha  $s \rightarrow 0$ .

Ez az un. direkt /"forward"/ Kolmogorov-egyenlet. A direkt /"forward"/ jelző itt arra utal, hogy a differenciálás az operátor nagyobbik időargumentumára vonatkozik.

/1.42/-höz hasonlóan kaphatjuk a következő összefüggést:

$$T_{t'+s,t} - T_{t',t} = (I - T_{t',t'+s}) T_{t',t} \quad /1.44/$$

Az egyenlet mindkét oldalát  $1/s$ -sel szorozva, majd elvégezve az  $s \rightarrow 0$  határátmenetet:

$$\frac{d}{dt'} T_{t',t} = -A_{t'} T_{t',t} \quad /1.45/$$

Ezt az egyenletet fordított /"backward"/ Kolmogorov-egyenlet-nek nevezzük, mivel a differenciálás most a kisebbik időargumentumra vonatkozik.

Homogén Markov-folyamat esetén a fenti összefüggések jelentősen egyszerűsödnek, mivel az átmeneti valószínűség, és így a  $T_{t,t}$  operátorok is, csak a  $t-t'$  időkülönbségtől függenek:

$$T_{t,t} = T_{t-t'} \quad /1.46/$$

ahol a  $T_t$  operátort a

$$T_t f(x) = \int \{f(x') P(xt|x')\} dx \quad /1.47/$$

összefüggés definiálja. Az /1.39/ egyenlet most így írható:

$$T_{t+s} = T_t T_s = T_s T_t \quad /1.48/$$

azaz a  $T_t$  operátorok kommutatív félsoportot alkotnak. Ezt szokás Markov-félsoportnak nevezni.

Az infinitezimális operátor most az időtől független, és

$$A f = \lim_{s \rightarrow 0} \frac{1}{s} (T_s f - f) \quad /1.49/$$

Fölhasználva, hogy /1.46/ értelmében

$$\frac{d}{dt'} T_{t',t} = -\frac{d}{dt} T_{t-t'} \quad , \quad /1.50/$$

a direkt ill. a fordított Kolmogorov-egyenletek alakja

$$\frac{d}{dt} T_t = T_t A = A T_t \quad . \quad /1.51/$$

Ezt az egyenletet formálisan megoldhatjuk a  $T_0 = I$  kezdeti feltétellel. A megoldás

$$T_t = e^{At} \quad . \quad /1.52/$$

Az  $A$  operátort a Markov-félcsoport generátorának is nevezzük.

Mint láttuk, egy Markov-folyamatot az  $A_t$  infinitezimális operátorok segítségével definiálhatunk. Fölmertülhet a kérdés, hogy milyen tulajdonságnak kell lennie az  $A_t$  operátornak, hogy Markov-folyamatot definiáljon, azaz, hogy az  $A_t$  operátorokkal felírt Kolmogorov-egyenletek megoldásai pozitív, kontrakciós operátorok legyenek. Anélkül, hogy a részletekbe belemennénk, megemlítjük, hogy a homogén Markov-folyamatokra vonatkozó Hille-Yoshida-tétel megadja a szükséges és elégséges fe tételt ahhoz, hogy az  $A$  operátor homogén Markov-folyamat generátora legyen, s így absztrakt módon megadja az összes homogén Markov-folyamatot. Mivel minden nem-homogén Markov-folyamat -itt nem részletezett módon- visszavezethető homogén Markov-folyamatra, a Hille-Yoshida-tétel nemhomogén folyamat esetében is megválaszolja fenti kérdésünket. A részleteket illetően a fejezet végen megadott irodalomra utalunk.

#### 1.4 A Markov-folyamatok néhány típusa

Ebben a fejezetben a Markov-folyamatok néhány alapvető típusát fogjuk leírni az infinitezimális operátorok segítségével.

A fizikai alkalmazásokban igen gyakran előforduló folytonos értékészletű Markov-folyamatok a diffúziós folyamatok. Diffúziós folyamatoknak azokat a Markov-folyamatokat nevezzük, amelyek infinitezimális operátora másodrendű differenciál-operátor:

$$A_t = b(x,t) \frac{\partial}{\partial x} + \frac{1}{2} \sigma^2(x,t) \frac{\partial^2}{\partial x^2} \quad , \quad /1.53/$$

ahol  $b(x,t)$  és  $\sigma(x,t)$  folytonos, elegendően sokszor differenciálható függvények. Ha  $b(x,t) \equiv b(x)$  és  $\sigma(x,t) \equiv \sigma(x)$  az időtől független, akkor a diffúziós folyamat homogén.

Az /1.43/ direkt Kolmogorov-egyenlet szerint

$$\frac{d}{dt} T_{t,t'} f = T_{t,t'} A_t f \quad , \quad /1.54/$$

azaz

$$\int \left\{ \frac{\partial P}{\partial t} - P(x,t|x',t') \left[ b(x,t) \frac{\partial}{\partial x} + \frac{1}{2} \sigma^2(x,t) \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right] \right\} f(x) dx = 0 \quad /1.55/$$

Parciális integrálás után, a

$$\lim_{|x| \rightarrow \infty} P(x,t|x',t') = 0 \quad /1.56/$$

természetes határfeltételt kihasználva azt kapjuk, hogy

$$\int \left\{ \frac{\partial P}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (bP) - \frac{1}{2} (\sigma^2 P) \right\} f dx = 0 \quad . \quad /1.57/$$

Ez az egyenlőség tetszőleges folytonos  $f(x)$  függvény esetén fennáll, így a zárójelben álló kifejezés eltűnik. Így kapjuk

meg az átmeneti valószínűségekre vonatkozó direkt egyenletet, az ún. Fokker-Planck egyenletet:

$$\frac{\partial P(x,t|x',t')}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} (b(x,t)P(x,t|x',t')) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} (\sigma^2(x,t)P(x,t|x',t')) \quad /1.58/$$

Az átmeneti valószínűség a Fokker-Planck-egyenlet alapmegoldása a

$$\lim_{t \rightarrow t'} P(x,t|x',t') = \delta(x-x') \quad /1.59/$$

kezdeti feltétellel.

Hasonlóképpen járhatunk el a fordított egyenlet esetében is. Ekkor /1.45/ szerint

$$\left\{ \frac{\partial P(x,t|x',t')}{\partial t'} + b(x',t') \frac{\partial}{\partial x'} P(x,t|x',t') + \frac{1}{2} \sigma^2(x',t') \frac{\partial^2}{\partial x'^2} P(x,t|x',t') \right\} f(x) = 0 \quad /1.60/$$

nánden folytonos  $f(x)$  függvény esetén, s így

$$\frac{\partial P(x,t|x',t')}{\partial t} = -b(x',t') \frac{\partial}{\partial x'} P(x,t|x',t') - \frac{1}{2} \sigma^2(x',t') \frac{\partial^2}{\partial x'^2} P(x,t|x',t') \quad /1.61/$$

Az átmeneti valószínűség ennek az ún. fordított egyenletnek is alapmegoldása a

$$\lim_{t' \rightarrow t} P(x,t|x',t') = \delta(x-x') \quad /1.62/$$

kezdeti feltétellel.

Ha a diffúziós folyamat homogén, akkor a  $P(x,t|x',t')$  átmeneti valószínűségekre vonatkozó egyenlet /1.51/-gyel összhangban így módosul:

$$\frac{\partial P(x,t|x')}{\partial t} = b(x') \frac{\partial}{\partial x'} P(x,t|x') + \frac{1}{2} \sigma^2(x') \frac{\partial^2}{\partial x'^2} P(x,t|x') \quad /1.63/$$

mig a direkt egyenlet változatlan marad.

A  $P_1(x,t_0)$  kezdeti eloszlás ismeretében az egydimenziós eloszlás a későbbi  $t > t_0$  időpillanatban ( l. az /1.28/ egyenletet)

$$P_1(x,t) = \int P(x,t|x',t_0) P_1(x',t_0) dx \quad /1.64/$$

Az /1.58/ Fokker-Planck-egyenlet mindkét oldalát  $P_1(x',t_0)$  -lal szorozva és  $x'$  szerint integrálva láthatjuk, hogy  $P_1(x,t)$  is kielégíti a Fokker-Planck-egyenletet a megadott  $P_1(x',t_0)$  kezdeti feltétellel.

A diffúziós folyamatokkal a 3. fejezetben fogunk részletesen foglalkozni.

A folytonos értékészletű folyamatok egy másik szélsőséges esetét képezik az ugró folyamatok, amelyeket az

$$A_t f = -\lambda(x,t) f(x) + \lambda(x,t) \int \pi(y,x,t) f(y) dy \quad /1.65/$$

infinitezimális operátorok jellemeznek. A direkt egyenlet alakja ekkor

$$\frac{\partial P(x,t|x',t')}{\partial t} = -\lambda(x,t) P(x,t|x',t') + \int dy \lambda(y,t) \pi(x,y,t) P(y,t|x',t') \quad /1.66/$$

A folyamat  $dt$  idő alatt  $\lambda(x,t)dt + \sigma(dt)$  valószínűséggel ugrik el az  $x$  értékről, és ha ugrik,  $\pi(y,x)dy$  valószínűséggel ugrik az  $(y, y+dy)$  intervallumba. A folyamat trajektóriája szakaszonként állandó függvény. Ha a folyamat homogén,  $\lambda(x,t) \equiv \lambda(x)$  és  $\pi(y,x,t) \equiv \pi(y,x)$ . A homogén ugró folyamat esetén az ugrások között eltelt idő eloszlása exponenciális ( $\sim e^{-\lambda(x)t}$ ).

A diszkrét értékészletű folyamatok az ugró folyamatokkal állnak analógiában. A diszkrét értékészletű folyamatok esetében az  $f(x)$  függvények helyét az  $\{f_n\}$  számsorozatok foglalják el,

az operátorok pedig mátrixok lesznek. A  $T_{t',t}$  operátornak a  $P(m|n, t, t') = P_{m,n}(t, t')$  mátrixok felelnek meg:

$$T_{t',t} \{n\} = \sum_m \int_m P_{m,n}(t, t') \quad /1.67/$$

Az  $A_t$  operátornak megfelelő

$$w_{m,n}(t) = \lim_{t \rightarrow t'} \frac{\partial}{\partial t} P_{m,n}(t, t') \quad /1.68/$$

mátrix segítségével az infinitezimális intervallumra vonatkozó átmeneti valószínűség így írható:

$$P_{m,n}(t+s, t) = \delta_{m,n} + w_{m,n}(t) s + o(s) \quad /1.69/$$

Az átmeneti valószínűség normált, ezért

$$\sum_m w_{m,n}(t) = 0 \quad /1.70/$$

vagy másképp, a helybenmaradás valószínűsége

$$P_{n,n}(t+s, t) = 1 - \left( \sum_{m \neq n} w_{m,n}(t) \right) s + o(s) \quad /1.71/$$

Az /1.43/ direkt egyenlet most így írható (ne felejtsük el, hogy a mátrixok jobbról balra hatnak, L. az /1.67/ egyenletet):

$$\frac{\partial}{\partial t} P_{m,n}(t, t') = \sum_{m' \neq m} w_{m,m'}(t) P_{m',n}(t, t') - P_{m,n}(t, t') \left( \sum_{m' \neq m} w_{m,m'}(t) \right) \quad /1.72/$$

Ezt az un. master egyenletet elégíti ki a  $P_m(t)$  egydimenziós eloszlás is. Az /1.45/ fordított egyenlet alakja:

$$\frac{\partial}{\partial t} P_{m,n}(t, t') = - \sum_{m' \neq m} P_{m,m'}(t, t') w_{m',n}(t) + P_{m,n}(t, t') \left( \sum_{m' \neq n} w_{m',n}(t) \right) \quad /1.73/$$

Homogén folyamat esetén  $w_{m,n}(t) = w_{m,n}$  az időtől független. A  $P_{m,n}(t)$  átmeneti valószínűségekre vonatkozó fordított egyenletben /1.51/-nek megfelelően az idő szerinti differenciál -

hányados negatív előjellel szerepel. Az ugró folyamatokhoz hasonlóan, a diszkrét értékészletű folyamat fejlődését szakaszonként állandó, egész értékű függvény írja le. Az ugrások között eltelt idő exponenciális eloszlású ( $\sim e^{-w_{m,n}t}$ ).

A diszkrét értékészletű folyamatokkal a 2. fejezetben fogunk részletesen foglalkozni.

Irodalom:

WENTZEL, A.D.: Kursz teorii szlucsajnuh processzov, Nauka, Moszkva 1975.

ARNOLD, L.: Stochastic differential equations, Wiley, New York, 1974.

FELLER, W.: Bevezetés a valószínűségszámításba és alkalmazásaiba, Műszaki Könyvkiadó, 1978.

LAX, M.: Classical Noise III.: Nonlinear Markoff Processes, Rev. Mod. Phys. 38 359 /1966/

HAKEN, H.: Rev. Mod. Phys. 47 67 /1975/

GIHMAN, I.I., SZKOROHOD, A.V.: Bevezetés a stochasztikus folyamatok elméletébe, Budapest, Műszaki Kiadó 1975.

## 2. Diszkrét állapotterben lezajló folyamatok

### 2.1 A master egyenlet szemléletes származtatása

Tekintsünk egy rendszert, melynek vizsgált állapotai diszkrét változókból alkotott vektorokkal  $(n, m, \dots)$  indexelhetők. Adott esetben az index lehet például a rendszer kvantumszámainak összessége, de az alkalmazások nagy részében a teljes makroszkópikus rendszer helyett csak néhány lessan változó szabadsági fokot vizsgálunk /a többi háttérnek tekintjük/, s ilyenkor az állapot megadása is egyszerűbb /kockarácson történő bolyongás esetén például három koordináta/. Tegyük fel, hogy a rendszer állapota  $n$ -a háttérrel, vagy környezetével való kölcsönhatás következtében bármelyik pillanatban megváltozhat, s hogy az  $n \rightarrow n'$  ( $n \neq n'$ ) átmenet  $\Delta t$  intervallum alatti bekövetkezésének valószínűsége

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

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

Jelölje  $P_{n,m}(t)$  annak a valószínűségét, hogy a rendszer  $t$  idő alatt az  $n$  állapotba kerül, feltéve, hogy az  $m$  álla-

pontból indult. Az az esemény, hogy a rendszer a  $t+\Delta t$  időpontban az  $n$  állapotban legyen, több egymást kizáró módon valósulhat meg: előfordulhat, hogy  $t$  idő eltelte után valamelyik másik ( $l$ ) állapotban van, s utána  $\Delta t$  alatt beszoródik  $n$ -be, ill. előfordulhat, hogy már  $t$  idő alatt eléri az  $n$  állapotot, s azután nem szóródik ki onnét:

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

Átrendezés ill. a  $\Delta t \rightarrow 0$  határérték elvégzése után az un.

direkt master egyenletet kapjuk

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

amely azt fejezi ki, hogy a valószínűség időegységre eső megváltozása a beszorási ill. kiszorási valószínűségek különbsége.

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

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

Ebből az un. fordított master egyenlet adódik

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

Mindkét master egyenlet a

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

kezdeti feltétel mellett vizsgálandó, hiszen zérus idő alatt nem történhet átmenet. Látni fogjuk, hogy a /2.1/ és /2.2/ egyenletek nem túl erős feltételek teljesülése esetén ekvivalensek, így elég csak az egyikkel foglalkoznunk. Néhány ki-

vételtől eltekintve a direkt master egyenletet használjuk majd.

A  $P_{n,m}(t)$  valószínűségeloszlás ismeretében az átmeneti valószínűségek könnyen megkonstruálhatók, hiszen

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

A master egyenlet jelentősége éppen abban áll, hogy az átmeneti valószínűségeket 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 egyértelmű, hanem egy  $P_m$  eloszlás jellemzi ( $\sum_m P_m = 1$ ), akkor annak a valószínűsége, hogy a rendszer  $t$  idő múlva az  $n$  állapotban legyen

$$P_n(t) = \sum_m P_{n,m}(t) P_m \quad , \quad /2.4/$$

ami azt tükrözi, hogy  $n$ -be több kezdeti állapotból is eljuthatunk. Könnyen látható, hogy a  $P_n(t)$  függvény is kielégíti a /2.1/ master egyenletet:

$$\dot{P}_n(t) = \sum_{l \neq n} w_{n,l} P_l(t) - P_n(t) \sum_{l \neq n} w_{l,n} \quad . \quad /2.5/$$

A  $P_m = \delta_{m,n}$  kezdeti eloszlásnak megfelelő megoldás természetesen  $P_{n,m}(t)$ . A fordított master egyenletnek  $P_n(t)$  nem megoldása.

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

**1. feladat**  $t=0$  pillanatban kozmikus sugárzásból

származó nagy energiájú nukleon éri légkörünket. Ez a részecske a légkör atomjaival ütközve újabb nukleonokat hoz létre, s azok is hasonlóképpen sokszorozódnak. Tegyük föl, hogy annak a valószínűsége, hogy egy nukleon  $\Delta t$  idő alatt létrehoz egy másodlagos nukleont  $\lambda \Delta t + \sigma(\Delta t)$ , s ez független a nukleon fajtajától és energiájától, valamint a korábbi eseményektől. Irjunk föl a folyamat master egyenletét!

**2. feladat** Egy üzemben  $N$  számú egyforma munkagép áll rendelkezésre. Ezen eszközök igénybevétele véletlenszerűen történik. Ha az egyik gép áll, akkor időegység alatt  $\Lambda$  valószínűséggel kerül használatba függetlenül attól, hogy mennyi ideje áll már. Ha egy gép működik, akkor időegység alatt  $\mu$  valószínűséggel kapcsolják ki, s működés idejétől függetlenül. Kezdetben  $m$  számú gépet használtak. Irjunk föl azt az egyenletet, amely meghatározza annak a valószínűségét, hogy  $t$  idő múlva  $n$  gép működik.

2.2 A master egyenlet megoldásainak tulajdonságai

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

- 1./ Mindig létezik legalább egy stacionárius /időtől független/megoldás.
- 2./ A stacionárius megoldás egyértelmű, ha teljesül a következő feltétel: Rendeljük hozzá, a  $d$ -dimenziós tér / $d$  az  $n$  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 egyértelmű. Olyan rendszerben tehát, amelyben bármelyik állapotból eljuthatunk akármelyik másikba a stacionárius megoldás egyértelmű.

3./ Ha a  $P_n^*$  stacionárius megoldás egyértelmű, akkor tetszőleges kezdeti eloszlás esetén az un. határeloszlás, vagyis a  $P_n(t)$  megoldás  $t \rightarrow \infty$  határesetre, a stacionárius megoldással egyezik meg:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} P_n(t) = P_n^* \quad /2.6/$$

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

4./ Ha a 2. állítás feltétele teljesül, akkor adott  $P_m$  kezdeti eloszláshoz olyan egyértelmű időfüggő megoldás,  $P_n(t)$  tartozik, amelyben minden  $t > 0$  -ra

$$0 \leq P_n(t) \leq 1 \quad \text{és} \quad \sum_n P_n(t) = 1, \quad /2.7/$$

tehát a  $P_n(t)$  függvény valóban valószínűség-eloszlásként értelmezhető az egész folyamat során. A /2.7/ összefüggések természetesen a  $P_{n,m}(t)$  feltételes valószínűségekre is fennállnak, hiszen ez a  $P_{n,m} = \delta_{m,n}$  kezdeti eloszláshoz tartozik. Ha a megoldás egyértelmű, a  $P_{n,m}(t)$  függvény mind a direkt, mind a fordított egyenletnek megoldása.

A fenti állítások szigorúan véve csak véges számú állapo-

tot tartalmazó állapot térben lezajló folyamatokra érvényesek, de hasonló kijelentések tehetők végtelen állapot térben is, amennyiben további feltételek teljesülését is megköveteljük /például azt, hogy az egymástól távol eső állapotok között kicsi legyen az átmenet valószínűsége, lásd 9. feladat/.

### 2.3 Stacionárius megoldás, a részletes egyensúly

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

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

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

Megmutatjuk, hogy amennyiben egy rendszer stacionárius megoldása eleget tesz a részletes egyensúly elvének, továbbá teljesülnek azok a 2.2-ben megadott feltételek, melyek a megoldás egyértelműségét biztosítják, akkor a  $P_n^*$  eloszlás egyszerűen 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

lánc N lépésből áll, s jelöljük a közbenső állapotokat  $n_j$ -vel /  $j=1,2,\dots,N$ ,  $n_N=n$  /. A részletes egyensúly alapján

$$p_n^* = \frac{W_{n_{N-1}, n_{N-1}}}{W_{n_{N-1}, n_N}} p_{n_{N-1}}^*$$

ill. az egész láncra felírva

$$p_n^* = \prod_{j=0}^{N-1} \frac{W_{n_{j+1}, n_j}}{W_{n_j, n_{j+1}}} p_{n_0}^* \quad /2.9/$$

$p_n^*$  nem függhet a lánc megválasztásától, hiszen a megoldás egyértelmű. A fenti kifejezést rögzített  $n$ . mellett minden  $n$ -re meg kell konstruálni, s akkor  $p_n^*$  a normálási feltételből határozható meg.

Vizsgáljuk most meg azt, a fizikai alkalmazások szempontjából nagyon fontos kérdést, hogy a makroszkopikus rendszerek termodinamikai egyensúlyi állapota eleget tesz-e a részletes egyensúly elvének. Tekintsünk először egy zárt rendszert. Osszuk ezt föl nagyszámu kis részrendszerre, s tegyük föl, hogy ezek belső viselkedéséről már nem rendelkezünk információval. Ez az ún. durva szemcsés leírás. (Példaként gondoljunk arra, hogy mikroszkópban vizsgálunk egy rendszert. Ilyenkor a részrendszerek lineáris mérete a felbontóképeség nagyságrendjében választható, az ennél rövidebb távolságu változásokról nem szerzünk tudomást.) A teljes rendszer állapotait a részrendszerek állapotain keresztül definiáljuk, s az ilyen módon figyelembe nem vett szabadsági fokok hatása nyilvánul meg abban, hogy stochasztikus viselkedést találunk.

Lényeges föltevésünk az, hogy a mikroszkópikus szinten lezajló folyamatok reverzibilisek, vagy másképpen: időtükrözésre invariánsok. Ez a mi esetünkben az átmeneti valószínűség

szimmetrikusságában nyilvánul meg

$$W_{n,m} = W_{m,n} \quad ; \quad /2.10/$$

ahol  $n$  és  $m$  a rendszer két tetszőleges állapotát jelöli a fenti értelemben. Definiáljuk az entrópiát az

$$S(t) = - \sum_n P_n(t) \ln P_n(t)$$

összefüggéssel. Az entrópia időderiváltjára a /2.5/ master egyenlet és /2.10/ alapján a következőt kapjuk.

$$\dot{S}(t) = - \sum_n \dot{P}_n(t) (\ln P_n(t) + 1) = - \sum_{n,m} W_{n,m} (P_m(t) - P_n(t)) (\ln P_n(t) + 1).$$

Indexcsere majd az így előállt két egyenlet összeadása után

$$\dot{S}(t) = \frac{1}{2} \sum_{n,m} W_{n,m} \{ (P_n(t) - P_m(t)) (\ln P_n(t) - \ln P_m(t)) \}.$$

A kapcsos zárójelben álló kifejezés sohasem lehet negatív, nullává is csak akkor válik, ha  $P_n = P_m$ . Az entrópia tehát sohasem csökkenhet,

$$\dot{S}(t) \geq 0,$$

s állandósága csak akkor valósul meg, ha a  $P_n(t)$  eloszlás egyenletes és időben állandó. Ezzel levezettük egyrészt az entrópiatételt, másrészt az egyensúlyi statisztikus fizika alapvető föltevését, miszerint zárt rendszerben valamennyi állapot egyforma valószínűséggel fordul elő. Az utóbbi állítás és /2.10/ együtt azt jelentik, hogy a részletes egyensúly feltétele, /2.8/ termodinamikai egyensúlyban lévő zárt rendszerben teljesül.

A fenti származtatás jól mutatja, hogy milyen lényeges a mikroszkópikus reverzibilitás feltételezése a makroszkópikus folyamatok irreverzibilis viselkedésének megértése szempontjából. A stochasztikus folyamatoknak a nem-egyensúlyi jelenségek leírásában játszott fontos szerepének további illusztrálá-

sára látunk példát a függelékben. Megmutatjuk, hogyan vezethető le a transzport folyamatok megértésében alapvető Boltzmann-egyenlet a kvantummechanika elvei ill. a master egyenlet felhasználásával.

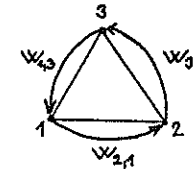
A részletes egyensúly kérdéséhez visszatérve  $T$  hőmérsékletű hőtartállyal kapcsolatban álló rendszer esetén a szabad energia általánosított formáját érdemes vizsgálni, melyről hasonló módon kimutatható, hogy sohasem növekszik. Minimális értéket akkor veszi fel, ha az  $n$  állapot megvalósulásának valószínűsége  $\exp(-E_n/kT)$ -vel arányos, ahol  $E_n$  az állapot energiája,  $k$  a Boltzmann-állandó /kanonikus sokaság/. Belátható, hogy az átmeneti valószínűségek tetszőleges  $m$  és  $n$  indexekre eleget tesznek a

$$\frac{w_{m,n}}{w_{n,m}} = e^{-\frac{E_m - E_n}{kT}} \quad /2.11/$$

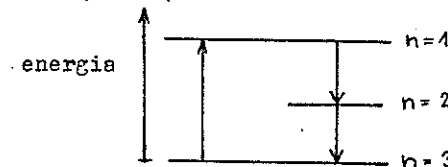
feltételnek, mely éppen a részletes egyensúly megvalósulását jelenti.

Összefoglalva azt mondhatjuk, hogy termodinamikai egyensúlytól nem túl távol lévő rendszerekben a részletes egyensúly elve érvényes. Fordítva a /2.10/ ill. /2.11/ összefüggések annak feltételeként tekinthetők, hogy a rendszer a termodinamikai egyensúlyi állapothoz tartson. Ha a megfelelő feltétel nem teljesül akkor a rendszer nem juthat el a termodinamikai egyensúlyba, de eljuthat stacionárius állapotba, ami esetleg még a részletes egyensúly elvének /2.8/ is eleget tesz. Nem fizikai, vagy egyensúlytól távoli rendszerekben a részletes egyensúly csak speciális esetekben valósul meg.

**3. feladat** Tekintsünk egy három állapotú rendszert, melyben cirkuláris átmenet lehetséges: a 3. állapotból az 1.-be kerül a rendszer, s minden lépés egyirányú.



Ez olyan atom, vagy molekula modelljének tekinthető, mely az alapállapotból /3./ külső hatásra az egyik gerjesztett állapotba /1./ juthat, ahonnan egy közbelső energiaszint /2./ érintésével bomlik le /lézer/.



Határozzuk meg a stacionárius megoldást, s mutassuk meg, hogy a részletes egyensúly elve nem teljesül!

#### 2.4 Az általános megoldás

A /2.5/ master egyenlet az idő változóra nézve lineáris differenciál-egyenlet, mely az

$$A_{n,n} \equiv w_{2,n}(1 - \delta_{2,n}) - \delta_{2,n} \sum_{l \neq n} w_{l,n} \quad /2.12/$$

mátrix bevezetésével a  $\dot{P}_n(t) = \sum_n A_{n,n} P_n(t)$

alakba írható. Ha a partikuláris megoldást a  $P_n(t) = e^{-\lambda t} \varphi_n$  feltevéssel kívánjuk meghatározni, egyszerűbb, algebrai egyenletre jutunk:  $\sum_n A_{n,n} \varphi_n^{(\lambda)} = -\lambda^{(\lambda)} \varphi_n^{(\lambda)}$ .

Az  $\lambda$  index bevezetése azért szükséges, mert a fenti sajátérték egyenletnek több megoldása is létezik. A  $\lambda^{(0)}=0$  sajátérték tartozik a stacionárius megoldáshoz.  $A_{n,n}$  nem feltétlenül szimmetrikus, tehát a bal-, és jobboldali saját vektorok különbözhetnek egymástól. Az általános megoldás a fenti megoldások lineáris kombinációjaként adódik. Aszimptotikus viselkedését, miközben a stacionárius megoldáshoz tart, a legkisebb pozitív valós részű sajátérték jellemzi.

A fentivel lényegében ekvivalens eljárás az, amikor vektoralakban írjuk föl az egyenletet

$$\dot{P}(t) = \underline{A} P(t).$$

Ennek megoldása

$$P(t) = e^{\underline{A}t} P(0), \quad /2.13/$$

ahol  $P(0)$  a kezdeti eloszlás vektora.

A nagy dimenziószámú /esetleg végtelen dimenziós/ mátrixok jelenléte miatt a master egyenlet egzakt megoldása csak speciális esetekben ismert.

**1. példa** Poisson-folyamat Vizsgáljunk egy rádióaktív

preparátumot, melyben nagyszámu atom van. A tapasztalat szerint egy atom elbomlásának időegységre eső valószínűsége ( $\lambda$ ) konstans, s független attól, hogy az atom milyen régóta van elbomlatlan állapotban. Tegyük föl, hogy a felezési idő jóval hosszabb a mérés időtartamánál. Ekkor annak  $\nu$  valószínűsége, hogy egy atom elbomoljon, közelítőleg állandónak vehető  $\nu \approx \lambda N$ , ahol  $N$  az aktív atomok száma. Jellemezzük a rendszer állapotait az elbomlott atomok  $n$  számával! Csak a  $W_{n+1,n} = \nu$  átmeneti valószínűség különbözik zérustól, hiszen minden bomláskor

eggyel növekszik az  $n$  érték, és két egyidejű esemény valószínűsége igen csekély (ritkaság). Határozzuk meg az eloszlásfüggvényt, ha kezdetben  $m \ll N$  elbomlott atom volt a preparátumban.

A fentiek alapján a master egyenlet mátrixa.

$$\underline{A} = \nu \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 1 & -1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & -1 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 1 & -1 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} = -\nu \underline{1} + \nu \underline{L},$$

ahol  $\underline{1}$  az egységmátrix és  $L_{n,n} = \delta_{n,n+1}$ . Jelölje  $e_j$  azt az egységvektort, amelyben csak a  $j$ . komponens különbözik nullától:  $(e_j)_k = \delta_{jk}$ . Ezzel a jelöléssel a kezdeti eloszlás

$P(0) = e_m$  alakban adható meg. /2.13/ szerint a megoldás:

$$P(t) = e^{-\nu t} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} (\nu t \underline{L})^k e_m.$$

Könnyen megállapíthatjuk, hogyan hat az  $\underline{L}$  mátrix az  $e_m$  vektorra:

$$(\underline{L} e_m)_i = \sum_j L_{ij} (e_m)_j = \sum_j \delta_{i,j+1} \delta_{m,j} = \delta_{i,m+1} = (e_{m+1})_i,$$

amiből az is következik, hogy  $(\underline{L})^k e_m = e_{m+k}$ .

A megoldás végső alakja tehát

$$P(t) = e^{-\nu t} \left[ e_m + \nu t e_{m+1} + \frac{1}{2!} (\nu t)^2 e_{m+2} + \frac{1}{3!} (\nu t)^3 e_{m+3} + \dots \right].$$

Ebből leolvasható, hogy

$$P_{n,m}(t) = \begin{cases} e^{-\nu t} \frac{(\nu t)^{n-m}}{(n-m)!} & , \text{ ha } n \geq m \\ 0 & , \text{ ha } n < m \end{cases} \quad /2.14/$$

Speciálisan, ha kezdetben nincs elbomlott atom, akkor

$$P_{n,0}(t) = e^{-\nu t} \frac{(\nu t)^n}{n!}$$

Megkaptuk tehát azt a jól ismert eredményt, amely szerint rövid mérési idők alatt a számlálócsövek jeleinek száma Poisson-eloszlást követ. Ennek feltételei, mint láttuk: memória nélküli bomlás, ritkeség, közelítőleg állandó aktivitás ( $\nu$ ). /Más levezetés található pl. Jánossy Lajos: A valószínűségelmélet alapjai című könyvében./

A Poisson eloszlás tulajdonságainak ismeretében rögtön felírhatjuk  $n$  várható értékét ill. szórását:

$$\langle n \rangle = \nu t, \quad \langle n^2 \rangle - \langle n \rangle^2 = \nu t.$$

A  $\nu$  mennyiség egy másik szemléletes jelentését kapjuk a következő gondolatmenettel: A  $P_{m,m}(t) = e^{-\nu t}$  kifejezés úgy is értelmezhető, mint annak a valószínűsége, hogy a tartozkodási idő az  $m$  állapotban nagyobb  $t$ -nél /hiszen ilyen valószínűséggel nem történik elmozdulás ebből az állapotból./  $1 - e^{-\nu t}$  tehát annak a valószínűsége, hogy a tartozkodási idő nem több  $t$ -nél. Az ennek megfelelő valószínűségsűrűség  $\nu e^{-\nu t}$ .

Az  $m$  állapotban való tartozkodás átlagos ideje ezért

$$T_m = \nu \int_0^{\infty} t e^{-\nu t} dt = \frac{1}{\nu}. \quad /2.15/$$

Mindez arra is utal, hogy a  $P_{n,m}(t)$  függvény kapcsolatba hozható az idő szerinti valószínűségeloszlással. A kérdés részletesebb tárgyalására a 2.7. fejezetben térünk vissza.

**2. példa** Kétállapotú rendszer Képzeljünk el egy mágneses

dipólust /mágneses nyomatéka  $\mu$  /, mely csak a tér adott egyenesével párhuzamosan helyezkedhet el. Két állapota létezik attól függően, hogy "felfelé", vagy "lefelé" mutat /klasszi-

kus spin/, s a két állapotot az  $S = \pm 1$  indexeléssel szokás megkülönböztetni. A  $T$  hőmérsékletű környezettel való kölcsönhatás következtében a dipólus átbillen egyik állapotából a másikba. Tegyük föl, hogy a folyamat Markov-típusú, s hogy valamelyik átmeneti valószínűség, például mérések alapján, ismert; legyen  $\omega_{1,-1} = \omega_0$ . Határozzuk meg a valószínűség eloszlás és az átlagos mágneses nyomaték időbeli változását, ha a rendszer kezdetben az  $S = +1$  állapotban volt, s külső mágneses tér nincsen jelen.

Mágneses tér hiányában mindkét állapot energiája ugyanakkora, ezért a /2.11/ részletes egyensúlyi feltétel alapján  $\omega_{-1,1} = \omega_0$ . A master egyenlet

$$\dot{P}_{S,1}(t) = -\omega_0 P_{S,1}(t) + \omega_0 P_{-S,1}(t), \quad S = -1, +1,$$

mely a  $P_{1,1}(0) = 1$  és  $P_{-1,1}(0) = 0$  kezdeti feltétel mellett oldandó meg. A  $P_{-1,1}(t) = 1 - P_{1,1}(t)$  összefüggést felhasználva az eredmény egyszerűen megkapható:

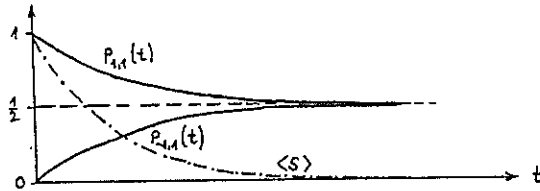
$$P_{1,1}(t) = \frac{1}{2} (1 + e^{-2\omega_0 t}), \quad P_{-1,1}(t) = \frac{1}{2} (1 - e^{-2\omega_0 t}).$$

A két valószínűség tehát idővel kiegyenlítődik, a  $P_{-1}^* = P_{1}^* = \frac{1}{2}$  stacionárius megoldáshoz tart /könnyen belátható, hogy a kezdeti eloszlástól függetlenül/.

Az átlagos mágnesezettség

$$\mu \langle S \rangle = \mu \sum_{S=-1}^{+1} S P_{S,1}(t) = \mu \{ P_{1,1}(t) - P_{-1,1}(t) \} = \mu e^{-2\omega_0 t},$$

a  $\mu$  értékről relaxál a zérus egyensúlyi értékig.



Vizsgáljuk most meg, hogyan módosul az eljárás, ha nem egyetlen rendszert, hanem  $N$  számú ugyanilyen rendszer együttesét /sokaság/ kívánjuk leírni. Aszerint kapunk különböző állapotokat, hogy hány részrendszer van a  $+1$  /ill.  $-1$  / állapotban. Jelölje  $n$  a felfelé mutató spinek számát,  $n=0,1,\dots,N$ . Mivel a részrendszerek függetlenek és egyformák, annak a valószínűsége, hogy időegység alatt  $n$  eggyel csökkenjen  $w_{n-1,n} = w_0 n$ , az  $n \rightarrow n+1$  átmenet valószínűsége viszont a lefelé mutató spinek számával arányos:  $w_{n+1,n} = w_0 (N-n)$ . A két vagy több lépéses átmenet esélye elhanyagolhatóan kicsi. A teljes rendszer master egyenlete ezért így írható, ha az  $m$  állapotból indultunk:

$$\dot{P}_{n,m}(t) = w_0 (n+1) P_{n+1,m}(t) + w_0 (N-n+1) P_{n-1,m}(t) - w_0 N P_{n,m}(t).$$

Az ilyen típusú egyenletek megoldásával a következő fejezetben foglalkozunk. A konkrét számolás azt mutatja, hogy az  $m=N$  esetben  $\frac{n}{N}$  várható értéke éppen az előző módszerrel kapott valószínűség:

$$\frac{\langle n \rangle}{N} = P_{1,1}(t),$$

ami a két eljárás egyenértékűségére utal.

**4. feladat** a./ Irjuk le a 2. példában megadott rendszer viselkedését a spin irányával párhuzamos külső  $H$  mágneses tér jelenlétében!

b./ Legyen a két-állapotú rendszer a  $t=0$  pill-

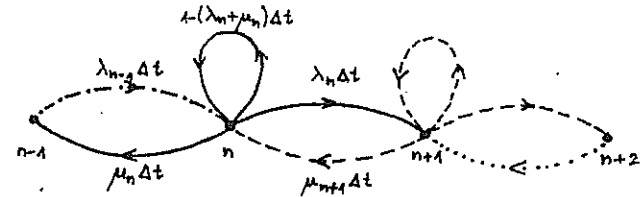
anatig a  $T_0$  hőmérsékletű hőtartállyal egyensúlyban. Ekkor hirtelen  $T$  hőmérsékletű környezetbe helyezzük át. Hogyan változik a valószínűség eloszlás és a rendszer átlagos energiája?

### 2.5 A születési-kihalási folyamat\*

Azt a speciális Markov-folyamatot, melynek során az egyetlen egész számmal indexelt állapotok terében igen rövid idők alatt csak a közvetlen szomszádok között történhet átmenet, születési-kihalási folyamatnak nevezzük. Az átmeneti valószínűségek ilyenkor mindig

$$w_{n,n} = \lambda_n \delta_{n,n+1} + \mu_n \delta_{n,n-1}$$

alakúak, ahol  $\lambda_n$  az előrelépés /születés/,  $\mu_n$  a hátralépés /kihalás/ időegységre eső valószínűsége. A folyamat jól szemléltethető a következő ábrával



A direkt és fordított master egyenlet ( /2.1/ és /2.2/ ) ekkor így írható:

$$\dot{P}_{n,m}(t) = \lambda_{n-1} P_{n-1,m}(t) - (\mu_n + \lambda_n) P_{n,m}(t) + \mu_{n+1} P_{n+1,m}(t) \quad /2.16/$$

$$\dot{P}_{n,m}(t) = \mu_n P_{n,m-1}(t) - (\mu_n + \lambda_m) P_{n,m}(t) + \lambda_m P_{n,m+1}(t) \quad /2.17/$$

\*A gyakori alkalmazások indokolják, hogy a következő fejezetekben végig a születési-kihalási folyamatok tulajdonságaival foglalkozunk.

Ha  $m$  jelöli a kiindulási állapotot, a kezdőfeltétel

$$P_{n,m}(0) = \delta_{n,m} \quad /2.18/$$

A /2.16/ egyenlet a master egyenletek olyan osztályát definiálja, melynek elemei -egyszerűségük miatt- sok esetben egzaktul is megoldhatók. A megoldás általában a

$$G_m(t, z) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} P_{n,m}(t) z^n \quad /2.19/$$

generátorfüggvény segítségével történik. Ha  $G_m(t, z)$ -t valahogyan meghatároztuk, akkor tehát hatványsorának együtthatói definiálják az eloszlásfüggvényt. Könnyen fölállíthatjuk a generátorfüggvényre vonatkozó egyenletet. Szorozzuk be /2.16/-ot  $z^n$ -nel és összegezzünk minden  $n$ -re:

$$\frac{\partial G_m(t, z)}{\partial t} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} (\lambda_{n+1} z^n P_{n+1,m} - \lambda_n z^n P_{n,m}) + \sum_{n=-\infty}^{\infty} (\mu_{n+1} z^n P_{n+1,m} - \mu_n z^n P_{n,m})$$

Az  $n-1 \rightarrow n$  ill.  $n+1 \rightarrow n$  helyettesítéssel a zárójel első tagjait átírva

$$\frac{\partial G_m(t, z)}{\partial t} = (z-1) \sum_{n=-\infty}^{\infty} \lambda_n z^n P_{n,m} + \left(\frac{1}{z}-1\right) \sum_{n=-\infty}^{\infty} \mu_n z^n P_{n,m} \quad /2.20/$$

Tegyük föl, hogy  $\lambda_n$  és  $\mu_n$  mint  $n$  függvényei Taylor-sorba fejthetők:\*

$$\lambda_n \equiv \lambda(n) = \lambda^{(0)} + \lambda^{(1)} n + \lambda^{(2)} n^2 + \dots, \quad \mu_n \equiv \mu(n) = \mu^{(0)} + \mu^{(1)} n + \mu^{(2)} n^2 + \dots$$

$$z \frac{\partial}{\partial z} z^n = n z^n \quad \text{és} \quad \left(z \frac{\partial}{\partial z}\right)^k z^n = n^k z^n \quad /2.21/$$

\* Ha ez nem teljesül /mint például a 8. feladatban/, akkor rendszerint a master egyenlet numerikus megoldásához kell folyamodni.

azonosságok fölhasználásával /2.20/ egyszerűbb alakba írható:

$$\frac{\partial G_m(t, z)}{\partial t} = \left\{ (z-1) \lambda \left( z \frac{\partial}{\partial z} \right) + \left( \frac{1}{z}-1 \right) \mu \left( z \frac{\partial}{\partial z} \right) \right\} G_m(t, z) \quad /2.22/$$

ahol az operátor-függvényeket Taylor-sorokkal definiáljuk.

A folyamat az  $m$  állapotból indult, s ez megszorítást jelent a  $G_m(t, z)$  függvényre a  $t=0$  pillanatban. /2.18/ és /2.19/ alapján

$$G_m(0, z) = z^m \quad /2.23/$$

Másrészt a  $P_{n,m}(t)$  normáltságából és a generátorfüggvény definíciójából /2.19/ az következik, hogy

$$G_m(t, 1) = 1 \quad /2.24/$$

A  $G_m(t, z)$  függvény végül is a /2.22/ parciális differenciálegyenletnek a fenti kezdeti-, ill. peremfeltételeket kielégítő megoldásaként adódik.

A generátorfüggvény ismerete nem csak azért lényeges, mert leolvasható belőle a keresett  $P_{n,m}(t)$  eloszlás, hanem azért is, mert segítségével egyes átlagos mennyiségek közvetlenül számolhatók. Alkalmazzuk ugyanis a  $\left(z \frac{\partial}{\partial z}\right)^k = \left(\frac{\partial}{\partial \ln z}\right)^k$  operátort a  $G_m(t, z)$ -t definiáló /2.19/ egyenletre. A /2.21/ azonosság alapján rögtön következik, hogy

$$\langle n^k(t) \rangle \equiv \sum_{n=-\infty}^{\infty} n^k P_{n,m}(t) = \left. \frac{\partial^k G_m(t, z)}{\partial (\ln z)^k} \right|_{z=1} \quad /2.25/$$

ami azért hasznos eredmény, mert lehetővé teszi, hogy a momentumokat deriválások segítségével megkapjuk /végtelen sor felösszegzése helyett/.

A  $G_m(t, z)$  függvény ill. a valószínűségeloszlás meghatá-

rozása még a születési-kihalási folyamatokban sem mindig könnyű feladat. Ezért fontosak sokszor azok az egyenletek, melyek közvetlenül a momentumokra vonatkoznak. Levezetésük a következő: Szorozzuk be a /2.16/ master egyenletet  $n^k$ -nal, majd a lehetséges állapotokra történő összegezés után a

$$\frac{d \langle n^k \rangle}{dt} = \sum (\lambda_{n-1} n^k P_{n-1,m} - \lambda_n n^k P_{n,m}) + \sum (-\mu_n n^k P_{n,m} + \mu_{n+1} n^k P_{n+1,m})$$

összefüggésre jutunk. Mivel  $\sum n^k \lambda_{n-1} P_{n-1,m} = \sum (n+1)^k \lambda_n P_{n,m}$ , a hasonló átalakítás alkalmazható a második zárójel utolsó tagjában is, azt kapjuk, hogy

$$\frac{d \langle n^k \rangle}{dt} = \langle (n+1)^k - n^k \rangle \lambda_n - \langle n^k - (n-1)^k \rangle \mu_n. \quad /2.26/$$

A fenti differenciálegyenlethez tartozó kezdeti feltétel /2.18/ alapján:

$$\langle n^k \rangle \Big|_{t=0} = m^k. \quad /2.27/$$

Speciálisan a  $k=1$  eset  $n$  átlagértékének változását írja le:

$$\frac{d \langle n \rangle}{dt} = \langle \lambda_n \rangle - \langle \mu_n \rangle, \quad \langle n \rangle \Big|_{t=0} = m. \quad /2.28/$$

A második momentumra az adódik, hogy

$$\frac{d \langle n^2 \rangle}{dt} = \langle (2n+1) \lambda_n \rangle - \langle (2n-1) \mu_n \rangle, \quad \langle n^2 \rangle \Big|_{t=0} = m^2.$$

A fentiek alapján a  $\Delta t \equiv \langle n^2(t) \rangle - \langle n(t) \rangle^2$  szórásnégyzetre

$$\frac{d \Delta}{dt} = 2 \langle n(\lambda_n - \mu_n) \rangle + (1 - 2 \langle n \rangle) \langle \lambda_n \rangle + (1 + 2 \langle n \rangle) \langle \mu_n \rangle, \quad /2.29/$$

ahol a megfelelő kezdőfeltétel:  $\Delta(0) = 0$ .

A /2.26/ egyenletek jelentősége főleg az un. lineáris folyamatok esetében nagy, vagyis akkor, amikor  $\lambda_n$  és  $\mu_n$  legfőljebb lineárisan függ  $n$ -től. Ilyenkor ugyanis  $\langle n^k \rangle$  egyenletében nem szerepel  $k$ -nál magasabb hatvány átlagértéke, ezért a megoldás könnyen meghatározható. Nem-lineáris  $n$  függés mellett bonyolult csatolású egyenletrendszerrel kapunk, mely csak közelítésekkel oldható meg.

Érdeemes megjegyezni, hogy a várható értékekre összetettebb folyamatok esetén is fölírhatók rendszerint a megfelelő egyenletek. Ilyen típusu maga a Boltzmann-egyenlet is. /l.: függelék/, a további példákat látunk majd a későbbi fejezetekben /7., 9. /.

Térjünk most át a születési-kihalási folyamatok stacionárius állapotainak vizsgálatára. A  $P_n^*$  eloszlás közvetlen meghatározásának egyik módja az, hogy a generátorfüggvényre vonatkozó /2.22/ egyenlet időtől független megoldását keressük a /2.24/ feltétel mellett. Az így adódó közönséges differenciálegyenlet megoldását hatványsorba fejtvé leolvashatók a  $P_n^*$  értékek.

A másik eljárás a /2.16/ master egyenletből indul ki. Válasszunk ki egy tetszőleges  $n$  értéket, majd adjuk össze mindazokat az egyenleteket, melyek baloldalán az  $n$ -nél kisebb indexű állapotokhoz tartozó valószínűségek állnak. A jobboldali tagok  $-k$ -kettő kivételével rendre kiejtik egymást, ezért a stacionárius megoldásra fennáll, hogy bármelyik  $n$ -re

$$\lambda_{n-1} P_{n-1}^* = \mu_n P_n^*. \quad /2.30/$$



Eredményünk azt mutatja, hogy a születési-kihalási folyamatok időtől független megoldásai eleget tesznek a részletes egyensúly elvének /2.8/. /2.30/ többszöri alkalmazása után azt kapjuk, hogy

$$P_n^* = \frac{\lambda_{n-1} \lambda_{n-2} \dots \lambda_0}{\mu_n \mu_{n-1} \dots \mu_1} P_0^* \quad , \text{ ha } n > 0 \quad , \quad /2.31a/$$

$$P_n^* = \frac{\mu_{n+1} \mu_{n+2} \dots \mu_0}{\lambda_n \lambda_{n+1} \dots \lambda_{-1}} P_0^* \quad , \text{ ha } n < 0 \quad , \quad /2.31b/$$

ahol  $P_0^*$ -ot a normálási feltétel határozza meg:

$$P_0^* = \left[ 1 + \sum_{i=1}^{\infty} \left( \frac{\lambda_0 \lambda_1 \dots \lambda_{i-1}}{\mu_1 \mu_2 \dots \mu_i} + \frac{\mu_0 \mu_{-1} \dots \mu_{-i+1}}{\lambda_{-1} \lambda_{-2} \dots \lambda_{-i}} \right) \right]^{-1} \quad . \quad /2.32/$$

Ez az eljárás a 2.3 fejezetben követett általános módszer speciális esetre történő alkalmazásának is tekinthető.

( l. például /2.9/)

A stacionárius megoldás születési-kihalási folyamatok esetén természetesen úgy is megkapható, hogy az időfüggő megoldás határeloszlását képezzük.

**3. példa** Irjuk le az 1. példában vizsgált rádióaktív preparátum bomlását tetszőleges hosszúságú mérési időtartamokra!

Jelölje most  $n$  az elbomlatlan atomok számát. Az atomok függetlensége miatt annak valószínűsége, hogy időegység alatt egy elbomlik  $\mu_n = \Lambda n$ , s több bomlás valószínűsége igen csekély. A folyamat master egyenlete

$$\dot{P}_{n,N}(t) = -\Lambda n P_{n,N}(t) + \Lambda (n+1) P_{n+1,N}(t) \quad ,$$

ahol  $N$  jelöli a  $t=0$  pillanatban még aktív atomok számát.

Esetünkben a generátorfüggvényre vonatkozó /2.22/ egyenlet így alakul

$$\frac{\partial G_N(t,z)}{\partial t} = \Lambda (1-z) \frac{\partial G_N(t,z)}{\partial z} \quad , \quad G_N(0,z) = z^N \quad , \quad G_N(t,1) = 1 \quad .$$

A megoldást célszerű a Laplace-transzformált segítségével elvégezni. Legyen  $g_N(s,z)$  a  $G_N(t,z)$  függvény idő szerinti transzformáltja:

$$g_N(s,z) = \mathcal{L}_t \{ G_N(t,z) \} = \int_0^{\infty} e^{-st} G_N(t,z) dt \quad . \quad /2.33/$$

Az idő-derivált Laplace-transzformáltja egyszerűen megadható:

$$\mathcal{L}_t \left\{ \frac{\partial G_N}{\partial t} \right\} = s g_N(s,z) - G_N(0,z) \quad . \quad /2.34/$$

Ezek felhasználásával a következő lineáris egyenletre jutunk /  $s$  itt paraméter/

$$\frac{\partial g_N}{\partial z} - \frac{s}{\Lambda(1-z)} g_N = -\frac{z^m}{\Lambda(1-z)} \quad , \quad g_N(s,1) = \frac{1}{s} \quad ,$$

melynek megoldása

$$g_N(s,z) = \int_1^z \frac{z'^m}{\Lambda(z'-1)} e^{-\frac{s}{\Lambda} \ln \frac{z'-1}{z-1}} dz' \quad .$$

/2.33/ alapján nyilvánvaló, hogy a Dirac-delta:  $\delta(t-a)$  ( $a > 0$ )

transzformálja  $e^{-sa}$ , tehát

$$\mathcal{L}_s^{-1} \{ e^{-sa} \} = \delta(t-a) \quad . \quad /2.35/$$

Ezt az összefüggést használjuk, amikor visszatérünk az eredeti

$G_N$  függvényre:

$$G_N(t, z) = \mathcal{L}_z^{-1} \{ g_N(s, z) \} = \int_1^z \frac{z'^m}{\Lambda(z'-1)} \delta \left( t - \frac{1}{\Lambda} \ln \frac{z-1}{z'-1} \right) dz'.$$

A Dirac-delta alapvető tulajdonsága, hogy tetszőleges  $g$  és  $f$  esetén

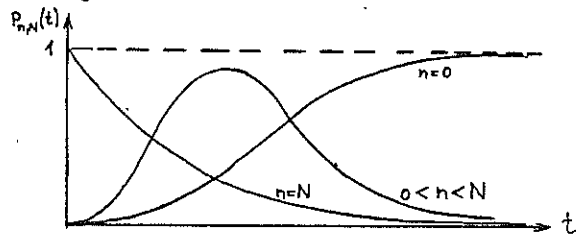
$$\int_{z_1}^{z_2} g(z') \delta(t - f(z')) dz' = \frac{g}{|f'|} \Big|_{z'=f^{-1}(t)} \quad /2.36/$$

feltéve, hogy  $z_1 < z_2$  és  $f^{-1}(t)$  beleesik a  $(z_1, z_2)$  intervallumba. Ennek segítségével a fenti integrál könnyen kiértékelhető, s eredményül

$$G_N(t, z) = [1 - (1-z)e^{-\Lambda t}]^N = \sum_{k=0}^N \binom{N}{k} (1-e^{-\Lambda t})^{N-k} e^{-k\Lambda t} z^k$$

adódik, amiből rögtön leolvasható a keresett valószínűségeloszlás is

$$P_{nN}(t) = \begin{cases} \binom{N}{n} (1-e^{-\Lambda t})^{N-n} e^{-n\Lambda t} & , n \leq N \\ 0 & , n > N \end{cases} \quad /2.36b/$$



Amennyiben a mérési idő rövid:  $\Lambda t \ll 1$ , nagy valószínűséggel csak  $N$ -hez közeli  $n$  értékeket találunk, s ilyenkor vizsgáljuk az  $e^{-\nu t} (\nu t)^{N-n} / (N-n)!$  Poisson-eloszlást, ahol  $\nu = \Lambda N$  /lásd 1. példa/.

/2.25/ alapján egyszerűen meghatározhatók az egyes

momentumok:

$$\langle n(t) \rangle = N e^{-\Lambda t}$$

$$\Delta(t) = N e^{-\Lambda t} (1 - e^{-\Lambda t})$$

Az átlagérték megegyezik az  $\dot{N}(t) = -\Lambda N(t)$  fenomenologikus egyenlet megoldásával,  $\Lambda$  a bomlási állandó. A stochasztikus tárgyalásmód azonban ennél lényegesen több információt szolgáltat, mivel magát az eloszlásfüggvényt határozza meg, melynek segítségével tetszőleges várható érték kiszámolható.

**5. feladat** Mutassuk meg, hogy

a./ a  $\lambda_n = \Lambda(N-n)$ ,  $\mu_n = \mu n$  átmeneti valószínűségekkel definiált születési-kihalási folyamat stacionárius megoldása Bernoulli-eloszlás

$$P_n^* = \binom{N}{n} \left( \frac{\Lambda}{\mu + \Lambda} \right)^n \left( \frac{\mu}{\mu + \Lambda} \right)^{N-n}, \quad 0 \leq n \leq N \quad /2.37/$$

b./  $\lambda_n = \nu$ ,  $\mu_n = \mu n$  esetén pedig Poisson-eloszlás jellemzi a stacionárius állapotot:

$$P_n^* = e^{-\nu/\mu} \left( \frac{\nu}{\mu} \right)^n \frac{1}{n!} \quad /2.38/$$

**6. feladat** Határozzuk meg a lineáris születési-kihalási folyamat ( $\lambda_n = \lambda_n + \nu$ ,  $\mu_n = \mu n + \beta$ ) várható értékének és szórájának időfüggését, ha a rendszer a kezdő pillanatban az  $m$  állapotban volt. Vizsgáljuk a speciális eseteket!

**7. feladat** Határozzuk meg az időfüggő valószínűségeloszlást az 5. feladatban szereplő két folyamatra!

**8. feladat** Tekintsünk egy nem eléggázó rádióaktív bomlási sort. A vizsgált atom /0. állapot/  $\Lambda$  időegységre eső valószínűséggel alakul át egy másik atommá /1. állapot/. Ez  $\Lambda_1$  valószínűséggel bomlik tovább, stb. Az N bomlás után létrejött atom /N. állapot/ már stabil. Bizonyítsuk be, hogy mivel minden bomlási állandó pozitív a./  $P_{n,0}(t)$  monoton csökken 0-ra, b./  $0 < n < N$  esetén  $P_{n,0}(t)$  előbb nő, egy  $t_n$  pillanatban maximumot ér el, majd lecsökken 0-ra, és  $t_1 < t_2 < \dots < t_{N-1}$ . c./  $P_{N,0}(t)$  monoton nő, s határértékben 1-hez tart.

Az I. táblázatban / 52 - 53. oldal/ összefoglaljuk a lineáris születési-kihalási folyamatokra vonatkozó eredményeket.

### 2.6 Korlátozott folyamatok

Eddig semmiféle korlátozást nem vezettünk be a születési-kihalási folyamatok állapotterében, n tetszőleges egész szám lehetett.  $\lambda_n$  és  $\mu_n$  megadása mégis sok esetben természetes korlátozást jelent: pl., ha  $\lambda_n = \lambda n$ ,  $\mu_n = \mu n$ , akkor az  $n=0$  állapot elérése után leáll a folyamat, az  $n=0$  un. nyelő /abszorbeáló/ állapot; másrészt, ha  $\lambda_n = \Lambda(N-n)$ ,  $\mu_n = \mu n$ , akkor a rendszer nem juthat el negatív ill. N-nél nagyobb indexű állapotba, az  $n=0$  ill.  $n=N$  állapotokról mintegy visszaverődik a folyamat. Mindezek azonban belső korlátozások voltak.

Most azt vizsgáljuk, hogyan vehetők figyelembe a külső

kényszerek, vagyis hogyan írható le a nyelő ill. visszaverő /reflektáló/ állapotok hatása a folyamatra, ha ezen speciális állapotok nem a fent említett természetes korlátozásból adódnak.

A kényszerfeltételek mindig megadhatók úgy, hogy a speciális állapotokhoz tartozó átmeneti valószínűségeket alkalmas módon választjuk meg /nyelő esetén például mindkettőt nullának/, ehelyett azonban célszerű a  $P_{n,m}(t)$  feltételes valószínűségekre vonatkozó peremfeltételeket megkeresni és  $\lambda_n$ -et és  $\mu_n$ -et továbbra is analitikus függvénynek tekinteni annak érdekében, hogy a generátorfüggvényre vonatkozó egyenletet használhassuk.

Vizsgáljuk először azt az esetet, amikor a felső u állapot nyelő. Onnét nem lehetséges továbblépés, az  $u-1$  állapot-ra vonatkozó egyenlet ezért

$$\dot{P}_{u-1,m}(t) = \lambda_{u-2} P_{u-2,m}(t) - (\mu_{u-1} + \lambda_{u-1}) P_{u-1,m}(t).$$

Ehelyett formálisan azt is írhatjuk, hogy

$$P_{u,m}(t) \equiv 0, \quad /2.39/$$

s a /2.16/ master egyenlet  $n \leq u$  -ra ezen határfeltétel mellett oldandó meg. Természetesen ilyenkor  $P_{u,m}(t)$  már nem tekinthető az  $u$  állapotban levés valószínűségének. Az utóbbi mennyiséget  $1 - \sum_{n=0}^{u-1} P_{n,m}(t)$  adja meg. A fordított master egyenlethez tartozó peremfeltétel

$$P_{n,u}(t) \equiv 0, \quad /2.40/$$

minden  $n \leq u$  -ra, hiszen a nyelő állapotból indulva sehova sem juthat el a rendszer. Ha alsó állapot az abszorbeáló, akkor a határfeltételek értelemszerűen módosulnak.

Ha a felső u állapot most visszaverő, akkor onnét csak hátra lépés történhet, tehát  $\lambda_u=0$  és  $P_{u+1,m} \equiv 0$ , ezért a /2.16/ egyenletrendszer legutolsó tagja így módosul:

$$\dot{P}_{u-1,m}(t) = \lambda_{u-2} P_{u-2,m}(t) - (\mu_{u-1} + \lambda_{u-1}) P_{u-1,m}(t), \quad /2.41/$$

a fordított master egyenlethen pedig a következő feltétel teljesül:

$$\dot{P}_{n,u}(t) = \mu_u P_{n,u-1}(t) - \mu_u P_{n,u} \quad /2.42/$$

Hasonlóan járhatunk el, ha alsó állapot a visszaverő.

Ha az állapotteret két speciális állapot határolja, akkor két különböző határfeltételi egyenletet kell figyelembe venni. A 2. példában szereplő kétállapotú rendszer például ugy is tekinthető, mint két szomszédos visszaverő fal között végbemenő folyamat.

Korlátozott folyamatok esetén a  $P_{n,m}(t)$  eloszlásfüggvény meghatározásának egyik módja az, hogy ismeretlen  $d_n$  segédmenyiségeket vezetünk be, s formálisan a

$$P_{n,m}(0) = d_n, \quad n < l, \quad n > u \quad /2.43/$$

kezdőfeltételt használjuk a szokásos

$$P_{n,m}(0) = \delta_{n,m}, \quad l \leq n \leq u$$

feltétel mellett (/2.24/-et most nem követeljük meg).  $u$  és  $l$  a speciális állapotokat jelöli /az egyik esetleg kitolódhat a végtelenbe/. Ezek után megoldjuk a /2.22/ egyenletet. A  $G_m$  generátorfüggvény azonban most tartalmazni fogja a  $d_n$  mennyiségeket, melyeket végül úgy választunk meg, hogy a  $P_{n,m}$  valószínűségekre kirótt peremfeltételek teljesüljenek.

4. példa

Határozzuk meg azon születési-kihalási folyamat valószínűségeloszlását, melyre  $\lambda_n = \nu$ ,  $\mu_n = \beta$ , a./ ha nem vezetünk be semmilyen korlátozást, b./ ha az  $n=0$  állapot nyelő és  $m > 0$ .

A generátorfüggvényt meghatározó differenciálegyenlet  $\frac{\partial G_m(t,z)}{\partial t} = [(z-1)\nu + (\frac{1}{z}-1)\beta] G_m(t,z)$ .

Ennek megoldása azonnal fölírható:

$$G_m(t,z) = f_m(z) e^{-(\nu+\beta)t} e^{(\nu z + \beta/z)t} \quad /2.44/$$

a./ Ha semmilyen kényszer nincs előírva, akkor a kezdeti ill. határfeltétel  $G$ -re /2.23-24/

$$G_m(0,z) = z^m, \quad G_m(t,1) = 1,$$

ezért  $f_m(z) = z^m$ .  $P_{n,m}(t)$  meghatározása érdekében fel kell használnunk a következő azonosságot

$$e^{ax + \frac{b}{x}} = \sum_{k=-\infty}^{\infty} I_k(2\sqrt{ab}) \left(\frac{a}{b}\right)^k x^k, \quad /2.45/$$

ahol  $I_n(x)$  az  $n$ . módosított Bessel-függvény /az  $x^2 y'' + xy' - (x^2 + n^2)y = 0$  egyenlet analitikus megoldása/. /2.45/ alapján az eloszlás

$$P_{n,m}^{(a)}(t) = \left(\frac{\nu}{\beta}\right)^{\frac{n-m}{2}} e^{-(\nu+\beta)t} I_{n-m}(2t\sqrt{\nu\beta}).$$

b./ Az origóbeli nyelő esetén /2.43/ miatt a  $G_m$ -re vonatkozó kezdeti feltétel

$$G_m(0,z) = z^m + \sum_{n=1}^{\infty} d_n z^n.$$

Amint az általános /2.44/ alakból leolvasható ez meg kell egyezzen az  $f_m(z)$  függvénnyel. A sorfejtés elvégzése után

$$G_m(t,z) = e^{-(\nu+\beta)t} \sum_{n=-\infty}^{\infty} z^n \left[ I_{n-m}(2t\sqrt{\nu\beta}) \left(\frac{\nu}{\beta}\right)^{\frac{n-m}{2}} + \sum_{j=1}^{\infty} d_j I_{n+j}(2t\sqrt{\nu\beta}) \left(\frac{\nu}{\beta}\right)^{\frac{n+j}{2}} \right].$$

Az eloszlásfüggvényre érvényes /2.39/ peremfeltétel szerint  $P_{0,m}(t) \equiv 0$ . A  $z^0$  együtthatója ezért el kell tűnjön  $G_m$ -ben, ami csak úgy valósulhat meg, ha

$$d_{-j} = -\delta_{j,m} \left(\frac{\nu}{\xi}\right)^{-m}$$

hiszen  $I_k(x) = I_{-k}(x)$ .  $d_{-j}$ -t behelyettesítve rögtön leolvasható, hogy

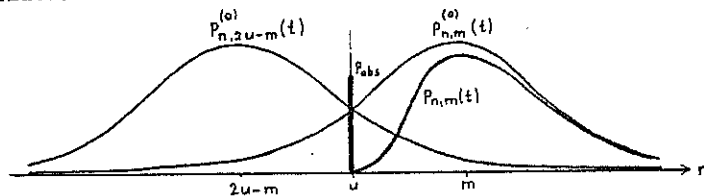
$$P_{n,m}(t) = \left(\frac{\nu}{\xi}\right)^{\frac{n-m}{2}} e^{-(\nu+\xi)t} [I_{n-m}(2t\sqrt{\nu\xi}) - I_{n+m}(2t\sqrt{\nu\xi})] \quad /2.46/$$

Amennyiben a nyelő az  $u$  indexű állapot, a szögletes zárójelben a második tag  $I_{2u-n}$  lesz.

Mindez jól mutatja, hogy a speciális állapot jelenlétében létrejövő eloszlás milyen lényegesen különbözik a korlátozatlan folyamatra vonatkozó megoldástól. Különösen érdekes az az eset amikor az előre, -ill. hátralépés valószínűségei egyformák ( $\nu = \xi$ ), ilyenkor ugyanis az  $u$  állapotban lévő nyelő következtében olyan eloszlás alakul ki, mely a korlátozatlan folyamathoz ill. annak  $u$ -ra vett tükrképéhez tartozó megoldások különbsége

$$P_{n,m}(t) = P_{n,m}^{(o)}(t) - P_{n,2u-m}^{(o)}(t)$$

Grafikusan:



ahol  $P_{obs} = 1 - \sum_{n>u} P_{n,m}(t)$  annak a valószínűsége, hogy a rendszer  $t$  idő múlva az  $u$  indexű nyelő állapotba jut.

**9. feladat** Vizsgáljuk a tiszta születési folyamatot

( $\mu_n = 0, \lambda_n$  tetszőleges), ha az  $N$  állapot nyelő, s a kezdő állapot  $m < N$ . Képezzük az  $N \rightarrow \infty$  határértéket, s adjuk meg, milyen feltételek mellett lesz  $\sum_{n=m}^{\infty} P_{n,m}(t)$  egynél kisebb.

### 2.7 Az első elérés ideje

A  $P_{n,m}(t)$  eloszláson és nyomatékain kívül más mennyiségek is bevezethetők, melyek lényeges információt szolgáltatnak a rendszerről. Az egyik legfontosabb az első elérés ideje ill. az ehhez tartozó valószínűségeloszlás. Jelölje  $F_{n,m}(t)\Delta t$  annak a valószínűségét, hogy a rendszer  $m$ -ből indulva  $t$  és  $t+\Delta t$  között először éri el az  $N$  állapotot. Az első elérés ideje az az átlagos idő, amely alatt a folyamat először jut az  $N$  állapotba:

$$T_{N,m} = \int_0^{\infty} t F_{N,m}(t) dt \quad /2.47/$$

Az általános összefüggés  $F_{N,m}(t)$  és  $P_{n,m}(t)$  között a következő:

$$P_{n,m}(t) = \int_0^t F_{N,m}(t-\tau) P_{n,N}(\tau) d\tau, \quad m < N < n \quad /2.48/$$

hiszen ahhoz, hogy a rendszer az  $n$  állapotba kerüljön, először el kell érnie a közbenső /tetszőleges/ $N$  állapotot, még hozzá  $t-\tau$  idő alatt, majd ezután  $\tau$  ideje van arra, hogy /nem feltétlenül először/ eljusson  $n$ -be. Az összes lehetséges  $\tau$  értékre összegezni kell. A fenti konvolúciós összefüggés a Laplace-transzformáltakra egyszerű szorzási kapcsolatot jelent.

Vizsgáljuk most azt az esetet, amikor a felső  $u$  állapot nyelő és más korlátozás nem áll fenn. Ahhoz, hogy a rendszer  $u-l$  először /s akkor utoljára is/  $t+\Delta t$  -ben érje el szükséges, hogy  $t$  idő alatt eljusson  $u-1$ -be, s onnantól azután előre lépjen a fennmaradó  $\Delta t$  időben. Ilyenkor tehát

$$F_{u,m}(t)\Delta t = P_{u-1,m}(t)\lambda_{u-1}\Delta t. \quad /2.49/$$

Ha a  $P_{u-1,m}$  -re vonatkozó fordított master egyenletet /2.17/  $\lambda_{u-1}$  -gyel beszorozzuk, azt látjuk, hogy  $F_{u,m}$  is kielégíti az egyenletet:

$$\dot{F}_{u,m}(t) = \lambda_m F_{u,m+1}(t) - (\mu_m + \lambda_m) F_{u,m}(t) + \mu_m F_{u,m-1}(t), \quad /2.50/$$

$m < u$ . /2.18/ alapján a kezdeti feltétel

$$F_{u,m}(0) = \delta_{m,u-1}. \quad /2.51/$$

A peremfeltétel

$$F_{u,u}(t) \equiv 0, \quad /2.52/$$

hiszen, ha  $u$  -ből indul a folyamat, végig ott is marad. Ha  $P_{n,m}$  -et nem ismernénk, a fenti egyenletek akkor is egyértelműen meghatározzák  $F_{u,m}$  -et.

Tekintsük most a korlátozás nélküli folyamatot és keressük az  $N > m$  állapot első elérési idejének eloszlásfüggvényét. Ennek meghatározása szempontjából lényegtelen mi történik  $N$  elérése után. Az első elérési ideje ugyanakkora tehát, mint akkor, ha  $N$  nyelő állapot. A /2.50-52/ egyenletek ezért az  $u=N$  helyettesítéssel korlátozatlan folyamatra is megadják az első elérési idejét.

Ha most korlátozott folyamatot vizsgálunk, az  $N$  fölött elhelyezkedő speciális állapot az első elérési ideje szempontjából

ból lényegtelen, az  $m$  alatti speciális állapot ( $l$ ) hatása viszont megfelelő peremfeltételekkel veendő figyelembe. Ha  $l$  nyelő

$$F_{l,l}(t) \equiv 0, \quad /2.53/$$

ha pedig  $l$  visszaverő, akkor

$$\dot{F}_{N,l}(t) = \lambda_l F_{N,l+1}(t) - \lambda_l F_{N,l}(t), \quad /2.54/$$

hiszen  $\mu_l = 0$ .

Az egyenletek megoldása rendszerint a Laplace-transzformálás segítségével történik (lásd: 10.2 fejezet).

**5. példa** A Poisson-folyamat első elérési ideje Mivel csak előrelépés lehetséges a  $P_{n,m}$  eloszlásfüggvény nem függ attól, hogy  $N$  nyelő vagy közönséges állapot, amíg  $n \leq N$ . Ezért használhatjuk /2.49/-et, így

$$F_{N,m}(t) = P_{N-1,m}(t)\lambda,$$

ahol  $P_{N-1,m}$  a Poisson-folyamat /2.14/ feltételes valószínűsége. Válasszuk a kiindulási állapotot  $0$ -nak, ekkor

$$F_{N,0}(t) = \frac{e^{-\lambda t} (\lambda t)^{N-1}}{(N-1)!} \lambda.$$

Az elérés ideje (/2.47/)

$$T_{N,0} = \frac{1}{\lambda} \frac{1}{(N-1)!} \int_0^{\infty} e^{-x} x^N dx = \frac{N}{\lambda},$$

amint az szemléletesen is várható, hiszen  $\lambda^{-1}$  egy lépés átlagos időtartama. Az első elérési idejének szórására  $N/\lambda^2$  adódik.

**10. feladat** Határozzuk meg azt az átlagos időt, amely alatt a rádióaktív preparátum aktív atomjainak száma a kiindulási érték felére csökken ( $l$ : 3. példa)!

I. táblázat A lineáris születési-kihalási folyamatok főbb jellemzői

$\lambda_n$	$\mu_n$	$G_m(t, z)$	$P_{n,m}(t)$	$\langle n(t) \rangle$	$\Delta(t)$	Megjegyzés
$\nu$	$0$	$z^m e^{\nu t(z-1)}$	$\frac{e^{-\nu t} (\nu t)^{n-m}}{(n-m)!}, n \geq m; 0, n < m$	$m + \nu t$	$\nu t$	—
$0$	$g$	$z^m e^{g t(z^2-1)}$	$\frac{e^{-g t} (g t)^{m-n}}{(m-n)!}, n \leq m; 0, n > m$	$m - g t$	$g t$	—
$\nu$	$g$	$z^m e^{(\nu+g)t + (\nu z + g z^2)t}$	$\left(\frac{\nu}{g}\right)^2 I_{n-m}^{n-m} (2t(\nu g)^{1/2}) e^{-(\nu+g)t}$	$m + (\nu+g)t$	$(\nu+g)t$	—
$\lambda n$	$0$	$[1 - e^{-\lambda t} (1 - z^2)]^m$	$\binom{n-1}{m-1} e^{-m\lambda t} (1 - e^{-\lambda t})^{n-m}, n \geq m; 0, n < m$	$m e^{\lambda t}$	$m e^{\lambda t} (e^{-\lambda t} - 1)$	—
$0$	$\mu n$	$[1 - e^{-\mu t} (1 - z)]^m$	$\binom{m}{n} e^{-n\mu t} (1 - e^{-\mu t})^{m-n}, n \leq m; 0, n > m$	$m e^{-\mu t}$	$m e^{-\mu t} (1 - e^{-\mu t})$	—
$\nu$	$\mu n$	$[1 - e^{-\mu t} (1 - z)]^m \cdot e^{\frac{\nu}{\mu} (z-1) (1 - e^{-\mu t})}$	$e^{\frac{\nu}{\mu} (1 - e^{-\mu t})} \sum_{k=0}^{m-n} \binom{m}{k} \cdot \frac{e^{-\mu t k} (1 - e^{-\mu t})^{m+n-2k} \left(\frac{\nu}{\mu}\right)^{n-k}}{(n-k)!}$	$m e^{-\mu t} + \frac{\nu}{\mu} (1 - e^{-\mu t})$	$\left(\frac{\nu}{\mu} + m e^{-\mu t}\right) (1 - e^{-\mu t})$	$(m, n) = \min\{m, n\}$

$\lambda n$	$\mu n$	$\left[ \frac{(\sigma-1) + (\sigma-\delta)z}{[(\sigma\delta-1) + \sigma(1-\delta)z]} \right]^m$	$\sigma^n \sum_{k=0}^{\min\{m,n\}} (-1)^k \binom{m+n-k-1}{n-k} \binom{m}{k} \cdot \left(\frac{1-\sigma}{1-\sigma\delta}\right)^{m+n-k} \left(\frac{1-\delta/\sigma}{1-\sigma}\right)^k$	$m\sigma$	$\frac{m\sigma(\sigma+1)(\delta-1)}{\sigma-1}$	$\sigma = \lambda/\mu$ $\delta = e^{-(\lambda-\mu)t}$ $(m, n) = \min\{m, n\}$
$\lambda n$	$\lambda n$	$\left[ \frac{\lambda t + (1+\lambda t)z}{1+\lambda t - \lambda t z} \right]^m$	$\left(\frac{\lambda t}{1+\lambda t}\right)^{m+n} \sum_{k=0}^{\min\{m,n\}} \binom{m}{k} \binom{m+n-k-1}{n-k} \cdot \left(\frac{1-\lambda^2 t^2}{\lambda^2 t^2}\right)^k$	$m$	$2m\lambda t$	—
$\lambda n + \nu$	$\mu n$	$\frac{\nu\lambda}{(\sigma-1)\lambda} \left[ \frac{(\sigma-1) + (\sigma-\delta)z}{[\sigma\delta-1 + \sigma(1-\delta)z]} \right]^m + \frac{\nu}{\lambda}$	$\frac{\nu\lambda}{(1-\sigma)} \sum_{k=0}^{\min\{m,n\}} (-1)^k \binom{m+n+\nu\lambda}{n-k} \binom{m}{k} \cdot \left(\frac{1-\sigma}{1-\sigma\delta}\right)^{m+n-k} \left(\frac{1-\delta/\sigma}{1-\sigma}\right)^k$	$m\sigma + \frac{\nu\sigma(\sigma-1)}{\lambda(\sigma-1)}$	$\frac{m\sigma(\sigma+1)(\delta-1)}{\sigma-1} + \frac{\nu}{\lambda} \frac{\sigma(\delta-1)(\sigma\delta-1)}{(\sigma-\delta)^2}$	$\lambda_j = \lambda(x+j), (x+j-1)$ $\sigma = \lambda/\mu$ $\delta = e^{-(\lambda-\mu)t}$
$\lambda n + \nu$	$\lambda n$	$\left[ \frac{\lambda t + (1-\lambda t)z}{[1+\lambda t - \lambda t z]} \right]^m + \frac{\nu}{\lambda}$	$\left(\frac{\lambda t}{1+\lambda t}\right)^{m+n} \sum_{k=0}^{\min\{m,n\}} \binom{m}{k} \binom{m+\nu\lambda}{n-k} \cdot \left(\frac{1-\lambda^2 t^2}{\lambda^2 t^2}\right)^k$	$m + \nu t$	$2m\lambda t + \nu t(\lambda t + 1)$	$(m, n) = \min\{m, n\}$
$\lambda(N-n)$	$\mu n$	$\left[ \frac{1-\delta + (\delta+\delta)z}{1+\delta} \right]^m \cdot \left[ \frac{1+\delta\delta + \delta(1-\delta)z}{1+\delta} \right]^{N-m}$	$\sum_{k=0}^{\min\{m, N-n\}} \binom{m}{k} \binom{N-m}{n-k} (1+\delta)^{-N} \cdot \delta^{N-m-k} (\delta+\delta)^k (1+\delta\delta)^{N-m-n-k}$	$m\delta + N \frac{\delta}{1+\delta}$	$\frac{m(1-\delta)\delta(1-\delta)}{1+\delta} + \frac{N\delta(\delta+\delta\delta)(1-\delta)}{(1+\delta)^2}$	$\sigma = \lambda/\mu$ $\delta = e^{-(\lambda+\mu)t}$ $[\alpha, \beta] = \max\{\alpha, \beta\}$

2.8 A folytonos határeset

Amennyiben a folyamatot olyan széles tartományban vizsgáljuk, mely nagyon sok különböző állapotot tartalmaz, sokszor célszerű áttérni a diszkrét indexelésről folytonos változókra. Ezt a születési-kihalási folyamat esetében formálisan a következőképpen tehetjük meg: Vezessünk be egy kis paramétert,  $h-t$ , melynek segítségével új valószínűségi változót definiálunk:  $x-nh$ . Két szomszédos állapot közötti átmenet következtében  $x$  éppen  $h$ -val változik ( $\Delta x = h$ ), vagyis a fenti transzformáció az állapotter összezsugorítását jelenti. Annak érdekében, hogy fizikailag értelmes határértékhez jussunk föl kell tételeznünk, hogy az átmeneti valószínűségek értékei függenek  $h$ -tól. Miközben tehát  $h$ -val nullához tartunk, minden  $h$ -nak megfelel egy születési-kihalási folyamat.

Tegyük föl, hogy eközben az átmeneti valószínűségek úgy változnak, hogy

$$h (\lambda_n(h) - \mu_n(h)) = b(nh) + \sigma(h) \quad , \quad /2.55/$$

$$h^2 (\lambda_n(h) + \mu_n(h)) = \sigma^2(nh) + \sigma(h) \quad , \quad /2.56/$$

ahol  $b(nh)$  és  $\sigma^2(nh)$  véges értékek. Ez a megszorítás szemléletesen azt jelenti, hogy az időegységre eső átlagos elmozdulás  $b(x)/h$  (1). átlagos négyzetes elmozdulás  $\sigma^2(x)/h^2$  a határértékben is véges. E két mennyiség megadása jellemzi majd a folyamatot az eredeti  $\lambda_n, \mu_n$  adatok helyett.

A  $P_{n,m}(t)$  feltételes valószínűség helyett vezessük be a  $P(x,t|y)$  jelölést, ahol  $y = mh$ . A /2.16/ master egyenlet

átrendezhető a következő alakba

$$\frac{\partial P(x,t|y)}{\partial t} = \frac{1}{2} [ (\lambda_{n+1} + \mu_{n+1}) P(x+h,t|y) - 2(\lambda_n + \mu_n) P(x,t|y) + (\lambda_{n-1} + \mu_{n-1}) P(x-h,t|y) ] - \frac{1}{2} [ (\lambda_{n+1} - \mu_{n+1}) P(x+h,t|y) - (\lambda_n - \mu_n) P(x,t|y) ] - \frac{1}{2} [ (\lambda_n - \mu_n) P(x,t|y) - (\lambda_{n-1} - \mu_{n-1}) P(x-h,t|y) ] .$$

A  $h \rightarrow 0$  határesetben a /2.55-56/ feltételek felhasználásával megkapjuk azt a differenciálegyenletet, mely a folytonos állapotterű folyamat valószínűségeloszlását határozza meg:

$$\frac{\partial P(x,t|y)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} [ b(x) P(x,t|y) ] + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} [ \sigma^2(x) P(x,t|y) ] .$$

Ez éppen a Fokker-Planck-egyenlet.

A fordított master egyenletből ugyanezen feltételek mellett a fordított Fokker-Planck-egyenlet adódik:

$$\frac{\partial P(x,t|y)}{\partial t} = b(y) \frac{\partial P(x,t|y)}{\partial y} + \frac{1}{2} \sigma^2(y) \frac{\partial^2 P(x,t|y)}{\partial y^2} .$$

A kezdeti feltétel /2.18/ következményeként mindkét egyenletre

$$\lim_{t \rightarrow 0} P(x,t|y) = \delta(x-y) .$$

A fenti származtatás mutatja, hogy<sup>a</sup> diszkrét Markov-folyamatok bizonyos feltételek mellett a folytonos határesetben diffúziós folyamatnak tekinthetők.

Irodalom

SCHNAKENBERG, J.: Rev. Mod. Phys. 48, 571(1976)



HAKEN, H.: Synergetics - An Introduction, Springer Verlag, 1977 és Rev. Mod. Phys. 47, 67 /1975/

GOEL, N.S., RICHTER-DYN, N.: Stochastic Models in Biology, 2. fejezet, Academic Press, 1974.

FELLER, W.: Bevezetés a valószínűségszámításba és alkalmazásaiba, Műszaki Könyvkiadó, 1978.

TAKÁCS, L.: Sztochasztikus folyamatok. A Műszaki Matematikai Gyakorlatok Valószínűségszámítás /C.V./ kötetében.

Szerk.: Fazekas Ferenc, Tankönyvkiadó, 1957.

### 3. Diffúziós folyamatok

#### 3.1 A Fokker-Planck- egyenlet

A diffúziós folyamatokat, mint a Markov-folyamatok egyik osztályát, az 1.4 fejezetben az

$$A_t = b(x,t) \frac{\partial}{\partial x} + \frac{1}{2} \sigma^2(x,t) \frac{\partial^2}{\partial x^2} \quad /3.1/$$

infinitézimális operátorok segítségével definiáltuk. Megmutattuk, hogy a diffúziós folyamat egydimenziós eloszlásának és átmeneti valószínűségének sűrűségfüggvényei kielégítik az un. Fokker-Planck- egyenletet:

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial x} (b(x,t)P(x,t)) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} (\sigma^2(x,t)P(x,t)) \quad /3.2/$$

Természetes határfeltételekkel dolgozunk, azaz megköveteljük, hogy /3.2/ megoldásai kielégítsék a

$$\lim_{x \rightarrow +\infty} P(x,t) = 0 \quad /3.3/$$

feltételeket.

A  $P(x,t|x't')$  átmeneti valószínűség alapmegoldása a Fokker-Planck egyenletnek a

$$\lim_{t \rightarrow t'} P(x,t|x't') = \delta(x-x') \quad /3.4/$$

kezdeti feltétel mellett. Ezenkívül  $P(x,t|x't')$ , mint  $x'$  függvénye, alapmegoldása az /1.61/ fordított egyenletnek is.

Mivel a valószínűségeloszlások normáltak, a

$$\int_{-\infty}^{+\infty} P(x,t) dx$$

integrál "mozgásálló", s így a sűrűségfüggvények időbeli

fejlődését

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial x} \mathcal{J}(x,t) \quad /3.5/$$

alakú mérlegegyenlet írja le. A Fokker-Planck-egyenlettel összehasonlítva, a  $\mathcal{J}$  valószínűségi áramsűrűség

$$\mathcal{J} = (b - \sigma \frac{\partial \xi}{\partial x}) P - \frac{1}{2} \sigma^2 \frac{\partial P}{\partial x} \quad /3.6/$$

A valószínűségi áramsűrűség kifejezése két tagból áll. Az első tag, a "konvektív" áramsűrűség vagy drift, a valószínűségi sűrűség  $b - \sigma \frac{\partial \xi}{\partial x}$  sebességeloszlással jellemzett áramlását írja le. A második tag a diffúziós áramsűrűség, ami a folyamatot a kiegyenlítődés felé igyekszik közelíteni.

Ha  $\sigma^2(x,t) \equiv 0$ , a diffúziós áramsűrűség eltűnik és a valószínűségi sűrűség fejlődése olyan, mint egy folyadék áramlása. Az átmeneti valószínűség ilyenkor semmi véletlen elemet nem tartalmaz, mindig egyetlen ponton van koncentrálna /ld. 11. feladat/.

Bár általában egydimenziós diffúziós folyamatokkal foglalkozunk, célszerű most felírni a d-dimenziós diffúziós folyamatok infinitezimális operátorait és a rájuk vonatkozó Fokker-Planck-egyenletet. A d-dimenziós folyamat értékészlete a d-dimenziós euklideszi tér pontjai:

$$\underline{x} = (x_1, x_2, \dots, x_i, \dots, x_d). \quad /3.7/$$

Az infinitezimális operátorok alakja

$$A_t = \sum_{i=1}^d b_i(x,t) \frac{\partial}{\partial x_i} + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^d D_{ij}(x,t) \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \quad /3.8/$$

ahol  $D_{ij}(x,t)$  nem-negatív definit mátrix. A Fokker-Planck-

egyenlet így módosul:

$$\frac{\partial P(\underline{x},t)}{\partial t} = - \sum_{i=1}^d \frac{\partial}{\partial x_i} (b_i(\underline{x},t) P(\underline{x},t)) + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^d \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} (D_{ij}(\underline{x},t) P(\underline{x},t)) \quad /3.9/$$

Az ebben a fejezetben előforduló, egydimenziós folyamatokra vonatkozó összefüggések általában a fentiekhez hasonló, egyszerű formális lépésekkel általánosíthatók a d-dimenziós diffúziós folyamatokra.

A /3.2/ Fokker-Planck-egyenlet segítségével más határfeltételek mellett is definiálhatunk Markov-folyamatokat. Például az origóban elhelyezett visszaverő vagy nyelő fallal a folyamatot a pozitív félegyenesre korlátozhatjuk. Ekkor a határfeltételek a következők lesznek:

$$\mathcal{J}(0,t) \equiv 0 \quad , \quad /visszaverő fal/, \quad /3.10a/$$

$$P(0,t) \equiv 0 \quad , \quad /nyelő fal/. \quad /3.10b/$$

**11. feladat** Határozzuk meg a Fokker-Planck-egyenlet megoldásait a  $\sigma^2(x,t) \equiv 0$  esetben /un. drift-folyamat/!

**12. feladat** Vezessük le a diffúziós folyamat  $\langle x^n(t) \rangle$  momentumainak időbeli fejlődését leíró egyenleteket!

**13. feladat** Igazoljuk, hogy a visszaverő vagy nyelő fallal korlátozott folyamat esetében a Fokker-Planck-egyenlet megoldásainak a /3.10a/ ill. /3.10b/ határfeltételeket kell kielégíteniük!

**14. feladat** Bizonyítsuk be, hogy az első elérés idejének  $F(x,t|y)$  eloszlása kielégíti az /1.63/ fordított egyen-

letét:

$$\frac{\partial F(x,t|y)}{\partial y} = b(y) \frac{\partial F(x,t|y)}{\partial y} + \frac{1}{2} \sigma^2(y) \frac{\partial^2 F(x,t|y)}{\partial y^2}, \quad /3.11a/$$

és a következő kezdeti ill. határfeltételeket:

$$F(x,0|y) = \delta(x-y), \quad /3.11b/$$

$$F(x,t|x) = \delta(t) \quad /3.11c/$$

### 3.2 A növekmények eloszlása

Ha az  $x(t)$  Markov-folyamat értéke a  $t'$  időpontban rögzített,  $x(t') = x'$ , akkor a  $(t',t)$  intervallumban elért növekménye független a korábbi eseményektől, és eloszlását a  $P(x,t|x',t')$  átmeneti valószínűség írja le.

A diffúziós folyamat növekményének eloszlását rövid időkre az infinitezimális operátorok segítségével határozhatjuk meg.

Az /1.34/ és /1.44/ összefüggések szerint az  $f(x(t+s))$  véletlen változó feltételes várható értéke így írható:

$$\int f(x) P(x,t+s|x',t) dx = f(x') + A_t f(x') s + \sigma(s) \quad /3.12/$$

A diffúziós folyamat esetében

$$A_t f(x') = b(x',t) f'(x') + \frac{1}{2} \sigma^2(x',t) f''(x') \quad /3.13/$$

A növekmények momentumainak számítása céljából alkalmazzuk ezeket az összefüggéseket a  $f(x) = (x-x')^n$  ( $n=1,2,\dots$ ) függvényekre. Azt kapjuk, hogy

$$\int (x-x')^n P(x,t+s|x',t) dx = \begin{cases} b(x',t)s + \sigma(s) & , \quad n=1, \\ \sigma^2(x',t)s + \sigma(s) & , \quad n=2, /3.14/ \\ \sigma(s) & , \quad n>2. \end{cases}$$

Fordítva is igaz: ha egy Markov-folyamat növekményeinek momentumai eleget tesznek a /3.14/ összefüggéseknek, akkor a Markov-folyamat diffúziós folyamat. Legyen ugyanis  $f(x)$  legalább kétszer folytonosan differenciálható függvény. Akkor

$$\begin{aligned} & \int [f(x) - f(x')] P(x,t+s|x',t) dx = \\ & = \int \left\{ f'(x')(x-x') + \frac{1}{2} f''(x')(x-x')^2 + \sigma(x-x')^3 \right\} P(x,t+s|x',t) dx = \\ & = f'(x') b(x',t)s + \frac{1}{2} f''(x') \sigma^2(x',t)s + \sigma(s) \quad , \end{aligned}$$

amiből a diffúziós folyamatot jellemző /3.13/ összefüggés következik. A növekmények momentumai a kumulánsokat is meghatározzák. Mivel két vagy több momentum szorzata már legfőljebb  $\sigma(s)$  nagyságrendű, /1.12/ értelmében a momentumok és a kumulánsok  $\sigma(s)$  nagyságrendű mennyiségektől eltekintve megagyveznek,

$$k_n = m_n + \sigma(s) \quad /3.15/$$

Ha az  $\sigma(s)$  nagyságrendű mennyiségeket elhagyjuk, a növekmények minden kettőnél magasabb rendű kumulánsa eltűnik, tehát a növekmények eloszlása Gauss-eloszlás:

$$P(x,t+s|x',t) \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi \sigma^2(x',t)s}} e^{-\frac{[x-x'-b(x',t)s]^2}{2 \sigma^2(x',t)s}} \quad /3.16/$$

A diffúziós folyamat növekményének várható értéke és szórása eltűnik, ha a vizsgált intervallum hossza 0-hoz tart. Ezért a diffúziós folyamat trajektóriái majdnem mind folyto-

nosak.

Ezzel szemben a trajektóriák sehol sem differenciálhatóak. Ezt a következő módon mutathatjuk meg. Vizsgáljuk az  $(x-x')/s$  differenciáhányados eloszlását. /3.14/-ből leolvasható, hogy a differenciáhányados várható értéke véges,

$$\lim_{s \rightarrow 0} \frac{1}{s} \langle x-x' \rangle = b(x',t) ,$$

de szórása divergál:

$$\frac{1}{s^2} \langle (x-x')^2 \rangle \sim \frac{\sigma^2(x',t)}{s} \rightarrow \infty$$

Ez azt jelenti, hogy tetszőleges korlátos intervallumot tekintve a differenciáhányados értéke az  $s \rightarrow 0$  határesetben 1 valószínűséggel az intervallumon kívülre esik. /ld. a 15. feladatot/

### 3.3 A Wiener-folyamat

A Wiener-folyamat az

$$A = \frac{1}{2} D \frac{\partial^2}{\partial x^2} , \quad D > 0 , \quad /3.17/$$

infinitezimális operátorral definiált homogén diffúziós folyamat. Az átmeneti valószínűséget meghatározó

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \frac{D}{2} \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} \quad /3.18/$$

egyenletet Fourier-módszerrel oldjuk meg. Az átmeneti valószínűség

$$\Phi(y,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} P(x,t|x') e^{ixy} dx \quad /3.19/$$

Fourier-transzformáltja, ami egyben az átmeneti valószínűség karakterisztikus függvénye, kielégíti a

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} = -\frac{D}{2} y^2 \Phi \quad /3.20/$$

közönséges differenciálegyenletet. /3.4/ értelmében a kezdeti feltétel:

$$\Phi(y,0) = e^{iyx'} \quad /3.21/$$

A /3.20/ egyenletnek a /3.21/ kezdeti feltételt kielégítő megoldása

$$\Phi(y,t) = e^{iyx' - \frac{D}{2} y^2 t} \quad /3.22/$$

Ebből Fourier-transzformációval kapjuk meg az átmeneti valószínűséget:

$$P(x,t|x') = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dy \Phi(y,t) e^{-iyx} = \frac{1}{\sqrt{2\pi Dt}} e^{-\frac{(x-x')^2}{2Dt}} \quad /3.23/$$

A Wiener-folyamat növekménye tehát normális eloszlású, az eloszlás független a kezdeti feltételtől. A növekmény várható értéke nulla, szórása  $\sqrt{Dt}$ .

Jelölje  $w(t)$  a  $w(0)=0$  feltételnek eleget tevő ( $t=0$ -ban az origóra koncentrált eloszlású) Wiener folyamatot, amelyre  $D=1$ . A  $t-Dt'$  változócserevel és a kezdőpontnak az origóba való tolásával minden, kezdetben egy pontra koncentrált Wiener-folyamat  $w(t)$ -re vezethető vissza. A  $w(t+s)-w(s)$  folyamat ( $s$  rögzített,  $t>0$ )  $w(t)$ -vel azonos tulajdonságú Wiener-folyamat. /3.23/-ből következik, hogy

$$\langle w(t) \rangle = 0 \quad /3.24/$$

$$\langle w^2(t) \rangle = t \quad /3.25/$$

A Wiener-folyamat korrelációs függvényét egyszerűen kiszámíthatjuk, ha figyelembe vesszük, hogy növekményei az egymást követő intervallumokban függetlenek:

$$\langle [w(t) - w(s)] w(s) \rangle = \langle w(t) w(s) \rangle - \langle w(s)^2 \rangle = 0, \quad t > s. \quad /3.26/$$

Ebből, /3.25/ felhasználásával, azt kapjuk, hogy

$$\langle w(t) w(s) \rangle = \min(t, s) \quad /3.27/$$

**15. feladat** Számítsuk ki annak valószínűségét, hogy

$$\left| \frac{w(t)}{t} \right| < c$$

Vizsgáljuk meg a  $t \rightarrow 0$  határesetet!

### 3.4 Az Ornstein-Uhlenbeck-folyamat

Az Ornstein-Uhlenbeck-folyamat homogén diffúziós folyamat, melyre

$$b(x) = -\lambda x, \quad /3.28/$$

$$\sigma^2(x) = D > 0. \quad /3.29/$$

A folyamat átmeneti valószínűsége a

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \lambda \frac{\partial}{\partial x} (xP) + \frac{1}{2} D \frac{\partial^2}{\partial x^2} P \quad /3.30/$$

differenciálegyenlet alapmegoldása. Az átmeneti valószínűség

Fourier-transzformáltja, a  $\Phi(y, t)$  karakterisztikus függvény,

megoldása az

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} = -\lambda y \frac{\partial \Phi}{\partial y} - \frac{D}{2} y^2 \Phi \quad /3.31/$$

egyenletnek a

$$\Phi(y, 0) = e^{iyx'} \quad /3.32/$$

kezdeti feltétellel. A /3.31/ egyenletet a  $z = ye^{-\lambda t}$  új változó bevezetésével közönséges differenciálegyenletre vezethetjük vissza.

Legyen

$$\Psi(z, t) \equiv \Phi(z e^{\lambda t}, t) \quad /3.33/$$

Ekkor

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{D}{2} z^2 e^{2\lambda t} \Psi, \quad /3.34/$$

$$\Psi(z, 0) = e^{izx'} \quad /3.35/$$

A /3.34/ egyenletnek a /3.35/ kezdeti feltételt kielégítő megoldása

$$\Psi(z, t) = e^{izx' - \frac{D}{4\lambda} z^2 (e^{2\lambda t} - 1)} \quad /3.36/$$

Ebből a  $z = ye^{-\lambda t}$  helyettesítéssel kapjuk meg az átmeneti valószínűség karakterisztikus függvényét:

$$\Phi(y, t) = \exp\left\{ iy e^{-\lambda t} x' - \frac{D}{4\lambda} (1 - e^{-2\lambda t}) y^2 \right\}. \quad /3.37/$$

A Fourier-transzformálás elvégzése után, az Ornstein-Uhlenbeck-folyamat átmeneti valószínűsége

$$P(x, t | x') = \frac{1}{\sqrt{2\pi V^2(t)}} \exp\left\{ -\frac{(x - x' e^{-\lambda t})^2}{2 V^2(t)} \right\}, \quad /3.38/$$

ahol

$$V^2(t) = \frac{D}{2\lambda} (1 - e^{-2\lambda t}) \quad /3.39/$$

/3.38/ Gauss-eloszlás, amelynek várható értéke és szórása időben változik:

$$\langle x(t) \rangle = x' e^{-\lambda t}, \quad /3.40/$$

$$\langle x(t)^2 \rangle = \langle x(t) \rangle^2 + V^2(t). \quad /3.41/$$

II. táblázat Néhány lineáris diffúziós folyamat megoldása különböző korlátozások esetén

$b(x)$	$\sigma^2(t)$	$A \lesssim x \lesssim B$	$P(x,t y)$	Megjegyzések
$r$	$\sigma^2$	—	$(2\pi\sigma^2 t)^{-1/2} e^{-\frac{(x-y-rt)^2}{2\sigma^2 t}}$	—
$r$	$\sigma^2$	nyelő	$(2\pi\sigma^2 t)^{-1/2} \left( e^{-\frac{(x-y-rt)^2}{2\sigma^2 t}} - e^{-2r(A-y)/\sigma^2} e^{-\frac{(x+y-2A-rt)^2}{2\sigma^2 t}} \right)$	—
$r$	$\sigma^2$	visszaverő	$(2\pi\sigma^2 t)^{-1/2} \left( e^{-\frac{(x-y-rt)^2}{2\sigma^2 t}} + e^{-\frac{(x+y-2A-rt)^2}{2\sigma^2 t}} \right) + (2r/\sigma^2) e^{-2r(x-A)/\sigma^2} (1 - \phi(\xi))$	$\phi(\xi)$ a hibaintegrál $\xi = (x+y-2A+rt)/(\sigma^2 t)^{1/2}$
$r$	$\sigma^2$	nyelő	$(2\pi\sigma^2 t)^{-1/2} \left( e^{-\frac{(x-y-rt)^2}{2\sigma^2 t}} - e^{-2r(B-y)/\sigma^2} e^{-\frac{(x+y-2B-rt)^2}{2\sigma^2 t}} \right)$	—
$r$	$\sigma^2$	visszaverő	$(2\pi\sigma^2 t)^{-1/2} \left( e^{-\frac{(x-y-rt)^2}{2\sigma^2 t}} + e^{-\frac{(x+y+2B-x-y-rt)^2}{2\sigma^2 t}} \right) - (2r/\sigma^2) e^{-2r(B-x)/\sigma^2} \phi\left(\frac{(2B-x-y+rt)/(\sigma^2 t)^{1/2}}{1}\right)$	$\phi$ a hibaintegrál
$r$	$\sigma^2$	nyelő	$(2/L) e^{r(x-y+rt)/2\sigma^2} \cdot \sum_{n=1}^{\infty} \sin[n\pi(x-A)/L] \sin[n\pi(y-A)/L] e^{-(\sigma n\pi/L)^2 t/2}$	$L \equiv B-A$

$r$	$\sigma^2$	visszaverő	nyelő	$(2/L) e^{r(x-y-rt/2)/\sigma^2} \cdot \sum_{n=0}^{\infty} \cos[(2n+1)\pi(x-A)/2L] \cos[(2n+1)\pi(y-A)/2L] e^{-\frac{[(2n+1)\sigma n\pi/2L]^2 t/2}$	$L \equiv B-A$
$r$	$\sigma^2$	nyelő	visszaverő	$(2/L) e^{r(x-y-rt/2)/\sigma^2} \cdot \sum_{n=0}^{\infty} \cos[(2n+1)\pi(B-x)/2L] \cos[(2n+1)\pi(B-y)/2L] e^{-\frac{[(2n+1)\sigma n\pi/2L]^2 t/2}$	$L \equiv B-A$
$-rx$	$\sigma^2$	—	—	$[2\pi V^2(t)]^{-1/2} e^{-\frac{[x-m(t)]V(t)]^2}{2}}$	$m(t) \equiv y e^{-rt}$ $V^2(k) \equiv \sigma^2(1-e^{-2rt})/2r$
$r > 0$	$\sigma^2$	$A=0$	—	$[\sigma\pi V^2(t)]^{-1/2} \left( e^{-\frac{[x-m(t)]V(t)]^2}{2}} + e^{-\frac{[x+m(t)]V(t)]^2}{2}} \right)$	$m(t) \equiv y e^{-rt}$ $V^2(k) \equiv \sigma^2(1-e^{-2rt})/2r$
$-rx$	$\sigma^2$	—	—	$[\sigma\pi V^2(t)]^{-1/2} \left( e^{-\frac{[x-m(t)]V(t)]^2}{2}} - e^{-\frac{[x+m(t)]V(t)]^2}{2}} \right)$	$m(t) \equiv y e^{-rt}$ $V^2(k) \equiv \sigma^2(1-e^{-2rt})/2r$
$r > 0$	$\sigma^2$	$A=0$	nyelő	—	—

Az átmeneti valószínűség  $t \rightarrow \infty$ -re az  $x'$  kezdeti feltételtől független lesz:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} P(x, t | x') = \sqrt{\frac{\lambda}{\pi D}} e^{-\frac{\lambda x^2}{D}} \equiv P^*(x) \quad /3.42/$$

Az /1.2/ fejezetben mondottak szerint ebből az következik, hogy az Ornstein-Uhlenbeck-folyamat ergodikus, azaz egydimenziós eloszlása — a /3.30/ egyenlet megoldása —  $t \rightarrow \infty$ -re tetszőleges kezdeti eloszlás esetén a  $P^*(x)$  határeloszláshoz tart.  $P^*(x)$  egyben stacionárius megoldása a /3.30/ egyenletnek.

Ha kezdeti eloszlásnak  $P^*(x)$ -et választjuk, megkapjuk a stacionárius Ornstein-Uhlenbeck-folyamatot, amely egyben példa a stacionárius Gauss-folyamatra is.

Most kiszámítjuk a stacionárius Ornstein-Uhlenbeck-folyamat korrelációs függvényét. Definíció szerint

$$C(t) \equiv \langle x(t)x(0) \rangle = \int_{x, x'} P_1(x, t; x', 0) dx dx' \quad /3.43/$$

Markov-folyamatról lévén szó,

$$P_1(x, t; x', 0) = P(x, H | x') P^*(x) \quad /3.44/$$

Ezután a /3.38/ és /3.42/ összefüggések felhasználásával az integrálás /3.43/-ban könnyen elvégezhető, és a korrelációs függvényre

$$C(t) = \frac{D}{2\lambda} e^{-\lambda |t|} \quad /3.45/$$

adódik. Eszerint a stacionárius Ornstein-Uhlenbeck folyamatban két esemény között csak akkor van lényeges korreláció, ha a köztük eltelt idő kisebb mint  $1/\lambda$ .

**16. feladat** a) Határozzuk meg annak a diffúziós folyamatnak az átmeneti valószínűségét, amelyre  $b(x) \equiv \gamma$  és  $\sigma^2(x) \equiv \sigma^2$ ! b) Hogyan módosul az átmeneti valószínűség, ha a folyamatot a  $B > 0$  pontba elhelyezett nyelővel az  $x < B$  tartományra korlátozzuk?

**17. feladat** Mutassuk meg, hogy az Ornstein-Uhlenbeck-folyamat várható értékét és korrelációs függvényét tetszőleges kezdeti eloszlás esetén a következő kifejezések adják meg:

$$\langle x(t) \rangle = \langle x(0) \rangle e^{-\lambda t} \quad /3.46/$$

$$k_{1,1}(t, t') = \frac{D}{2\lambda} e^{-\lambda |t-t'|} + e^{-\lambda(t+t')} \left[ \langle x(0)^2 \rangle - \langle x(0) \rangle^2 - \frac{D}{2\lambda} \right] \quad /3.47/$$

**18. feladat** Legyen  $x(t)$  a stacionárius Ornstein-Uhlenbeck folyamat. Mutassuk meg, hogy az

$$y(t) = \int_0^t x(s) ds \quad /3.48/$$

folyamat nem Markov-folyamat!

**19. feladat** Mutassuk meg, hogy az előző feladatban definiált  $y(t)$  folyamat korrelációs függvénye:

$$k_{1,1}(t, t') = \langle y(t) y(t') \rangle = \frac{D}{\lambda^2} \min(t, t') - \frac{D}{\lambda^3} \left( e^{-\lambda |t-t'|} - e^{-\lambda t} - e^{-\lambda t'} + 1 \right) \quad /3.49/$$

### 3.5 A fehér zaj és a Langevin-egyenlet

Fehér zajon általában olyan stacionárius Gauss-folyama-

tot értünk, amelynek várható értéke nulla, spektrális sűrűsége pedig állandó, melynek értékét az általánosítás megszorítása nélkül most  $1/2\pi$ -nek választjuk.

Jelölje a fehér zajt  $\{t\}$ . Ekkor tehát

$$\langle \{t\} \rangle = 0 \quad /3.50/$$

és

$$f(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} c(t) e^{-i\omega t} dt = \frac{1}{2\pi} \quad /3.51/$$

Mivel a fehér zaj Gauss-folyamat, kettőnél magasabb rendű kumulánsai eltűnnek. Korrelációs függvénye, /3.51/-ből,

$$C(t) = \langle \{t\} \{0\} \rangle = \delta(t) \quad /3.52/$$

A fehér zaj spektrumában minden frekvencia azonos súllyal szerepel, innen ered a "fehér" jelző.

Vizsgáljuk most az

$$\int_0^t \{s\} ds \quad /3.53/$$

véletlen folyamatot. Könnyen beláthatjuk, hogy az így definiált folyamat Gauss-folyamat, mivel kettőnél magasabb rendű kumulánsai mind eltűnnek. Továbbá

$$\langle \int_0^t \{s\} ds \rangle = \int_0^t \langle \{s\} \rangle ds = 0 \quad ; \quad /3.54/$$

és /3.52/ felhasználásával,

$$\langle \int_0^t \{u\} du \int_0^s \{v\} dv \rangle = \min(t, s) \quad /3.55/$$

Fölidézve a /3.24/ és /3.27/ összefüggéseket, a /3.53/-ban definiált folyamatot a  $w(t)$  Wiener-folyamattal azonosítjuk:

$$w(t) = \int_0^t \{s\} ds \quad , \quad /3.56/$$

vagy differenciális formában,

$$dw(t) = \{t\} dt. \quad /3.57/$$

Eszerint a  $\{t\}$  fehér zaj trajektóriái a  $w(t)$  Wiener-folyamat trajektóriáinak deriváltjai, vagy röviden, a fehér zaj a Wiener-folyamat deriváltja.

Láttuk azonban a /3.2 / fejezetben, hogy a Wiener-folyamat trajektóriái sehol sem differenciálhatóak, így tehát a fehér zaj közönséges véletlen folyamatként nem értelmezhető. Erre már abból is következtethettünk volna, hogy a fehér zaj korrelációs függvénye Dirac-delta.

A Wiener-folyamat deriváltja, és így a fehér zaj szigorúan csak az általánosított függvények /disztribúciók/ segítségével értelmezhető. Ezt a témakört csak néhány utalás erejéig érintjük. A Wiener-folyamat trajektóriái folytonosak, tehát lokálisan integrálhatóak, és mint ilyenek, reguláris disztribúciókat definiálnak. Ezeknek a disztribúcióknak már -általánosított értelemben- van deriváltjuk, ezek lesznek a fehér zaj "trajektóriáinak" megfelelő disztribúciók. Mivel a Wiener-folyamat trajektóriái közönséges értelemben sehol sem differenciálhatóak, a fehér zaj "trajektóriái" nem regulárisak, azaz nem ábrázolhatók közönséges függvények segítségével. Ezért a /3.56/ és /3.57/ összefüggések csak szimbólikus jelentéssel rendelkeznek. Látjuk azonban, hogy a fehér zaj, mint általánosított folyamat, nem esik "messze" a közönséges folyamatoktól, mivel egyetlen integrálás "simitó" hatása elegendő ahhoz, hogy közönséges folyamatra, nevezetesen a  $w(t)$  Wiener-folyamatra vezessük vissza.



A fehér zaj másképpen is kapcsolatba hozható közönséges folyamatokkal. Vannak ugyanis olyan közönséges stacionárius Gauss-folyamatok, amelyek jól közelítik a fehér zajt.

Vizsgáljuk meg ebből a szempontból a stacionárius Ornstein-Uhlenbeck-folyamatot. /1.: a 3.4 fejezet/. A folyamat várható értéke nulla, korrelációs függvénye pedig /3.45/ szerint:

$$C(t) = \frac{D}{2\lambda} e^{-\lambda|t|} \quad /3.58/$$

A folyamat spektrális sűrűsége

$$f(\omega) = \frac{1}{2\pi} \frac{D}{\omega^2 + \lambda^2} \quad /3.59/$$

Végezzük el most a  $\lambda \rightarrow \infty, D/\lambda^2 \rightarrow 1$  határátmenetet. Ekkor

$$f(\omega) \rightarrow \frac{1}{2\pi} \quad /3.60/$$

$$C(t) \rightarrow \begin{cases} 0, & \text{ha } t \neq 0 \\ \infty, & \text{ha } t = 0 \end{cases} \quad /3.61/$$

miközben

$$\int_{-\infty}^{+\infty} C(t) dt \rightarrow 1 \quad /3.62/$$

A /3.61/ és /3.62/ összefüggésekből következik, hogy

$$C(t) \rightarrow \delta(t) \quad /3.63/$$

tehát a stacionárius Ornstein-Uhlenbeck-folyamat az adott határesetben a fehér zajt állítja elő.

Nézzük most az

$$Y(t) = \int_0^t \zeta(s) ds \quad /3.64/$$

folyamatot, ahol  $\zeta(s)$  a stacionárius Ornstein-Uhlenbeck-folyamat.  $Y(t)$  is Gauss-folyamat, várható értéke nulla.

/3.49/ szerint a folyamat korrelációs függvénye

$$\langle Y(t)Y(s) \rangle = \frac{D}{\lambda^2} \left\{ \min(t,s) - \frac{1}{2\lambda} \left( 1 + e^{-\lambda|t-s|} - e^{-\lambda t} - e^{-\lambda s} \right) \right\} \quad /3.65/$$

A  $\lambda \rightarrow \infty, D/\lambda^2 \rightarrow 1$  határátmenetet elvégezve

$$\langle Y(t)Y(s) \rangle \rightarrow \min(t,s) \quad /3.66/$$

tehát /3.66/-tal összhangban, az  $Y(t)$  folyamat az adott határesetben a Wiener-folyamatot állítja elő.

Ez a példa azt mutatja, hogy vannak olyan közönséges stacionárius Gauss-folyamatok, amelyek egy meghatározott határátmenet végrehajtása után a fehér zajt állítják elő. A /3.50/-/3.57/ összefüggéseknek most már a szimbolikusnál több értelmet tulajdoníthatunk, ugyanis ezek az összefüggések úgy is megkaphatók, ha a számításokat a fehér zajt közelítő közönséges stacionárius Gauss-folyamatokkal végezzük el, és csak a számítások végén hajtjuk végre azt a határátmenetet, amely a közönséges folyamatot a fehér zajba viszi át.

A stacionárius, független növekményű folyamatok deriválása általában fehér spektrumu zajokat eredményez. Ha a Wiener-folyamatból indulunk ki, akkor az itt tárgyalt Gauss-típusú fehér zajt kapjuk meg. Vannak azonban más /nem Gauss-típusú/ fehér zajok is, pl. a Poisson fehér zaj, amit a Poisson-folyamat deriválásával állíthatunk elő. Mi a továbbiakban mindig a /3.50/ -/3.56/ egyenletekkel definiált Gauss-típusú fehér-zajjal fogunk foglalkozni.

A véletlen külső zavar hatása alatt álló dinamikai rendszereket sok esetben az

$$\dot{x}(t) = f(x(t), y(t), t) \quad /3.67/$$

elsőrendű differenciálegyenlettel írjuk le, ahol  $y(t)$  ismert tulajdonságu véletlen folyamat. /3.67/-et stochasztikus differenciálegyenletnek nevezük.

Ha az  $y(t)$  véletlen folyamat trajektóriái folytonosak, akkor  $y(t)$  minden adott trajektóriája esetén /3.67/ közönséges differenciálegyenletnek tekinthető, amely  $x(t)$  egy-egy trajektóriáját határozza meg.

A helyzet egészen más, ha a stochasztikus differenciálegyenletben szereplő véletlen folyamat a  $\{t\}$  fehér zaj. Ebben az esetben olyan stochasztikus differenciálegyenletekre szorítkozunk, amelyekben a zaj lineárisan szerepel:

$$\dot{x}(t) = b(x(t), t) + \sigma(x(t), t) \{t\} . \quad /3.68/$$

Ezt az egyenletet Langevin-egyenletnek nevezük. /3.68/-at a  $\{t\}$  általánosított folyamat jelenléte miatt nem tekinthetjük úgy, mint egy közönséges differenciálegyenletet. Ezért mindennek előtt meg kell mondanunk, hogy mi a pontos jelentése a /3.68/ Langevin-egyenletnek. Erre több lehetőség is kínálkozik.

A  $\{t\}$  fehér zajt formálisan kiküszöbölhetjük, ha a Langevin-egyenletet integrál egyenlet formájába írjuk át. /3.57/ felhasználásával azt kapjuk, hogy

$$x(t) = x(t_0) + \int_{t_0}^t b(x(s), s) ds + \int_{t_0}^t \sigma(x(s), s) d\omega(s) , \quad /3.69/$$

vagy differenciális alakban:

$$d x(t) = b(x(t), t) dt + \sigma(x(t), t) d\omega(t) . \quad /3.70/$$

Megmutatható, hogy /3.69/-ben a második integrál nem értel-

mezhető közönséges Stieltjes-integrálként, mivel közelítő összegének határértéke függ a közbülső pontok megválasztásától. Ezért új integrálfogalom bevezetésére van szükség. Az

$$\int_{t_0}^t G(s) d\omega(s) \quad /3.71/$$

alaku stochasztikus integrálok többféleképpen is definiálhatók. Két változatuk terjedt el, amelyek K.Ito ill. R.L. Stratonovich nevéhez fűződnek.

A /3.68/ Langevin-egyenletet szimbólikus egyenletnek tekintjük, amelynek valódi jelentését a stochasztikus integrálok segítségével a /3.69/ integrálegyenlet, illetve ennek differenciális változata, a /3.70/ egyenlet adja meg. A következő két fejezetben részletesebben beszélni fogunk a stochasztikus integrálásról és a Langevin-egyenlet Ito-ill. Stratonovich-féle értelmezéséről. Nem fogunk szigorú alapozást végezni. Célnünk, mint eddig is, inkább az, hogy néhány alapvető, és az egyszerű alkalmazások megértéséhez szükséges fogalmat vagy összefüggést levezessünk és elmagyarázzunk.

A /3.68/ Langevin-egyenletnek a stochasztikus integrálás fogalmának bevezetése nélkül is adhatunk értelmet, ha a fehér zajt "regularizáljuk", azaz egy közönséges, "majdnem delta" korrelációju stacionárius Gauss-folyamattal helyettesítjük, pl. a stacionárius Ornstein-Uhlenbeck-folyamattal. Ekkor a Langevin-egyenlet közönséges differenciálegyenletként kezelhető, ami kétségtelen könnyebbség. Egy másik indíték a fehér zaj "regularizálására", hogy a valódi fizikai folyamatok általában simák, és a fehér zaj többnyire csak közelítése egy

olyan zajnak, amelynek korrelációs ideje a minket érdeklő időskálán elhanyagolható.

A 3.7 fejezetben meg fogjuk mutatni, hogy ha a Langevin-egyenletnek a fehér zaj "regularizálása" után kapott megoldásában végrehajtjuk azt a határátmenetet, amely a "majdnem delta" korrelációjú zajt a fehér zajba viszi át, akkor az eredeti Langevin-egyenlet Stratonovich-féle megoldását kapjuk vissza.

Tekintsük ismét a /3.67/ stochasztikus differenciálegyenletet. Rögzítsük  $x(t)$  értékét:

$$x(t) = x' \quad /3.72/$$

Az  $x(t)$  folyamat Markov-folyamat, ha  $x(t+h)$ , amely közelítőleg

$$x(t+h) \approx x' + f(x', y(t), t) h,$$

független mindattól, ami a  $t$  időpont előtt történt. Ez akkor és csak akkor teljesül ha  $y(t)$  minden időpontban független más időpontokban fölvevett értékeitől. /3.52/-öt fölidézve, láthatjuk, hogy a /3.68/ Langevin-egyenlet Markov-folyamatot definiál.

### 3.6 Az Ito-féle stochasztikus differenciálegyenlet

Az előző fejezetben a Langevin-egyenletet a következő alakba irtuk át:

$$dx(t) = b(x(t), t) dt + \sigma(x(t), t) dw(t) \quad /3.74/$$

A Langevin-egyenlet Ito-féle értelmezése szerint /3.74/ pontos jelentése a következő:

$$dx(t) = x(t+dt) - x(t) =$$

$$= b(x(t), t) dt + \sigma(x(t), t) (w(t+dt) - w(t)) + \sigma(t) \quad /3.75/$$

ahol  $\sigma(dt)$  olyan mennyiséget jelöl, amelynek minden kumulánása  $dt$ -vel osztva is nullához tart. A /3.74/ egyenletet, az Ito-féle értelmezésben, Ito-féle stochasztikus differenciálegyenletnek /röviden: Ito-SDE/ fogjuk nevezni.

Az Ito-féle értelmezésnek nagyon lényeges pontja, hogy /3.75/-ben  $dw(t)$  együtthatójának  $t$  időpontbeli értéke,  $\sigma(x(t), t)$  szerepel. Ha  $w(t)$  sima függvény lenne, akkor a  $\sigma$  függvény akár-melyik,  $(t, t+dt)$  intervallumon fölvevett értékét beírhatnánk, mivel ez csak  $\sigma(dt)$  nagyságrendű változást eredményezne /3.75/ jobboldalán. A következő 3.7 fejezet elején látni fogjuk, hogy mivel  $w(t)$  a Wiener-folyamat, a  $\sigma$  függvény más időpontbeli értékének beírása /3.75/ jobboldalát  $dt$ -vel arányos mértékben is megváltoztathatja.

A /3.75/ összefüggésből azonnal látszik, hogy az Ito-SDE Markov-folyamatot definiál. Ugyanis ha a folyamat  $t$  időpontbeli értéke,  $x(t)$  adott, akkor a folyamat kis  $dt$  idő alatti növekményét teljes mértékben a Wiener-folyamat növekménye határozza meg, ez pedig minden további eseménytől független.

A Wiener-folyamat  $dw(t)$  növekménye Gauss-eloszlást követ. Mivel  $\langle dw(t) \rangle = 0$ , a növekmény páratlan hatványainak várható értéke nulla, páros hatványainak várható értéke pedig a páronkénti várható értékek szorzatára bomlik fel. /3.25/ felhasználásával

$$\langle d\omega(t)^{2n} \rangle = 1 \cdot 3 \cdot 5 \cdot \dots \cdot (2n-1)(dt)^n, \quad n \geq 1. \quad /3.76/$$

Vizsgáljuk most  $d\omega(t)^2$ -et, mint véletlen változót. Várható értéke

$$\langle d\omega(t)^2 \rangle = dt, \quad /3.77/$$

szórása pedig, /3.76/ felhasználásával,

$$\langle d\omega(t)^4 \rangle - \langle d\omega(t)^2 \rangle^2 = 2(dt)^2 = \sigma(dt). \quad /3.78/$$

Ezért, ha az  $\sigma(dt)$  nagyságrendű mennyiségeket elhagyjuk, akkor  $(d\omega(t))^2$  helyére mindig a várható értékét írhatjuk:

$$d\omega(t)^2 = dt. \quad /3.79/$$

Hasonlóképpen láthatjuk be, hogy ugyanebben a közelítésben

$$dt d\omega(t) = 0, \quad /3.80/$$

$$d\omega(t)^n = 0, \quad n > 2. \quad /3.81/$$

Legyen  $f(x)$  egy sima függvény. Számítsuk ki a függvény

$$df(x(t)) = f(x(t+dt)) - f(x(t)) \quad /3.82/$$

növekményét  $\sigma(dt)$  pontossággal. Ehhez a függvényt Taylor-sorba fejtjük:

$$df(x) = f'(x) dx + \frac{1}{2} f''(x) d^2x + \dots, \quad /3.83/$$

majd a kapott kifejezésbe  $dx$ -nek a /3.74/ Ito-SDE által meghatározott alakját behelyettesítjük. A /3.79/-/3.81/ számolási szabályok figyelembe vételével azt kapjuk, hogy

$$df(x(t)) = f'(x(t)) b(x(t), t) dt + f'(x(t), t) \sigma(x(t), t) d\omega(t) + \frac{1}{2} f''(x(t)) \sigma^2(x(t), t) dt + \sigma(dt). \quad /3.84/$$

Ez a stochasztikus differenciálás ún. Ito-formulája. Az  $f''$ -t tartalmazó tag /3.79/ következménye, a közönséges differen-

ciálás során nem lépne fel.

A továbbiakban a  $\sigma(dt)$  mennyiségeket nem fogjuk kiírni.

Ha az  $x(t)$  folyamat helyére a Wiener-folyamatot írjuk,  $b=0$  és  $\sigma=1$  lesz és /3.84/ így módosul:

$$df(\omega(t)) = f'(\omega(t)) d\omega(t) + \frac{1}{2} f''(\omega(t)) dt. \quad /3.85/$$

A szemléltetés kedvéért legyen például  $f(\omega) = \omega^2$ . Ekkor

$$d(\omega(t)^2) = 2\omega(t) d\omega(t) + dt. \quad /3.86/$$

Az Ito-formula segítségével meghatározhatjuk az Ito-SDE által leírt Markov-folyamat infinitezimális operátorát. Legyen  $x(t) = x^1$  rögzített. Az infinitezimális operátor /1.40/ definíciója szerint

$$\langle f(x(t+dt)) \rangle = f(x^1) + A_t f(x^1) dt. \quad /3.87/$$

Másrészt, a /3.84/ Ito-formula átlagolásával azt kapjuk, hogy

$$\langle f(x(t+dt)) \rangle = f(x^1) + b(x^1, t) f'(x^1) dt + \frac{1}{2} \sigma^2(x^1, t) f''(x^1) dt. \quad /3.88/$$

A két kifejezés összehasonlításából a folyamat infinitezimális operátora

$$A_t = b(x^1, t) \frac{\partial}{\partial x^1} + \frac{1}{2} \sigma^2(x^1, t) \frac{\partial^2}{\partial x^{12}}, \quad /3.89/$$

tehát, /1.53/ értelmében, az Ito-SDE diffúziós folyamatot

határoz meg. A folyamat Fokker-Planck-egyenlete:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial x} (bP) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} (\sigma P). \quad /3.90/$$

Az Ito-SDE és Fokker-Planck-egyenlet a diffúziós folyamat egyenértékű leírásai. A kettő szemlélete erősen különbözik. A Fokker-Planck-egyenlet az átmeneti valószínűség időbeli fejlődését írja le, és ezen keresztül az összes véges dimenziós eloszlás közvetlen konstrukcióját teszi lehetővé. Az Ito-SDE ezzel szemben az állapot fejlődésére vonatkozik. El-

járást ad arra, hogy a diffúziós folyamat trajektóriáit a Wiener-folyamat trajektóriával kifejezzük.

Az Ito-SDE-nek megfelelő integrálegyenlet felírásához értelmezni kell az

$$\int_{t_0}^t g(s) ds \quad /3.91/$$

integrált, ahol  $g(s)$  egy véletlen folyamat. Az Ito-féle stochasztikus integrált a szokásos közelítő összeg határértéke definiálja, azzal a további megkötéssel, hogy a  $g(s)$  folyamatnak mindig az intervallumok alsó határán fölött értékeit kell beírni.

$$\int_{t_0}^t g(s) d\omega(s) = \lim_{\delta \rightarrow 0} \sum_{i=1}^n g(s_{i-1}) (\omega(s_i) - \omega(s_{i-1})) ,$$

$$t_0 < s_0 < s_1 < \dots < s_i < \dots < s_n = t \quad , \quad \delta = \max_i (s_i - s_{i-1}) \quad /3.92/$$

A /3.93/-beli  $\lim$  úgy értendő, hogy nullához tart annak valószínűsége, hogy a két oldal különbsége egy tetszőleges  $\epsilon > 0$  számnál nagyobb legyen. Megmutatható, hogy a /3.92/ definíció egyértelmű, ha  $g(t)$  folytonos trajektóriájú folyamat, amely "nem tekint előre", azaz, amely független minden későbbi ( $t' > t$ ) eseménytől.

A stochasztikus integrálok kiszámítására nincs általános módszer. Ez azonban a közönséges Riemann-integrálok esetében is így van. A /3.92/ definíciót azonban mindig felhasználhatjuk arra, hogy a stochasztikus integrált tetszőleges pontossággal közelítsük. Hasznos összefüggést kaphatunk az Ito-formula /3.85/ változatának felhasználásával.

Eszerint

$$\int_0^t f(\omega(s)) d\omega(s) = f(\omega(t)) - f(\omega(0)) - \frac{1}{2} \int_0^t f''(\omega(s)) ds \quad /3.93/$$

Ez az összefüggés a  $\omega(s)$  szerinti stochasztikus integrált közönséges integrálra vezeti vissza.

Az Ito-SDE-nek megfelelő integrálegyenlet

$$x(t) = x(t_0) + \int_{t_0}^t b(x(s), s) ds + \int_{t_0}^t \sigma(x(s), s) d\omega(s) \quad /3.94/$$

Bebizonyítható, hogy a /3.94/ integrálegyenlet megoldása eléggé általános feltételek mellett egyértelmű és iterációs eljárással tetszőleges pontossággal megközelíthető.

Homogén folyamatok esetében az Ito-SDE -t közönséges differenciálegyenletre vezethetjük vissza, ha  $\sigma(x)$  nem vált előjelet. Legyen pl.  $\sigma(x) > 0$ . A

$$\Psi'(x) = \frac{1}{\sigma(x)} \quad /3.95/$$

differenciálegyenlettel meghatározott  $\Psi(x)$  függvény monoton növekszik, ezért invertálható. Vizsgáljuk az

$$y(t) = \Psi(x(t)) \quad /3.96/$$

folyamatot. A /3.84/ Ito-formula felhasználásával azt kapjuk, hogy

$$d\Psi(x(t)) = \left[ \frac{b(x(t))}{\sigma(x(t))} - \frac{1}{2} \sigma'(x(t)) \right] dt + d\omega(t) \quad /3.97/$$

Eszerint  $y(t)$  kielégíti a

$$dy(t) = \tilde{b}(y(t)) dt + d\omega(t) \quad /3.98/$$

Ito-SDE-t, ahol

$$\tilde{b}(y) = \left[ \frac{b(x)}{\sigma(x)} - \frac{1}{2} \sigma'(x) \right] \Big|_{x=\Psi^{-1}(y)} \quad /3.99/$$

Az

$$u(t) = y(t) - w(t) \quad /3.100/$$

folyamat viszont már közönséges differenciálegyenletet elégít ki:

$$\frac{d u(t)}{dt} = \tilde{b}(u(t) + w(t)). \quad /3.101/$$

A  $w(t)$  folyamat egy adott folytonos trajektóriáját behelyettesítve, /3.101/-t a közönséges differenciálegyenletek elméletéből ismert módszerekkel oldhatjuk meg. /3.96/ és /3.100/ felhasználásával pedig megkapjuk az  $x(t)$  folyamat megfelelő trajektóriáját:

$$x(t) = \Psi^{-1}(u(t) + w(t)) \quad /3.102/$$

**20. feladat**  
stokasztikus integrált!

Számítsuk ki az  $\int_0^t w(s) dw(s)$  stochasztikus integrált!

**21. feladat**

Határozzuk meg a

$$dx = -\lambda x dt + D dw$$

Ito-SDE  $x(0) = x'$  kezdeti feltételt kielégítő megoldását! A megoldás alapján írjuk fel a folyamat átmeneti valószínűségét!

**22. feladat**

Oldjuk meg a  $dx = x dw$

Ito-SDE-t az  $x(0) = 1$  kezdeti feltétel mellett!

/Utmutatás a 21. és 22. feladatokhoz: Vezessük vissza az Ito-SDE-t közönséges differenciálegyenletre/

### 3.7 A Stratonovich-SDE és a Langevin-egyenlet regularizálása

A /3.70/ Langevin-egyenlet Stratonovich-féle értelmezését Stratonovich-féle stochasztikus differenciálegyenletnek /röviden: Stratonovich-SDE/ fogjuk nevezni és szimbólikusan így fogjuk írni:

$$(S) \quad dx(t) = b(x(t), t) dt + \sigma(x(t), t) dw(t). \quad /3.103/$$

A Stratonovich-SDE pontos jelentése a következő:

$$dx(t) = x(t+dt) - x(t) = b(x(t), t) dt + \sigma\left(\frac{x(t) + x(t+dt)}{2}, t\right) (w(t+dt) - w(t)) + o(dt). \quad /3.104/$$

Ha  $x(t)$  értékét rögzítjük, akkor /3.104/ implicit egyenlet  $x(t+dt)$ -re.  $x(t+dt)$  értékét  $x(t)$ -n kívül csak a Wiener-folyamat növekménye befolyásolja, ezért független minden  $t$  időpont előtti eseménytől. A Stratonovich-SDE tehát Markov-folyamatot határoz meg.

Fejtsük sorba  $dw(t)$  együtthatóját:

$$\sigma\left(\frac{x(t) + x(t+dt)}{2}, t\right) = \sigma(x(t), t) + \frac{1}{2} \sigma'(x(t), t) dx(t) + \dots, \quad /3.105/$$

ahol  $\sigma'(x, t) = \frac{\partial \sigma}{\partial x}(x, t)$ . /3.105/-t a /3.104/ egyenletbe helyettesítve, az egyenlet jobboldalán  $dx(t)$  már csak lineárisan szerepel, és a /3.79/-/3.81/ számolási szabályok figyelembevételével, iterálással eltávolítható. Az eredmény:

$$dx(t) = x(t+dt) - x(t) = \left[ b(x(t), t) + \frac{1}{2} \sigma(x(t), t) \sigma'(x(t), t) \right] dt + \sigma(x(t), t) dw(t) + o(dt)$$

Találtunk tehát egy olyan Ito-féle stochasztikus differenciál-egyenletet, amely ugyanazt az  $x(t)$  folyamatot határozza meg, mint a /3.104/ egyenlet. Következésképpen, a Stratonovich-SDE diffúziós folyamatot definiál, amelynek infinitezimális operátora:

$$A_t = \left[ b(x,t) + \frac{1}{2} \sigma(x,t) \sigma'(x,t) \right] \frac{\partial}{\partial x} + \frac{1}{2} \sigma^2(x,t) \frac{\partial^2}{\partial x^2} \quad /3.107/$$

/3.75/ és /3.104/ egybevetésével látható, hogy ha  $\sigma(x,t) \equiv \sigma(t)$ , akkor az Ito-SDE és a Stratonovich-SDE között nincs sem formai, sem értelmezésbeli különbség.

A /3.104/ egyenlet megoldásához egy vele összhangban álló stochasztikus integrált kell bevezetni. Ez az ún. Stratonovich-féle stochasztikus integrál is közelítő összegek határértékével van definiálva. Legyen  $g(x(t), t)$  egy  $x(t)$  diffúziós folyamat sima függvénye. Ekkor

$$(S) \int_{t_0}^t g(x(s), s) dw(s) = \lim_{\delta \rightarrow 0} \sum_{i=1}^n g\left(\frac{x(s_i) + x(s_{i-1})}{2}, s_{i-1}\right) (w(s_i) - w(s_{i-1})),$$

$$t_0 = s_0 < s_1 < \dots < s_n = t, \quad \delta = \max_i (s_i - s_{i-1}). \quad /3.108/$$

Az Ito-féle stochasztikus integráltól való megkülönböztetés érdekében az integráljel elé egy  $(S)$  jelet teszünk. A két-féle stochasztikus integrál /3.92/ és /3.108/ definíciói a közbülső pontok megválasztásában különböznek egymástól, a választás mindkét esetben a megfelelő stochasztikus differenciálegyenlettel van összhangban.

A Stratonovich-féle stochasztikus integrál kapcsolatba hozható az Ito-féle integrállal. Legyen  $x(t)$  a /3.75/ Ito- vagy a /3.104/ Stratonovich-SDE megoldása. Akkor a /3.79/-

-/3.81/ számolási szabályok felhasználásával

$$g\left(\frac{x(t) + x(t+dt)}{2}, t\right) dw(t) = g(x(t), t) dw(t) + \frac{1}{2} g'(x(t), t) \sigma(x(t), t) dt + \sigma(dt) \quad /3.109/$$

ahol  $g'(x, t) = \frac{\partial g}{\partial x}(x, t)$ . /3.108/-ban a közelítőösszeg tagjait ily módon átírva és /3.92/-vel összehasonlítva, azt kapjuk, hogy

$$(S) \int_{t_0}^t g(x(s), s) dw(s) = \int_{t_0}^t g(x(s), s) dw(s) + \frac{1}{2} \int_{t_0}^t g'(x(s), s) \sigma(x(s), s) ds. \quad /3.110/$$

A Stratonovich-féle stochasztikus integrál előnye, hogy sok esetben formálisan úgy kezelhető, mint egy közönséges Riemann-Stieltjes-integrál. Legyen például  $f(w(t))$  a Wiener-folyamat sima függvénye. Alkalmazzuk /3.110/-et  $f'(w(t))$ -re:

$$(S) \int_0^t f'(w(s)) dw(s) = \int_0^t f'(w(s)) dw(s) + \frac{1}{2} \int_0^t f''(w(s)) ds. \quad /3.111/$$

Kihasználtuk, hogy a Wiener-folyamat esetében  $\sigma \equiv 1$ . A jobboldalon álló Ito-féle integrált a /3.93/ összefüggés közönséges integrálra vezeti vissza. Ennek felhasználásával:

$$(S) \int_0^t f'(w(s)) dw(s) = f(w(t)) - f(0). \quad /3.112/$$

A /3.104/ Stratonovich-SDE-vel egyenértékű integrálegyenlet a következő:

$$x(t) = x(t_0) + \int_{t_0}^t b(x(s), s) ds + (S) \int_{t_0}^t \sigma(x(s), s) dw(s). \quad /3.113/$$

A Stratonovich-SDE megoldását a /3.113/ egyenlet iterálásával kaphatjuk meg. Bizonyos esetekben a /3.104/ egyenlet közvetlenül is integrálható.

Vizsgáljuk most a Langevin-egyenlet regularizált változatát:

$$\dot{x}(t) = b(x(t), t) + \sigma(x(t), t) \xi(t), \quad /3.114/$$

ahol  $\xi(t)$  egy közönséges stacionárius Gauss-folyamat "majdnem delta" korrelációs függvényvel. Tételezzük fel, hogy alkalmas határátmenetet elvégezve,  $\xi(t)$  a fehér zajt állítja elő, azaz

$$\langle \xi(t) \xi(s) \rangle \rightarrow \delta(t-s). \quad /3.115/$$

Ilyen tulajdonságokkal rendelkezik pl. a stacionárius Ornstein-Uhlenbeck-folyamat, amelyet a 3.4. és a 3.5. fejezetben részletesen tárgyaltunk.

/3.114/-et közönséges differenciálegyenletként kezelhetjük. Megoldásának sima trajektóriái vannak. A 3.5. fejezet végén mondottak értelmében a megoldás nem Markov-folyamat, mivel a  $\xi(t)$  zaj korrelációs ideje véges. Ha azonban a megoldásban elvégezzük azt a határátmenetet, amely  $\xi(t)$ -t a fehér zajba viszi át, akkor a folyamat Markov-folyamat lesz.

A Langevin-egyenlet regularizálással kapott megoldása diffúziós folyamat. Ezt, az egyszerűség kedvéért, csak abban az esetben igazoljuk, amikor a  $\xi(t)$  zaj a stacionárius Ornstein-Uhlenbeck folyamat. Számítsuk ki  $x(t+s) - x(t)$  hatványainak várható értékét  $\sigma(s)$  pontossággal!  $x(t+s)$  értékét a /3.114/ egyenlettel egyenértékű

$$x(t+s) = x(t) + \int_t^{t+s} b(x(u), u) du + \int_t^{t+s} \sigma(x(u), u) \xi(u) du \quad /3.116/$$

integrálegyenlet iterálásával határozzuk meg. A kiindulás legyen

$$x^{(0)}(t+s) \equiv x(t) = x^1 \quad /3.117/$$

Mivel az integrálásokat  $\sigma(s)$  pontossággal kell elvégezni, az integrálandó függvényeket az  $x^1(t)$  hely körül sorba fejtjük. Azok az integrálok, amelyekben  $u-t$  jelenik meg,  $\sigma(s)$  nagyságrendűek, s így elhagyhatók. A zaj hatványainak járulékait  $x(t+s) - x(t)$  hatványainak várható értékeiben külön meg kell

becsülnünk. Tekintsük például a

$$\left\langle \int_t^{t+s} \xi(u) \int_t^u \xi(v) dv du \right\rangle \quad /3.118/$$

várható értéket. Az

$$y(u) = \int_t^{t+u} \xi(v) dv \quad /3.119/$$

új folyamat bevezetésével /3.118/ így írható:

$$\left\langle \int_0^{y(s)} y^1 dy^1 \right\rangle = \frac{1}{2} \langle y(s)^2 \rangle. \quad /3.120/$$

Ezt a várható értéket a 18. feladatban kiszámoltuk (1./3.49/-et):

$$\langle y(s)^2 \rangle = \frac{D}{\lambda^2} (s - \frac{1}{\lambda} (1 - e^{-\lambda s})). \quad /3.121/$$

A stacionárius Ornstein-Uhlenbeck-folyamatot a fehér zajba átvivő  $\lambda \rightarrow \infty, D/\lambda^2 \rightarrow 1$  határátmenetet elvégezve

$$\langle y(s)^2 \rangle \rightarrow s. \quad /3.122/$$

Hasonlóképpen becsülhetők meg a  $\xi(u)$  zaj második hatványát tartalmazó más kifejezések is. Az eredmény mindig az,



hogy a kifejezések járuléka  $S$ -sel arányos. Mivel  $\xi(u)$  Gauss-folyamat nulla várható értékkel, páratlan hatványainak várható értéke nulla, páros hatványainak várható értékei pedig páronkénti várható értékek szorzataira esnek szét. Ezért az iterálással kapott megoldásban a zaj kettőnél magasabb hatványát tartalmazó kifejezéseket már nem kell megtartanunk.

A fentiek figyelembevételével a megoldás így írható

$$x(t+s) = x^1 + b(x^1, t)S +$$

$$\sigma(x^1, t) \left[ y(s) + \frac{1}{2} \sigma'(x^1, t) y^2(s) + b'(x^1, t) \int_t^{t+s} y(u) du \right] + o(s). \quad /3.123/$$

E kifejezés birtokában már könnyű a kívánt várható értékek kiszámítása

$$\langle (x(t+s) - x^1)^n \rangle = \begin{cases} [b(x^1, t) + \frac{1}{2} \sigma'(x^1, t) \sigma(x^1, t)] s + o(s), & n=1, \\ \sigma(x^1, t) s + o(s), & n=2 \\ o(s), & n>2. \end{cases} \quad /3.124/$$

Fölidézve a /3.13/ és /3.14/ összefüggéseket, láthatjuk, hogy az  $x(t)$  folyamat diffúziós folyamat, amelynek infinitezimális operátora /3.107/-tel egyezik meg. Ebből az is következik, hogy a /3.114/ regularizált Langevin-egyenlet megoldása a megfelelő határátmenet elvégzése után megegyezik a /3.103/ Stratonovich-SDE megoldásával.

Ezen a ponton érdemes összefoglalni a diffúziós folyamatok leírásának eddig megismert változatait. Legyen az  $x(t)$  diffúziós folyamat infinitezimális operátora

$$A_x = b(x, t) \frac{\partial}{\partial x} + \sigma^2(x, t) \frac{\partial^2}{\partial x^2}. \quad /3.125/$$

Az így definiált diffúziós folyamat leírására egyaránt használhatjuk:

1., a Fokker-Planck-egyenletet:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial x} (bP) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} (\sigma^2 P), \quad /3.126/$$

2., az Ito-SDE-t:

$$dx(t) = b dt + \sigma dw(t), \quad /3.127/$$

3., a Stratonovich-SDE-t:

$$(S) dx(t) = (b - \frac{1}{2} \sigma \sigma') dt + \sigma dw(t). \quad /3.128/$$

(A harmadik változatot /3.104/ és /3.106/ összehasonlításával és némi átjelölés elvégzésével kapjuk.) Megjegyezzük, hogy 2., és 3., nem jelent különböző leírást, ha  $\sigma(x, t) \equiv \sigma(t)$ .

Ha egy adott jelenséget diffúziós folyamattal lehet leírni, akkor a modellezés során általában nem a folyamat infinitezimális operátorát vagy Fokker-Planck-egyenletét kapjuk meg, hanem egy Langevin-egyenletet. Ha a fehérzaj együtt-hatója függ magától a folyamattól, akkor a Langevin-egyenlet értelmezése nem egyértelmű. Azt, hogy a lehetséges értelmezések közül melyiket kell választani, csak az adott jelenség ismeretében lehet eldönteni.

**23. feladat** Oldjuk meg a

$$(S) dx = x dw$$

és a

$$(S) dx = - \frac{x}{2} dt + x dw$$

Stratonovich-SDE-t az  $X(0)=1$  kezdeti feltétel mellett! A megoldásokat hasonlítsuk össze a 22. feladat megoldásával!

### 3.8 A stacionárius eloszlás és a stacionárius áramsűrűség

Az eddigi fejezetekben mindig skalár diffúziós folyamatokról volt szó. Mint már a 3.1. fejezet végén is utaltunk rá, a skalár diffúziós folyamatokra vonatkozó összefüggések könnyen általánosíthatók a vektor értékű diffúziós folyamatok esetére. Legyen

$$X(t) = (x_1(t), \dots, x_i(t), \dots, x_n(t)) \quad /3.129/$$

egy vektor értékű diffúziós folyamat. A diffúziós folyamatok lehetséges leírásai közül válasszuk kiindulópontnak az Ito-SDE-t. /3.75/ általánosítása erre az esetre:

$$dx_i(t) = b_i(x(t), t)dt + \sum_j \sigma_{ij}(x(t), t)dw_j(t). \quad /3.130/$$

Itt  $w_j(t)$   $n$  független, azonos tulajdonságu Wiener-folyamatot jelöl, amelyekre

$$\langle w_i(t)w_j(s) \rangle = \delta_{ij} \min(t, s). \quad /3.131/$$

A diffúziós folyamatot leíró Fokker-Planck-egyenletet ugyanúgy vezethetjük le /3.130/-ból, mint a 3.6. fejezetben a skalár diffúziós folyamatnál tettük. Rögzítsük a folyamat értékét a  $t$  időpontban:

$$x_i(t) = x_i^1. \quad /3.132/$$

A folyamat növekményeinek momentumaira a /3.79/-/3.81/ számolási szabályok figyelembevételével a következő eredménye-

ket kapjuk:

$$\langle dx_i(t) \rangle = b_i(x^1, t)dt + o(dt), \quad /3.133/$$

$$\langle dx_i(t)dx_j(t) \rangle = \sum_k \sigma_{ik}(x^1, t)\sigma_{jk}(x^1, t)dt + o(dt), \quad /3.134/$$

míg a magasabb rendű momentumok mind  $o(dt)$  nagyságrendűek. A rövidebb írásmód kedvéért bevezetjük a

$$D_{ij}(x, t) = \sum_k \sigma_{ik}(x, t)\sigma_{jk}(x, t) \quad /3.135/$$

mátrixot, amelyet diffúziós mátrixnak nevezünk el. A diffúziós mátrix szimmetrikus, és /3.134/ szerint nem-negatív definit. A  $b_i(x, t)$  vektor neve áramlási vektor lesz.

A /3.133/ és /3.134/ momentumok ismeretében fölírhatjuk a Fokker-Planck-egyenletet:

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = -\sum_i \frac{\partial}{\partial x_i} (b_i(x, t)P(x, t)) + \frac{1}{2} \sum_{ij} \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} (D_{ij}(x, t)P(x, t)). \quad /3.136/$$

Homogén diffúziós folyamat esetében

$$b_i(x, t) \equiv b_i(x),$$

$$\sigma_{ik}(x, t) \equiv \sigma_{ik}(x). \quad /3.137/$$

Tegyük fel, hogy a homogén diffúziós folyamat ergodikus, azaz a Fokker-Planck-egyenletnek létezik egyértelmű stacionárius eloszlása,  $P^*(x)$ , és minden megoldása  $t \rightarrow \infty$  esetén ehhez a stacionárius eloszláshoz tart. Mivel  $P^*(x) \geq 0$ , a stacionárius eloszlás jellemzésére bevezethetjük a

$$\varphi(x) = -\ln P^*(x) \quad /3.138/$$

potenciált. A stacionárius folyamat valószínűségi áramsűrűsége, /3.6/ analógiájára, így írható:

$$F_i^*(x) = b_i(x)P^*(x) - \frac{1}{2} \sum_j \frac{\partial}{\partial x_j} D_{ij}(x)P^*(x). \quad /3.139/$$

A differenciálások elvégzése után

$$F_i^*(x) = r_i(x)P^*(x), \quad /3.140/$$

ahol

$$r_i(x) = b_i(x) - \frac{1}{2} \sum_j \frac{\partial}{\partial x_j} D_{ij}(x) + \frac{1}{2} \sum_j D_{ij}(x) \frac{\partial \varphi(x)}{\partial x_j} \quad /3.141/$$

az un. stacionárius áramlási vektor.

A stacionárius áramsűrűség kielégíti a

$$\sum_i \frac{\partial F_i^*(x)}{\partial x_i} = 0 \quad /3.142/$$

egyenletet. /3.140/ felhasználásával kapjuk az un. divergencia feltételt:

$$\sum_i \frac{\partial}{\partial x_i} (r_i(x) e^{-\varphi(x)}) = 0 \quad /3.143/$$

Skalár diffúziós folyamat esetében /3.142/ azt jelenti, hogy

$F^*(x)$  állandó. /3.139/-ből következik, hogy ha  $b(x)$  és  $D(x)$  korlátosak és  $P^*(x) \rightarrow 0$ , ha  $x \rightarrow \pm\infty$ , akkor  $F^*(x) \equiv 0$ .

A  $b_i(x)$  áramlási vektort /3.141/ segítségével ki-küszöbölhetjük a Fokker-Planck-egyenletből és az Ito-SDE-ből. A Fokker-Planck-egyenlet új alakja:

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = - \sum_i \frac{\partial}{\partial x_i} \left[ r_i(x) - \frac{1}{2} \sum_j D_{ij}(x) \left( \frac{\partial \varphi(x)}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \right) \right] P(x,t) \quad /3.144/$$

Ezzel párhuzamosan az Ito-SDE így írható:

$$dx_i = \left( r_i + \frac{1}{2} \sum_j \frac{\partial D_{ij}}{\partial x_j} - \frac{1}{2} \sum_j D_{ij} \frac{\partial \varphi}{\partial x_j} \right) dt + \sum_j \sigma_{ij} dw_j. \quad /3.145/$$

A Fokker-Planck-egyenlet és az Ito-SDE ilyen módon való felírásának akkor vehetjük hasznát, ha olyan diffúziós folyamatot akarunk fölírni, amelynek stacionárius eloszlása egy előre adott eloszlással egyezik meg. Az az előírás csak a  $\varphi(x)$  potenciált határozza meg. Az  $r_i(x)$  stacionárius áramlási vektornak ki kell elégítenie a /3.143/ divergencia feltételt, de ettől eltekintve  $r_i(x)$  és  $D_{ij}(x)$  szabadon választható meg.

**24. feladat**

Határozzuk meg a skalár homogén diffúziós folyamat stacionárius eloszlását!

3.9 Brown-mozgás

Egy folyadékban mozgó, makroszkópikus méretű gömb mozgásegyenlete

$$\dot{v} = -\lambda v. \quad /3.146/$$

$\lambda$  értékét a Stokes-törvény adja meg:

$$\lambda = \frac{6\pi\eta a}{m}, \quad /3.147/$$

ahol  $\eta$  a folyadék viszkozitása,  $a$  a gömb sugara és  $m$  a gömb tömege.

Ha a folyadékba kis részecskét helyezünk, amelynek tömege elég közel áll a folyadék molekuláinak tömegéhez, akkor a molekuláris ütközések hatására a részecske mozgása rendezetlen lesz. Ez az un. Brown-mozgás.

Legyen  $v$  a Brown-mozgást végző részecske sebességének egy adott irányba eső vetülete. A mozgásegyenlet most a következő alakú lesz:

$$\dot{v} = -\lambda v + \sigma \xi(t), \quad /3.148/$$

ahol  $\sigma \xi(t)$  képviseli a molekuláris ütközések véletlen hatását. Mivel a részecske kb.  $10^{21}$  ütközésben vesz részt másodpercenként, és az ütközések során minden oldalról egyaránt érhetik lökések,  $\sigma \xi(t)$  igen gyorsan változó fluktuáció, amit fehérzajként írhatunk le.  $\xi(t)$ -t úgy normalizáljuk, hogy korrelációs függvénye

$$\langle \xi(t) \xi(s) \rangle = \delta(t-s) \quad /3.149/$$

legyen.  $\sigma$ -t állandónak tekintjük. A /3.148/ egyenletet először Langevin írta fel 1908-ban. Ezért is nevezzük a /3.68/ alakú egyenleteket Langevin-egyenletnek.

Az /3.148/ Langevin-egyenlet diffúziós folyamatot határoz meg. A diffúziós folyamatok leírásának több, egymással egyenértékű módját láttuk az előző fejezetekben. Ezek bármelyike alkalmas a Brown-mozgás tárgyalására. A szemléltetés kedvéért mi most mindegyik módszerrel megoldjuk a problémát. Látni fogjuk, hogy a Brown-mozgást végző részecske sebessége Ornstein-Uhlenbeck-folyamat, ezért sokszor elegendő lesz a korábbi eredményekre utalni.

Az /3.148/ Langevin-egyenletnek megfelelő stochasztikus differenciálegyenlet

$$dv(t) = -\lambda v(t) + \sigma dw(t). \quad /3.150/$$

Mivel  $\sigma$  a sebességtől független, most nincs különbség az Ito-és a Stratonovich-SDE között.  $\lambda$  értékét a Stokes-törvény rögzíti (1. a /3.147/ összefüggést).  $\sigma$  értékét úgy kell megválasztanunk, hogy a kapott folyamat stacionárius eloszlása a

$$P^*(v) \sim e^{-\frac{mv^2}{2kT}} \quad /3.151/$$

Maxwell-Boltzmann-eloszlás legyen. Az előző fejezetben módszert adtunk arra, hogyan lehet adott stacionárius eloszlással rendelkező homogén folyamatot felírni. Skalár folyamat esetében a stacionárius áramsűrűség és a stacionárius áramlási vektor azonosan nulla. A stacionárius eloszlást meghatározó potenciál

$$\varphi(v) = -\ln P^*(v) = \frac{mv^2}{2kT} + \text{állandó}. \quad /3.152/$$

Az /3.151/ stacionárius eloszlással rendelkező stochasztikus differenciálegyenlet /3.145/ alapján így írható:

$$\begin{aligned} dv(t) &= -\frac{1}{2} \sigma^2 \frac{\partial \varphi}{\partial v} dt + \sigma dw = \\ &= -\frac{mv^2}{2kT} v + \sigma dw. \end{aligned} \quad /3.153/$$

Ezt az egyenletet /3.150/-nel összehasonlítva látható, hogy  $\lambda$  és  $\sigma$  ki kell elégítsék a

$$\lambda = \frac{m}{2kT} \sigma^2 \quad /3.154/$$

összefüggést. A Stokes-törvény felhasználásával

$$\sigma^2 = \frac{12\pi\eta a k T}{m^2}. \quad /3.155/$$

Ezt a két összefüggést szokás Einstein-relációnak is nevezni.

A /3.150/ stochasztikus differenciálegyenletet a 21. feladatban megoldottuk. Az eredmény

$$v(t) = v(0) e^{-\lambda t} + \sigma e^{-\lambda t} \int_0^t e^{\lambda s} dw(s). \quad /3.156/$$

Meghatároztuk a folyamat átmeneti valószínűségét is. A

/3.154/ Einstein-reláció segítségével ez így írható:

$$P(v_1, t | v) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} V^2(t)} \exp\left\{-\frac{(v - v_1 e^{-\lambda t})^2}{2 V^2(t)}\right\} \quad /3.157/$$

ahol

$$V^2(t) = \frac{k T}{m} (1 - e^{-2\lambda t}). \quad /3.158/$$

A  $t \rightarrow \infty$  határátmenetet elvégezve megkapjuk a stacionárius eloszlást, ami /3.151/-gyel egyezik meg. Ugyanezt az eredményt kapjuk a Brown-mozgást végző részecske sebességeloszlását meghatározó

$$\frac{\partial P(v, t)}{\partial t} = \lambda \frac{\partial}{\partial v} (v P(v, t)) + \frac{1}{2} \sigma^2 \frac{\partial^2}{\partial v^2} P(v, t) \quad /3.159/$$

Fokker-Planck-egyenlet megoldásával /1. a 3.4. fejezetet/.

A Langevin-egyenlet regularizálásával történő megoldás sok szempontból a /3.150/ SDE megoldásával párhuzamosan történik. Ekkor a /3.148/ egyenletben  $\xi(t)$ -t közönséges Gauss-folyamatként kezeljük. Adott  $\xi(t)$  trajektória esetén az egyenlet megoldása

$$v(t) = v(0) e^{-\lambda t} + e^{-\lambda t} \int_0^t e^{\lambda s} \xi(s) ds. \quad /3.160/$$

Ez a megoldás lehetővé teszi a sebesség kumulánsainak számítását.  $\xi(s)$  Gauss-folyamat, ezért  $v(t)$  kettőnél magasabb

rendű kumulánsai eltűnnek, tehát  $v(t)$  eloszlása, ami a kezdeti feltétel rögzítése esetén az átmeneti valószínűséggel egyezik meg, szintén Gauss-eloszlás lesz.  $\langle \xi(t) \rangle = 0$  miatt

$$\langle v(t) \rangle = v(0) e^{-\lambda t}. \quad /3.161/$$

Másrészt a sebesség szórásának négyzete

$$\langle v(t)^2 \rangle - \langle v(t) \rangle^2 = \sigma^2 e^{-2\lambda t} \int_0^t e^{\lambda s} \int_0^t e^{\lambda u} \langle \xi(s) \xi(u) \rangle ds du. \quad /3.162/$$

Az integrálás elvégzése előtt végrehajthatjuk azt a határátmenetet, amely a zajt a fehér zajba viszi át, azaz az integrálba a /3.149/ korrelációs függvényt írjuk be. Az integrálás elvégzése után, a /3.154/ Einstein-reláció felhasználásával kapjuk, hogy

$$\langle v(t)^2 \rangle - \langle v(t) \rangle^2 = \frac{k T}{m} (1 - e^{-2\lambda t}) \quad /3.163/$$

Az átmeneti valószínűség Gauss-eloszlás, amelyet várható értéke és szórása már egyértelműen jellemez. Eredményül a /3.157/-beli kifejezést kapjuk.

**25. feladat**

Határozzuk meg a Brown-mozgást végző részecske sebességének korrelációs függvényét, valamint elmozdulásának várható értékét és korrelációs függvényét, ha

- a) a részecske kezdeti sebessége adott,
- b) a részecske kezdeti sebességének eloszlása a stacionárius Maxwell-Boltzmann-eloszlás!

**26. feladat**

Milyen folyamattal írható le a Brown-mozgást végző részecske elmozdulása abban az esetben, ha a folyadék viszkozitása nagyon nagy ( $\lambda \rightarrow \infty$ )?

**27. feladat** Vizsgáljuk az  $m$  tömegű,  $\omega_0$  sajátfrekvenciájú harmonikus oszcillátor Brown-mozgását adott kezdeti feltételek mellett! Határozzuk meg a kitérés, a sebesség ill. ezek négyzeteinek várható értékeit, valamint a  $P(x,t|x_0,v_0)$  és a  $P(v,t|x_0,v_0)$  átmeneti valószínűségeket! Milyen folyamatot kapunk a túlszillapított határesetben?

Irodalom:

- WENTZEL, A.D.: Kursz teorii szlucsajnuh processszov, Nauka, Moszkva 1975.
- ARNOLD, L.: Stochastic differential equations, Wiley, New York, 1974.
- LAX, L.: Classical Noise III.: Nonlinear Markoff Processes, Rev. Mod. Phys. 38 359 /1966/
- GIEMAN, I.I., SZKOROHOD, A.V.: Bevezetés a stochasztikus folyamatok elméletébe, Budapest, Műszaki Kiadó 1975.
- CHANDRASEKHAR, S.: Rev. Mod. Phys. 15 1 /1943/
- GRAHAM, R.: Springer Tracts in Modern Physics, Vol. 66, p 1, Springer Verlag, 1973
- van KALPEN, H.G.: in Stochastic Processes in Nonequilibrium Systems, Lecture Notes in Physics 84 Springer Verlag 1978

4. Zajmérés

4.1 A zajmérés sémája, a Wiener-Hincsin-tétel

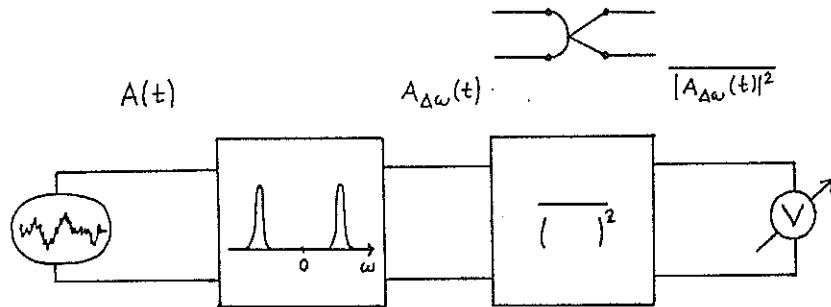
Makroszkópikus testek mérhető jellemzői /pl. sűrűség, nyomás, elektromos polarizáció/ termikus egyensúlyban vagy stacionárius /pl.elektromos egyenáramot vezető/ állapotban majdnem állandó értéket vesznek fel: egy állandó középérték körül végeznek kicsiny ingadozásokat, fluktuációkat.

A fluktuációk részletes ismerete rendkívül sokat árul el az anyag mikroszkópikus szerkezetéről és folyamatairól. A fluktuációkról a legrészletesebb kísérleti információt egy viszonylag modern technika: a szórás-kísérletek módszere adja: a mintára beeső sugárzás /fény, neutron stb./ úgy szóródik a fluktuációs eredetű inhomogenitásokon, mint egy optikai rácson. Ez az optikai rács még mozog is, ami a sugárzás frekvenciáját modulálja: így kapunk információt az atomi mozgásokról.

Van azonban a fluktuációk kísérleti vizsgálatának egy klasszikusabb, egyszerűbb módja is: a zajmérés, ami a fluktuációktól eredő elektromos jelek analízisét jelenti. A zajmérés általában térbeli felbontást nem ad: ennyiben szegényebb a szórás-kísérleteknél. A mikroszkópikus folyamatok időbeli követését azonban igen kényelmesen és pontosan valósítja meg, valahányszor a szóbanforgó folyamatban elektromos töltéshordozók vesznek részt, vagy legalábbis közvetve elektro-

mos jellé alakítható változások történnek.

A zajmérés sémáját az 1. ábra mutatja. A tipikus mérés abból áll, hogy a zajforrásból eredő fluktuáló jelet /pl.  $J(t)$ / fluktuáló elektromos áramot/ először egy sáváteresztő frekvenciaszűrőn vezetjük át, amely az időbeli változásból annak egy adott  $\omega$  frekvencia szűk környezetébe eső részét választja ki, majd az így kiválasztott jelet olyan mérőműszerre visszük, amely a négyzetes átlagértéket méri. Ez utóbbi műszer legegyszerűbb formájában egy, az áram hatására felmelegedő huzalt tartalmaz, amelynek hőmérsékletét termoelemhez kapcsolt voltmérő méri.



1. ábra

Vizsgáljuk először az egyetlen  $A(t)$  mennyiség klasszikus /nem kvantum/ fluktuációból eredő zajt. Állítsuk elő  $A(t)$ -t Fourier-integrál alakjában:

$$A(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} A_{\omega} e^{-i\omega t} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} A_{\omega}^* e^{i\omega t} \quad /4.1/$$

/ a második egyenlőség azért igaz, mert  $A(t)$  valós/.

A sávszűrőről tegyük fel az egyszerűség kedvéért, hogy  $\omega_0$  és  $\omega_0 + \Delta\omega$  között minden frekvenciát változatlan amplitudóval átéreszt, azon kívül pedig semmit. Ekkor a szűrő után kapott jel /eltekintve a szűrő okozta fáziseltolásoktól, amelyeket nem írunk ki, mert az itt tárgyalt zajmérő berendezés ugysem érzékeli/ a következő lesz:

$$A_{\Delta\omega}(t) = \left[ \int_{\omega_0}^{\omega_0 + \Delta\omega} + \int_{-\omega_0 - \Delta\omega}^{-\omega_0} \right] \frac{d\omega}{2\pi} A_{\omega} e^{-i\omega t} \quad /4.2/$$

A zajmérésben ezen mennyiség abszolút értékének négyzetét mérjük, amit elméleti tárgyalásban a statisztikus mechanika szabályai szerint a zajforrás termodinamikai állapotának megfelelő sokaságra átlagolnunk kell. Az alábbiakban az ilyen /egyensúlyi vagy stacionárius/ sokaságra vett átlagot  $\langle \rangle$  jelöli.

Ha a /4.2/ egyenleten elvégezzük a négyzetreemelés és átlagolást,  $\langle A_{\omega}^* A_{\omega} \rangle$  alakú átlagértékek lépnek fel. Ezek kiszámítására tekintsük a fluktuáló mennyiség  $\langle A(t)A(t+\tau) \rangle$  autokorrelációs rüggvényét. /4.1/ felhasználásával.

$$\langle A(t)A(t+\tau) \rangle = \int \frac{d\omega}{2\pi} \int \frac{d\omega'}{2\pi} \langle A_{\omega}^* A_{\omega'} \rangle e^{-i(\omega' - \omega)t - i\omega'\tau} \quad /4.3/$$

A baloldal adott  $\tau$  mellett  $t$ -től már nem függhet, mivel a fluktuáló zajforrás termikus egyensúlyi, vagy legalábbis stacionárius állapotban van, így átlagosan minden pillanat-

ban egyformán viselkedik /valószínűségi számításai szóhasználat/  $A(t)$  stacionárius folyamat/. Ez csak úgy lehetséges, ha a jobb-  
oldal integrandusza  $\omega \neq \omega'$  esetén eltűnik, tehát a keresett átlagérték

$$\langle A_{\omega}^* A_{\omega'} \rangle = 2\pi F_{AA}(\omega) \delta(\omega - \omega') \quad /4.4/$$

alakban írható, ekkor pedig /4.3/-ből

$$\langle A(t)A(t+\tau) \rangle = \int \frac{d\omega}{2\pi} F_{AA}(\omega) e^{-i\omega\tau} \quad /4.5/$$

Számítsuk ki most /4.2/-nek a sokaságra átlagolt abszolút érték négyzetét /4.4/ felhasználásával. Ha a szűrőt olyan keskenysávnak tekinthetjük, hogy  $\Delta\omega$ -n belül  $F_{AA}(\omega)$  konstansnak vehető, akkor az eredmény

$$\langle |A_{\Delta\omega}(t)|^2 \rangle = [F_{AA}(\omega_0) + F_{AA}(-\omega_0)] \Delta\nu \quad , \quad /4.6/$$

ahol  $\Delta\nu = \Delta\omega/2\pi$ .

Az autokorrelációs függvény  $t$ -től független:

$$\langle A(t)A(t+\tau) \rangle = \langle A(0)A(\tau) \rangle = \langle A(-\tau)A(0) \rangle \quad /4.7/$$

Ennek segítségével, felhasználva azt is, hogy klasszikus fluktuációknál az autokorrelációs függvény valós, elvégezve az  $A_{\Delta\omega} \equiv A_{\Delta\nu}$  átjelölést, /4.5/ megfordításával kapjuk:

$$\frac{\langle |A_{\Delta\nu}|^2 \rangle}{\Delta\nu} = \int_{-\infty}^{\infty} dt 2 \cos(\omega t) \langle A(0)A(t) \rangle \quad , \quad /4.8/$$

ahol a baloldalon elhagytuk a — /4.6/ szerint nemlétező — időfüggés jelölését, és az így felszabaduló  $t$  betűt használtuk a jobboldalon integrációs változónak.

Ha a fluktuációk kvantumos tulajdonságait is figyelembe akarjuk venni, akkor  $A(t)$ -t és a belőle levezetett  $A_{\omega}$  és  $A_{\Delta\omega}(t)$  mennyiségeket operátoroknak kell tekintenünk, a komplex konjugálást hermitikus adjungálással kell helyettesíteni, és vigyázni kell, hogy a négyzetreemeléskor fellépő operátorszorzatokat az átalakítások során ne cseréljük fel. A fenti levezetés végig érvényben marad, csak /4.8/ helyett az általánosabb

$$\frac{\langle |\hat{A}_{\Delta\nu}|^2 \rangle}{\Delta\nu} = 2 \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \langle (\hat{A}(0)\hat{A}(t) + \hat{A}(t)\hat{A}(0))/2 \rangle \quad /4.9/$$

eredményt kapjuk, amely klasszikus határesetben átmege /4.8/-ba.

A /4.8/ és /4.9/ egyenletek baloldalán a zajmérésben meghatározható mennyiség: a fluktuáló  $A(t)$  teljesítményspektruma szerepel. Maguk a /4.8-9/ egyenletek a klasszikus ill. kvantum Wiener-Hincsin-tételt fejezik ki: a teljesítményspektrum arányos az autokorrelációs függvény Fourier-transzformáltjával. A zajmérés segítségével tehát a fluktuáló mennyiség autokorrelációs függvényét meghatározhatjuk meg.

Kvantumos esetben a zajmérés a /4.9/-ben fellépő  $\langle (\hat{A}(0)\hat{A}(t) + \hat{A}(t)\hat{A}(0))/2 \rangle$  szimmetrizált autokorrelációs függvényt határozza meg. Hangsúlyozzuk, hogy — a levezetésből láthatóan — ez annak a következménye, hogy a fáziseltolásra érzéketlen sávszűrő és detektor a  $+\omega$  és  $-\omega$  frekvenciákat egyszerre választja ki. Hibás az a sok helyen olvasható érvelés, hogy csak a szimmetrizált, tehát hermitikus szorzatnak van fizikai jelentése: a kísérlet a teljesítményspektrumot méri, ami szim-



metrizálás nélkül is valós lenne. Szórás kísérletekben, ahol  $+\omega$  és  $-\omega$  fizikailag lényegesen különböző jelentésű  $/t_i$ . energiacsnyelés ill. energialeadás/, valóban nem-szimmetrizált korrelációs függvényt határozunk meg, annak valós Fourier-transzformáltja: a hatáskeresztmetszet alapján.

Az egész eddigi gondolatmenetet könnyű általánosítani több mennyiség egyidejű fluktuációjából eredő zaj esetére; ekkor a leírásban  $\langle (\hat{A}(0)\hat{B}(t) + \hat{B}(t)\hat{A}(0))/2 \rangle$  alakú korrelációs függvények lépnek fel.

#### 4.2 Egyensúlyi zaj

A zajforrások legegyszerűbbike egy ellenállás. Ebben az elektronok termikus mozgása következtében fluktuáló áramok folynak, amelyeket egy elég érzékeny zajmérő berendezéssel analizálni lehet. Ilyen mérést Johnson végzett először 1929-ben; akkor ez mérés technikai csúcsteljesítménynek számított. A mérés szerint az ellenállás zajának teljesítményspektruma független a frekvenciától /"fehér zaj"/, továbbá arányos az ellenállás nagyságával és a hőmérséklettel; ez utóbbi a zaj és a termikus mozgás közvetlen kapcsolatára utal /"termikus zaj"/. A jelenséget még abban az évben Nyquist magyarázta meg. Azóta a jelenségekört Johnson-zaj vagy Nyquist-zaj néven ismerik.

Az elméleti leírásban az ellenálláson átfolyó  $J(t)$  áramot tekintsük a fluktuáló mennyiségnek, és használjuk a /4.8/ egyenletet. Láthatóan a  $\langle J(0)J(t) \rangle$  korrelációs függvényre kell valamilyen elméleti becslést adnunk. Határozzuk meg először en-

nek  $t=0$ -beli értékét: ehhez csak a  $\langle JJ \rangle$  egyensúlyi átlagot kell kiszámítanunk. Legyen az ellenállás  $x$  irányu, egységnyi keresztmetszetű egyenes huzal, hosszúságegységenként  $n$  darab, egyenként  $e$  töltésű töltéshordozóval, amelyek sebességének a huzal irányába eső komponense  $v_{ix}$ , ekkor  $J = \sum_i e v_{ix}$ . Figyelembe véve, hogy Boltzmann-statisztikában a különböző részecskék sebességei egymástól függetlenek, a keresett átlagérték

$$\langle JJ \rangle = ne^2 \langle v_x^2 \rangle = ne^2 kT/m, \quad /4.10/$$

ahol  $m$  egy töltéshordozó tömege és  $k$  a Boltzmann-állandó.

Tegyük fel, hogy a korrelációs függvény időben exponenciálisan cseng le valamilyen relaxációs idővel, de azt se felejtjük el, hogy a korrelációs függvény az időnek páros függvénye. Közelítő kifejezésünk tehát:

$$\langle J(0)J(t) \rangle \approx (ne^2 kT/m) e^{-|t|/\tau}. \quad /4.11/$$

Ezt /4.8/-ba helyettesítve, az eredményt

$$\frac{\langle |J_{AV}|^2 \rangle}{\Delta\nu} = 4kT \operatorname{Re} \sigma(\omega) \quad /4.12/$$

alakban kapjuk, ahol

$$\sigma(\omega) = (ne^2 \tau/m) (1 - i\omega\tau)^{-1} \quad /4.13/$$

a frekvenciafüggő /optikai/ vezetőképesség. /Kittel: Bevezetés a szilárdtestfizikába./

Johnson kísérletében nem áramot mért, hanem az ellenállás végein fellépő feszültséget. A fluktuáló áramot ugyan nem feszültség kelti, hanem lokális atomi mozgások, azonban ahhoz, hogy ez az áram keresztül folyjon a minta összes többi részén,

/egy mikroszkópikus szakasztól eltekintve az egész ellenálláson/, fel kell épülnie az Ohm-törvénynek megfelelő feszültségésésnek. Ezzel a nemtriviális megfontolással alkalmazhatjuk az Ohm-törvényt:  $V_{\omega} = R(\omega) I_{\omega}$ , ahol  $R(\omega) = [\sigma(\omega)]^{-1}$  a frekvenciafüggő ellenállás. Ennek felhasználásával kapjuk /4.12/-ből a kísérlettel összehasonlítható eredményt:

$$\frac{\langle |V_{\Delta V}|^2 \rangle}{\Delta V} = 4kTR(\omega). \quad /4.14/$$

Ez a híres Nyquist-formula. Ha  $\omega \ll \tau^{-1} \sim 10^{14}$  1/sec /, ami pl. Johnson méréseiben mindig teljesült, akkor  $R(\omega)$ -t annak kisfrekvenciás határértékével, az  $R$  egyenáramu ellenállással helyettesíthetjük. Ilyen körülmények között észlelünk fehér zajt.

/4.12/ levezetésénél erőteljesen kihasználtuk a durva /4.11/ közelítő kifejezést, ami kétséget ébreszthet az eredmény általánosságát illetően. Valójában /4.12/ speciális esete a bármilyen lineáris válaszeljenséget /itt: a lineáris elektromos vezetést/ a megfelelő zajjal /itt: az áramfluktuációkkal/ összekapcsoló fluktuáció-disszipáció tételnek /Callen és Welton 1951/. Ezen tétel szerint /4.12/ független a vezetési mechanizmus részleteitől, csak  $kT$  helyébe kell általában a pontosabb  $\hbar\omega$  cth( $\hbar\omega/kT$ ) szorzót írni /ez is független a konkrét rendszer tulajdonságaitól!/, ami  $\hbar\omega/kT \ll 1$  esetén /az un. klasszikus határesetben/ megy át  $kT$ -be.

### 4.3 Modulációs zaj

Az előző pontban tárgyalt, egyensúlyi áramfluktuációkból

eredő Johnson-zajt a /4.14/-beli  $k$  szorzó miatt roppant gyenge, nehezen detektálható effektus. Ennél sokkal durvább, jól mérhető zajt kapunk, ha a mintán állandó külső feszültséggel makroszkópikus áramot hozunk létre, amelynek  $J(t)$  pillanatnyi értéke  $\bar{J}$  stacionárius átlagérték körül fluktuál. A zajmérés a  $\langle (J(0) - \bar{J})(J(t) - \bar{J}) \rangle$  korrelációs függvény Fourier-transzformáltját szolgáltatja. Áramgenerátoros meghajtással a mintán eső feszültség fluktuációit mérhetjük, ami a rendszerről azonos információt nyújt.

$E$  elektromos térben  $n$  töltéshordozó, amelyek töltése  $e$  és mozgékonyága  $\mu$ , összesen  $J = en\mu E$  áramot okoz. Állandó  $E$  mellett ez a kifejezés  $n(t)$  és  $\mu(t)$  időbeli változása miatt fluktuálhat. Ez két jól elkülönülő jelenség. Közös bennük az, hogy a mikroszkópikus mennyiségek fluktuációit nem közvetlenül, hanem a külső forrásból származó áramra gyakorolt moduláló hatásukon keresztül figyeljük meg. Ezért hívják ezeket a jelenségeket modulációs zajnak.

A töltéshordozók száma félvezetőkben a generációs-rekombinációs folyamatok miatt fluktuál. Ezért serceg a tranzistoros rádió. Ha a  $\mu$  mozgékonyágot állandónak tekintjük, akkor

$$\begin{aligned} \langle (J(0) - \bar{J})(J(t) - \bar{J}) \rangle &= e^2 \mu^2 E^2 \langle \Delta n(0) \Delta n(t) \rangle = \\ &= (\bar{J}^2 / \bar{n}^2) \langle \Delta n(0) \Delta n(t) \rangle, \end{aligned} \quad /4.15/$$

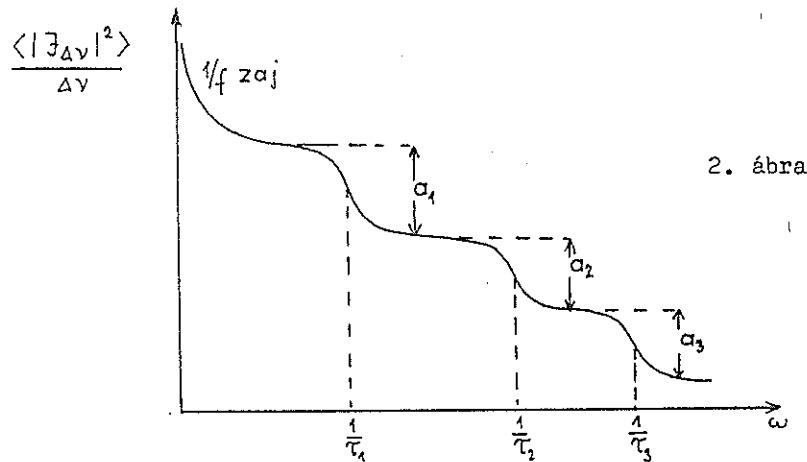
ahol  $\Delta n(t) = n(t) - \bar{n}$ .  $\Delta n(t)$  fluktuációja tipikus születési-kihalási folyamat, amelynek korrelációs függvénye ilyen alakú:

$$\langle \Delta n(0) \Delta n(t) \rangle = \sum_i a_i e^{-\frac{|t|}{\tau_i}}, \quad /4.16/$$

ahol  $\tau_i$  és  $\alpha_i$  az  $i$ -ik elemi generációs-rekombinációs folyamat relaxációs ideje ill. intenzitása. A megfelelő zajspektrum /4.8/ szerint

$$\frac{\langle |J_{\Delta\nu}|^2 \rangle}{\Delta\nu} = \frac{4\bar{J}^2}{\hbar^2} \sum_i \frac{\alpha_i \tau_i}{1 + \omega^2 \tau_i^2} \quad /4.17/$$

A 2. ábra mutatja a mért zajspektrumok sematikus képét. Látható, hogy a kísérleti görbéből könnyű meghatározni azon elemi folyamatok  $\alpha_i$  és  $\tau_i$  paramétereit, amelyek eléggé intenzívek és sebességük egymástól eléggé elkülönül. Felhívjuk a figyelmet /4.17/-ben a  $\bar{J}^2$  szorzóra: a meghajtó áram növelésével javítani lehet a modulációs zajspektrum "kontrasztosságát".



Hasonló módon fluktuál a töltéshordozók száma gyenge elektrolit-oldatokban az asszociációs-disszociációs folyamatok következtében. Ezen folyamatok kinetikája is jól követhető zajméréssel /Y.Yeh és R.N. Keeler cikkei a Journal of Chemical Physics-ben/.

A mozgékony fluktuációinak tárgyalása előtt leszögez-

zük, hogy most nem a mozgékony saját frekvenciafüggéséről van szó, amely a Johnson-zajnál a fehér zaj igen nagy frekvencián bekövetkező letörését okozza. Az alábbiakban tipikusan kisfrekvenciás jelenségről lesz szó: a stacionárius mozgékony lassu időbeli változásairól.

Ezeket a változásokat a mozgékonyt befolyásoló körülmények, főleg a hőmérséklet fluktuációi okozzák.

Nem teljesen eldöntött kérdés, de valószínűleg ez a mechanizmus a rejtélyes "1/f zajnak". Amint a 2. ábrán feltüntettük, a modulációs zajspektrumok kisfrekvenciás végén legtöbbször kiemelkedik egy hegyes csúc, amelynek frekvenciafüggése durván  $\omega^{-1}$  (hagyományos jelölésben 1/f) alakú. Ezt először félvezetőkön figyelték meg és sok éven keresztül hiába próbálták speciális rekombinációs folyamatokkal összekapcsolni. Később fémes vékony rétegeken is sikerült megfigyelni, ami megmutatta, hogy nem a töltéshordozók számának, hanem mozgékonyuknak fluktuációjáról lehet szó. Ennek legkézenfekvőbb oka a már említett hőmérsékletfluktuáció. A meggyőző kísérleti bizonyításhoz még valószínűleg sokat kell dolgozni, de az eddig publikált vizsgálatok /Voss és Clarke cikkei a Physical Review Letters-ben 1974 óta/ a kép helyességé mellett szólnak.

Irodalom

CH.KITTEL: Elementary Statistical Physics, Wiley, 1958.

H.B.CALLEN, T.A.WELTON: Phys. Rev. 83, 34 /1951/

M. GARDNER: Scientific American 238, No.4, 16 /1978/

7.A kinetikus Ising-modell és a kristálynövekedés  
stochasztikus modellje

7.1 Bevezetés

A sok szabadsági fokú, kölcsönható részecskékből álló rendszer fizikai tulajdonságait vagy a fenomenológikus termodinamika vagy a mikroszkópikus alapokról kiinduló statisztikus fizika segítségével adhatjuk meg. Ha azonban időfüggő tulajdonságokat akarunk leírni, nem áll rendelkezésünkre egységes elmélet. A jelenségek tanulmányozásánál komoly szerepet kapnak a modellek. A vizsgált rendszert, amelynek időbeli viselkedését egzakt módon követhetjük, stochasztikus egyenletekkel tudjuk majd leírni.

Először a ferromágneses anyagok tulajdonságainak vizsgálatára bevezetett modell dinamikai továbbfejlesztéséről lesz szó. Az egyensúlyi modell alapötlete 1924-ből, Lenz svájci fizikustól származik. Nevét E. Isingről kapta, aki 1925-ben értelmezte és megoldotta az egy-dimenziós rendszer problémáját. Később, 1942-ben Onsager megoldást talált a két-dimenziós problémára is. Az időfüggés beépítését és néhány egyszerűbb eset végigszámolását 1963-ban Glauber végezte el, ezért lett a neve Glauber-modell. Gyakrabban használt a kinetikus Ising-modell elnevezés, amely az időfüggést jelzi.

Már Ising és Onsager munkái is arra utaltak, hogy az alapfeltevések általánosíthatók, illetve az eredmények formálisan

továbbvihetők különböző rendszerekre /pl. : két komponensű ötvözetek, stb. /. A sztatikához hasonló a helyzet a dinamikában is. A második részben a modell alkalmazásaival foglalkozunk. A mágneses rendszerre vonatkozó egyszerű számolás után, valamely kristály olvadátkból történő növekedésének modelljét fogjuk vizsgálni.

7.2 Az Ising-modell

A ferromágneses anyagok spontán mágneses momentummal rendelkeznek, azaz külső mágneses tér nélkül is van mágneszettségük. Mivel a telítési mágneszettség extenzív mennyiség, ez arra utal, hogy érdemes az anyag legkisebb egységéhez rendelni egy mágneses értéket. A kvantummechanika alapján is szükségeszerű, hogy az atomok -bizonyos esetekben- mágneses momentummal rendelkezzenek. Ezek alapján az Ising-modell a következő feltevésekkel definiálható:

- $\alpha$ , A ferromágneses anyag minden rácspontjához hozzárendelhető egy spin, mely külső mágneses térben -azaz rögzítve a  $z$  tengelyt- a mágneses tér irányába, vagy vele ellentétesen áll be. Másképpen fogalmazva, a spinek számára csak egy irány létezik.
- $\beta$ , Kölcsönhatás csak a szomszédos spinek között van.  $J_{ij}$  az  $i, j$  első-szomszéd rácspontokban ülő spinek közötti kölcsönhatást jellemző energia, melyet a kvantummechanika segítségével adhatunk meg.  $-2J_{ij}$  azt a munkát jelenti, ami ahhoz szükséges, hogy két szomszédos, eredeti-

leg ellentétesen álló spint párhuzamosan állítsunk. Könnyen belátható, hogy ha  $J_{ij} > 0$ , minden  $i, j$  spinpár esetén, a rendszer számára energetikailag az kedvező, ha a spinek egy irányban állnak, azaz az anyag ferromágnes. Ellenkező esetben  $J_{ij} < 0$ , az anyag antiferromágnes.

7.1. A rendszer Hamilton-függvénye tartalmazni fogja a spinek közti kölcsönhatást és a külső tér energia járulékát:

$$\mathcal{H} = -\sum_{i,j} J_{ij} s_i s_j - H \sum_i s_i \quad /7.1/$$

A spinek mágneses nyomatékát egységnyinek választottuk ( $\mu=1$ ). Feltételezve, hogy minden spin-párra ugyanolyan a kölcsönhatás, a következő Hamilton-függvényhez jutunk:  $\mathcal{H} = -J \sum_{i,j} s_i s_j - H \sum_i s_i$ . Érdemes megfigyelni, hogy az összenergia érzéketlen az összes spin megfordításra, amennyiben a külső tér,  $H=0$ .

A statisztikus fizika módszereivel ennek a rendszernek meghatározhatjuk az egyensúlyi paramétereit, amelyek jól leírják bizonyos reális mágneses testek tulajdonságait.

Az időfüggés vizsgálatához azonban tovább kell lépniünk, hiszen eddig erre vonatkozóan nincs feltevésünk.

### 7.3 Az egydimenziós kinetikus Ising-modell:

Vizsgáljuk  $N$  darab rögzített részecske spinjét, mint az idő függvényét:  $s_i(t)$   $i=1,2,\dots,N$ , amelynek —az

2. feltevés értelmében-  $\{+1,-1\}$  értékek adják az értékkészletét, és véletlenszerűen veszi fel ezen két állapot valamelyikét. Az átmenetek oka egyrészt a rendszer  $T$  hőmérséklete, másrészt a spinek közti kölcsönhatás. Így az egyes spinek átmeneti valószínűségei feltehetően függeni fognak a közvetlen szomszédok pillanatnyi értékétől és a hőtartály állapotától. Ez az oka, hogy statisztikus korreláció jön létre a közel szomszéd spinek értékei között. A rendszer állapotait az  $s$  vektorral jellemezhetjük. Feltesszük, hogy az időbeli változás Markov-folyamat. A valószínűség eloszlásra master egyenletet írhatunk fel.

A legegyszerűbb rendszer tárgyalásával vezetjük be a problémát. Tekintsünk egyetlen részecskét, amely két állapota között véletlenszerűen ugrál, hiszen adott  $T$  hőmérsékletű hőtartállyal van kapcsolatban. Annak valószínűsége, hogy a spin felveszi az  $s$  értéket a  $t$  időpillanatban:  $P(s,t)$ , melyre:

$$P(s,t) = \frac{1}{2} [1 + s q(t)] \quad ,$$

ahol a  $q(t)$  a spin várható értéke:

$$q(t) \equiv \langle s(t) \rangle = P(+1,t) - P(-1,t) = q(0) e^{-2\omega_0 t} .$$

Mindez könnyen igazolható a 2.4. fejezet 2. példája alapján.

Nem nehéz megfogalmazni azokat az egyenleteket sem, amelyek leírják modellünk viselkedését homogén mágneses térben / l. 2.4. fejezet, 4. feladat/. A spin tengelyével párhuzamos mágneses tér az  $S=\pm 1$  állapotok valamelyikét kitünteti, így a két állapotra nem ugyansz az időegységre vonatkozó átmeneti valószínűség. A részletes egyensúly elve szerint:  $\omega(s)/\omega(-s) = e^{-2\beta H s}$  ,

ahol:  $\omega(s)$  annak valószínűsége, hogy bekövetkezik az  $s \rightarrow -s$  átmenet, továbbá  $\beta = \frac{1}{kT}$ . A  $\tanh x = \frac{1 - e^{-2x}}{1 + e^{-2x}}$  azonosság alapján könnyen belátható, hogy

$$\frac{\omega(s)}{\omega(-s)} = \frac{1 - s \tanh \beta H}{1 + s \tanh \beta H}$$

Ez segítséget ad az átmeneti valószínűség matematikai megfogalmazásához. Vegyük figyelembe, hogy  $H = 0$ -ra  $\omega(s) = \omega_0$  a fentiek alapján. E két utóbbi összefüggésből

$$\omega(s) = \omega_0 (1 - s \tanh \beta H) \quad /7.2/$$

Ekkor a spin várható értékét leíró egyenletre a következő adódik:

$$\dot{q}(t) = -2\omega_0 [q(t) - \tanh \beta H] \quad /7.3/$$

Az eredmény abból a szempontból is érdekes, hogy segítségével figyelembe vehetjük a mágneses tér időbeli változását is. Legyen  $b(t) = \tanh \beta H(t)$  ! A spin átlagértékére adódó megoldás ekkor:

$$q(t) = q_0 e^{-2\omega_0(t-t_0)} + \int_{t_0}^t e^{-2\omega_0(t-t')} b(t') (2\omega_0) dt' \quad /7.4/$$

ahol  $t_0$  és  $q_0 = q(t_0)$  a kezdeti értékek. /7.4/ megadja, hogy a rendszer átlagos mágnesezettsége hogyan változik időben.

Az előbbi gondolatmenetet követve, vizsgáljuk az  $N$  spinből álló láncot. A spinek mindegyike kölcsönhat a hő-tartállyal és legközelebbi szomszédaival, később a külső térrel is. Az Ising-modell figyelembevételével a rendszernek  $2^N$  diszkrét felvehető értéke van. Feltesszük, hogy egységnyi idő alatt csak egy spin fordul át, míg a többiek pillanatnyilag változatlanok. Ha  $\omega_j(s_j)$  annak időegységre vonatkozó átmeneti valószínűsége, hogy a  $j$ -dik spin az  $s_j$ -ről a  $-s_j$

értékre átfordul, míg az összes többi spin pillanatnyilag mozdulatlan, akkor a master egyenlet a következő alakú:

$$\dot{P}(s_1 \dots s_N, t) = -\sum_j \omega_j(s_j) P(s_1 \dots s_j \dots s_N, t) + \sum_j \omega_j(-s_j) P(s_1 \dots s_{j-1} s_{j+1} \dots s_N, t) \quad /7.5/$$

Most a kvantitatív megfeleltetés érdekében idézzük fel újra az Ising-modell Hamilton-függvényét. Homogén esetben, külső tér nélkül:  $\mathcal{H} = -J \sum_l s_l s_{l+1}$ . A részletes egyensúly feltétele meghatározza az átmeneti valószínűségek arányát /2.3 fejezet/:

$$\frac{\omega_j(s_j)}{\omega_j(-s_j)} = \frac{e^{-\beta J s_j (s_{j-1} + s_{j+1})}}{e^{\beta J s_j (s_{j-1} + s_{j+1})}}$$

A következő azonos átalakítást felhasználva:

$$e^{\pm A s} = \text{ch } A \pm s \text{ sh } A = \text{ch } A (1 \pm s_j \tanh A) \quad ,$$

az átmeneti valószínűségekre az alábbi összefüggést kapjuk:

$$\frac{\omega_j(s_j)}{\omega_j(-s_j)} = \frac{1 - s_j \tanh \beta J (s_{j-1} + s_{j+1})}{1 + s_j \tanh \beta J (s_{j-1} + s_{j+1})} = \frac{1 - \frac{1}{2} s_j (s_{j-1} + s_{j+1}) \tanh 2\beta J}{1 + \frac{1}{2} s_j (s_{j-1} + s_{j+1}) \tanh 2\beta J}$$

Az utolsó lépést  $s$  lehetséges értékeinek behelyettesítésével igazolhatjuk. A részletes egyensúly elvével összhangban az átmeneti valószínűség a

$$\omega_j(s_j) = \frac{\alpha}{2} \left( 1 - \frac{1}{2} s_j (s_{j-1} + s_{j+1}) \tau \right) \quad /7.6/$$

alakban választható meg, ahol  $\tau = \tanh 2\beta J$  és  $\alpha$  olyan konstans, melynek reciproka -mint látni fogjuk- a folyamat karakterisztikus ideje. Az, hogy az átmeneti valószínűséget ilyen alakban kell megválasztani, egyszerű uton, az Ising-modell feltételezéseit használva is megérthető. Ha kiválasztjuk  $s_j$ -t, ennek megfelelően  $s_{j-1}$  és  $s_{j+1}$  szerepelhet az át-

meneti valószínűségben. Ha ezek a spinek antiparallel helyezkednek el,  $s_{j-1} = s_{j+1}$ , a Hamilton-függvény tulajdonságai alapján az  $s_j$  két állapota energetikailag ekvivalens, így  $s_j$  mindkét irányban ugyanolyan valószínűséggel állhat:  $\omega_j(s_j) = \frac{d}{2}$ . Ha a  $j-1$  és  $j+1$  helyen lévő spinek ugyanazt az értéket veszik fel,  $s_{j-1} = s_{j+1}$ , azaz párhuzamosak, akkor a közöttük lévő spin parallel vagy antiparallel áll hozzájuk képest. A két beállítás nem lehet ugyanolyan valószínűségű. A fenti szimmetrikus esethez képest az egyik átfordulás valószínűsége megnő  $\left(\frac{d}{2}(1+a)\right)$ , a másik lecsökken  $\left(\frac{d}{2}(1-c)\right)$ . Az  $a, c$  paraméterek függenek a kölcsönhatás előjelétől. Vagy a parallel /ferromágneses/ állapot, vagy az antiparallel /antiferromágneses/ állapot lesz hosszabb életű, s ez határozza meg, hogy a rendszer melyik állapothoz tart. A fenti számolás  $a = c = \tanh 2\beta J$ -t határoz meg.

A  $P(s_1, \dots, s_N, t)$  master egyenletet kielégítő függvények a rendszer legteljesebb leírásának lehetőségét adják.

A valószínűségek meghatározása — különösen  $N$  nagy értékeire — nehéz feladat; ugyanakkor a gyakorlatilag érdekes problémákhoz kevesebb információ, nevezetesen az átlagértékek ismerete, is elegendő. Mielőtt ezt matematikailag részletesen vizsgálnánk, vezessük be a spin átlag és a korrelációs függvény fogalmát:

$$q_j(t) \equiv \langle s_j \rangle = \sum_{\{s\}} s_j P(\{s\}, t) \quad , \quad /7.7/$$

$$r_{j,k}(t) \equiv \langle s_j(t) s_k(t) \rangle = \sum_{\{s\}} s_j s_k P(\{s\}, t) \quad . \quad /7.8/$$

Itt  $\{s\} = s_1, s_2, \dots, s_j, \dots, s_N$  a spinek egy adott elrendezését je-

lenti.

A következőkben általános kifejezést vezetünk le a valószínűségekre. Legyen  $s_j$  és  $s'_j$  a  $j$ -dik spin két különböző lehetséges értéke. Ekkor

$$\frac{1}{2} (1 + s_j s'_j) = \begin{cases} 1 & , s_j = s'_j \\ 0 & , s_j \neq s'_j \end{cases} .$$

Ennek a függvénynek a segítségével egy triviális azonosság adható meg.

$$P(\{s\}, t) = \frac{1}{2^N} \sum_{\{s'\}} (1 + s_1 s'_1) (1 + s_2 s'_2) \dots (1 + s_N s'_N) P(\{s'\}, t) .$$

Elvégezve a szorzásokat és összegzéseket, /7.7/és/7.8/ alapján a következő sorfejtés-szerű végeredményre jutunk:

$$P(\{s\}, t) = \frac{1}{2^N} \left[ 1 + \sum_j s_j q_j(t) + \sum_{\substack{j,k \\ j \neq k}} s_j s_k r_{j,k}(t) + \dots \right] . \quad /7.9/$$

Ennek segítségével a redukált valószínűségeket a következőképpen definiálhatjuk és számolhatjuk a  $P(\{s\}, t)$  sorfejtés ismeretében:

$$P_i(s_i, t) \equiv \sum_{\{s \neq s_i\}} P(\{s\}, t) = \frac{1}{2} [1 + s_i q_i(t)] ,$$

miel:

$$\sum_{\{s \neq s_i\}} \frac{1}{2^N} \left[ 1 + \sum_k s_k q_k(t) + \sum_{\substack{j,k \\ j \neq k}} s_j s_k r_{j,k}(t) + \dots \right] =$$

$$= \frac{1}{2^N} \sum_{\{s \neq s_i\}} \left[ 1 + s_i q_i(t) + \sum_{\substack{j,k \\ j \neq i}} s_j s_k r_{j,k}(t) + \dots \right] = \frac{2^{N-1}}{2} [1 + s_i q_i(t)] .$$

Hasonlóan:

$$P_{j,k}(s_j, s_k, t) \equiv \sum_{\{s \neq s_j, s_k\}} P(\{s\}, t) = \frac{1}{4} [1 + s_j q_j(t) + s_k q_k(t) + s_j s_k r_{j,k}(t)] .$$

Először az  $s_j$ -k várható értékeire vezetünk le egyenletet. A /7.5/ master egyenletet szorozzuk meg  $s_k$ -val, és összegezzük az összes  $\{s\}$  állapotra:

$$\sum_{\{s\}} s_k \dot{P}(\{s\}, t) = \sum_{\{s\}} \left[ - \sum_j s_k \omega_j(s_j) P(\{s\}, t) + \sum_j s_k \omega_j(-s_j) P(\{s, -s_j\}, t) \right],$$

ahol  $\{s, -s_j\} = s_1, s_2, \dots, s_{j-1}, -s_j, s_{j+1}, \dots, s_N$  elrendezés rövid jelölés. Cseréljük fel a két szummát, és vegyük figyelembe, hogy a  $j$ -re történő összegzés valójában egy adott  $\{s\}$  elrendezés összes  $N$  helyén fut végig. Így ezt két részre bonthatjuk,  $a_{j=k}$  illetve  $a_{j \neq k}$  esetekre:

$$\sum_{j \neq k} \left[ \sum_{\{s\}} (-s_k \omega_j(s_j) P(\{s\}, t) + s_k \omega_j(-s_j) P(\{s, -s_j\}, t)) \right] + \sum_{\{s\}} (-s_k \omega_k(s_k) P(\{s\}, t) + s_k \omega_k(-s_k) P(\{s, -s_k\}, t))$$

Figyelembe véve, hogy  $s_j$  és  $s_k$  a  $\pm 1$  értékeket vehetik fel, könnyen belátható, hogy az első tag algebrai összege zérus. Gondoljunk csak arra, hogy ha  $\{s\}$  minden elrendezését megvizsgáljuk, abba beletartoznak olyan elrendezések, amelyek  $j$ -ik helyén mindig  $s_j$  van, de a  $k$ -dik helyen egyszer  $+1$ , egyszer  $-1$ . Ugyanezért a második tag egyszerűsíthető, s azt kapjuk, hogy

$$\sum_{\{s\}} s_k \dot{P}(\{s\}, t) = \sum_{\{s\}} [-s_k \omega_k(s_k) P(\{s\}, t) - (-s_k) \omega_k(-s_k) P(\{s, -s_k\}, t)] = -2 \sum_{\{s\}} s_k \omega_k(s_k) P(\{s\}, t),$$

azaz

$$\dot{q}_k(t) = -2 \langle s_k \omega_k(s_k(t)) \rangle \quad /7.10/$$

Hasonlóképpen, ha a master egyenlet mindkét oldalát  $s_j s_k$ -val szorozzuk ( $j \neq k$ ) és  $\{s\}$ -re összegezzünk:

$$\dot{r}_{jk}(t) = -2 \sum_{\{s\}} s_j s_k (\omega_j(s_j) + \omega_k(s_k)) P(\{s\}, t) = -2 \langle s_j(t) s_k(t) \{ \omega_j(s_j(t)) + \omega_k(s_k(t)) \} \rangle \quad /7.11/$$

Érdemes megjegyezni, hogy /7.9/, /7.10/ és /7.11/ leve-

zetése során a  $2^{-N}$  együttható kivételével nem használtuk ki, hogy a rendszer egydimenziós.

Ha /7.10/-be az egy dimenzióban érvényes /7.6/ átmeneti valószínűséget beírjuk, differenciálegyenletek rekurzív rendszerét kapjuk:

$$\dot{q}_k(t) = -2 \langle s_k(t) \left\{ \frac{d}{dt} \left( 1 - \frac{\sigma}{2} s_k(s_{k-1} + s_{k+1}) \right) \right\} \rangle,$$

azaz:

$$\frac{1}{d} \dot{q}_k(t) = -q_k(t) + \frac{\sigma}{2} (q_{k-1}(t) + q_{k+1}(t)) \quad /7.12/$$

A 4. példában /l.: 47. oldal/ használt módszer alkalmazásával különböző kezdeti feltételek mellett meg tudjuk oldani az egyenletünket. Tegyük fel, hogy a  $t_0$  időpillanatban a spinfüggvények értékei  $q_i^0 = q_i(t_0)$ . Ekkor

$$q_k(t) = e^{-d(t-t_0)} \sum_l q_l^0 I_{k-l}(d\sigma(t-t_0)) \quad /7.13/$$

mely megadja, hogy külső tér hiányában hogyan tart zérushoz a mágnesezettség az Ising-modellben.

Hasonló módon /7.11/-be behelyettesítve és elvégezve a kijelölt műveleteket:

$$\frac{1}{d} \dot{r}_{jk} = -2 r_{jk} + \frac{d}{2} \sigma (r_{j,k-1} + r_{j,k+1} + r_{j-1,k} + r_{j+1,k}) \quad /7.14/$$

A továbbiakban szükségünk lesz a korrelációs függvényekre az egyensúlyi helyzetben. Feltételezhetjük, hogy a rendszer translációs szimmetriát mutat, ami a korrelációs függvényre a következő egyszerűsítést jelenti:

$$r_{jk} = r_{j-k,0} \equiv r_m$$

Most tehát a következő egyenletrendszert kell vizsgálni

$$\frac{1}{d} \dot{r}_m = 0 = -2 r_m + \sigma (r_{m-1} + r_{m+1}) \quad /7.15/$$



$$r_0 = 1$$

Erről nem nehéz belátni, hogy  $r_m = \eta^{|m|}$  alakban kereshetjük a megoldást, ahol  $\eta$  értékét figyelembe véve:  $\eta = \tanh \beta J$ .

#### 7.4 A kinetikus Ising-modell mágneses térben

Jelöljük vesszőssel a külső tér jelenlétében megvalósuló átmeneti valószínűséget. A részletes egyensúly elve alapján:

$$\frac{\omega_j^+(s_j)}{\omega_j^+(-s_j)} = \frac{\exp\{-\beta s_j [J(s_{j-1} + s_{j+1}) + H]\}}{\exp\{-\beta s_j [J(s_{j-1} + s_{j+1}) + H]\}} = \frac{\omega_j^+(s_j)}{\omega_j^+(-s_j)} e^{-2\beta H s_j}$$

Mint /7.2/ levezetésekor láttuk:

$$\frac{\omega_j^+(s_j)}{\omega_j^+(-s_j)} = \frac{\omega_j^+(s_j)(1 - s_j \tanh \beta H)}{\omega_j^+(-s_j)(1 + s_j \tanh \beta H)}$$

Ez alapján  $\omega_j^+$  a következő alakban választható:

$$\omega_j^+(s_j) = \omega_j^+(s_j)(1 - s_j \tanh \beta H) = \omega_j^+(s_j)(1 - s_j b(t)) \quad /7.16/$$

Vegyük észre, hogy  $H=0$  esetre az előző rész eredményéhez jutottunk vissza. Irjuk be  $\omega_j^+(s_j)$  /7.6/-beli értékét és végezzük el a szorzást:

$$\omega_j^+(s_j) = \frac{\alpha}{2} \left\{ 1 - s_j b(t) + \frac{\alpha}{2} (b(t) - s_j) \cdot (s_{j-1} + s_{j+1}) \right\} \quad /7.17/$$

Most az  $s_j$  átlagára felírt mozgásegyenlet inhomogén lineáris differenciál egyenlet lesz:

$$\frac{1}{2} \dot{q}_j(t) = -q_j(t) + \frac{\alpha}{2} (q_{j-1} + q_{j+1}) + b(t) \left[ 1 - \frac{\alpha}{2} (r_{j-1,j} + r_{j,j+1}) \right] \quad /7.18/$$

A homogén egyenlet megoldását /7.13/ alapján adottnak vehetjük. Az inhomogén tag azonban matematikailag elég nagy nehézséget jelent, nemcsak  $b(H, t)$ , hanem az  $r_{j-1,j}$  és  $r_{j,j+1}$  megjelenése miatt is. Ezért csak azt az egyszerű esetet vizsgáljuk meg, melyben a mágneses tér elegendően gyenge, azaz

$H \ll kT$ . Ekkor:

$$b(H) = \tanh \beta H(t) \cong \frac{1}{kT} H(t) \quad /7.19/$$

Egyszerűség kedvéért az egyenleteket csak a termodinamikai egyensúlyhoz közeli állapotokban vizsgáljuk. Ilyenkor a korrelációs függvényt az egyensúlyi értékével helyettesíthetjük. /7.15/ alapján

$$r_{j-1,j} = r_{j,j+1} \cong \tanh \beta J \quad /7.20/$$

Felhasználva, hogy  $1 - \tanh 2x \tanh x = \frac{1}{\cosh 2x}$ , a /7.18/-at /7.19/ és /7.20/ segítségével a következő egyszerű alakra hozhatjuk:

$$\frac{1}{2} \dot{q}_j(t) = -q_j + \frac{\alpha}{2} (q_{j-1} + q_{j+1}) + \frac{H(t)}{kT} \frac{1}{\cosh \frac{2J}{kT}} \quad /7.21/$$

A partikuláris megoldás — visszahelyettesítéssel könnyen igazolható — a következő integrálkifejezés:

$$q_j^+(t) = \frac{\alpha}{kT \cosh(2J/kT)} \int_{t_0}^t e^{-\alpha(1-\tau)(t-t')} H(t') dt' \quad /7.22/$$

ahol  $t_0$  a kezdeti időpillanat.

Mivel a homogén tagra a megoldást /7.13/ megadja, előttünk áll a spin-átlagra vonatkozó időfüggvény.

Alkalmazzuk eredményünket a frekvencia függő mágneses szuszceptibilitás kiszámolására! A test mágnesezettsége definíció szerint:  $\langle M(t) \rangle \cong \sum_k q_k(t)$ . Hason a spin-rendszerre

$$H(t) = H_0 e^{-i\omega t}$$

mágneses tér, amelyet nagyon régen ( $t \rightarrow -\infty$ ) kapcsolunk be.

Emiatt a homogén tag már nem ad járulékot (lásd: /7.13/), így /7.22/ segítségével:

$$\langle M(t) \rangle = \frac{\alpha N}{kT \cosh(2J/kT)} \int_{-\infty}^t e^{-\alpha(1-\tau)(t-t')} H_0 e^{-i\omega t'} dt' =$$

$$= \frac{N}{kT} \frac{1}{\text{ch}(2\tau/kT)} \frac{d}{d(1-\tau)-i\omega} H_0 e^{i\omega t}$$

A mágneses szuszeptibilitás definíciója:

$$\langle M(t) \rangle = \chi(\omega) H_0 e^{i\omega t}$$

Ebből algebrai átalakítás után

$$\chi(\omega) = \frac{N}{kT} e^{\frac{2\tau}{kT}} \frac{d(1-\tau)}{d(1-\tau)-i\omega}$$

Eredményünk a kis frekvenciás határesetben az N elemű spinlánc Ising-modelljének sztatikus szuszeptibilitására az ismert összefüggést adja:

$$\chi(0) = \frac{N}{kT} e^{\frac{2\tau}{kT}}$$

Eddig egydimenziós rendszerrel foglalkoztunk, ahol a modell alapján a legtöbb számolás egzakt módon elvégezhető volt. A valódi rendszerek azonban három dimenziósak, s így általában valamilyen közelítő módszert alkalmazunk. Az előző fejezetekben levezetett összefüggések [7.7/-/7.11/] érvényben maradnak a három dimenziós esetben is. A közelítés első sorban az átmeneti valószínűségeket fogja érinteni. Annak ellenére, hogy az Ising-modell a valóságos kristályos anyag egyszerű modellje, több jelenség értelmezhető vele nemcsak a mágnesség elméletében, hanem az anyagszerkezet általános elméletében is. Erre látunk példát a következő fejezetben.

### 7.5 A három-dimenziós kinetikus Ising-modell közelítő megoldása

Vizsgáljuk most meg, hogyan változik időben a modell mágnesszettsége a külső tér kikapcsolása után. A számolás-

ban átlag-tér közelítést használunk, amely az egyik legegyszerűbb approximációs módszer a kölcsönható sokrészecské-rendszerek sztatikus és dinamikus jelenségeinek vizsgálatában. Feltetésünk szerint bármely spinre a környezet valamilyen átlag-térrel hat, melyet a környező spinnek átlagértéke határoz meg. A kiszemelttől eltérő spinre ezért a következő közelítést használjuk:

$$s_k = \langle s_k \rangle \quad k \neq j$$

Sőt, a translációs szimmetria miatt:

$$\langle s_k \rangle = \langle s \rangle$$

Ezeket a feltételeket /7.1/-be helyettesítve olyan rendszerhez jutunk, melyben minden egyes spinre a  $H_{\text{eff}}$  átlag tér hat:

$$\mathcal{H} = \sum_j s_j \left( H + \sum_k J_{jk} s_k \right) \simeq \sum_j s_j (H + \lambda \langle s \rangle), \quad /7.23/$$

ahol:  $\lambda = \frac{1}{N} \sum_{j,k} J_{jk}$ , és az összegzés az első szomszédokra vonatkozik. Ezek miatt a /7.2/ átmeneti valószínűség alkalmazható, ahol a külső tér helyett az effektív tér jelenik meg:

$$\omega_j(s_j) = \frac{d}{2} \left( 1 - s_j \tanh \beta H_{\text{eff}} \right). \quad /7.24/$$

/7.24/-t /7.10/-be helyettesítve a spin átlagára a következő kifejezést kapjuk:

$$\frac{1}{d} \dot{q}(t) = -q + \tanh \beta (H + \lambda q). \quad /7.25/$$

Nem irtunk indexeket, mivel az összes átlag-függvény ugyanugy viselkedik. Érdekes megfigyelni, hogy a stacionárius esetben ( $\dot{q} = 0$ ) az ismert sztatikus viselkedést kapjuk vissza:

$$q = \tanh \beta (H + \lambda q). \quad /7.26/$$

/7.26/-nak a  $H=0$  esetben is létezik  $q \neq 0$  megoldása a kritikus hőmérséklet:  $T_c = \lambda/k$  alatt.  $T > T_c$  esetén azonban csak

$q=0$  lehet megoldás.

Ahhoz, hogy a relaxációs idő hőmérsékletfüggését a kritikus hőmérséklet közelében meghatározzuk, fejtsük sorba /7.25/-öt. A külső tér nélküli esetekben a termikus egyensúly állapothoz közel, azaz  $q$  kis értékeire:

$$\frac{1}{\lambda} \dot{q}(t) = -q + \beta \lambda q - \frac{1}{3} (\beta \lambda)^3 q^3$$

Vezessük be a következő jelöléseket:

$$\hat{\xi} = 1 - \frac{T}{T_c} = \frac{T}{T_c} \xi, \quad Q = \frac{1}{3} \left( \frac{\beta}{\beta_c} \right)^3, \\ \lambda = k T_c = \beta_c^{-1}, \quad \hat{\lambda} = 1/\lambda$$

Ezzel a differenciál egyenletünk:

$$\hat{\lambda} \dot{q} = -\hat{\xi} q - Q q^3$$

alakú lesz, amelyből az  $y = q^{-2}$  - es helyettesítés, ugynevezett Bernoulli-típusú egyenletre vezet:

$$\left(-\frac{1}{2}\right) \hat{\lambda} \frac{dy}{dt} = -\hat{\xi} y - Q$$

Ennek megoldása  $T \neq T_c$ -re:

$$q(t) = \left[ \left( \frac{Q}{\hat{\xi}} + \frac{1}{q_0^2} \right) e^{\frac{2\hat{\xi}}{\hat{\lambda}} t} - \frac{Q}{\hat{\xi}} \right]^{-1/2} \quad /7.27/$$

Itt  $q_0$  a  $q(t)$  értéke a kezdeti,  $t=0$  időpillanatban. Az exponenciális függvény kitevője  $T < T_c$ -re negatív, így a  $q$  mennyiség a  $t$  tart végtelen esetben a  $\sqrt{-\frac{\hat{\xi}}{Q}}$  értékhez tart, az anyag ferromágneses állapotban van.  $T > T_c$  esetén a kitevő pozitív, és így  $q(t)$  exponenciálisan tart zérushoz. Ez azt jelenti, hogy az anyag magas hőmérsékleten nem tud mágneses szempontból rendeződni.

A folyamatot rendszerint az egyensúlyi értékhez tartás idejével, a relaxációs idővel jellemzik, amelyre /7.27/-ből a

$$\tau = \frac{\hat{\lambda}}{\hat{\xi}} = \frac{1}{\lambda} \cdot \frac{T}{T - T_c}$$

kifejezést kapjuk. Az eredmény azt mutatja, hogy a rendszer a kritikus hőmérséklethez közeledve egyre lassulva ér el egyensúlyi állapotába. Ez az ugynevezett kritikus lelassulás jelensége.

A  $T \rightarrow T_c$  esetén a /7.27/-ben az exponenciális kifejezés sorbefejthető:

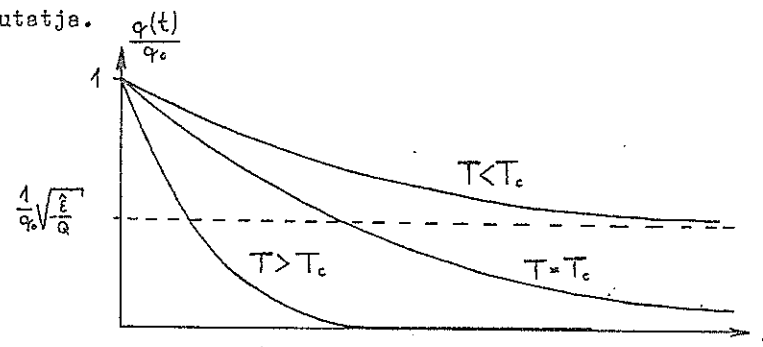
$$e^{2\alpha t} = 1 + 2\alpha t + \dots$$

Ezt felhasználva, a  $T = T_c$ -nél a következő megoldás adódik:

$$q(T=T_c; t) = \frac{1}{\sqrt{\frac{1}{q_0^2} + \frac{2Qt}{\hat{\lambda}}}}, \quad /7.28/$$

amiből látszik, hogy a kritikus hőmérsékleten a relaxálás jóval lassabb, hiszen csak hatványfüggvény szerint történik ( $q \sim t^{-1/2}$ ).

A következő ábra a mágnesesség kvalitatív viselkedését mutatja.



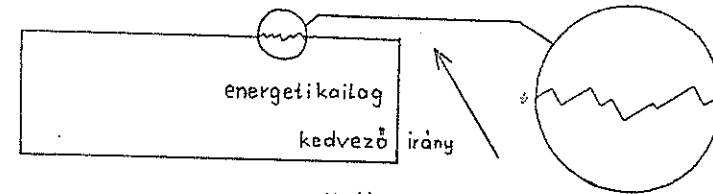
1. ábra

### 7.6 A kristálynövekedés kinetikája

A szilárd anyag gőzből, oldatból vagy olvadékból történő kikristályosodása elsőrendű fázisátalakulás. Ennek az át-

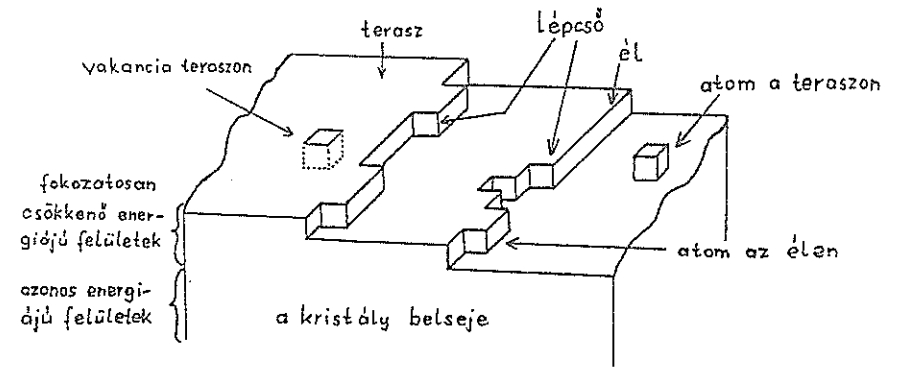
lakulásnak nem ismerjük az átfogó elméletét. A részecske-rendszer olyan modelljét választjuk, melyen a kinetikát stochasztikus folyamatként értelmezhetjük. Az előző fejezetben bemutatott utat fogjuk követni. Így fél kell tennünk azt, hogy a részecskék egy adott szilárd rácsban kondenzálódnak. Nem célunk annak meghatározása, hogy milyen kristályszerkezet alakul ki. További korlátozást jelent, hogy a rendszer hőmérsékletének jóval a hármaspont alatt kell lennie azért, hogy a rácsállandó hőmérséklet-függését elhanyagolhassuk, és így megfelelő leírását adjuk a gázból, oldatból történő kristályosodásnak.

A szilárdtest "felülete" alatt nem matematikai absztrakciót értünk, hanem véges kiterjedésű makroszkópikus fázis érintkezésekor azt az elhanyagolható vastagságú határreteget, amelyben a fizikai tulajdonságok makroszkópiusan gyorsan változnak. A változás olyan, hogy a fizikai paraméterek kvázifolytonosan módosulva alakulnak az egyik közegbeli értékről a másik közegbeli értékre. A kristályok felülete "mikroszkópikus" és "makroszkópikus" értelemben is lehet "durva" illetve "sima", és ez a hőmérséklet függvénye. A közvetlenül megfigyelhető érdekesség oka a felületi energia kristálytani irányoktól való függése. Ez okozza, hogy amennyiben a kristályfelület nem párhuzamos az energia által kitüntetett valamelyik iránnyal, az anyag olyan töredezett síklepokkal határolt térfogatban igyekszik elhelyezkedni, ahol ezek a síkok valamilyen minimális energiájú felülettel párhuzamosak.



2. ábra

Atomi méretekben azonban az előbb említett síkok is érdesek. A mi érdeklődésünk erre irányul. Vizsgáljuk tehát egy mikroszkópikus felület jellemzőit. A kialakuló szerkezetben a következő alvezeteket találjuk:



3. ábra

A felső réteg energiája a legnagyobb, így ez a legkevésbé kötött. Az atom kötöttségének mértéke nyilván függ attól is, hogy hány szomszédja vonzza őt. Így a stabil beépülés szempontjából a legkedvezőbb a vakancia, esetleg valamilyen lépcső, a legkedvezőtlenebb a terasz, illetve idealizált esetben a végtelen sík. Ahhoz, hogy folyamatos atom-beépülések legyenek, állandó utánpótlásra, azaz állandó kémiai potenciálkülönbségre van szükség. De a felületnövekedés — amely az időegység alatt betöltődő felületek számával arányos-

akkor egyenletes, ha az atom mindig talál éleket és lépcsőket. Ilyenkor a kristály tömegének növekedése jó közelítéssel állandó, és arányos a kémiai potenciálkülönbséggel. Ellenkező esetben meg kell várni azt a ritka eseményt, hogy több atom egymás mellé kerülésével ugynevezett magképződés induljon meg, amely a további beépülést megkönnyíti. Ezt igazolják azok a kísérletek, melyek szerint ha különböző módon előkészített felületeket ugyanazon termodinamikai feltételek mellett vizsgáljuk, a felületnövekedés más-más módon zajlik le.

Az előbb említett jelenségek nagy részét egy, a Glauber-modellhez hasonló számolással jól lehet közelíteni. Az egykomponensű kristály-gáz határfelület modellezésekor vizsgáljunk egy adott kristályszimmetriájú rácsot, amelynek rácspontjai részben atomokkal vannak megtöltve. Így az  $i$ -ik helyen a koncentráció a  $c_i = \{0, 1\}$  kétértékű függvénnyel írható le. A  $c_i$  és  $s_i$  között egyszerű transzformációs összefüggés van:  $s_i = 2c_i - 1$ . Modellünknek tartalmaznia kell azt a tendenciát, hogy az újonnan beépülő atom számára kedvezőbb a már korábban betöltött hely mellé kerülni. Ennek az Ising-modellhez hasonló Hamilton-függvény tesz eleget. A változók transzformációja nem okoz lényeges változást, így megmaradhatunk az eredeti jelölés mellett. Az  $s_i = +1$  érték azt jelzi, hogy a rácspont betöltött, míg az  $s_i = -1$  üres helyre utal. Ekkor az összenergiát kifejező összefüggés formális analógiában /7.1/-gyel:

$$\mathcal{K} = - \sum_{i,j} J_{ij} s_i s_j - \Delta\mu \sum_i s_i + V(\{s_i\}) \quad , \quad /7.29/$$

ahol  $J_{ij}$  a kölcsönhatási energia,  $\Delta\mu$  a lokális kémiai potenciálkülönbség a két fázis között,  $V(\{s_i\})$  pedig egy taszító potenciál. A  $V(\{s_i\})$  függvény segítségével különböző további feltételeket írhatunk elő. Pl.: megtilthatjuk üres helyek -vánciák- visszamaradását a határfelület mögött, ha  $V(\{s_i\}) = \infty$  minden olyan elrendezésre, ahol az  $i$ -edik üres hely körüli összes szomszéd betöltött. Természetesen a /7.29/-ben szereplő összegzésben az első index  $i$  a legközelebbi szomszédokra vonatkozik; a második a rácshelyekre. A kinetikát a master egyenlettel vezethetjük be. Ehhez először a részletes egyensúly feltételéből kiindulva az átmeneti valószínűséget kell megadni. A /7.2/ származtatásakor követett gondolatmenet alkalmazható. Az átmeneti valószínűség egy újabb, a  $V(\{s_i\})$ -t tartalmazó tényezővel bővül.

$$\hat{\omega}_j(s_j) = \frac{\sigma}{2} u(V(\{s_i\})) \left[ 1 - s_j \tanh \beta H_j \right] \quad , \quad /7.30/$$

ahol:

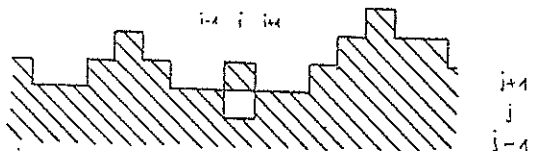
$$H_j = \sum_k J_{j,k} s_k + \Delta\mu \quad .$$

Az általános kifejezés után nézzük meg, hogyan adható meg  $u(\{s_i\})$  két speciális esetben.

Az egyszerű Ising-modell:  $V(\{s_i\}) \equiv 0$ . Ilyenkor  $u(\{s_i\}) = 1$ .

Az SAS /solid-above-solid/ vagy más szóval váncia mentes felületnövekedés modellben  $V(\{s_i\}) = \infty$  minden olyan esetben, ahol a koordináta-rendszer  $z$  tengelyére merőleges síkuk egy követik egymást, hogy a legfelső majdnem teljesen betöltött  $s_j$  sík  $i$ -ik pontjában nincs atom, míg a felette lévő  $j+1$ -ik és az alatta lévő  $j-1$ -ik sík  $i$ -ik pontja

betöltött:



Minden más esetben  $V(i,s) = 0$ . Ha  $V(i,s) = \infty$ , az átmeneti valószínűség értelemszerűen zérus! Ezt olyan  $\hat{\omega}_j$ -pal érhetjük el, melyben:

$$u(i,s) = \frac{1}{4} [z + s_{j-1}^i - s_{j+1}^i - s_j^i (s_{i-1}^i + s_{i+1}^i)]$$

ahol az alsó index a síkot, a felső a sík adott pontját jellemzi. A választás jogosságát behelyettesítéssel ellenőrizhetjük. A számolásokat általában erre a két modellre végzik el, mivel a valódi rendszerhez viszonyítva ezek határesetek; ugyanis tetszőlegesen sok pont hibát megengedő, illetve ponthiba mentes szilárd testeket írnak le. Az egyszerű Ising-rendszerre a számolás végeredményét ismerjük, úgyhogy figyelmünket az SAS modellre fordítjuk. A /7.10/ egyenlet alapján /7.30/ figyelembe vételével a  $j$ -ik sík  $i$ -ik spinjére (egyszerű algebrai átalakítások után; hasonlóan, mint /7.3/-ban) a következő differenciál egyenletet kapjuk:

$$\frac{d}{dt} \langle s_j^i \rangle = - [ \langle (s_j^i - s_{j+1}^i) \hat{\omega}_{j-}^i \rangle + \langle (s_j^i - s_{j-1}^i) \hat{\omega}_{j+}^i \rangle ] \quad /7.31/$$

ahol:

$$\hat{\omega}_{j\pm}^i = \frac{1}{2} [ 1 \mp s_j^i ] \frac{1}{2\alpha} [ 1 \pm \text{th } H_j^i ] \quad /7.32/$$

a beépülés és kilépés átmeneti valószínűségét adja. A Hamilton-függvény tulajdonságait felhasználva:

$$\hat{\omega}_{j\pm}^i = \frac{1}{2\alpha} [ 1 \pm \text{th } H_j^i ] \quad /7.33/$$

hiszen beépülés csak  $s_j^i = -1$  esetben lehet, míg kilépéshez szükséges, hogy  $s_j^i = +1$  legyen. A /7.31/ egyenlet segítségével a problémánk csatolt differenciál egyenletek sorozatára egyszerűsödött. A sok változós csatolt egyenletrendszert átlag-tér közelítésben vizsgáljuk. Az átlagolást rétegenként végezzük el. Négyzet rácstól feltételezve, minden struktúrának négy szomszédja van. Ezzel egyenletrendszerünk végső alakja:

$$\frac{d}{dt} \langle s_j \rangle = - [ \langle s_j \rangle - \langle s_{j+1} \rangle ] \hat{\omega}_{j-} (\langle s_j \rangle - \langle s_{j-1} \rangle) \hat{\omega}_{j+} ] \quad /7.34/$$

ahol:

$$\hat{\omega}_{j\pm} = \frac{1}{2\alpha} [ 1 \pm \text{th } \beta (4J \langle s_j \rangle + \Delta \mu) ] \quad /7.35/$$

/7.34/ és /7.35/ numerikusan kiintegrálható a megfelelő paraméterek és kezdeti feltételek megadása után. A reális kezdeti feltételek megadásához azonban több száz paraméterre van szükség, amelyeknek az egyenletekbe történő beírása, majd kiintegrálása még erős egyszerűsítő feltételek mellett is bonyolult probléma, mely csak számítógép használatával lehetséges. A modell tulajdonságainak vizsgálatára most egy sor "viselkedet" kell végrehajtani, azaz különböző paraméterek mellett kell megadni a rendszer viselkedését. Ha eredményeink valódi rendszernek vizsgálatakor kapott tapasztalatokkal összehasonlíthatók, elmondhatjuk, hogy a kristálynövekedés megértése területén előbbre jutottunk egy lépéssel.

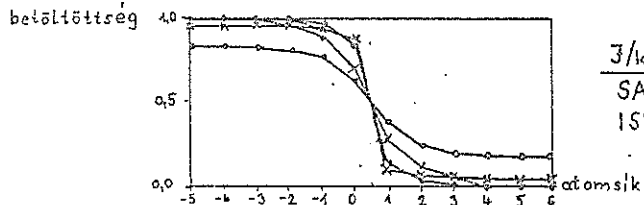
A számítógép egy másik felhasználási módja - az előzőnél sokkal időigényesebb számolás - a Monte Carlo szimuláció. Illegyen egy adott geometriájú felületről indulunk ki, amelyre véletlenszerűen kerülnek a további atomok. A beépülés ve-

lőszinüségét feltevés szerint az  $e^{-\beta \mathcal{H}}$  adja, ahol  $\mathcal{H}$  -t a /7.29/-ben definiáltuk.

Minden lépés után megvizsgálhatjuk a rendszer összenergiáját és stabilitását. Ezt figyelembe véve építi a rendszert tovább a számológép. Az előbbiekben mindkét módszer végkövetkeztetését ismertettjük.

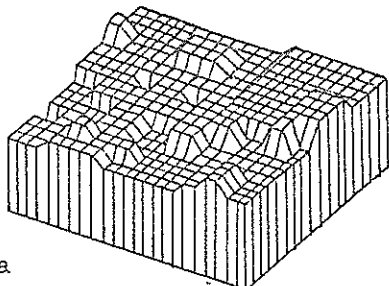
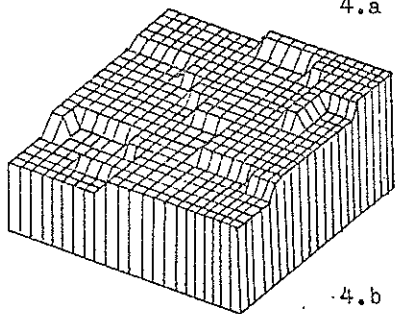
A szerteágazó eredményekből csak szemelvényeket mutatunk be. A számolásnál a szilárdtest felületét egy 200 x 200 egységű terület adta. Erre rétegződött a növekedés során a többi sík.

A szilárd állapot határfelületi profilját mutatja a 4. ábra, jól reprezentálva a határfelületre adott definíció lényegét. Az a., grafikon a numerikus integrálással kapott eredmény, ahol  $\Delta\mu=0$  és b., eset a Monte Carlo szimulációval kapott felület, kis  $\Delta\mu$  / a spinodális értéknél jóval kisebb/  $\Delta\mu$  -nél.



$3/k_B T$	0,2	0,3
SAS	o	x
ISING	o	x

4.a ábra

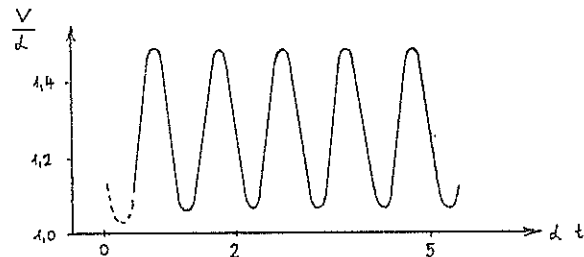


4.b ábra

Ha most a kémiai potenciálkülönbséget megnöveljük, a határfelület helyzetét megváltoztatjuk. Csak akkor mozog folytonosan a felület, ha  $\Delta\mu$  túllép egy kinetikus értéket, az úgynevezett spinodált,  $\Delta\mu^*$  -t. A határfelület helyzetét  $Y$  adja meg, amelynek definíciójában az  $n$  index a síkokat jelöli:

$$Y = \lim_{n \rightarrow \infty} \left( \frac{1}{\langle s_n - s_n \rangle} \sum_{i=n}^n \langle s_i \rangle \right)$$

Ekkor a sebesség értelemszerűen a  $v = \frac{dY}{dt}$ . Ez a mozgás periodikus.



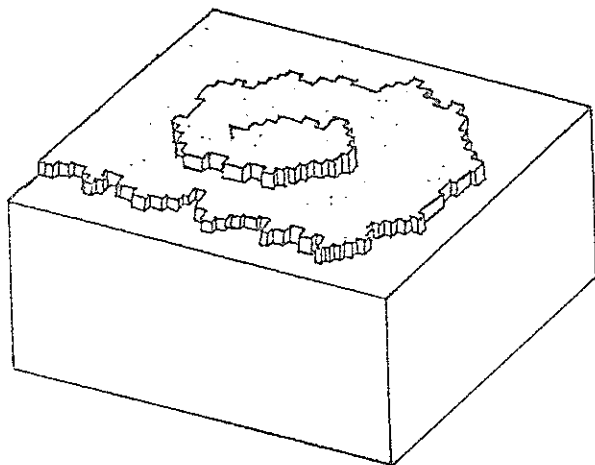
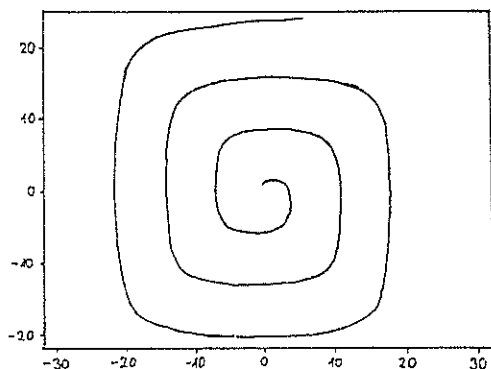
5. ábra

A jelenség mikroszkopikus magyarázata egyszerű.

Ha a kristály felületén lépcsők vannak, az új elem ezek mellé épül be. Ha feltöltődik a réteg, új lépcsőre van szükség. Ha ilyen nincs, meg kell várni hogy maglépcsődéssel újra felületi egyenetlenség jöjjön létre.

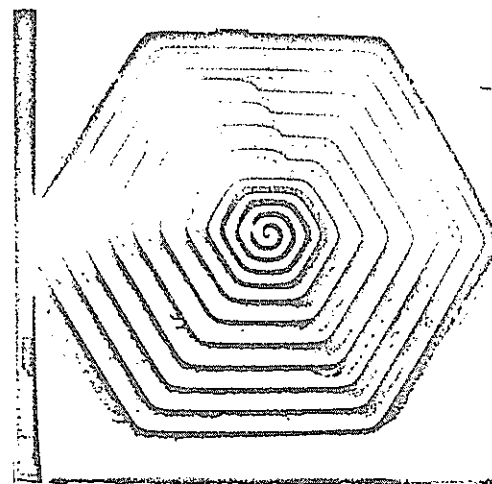
Ahhoz, hogy az ilyen nukleációs problémát megkerüljük, folyamatos lépcső forrásra van szükség. Ez magyarázná, hogy az elméleti számítások — amelyek általában sima felületen nukleációs mechanizmusokból indultak ki — és a kísérletek — amelyekben mindig a valóságnak megfelelő reális kristályfelületekkel találkoztunk — miért különböznek egymástól egyes paraméterekben.

A reális kristály-hibák közül a felületre merőlegesen kibukó csavardiszlokáció látszik -keletkezésénél fogva - a legalkalmasabbnak a folytonos lépcső-forráshoz. Valóban, az ilyen kezdeti feltétel mellett folyamatosan van a beérkező atomoknak beépülési lehetősége, amint ezt a 6. ábrán láthatjuk a numerikus számolás /a/ és a Monte-Carlo szimuláció /b/ esetében.



6.b ábra

Ezzel együtt egy jellemző alakzat, az archimedeszi spirális jelent meg, amely egyenesen következett modellünkben és a kezdeti feltételünkben. Ha ilyen alakzat a kristályon valóban kialakul, akkor ez alátámasztja modellünk realitását. Ilyen közvetlen bizonyíték /lásd: 7. ábra/ bemutatásával szeretnénk a Glauber-modell használatának jogosságát igazolni, és további tanulásra lelkesíteni az olvasót.



7. ábra  
Reális anyagon / SiC / csevardiszlokációra növekedett felület

Irodalom:

History of the Lenz-Ising Model, Rev. Mod. Phys. 39 /1967/183.  
 GLAUBER, R.J.: Journal of Mathematical Physics 4 /1963/294.  
 STANLEY, H.E.: Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena, Clarendon Press, Oxford 1971.



MULLER - KRUMBHAAR, H.: Fluctuation, Sustabilities and Phase Transitions, ed .: T. Riste, Plenum Press, 1975.

MULLER - KRUMBHAAR, H.: in Current Topics in Materials Science Vol.1 ed.: E. Kaldis, North-Holland, 1978.

MULLER - KRUMBHAAR, H.: Phys. Rev. 10 /1974/ 1308

GUY, A.G.: Fémfizika, Műszaki Könyvkiadó, 1978.

KITTEL, C.: Bevezetés a szilárdtest fizikába, Műszaki Könyvkiadó, 1966.

### 8. Kritikus dinamika

#### 8.1 Kritikus jelenségek

Ha egy ferromágnest Curie-hőmérséklete fölé melegítünk, spontán mágnesezettsége eltűnik. Sok esetben ez a fázisátalakulás folytonos, azaz, ahogy a hőmérséklet alulról közeledik a  $T_c$  Curie-hőmérséklethez, a mágnesezettség folytonosan válik nullává. A mérések szerint a mágnesezettség  $T_c$  közelében hatványfüggvénnyel írható le:

$$M(T) \sim (T_c - T)^\beta, \quad T < T_c, \quad /8.1/$$

ahol  $\beta$  tipikus értéke 0.33 és 0.37 között van.

A mágneses rend kialakulásának előjele mutatkozik meg  $T_c$  fölött abban, hogy ha a hőmérsékletet csökkentve közelítjük meg a  $T_c$  hőmérsékletet, akkor a kezdeti mágneses szuszceptibilitás divergál. A szuszceptibilitás is hatványfüggvénnyel írható le:

$$\chi(T) \sim (T - T_c)^{-\gamma}, \quad T > T_c, \quad /8.2/$$

ahol a  $\gamma$  kitevő értéke általában 1.3 és 1.4 közé esik.

Jellegzetes szingularitás található a zérus külső tér mellett mért fajhőben is:

$$c(T) \sim (T - T_c)^{-\alpha}, \quad T > T_c, \quad /8.3/$$

ez azonban sokkal gyengébb, mint a szuszceptibilitásé. Az  $\alpha$  kitevő értéke általában kisebb, mint 0.1, sőt egyes anyagokban negatív.

Folytonos fázisátalakulás sok másféle rendszerben is le-

játszóhat. Ilyen a folyadék-gáz fázisátalakulás a kritikus pontban, a szuperfolyékonyság megjelenése He<sup>4</sup> folyadéokban, bizonyos kristályokban az antiferromágneses rend kialakulása vagy a kristályszerkezet szimmetriájának megváltozása. A folytonos fázisátalakulások közös tulajdonsága, hogy mind-egyik rendszerben található egy olyan paraméter, az un. rendparaméter, amely a ferromágnesek mágnesezettségéhez hasonlóan az alacsonyabb hőmérsékletű rendezett fázisban nullától különbözik, és a fázisátalakulási ponthoz közeledve a /8.1/ összefüggés szerint folytonosan tűnik el. A rendparaméterhez tartozó szuszceptibilitás és a fajhő ilyenkor a /8.2/ és /8.3/ összefüggéseknek megfelelően változik.

A mérések tanúsága szerint a folytonos fázisátalakulást jellemző kritikus exponensek függetlenek a rendszerek specifikus tulajdonságaitól, mint pl. a kölcsönhatás jellege és erőssége, stb. és értéküket olyan globális jellemzők határozzák meg, mint a rendszer térbeli dimenziója és a rendparaméter szimmetriája. Ezt a tényt szokás az univerzalitás jelenségének nevezni.

A kísérleti adatok között egy másik típusú korreláció is fölfedezhető, amit a skálázás szóval foglalunk össze. Példának a ferromágnesek állapotegyenletét említjük, amely a T = T<sub>c</sub>, H = 0 kritikus pont közelében ilyen alakba írható:

$$\frac{H}{|T_c - T|^{\beta + \delta}} = f_{\pm} \left( \frac{M}{|T_c - T|^{\beta}} \right) \quad /8.4/$$

Eszerint az állapot-egyenletet a kritikus exponensek és egy

egyváltozós függvény, az un. skála-függvény meghatározza.

Az univerzalitás és skálázás jelenségének eredetét csak a fázisátalakulások modern, a renormálási csoport transzformációra alapozott elmélete tudja kielégítően megmagyarázni. A kritikus exponensek és a skálafüggvények számítása azonban még ma sem megoldott feladat.

A folytonos fázisátalakulást kísérő dinamikai jelenségek központi fogalma a relaxációs idő. Ez a mennyiség jellemzi azt, hogy egy nem-egyensúlyi állapotból kiindulva milyen gyorsan éri el a rendszer a termikus egyensúly állapotát. A relaxációs idő kritikus viselkedésére vonatkozó első elmélet a van Hove nevéhez fűződő un. konvencionális elmélet. A következőkben ezt a konvencionális elméletet fogjuk megfogalmazni a stochasztikus differenciálegyenletek nyelvén.

### 8.2 A konvencionális elmélet

Vizsgáljunk egy egytengelyű ferromágnest a Curie-hőmérséklet fölött. Ekkor a makroszkópikus mágnesezettség átlagértéke zérus, de fluktuációként a mágnesezettség nullától különböző értéket is fölvehet. Legyen m(x) a mágnesezettség sűrűsége, amit

$$m_{\underline{k}} = \frac{1}{\sqrt{V}} \int d^3x m(\underline{x}) e^{i \underline{k} \underline{x}} \quad /8.5/$$

Fourier-komponenseivel adunk meg. Periodikus határfeltétel mellett a k vektor komponensei csak diszkrét értékeket vehetnek föl:

$$\underline{k} = \frac{2\pi}{L} (n_1, n_2, n_3), \quad n_1, n_2, n_3 = \text{egész} \quad /8.6/$$

ahol  $L$  a kocka alaknak választott rendszer hosszúsága. Természetesen a makroszkópikus elméletben csak olyan  $k$  hullámszámvektorok fordulhatnak elő, amelyekre  $\frac{1}{k}$  jóval nagyobb minden karakterisztikus hosszúságnál, mint pl. a rácsállandó, a kölcsönhatás hatótávolsága, stb. A mágnes szabadenergiáját fejtjük sorba  $m_k$  hatványai szerint. Mivel a mágnesezettség két lehetséges iránya egyenértékű, ezért csak páros hatványok szerepelnek. A második tagnál megállva:

$$\bar{F}(T, m_k) = \bar{F}(T, 0) + \frac{1}{2} \sum_k \frac{m_k m_{-k}}{\chi_k} + \dots \quad /8.7/$$

Makroszkópiusan homogén rendszerről lévén szó, a különböző hullámszámú komponensek  $\bar{F}(T, m_k)$  sorfejtésének kvadratikus tagjában nem keverednek.

A termodinamikai fluktuációk elmélete szerint annak valószínűsége, hogy egy adott  $\{m_k\}$  Fourier-komponensekkel jellemezett állapot a termikus egyensúlyban lévő rendszerben fluktuációként föllépjen, a következő kifejezéssel adható meg:

$$P\{m_k\} \sim e^{-\frac{\bar{F}(T, m_k)}{k_B T}} \sim e^{-\frac{1}{2k_B T} \sum_k \frac{1}{\chi_k} m_k m_{-k}} \quad /8.8/$$

A mágnesezettség időfüggésére vonatkozó egyenletnek tartalmaznia kell a többi szabadsági fok hatását is, hiszen épp az ezekkel való kölcsönhatás vezet a mágnesezettség relaxációjához. Ezt a hatást zajként vesszük figyelembe. Föltehető azonban, hogy ez a zaj igen gyorsan változik, korrelációs ideje rövid a mágnesezettség változásának sebességét jellemző relaxációs időhöz képest, s ezért a zajt fehér zajnak te-

\*  $k_B$  a Boltzmann-állandó

kintjük.

Olyan diffúziós folyamatot akarunk felírni, amelynek stationárius eloszlása a fent megadott  $P\{m_k\}$ . A 3.8. fejezetben látott eljárást követjük. A stationárius eloszlást jellemző potenciál

$$\varphi = \frac{\bar{F}}{k_B T} = \frac{1}{2k_B T} \sum_k \frac{m_k m_{-k}}{\chi_k} + \text{állandó} \quad /8.9/$$

Föltesszük, hogy az  $m_k$  folyamatok függetlenek, és hogy a zaj hatása független a mágnesezettség értékétől. A mozgásegyenletet a /3.145/ egyenletnek megfelelően építjük fel. Kis mértékű módosítást jelent, hogy komplex értékű folyamattal van dolgunk. Ekkor

$$\begin{aligned} \dot{m}_k &= -\frac{1}{2} D_k \frac{\partial \varphi}{\partial m_{-k}} + \xi_k(t) = \\ &= -\frac{1}{2} D_k \frac{m_k}{\chi_k k_B T} + \xi_k(t) \end{aligned} \quad /8.10/$$

ahol  $\xi_k(t)$  Gauss-típusú fehér zaj, melynek korrelációs függvénye

$$\langle \xi_k(t) \xi_{-k}(t') \rangle = D_k \delta(t-t') \quad /8.11/$$

Bevezetjük a

$$\Gamma_k = \frac{D_k}{2k_B T} \quad /8.12/$$

kinetikus együtthatót. Ennek segítségével a mozgásegyenlet így írható:

$$\dot{m}_k = -\frac{\Gamma_k}{\chi_k} m_k + \xi_k(t) \quad /8.13/$$

a zaj korrelációs függvénye pedig

nesezettség a forgatások infinitezimális generátorával arányos, s mint ilyen, megmaradó mennyiség. A zaj elhagyásával kapható determinisztikus mozgásegyenlet ezért mérlegegyenlet kell legyen:

$$\frac{\partial m_{\alpha}(x,t)}{\partial t} = - \sum_{\beta} \frac{\partial \mathcal{F}_{\alpha\beta}(x,t)}{\partial x_{\beta}}, \quad /8.23/$$

vagy Fourier-komponensekre felírva:

$$\frac{\partial m_{\alpha k}(t)}{\partial t} = - \sum_{\beta} i k_{\beta} \mathcal{F}_{\alpha\beta k}. \quad /8.24/$$

A térbeli tükrözéssel szemben az egyenletnek invariánsnak kell lennie, ezért a  $k$  hullámszámnak csak páros hatványai szerepelhetnek, következésképp ha a mágnesezettség lineáris függvényeit engedjük csak meg,

$$\mathcal{F}_{\alpha\beta k} = i k_{\beta} \lambda_k m_{\alpha k}. \quad /8.25/$$

Ha most a mozgásegyenletbe a zajt is beírjuk,

$$\frac{\partial m_{\alpha k}}{\partial t} = - \lambda_k k^2 m_{\alpha k} + \mathcal{F}_k(t), \quad /8.26/$$

ahol a  $\mathcal{F}_k(t)$  fehérzaj korrelációs függvénye

$$\langle \mathcal{F}_k(t) \mathcal{F}_{-k}(t') \rangle = 2 \lambda_k k^2 (k_B T) \delta(t-t'). \quad /8.27/$$

Az izotrop ferromágnest jellemző korrelációs idő

$$\tau_k = \frac{\chi_k}{\lambda_k k^2}, \quad /8.28/$$

amely divergál, ha  $k \rightarrow 0$ . A kritikus lelassulás most abban jelentkezik, hogy a

$$\mathcal{D}_m = \lim_{k \rightarrow 0} (\tau_k k^2)^{-1} = \frac{\lambda_0}{\chi_0} \quad /8.29/$$

spindiffúziós együttható eltűnik a Curie-hőmérsékleten. A

konvencionális elmélet feltételezése szerint  $\lambda_0$  nem viselkedik szingulárisan, s így

$$\mathcal{D}_m \sim (T-T_c)^{-\gamma}. \quad /8.30/$$

### 8.3 Túl a konvencionális elméleten

A mágnesezettség korrelációs függvényének spektrális sűrűsége közvetlenül mérhető mennyiség, ő határozza meg ugyanis a rugalmatlan neutron szórás hatáskeresztmetszetének mágneses eredetű részét. Ez lehetőséget ad a konvencionális elmélet és a mérési eredmények összehasonlítására.

A konvencionális elmélet szerint a spindiffúziós együttható ugyanugy tűnik el a Curie-hőmérséklethez közeledve, mint a mágneses szuszceptibilitás inverze. Mivel a  $\gamma$  kitevő tipikus értéke  $\gamma \sim 4/3$ , azt várjuk, hogy

$$\mathcal{D}_m \sim (T-T_c)^{4/3}. \quad /8.31/$$

Ezzel szemben a jó közelítéssel izotrópnak tekinthető ferromágneseken végzett mérések szerint

$$\mathcal{D}_m \sim (T-T_c)^{1/3}. \quad /8.32/$$

Az eltérés jelentős, és nyilvánvalóan arra vezethető vissza, hogy a konvencionális elmélet föltételezésével ellentétben a  $\lambda_0$  transzport együttható divergál:

$$\lambda_0 \sim (T-T_c)^{-1}. \quad /8.33/$$

Az egytengelyű ferromágnes esetében sincs összhang a konvencionális elmélet és a mérések eredményei között, az

eltérés azonban jóval kisebb, mint az izotróp ferromágnes esetében.

A konvencionális elméletet tehát módosítani kell, éspe- dig a mágnesezettség különböző hullámszámu komponenseinek nem-lineáris csatolását kell figyelembe venni. Ilyen csatolást két helyről is kaphatunk. Az egyik lehetőség az, hogy a szabad-energia sorbafejtésekor nem állunk meg a második tagnál, hanem magasabb rendű kifejezéseket is megtartunk. A másik lehetőség a stacionárius áramlási vektor (l. a /3.145/ egyenletet) megfelelő megválasztásában rejlik. Izotróp ferromágnes esetében, például, ennek alakját a spin-precesszió jelensége határozza meg.

A nem-lineáris csatolások bevezetése az egyenleteket any- nyira elbonyolítja, hogy azok megoldása gyakorlatilag lehetet- lenné válik, és így fizikai megfontolásokon alapuló közelítő módszerekre kell hagyatkozniuk.

Az egyik ilyen közelítő módszer, az un. módus-csatolási /"mode-coupling"/ elmélet segítségével sikerült megmutatni, hogy a stacionárius áramlási vektorban bevezetett nem-lineáris csatolások a transzport együtthatókat divergenssé tehetik. A dinamikai kritikus jelenségek megértésében döntő szerepet ját- szott a renormálási csoport transzformáció kiterjesztése a di- namikára. Segítségével sikerült, többek között, azt is megmu- tatni, hogy az univerzalitás és a skálázás a dinamikai kriti- kus viselkedést is jellemzi. Minazonáltal ma is nyitott kérdés, hogy hogyan lehet a dinamikai kritikus viselkedést jellemző

mennyiségeket reális rendszerekre vonatkozóan megbízható pontossággal kiszámítani.

#### Irodalom

HOHENBERG, P.C., HALPERIN, B.I.: Rev. Mod. Phys. 49, 435 /1977/

## 9. Kémiai reakciók stochasztikus leírása

### 9.1 Bevezetés

Bevezetésként egy nagyon egyszerű példa kapcsán összehasonlítjuk a kémiai reakciók determinisztikus és stochasztikus leírásmódját.

A reakciókinetika egyenletei a folyamatban részt vevő anyagok koncentrációira vonatkoznak. A továbbiakban koncentráción az azonos típusu molekulák számának és a térfogatnak a hányadosát, az un. részecskeszám-koncentrációt értjük. A reakcióegyenlet azt fejezi ki, hogy adott anyag koncentrációjának időegységre eső megváltozása arányos azon anyagok koncentrációinak szorzatával, melyek a megfelelő reakcióban részt vesznek. Az arányossági tényező /általában a hőmérséklet függvénye/ mérésekkel jól meghatározható. Ezeket az un. reakcióállandókat tehát ismertnek tekinthetjük. Ha kétirányú a reakció, vagy több reakció út is előfordulhat, az összes lehetőséget figyelembe kell venni a koncentráció megváltozásának felírásakor.

Példaként vizsgáljuk a következő leegyszerűsített folyamatot:



Az X molekula tehát átalakulhat A típusúvá, s e fordított reakció is megtörténhet. Jelölje  $n$  és  $a$  az X ill. A molekula pillanatnyi koncentrációját,  $V$  a rendszer térfogatát! A reakció-

állandó definíciója alapján időegységenként

$$\Delta N_1 = k n V \quad /9.2/$$

számu X molekula bomlik el, s ezalatt A átalakulásával

$$\Delta N_2 = k' a V \quad /9.3/$$

új X molekula keletkezik. A koncentráció teljes megváltozása  $(\Delta N_2 - \Delta N_1)/V$ , a keresett differenciálegyenlet tehát

$$\dot{n}(t) = -k n(t) + k' a(t) \quad /9.4/$$

Zárt rendszerben az  $n$  és  $a$  koncentráció összege állandó kell legyen. Vizsgáljuk azonban most azokat az eseteket, amikor az egyik koncentrációt, nevezetesen  $A$ -ét kívülről szabályozzák: ekkor  $a(t)$  adott függvény. Ezek közül legegyszerűbb az a folyamat, melynek során az  $a$  koncentrációt állandónak tartják. A /9.4/ egyenlet megoldása ekkor exponenciális lecsengés a stacionárius  $k'a/k$  értékhez:

$$n(t) = \frac{k'}{k} a + (n_0 - \frac{k'}{k} a) e^{-kt} \quad /9.5/$$

Itt  $n_0$  jelöli az X molekulák kezdeti koncentrációját.

Térjünk most át a stochasztikus leírásra! A rendszer állapotát ilyenkor természetes módon a különböző típusu molekulák számával jellemezzük. Ha fölteszük, hogy a folyamat Markov-típusú /amit az eredmények igazolnak/, a valószínűség-eloszlás időbeli változását master egyenlettel írhatjuk le. Az átmeneti valószínűségek fenomenológikus ismeretek alapján megadhatók, hiszen, mint látni fogjuk, kifejezhetők a reakcióállandók segítségével.

$$\langle \{m_k(t)\} \{m_k(t')\} \rangle = 2 \Gamma_k (k_B T) \delta(t-t') \quad /8.14/$$

lesz. A /8.13/ egyenlet minden  $m_k$  komponense egy Ornstein-Uhlenbeck-folyamatot határoz meg.

A magára hagyott rendszer termikus egyensúlyban van és a  $P\{m_k\}$  stacionárius eloszlás jellemzi. A mágnesezettség korrelációs függvénye

$$C(t-t') = \langle m_k(t) m_k(t') \rangle = k_B T \chi_k e^{-\frac{\Gamma_k}{\chi_k} |t-t'|} \quad /8.15/$$

A korrelációk tehát a

$$\tau_k = \frac{\chi_k}{\Gamma_k} \quad /8.16/$$

idő alatt lecsengenek. A korrelációs függvény Fourier-transzformáltja, a spektrális függvény, egyszerű Lorentz-görbe:

$$C(\omega) = \frac{k_B T}{\pi} \frac{\Gamma_k}{\omega^2 + (\Gamma_k / \chi_k)^2} \quad /8.17/$$

A spektrális függvény félérték szélességét meghatározó karakterisztikus frekvencia

$$\omega_k = \frac{1}{\tau_k} \quad /8.18/$$

Megfelelő mágneses tér alkalmazásával elérhetjük, hogy a mágnesezettség várható értéke  $\langle m_k \rangle \neq 0$  legyen. Ha a mágneses teret a  $t=0$  időpontban kikapcsoljuk, akkor a 17. feladat eredményét felhasználva azt látjuk, hogy a mágnesezettség várható értéke:

$$\langle m_k(t) \rangle = \langle m_k(0) \rangle e^{-\frac{\Gamma_k}{\chi_k} t} \quad /8.19/$$

Ezt a változást ugyanaz a relaxációs idő jellemzi, mint a termikus egyensúlyban lévő rendszer korrelációs függvényét.

Vizsgáljuk most a  $k=0$  komponenst. Definíció szerint  $m_0$  a teljes mágnesezettséggel arányos:

$$m_0 = \frac{1}{V} \int d^d x m(x) \quad /8.20/$$

A fázisátalakulási ponthoz közeledve  $\chi_0$  a /8.2/ összefüggés szerint divergál. A konvencionális elmélet lényeges feltételezése az, hogy  $\Gamma_0$  viselkedését a háttér határozza meg, és ezért  $\Gamma_0$  nem viselkedhet szingulárisan a Curie-hőmérsékleten. Ebből azt kapjuk, hogy a  $\tau_0$  relaxációs idő ugyanugy divergál, mint a  $\chi_0$  szuszceptibilitás:

$$\tau_0 = \frac{\chi_0}{\Gamma_0} \sim (T-T_c)^{-\delta} \quad /8.21/$$

Ez a kritikus lelassulás jelensége: a Curie-hőmérséklethez közeledve egyre hosszabb idő szükséges ahhoz, hogy a mágnesezettség egy nem-egyensúlyi értékről elindulva elérje a termikus egyensúly által előírt értéket. A  $k \neq 0$  komponensek is lelassulnak, azonban relaxációs idejük nem divergál.

Az egytengelyű ferromágnes esetében levezetett összefüggéseket könnyen általánosíthatjuk az izotrop ferromágnesekre. Ekkor a mágnesezettség mindhárom  $m_d(x)$ ,  $d=1,2,3$ , komponensét figyelembe kell vennünk. A szabadenergia /8.9/ kifejezése a következőképpen módosul:

$$F(T, m_k) = F(T, 0) + \frac{1}{2k_B T} \sum_{k \neq 0} \frac{m_{dk} m_{d-k}}{\chi_k} \quad /8.22/$$

A mozgásegyenletet csak annyiban kell módosítani, hogy  $\Gamma_k$  helyére

$$\Gamma_k \rightarrow \lambda_k k^2$$

kerül.  $\lambda_k$  neve: transzport együttható. Ezt a módosítást az teszi szükségessé, hogy izotrop ferromágnesben a teljes mág-

Konkrét példaként továbbra is a /9.1/ folyamatot vizsgáljuk, az egyszerűség kedvéért állandó A-koncentráció mellett. A rendszer állapota ekkor a benne lévő X molekulák n számával indexelhető. Rövid időtartamok alatt két molekula keletkezése ill. elbomlása nagyon ritka esemény, ezért születési-kihalási folyamattal van dolgunk. Az átmeneti valószínűségek szoros kapcsolatban állnak a reakcióállandókkal. /9.2/-ből ugyanis leolvasható annak a valószínűsége, hogy időegység alatt egy X molekula elbomoljon. Ez éppen  $\Delta N_1/N=k$ . Mivel N független molekuláról van szó, az  $N \rightarrow N-1$  átmenet valószínűsége

$$\mu_N = kN . \quad /9.6/$$

Hasonlóan kapjuk, hogy

$$\lambda_N = k'aV ,$$

ahol  $aV$  éppen a A molekulák száma. /A reakcióállandó definíciója alapján könnyen belátható az is, hogy két-molekulás reakciókban pl.:  $B+X \xrightarrow{k} C$ , az átmeneti valószínűség az ütközésben résztvevő másik molekula koncentrációjával is arányos:

$$\mu_N = k'bN . /$$

A /9.6-7/ átmeneti valószínűségekkel definiált születési-kihalási folyamat adatai az I. táblázatból /52-53. oldal/ olvashatók le: Az átlagértékre vonatkozó egyenlet ekvivalens a determinisztikus reakció-egyenlettel, /9.4/-gyel. /A következő fejezetben példát látunk arra, hogy ez az egyenértékűség nem-lineáris folyamatokban már nem áll fenn. / A stochasztikus leírás természetesen nyomtérképek számolását is lehetővé teszi. A szórás-négyzetre például a

$$\Delta(t) = \frac{k'aV}{k} + \left(m - \frac{k'aV}{k}\right) e^{-kt} - m e^{-2kt}$$

kifejezést kapjuk ( $m \equiv n_0 V$ ), mely mutatja, hogy a kezdő állapottól távol a szórást elsősorban az A-koncentráció szabja meg /rögzített reakcióállandók mellett/. A stacionárius eloszlás Poisson-típusú lesz:

$$P_N^* = \left(\frac{k'aV}{k}\right)^N \frac{e^{-\frac{k'aV}{k}}}{N!} .$$

## 9.2 Nem-lineáris reakciók

Azokban a kémiai folyamatokban, melyeket nem-lineáris reakció-egyenletek írnak le, érdekes jelenségek következhetnek be: megfelelő körülmények között egyes tulajdonságok /pl.: az oldat színe/ időben periódikusan változnak. Ezzel párhuzamosan a diffúzió szerepe is megnőhet, ilyenkor stabil térbeli strukturák /pl.: változó színű sávok / is kialakulnak. A paraméterek azon tartományában, ahol a homogenitást inhomogén viselkedés váltja föl meglepő hasonlóságot találunk a kémiai rendszer és a fázisátalakulást mutató fizikai rendszerek között. Az egyik ilyen analóg jelenség a fluktuációk jelentős szerepe, mely feltétlenül szükségessé teszi, hogy a folyamat leírásakor stochasztikus egyenleteket használjunk.

Következő példánk, egyszerűsége miatt, nem alkalmas arra, hogy periódikus tulajdonságok kialakulását leírja, lehetővé teszi azonban a fázisátalakulások és a kémiai instabilitás közötti hasonlóság bemutatását.



Tekintsük ezt a folyamatot, amikor az A molekula átalakul X molekulává, s ezt a reakciót egy másik X molekula katalizálja /autokatalitikus reakció/, miközben a fordított folyamat is végbemehet:



Tegyük föl továbbá, hogy X egy B típusu molekulával ütközve C-vé egyesül, s ez is megfordítható reakció,



Az A, B, C molekulák koncentrációját külső szabályozással állandó szinten /a, b és c/ tartják. A rendszer állapotai ekkor az X molekulák N számával jellemezhetők, s a reakció a korábbi példához hasonlóan születési-kihalási folyamattal írható le. Vegyük sorra, milyen változást okoznak az egyes reakciók időegység alatt a  $P_N(t)$  valószínűségeloszlásban! A /9.8/ folyamat járuléka az egyesülésből:

$$k_1 a (N-1) P_{N-1} - k_1 a N P_N .$$

A bomlásból adódó átmeneti valószínűség első ránézésre  $k_1' n N$ , ahol  $n = N/V$ . Ha azonban N molekula van a rendszerben, azok közül egy kiszemelt csak N-1 másikkal ütközhet, ezért a helyes átmeneti valószínűség  $k_1' (N-1) N/V$  lesz, s a valószínűségeloszlás megváltozása

$$\frac{k_1' N(N+1)}{V} P_{N+1} - \frac{k_1' N(N-1)}{V} P_N .$$

A /9.9/ folyamat egyesülésből ill. bomlásból adódó járuléka:

$$k_2 b (N+1) P_{N+1} - k_2 b N P_N , \\ k_2' c V P_{N-1} - k_2' c V P_N .$$

Mindezeket összeadva olyan születési-kihalási folyamatra jutunk, melyet a

$$\lambda_N = (k_1 a N + k_2' c V) , \quad \mu_N = (k_1' N(N-1)/V + k_2 b N) \quad /9.10a/$$

átmeneti valószínűségek definiálnak. Az X molekulák átlagos számára /2.28/ alapján a következő egyenletet kapjuk:

$$\langle \dot{N}(t) \rangle = k_1 a \langle N \rangle + k_2' c V - k_1' \langle N(N-1) \rangle / V - k_2 b \langle N \rangle . \quad /9.10/$$

Ezt nem tudjuk egzaktul megoldani, hiszen tartalmazza  $\langle N^2 \rangle$ -ot, az utóbbira vonatkozó egyenletben viszont fellép  $\langle N^3 \rangle$  é.i.t. A /9.10/-zel kapcsolatos másik bonyodalom az, hogy nem ekvivalens a determinisztikus egyenlettel. A nehézséget a nem-lineáris tag jelenléte okozza, hiszen a két egyenlet csak a  $k_1'$ -vel arányos részben különbözik. Ha az

$$\langle N(N-1) \rangle \approx \langle N^2 \rangle \quad /9.11/$$

közelítés jogos, /9.10/-ből az

$$\dot{n}(t) = (k_1 a - k_2 b) n - k_1' n^2 + k_2' c \quad /9.12/$$

determinisztikus egyenletre jutunk. Amennyiben a  $P_N(t)$  eloszlás Poisson-típusú, /9.11/ egyenlőségként teljesül. /9.11/ tehát biztosan jó közelítés akkor, ha az eloszlásfüggvény nem tér el túlságosan a Poisson-eloszlástól.

Érdekeségként megmutatjuk, hogy ha mindkét reakcióra külön-külön teljesül a részletes egyensúly elve, akkor leg-  
alábbis a stacionárius eloszlás Poisson-típusú. Bontsuk föl az átmeneti valószínűségeket az egyes reakciókból adódó járulé-  
kokra:

$$\lambda_N = \lambda_N^{(1)} + \lambda_N^{(2)} \quad , \quad \mu_N = \mu_N^{(1)} + \mu_N^{(2)} \quad ;$$

ahol

$$\lambda_N^{(1)} = k_1 a N \quad , \quad \lambda_N^{(2)} = k_2' c V \quad ; \quad \mu_N^{(1)} = k_1' N(N-1)/V \quad , \quad \mu_N^{(2)} = k_2 b N.$$

Ha a részletes egyensúly külön-külön fennáll, akkor

$$\lambda_{N-1}^{(1)} P_{N-1}^* = \mu_N^{(1)} P_N^* \quad , \quad \lambda_{N-1}^{(2)} P_{N-1}^* = \mu_N^{(2)} P_N^* \quad ;$$

amiből következik, hogy

$$\frac{\lambda_{N-1}^{(1)}}{\mu_N^{(1)}} = \frac{\lambda_{N-1}^{(2)}}{\mu_N^{(2)}} = \frac{k_1 a}{k_1' N/V} = \frac{k_2' c}{k_2 b N/V} \equiv \frac{\sigma}{N}.$$

Ezen feltétel teljesülése esetén az  $a$ ,  $b$  és  $c$  koncentrációk nem választhatók meg függetlenül, hiszen igaz kell legyen, hogy  $c/ab = \text{állandó}$ . /Érdemes megjegyezni, hogy ez az állítás egyenértékű a tömeghatás törvényével, amely szerint adott hőmérsékleten, egyensúlyban a reakcióegyenletek egyik oldalán álló anyagok koncentrációinak szorzata arányos a másik oldalon álló anyagok koncentrációinak szorzatával. Esetünkben /9.8-9/ alapján  $n^2 c \sim a b n^2$ . /Az eddigiekből következik, hogy ha a részletes egyensúly külön-külön teljesül, akkor

$$\lambda_{N-1} = \frac{\sigma}{N} \mu_N \quad ,$$

amely /2.31-32/ felhasználásával a

$$P_N^* = e^{-\sigma} \frac{\sigma^N}{N!} \quad , \quad N \geq 0$$

stacionárius eloszlásra vezet.

A tapasztalat azt mutatja, hogy a determinisztikus egyen-  
let makroszkópikus szempontból általában jó leírást ad. /9.12/  
szétválasztással egyszerűen megoldható, s a végeredmény

$$n(t) = \frac{x_1 - x_2}{2 k_1'} - \frac{1}{2 k_1' \tau} \frac{A e^{-\frac{t}{\tau}} + 1}{A e^{-\frac{t}{\tau}} - 1} \quad , \quad /9.13/$$

ahol

$$\tau = \frac{1}{\sqrt{(x_1 - x_2)^2 + 4 k_1' k_2' c}} \quad , \quad A = \frac{2 n_0 k_1' - x_1 + x_2 - \tau^{-1}}{2 n_0 k_1' - x_1 + x_2 + \tau^{-1}} \quad . \quad /9.14/$$

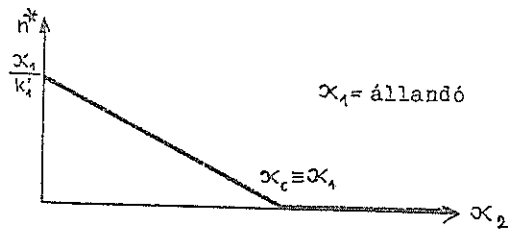
$n_0$  az X molekulák kezdeti koncentrációja és

$$x_1 \equiv k_1 a \quad , \quad x_2 \equiv k_2 b \quad . \quad /9.15/$$

Fontos speciális esethez jutunk, ha a /9.9/reakció csak az e-  
gyesülés irányában folyik ( $k_2' = 0$ ). A karakterisztikus idő  
ekkor  $\tau^{-1} = |x_1 - x_2|$ , s /9.13/-ből a stacionárius megoldásra a  
következő adódik:

$$n^* = \begin{cases} \frac{x_1 - x_2}{k_1'} & , \text{ ha } x_1 > x_2 \quad , \\ 0 & , \text{ ha } x_1 \leq x_2 \quad . \end{cases}$$

Ezek szerint  $x_2 \geq x_1$  esetén az összes X molekula elfogy, míg  
 $x_2 < x_1$  mellett véges X-koncentráció állandósul. Az egyensu-  
lyi koncentráció  $b$ -től való függését mutatja a következő  
ábra:



Az I molekulát tartalmazó és az őt nem tartalmazó stacionárius állapotok közötti átmenet erős hasonlóságot mutat a termodinamikai egyensúlyban végbemenő másodrendű fázisátalakulásokhoz / U. 7-8. fejezet/.  $n^*$  hasonló szerepet játszik itt, mint a 7. fejezetben az egyensúlyi mágnesezettség /rendparaméter/. Az "átalakulás" most nem a hőmérséklet, hanem a b koncentráció / pontosabban a  $\alpha_1 - \alpha_2$  mennyiség / változása következtében történik. Érdemes megemlíteni, hogy a  $k_1' \neq 0$  esetben  $k_1' c$  a H külső tér megfelelője. /Ilyenkor természetesen elsőrendű fázisátalakulásokhoz hasonló viselkedést találunk./

Vizsgáljuk most a kémiai reakciót a stacionárius állapot közvetlen közelében! Ez azt jelenti, hogy már a kezdeti koncentráció is csak alig tér el a stacionárius értéktől, ezért  $n(t) - n^*$  az egész folyamat során kis mennyiség, így elég a /9.12/ egyenlet linearizált változatát tanulmányozni. A továbbiakban csak a  $\alpha_2 > \alpha_1$  esettel foglalkozunk. Ekkor  $n^* = 0$ , ezért az  $n(t)$ -ben lineáris tagokat kell megtartanunk /formálisan  $k_1'$ -t nullának választhatjuk/. /9.12/ megoldása ebben az esetben

$$n(t) = n_0 e^{-(\alpha_2 - \alpha_1)t}$$

A stacionárius állapot közelében a fluktuációt is meg tudjuk adni, hiszen ebben a tartományban a folyamat átmeneti való-

színűségeiben, /9.10a/-ban a  $k_1'$ -vel arányos tag elhanyagolható. Az így definiált lineáris születési-kihalási folyamat szórása az I. táblázatból leolvasható:

$$\Delta(t) = n_0 N \frac{\alpha_2 + \alpha_1}{\alpha_2 - \alpha_1} e^{-(\alpha_2 - \alpha_1)t} \left( 1 - e^{-(\alpha_2 - \alpha_1)t} \right)$$

$t \rightarrow \infty$ -re a  $\Delta(t)$  zérushoz tart, ami annak felel meg, hogy a  $\alpha_2 > \alpha_1$  esetben az összes I molekula biztosan eltűnik. Másrészt azonban jól látszik, hogy a kritikus pont ( $\alpha_2 = \alpha_1$ ) felé közeledve a lecsengés egyre később következik be, míg végül a  $\alpha_2 \rightarrow \alpha_1$  határértékben állandóan növekvő szórást kapnánk. Meg kell jegyeznünk, hogy a lineáris közelítés a kritikus pont közvetlen közelében már nem alkalmazható, ilyenkor ugyanis a nem-lineáris tag /9.12/ -ben már nem hanyagolható el az elsőhöz képest. A közelítés feltétele tehát:  $\alpha_2 - \alpha_1 \gg n_0 k_1'$ .

### 9.3 A diffúzió figyelembevétele

Vizsgáljuk most meg, hogyan írható le a reakcióban részt vevő molekulák térbeli vándorlása stochasztikus folyamatként. Osszuk föl a teljes térfogatot  $e$  élhosszusú kis kockákra, s legyen  $\underline{l}$  egy kiszemelt kocka helyvektora! Jelöljük a szomszédos kockákat jellemző helyvektorokat  $\underline{l} + \underline{e}$ -vel, /ahol  $\underline{e}$  hat különböző vektor-értéket vehet fel, mindegyik hossza  $e$ /. Az egyszerűség kedvéért csak egy típusu molekula diffúzióját vizsgáljuk. Az  $\underline{l}$ -lel definiált cellában lévő molekulák száma /ebből a típusból/  $N_{\underline{l}}$ . A rendszer állapotait az  $\{N_{\underline{l}}\}$  halmaz meg-

adásával definiáljuk. A  $P_{\{N_l\}}(t)$  valószínűségeloszlás megváltozása két okból következhet be: a kémiai reakció ill. a diffúzió miatt. Az utóbbi leírásakor feltesszük, hogy rövid idők alatt csak a szomszédos kockák között történhet átmenet, s a folyamat nem rendelkezik memóriával /a születési-kihalási folyamat térbeli általánosítása/. Legyen  $D'$  annak időegységre eső valószínűsége, hogy valamelyik cellából egy részecske átkerül az egyik szomszédosba, s ez független az iránytól. Az  $N_l$  betöltöttségű kockából tehát  $D'N_l$  valószínűséggel jut át egy részecske a kiszemelt szomszédos cellába. Az összes lehetőség felírásakor először egy kiválasztott kocka szomszédaira, majd az összes  $l$  helyvektorra is összegezni kell. A valószínűségi függvény diffúzió által okozott megváltozása tehát így írható le:

$$\dot{P}_{\{N_l\}}(t) \Big|_{\text{diff}} = \sum_{l \in E} \left\{ D' N_{l+e} P_{\dots N_{l-1}, N_{l+e}+1, \dots}(t) - D' N_l P_{\dots N_l, N_{l+e}, \dots}(t) \right\} \quad /9.16/$$

Konkrét példaként vizsgáljuk az előző fejezetben definiált autokatalikus reakciót az  $n^*=0$  stacionárius állapota körüli lineáris közelítésben!  $N_l$  most az X molekulák száma. /9.16/ a reakciótól függetlenül érvényben marad, de meg kell határoznunk a valószínűségnek a kémiai reakciók miatt történő megváltozását is. Az átmeneti valószínűségeket most  $e^3$  térfogatu rendszerben kell fölírni:

$$\lambda_{N_l} = \alpha k_1 N_l \quad , \quad \mu_{N_l} = k_2 b N_l \quad , \quad /9.17/$$

és

$$\dot{P}_{\{N_l\}}(t) \Big|_{\text{reakció}} = \sum_l \left\{ \lambda_{N_l-1} P_{\dots N_l-1, \dots}(t) - (\lambda_{N_l} + \mu_{N_l}) P_{\dots N_l, \dots}(t) + \mu_{N_l+1} P_{\dots N_l+1, \dots}(t) \right\} \quad /9.18/$$

A teljes master egyenlet

$$\dot{P}_{\{N_l\}}(t) = \dot{P}_{\{N_l\}}(t) \Big|_{\text{diff}} + \dot{P}_{\{N_l\}}(t) \Big|_{\text{reakció}} \quad /9.19/$$

/9.19/ megoldása reménytelen feladat, de az átlagokra kezelhető egyenletet kapunk. Vizsgáljuk először egy adott  $l$  indexű kockában lévő X molekulák átlagos számát! Szorozzuk be /9.16/-ot  $N_l-1$ el, majd összegezzünk a lehetséges állapotokra:

$$\sum_{\{N_l\}} \left\{ D' N_{l+e} (N_{l+e} + 1) P_{\dots N_{l+e}+1, \dots}(t) - D' N_l N_l P_{\dots N_l, N_{l+e}, \dots}(t) \right\} \quad /9.19/$$

Indexcserék után könnyen látható, hogy mindazokból a tagokból, melyekben  $l$  vagy  $l+e$  nem egyezik meg a vizsgált  $l$  helyvektorral, eredően nulla járulékot kapunk. A fennmaradó tagokban az  $N_{l-1} \rightarrow N_l$  ,  $N_{l+e}+1 \rightarrow N_{l+e}$  helyettesítést elvégezve a

$$D' \sum_l \left\{ \langle (N_{l+1}) N_{l+e} \rangle - \langle N_l^2 \rangle + \langle (N_{l-1}) N_l \rangle - \langle N_l N_{l+e} \rangle \right\}$$

eredményre jutunk. A /9.18/-ból adódó járulékkal együtt:

$$\langle \dot{N}_l(t) \rangle = \frac{1}{2} D' \sum_l \langle N_{l+e} - 2N_l + N_{l-e} \rangle + \langle \lambda_{N_l} \rangle - \langle \mu_{N_l} \rangle \quad /9.20/$$

Ez a /2.28/ egyenlet diffúzióra is érvényes általánosítása.

Ha a kockák beosztása elegendően finom, érdemes áttérni a folytonos térváltozóra:  $\underline{L} \rightarrow \underline{r}$ , s ugyanakkor bevezetni a lokális részecskeszám-koncentrációt az

$$n(\underline{r}, t) = \langle N_{\underline{L}}(t) \rangle e^{-3}$$

definícióval. /9.20/ ekkor a következő differenciálegyenletbe megy át

$$\frac{\partial n(\underline{r}, t)}{\partial t} = D \nabla^2 n(\underline{r}, t) + (\alpha_1 - \alpha_2) n(\underline{r}, t), \quad /9.21/$$

ahol a  $D$  diffúziós állandó a  $D^1 e^2$  mennyiség határértéke. A /9.21/ egyenlet természetesen makroszkópikus megfontolások alapján is megvapható. A stochasztikus leírásban azonban tovább léphetünk, s bonyolultabb mennyiségek átlagos viselkedését is meghatározhatjuk. A

$$g(\underline{r}, \underline{r}', t) = \langle N_{\underline{L}} N_{\underline{L}'} \rangle e^{-6} - \langle N_{\underline{L}} \rangle \langle N_{\underline{L}'} \rangle e^{-6} - n(\underline{r}, t) \delta(\underline{r} - \underline{r}') \quad /9.22/$$

korrelációs függvényre például /9.16-18/ alapján a fentiekhez hasonló /de hosszadalmasabb/ számolással a következő egyenletet kapjuk:

$$\frac{\partial g}{\partial t} = D(\nabla_{\underline{r}}^2 + \nabla_{\underline{r}'}^2) g + 2(\alpha_1 - \alpha_2) g + 2\alpha_1 n(\underline{r}, t) \delta(\underline{r} - \underline{r}'). \quad /9.23/$$

Az általunk vizsgált lineáris rendszer térben homogén, ezért a korrelációs függvény csak a relatív koordinátáktól függhet. A  $g(\underline{r} - \underline{r}', t) \rightarrow g(\underline{r}, t)$  jelölés bevezetése után /9.23/ így írható:

$$\frac{1}{2} \frac{\partial g(\underline{r}, t)}{\partial t} = D \nabla^2 g(\underline{r}, t) + (\alpha_1 - \alpha_2) g(\underline{r}, t) + \alpha_1 n(t) \delta(\underline{r} - \underline{r}'), \quad /9.24/$$

ahol  $n(t)/9.21/$  homogén megoldása.

A /9.21/, /9.24/ egyenletek megoldásának vizsgálatokor célszerű áttérni a térkoordináták szerinti Fourier-transzformáltakra

$$n_{\underline{k}}(t) = V^{-\frac{1}{2}} \int e^{-i\underline{k}\underline{r}} n(\underline{r}, t) d^3 \underline{r}, \quad /9.25/$$

melyek időbeli változását /9.21/ alapján könnyen megkaphatjuk:

$$n_{\underline{k}}(t) = n_{\underline{k}}(0) e^{-\omega_c(\underline{k})t},$$

ahol a karakterisztikus frekvencia

$$\omega_c(\underline{k}) = D k^2 + \alpha_2 - \alpha_1.$$

Az eredmény ezt mutatja, hogy a kritikus pont felé közeledve mindegyik Fourier-komponens egyre lassabban tart stacionárius értékéhez /kritikus lelassulás/, s adott  $\alpha_1 - \alpha_2$  mellett a nagy hullámhosszu /kis  $k$ -val jellemzett/ térbeli változások relaxációja tart tovább.

Abban az esetben, ha a korrelációt olyan kezdő állapotból indulva vizsgáljuk, melyhez a stacionárius koncentráció ( $n=0$ ) tartozik, a  $g_{\underline{k}}(t)$  Fourier-komponensre a

$$g_{\underline{k}}(t) = g_{\underline{k}}(0) e^{-2\omega_c(\underline{k})t}$$

időbeli viselkedést találjuk. Ez arra utal, hogy a kritikus ponthoz közel a kezdeti korreláció nagyon lassan szűnik meg, vagyis a fluktuációk egyre jelentősebb szerepet játszanak / l. 8. fejezet/.

Végezetül hangsúlyozzuk, hogy annak ellenére, hogy a lineáris közelítés kvalitatíven helyes képet ad a fázisátalakulás-szerű jelenségekről, a kritikus tartománybeli viselkedés pontos leírása, a fluktuációk megfelelő kezelése csak a nem-lineáris tagok figyelembevételével történhet.

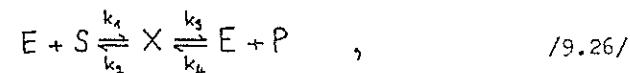
Az ebben a fejeztben ismertetett módszer sikeresen alkalmazható kémiai rendszerekben kialakuló inhomogenitások leírására. Ez az érdekes jelenség azonban csak az általunk tanulmányozottnál jóval bonyolultabb reakciók esetén következik be.

#### 9.4 Enzim kinetika

Az enzim-fehérje aktivitása a molekula térszerkezetének függvénye, ami viszont nagyon érzékenyen reagál a környezet megváltozására /hőmérséklet, pH stb./. Ráadásul a biokémiai folyamatok általában nagyszámú enzimreakcióból tevődnek össze. Így előfordulhat, hogy a környezet kis fluktuációja által okozott aktivitás-változások következtében a folyamat során keletkező molekulák száma szignifikánsan eltér az átlagostól, aminek viszont jelentős következményei lehetnek, hiszen ha a biokémiai folyamatok nem az optimális körülmények között mennek végbe az veszélyeztetheti az egész rendszer működését. Ezért fontos a biokémiai reakciók leírásában a stochasztikus megközelítés.

Példaként a legegyszerűbb enzimek működési mechanizmusát vizsgáljuk. Az enzimek nagy része úgy hat kölcsön az általa

átalakítandó molekulával, a szubsztráttal (S), hogy előbb egy enzimszubsztrát komplex (X) jön létre, melyben megtörténik a szubsztrát átalakulása a terméké (P), majd a komplex az enzimre (E) és a termékre bomlik. Mindegyik reakció megfordítható, de a termék már csak kis valószínűséggel egyesül az enzimmel komplexszé. A folyamat egyenlete



$k_i$  kicsi. Ez a Michaelis-Menten-mechanizmus.

Jelöljük a továbbiakban a komplex-molekulák számát  $N$ -nel, a többi molekula számát pedig a megfelelő nagybetűvel. A koncentrációk jelölésére a kis betűket használjuk majd.

A reakció során érvényes két megmaradási tétel. Az egyik az, hogy a szabad enzimek és a komplexek száma állandó:

$$E + N = E_0, \quad /9.27/$$

ahol  $E_0$  az enzim molekulák száma kezdetben /komplexet nem vesszünk be kívülről a rendszerbe/. A másik összefüggés az, hogy a kiindulási szubsztrát-szám ( $S_0$ ) meg kell egyezzen a szubsztrátok, komplexek és termékek számának összegével bármelyik későbbi pillanatban

$$S + N + P = S_0. \quad /9.28/$$

Ezek szerint a rendszer állapotait két független egész számmal jellemezhetjük. Legyenek ezek  $N$  és  $S$ . A  $P_{N,S}(t)$  valószínűség-eloszlást meghatározó master egyenlet könnyen felírható:

$$\begin{aligned} \dot{P}_{N,S}(t) = & k_1(E_0 - N + 1)(S + 1)/V P_{N-1,S+1} + k_2(N+1)P_{N+1,S-1} + \\ & + k_3(N+1)P_{N+1,S} + k_4(E_0 - N + 1)(S_0 - S - N + 1)/V P_{N-1,S} - /9.29/ \\ & - [k_1(E_0 - N)S/V + (k_2 + k_3)N + k_4(E_0 - N)(S_0 - S - N)/V] P_{N,S}, \end{aligned}$$

ahol  $V$  a rendszer térfogata. A kezdeti feltétel

$$P_{N,S}(0) = \delta_{N,0} \delta_{S,S_0} . \quad /9.30/$$

A fenti egyenlettel definiált kétváltozós születési-kihalási folyamat egzakt eloszlásfüggvénye nem ismert. Nem nehéz azonban meghatározni az átlagokra vonatkozó egyenleteket:

$$\begin{aligned} \langle \dot{N}(t) \rangle = & k_1 \langle (E_0 - N)S \rangle / V - (k_2 + k_3) \langle N \rangle + k_4 \langle (S_0 - S - N)(E_0 - N) \rangle / V, \\ \langle \dot{S}(t) \rangle = & -k_1 \langle (E_0 - N)S \rangle / V + k_2 \langle N \rangle, \end{aligned}$$

melyek az  $\langle NS \rangle \approx \langle N \rangle \langle S \rangle$  és  $\langle N^2 \rangle \approx \langle N \rangle^2$  közelítésben ekvivalensek az

$$\begin{aligned} \dot{e} = & -k_1 e s + (k_2 + k_3) n - k_4 e p, \\ \dot{s} = & -k_1 e s + k_2 n, \\ \dot{n} = & k_1 e s - (k_2 + k_3) n + k_4 e p, \\ \dot{p} = & k_3 n - k_4 e p \end{aligned} \quad /9.31/$$

determinisztikus egyenletekkel.

A továbbiakban ezzel a speciális esettel foglalkozunk, amikor a szubsztrát és a termék koncentrációja állandónak tekinthető. Ez kísérletileg is megvalósítható, ha az enzim-rendszert féligáteresztő hártával vesszük körül, melyen az enzim ill. a komplex nem hatolhat át, szemben a /rendszerint kis molekula-

méretű/ szubsztráttal ill. termékkel, és ha a környezet olyan nagyszámu  $S$  és  $P$  típusu molekulát tartalmaz, hogy ezek koncentrációja a vizsgált folyamattól függetlenül állandónak ( $s$  és  $p$ ) tekinthető. Amennyiben a /9.26/ reakció elég lassan megy végbe ahhoz, hogy ne zavarja meg az egyensúlyt a hártával határolt rendszer és környezete között, a koncentráció a hártán belül is  $s$  ill.  $p$  lesz. A rendszer állapotát ekkor egyetlen szám:  $N$  jellemzi. A  $P_N(t)$  eloszlást meghatározó master egyenlet /9.29/ alapján

$$\begin{aligned} \dot{P}_N(t) = & k_1(E_0 - N + 1)s P_{N-1} + k_2(N+1)P_{N+1} + k_3(N+1)P_{N+1} + \\ & + k_4(E_0 - N + 1)p P_{N-1} - [k_1(E_0 - N)s + (k_2 + k_3)N + k_4(E_0 - N)p] P_N, \end{aligned} \quad /9.32/$$

ami nem más mint a

$$\lambda_N = (k_1 s + k_4 p)(E_0 - N), \quad \mu_N = (k_2 + k_3)N$$

átmeneti valószínűségekkel definiált születési-kihalási folyamat. A kezdeti feltétel  $P_N(0) = \delta_{N,0}$ . Az I. táblázat/52-53. oldal/ szerint az átlagérték időbeli változását az

$$\langle N(t) \rangle = E_0 \frac{k_1 s + k_4 p}{k_2 + k_3 + k_1 s + k_4 p} \left( 1 - e^{-(k_1 s + k_4 p + k_2 + k_3)t} \right), \quad /9.33/$$

függvény írja le. Említettük már, hogy a gyakorlatban előforduló esetekben  $k_4$  elhanyagolhatóan kicsi, ezért a következőkben zérusnak választjuk. Ekkor egyszerű kapcsolat áll fenn  $\langle N(t) \rangle$  és az enzim által katalizált reakció egyik legfontosabb jellemzője, a sebessége között. A  $v$  sebességet a termék koncentráció időderiváltjaként értelmezzük. /9.31/ utolsó egyen-

lete alapján

$$v(t) = k_3 \langle N(t) \rangle / V. \quad /9.34/$$

A vizsgált körülmények között tehát az enzimreakció sebessége a kezdeti nulla értékről exponenciálisan növekszik a stacionárius állapothoz tartozó

$$v^* = \frac{k_3 E_0 / V \Delta}{(k_2 + k_3) / k_1 + \Delta}$$

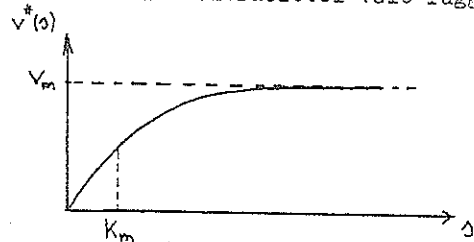
értékre. Szokásosabb alakra jutunk a

$$K_m = \frac{k_2 + k_3}{k_1}, \quad v_m = \frac{k_3 E_0}{V}$$

jelölések bevezetésével. Az így adódó

$$v^* = \frac{v_m \Delta}{K_m + \Delta}$$

Michaelis-egyenlet az enzime jellemző két adat ( $v_m$  és  $K_m$ ) segítségével adja meg a stacionárius állapot reakciósebességének a szubsztrát-koncentrációtól való függését.



A kis koncentrációkra érvényes lineáris növekedés után a reakciósebesség a  $K_m$  ( $E_0$ -tól független) Michaelis-állandónak megfelelő szubsztrát-koncentrációnál éri el a maximális sebesség ( $v_m$ ) felét. A maximális sebesség egyébként annak az

esetnek felel meg, amikor gyakorlatilag az összes enzim komplexet alkot. A stacionárius állapot beállításának relaxációs ideje /9.31/ alapján  $\tau^{-1} = k_1 (\Delta + K_m)$ .

Hasonlóan tárgyalhatjuk a szórás időfüggését is / l. I. táblázat/. A stacionárius értékhez tartás karakterisztikus ideje itt is  $\tau$ . A reakciósebesség szórás-négyzete a stacionárius állapotban

$$\frac{k_3^2 \Delta^*}{V^2} = \frac{k_3^2 E_0 K_m \Delta}{V^2 (K_m + \Delta)^2} = \frac{K_m}{E_0 \Delta} v^{*2}$$

A relativ szórás tehát

$$\frac{\Delta v}{v^*} = \sqrt{\frac{K_m}{E_0 \Delta}}$$

ami akkor nagy, ha kicsi a szubsztrát koncentráció, pontosabban ha az  $E_0 \Delta$  szorzat kicsi  $K_m$ -hez képest. /A legtöbb kísérletben  $E_0 \ll \Delta V$  /

A stacionárius állapotra jellemző további mennyiségek a

$$P_N^* = \binom{E_0}{N} \left( \frac{K_m}{K_m + \Delta} \right)^N \left( \frac{\Delta}{K_m + \Delta} \right)^{E_0 - N}$$

határeloszlás segítségével adhatók meg.

Irodalom

HAKEN, H.: Synergetics — An Introduction, Springer Verlag, 1977.  
 GOEL, N.S., RICHTER-DYN, N.: Stochastic Models in Biology, Academic Press, 1974.  
 van KAMPEN, NG.: in Lecture Notes in Physics 84 Springer 1978



10. Stochasztikus modellek a biológiában

Azt, hogy a stochasztikus folyamatok hogyan alkalmazhatók biológiai jelenségek leírására, a biológia különböző területeiről választott példák segítségével mutatjuk be.

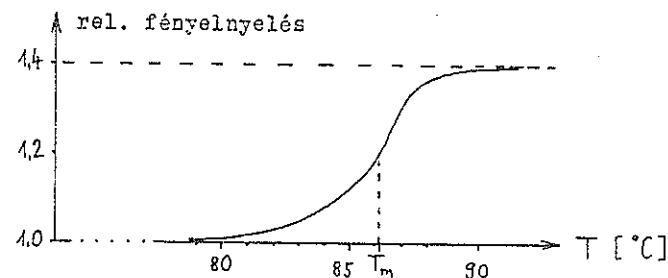
10.1 A DNS szerkezetének megváltozása

A DNS molekula normális körülmények között kettős hélix alakú, melynek két szálát a szálakon elhelyezkedő kisebb molekulacsoportok, az ún. bázisok között kialakuló kötések /hidrogén hidak/ tartják össze. A négy különböző bázis: az adenin /A/, a timin /T/, a citozin /C/ és a guanin /G/; a DNS-ben csak A-T ill. C-G bázispárok állhatnak egymással szemben. A C-G kötés erősebb, mert több hidrogén hidat tartalmaz.

Ez a speciális makromolekula is csak bizonyos körülmények között stabil. A környezet paramétereinek viszonylag csekély megváltoztatásával elérhető, hogy a kettős hélix két különálló szálra szakadjon szét, amelyek azután rendezetlen formát vesznek föl, ún. gomolyagot alkotnak. A jelenség kiváltásának egyik legegyszerűbb módja a hőmérséklet emelése. Ennek során a molekula szerkezete egy darabig alig változik, majd szűk /néhány °C-os/ hőmérséklet-intervallumban hirtelen megtörténik a két szálra bomlás. A DNS denaturálódásnak ezt a módját szokás a DNS olvadásának is nevezni. Az olvadási hőmérséklet / $T_m$ / definíció szerint az a hőmérséklet,

ahol a bázispárok közötti kötések fele már felszakadt.

A jelenség kísérleti tanulmányozására az ad lehetőséget, hogy a kötésben lévő bázisok elektronjainak gerjeszthetősége kisebb, mint a szabad bázisok elektronjaié, s ennek következtében a kettős hélix szerkezetű DNS fényelnyelése /az ultraibolya tartományban/ kisebb a denaturált DNS-énél. 2600 Å hullámhosszu fényben a híg DNS oldat abszorpciója kb. 40%-kal növekszik az olvadás során. A következő ábra egy tipikus mérési eredményt mutat



Ez a jól mérhető effektus, és az a tény, hogy az abszorpció változása arányosnak tekinthető a felszakadt kötések számával lehetővé teszi az épen maradt kötések számának viszonylag pontos meghatározását. Az egész folyamat időben is követhető.

A továbbiakban azt az egyszerű esetet vizsgáljuk részletesen, amikor a DNS molekula kizárólag egy típusu kötések, pl. csak A-T párokat tartalmaz. Ilyen molekulákat mesterségesen elő lehet állítani, s így lehetőség adódik az elméleti és kísérleti eredmények összehasonlítására.

Jelölje  $N(\gg 1)$  a DNS-ben lévő bázispárok számát,  $n$

pedig az ép kötések számát. Legyen  $\mu_n$  ill.  $\lambda_n$  annak időegységre eső valószínűsége, hogy az  $n$  kötést tartalmazó molekulában/ $A_n$ -ben/ egy kötés felbomlik ill. egy szétszakadt kötés újra kialakul. A folyamat a következő egyenlettel jellemezhető:

$$2A_0 \xrightleftharpoons[\mu_1]{\lambda_0} \dots \rightleftharpoons_{\mu_{n-1}}^{A_{n-1}} \xrightleftharpoons[\mu_n]{\lambda_{n-1}} A_n \xrightleftharpoons[\mu_{n+1}]{\lambda_n} A_{n+1} \rightleftharpoons \dots \xrightleftharpoons[\mu_N]{\lambda_{N-1}} A_N. \quad /10.1/$$

/Ez egyben a kémiai reakciókkal való analógiára is utal./ Legezen  $P_{n,m}(t)$  annak a valószínűsége, hogy a  $t$  pillanatban  $n$  fel nem bomlott kötés van a molekulában, ha kezdetben  $m$  volt. A /10.1/-nek megfelelő master egyenlet

$$\dot{P}_{n,m}(t) = \lambda_{n-1} P_{n-1,m}(t) - (\lambda_n + \mu_n) P_{n,m}(t) + \mu_{n+1} P_{n+1,m}(t). \quad /10.2/$$

Amennyiben a rendszert a  $T_m$  olvadási hőmérséklethez közeli tartományban vizsgáljuk, nincs nagy valószínűsége annak, hogy az  $n=N$  ill.  $n=0$  értékekkel jellemzett szélsőséges lehetőségek megvalósuljanak. Ilyenkor a peremfeltételeknek várhatóan nincs jelentős szerepük, ezért korlátozatlanak tekinthetjük a folyamatot.

Az átmeneti valószínűségeket az olvadás mikroszkópikus mechanizmusa határozza meg. Ha az olvadás úgy menne végbe, hogy a kötések felbomlása csak adott sorrendben történhet, vagyis mindig az utolsó szétvált bázispárnak van csak esélye arra, hogy újra egyesüljön, s mindig csak az ezt követő bázispár kötése szakadhat föl /cípár mechanizmus/, az átmeneti valószínűségek állandók:

$$\lambda_n = \nu \quad , \quad \mu_n = \delta \quad ,$$

hiszen minden bázispár egyforma. Az átlag ill. a szórásnégyzet időbeli változása az I. táblázat szerint ekkor

$$\langle n(t) \rangle = m + (\nu - \delta)t \quad ; \quad \Delta = (\nu + \delta)t \quad . \quad /10.3/$$

Ettől lényegesen különbözik az a lehetőség, amikor a kötések az egész lánc mentén, egymástól függetlenül bomlanak fel ill. alakulnak ki újra,  $\mu$  ill.  $\lambda$  időegységre eső valószínűséggel. A bázispárok feltételezett függetlensége miatt az átmeneti valószínűségek ebben az esetben így írhatók:

$$\lambda_n = \lambda(N-n) \quad , \quad \mu_n = \mu n \quad . \quad /10.4/$$

Az ép kötések átlagos számát megadó függvény most exponenciális / l. I. táblázat/:

$$\langle n(t) \rangle = n^* + (m - n^*) e^{-(\lambda + \mu)t} \quad , \quad /10.5/$$

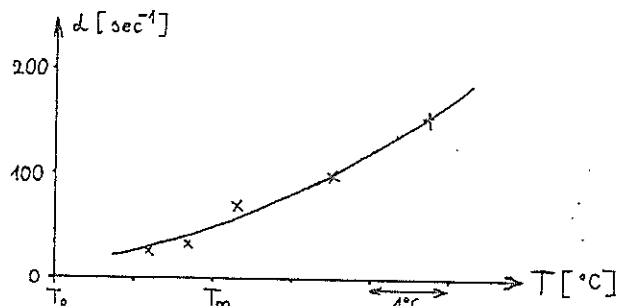
ahol  $n^*$  a stacionárius érték:

$$n^* = N \frac{\lambda}{\lambda + \mu} \quad . \quad /10.6/$$

A szintetikus DNS-en végzett mérések egyértelműen azt mutatják, hogy a fényelnyelés időben exponenciálisan változik, ha az oldat hőmérsékletét hirtelen megváltoztatjuk néhány °C-kal. Ezt az eredményt két előző egyszerű modellünk jellemzőivel összevetve arra a következtetésre jutunk, hogy a DNS olvadásában elsősorban a véletlen kötés-felbomlásoknak van szerepe.

Az A-T bázispárokat tartalmazó DNS esetén az új egyenletértékhez tartás karakterisztikus frekvenciája ( $\alpha$ ) hő-

mérsékletfüggésére a következő mérési eredmény adódott:



Itt  $T_0$  jelöli a kiindulási,  $T$  a végső hőmérsékletet. Esetünkben  $d = \lambda + \mu$ . A fenti adatok a /10.6/ stacionárius érték mérésekor nyert információkkal együtt elegendőek ahhoz, hogy meg lehessen határozni a  $\lambda$  és  $\mu$  paraméterek hőmérsékletfüggését.  $\lambda(T)$  csökkenő,  $\mu(T)$  pedig növekvő függvénynek adódik, melyek értékei az olvadásponton éppen megegyeznek:

$$\lambda(T_m) = \mu(T_m) \quad , \quad /10.7/$$

ami /10.6/-ből is látszik, hiszen csak ekkor lehet  $n^* = N/2$ .

Érdeemes megjegyezni, hogy  $\lambda$  és  $\mu$  helyett használhatunk más paramétereket is, például a

$$\lambda = d \frac{e^{-g}}{e^g + e^{-g}} \quad , \quad \mu = d \frac{e^g}{e^g + e^{-g}} \quad /10.8/$$

definícióval bevezetett  $d$  és  $g$  mennyiséget. A fenti jelölés azért is célszerű, mert utal arra, hogy a bázispár kétállapotu rendszernek tekinthető /kötött vagy felbomlott/. A  $2gkT$  mennyiség ezek szerint a bázispár effektív kötési energiája. A /10.7/ egyenlet csak úgy teljesülhet, ha az olvadási pont közvetlen közelében

$$g = a(T - T_m) \quad , \quad /10.9/$$

ahol  $a$  állandó.  $d$  továbbra is a karakterisztikus frekvencia.

Térjünk vissza a /10.4/ átmeneti valószínűségekkel definiált folyamat szórásának vizsgálatához! Az I. táblázatból leolvasható, hogy

$$\Delta(t) = \frac{\mu}{\lambda} \frac{n^{*2}}{N} + \frac{\mu - \lambda}{\mu + \lambda} (m - n^*) e^{-(\lambda + \mu)t} - \frac{m(\mu - \lambda) + n^* \lambda}{\mu + \lambda} e^{-2(\lambda + \mu)t}$$

Amennyiben létezik olyan  $t_m > 0$  érték, hogy  $\left. \frac{d\Delta}{dt} \right|_{t_m} = 0$ , vagyis

$$e^{-(\lambda + \mu)t_m} = \frac{1}{2} \left[ 1 - \frac{\mu n^*}{\lambda n^* + m(\mu - \lambda)} \right] \quad ,$$

tehát, ha

$$\left| \frac{\mu n^*}{\lambda n^* + m(\mu - \lambda)} \right| < 1 \quad , \quad /10.10/$$

akkor a szórásnégyzet maximumot ér el a stacionárius állapotba kerülés előtt. Ezen maximális érték

$$\Delta_{max} = \frac{\mu n^{*2}}{\lambda N} + \frac{(\mu - \lambda)^2 (m - n^*)^2}{4(\mu + \lambda) [\lambda n^* + m(\mu - \lambda)]}$$

/10.10/ csak akkor teljesülhet, ha

$$\lambda < \mu \quad \text{és} \quad n^* < m \quad \text{vagy} \quad \lambda > \mu \quad \text{és} \quad n^* > m \quad .$$

Ezek szerint, ha az olvadási pont alatt megnöveljük a hőmérsékletet ( $\lambda > \mu$ ,  $n^* < m$ ), vagy ha az olvadási pont fölött lecsökkentjük azt ( $\lambda < \mu$ ,  $n^* > m$ ), akkor a szórásnégyzet monoton nő a stacionárius

$$\Delta^* = N \frac{\mu \lambda}{(\lambda + \mu)^2}$$

értékig, ellenkező esetben előbb eléri  $\Delta_{max}$ -ot, s utána csökken  $\Delta^*$ -ra. A relatív szórás,  $\sqrt{\Delta}/n$  nagyságrendje mindenképpen  $1/\sqrt{N}$ , tehát kicsi, ha a DNS lánc eléggé hosszú.

A stacionárius megoldás is könnyen meghatározható:

$$P_n^* = \binom{N}{n} \left( \frac{\lambda}{\lambda + \mu} \right)^n \left( \frac{\mu}{\lambda + \mu} \right)^{N-n}$$

Az eddig megtárgyalt két határeset után finomítsuk tovább modellünket! Vegyük figyelembe, hogy a kötések fölhasadása nem teljesen véletlenszerű, hanem nagyobb valószínűséggel következik be ott, ahol egy bázispár már szétszakadt. Tegyük föl azonban, hogy ennek hatását csak a közvetlen szomszédok érzik. Az  $i$ . és  $(i+1)$ . bázispár együttes energiája ezek szerint akkor kisebb, ha mindkét kötés azonos állapotban van. Jelölje az  $s_i$  változó az  $i$ . bázispár állapotát:  $s_i = +1$ , ha a kötés ép, és  $s_i = -1$ , ha a kötés felbomlott. Az eddigiek alapján feltételezhető, hogy a bázispár energiája a következő alakban írható:

$$E(s_i, s_{i+1}) = -v s_i s_{i+1} + \frac{h}{2} (s_i + s_{i+1}),$$

ahol  $v$  két szomszédos bázispár kölcsönhatási energiájával,  $h$  pedig egyetlen bázispár effektív kötési energiájával kapcsolatos paraméter. Mindkettő független  $i$ -től, hiszen csak egyfajta bázispár alkotja a molekulát. Az egész rendszer Hamilton-függvénye tehát:

$$\mathcal{H} = -v \sum_i s_i s_{i+1} + h \sum_i s_i, \quad /10.11/$$

ami a  $v \rightarrow J$ ,  $h \rightarrow (-H)$  megfeleltetéssel nem más, mint

a külső térbe helyezett egy-dimenziós Ising-modell Hamilton-függvénye, /7.1/. Az analógia a dinamikára is tovább vihető, s így a 7. fejezet eredményei alkalmazhatók. A  $P(s_1, s_2, \dots, s_N, t)$  valószínűségeloszlást a /7.5/ master-egyenlet határozza meg, s a részletes egyensúly elvének fölhasználásával az átmeneti valószínűségekre a

$$\omega_j(s_i) = \frac{\alpha^j}{2} \left\{ 1 - s_i b + \frac{1}{2} \tau (b - s_i)(s_{i-1} + s_{i+1}) \right\}$$

kifejezést kapjuk (l. /7.17/).  $\alpha^j$  egyelőre ismeretlen állandó,

$$b \equiv -thg, \quad \tau \equiv th2U,$$

és bevezettük a  $g = h/kT$ ,  $U = v/kT$  jelölést is. Jelölje  $S_j$  átlagértékét most is  $q_j(t)$ . Az erre vonatkozó egyenlet, /7.18/ a translációs invariancia felhasználása után így írható:

$$\frac{1}{\alpha^j} \dot{q}_j(t) = -q_j(t) + \frac{1}{2} \tau (q_{j-1}(t) + q_{j+1}(t)) + b [1 - \tau r_j]. /10.12/$$

Itt  $r_j$  jelenti a közvetlen szomszédok közötti korrelációs függvényt, melynek egyensúlyi értéke a  $g=0$  esetben  $thU$  (l. /7.15/). Feltesszük, hogy az olvadási hőmérséklet körül  $g$  most is elhanyagolhatóan kicsi. A vizsgált folyamatban  $r_j$  a kiindulási  $T_0$  hőmérséklethez tartozó értékről indulva vált át a  $T$  hőmérséklethez tartozó kifejezésre. Az olvadási pont közvetlen közelében maradván azonban csak kis hőmérséklet változások történhetnek, márpedig  $U$  lassan változó függvénye  $T$ -nek, így első közelítésben állandónak tekinthető. Ezért  $r_j$ -et végig  $thU$ -val helyettesíthetjük.

A DNS olvadását vizsgálva nem  $q_j(t)$  a meghatározandó mennyiség, hanem továbbra is az ép kötések átlagos száma. Az  $s_j$  értékek ismeretében nyilván az

$$n = \frac{1}{2} \sum (1 + s_j)$$

kifejezés adja az ép kötések számát, ezért

$$\langle n(t) \rangle = \frac{N}{2} + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N q_j(t).$$

A /10.12/ egyenletek összeadása után  $\langle n(t) \rangle$ -ra a következő összefüggést kapjuk:

$$\dot{\langle n(t) \rangle} = -(1-\theta) \alpha^1 \left\{ \langle n \rangle - \frac{N}{2} [1 - e^{2U} \text{th}g] \right\},$$

aminek megoldása

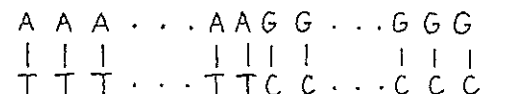
$$\langle n(t) \rangle = n^* + (n_0 - n^*) e^{-\alpha^1 t},$$

ahol most

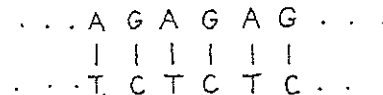
$$n^* = \frac{N}{2} (1 - e^{2U} \text{th}g), \quad \alpha = (1 - \text{th}2U) \alpha^1,$$

és  $n_0$  a kezdeti, a  $T_0$  hőmérsékleten mért átlagos kötés-szám. A bázispárok közötti kölcsönhatás figyelembevétele esetén is exponenciális lecsengést kapunk tehát, de mind az egyensúlyi érték, mind a relaxációs idő módosul. Az olvadási hőmérséklethez most is csak a  $g=0$  érték tartozhat, ezért /10.9/ továbbra is érvényben marad. Az  $U=0$  esetben természetesen korábbi eredményeinket ( l. /10.5-6/, /10.8/) kapjuk vissza. /Az  $U \rightarrow \infty$  határértékben nem tapasztalunk időbeli változást,  $\langle n(t) \rangle = 0$ ./

Végezetül érdemes megemlíteni, hogy a fenti gondolatmenet négy bázist tartalmazó DNS-re is kiterjeszhető, amennyiben a bázispárok egymás utáni elhelyezkedése valamilyen szabályosságot mutat. Az ilyen jellegű számolások célja az, hogy a modellre vonatkozó eredmények ill. élő rendszerekből nyert DNS olvadására vonatkozó mérési adatok összehasonlításával valamilyen információt nyerjünk a molekula bázissorrendjéről. Azt, hogy ilyen kapcsolat létezik, a következő egyszerű gondolatmenettel láthatjuk be. A kizárólag A-T bázispárokat tartalmazó DNS olvadásponjtja,  $T_{AT}$  alacsonyabb a G-C párokat tartalmazóénál,  $T_{GC}$  -nél, hiszen az utóbbiban található kötések erősebbek. Tekintsünk most egy olyan molekulát /a.eset/, melynek összetétele:

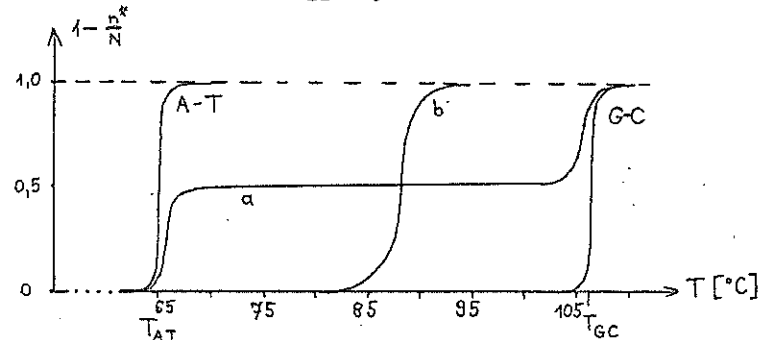


Az A-T párokat tartalmazó rész nyilván már a  $T_{AT}$  hőmérséklet körül szinte teljesen fölhasad. Ezután a szerkezet a további melegítés hatására alig változik, míg nem  $T_{GC}$  közelében bekövetkezik a teljes denaturáció. Ezzel szemben az ugyanannyi bázispárt tartalmazó



molekulában /b.eset/ az A-T kötések  $T_{AT}$  körül még nem bomlanak föl, hiszen a környező G-C párok ezt megakadályozzák. Az A-T bázisok lazító hatása abban mutatkozik meg, hogy a hirtelen denaturálás a  $T_{GC}$ -nél alacsonyabb hőmérsékleten történik.

nik meg. Ezek alapján fölvezethetjük a különböző esetekre  $n^*$  változását a hőmérséklet függvényében:



Míndez tehát azt mutatja, hogy a DNS molekulák fényelnyelésének olvadási pont körüli mérése információt szolgáltat a bázissorrendről. /A témához kapcsolódó irodalom például: N.S. Goel: Biopolymers 6, 55, (1968); N.S. Goel - E.W. Montroll: Biopolymers 6, 731, (1968)./

### 10.2 Makromolekulák bioszintézise

A DNS molekula a sejt osztódása során megkettőzi önmagát. Ez a replikációs folyamat a kettős hélix szerkezet lokális megbomlásával /denaturációjával/ jár. Az így szabaddá vált két szál mellé azután beépülnek a környezetben már megtalálható DNS alegységek, az un. nukleotidok, melyek egy bázist, öt-szénatomos cukrot és foszforsavat tartalmaznak. Az utóbbiak segítségével kapcsolódnak össze az egymás mellett elhelyezkedő nukleotidok. Az egész folyamat természetesen különféle enzimek jelenlétében megy csak végbe. Végeredményben az eredetivel teljesen megegyező két egyforma DNS jön létre, hiszen csak a

kiegészítő bázisok kerülhetnek egymással szembe.

Ehhez nagyon hasonló folyamat a DNS egy szakaszának un. átírása, amikor a megfelelő hirtívő RNS szintézise történik meg a DNS minta /templát/ alapján. /A hirtívő RNS-ek bázissorrendje határozza meg azután a fehérjeszintézis menetét./

Az egyszerűség kedvéért tegyük fel, hogy a vizsgált DNS szál minden bázisa egyforma, s legyen a lemásolandó szakasz nukleotidjainak száma  $N$ . Jelöljük a szintézis kezdő bázisát az  $n=1$  indexszel. Tegyük föl, hogy ha ide bekapcsolódik a kiegészítő nukleotid, akkor az már nem válhat le, másrészt azt, hogy az  $n=N$  indexű bázis elérése után a folyamat azonnal leáll. Feltételezhetjük, hogy tetszőleges közbelső helyen az utoljára beépült bázis bizonyos valószínűséggel /melynek időegységre eső értéke  $S$  / még leválhat, a korábban összekapcsolódtak azonban már nem. Egységnyi idő alatt csak egy új bázis beépülése következhet be, s legyen ennek valószínűsége  $\nu$ . A DNS szál homogenitása miatt sem  $\nu$ , sem  $S$  nem függhet a pillanatnyi állapottól. Az így definiált korlátozott születési-kihálási folyamatot a következő egyenletek írják le:

$$\dot{P}_{1,m} = -\nu P_{1,m} + S P_{2,m} \quad ,$$

$$\dot{P}_{n,m} = \nu P_{n-1,m} - (\nu + S) P_{n,m} + S P_{n+1,m} \quad , \quad 1 < n < m \quad , \quad /10.13/$$

$$\dot{P}_{N,m} = \nu P_{N-1,m} \quad ,$$

a megfelelő kezédfeltétel

$$P_{n,m}(0) = \delta_{n,1} \quad . \quad /10.14/$$

Az  $n=1$  állapot visszaverő, az  $n=N$  állapot viszont nyelő típusu.  $P_{n,1}(t)$  annak a valószínűsége, hogy  $t$  idő alatt  $n$  bázis beépülése történt meg. Az igazán érdekes mennyiség azonban most a szintézis átlagos ideje, tehát az az átlagos idő, amely alatt a folyamat /először/ az  $N$  állapotba ér.

Ennek meghatározása érdekében az első elérés idejének generátorfüggvényére, az  $F_{N,m}(t)$ -re vonatkozó egyenletet kell vizsgálnunk. /2.50-53/ alapján

$$\dot{F}_{N,m}(t) = \nu F_{N,m+1} - (\nu + \beta) F_{N,m} + \beta F_{N,m-1}, \quad 1 < m < N,$$

$$\dot{F}_{N,1}(t) = \nu F_{N,2} - \nu F_{N,1}, \quad /10.15/$$

$$\dot{F}_{N,N}(t) \equiv 0.$$

A kezdeti feltételek:

$$F_{N,m}(0) = 0, \quad \text{ha } 1 \leq m < N-1, \quad F_{N,N-1}(0) = \nu. \quad /10.16/$$

Vezessük be a Laplace-transzformáltat az

$$f_{N,m}(s) = \int_0^{\infty} e^{-st} F_{N,m}(t) dt \quad /10.17/$$

definícióval. Az előzőek szerint az  $f_{N,m}$ -re vonatkozó egyenletek

$$\nu f_{N,m+1} = (s + \nu + \beta) f_{N,m} - \beta f_{N,m-1}, \quad 1 < m < N-1,$$

$$\nu f_{N,2} = (s + \nu) f_{N,1}, \quad /10.18/$$

$$\nu = (s + \nu + \beta) f_{N,N-1} - \beta f_{N,N-2}.$$

Az első elérés  $T_{N,m}$  idejére  $f_{N,m}$  ismerete nélkül is fel tudunk írni egyenleteket. /10.17/-ből ugyanis leolvasható, hogy

$$T_{N,m} = \int_0^{\infty} t F_{N,m}(t) dt = - \left. \frac{\partial f_{N,m}(s)}{\partial s} \right|_{s=0}, \quad /10.19/$$

másrészt viszont

$$f_{N,m}(0) = \int_0^{\infty} F_{N,m}(t) dt = 1,$$

hiszen a nyelő elérése biztos esemény. A /10.18/ egyenletek  $s$  szerinti deriválása után az első elérési időkre a következő összefüggéseket kapjuk:

$$\nu T_{N,m+1} = (\nu + \beta) T_{N,m} - \beta T_{N,m-1} - 1, \quad 1 < m \leq N-1, \quad /10.20/$$

$$T_{N,N} = 0, \quad /10.21/$$

$$\nu T_{N,2} = \nu T_{N,1} - 1. \quad /10.22/$$

/10.20/ átírható a

$$\nu (T_{N,m} - T_{N,m+1}) = \beta (T_{N,m-1} - T_{N,m}) + 1$$

alakba. A fenti egyenlet homogén részének  $\tilde{T}_{N,m}$  megoldása könnyen megkapható:

$$\tilde{T}_{N,m} - \tilde{T}_{N,m+1} = (\beta/\nu)^{m-1} \equiv \alpha^{m-1},$$

ha  $(\tilde{T}_{N,1} - \tilde{T}_{N,2})$ -t  $1$ -nek választjuk. Ebből

$$\tilde{T}_{N,m} = \sum_{i=m}^{N-1} \alpha^{i-1}.$$

Ennek ismeretében célszerű a /10.20-22/ egyenletek általános megoldását a következő alakban keresnünk

$$T_{N,m} = \sum_{i=m}^{N-1} a_i \alpha^{i-1} \quad /10.23/$$

Az  $a_i$  együtthatókra behelyettesítés után azt kapjuk, hogy

$$a_i = a_{i-1} + \frac{1}{v} \alpha^{i-1},$$

és /10.22/ is teljesül, ha formálisan  $a_0 = 0$ -t írunk. Ezt felhasználva

$$a_i = \frac{1}{v} \frac{1 - \alpha^{i-1-1}}{1 - \alpha^{-1}}.$$

/10.23/-ba visszairva

$$T_{N,1} = \frac{1}{v} \frac{1}{1-\alpha} \left[ N-1-\alpha \frac{1-\alpha^{N-1}}{1-\alpha} \right], \quad \alpha \equiv S/v.$$

A fenti képlet tehát megadja az N bázist tartalmazó DNS vagy RNS molekula szintetizálásának átlagos idejét a  $v$  és  $S$  paraméterek függvényében. /Hasonló módon a szintetizálási idő szórása is kiszámítható lenne./

A konkrét esetekben nyilván  $N \gg 1$ , másrészt a bomlás valószínűsége nagyon kicsi ( $\alpha \ll 1$ ), s ilyenkor

$$T_{N,1} = \frac{N}{v} (1 + \alpha).$$

Az  $\alpha \rightarrow 0$  határesetben visszakapjuk a Poisson-folyamatra ismert eredményt / l. 5. példa/.

A  $v$  paraméter kísérletileg mérhető mennyiségekkel is kapcsolatba hozható. Ha denaturálódási folyamat gyorsabb a

szintézisnél, akkor az utolsó megkötött nukleotid melletti hely mindig hozzáférhető. Annak a valószínűsége, hogy ide egy bázis kerüljön egyrészt a környezetben lévő komplementer nukleotidok koncentrációjától, másrészt az E adszorpciós energiától függ. Feltételezhető, hogy T hőmérsékletű oldatban

$$v = B c e^{-\frac{E}{kT}},$$

ahol  $B$  állandó. A szintézis ideje ezzel

$$T_{N,1} \approx \frac{N}{Bc} e^{\frac{E}{kT}}.$$

Mindazt mutatja, hogy a szintézis sebessége nem nagyon érzékeny a nukleotidok koncentrációjára /hacsak nem több nagyságrendű a változás/, viszont erősen függ az adszorpciós energiától. Ezért az utóbbi változtatása, például más molekulák DNS-hez kötésevel, jó módszer lehet a bioszintézis szabályozására.

### 10.3 Bakteriofág fertőzés

A bakteriofágok, mint általában a vírusok, külső fehérje burkából ill. az ebben elhelyezkedő örökítő anyagból állnak. Az örökítő anyag egyes fajtákban RNS, másokban DNS. Az egyszerű fágok külső burka repdszerint azonos fehérjemolekulákat tartalmaz, melyek meglepően szabályos alakzatokba rendeződnek. Hosszuságuk  $1000 \text{ \AA}$  nagyságrendű.

A fágok a baktériumok parazitái. Mivel önálló helyváltoztatásra nem képesek, az oldatban Brown-mozgást végeznek. Ha azonban ütköznek a megfelelő baktériummal, akkor annak



felületén megtapadnak. Eközben a baktérium sejthártyájának tulajdonságai megváltoznak, s valamelyest gátolják újabb fágok beépülését. Egy gazdasejt felületén ezért csak korlátozott számú fág helyezkedhet el. A megtapadás után a fágok örökítő anyaga bekerül a baktériumba, és annak anyagát, így többek között enzimeit is fölhasználva replikálódik. Ugyanakkor megkezdődik a fág örökítő anyaga által vezérelt fehérjeszintézis is, miközben a baktérium saját fehérje termelése leáll. A speciális fág fehérjék egy része a további fágreplikációt segíti elő, másik része burok-fehérje, ill. olyan anyag, ami a gazdasejt hártájának feloldásához szükséges majd. Egy idő múlva azután megkezdődik az RNS /vagy DNS/ molekulák körül a burok kialakulása, s ilyen módon a fertőzés megtörténte után 15-60 perccel 2-300 új fág található már a baktérium belsőjében. Ezek a sejthártya feloldódása után kikerülnek az oldatba.

A továbbiakban azt vizsgáljuk, hogyan változik időben egyetlen baktérium felületén a fágok száma,  $n$ . Jelölje  $x$  a szuszpenzióban található, még szabad fágok számát,  $s$  pedig a gazdasejt hártáján megtapadt fágok számát. A sejthártya telítettsége esetén annak időegységre eső valószínűsége, hogy újabb fág támadja meg a baktériumot a külső fág-koncentrációtól, ill. a baktérium felületén még betölthető helyek számától függ. Mivel a leválásnak nincs esélye, a folyamatot a

$$\lambda_n = \lambda x (s - n) \quad , \quad \mu_n = 0$$

átmeneti valószínűségekkel definiált születési-kihalási folyamattal írhatjuk le.  $x$  maga is véletlen változó, a vizsgált je-

lenség szempontjából azonban fluktuációja nem játszik lényeges szerepet, ezért elegendő az átlagértékét,  $x(t)$ -t használni.  $x(t)$  kísérletileg meghatározható.

Kezdetben a baktérium még nem volt fertőzött, ezért annak  $P_{n,0}(t)$  valószínűségét, hogy  $t$  idő alatt  $n$  fág tapad meg a felületén, a

$$\frac{d P_{n,0}(t)}{dt} = \lambda x(t)(s+1-n) P_{n-1,0}(t) - \lambda x(t)(s-n) P_{n,0}(t) \quad , \quad n \geq 0 \quad , \quad /10.24/$$

$$P_{-1,0}(t) \equiv 0 \quad , \quad P_{n,0}(0) = \delta_{n,0} \quad ,$$

master egyenlet megoldása adja meg. /10.24/ inhomogén Markov-folyamatot ír le, melyet azonban könnyen visszavezethetünk homogénre. Definíáljuk ugyanis a

$$\theta(t) = \int_0^t x(t') dt' \quad , \quad d\theta = x(t) dt$$

új változót. A  $P_{n,0}(\theta)$  függvényt meghatározó egyenlet, /10.24/ alapján

$$\frac{d P_{n,0}(\theta)}{d\theta} = \lambda (s+1-n) P_{n-1,0}(\theta) - \lambda (s-n) P_{n,0}(\theta) \quad ; \quad P_{-1,0}(\theta) \equiv 0 \quad .$$

Az  $n' = s - n$  helyettesítéssel kapott homogén kihalási folyamat eloszlásfüggvénye az I. táblázatból /52-53. oldal/ leolvasható, az eredmény:

$$P_{s-n',0}(\theta) = P_{n,0}(\theta) = \binom{s}{n} \left(1 - e^{-\lambda\theta}\right)^n e^{-\lambda\theta(s-n)}$$

A /10.24/ egyenlet megoldása ezek alapján

$$P_{n,0}(t) = \binom{\Delta}{n} (1 - \zeta(t))^n \zeta(t)^{\Delta-n}, \quad \zeta(t) = e^{-\lambda \int_0^t x(t') dt'}$$

$P_{n,0}(t)$  ismeretében könnyen meghatározható a baktériumhoz kapcsolódó fágok átlagos száma az idő-függvényében:

$$\langle n(t) \rangle = \Delta \left[ 1 - e^{-\lambda \int_0^t x(t') dt'} \right]$$

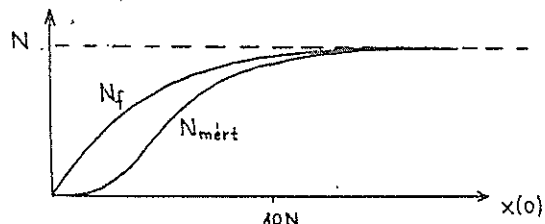
A másik érdekes mennyiség a fertőzetlen baktériumok száma. Tegyük föl, hogy  $t^*$  idő alatt az összes fág megkötődött:  $x(t^*)=0$ . Ekkor annak a valószínűsége, hogy egy sejt fertőzetlen marad

$$P_{0,0}(t^*) = e^{-\lambda \Delta \int_0^{t^*} x(t') dt'}$$

Ha eredetileg  $N$  baktérium volt az oldatban, akkor közelítőleg  $N P_{0,0}(t^*)$  adja a fertőzetlen baktériumok számát. Amennyiben a  $t^*$  idő eléggé rövid, a fertőzött sejtek száma

$$N_f \approx N \left( 1 - e^{-\frac{1}{2} \lambda \Delta t^* x(0)} \right),$$

tehát exponenciálisan növekszik a kezdeti fág-koncentráció függvényében. Grafikusan:



Az ábrán feltüntettük azt a mérési eredményt is, amely sze-

rint azoknak a baktériumoknak a száma, melyekből fágok szabadulnak ki /  $N_{mért}$  / ,  $S$  -alaku görbét ad a kezdeti koncentráció függvényében. Az eltérés oka feltehetően az, hogy a fertőzött baktériumok között van néhány, amelynek sejt-hártyája nem oldódik föl, s ez elsősorban akkor fordul elő, ha az egy baktériumot megtámadott fágok átlagos száma kicsi.

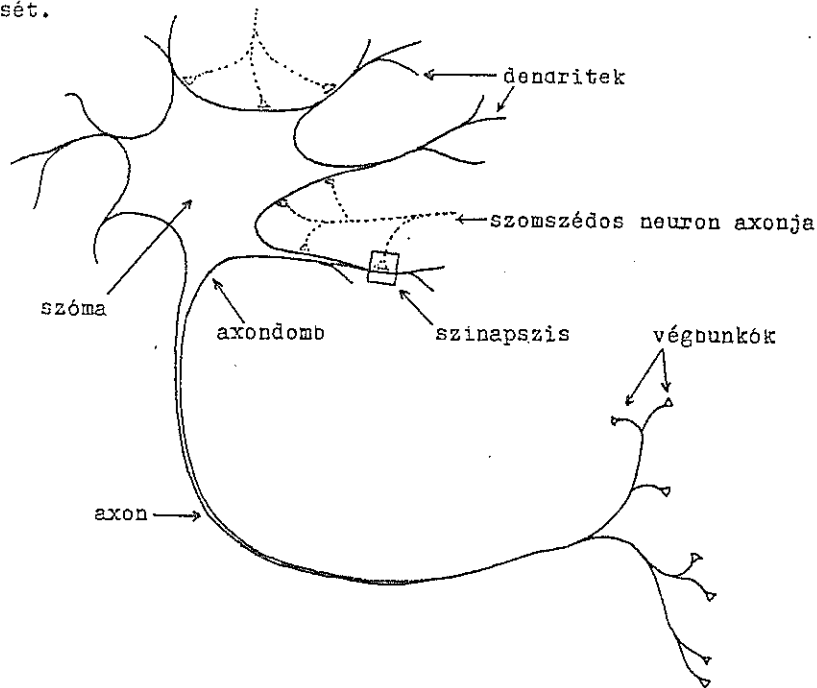
#### 10.4 Az idegsejt ingerületvezetése

A központi idegrendszert alkotó idegsejtek, neuronok egy része nagyszámú más idegsejttel van kapcsolatban. Egyetlen ilyen neuron működésének leírásához elvben szinte az összes többi állapotának ismerete szükséges lenne. Mivel ennyi információ rendszerint nem áll rendelkezésünkre, az egyes idegsejtek ingerületvezetésének modelljében a többi neuron hatását célszerű stochasztikus háttérként figyelembe venni.

A modell megalkotása előtt tekintsük át röviden az idegsejtek szerkezetére és működésére vonatkozó legfontosabb tudnivalókat. A neuron sejttestből, vagy szómából és különböző nyulványokból áll. Az ingerületvezetés szempontjából alapvető fontosságú nyulvány az axon. Minden neuron általában egyetlen axont tartalmaz, melynek hosszúsága rendszerint jóval nagyobb a szóma lineáris méreténél /egyes esetekben a méteres nagyságrendet is elérheti/. Az axon végágakra bomlik, melyek kiszélesedett végződésekként ún. végbunkókkal rendelkeznek. Az idegsejt másik jellegzetes nyulvánformáját a dendritok alkotják. Ezek a szómából kiinduló, az axonnál jóval rövidebb, elágazo-

\* esetenként több ezer

dó nyulványok bonyolult hálózatot alkotnak. A környező neuronok axonjainak végágai a dendritek vagy a szóma felületén végződnek. Az idegsejtek közötti kapcsolatot az un. szinapszisok biztosítják. Szinapszisknak nevezzük a végbunkó, az ezzel szemben elhelyezkedő sejthártya rész, az un. posztzinaptikus membrán, és a köztük levő kb. 200 Å vastagságu szinaptikus rész együttesét.



Az élő sejteket határoló sejthártya két oldala között mindig potenciálkülönbség áll fenn, s mindig a sejt belseje negatívabb. Ingermentes idegsejt esetén ennek az un. nyugalmi potenciálnak a nagysága kb. -70 mV. /A nyugalmi potenciál kia-

lakulásának oka az, hogy bizonyos egyszerű ionok — főleg a K és Na — koncentrációja nem azonos a sejt belsejében és környezetében. A koncentrációkülönbség fenntartása energiaigényes anyagcsere folyamat eredménye. / Ha a membrán két oldala közötti feszültséget kissé megváltoztatjuk, a külső kényszer megszűntetése után a potenciál exponenciális lecsengéssel visszaáll kiindulási értékére. A folyamat relaxációs ideje ( $\tau$ ) néhány milliszekundum.

Ha azonban a membrán-potenciál elér egy bizonyos küszöbértéket / (-60) — (-55) mV /, a sejthártya permeabilitása hirtelen megváltozik, bonyolult ion-áramlás indul meg, melynek következtében a membrán polarizációja rövid idő alatt ellenkező előjelűvé válik, s a feszültségkülönbség abszolút értéke kb. 30 mV lesz. Az így létrejött jelentős potenciálkülönbséget nevezzük akciós potenciálnak, vagy a neuron impulzusának. Az impulzus keletkezésének a helye a szóma és az axon közötti átmenet, az un. axondomb membránja, ugyanis a küszöbfeszültség itt a legalacsonyabb. A kialakult akciós potenciál következtében a szomszédos tartományok is depolarizálódnak, s végülis az akciós potenciál végighalad az axonon egészen a végbunkókig. Ezen feszültség-hullám terjedési sebessége állandó, 1-100 m/s nagyságrendű. Az egész folyamatot az idegsejt ingerületvezetésének, vagy tüzelésének nevezzük.

Amennyiben adott helyen vizsgáljuk a feszültségviszonyokat, akkor azt találjuk, hogy a nyugalmi állapot néhány msec alatt visszaáll. Az akciós potenciál kialakulását követő un. abszolút refrakter periódusban /kb. 2 msec/ azonban egyáltalán nem

kelthető újabb akciós potenciál, a következő néhány millisekondum /a relativ refrakter periódus/ alatt pedig csak az eredetinel jóval magasabb küszöbérték elérése után alakulhat ki impulzus. A küszöbfeszültség közelítőleg exponenciálisan /  $\tau \approx 0,4\tau$  relaxációs idővel/ csökken nyugalmi értékére.

Miután az akciós potenciál eljutott az axon végbunkóiba, ott speciális közvetítő anyag szabadul föl, mely átdifundál a szinaptikus résen és a másik neuron membrán-feszültségének nagyságát megnöveli vagy lecsökkentí attól függően, hogy gátló vagy izgalmi szinapsziszról van-e szó. Azokban az idegsejtekben, melyek sok másikkal vannak kapcsolatban, az ilyen posztszinaptikus potenciálváltozás értéke nem túl nagy: néhány tized millivolt. A kialakult feszültségkülönbség a dendritről azután lényegében gyengítetlenül áttérjed a szómára, ahol a különböző szinapszisokból származó potenciálok összegeződnek.

Az ingerületkeltés szempontjából legfontosabb hely az axondomb, ezért a továbbiakban az itteni membrán-feszültséget ( $x$ ) vizsgáljuk. Modellünkben tételezzük föl, hogy mindegyik szinapszis azonos nagyságu ( $\Delta U$ ) posztszinaptikus potenciált kelt, s ezek nagyon rövid idő alatt eljutnak az axondombhoz. Legyen a neuront érő izgalmi ill. gátló impulzusok átlagos frekvenciája  $f_+$  ill.  $f_-$ . Az időegység alatt felvett átlagos feszültség tehát

$$m = (f_+ - f_-) \Delta U \quad /10.25/$$

ennek szórása pedig

$$\sigma^2 = (f_+ + f_-) (\Delta U)^2 \quad /10.26/$$

Válasszuk a nyugalmi potenciált az  $x=0$  értéknek. A felállítandó egyenletnek azt kell kifejeznie, hogy külső impulzus hiányában, a küszöbérték alatti potenciál exponenciálisan csökken nullára, és tartalmaznia kell a stochasztikus ingerlés hatását is. Mivel a  $\Delta U$  potenciál jóval kisebb a küszöbfeszültségnél, célszerű  $x$ -et folytonos változónak tekinteni. Jelölje  $F(t)$  a posztszinaptikus potenciálok összegének időegységre eső járulékát a  $t$  pillanatban. Amennyiben a beérkező impulzusok között eltelt átlagos idő jóval kisebb, mint a membránpotenciál relaxációs ideje ( $f \gg 1/\tau$ ), feltételezhetjük, hogy  $F(t)$  Gauss-típusú zajként modellezhető, melynek paramétereit /10.25-26/ határozza meg a folytonos határesetben / l. 2.8 fejezet/. Az  $x$ -re vonatkozó mozgásegyenlet

$$\dot{x} = -\frac{x}{\tau} + F(t) \quad ,$$

ami a várható érték leválasztásával az

$$\dot{x} = -\frac{x}{\tau} + m + \xi(t) \quad ,$$

$$\langle \xi(t) \rangle = 0 \quad , \quad \langle \xi(t) \xi(t') \rangle = \sigma^2 \delta(t-t') \quad /10.27/$$

Langevin-egyenletre vezet. A fenti leírás csak addig érvényes, amíg a membránpotenciál el nem éri azt a kritikus értéket, ahol a tüzelés megindul. Jelölje

$$B(t) = B + \beta e^{-\frac{t}{\tau}} \quad /10.28/$$

az időtől függő küszöbfeszültséget. A korábbi adatok alapján  $B \approx 10\text{mV}$ ,  $\tau \approx 0,5\text{msec}$ .  $\beta$ -t  $100 B$ -nek választjuk.  $t$  az utolsó akciós potenciál refrakter periódusának befejeződése óta eltelt idő. A /10.27/ egyenletben tehát  $-\infty < x < B(t)$  és  $B(t)$

a folyamat időtől függő nyelő állapota.

Célszerű áttérni a valószínűségeloszlás vizsgálatára.

A folyamathoz tartozó Fokker-Planck-egyenlet / l. 3.7. fejezet/

$$\frac{\partial P(x,t|y)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} \left( (m - \frac{x}{\tau}) P(x,t|y) \right) + \frac{\sigma^2}{2} \frac{\partial^2 P(x,t|y)}{\partial x^2}, \quad /10.29/$$

ahol  $y$  jelöli a  $t=0$  pillanatban mérhető membrán-potenciált.

A kezdőfeltétel

$$P(x,0|y) = \delta(y-x), \quad /10.30/$$

azt fejezi ki, hogy zérus idő alatt semmilyen átmenet nem történhet. A nyelő állapot jelenlétét a

$$P(B(t),t|y) \equiv 0 \quad /10.31/$$

peremfeltétel fejezi ki, / l. 13. feladat/ de teljesülnie kell a

$$P(-\infty,t|y) \equiv 0 \quad /10.32/$$

összefüggésnek is, hiszen véges idő alatt csak véges változás következhet be.

A /10.29/ egyenlet megoldása a /10.30-32/ feltételek mellett meglehetősen bonyolult, ezért először egyszerűbben kezelhető speciális eseteket vizsgálunk.

Első közelítésben hanyagoljuk el a küszöbpotenciál időfüggését, és tételezzük föl, hogy a neuron két egymást követő tüzelése között eltelt idő jóval kisebb, mint a membránpotenciál relaxációs ideje. Az utóbbi feltevés a  $\tau \rightarrow \infty$  határesetnek felel meg /10.29/-ben. Ilyen módon olyan diffúziós

folyamathoz jutunk, melyben mind a drift, mind a diffúziós együttható állandó, s amelynek állapotterét a  $B$  nyelő állapot felülről korlátozza. A megfelelő valószínűségeloszlás a II. táblázat /66. oldal/ alapján:

$$P(x,t|y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2 t}} e^{-\frac{(x-y-mt)^2}{2\sigma^2 t}} \left( 1 - e^{-\frac{2(B-y)(x-B)}{\sigma^2 t}} \right). \quad /10.33/$$

A modell egyik legfontosabb jellemzője az egymást követő kisülések közötti átlagos idő. Ennek meghatározásához a  $B$  állapot első elérési idejének  $F(B,t|y)$  eloszlásfüggvényét kell ismernünk. Az általános módszer (l./3.11/ egyenlet/) használata helyett most egyszerűbben is célhoz juthatunk, ha észrevesszük, hogy a nyelő állapot  $t$  és  $t+\Delta t$  közötti eléréseinek valószínűsége a  $(-\infty, B)$  intervallumban való tartózkodás valószínűségének megváltozásából adódhat csak:

$$F(B,t|y) = -\int_{-\infty}^B \{ P(x,t+\Delta t|y) - P(x,t|y) \} dx.$$

A  $\Delta t$ -vel történő osztás, a /10.29-32/ egyenletek felhasználása és parciális integrálás után

$$F(B,t|y) = -\frac{\sigma^2}{2} \frac{\partial P(x,t|y)}{\partial x} \Big|_{x=B}.$$

Ennek alapján /10.33/ deriválásával a keresett eloszlásra az

$$F(B,t|y) = \frac{B-y}{\tau} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2 t}} e^{-\frac{(B-y-mt)^2}{2\sigma^2 t}}$$

kifejezést kapjuk, ebből az első elérési idő

$$T(B|y) = \int_0^{\infty} t F(B,t|y) dt = \frac{B-y}{m}.$$

A szórásra  $(\beta-y)\tau^2 / m^3$  adódik.

Ha az abszolút refrakter periódust is figyelembe vesszük, akkor két tüzelés között eltelt átlagos idő

$$\langle t \rangle = \tau_A + T(\beta|y) ,$$

ahol  $\tau_A$  az abszolút refrakter periódus hossza.

Térjünk most rá annak a reálisabb esetnek a vizsgálatára, amikor az  $1/\tau$  mennyiség már nem hanyagolható el. Célszerű rögtön az első elérés idejének eloszlásfüggvényére vonatkozó egyenletet vizsgálni.  $F(\beta, t|y)$ , mint tudjuk, ( l. /3.11/ ) kielégíti a fordított Fokker-Planck-egyenletet:

$$\frac{\partial F(\beta, t|y)}{\partial t} = \left(m - \frac{y}{\tau}\right) \frac{\partial F(\beta, t|y)}{\partial y} + \frac{\tau^2}{2} \frac{\partial^2 F(\beta, t|y)}{\partial y^2} \quad /10.34/$$

az

$$F(\beta, 0|y) = \delta(\beta-y) \quad \text{és} \quad F(\beta, t|\beta) = \delta(t)$$

kezdeti-, ill. peremfeltételek mellett. A 10.2 fejezetben látott eljáráshoz hasonlóan most is érdemes áttérni  $F(\beta, t|y)$  idő szerinti Laplace-transzformáltjára:

$$\partial f(\beta, s|y) - \delta(\beta-y) = \left(m - \frac{y}{\tau}\right) \frac{\partial f(\beta, s|y)}{\partial y} + \frac{\tau^2}{2} \frac{\partial^2 f(\beta, s|y)}{\partial y^2} . \quad /10.35/$$

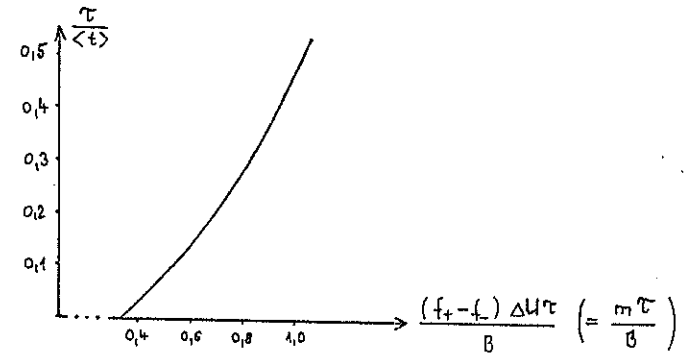
Fölállíthatunk egyenletet közvetlenül az első elérés idejére is, hiszen /10.19/-hez hasonlóan

$$T(\beta|y) = - \left. \frac{\partial f(\beta, s|y)}{\partial s} \right|_{s=0}$$

A nyelő elérése most is biztos esemény ( $f(\beta, 0|y) = 1$ ), így a következő összefüggésre jutunk:

$$\left(m - \frac{y}{\tau}\right) \frac{dT(\beta|y)}{dy} + \frac{\tau^2}{2} \frac{d^2T(\beta|y)}{dy^2} + 1 = 0 . \quad /10.36/$$

Ezen közönséges differenciálegyenlet megoldása nem fejezhető ki elemi függvényekkel, de a végeredmény numerikusan megadható.



A fenti grafikon lényegében a kisülési frekvenciát ábrázolja az ingerlő impulzusok frekvenciája függvényében, dimenziótlan egységekben. A felhasznált paraméterértékek:  $\Delta U = 0,1 \text{ mV}$ ,  $\tau = 5 \text{ sec}$ ,  $\tau_A = 1,5 \text{ sec}$ ,  $\beta = 40 \text{ mV}$ . A kiindulási feszültséget zérusnak választottuk ( $y=0$ ), és a két tüzelés között eltelt átlagos idő,  $\langle t \rangle$  az abszolút refrakter periódus hosszának  $\tau_A$ -nak és  $T(\beta|0)$ -nak az összege.

Időben változó küszöbfeszültség (pl.: /10.28/) esetén a Fokker-Planck-egyenlet egzakt megoldása reménytelen. Vegyük azonban észre, hogy a relatív refrakter periódusban az impulzus kibocsátások közötti átlagos idő jóval hosszabb, mint később, hiszen  $\beta(t)$  nagyon nagy értékről csökken  $\beta$ -re. Ez ugy is tekinthető, mintha a neuron működése a relatív refrakter periódusban lelassulna, és ugyanakkor küszöbfeszültsége az ál-

landó  $\beta$  érték lenne. A lelassulás mértékét a

$$j(t) \equiv \frac{\beta}{\beta(t)}$$

függvénnyel jellemezhetjük. Mindez ugy is fogalmazható hogy az

$$f_{\pm} \rightarrow f_{\pm} \cdot j(t) \quad , \quad \tau \rightarrow \frac{\tau}{j(t)}$$

áthelyettesítéssel definiált új folyamat, melynek nyelő állapota a  $\beta =$  konstans értékhez tartozik, jó közelítéssel ugyanazokat az eredményeket kell szolgáltatassa, mint az eredeti folyamat.

/10.29/ helyett most a

$$\frac{\partial P(x,t|y)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} \left[ \left( m_j - \frac{x}{\tau_j} \right) P(x,t|y) \right] + \frac{\sigma^2}{2} j \frac{\partial^2 P(x,t|y)}{\partial x^2}$$

Fokker-Planck-egyenletet kell vizsgálnunk. Célszerű áttérni az

$$I(t) = \int_0^t j(\dot{t}) dt \quad , \quad dI = j(t) dt$$

új változóra, mellyel a peremfeltétel a

$$P(\beta, I(t)|y) \equiv 0$$

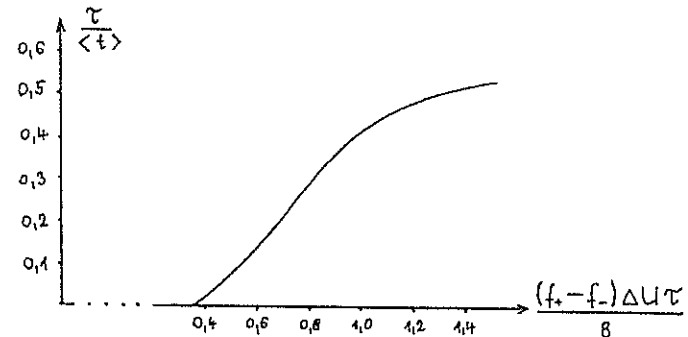
alakban fejezhető ki. A fentiekből látszik, hogy a  $P(x,t|y)$  eloszlás a rögzített nyelő állapottal jellemzett diffúziós folyamat megoldása. Hasonlóan, az első elérés idejének

$F(\beta, t|y)$  generátorfüggvénye a /10.34/ egyenlet megoldásából kapható a  $t \rightarrow I$  helyettesítéssel, az első elérés idejét pedig a

$$T(\beta|y) = \int_0^{\infty} t F(\beta, t|y) j(t) dt$$

összefüggés adja meg.

A /10.34/ egyenlet numerikus megoldásának ismeretében tehát viszonylag egyszerűen eljuthatunk a változó küszöbfe - szűltségű folyamat átlagos tüzelési frekvenciájának közelítő meghatározásához. A konkrét számolások azt mutatják, hogy a végeredmény nem függ erősen a /10.28/-ban szereplő  $\beta$  paraméter értékétől, amennyiben  $\beta \gg \beta$ . A  $\beta = 400\beta$  választás már ebbe a tartományba esik. A következő ábra a fenti módszerrel kapott eredményt mutatja /  $\tau = 0,5$  msec, a többi adat ugyanaz, mint az előző esetben /:



Azt látjuk tehát, hogy modell-neuronunk nem reagál, ha a külső impulzusok nagyon ritkán érkeznek, másrészt viszont nagyon gyakori ingerlés esetén a válasz impulzusok már alig sűrűsödnek. Mindkét tulajdonság az emlősök agykérgi idegsejtjeinek alapvető sajátosságai közé tartozik.

Irodalom:

GOEL, N.S., RICHTER-DYN, N.: Stochastic Models in Biology, Academic Press, 1974.  
GOEL, N.S., MAITRA, S.C., MONTROLL, E.W.: Rev. Mod. Phys. 43, 231/1971/