# Dinamika estokastikoa eta higidura browndarra

5. GAIA

Aurreko gaian probabilitate-teoriaren oinarrizko ideak ikasi ditugu; gai honetan, egoera konplikatuagoak aztertzen hasiko gara, hots, probabilitatea denboran aldatzen den kasuak ikasiko ditugu. Aurreko gaian, dagoeneko ikasi ditugu zenbait zorizko ibilbide, oinarrizko prozesu estokastikotzat jo daitezkeenak, eta trantsizio-prozesu berbera errepikatuz, denbora-tarte diskretuetan, eraiki daitezkeenak. Gai honetan, probabilitatebanaketen eta probabilitate-dentsitateen higidura-ekuazio diferentzialak ondorioztatuko ditugu, haien denborako eboluzioa aztertzeko. Fenomenologikoa da denborako eboluzioa aztertuko dugun maila, ekuazio haiek Newton-en mekanikarekin duten lotura ez baitugu kontuan hartuko. Horixe izango da 6. gaian egingo duguna. Berebat, gai honetan egingo dugun azterketa Markov-en prozesuetara mugatuko dugu: Markov-en prozesuak dira aurreko gertakariei buruzko memoria murriztua duten prozesu estokastikoak.

#### Sarrera

Markov-en prozesuen dinamika estokastikoa zuzentzen duen ekuazioa master ekuazioa da (ekuazio nagusia). Fisikan, estatistikako ekuazioen artean garrantzitsuenetarikoa da bere aplikagarritasun unibertsala dela-eta. Besteak beste, honako esparruetan aplikatu izan da: kimikako problemetan, biologian, populazio-dinamikan, laserren fisikan, higidura browdarrean, fluidoetan eta erdieroaleetan. Aldagai estokastikoko sistema bat denboran eboluzionatzen duen heinean, aldagai estokastikoen balioen artean trantsizioak gertatzen dira. Trantsizio horiek direla-eta, egoera jakin batean sistema antzemateko probabilitatea aldatzen da sistemak bukaerako egoera geldikorra aurkitzen duen arte; egoera horretan trantsizioek ezin dute probabilitate-banaketa aldatu (gerta daiteke sistemak inoiz ez heltzea aipatutako egoera geldikor horretara; baina, gehien bat, ailegatu den kasuak aztertuko ditugu). Master ekuazioa ondorioztatzeko, trantsizio bakoitzaren probabilitateak aurreko urrats bakarrarekiko, eta ez aurreko historia osoarekiko, mendekotasuna duela onartu behar dugu. Hipotesi hori Izadian antzematen diren askotariko sistema fisikoren motari dagokio.

Aztertuko ditugun Markov-en prozesuen moten adibideetan sinpleenetarikoa Markov-en katea da. Markov-en kateak prozesuak dira; prozesu horietan aldagai estokastiko diskretuen balioen arteko trantsizioak denbora-tarte diskretuetan gertatzen dira. Izan ere, horixe da probabilitate-teoria bakuna erabiliz 4. gaian aztertu ditugun zorizko ibilbideen kasua. Gai honetan problema horiek era dotoreagoan formulatuko ditugu. Sistema estokastikoen egoera geldikor bakarreko jauziaren irudi oso egokia lortuko dugu, trantsizio-matrizea "erregularra" denean eta ergodikotasunaren kontzeptua erabil dezakegunean (kontzeptu hori 6. gaian berreskuratuko dugu). Markov-en kateen dinamika arras zuzentzen du erreala eta normalean ez-simetrikoa den "trantsizio-

matrizeak". Trantsizio-matrizearen eskuineko eta ezkerreko autobektoreen bidezko probabilitatearen deskoposaketa espektrala erabiliz dinamika estokastikoa adieraz daitekeela frogatuko dugu.

Gertakarien arteko denbora-tartea era jarraituan alda badaiteke, orduan, probabilitatearen denborako eboluzioa zuzentzen duen diferentzia-ekuazio diferentziala den master ekuazioa definitu behar dugu. Aldagai estokastikoaren balioen arteko trantsizio-ratioak balantze zehatza erakusten duen kasu oso berezi horretan, master ekuazioaren ebazpenak deskonposaketa espektrala erabiliz ere adieraz daitezke. Balantze zehatza Egoera termikotik gertu edo denbora luzeko egoerara ailegatzean barneko probabilitate-korronterik ez duten askotariko sistema motek balantze zehatza betetzen dute. Honako hauek dira, besteak beste, balantze zehatza betetzen duten sistemak: orekatik gertuko erreakzio kimikoak, trantsizio elektronikoak eta zenbait zorizko ibilbide. Jaiotze-hiltze prozesuen (errreakzio kimikoak edo populazio-dinamika) master ekuazioa gai berezietan ondorioztatuko dugu.

Askotan, aztertzen ditugun sistemek askatasun-graduen kopurua handiak dituzte, baina, horien artean, batzuek gainerakoek baino denbora-eskala moteagoan eboluzionatzen dute. Horren adibide bat higidura browndarra da; higidura horretan, masa handiko partikula bat, lore-hautsa izan daiteke, jariakin batean murgilduta dago, uretan, esaterako. Lore-hautsari higidura bortitz azkarra, zoriozkoaren antzekoa, antzeman dakioke. Higidura browndarra, Robert Brown biologoak egindako lanak zabaldua, Einstein-ek erabili zuen materiaren izaera atomikoaren abidentzia modura. Izan ere, gertatzen da soilik materiaren partikula diskretuzko izaera dela-eta.

#### 5.1 Teoria orokorra

Azter dezagun sistema bat zeinaren propietateak Y aldagai estokastiko bakarraren bidez deskribatu daitezkeen. Y aldagai estokastikoa partikula browndar baten abiadura, kutxa baten partikula kopurua, edo hilara batean dauden pertsonen kopurua izan daiteke, besteak beste.

Y aldagai estokastikoaren probabilitate-dentsitatea adierazteko honako notazio hau erabiliko dugu:

$$P_1(y_1, t_1) \equiv (Y \text{ aldagai estokastikoak } y_1 \text{ balioa, } t_1 \text{ aldiunean,}$$
 izateko dentsitate-probabilitatea ) (5.1)

$$P_2(y_1, t_1; y_2, t_2) \equiv (Y \text{ aldagai estokastikoak } y_1 \text{ balioa, } t_1 \text{ aldiunean}$$
 eta  $y_2$  balioa,  $t_2$  aldiunean, (5.2) izateko dentsitate-probabilitate elkartua)

$$P_n(y_1, t_1; y_2, t_2; \dots; y_n, t_n) \equiv (Y \text{ aldagai estokastikoak } y_1 \text{ balioa, } t_1 \text{ aldiunean;}$$

$$y_2 \text{ balioa; } t_2, \dots, \text{ eta } y_n, t_n \text{ aldiunean,}$$
izateko dentsitate-probabilitate elkartua)
$$(5.3)$$

Probabilitate-dentsitate elkartuak positiboak dira, hots,

$$P_n \geqslant 0 \tag{5.4}$$

Gainera, bildu daitezke, honako honek adierazten duen moduan:

$$\int P_n(y_1, t_1; y_2, t_2; \dots; y_n, t_n) dy_n = P_{n-1}(y_1, t_1; y_2, t_2; \dots; y_{n-1}, t_{n-1})$$
 (5.5)

eta normalizatu daitezke, honako era honetan:

$$\int P_1(y_1, t_1) dy_1 = 1 \tag{5.6}$$

(5.5) eta (5.6) ekuazioetan onartu dugu Y aldagaia aldagai estokastiko jarraitua dela. Haatik, Y diskretua bada, integralen ordez batukariak idatzi behar dira. Aldagai estokastikoen denborarekiko mendekotasuna duten momentuak,  $\langle y_1(t_1)y_2(t_2) \times \cdots \times y_n(t_n) \rangle$ , defini ditzakegu; hauxe da horien definizioa:

$$\langle y_1(t_1)y_2(t_2)\dots y_n(t_n)\rangle = \int \int y_1y_2\dots y_n P_n(y_1, t_1; \dots; y_n, t_n) dy_1\dots dy_n$$
 (5.7)

Momentu horiek ematen dute aldagai estokastikoaren aldiune ezberdinetako balioen arteko koerlazioa. Prozesu bat *geldikor*ra dela esango dugu honako hau betetzen bada:

$$P_n(y_1, t_1; y_2, t_2; \dots; y_n, t_n) = P_n(y_1, t_1 + \tau; y_2, t_2 + \tau; \dots; y_n, t_n + \tau)$$
(5.8)

Adierazpen hori bete n eta  $\tau$  guztietarako bete behar da. Beraz, prozesu geldikorraren kasuan, honako hau betetzen da:

$$P_1(y_1, t_1) = P_1(y_1) \tag{5.9}$$

Orduan,  $\langle y_1(t_1y_2(t_2))\rangle$  balioak  $|t_1-t_2|$ -rekiko –aldiuneetako denbora-balioen diferentziaren balio absolutua– mendekotasuna baino ez dauka. Orekan dauden prozesu fisiko guztiak geldikorrak dira.

Probablitate baldintzatua ere defini daiteke, honako hau da:

$$P_{1|1}(y_1, t_1|y_2, t_2) \equiv (Y \text{ aldagai estokastikoak } y_2 \text{ balioa, } t_2 \text{ aldiunean;}$$
  $y_1 \text{ balioa; } t_1, \text{ aldiunean,}$  (5.10) izateko dentsitate-probabilitate baldintzatua)

Honako identitate honek definitzen du:

$$P_1(y_1, t_1)P_{1|1}(y_1, t_1|y_2, t_2) = P_2(y_1, t_1; y_2, t_2)$$
(5.11)

(5.5) eta (5.11) ekuazioak konbinatuz, aldiune ezberdinetako probabilitate-dentsitateen arteko honako erlazio hau lortzen da:

$$P_1(y_2, t_2) = \int P_1(y_1, t_1) P_{1|1}(y_1, t_1|y_2, t_2) dy_1$$
 (5.12)

Adierazpen horretan dagoen  $P_{1|1}(y_1,t_1|y_2,t_2)$  probabilitate baldintzatuak honako propietate hau betetzen du:

$$\int P_{1|1}(y_1, t_1|y_2, t_2) = 1 \tag{5.13}$$

Hori modu errazean frogatu daiteke.

Probabilitate-dentsitate baldintzatu elkartua ere defini daiteke, honako era honetan:

$$\begin{split} P_{k|l}(y_1,t_1;\ldots;y_k,t_k|y_{k+1},t_{k+1};\ldots;y_{k+l},t_{k+l}) \\ &\equiv \quad (Y \text{ aldagai estokastikoak } (y_{k+l},t_{k+l};\cdots;y_{k+l},t_{k+l}) \text{ balioak dituela,} \\ &\quad (y_1,t_1;\cdots;y_k,t_k) \text{ balioak finkoak direnean,} \\ &\quad \text{izateko dentsitate-probabilitate baldintzatu elkartua)} \end{split}$$

Honako identitate honek definitzen du:

$$P_{k|l}(y_1, t_1; \dots; y_k, t_k | y_{k+1}, t_{k+1}; \dots; y_{k+l}, t_{k+l}) = \frac{P_{k+l}(y_1, t_1; \dots; y_k, t_k; y_{k+1}, t_{k+1}; \dots; y_{k+l}, t_{k+l})}{P_k(y_1, t_1; \dots; y_k, t_k)}$$
(5.15)

Aldagai estokastikoaren aldiune ezberdinetako balioen artean koerlazioa dagoenean, hots, aldagai estokastikoak iraganez oroitzen denean, probabilitate-dentsitate elkartuak garrantzitsuak dira. Haatik, aldagai estokastikoak iragan gertuena baino ez badu gogoratzen, orduan, probabilitate-dentsitatearen eta probabilitate-dentsitate baldintzatu elkartuen adierazpenak errazten dira.

Aldagai estokastikoak bere iragan gertuena baino ez badu gogoratzen, orduan, probabilitate-dentsitate baldintzatu elkartuak  $(P_{n-1}(y_1, t_1; \dots y_{n-1}, t_{n-1}|y_n, t_n))$  honako forma hau izango du,  $t_1 < t_2 < \dots < t_n$  betetzen dela onartuz:

$$P_{n-1|1}(y_1, t_1; \dots; y_{n-1}, t_{n-1}|y_n, t_n) = P_{1|1}(y_{n-1}, t_{n-1}|y_n, t_n)$$
(5.16)

Hots,  $y_n$  balioaren probabilitate-dentsitate baldintzatua  $t_n$  aldiunean,  $t_{n-1}$  aldiuneko  $y_{n-1}$  balioak erabat finkatzen du eta aurreragoko aldiuneetako Y aldagai estokastikoari buruzko ezagutzak ez dauka haren gaineko eraginik.  $P_{1|1}(y_1,t_1|y_2,t_2)$  probabilitate-dentsitate baldintzatuari trantsizio-probabilitate deritzo. (5.16) ekuazioa betetzen duen prozesuari Markov-en prozesu deritzo.  $P_1(y,t)$  eta  $P_{1|1}(y_1,t_1|y_2,t_2)$  funtzioek erabat finkatzen dute Markov-en prozesu bat. Probabilitate-dentsitateen hierarkia osoa bi horietatik eraiki daiteke; esaterako, honako era honetan:

$$P_{3}(y_{1}, t_{1}; y_{2}, t_{2}; y_{3}, t_{3}) = P_{2}(y_{1}, t_{1}; y_{2}, t_{2}) P_{2|1}(y_{1}, t_{1}; y_{2}, t_{2}|y_{3}, t_{3})$$

$$= P_{1}(y_{1}, t_{1}) P_{1|1}(y_{1}, t_{1}|y_{2}, t_{2}) P_{1|1}(y_{2}, t_{2}|y_{3}, t_{3})$$

$$(5.17)$$

(5.17) ekuazioa,  $t_1 < t_2 < t_3$  onartuz,  $y_2$  aldagaian integratzen badugu, honakoa lortzen da:

$$P_2(y_1, t_1; y_2, t_2) = P_1(y_1, t_1) \int P_{1|1}(y_1, t_1|y_2, t_2) P_{1|1}(y_2, t_2|y_3, t_3)$$
 (5.18)

(5.18) ekuazioa  $P_1(y_1, t_1)$  erabiliz zatitzen badugu, honako hau lortzen dugu:

$$P_{1|1}(y_1, t_1|y_3, t_3) = \int P_{1|1}(y_1, t_1|y_2, t_2) P_{1|1}(y_2, t_2|y_3, t_3)$$
 (5.19)

(5.19) ekuazioari Chapman-en eta Kolmogorov-en ekuazioa deritzo. Kontura zaitez  $(y_1, t_1)$ -etik  $(y_3, t_3)$ -rako trantsizio-probabailitatea elkarren segidako bi urratseko prozesuan banatu dugula: lehena  $(y_1, t_1)$ -etik  $(y_2, t_2)$ -rakoa, eta bigarrena  $(y_2, t_2)$ -tik  $(y_3, t_3)$ -rakoa. Markov-en izaera erakusten da zeren elkarren segidako bi urratseko

probabilitatea urrats bakarren probabilitatean arteko biderkadura baita. Elkarren segidako urratsak estatistikoki independenteak dira. Lehenik gertatzen den  $(y_1, t_1)$ -tik  $(y_2, t_2)$ -rako trantsizioak ez dio  $(y_2, t_2)$ -tik  $(y_3, t_3)$ -rako trantsizio-probabilitateari eragiten.

Hurrengo atalean, ekuazio horiek guztiak erabiliko ditugu Markov-en prozesurik sinpleenak aztertzeko: Markov-en kateak, hain zuzen ere.

#### 5.2 Markov-en kateak

Markov-en prozesuen adibide sinpleenetakoa Markov-en katea da.

Horrelako kate batean aldagai estokastiko diskretu baten, Y-ren, balioen arteko trantsizioak gertatzen dira, aldiune diskretutan. Onar ditzagun Y aldagaiaren balio posibleak  $\{y(n)\}$  direla  $(n=1,\ldots,M)$  eta trantsizioak  $t=s\tau$  aldiuneetan  $(s=0,1,\ldots,\infty)$  gertatzen direla. Onar dezagun, berebat, P(n,s) ikurrak Y aldagaiak y(n) balioa, t=s aldiunean, izateko probabilitatea adierazten duela.  $P_{1|1}(n_1,s_1|n_2,s_2)$  ikurraren bidez probabilitate baldintzatua adierazten ari gara: Y aldagaiak y(n) balioa, y(n) balioa, y(n) balioa, y(n) balioa, y(n) balioa, y(n) balioa izan badu. y(n)0 eta y(n)1 balioa izan badu. y(n)2 balioa, y(n)3 eta y(n)3 balioa izan badu. y(n)4 balioa izan badu. y(n)5 eta y(n)6 eta y(n)8 balioa izan badu. y(n)8 eta y(n)9 eta y(n)9 kantitateek arras determinatzen dute Markov-en katearen eboluzioa.

(5.12)ekuazioa P(n,s) probabilitateari dagokionez, honako era honetan idatz dezakegu:

$$P(n, s+1) = \sum_{m=1}^{M} P(m, s) P_{1|1}(m, s|n, s+1)$$
 (5.20)

Eta Chapman-en eta Kolmogorov-en ekuaziotik, (5.19) ekuaziotik, honako era honetan idatz dezakegu probabilitate baldintzatua:

$$P_{1|1}(n_0, s_0|n, s+1) = \sum_{m=1}^{M} P_{1|1}(n_0, s_0|m, s) P_{1|1}(m, s|n, s+1)$$
 (5.21)

 $P_{1|1}(m,s|n,s+1)$  kantitateari trantsizio-probabilitate deritzo. Honako probabilitate baldintzatu hau adierazten du: sistema s aldiunean m egoeran badago, hurrengo urratsean n egoerara jauzia egingo du. Ondorioz, sistemaren trantsizio-mekanismoari buruzko behar den informazio guztia barneratzen du kantitate horrek.

Defini dezagun, orain,  $\mathbf{Q}(s)$  trantsizio-matrizea; horren (m, n)-garren elementua trantsizio-probablitatea da, honako hau:

$$Q_{m,n} \equiv P_{1|1}(m, s|n, s+1) \tag{5.22}$$

Denborarekiko mendekotasunik gabeko trantsizio-matrizea,  $\mathbf{Q}(s) = \mathbf{Q}$ , duten Markov-en kateak aztertuko ditugu atal honetan. S5.A atalean, denborarekiko mendekotasun periodikoa ( $\mathbf{Q}(s) = \mathbf{Q}(s+N)$ ) duen trantsizio-matrizearen kasua aztertuko dugu.

#### 5.2.1 Propietate espektralak

Denborarekiko mendekotasunik ez duen trantsizio-matrizearen kasuan, honako hau dugu:

$$\mathbf{Q}_{m,n} = P_{1|1}(m,0|n,1) = P_{1|1}(m,s|n,s+1)$$
(5.23)

(5.21) ekuazioaren, hots, probabilitate baldintzatuaren ebazpen formala iterazioz lor daiteke eta honako hau da:

$$P_{1|1}(m, s_0|n, s) = (\mathbf{Q}^{s-s_0})_{m,n}$$
(5.24)

Adierazpen horretan, eskuineko atalean  $\mathbf{Q}$  matrizearen (m,n)-garren elementuaren  $(s-s_0)$  berretura adierazita dago. P(n,s) probabilitatearen adierazpena honako hau da:

$$P(n,s) = \sum_{m=1}^{M} P(m,0) (\mathbf{Q}^{s})_{m,n}$$
 (5.25)

Puntu honetan, erabilgarria da Dirac-en bektore-notazioa erabiltzea. Honako bi definizio hauek onartuko ditugu:  $P(n,s) \equiv \langle \mathbf{p}(s)|n \rangle$  eta  $P_{1|1}(m,s_0|n,s) \equiv \langle m|\mathbf{P}(s|s_0)|n \rangle$ . Adierazpen horietan,  $\langle \mathbf{p}(s)|$  da probabilitate-bektorea eta  $\mathbf{P}(s|s_0)$ , probabilitate baldintzatuaren matrizea. Ezkerreko eta eskuineko  $\langle n|$  eta  $|n \rangle$  egoerek, hurrenez hurren, Y aldagaiaren posibleak diren balioak adierazten dituzte eta multzo osoa,  $\sum_{n=1}^{M} |n\rangle\langle n| = 1$ , eta ortonormala,  $\langle m|n\rangle = \delta_{m,n}$ , osatzen dutela onartzen dugu.  $P(n,s) \equiv \langle \mathbf{p}(s)|n\rangle$  probabilitatea hilara-bektore baten n-garren osagaitzat jo behar dugu. Ondoren,  $\mathbf{P}(s|s_0)$  eta  $\langle \mathbf{p}(s)|$  trantsizio-matrizearen ( $\mathbf{Q}$ ) autobektoreen funtzioan adieraziko ditugu.

Normalean,  $\mathbf{Q}$  trantsizio-matrizea ez da simetrikoa. Beraz, ezkerreko eta eskuineko autobektoreak ezberdinak izango dira. Q matrizearen  $\lambda_i$  autobalioek ( $i = 1, \ldots, M$ )  $\mathbf{Q} - \lambda \mathbf{I}$  matrizearen determinantea zero egiten dute; hots, honako baldintza hau betetzen duten balioak dira autobalioak:

$$\det |\mathbf{Q} - \lambda \mathbf{I}| = 0 \tag{5.26}$$

Adierazpen horretan, **I** da unitate-matrizea. **Q** matrizea  $M \times M$  matrizea bada, M autobalio izango ditu; horiek errealak edo ez izan daitezke. i-garren autobalioarekin lotuta  $\langle \chi_i |$  eta  $|\psi_i \rangle$  ditugu, ezkerreko autobektorea eta eskuineko autobektorea, hurrenez hurren. Ezkerreko autobektoreak  $\langle \chi_i | \lambda_i = \langle \chi_i | \mathbf{Q}$  autobalio-ekuazioa betetzen du; edo, beste moduan adierazita, honako beste ekuazio hau:

$$\chi_i(n)\lambda_i = \sum_{m=1}^M \chi_i(m)Q_{m,n}$$
(5.27)

Adierazpen horretan,  $\chi_i(n) \equiv \langle \chi_i | n \rangle$  eta  $Q_{m,n} \equiv \langle m | \mathbf{Q} | n \rangle$  definizioak egin ditugu. Berebat, eskuineko autoegoerak  $\lambda_i | \psi_i \rangle = \mathbf{Q} | \psi_i \rangle$  autobalio-ekuazioa betetzen du, hots,

$$\lambda_i \psi_i(n) = \sum_{m=1}^M Q_{m,n} \psi_i(m)$$
 (5.28)

Adierazpen horretan,  $\psi_i(n) \equiv \langle n|\psi_i\rangle$  egin dugu.

Orain, **Q**-ren ezkerreko eta eskuineko autobektoreek multzo osoa eta ortogonala osatzen dutela konproba dezakegu. Lehenik, froga dezagun *ortogonalitate*a. Har itzazu kontuan honako autobalio-ekuazio bi hauek:  $\lambda_j |\psi_j\rangle = \mathbf{Q} |\psi_j\rangle$  eta  $\langle \chi_i | \lambda_i = \langle \chi_i | \mathbf{Q}$ . Biderka ezazu horietako lehena  $\langle \chi_i |$  erabiliz eta bigarrena  $|\psi_j\rangle$  erabiliz; ondoren, bigarren ekuazioari lehenengoa kendu, honako hau lortzen da:

$$(\lambda_i - \lambda_j)\langle \chi_i | \psi_j \rangle = \langle \chi_i | \mathbf{Q} | \psi_j \rangle - \langle \chi_i | \mathbf{Q} | \psi_j \rangle = 0$$
 (5.29)

Beraz,  $\lambda_i \neq \lambda_j$  betetzen bada, orduan,  $\langle \chi_i | \psi_j \rangle$  izango dugu.  $\lambda_i = \lambda_j$  betetzen bada,  $\langle \chi_i | \psi_j \rangle$  nulua izan daiteke. Ezkerreko eta eskuineko autobektoreak beti normalizatuko ditugu honako balditza bete dezaten:

$$\langle \chi_i | \psi_j \rangle = \delta_{i,j} \tag{5.30}$$

Azter dezagun, orain, osotasuna. Gara dezagun  $\langle \mathbf{p}|$  probabilitate-bektorea ezkerreko autobektorean funtzioan:  $\langle \mathbf{p}| = \sum_{i=1}^{M} \alpha_i \langle \chi_i|$ . Garapen hori  $|\psi_j\rangle$  erabiliz biderkatuko dugu, eskuinetik, eta (5.30) edierazten duen ortogonalitate-baldintza erabiliko dugu.  $\alpha_j = \langle \mathbf{p}|\psi_j\rangle$  aurkitzen dugu; beraz, honako hau idatz dezakegu:

$$\langle \mathbf{p} | = \sum_{i=1}^{M} \langle \mathbf{p} | \psi_i \rangle \langle \chi_i |$$

Adierazpen hori ezkerreko eta eskuineko autobektoretarako honako osotasun-baldintzaren

$$\sum_{i=1}^{M} |\psi_i\rangle\langle\chi_i| = \mathbf{I} \tag{5.31}$$

adierazgarri da.

Ondoren,  $\lambda_i$  autobalioen zenbait propietate orokor lortuko ditugu. Lehenik,  $|\lambda_i| \leq 1$ , i guztietarako betetzen dela frogatuko dugu. Horretarako, kalkula ezazu

(5.28) ekuazioaren balio absolutua:  $|\lambda_i\psi_i(n)| = |\sum_{m=1}^M Q_{m,n}\psi_i(m)|$ .  $\lambda_i$  eta  $\psi_i(n)$  zenbaki konplexuak (edo errealak) dira, baina,  $Q_{m,n}$  zenbaki erreala da.  $|\lambda_i\psi_i(n)| = |\lambda_i| |\psi_i(n)|$  berdintza betetzen dela frogatzea erraza da. Hurrengo urratsa da triangeluaren desberdintza erabiltzea; hots, honako hau:  $|\sum_{m=1}^M x_i| \leqslant \sum_{m=1}^M |x_i|$ , horretan,  $x_i$  zenbaki konplexua da. Beraz, honako hau aurkitzen dugu:

$$|\lambda_i| |\psi_i(n)| \le \sum_{m=1}^M Q_{n,m} |\psi_i(m)|$$
 (5.32)

Onar dezagun  $|\psi_i(n)| \leq C$  betetzen dela, n guztietarako; horretan, C konstante positiboa da. Hortaz, honako hau idatz dezakegu:

$$\sum_{m=1}^{M} Q_{n,m} |\psi_i(m)| \leqslant C \sum_{m=1}^{M} Q_{n,m} = C$$
 (5.33)

Onar dezgun  $n = n_0$  denean,  $|\psi_i(n_0)| = C$  dugula. Orduan, (5.32) eta (5.33) ekuazioek  $|\lambda_i|C \leq C$  ematen dute eta honako izango dugu:

$$|\lambda_i| \leqslant 1 \tag{5.34}$$

Ondorioz, trantsizio-matrizearen autobalio guztien modulua bat edo bat baino txikiagoa da.

 $|\lambda_i|\leqslant 1$ betetzen dela frogatu dugula, frogatu dezagun  $\lambda_i=1$ balioa beti dela autobalio bat. Azpimarra dezagun honako hau:  $\psi_i(n)=1,\,n$ guztietarako, hautaketa jakina  $\lambda_i=1$ autobalioko eskuineko autobektorea da. Ikus (5.28) ekuazioa eta kontuan har ezazu $\sum_{m=1}^M Q_{n,m}=1$  dugula.  $\lambda_i=1$ autobalioko ezkerreko autobetoreak honako ekuazioa bete behar du:

$$\chi_i(n) = \sum_{i=1}^{M} \chi_i(m) Q_{m,n}$$
 (5.35)

(5.35) ekuazioa probabilitate-bektore geldikor  $-\chi_i(n) \equiv P_{ST}(n)$ - bati dagokion ekuazioa da; hots, denboran aldatzen ez den bektore bati dagokion ekuazioa.

 $\mathbf{Q}$  trantsizio-matrizea bere ezkerreko eta eskuineko autobektoreen funtzioan gara dezakegu. Har ezazu kontuan honako autobalio-ekuazio hau:  $\langle \chi_i | \lambda_i = \langle \chi_i | \mathbf{Q};$  biderka ezazu, ezkerretik,  $|\psi_i\rangle$  eskuineko autobektorea erabiliz; eta batu ezazu i guztietarako. (5.31) ekuazioa erabiliz, osotasun-erlazioa,  $\mathbf{Q} = \sum_{i=1}^{M} \lambda_i |\psi_i\rangle \langle \chi_i|$  lortzen dugu, edo honako baste hau:

$$Q_{m,n} = \sum_{i=1}^{M} \lambda_i \psi_i(m) \chi_i(n)$$
(5.36)

(5.24) eta (5.36) ekuazioak konbinatuz eta ezkerreko eta eskuineko autobektoreen arteko autonormalizazio-baldintza erabiliz, honako hau lortzen dugu:

$$P_{1|1}(m, s_0|n, s) = \sum_{i=1}^{M} \lambda_i^{s-s_0} \psi_i(m) \chi_i(n)$$
(5.37)

Beraz, Markov-en prozesu diskreturako ebazpen orokorra lortu dugu,  $\mathbf{Q}$  trantsizio-matrizearen autobalioen eta ezkerreko eta eskuineko autobalioen funtzioan.

Probabilitate baldintzatuaren portaera zehatza trantsizio-matrizearen egituraren araberakoa da. Kasu berezi bat dago zeinean interesaturik gauden: trantsizio-matrizea erregularra den kasua.  $\mathbf{Q}$  trantsizio-matrizea erregularra dela esango dugu  $\mathbf{Q}^N$  (N zenbaki osoa da) potentziaren elementu guztiak nuluak ez badira.  $\mathbf{Q}$  erregularra bada, P(n,s) probabilitatea egoera geldikor bakarrera biltzen da,  $P_{ST}(n)$ , denbora luzea igarota. Horrek esan nahi du  $\mathbf{Q}$  matrizearen  $\lambda_i=1$  balioko autobalio bakarra dagoela. Egin dezagun honako definizio hau:  $\lambda_1=1$ . Orduan, (5.37) ekuazioa honako era honetan idatz daiteke:

$$P_{1|1}(m, s_0|n, s) = \psi_1(m)P_{ST}(n) + \sum_{i=2}^{M} \lambda_i^{s-s_0} \psi_i(m)\chi_i(n)$$
 (5.38)

Adierazpen horretan  $\psi_1(m)=1$  da, m guztietarako.  $\lambda_i<1$  betetzen denez,  $i\neq 1$  denean,  $s\to\infty$  limitea egin dezakegu eta honako hau lortu:

$$\lim_{s \to \infty} P_{1|1}(m, s_0|n, s) = \psi_1(m) P_{ST}(n) \quad \text{honako hau betetzen denean: } \psi_1(m) = 1, \ \forall m$$

$$(5.39)$$

Beraz, trantsizio-matrize erregularren kasuan, probabilitate baldintzatuak, denbora luzearen buruan, balio bakarrera jotzen du. Berebat, honako hau dugu:

$$\lim_{s \to \infty} P(n, s) = P_{ST}(n) \tag{5.40}$$

(5.1) ariketak ideia horiek guztiak adibide baten bidez erakutsiko ditu.

Trantsizio-matrize erregularrek zuzendutako Markov-en prozesuak ergodikoak dira. Hau da, sistemaren eboluzioan zehar, aldagai estokastikoaren posiblea den edozein baliotatik abiatuta, posiblea da, trantsizioei esker, aldagai estokastikoaren gainerako balio posibleetatik igarotzea. Adibidez, hori ez da egia trantsizio-matrizea blokekako diagonala bada. Kasu horretan, zenbait balio besteengandik desakoplaturik egongo da. Trantsizio-matrizea blokekako diagonala denean, denbora luzeko egoera bat baino gehiago eduki dezake sistemak.

#### 5.2.2 Zorizko ibilbidea

4.E eta 4.F ataletan aztertutako sareko zorizko ibilbidea trantsizio-probabilitateen Markov-en kate moduan formula daiteke. Problema erraztearren, azter dezagun zorizko ibilbide bat dimentsio bakarreko sare batean, x ardatzean; sarearen sare-tartea  $\Delta$  da eta onar dezagun urratsen arteko denbora-tartea  $\tau$  dela. Defini dezagun  $P_1(n\Delta, s\tau)$  probabilitatea; hots, s urrats eman osteko  $x=n\Delta$  sare-puntuan partikula hautemateko probabilitatea. Beraz, honako hau idatz dezakegu:

$$P_1(n\Delta, (s+1)\tau) = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} P_1(m\Delta, s\tau) P_{1|1}(m\Delta, s\tau|n\Delta, (s+1)\tau)$$
 (5.41)

Adierazpen horretan,  $P_{1|1}(m\Delta, s\tau|n\Delta, (s+1)\tau)$  da  $x=m\Delta$  sare-puntutik  $x=n\Delta$  sare-puntura urrats bakar batean pasatzeko probabilitatea.

Horren guztiaren adibide konkretu gisara, azter dezagun zorizko ibilbidearen problema bat zeinean ibiltariak probabilitate berbera duen ezkerretara zein eskuinetara joateko, sare-puntu jakin batean dagoenean. Beraz, trantsizio-probabilitatea honako hau izango da:

$$P_{1|1}(m\Delta, s\tau | n\Delta, (s+1)\tau) = \frac{1}{2}\delta_{n,m+1} + \frac{1}{2}\delta_{n,m-1}$$
 (5.42)

Orduan, (5.41) ekuazioak honako forma hau hartzen du:

$$P(n\Delta, (s+1)\tau) = \frac{1}{2}P_1((n+1)\Delta, s\tau) + \frac{1}{2}P_1((n-1)\Delta, s\tau)$$
 (5.43)

 $P_1(n\Delta, s\tau)$  probabilitateari dagokion ekuazio diferentziala lor dezakegu, jarraitutasunlimitean ("continuum-eko limitean"). Ken diezaiegun  $P_1(n\Delta, s\tau)$  probabilitatea (5.43) ekuazioko bi atalei eta zati dezagun emaitza  $\tau$  erabiliz; honako hau idatz dezakegu:

$$\frac{P_1(n\Delta, s\tau + \tau) - P_1(n\Delta, s\tau)}{\tau} = \frac{\Delta^2}{2\tau} \left[ \frac{P_1(n\Delta + \Delta, s\tau) + P_1(n\Delta - \Delta, s\tau) - 2P_1(n\Delta, s\tau)}{\Delta^2} \right]$$
(5.44)

Honako bi hauek onartuz:  $x=n\Delta$  eta  $t=s\tau$ ; eta bi limite hauek eginez:  $\Delta\to 0$  eta  $\tau\to 0,\, D\equiv \frac{\Delta^2}{2\tau}$  finitua da eta, berebat, x eta t. Honakoa da P(x,t) probabilitateari dagokion ekuazio diferentziala:

$$\frac{\partial P_1(x,t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 P_1(x,t)}{\partial^2 x} \tag{5.45}$$

(5.45) ekuazioa da  $P_1(x,t)$  probabilitate-dentsitatearen difusio-ekuazioa.

Ebatz dezagun (5.45) ekuazioa  $P_1(x,0) = \delta(x)$  kasurako. Lehenik, defini dezagun  $P_1(x,t)$  probabilitatearen Fourier-en transformatua, hots,

$$\tilde{P}_{1}(k,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx P_{1}(x,t) e^{ikx}$$
(5.46)

Orduan, (5.45) ekuazioak honako eite hau hartzen du:

$$\frac{\partial \tilde{P}_1(k,t)}{\partial t} = -Dk^2 \tilde{P}_1(k,t) \tag{5.47}$$

(5.47) ekuazioa ebazten badugu, honako hau lortzen dugu:

$$\tilde{P}_1(k,t) = e^{-Dk^2t} \tag{5.48}$$

Adierazpen horretan,  $\tilde{P}_1(k,0) = 1$  erabili dugu,  $P_1(x,0) = \delta(x)$  betetzen baita. Orain, transformazioaren alderantzizkoa egiten badugu, honako hau lortzen da:

$$P_1(x,t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk e^{-ikx} e^{-Dk^2 t} = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}}$$
 (5.49)

Oso erraza da  $\langle x(t)\rangle = 0$  eta  $\langle x^2(t)\rangle = 2Dt$  betetzen direla frogatzea.

#### 5.3 Master ekuazioa

Askotan, aztertu behar ditugun prozesuetako gertakarien arteko denbora-tarteak modu jarraituan eta zorizko eran alda daitezke, baina, 6.C atalean ikusi dugun moduan, Y aldagai estokastikoaren balio posibleak diskretuak dira. Horrelako prozesuen kasuan,  $P_1(n,t)$  probabilitatearen denborarekiko mendekotasunaren ekuazio diferentziala lortu behar dugu. Atal honetan aztertuko ditugun prozesuen gertakari elementalak edo trantsizioak denbora-tarte txikietan gertatzen dira, prozesu estokastikoa eboluzionatzen duen denborarekin alderatuz. Horrelako prozesuen denborako eboluzioa ekuazio nagusiak (Master ekuazioa) zuzentzen du.

#### 5.3.1 Ekuazio nagusiaren ondorioztapena

$$P_1(n, t + \Delta t) = \sum_{m=1}^{M} P_1(m, t) P_{1|1}(m, t|n, t + \Delta t)$$
 (5.50)

$$\frac{\partial P_1(n,t)}{\partial t} = \lim_{\Delta t \to 0} \left( \frac{P_1(n,t+\Delta t) - P_1(n,t)}{\Delta t} \right) 
= \lim_{\Delta t \to 0} \frac{1}{\Delta t} \sum_{m=1}^{M} P_1(m,t) \left( P_{1|1}(m,t|n,t+\Delta t) - \delta_{m,n} \right)$$
(5.51)

$$P_{1|1}(m, t|n, t + \Delta t) = \delta_{m,n} \left[ 1 - \Delta t \sum_{l=1}^{M} w_{m,l}(t) \right] + w_{m,n}(t) \Delta t + \cdots$$
 (5.52)

$$\frac{\partial P_1(n,t)}{\partial t} = \sum_{m=1}^{M} \left[ P_1(m,t) w_{m,n}(t) - P_1(n,t) w_{n,m}(t) \right]$$
 (5.53)

$$\frac{\partial P_{1|1}(n_0, 0|n, t)}{\partial t} = \sum_{m=1}^{M} \left[ P_{1|1}(n_0, 0|m, t) w_{m,n}(t) - P_{1|1}(n_0, 0|n, t) w_{n,m}(t) \right]$$
 (5.54)

$$W_{m,n}(t) = w_{m,n}(t) - \delta_{m,n} \sum_{n'=1}^{M} w_{n,n'}(t)$$
(5.55)

$$\frac{\partial P_1(n,t)}{\partial t} = \sum_{m=1}^{M} P_1(m,t) W_{m,n}(t)$$
 (5.56)

$$W_{m,n} \geqslant 0$$
  $n \neq m$ , betetzen denean, eta  $\sum_n W_{m,n} = 0$   $m$  bakoitzerako (5.57)

$$\frac{\partial \langle \mathbf{p(t)} |}{\partial t} = \langle \mathbf{p}(t) | \mathbf{W}(t)$$
 (5.58)

$$\frac{\partial \mathbf{P}(0|\mathbf{t})|}{\partial t} = \mathbf{P}(0|t) \mathbf{W}(t)$$
 (5.59)

#### 5.3.2 Balantze zehatza

Trantsizio-ratioek balantze zehatza betetzen dute honako baldintza hau betetzen dutenean:

$$P^{s}(n)w_{n,m} = P^{s}(m)w_{m,n} (5.60)$$

Adierazpen horretan,  $P^s(n) \equiv \lim_{t \to \infty} P_1(n,t)$  da sistemaren denbora luzeko probabilitate geldikorra (onartzen ari gara trantsizio-ratioek,  $w_{n,m}$ -k, ez dutela denborarekiko mendekotasunik) eta denboraren independentea da.  $P^s(n)$  da  $\mathbf{W}$  trantsizio-matrizearen ezkerreko autobektorea; beraz, honako hau betetzen du:  $\langle \mathbf{p}^s | \mathbf{W} = 0$ , non  $P^s(n) = \langle \mathbf{p}^s | n \rangle$  den. Honakoa da, hortaz, (5.60) ekuazioak adierazten duena: m mailatik n mailarako probabilitate-fluxua eta n mailatik m mailarako probabilitate-fluxuak berdinak dira. Azpimarratzekoa da (5.60) ekuazioa iteratuz  $P^s(n)$  lor daitekeela. Esaterako:  $P^s(2) = P^s(1)(\frac{w_{1,2}}{w_{2,1}})$ ,  $P^s(3) = P^s(2)(\frac{w_{2,3}}{w_{3,2}}) = P^s(1)(\frac{w_{1,2}}{w_{2,1}})(\frac{w_{2,3}}{w_{3,2}})$ , eta abar. Azkenik,  $P^s(1)$  lor daiteke normalizazio-baldintza,  $\sum_{n=1}^M P^s(n) = 1$ , erabiliz.

(5.60) ekuazioa betetzen bada, ekuazio nagusiaren eboluzio dinamikoa matrize simetriko batek zuzentzen duela frogatu dezakegu. Egin dezagun honako definizio hau:

$$V_{n,m} = \sqrt{\frac{P^{s}(n)}{P^{s}(m)}} W_{n,m} = \sqrt{\frac{P^{s}(n)}{P^{s}(m)}} w_{n,m} - \delta_{n,m} \sum_{n'} w_{n,n'}$$

$$= \sqrt{\frac{P^{s}(m)}{P^{s}(n)}} w_{m,n} - \delta_{n,m} \sum_{n'} w_{m,n'} = V_{m,n}$$
(5.61)

Adierazpen hori lortzeko (5.60) ekuazioa erabili dugu. Funtzio berri bat definitzen badugu:  $\tilde{P}(n,t) = \frac{P_1(n,t)}{\sqrt{P^s(n)}}$ , ekuazio nagusiaren eitea honako hau izango da:

$$\frac{\partial \tilde{P}(n,t)}{\partial t} = \sum_{m=1}^{M} \tilde{P}(m,t) V_{m,n}$$
 (5.62)

Berreskura dezagun Dirac-en notazioa eta idatz ditzagun honako bi hauek:  $\langle \tilde{\mathbf{p}} | n \rangle = \tilde{P}(n,t)$  eta  $V_{n,m} = \langle n | \mathbf{V} | m \rangle$ . Orduan, ekuazio nagusiaren ebazpena honakoa da:

$$\langle \tilde{\mathbf{p}}(t) | = \langle \tilde{\mathbf{p}}(0) | e^{\mathbf{V}t}$$
 (5.63)

 $V_{n,m}$  matrize simetrikoa denez, harek autobektore ortonormaleen multzo osoa dauka.  $\mathbf{V}$  matrizearen autobalioak adierazteko  $\lambda_i$  (non  $i=1,\ldots,M-1$  den) erabiliko dugu eta ezkerreko eta eskuineko autobektoreak adierazteko  $\langle \psi_i |$  eta  $|\psi_i \rangle$  dira, hurrenez hurren. Ezkerreko eta eskuineko autobektoreak berberak dira. Beraz,  $\langle \psi_i | \mathbf{V} = \langle \psi_i | \lambda_i$  eta  $\mathbf{V} | \psi_i \rangle = \lambda_i | \psi_i \rangle$  izango ditugu. Autobektoreek multzo oso eta ortonormala osatzen duenez, ortonormalizazio-baldintza honako era honetan idatz dezakegu:  $\langle \psi_i | \psi_j \rangle = \delta_{i,j}$ ; eta osotasun-baldintza, beste modu honetan:  $\sum_{i=0}^{M-1} |\psi_i \rangle \langle \psi_i | = \mathbf{1}$ .

Ekuazio nagusiaren ebazpena deskoposaketa espektralaren funtzioan idatz daiteke, honako era honetan:

$$\langle \tilde{\mathbf{p}}(t)| = \sum_{i=0}^{M-1} \langle \tilde{\mathbf{p}}(0)|\psi_i\rangle e^{\lambda_i t} \langle \psi_i|$$
 (5.64)

 $P_1(n,t)$  probabilitatearen funtzion, beste era honetan idatz daiteke:

$$P_1(n,t) = \sum_{i=0}^{M-1} \sum_{m=1}^{M} \sqrt{\frac{P^s(n)}{P^s(m)}} P_1(m,0) \langle m|\psi_i \rangle e^{\lambda_i t} \langle \psi_i | n \rangle$$
 (5.65)

 $\lambda_i$  autobalioak negatiboak dira edo nuluak. Onar dezagn i=0 etiketako autobalioa nulua dela; hots,  $\lambda_0=0$ . Orduan, honako hau izango dugu:

$$P^{s}(n) = \lim_{t \to \infty} P_{1}(n, t) = \sum_{m=1}^{M} \sqrt{\frac{P^{s}(n)}{P^{s}(m)}} P_{1}(m, 0) \langle m | \psi_{0} \rangle \langle \psi_{0} | n \rangle$$
 (5.66)

Konsistentzia mantentzeko honako hau bete behar da:  $\langle \psi_0 | n \rangle = \langle m | \psi_0 \rangle = \sqrt{P^s(m)}$ , m guztietarako,  $\sum_m P_1(m,0) = 1$  betetzen baita. Beraz, honakoa idatz ahal izango dugu:

$$P_{1}(n,t) = P^{s}(n) + \sum_{i=1}^{M-1} \sum_{m=1}^{M} \sqrt{\frac{P^{s}(n)}{P^{s}(m)}} P_{1}(m,0) \langle m|\psi_{i}\rangle e^{\lambda_{i}t} \langle \psi_{i}|n\rangle$$
 (5.67)

### 5.3.3 Batez besteko lehen pasatze-denbora

Kalkula dezakegun erabilgarria den kantitate bat batez besteko lehen pasatze-denbora dugu. Zorizko ibilbidearen problema aztertzen ari bagara, batez besteko lehen pasatze-denbora da ibiltariak behar duen batez besteko denbora  $n_p$  sare-punturaino lehen aldiz heltzeko, onartuz ibiltaria  $n_0$  sare-puntutik abiatu dela, t=0 aldiunean. Kantitate horren kalkulua egiteko trikimailu baten beharra dugu. Onartuko dugu  $P_1(n_p,t)\equiv 0$  dela, aldiune guztietarako. Modu horretan, ibiltaria  $n_p$  sare-puntura erortzen bada, ezin izango da berriro zorizko ibilbidera bueltatu. Horri **itxidura-baldintza xurga-tzaile**a deritzo.

Egiten ari garena argitzeko asmotan,  $Q_n(t)$  ikurrarren bidez n sare-puntuan ibiltaria antzemateko probabilitatea adieraziko dugu, onartuz  $n_0$  sare-puntutik abiatu dela, t=0 aldiunean (erraztasunaren izenean, harek  $n_0$ -rekiko duen mendekotasuna desagertaraziko dugu). Orduan,  $Q_n(0)=\delta_{n,n_0}$  dugu eta  $Q_{n_p}(t)=0$  ere bai (itxidura-baldintza xurgatzailea).  $Q_n(t)$ -ri dagozkion higidura-ekuazioak  $P_1(n,t)$ -ri dagozkionaren berdinak dira [(5.55) eta (5.56 ekuazioak)],  $Q_{n_p}(t)=0$  egin dugula izan ezik. Beraz, honakoa izango dugu:

$$\frac{\partial Q_n(t)}{\partial t} = \sum_{m(\neq n_p)}^{M} Q_m(t) w_{m,n}(t) - Q_n(t) \sum_{m=1}^{M} w_{m,n}(t)$$
 (5.68)

Kontura zaitez  $Q_{n_p}(t) = 0$  egin dugula, baina  $w_{n_p,n} \neq 0$  dela, (5.68) ekuazioan. Dirac-en notazioan, (5.68) ekuazioa honako era honetan idatziko dugu:

$$\frac{\partial \mathbf{Q}(t)}{\partial t} = \mathbf{Q}\mathbf{M} \tag{5.69}$$

Adierazpen horretan,  $Q_n(t) \equiv \langle n_0 | \mathbf{Q}(t) | n \rangle$  eta  $\langle m | \mathbf{M} | n \rangle = w_{m,n} - \delta_{m,n} \sum_{n'}^{M} w_{n,n'}$  dira, eta  $m \neq n_p$  betetzen da. Jeneralean, M matrizea ez da simetrikoa eta, beraz, haren ezkerreko eta eskuineko autobektoreak ez dira berdinak. 5.C ataleko metodoak erabil ditzakegu (5.69) ekuazioaren ebazpena M matrizearen autobalioen eta ezkerreko eta eskuineko autobektoreen funtzioan garatzeko (ikus 5.4 ariketa). Haatik, hurbilketa hori erabiltzen dugunean, autobektoreek multzo osoa osatzen dutela konprobatu behar da.  $Q_n(t)$  matrizeak desagertuz joan behar duenez, behintzat, sare finituaren kasuan (azkenean ibiltaria  $n_p$  sare-puntuan eroriko da), M-ren autobalio guztiek negatiboak izan behar dute.

Ibiltaria "bizirik" (hots, oraindik  $n = n_p$  sare-puntuan erori ez dela) antzemateko probabilitatea, t aldiunean, honako hau da:

$$P_{n_0} \equiv \sum_{n(\neq n_p)=1}^{M} Q_n(t)$$
 (5.70)

Orain, egin dezagun honako definizio hau:

$$f_{n_0,n_p}(t) \equiv \{n_p \text{ sare-puntura heltzeko probabilitatea}, t \to t + dt \text{ denbora-tartean}\}$$
(5.71)

Kontuan har dezagun honako hau: t aldiunean "bizirik" egoteko probabilitatea bi probabilitatean da,  $t \to t + dt$  denbora-tartean "hilik" antzemateko probabilitatea eta  $t \to t + dt$  denbora-tartean oraindik bizirik antzemateko probabilitatea.

$$P_{n_0}(t) = f_{n_0, n_n}(t)dt + P_{n_0}(t+dt)$$
(5.72)

Kontuan hartuz honako berdintza hau:  $P_{n_0}(t+dt) = P_{n_0}(t) + \left(\frac{dP_{n_0}(t)}{dt}\right)dt + \dots$ , orduan, honako hau idatz dezakegu:

$$f_{n_0,n_p}(t) = -\frac{dP_{n_0}(t)}{dt}$$
 (5.73)

(5.68) eta (5.69) ekuazioak erabiliz,  $f_{n_0,n_p}(t)$  probabilitate-dentsitatea honako era honetan ere idatz daiteke:

$$f_{n_{0},n_{p}}(t) = -\sum_{n(\neq n_{p})=1}^{M} \frac{dQ_{n}(t)}{dt}$$

$$= \sum_{n(\neq n_{p})=1}^{M} \sum_{m(\neq n_{p})=1}^{M} Q_{m}(t)w_{m,n'}(t) - \sum_{n'(\neq n_{p})=1}^{M} Q_{n'}(t) \sum_{m=1}^{M} w_{m,n'}(t)$$

$$= -\sum_{n'(\neq n_{p})=1}^{M} Q_{n'}(t)w_{n_{p},n'}(t)$$
(5.74)

Beraz,  $f_{n_0,n_p}$  adieraz daiteke ibiltaria  $n_p$  sare-puntuaren aldameneko (auzokide) puntuetan antzemateko probabilitatearen eta  $n_p$  sare-puntutik haren aldemenekoen arteko trantsizio-ratioen funtzioan.

Honako hau da ibiltariak  $n_p$  sare-punturaino heltzeko behar duen batez besteko denbora-tartea, onartuz  $n_0$  puntutik abiatu dela, t=0 aldiunean:

$$\langle t \rangle = \int_{0}^{\infty} dt \ t \ f_{n_0, n_p}(t) = \int_{0}^{\infty} dt \ P_{n_0}(t)$$
 (5.75)

Adierazpen hori lortzeko (55.72) ekuazioa erabili dugu eta zatiketa integratu dugu.  $\langle t \rangle$  da batez besteko lehen pasatze-denbora.

## 5.4 Higidura browndarra

Atal honetan, higidura browndarraren teoria ondorioztatuko dugu, partikula browndarraren Langevin-en ekuazioetatik abiatuz. Hots, partikula handian (partikula browndarra), ha baino txikiagoak diren atomoz osatutako jariakinean murgilduta dagoena, fijatuko gara. Partikula handiaren higidura ajitatua atomoen higidura baino motelagoa da eta haren jatorria da zorizkoak eta azkarrak diren talkak, dentsitate-fluktuazioak direla-eta. Higidura browndarraren eta higidura atomikoen denbora-eskalak hain difenteak direnez, higidurak bana ditzakegu eta partikula browndarrean fijatu gaitezke. Partikula browndarraren gaineko jariakinaren eketua honako bi ekarpen hauetara bildu daiteke: zorizkoa den indarra eta partikula browndarrari eragiten dion marruskadura sistematikoa. Higidura browndarraren Langevin-en teoria zenbait askatasun-gradutan denbora-eskalen bereizketa identifikatu daiteke gorputz anitzezko sistemen azterketa egiteko paradigmatzat har daiteke. Horrexegatik aztertuko dugu hemen.

Higidura browndarrak ematen digu, maila makroskokopikoan, maila mikroskokopikoko materiaren izaera atomiko edo diskretuaren erabat ikusgarria den ebidentzia. Materiaren diskretutasunak fluktuazioak eragiten ditu materiaren dentsitatean eta horiek, ondorioz, partikula browndarraren higiduran antzematen diren efektuak eragiten ditu. Hori guztia kronprobatu daiteke partikula handi bat (normalean, 1 mikroiko diametrokoa) haren dentsitate bereko jariakin batean murgiltzen denean. Mikroskopioaren bidez behatzen denean, partikula handia (partikula browndarra), antza, egoe-

ra kitzikatuan dago: higidura azkar eta zorizkoa betez. Hemeretzi garren mendearen hasieran, Robert Brown biologoak artikulu bat idatzi zuen fenomeno horri buruz.

Higidura browndarraren aro modernoa Albert Einsteinekin hasi zen. Hasieran, Einstein higidura browndarraren hedadura handiaz ez zen jabetu, haren helburua materiaren izaera atomikoa konfirmatzea zen. Einsteinek erlazio bat lortu zuen Ddifusio-koefiziente makroskopikoa eta materiaren propietate atomikoen artean. Honakoa da erlazio hori:  $D = RT/N_A 6\pi \eta a$ . Adierazpen horretan, R gasen konstatea da;  $N_A = 6,02 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$ , Avogadro-ren zenbakia; T, tenperatura, kelvinetan;  $\eta$ , likatasuna; a partikula browndarraren erradioa. Adierazpen hori askotan konfirmatu izan da higidura browndarreko saiakuntzetan.

#### 5.4.1Langevin-en ekuazioa

Jariakin batean higidura browndarrean dagoen partikula bat aztertuko dugu. Gauzak errazteko, dimentsio bakarreko higidura aintzakotzat hartuko dugu. Emaitzak era errazean orkortu daitezke hiru dimentsioetara. Onartuko dugu partikula era askean higi daitekeela jariakinean eta jariakinaren eragina bi ekarpenez adierazita dagoela: abiaduraren proportzionala den marruskadura eta zorizko indar bat,  $\xi(t)$ , dentsitatearen zorizko fluktuazioetan jatorria duena. Partikula browndarraren higiduraekuazioak honako hauek dira:

$$\frac{dv(t)}{dt} = -\frac{\gamma}{m}v(t) + \frac{1}{m}\xi(t) \tag{5.76}$$

$$\frac{dv(t)}{dt} = -\frac{\gamma}{m}v(t) + \frac{1}{m}\xi(t)$$

$$\frac{dx(t)}{dt} = v(t)$$
(5.76)

Adierazpen horretan, v(t) eta x(t) dira partikularen t aldiuneko abiadura eta posizioa, hurrenez hurren; m, partikularen masa eta  $\gamma$ , marruskadura-koefizientea. (5.76) eta (5.77) ekuazioak dira partikula browndarraren Langevin-en higidura-ekuazioak.

Zorizko indarra,  $\xi(t)$ , aldagai estokastikoa da; horrek ematen digu partikula browndarraren gaineko jariakinetiko hondoko zarataren efektua. Onartuko dugu  $\xi(t)$  zarata zuriko eta batezbesteko nuluko ( $\langle \xi(t) = 0 \rangle$ ) prozesu gausiarra dela. Zarata markoviarra eta geldikorra da eta  $\langle \rangle_{\xi}$  ikurrak adierazten du  $\xi(t)$  aldagia estokastikoaren posibleak diren balioen probabilitate-banaketarekiko batez bestekoa. Zarata zuria dela onartzeak esan nahi du zarata delta-koerlatua dela, hots,

$$\langle \xi(t_1)\xi(t_2)\rangle_{\varepsilon} = g \,\delta(t_2 - t_1) \tag{5.78}$$

Zarata delta-koerlatua bada, haren potentzia-espektroak maiztasuneko osagai guztiak barneratzen ditu (5.E.2 atalean ikusiko dugun moduan). q haztapen-faktorea zarataren indarraren neurria da. Horrelako koerlazio-funtzioak adierazten du zarata ez dagoela aldiune batetik bestera koerlatuta eta, ondorioz,  $\mathcal{E}(t)$  aldagaiaren posiblea den balio bakarra ezinezkoa dela adieraztea lerro jarraitua erabiliz. Zarata batez besteko nuluko gausiarra izateak esan nahi du (4.9 ariketa) kopuru bakoitiko koerlaziofuntzioak nuluak direla eta kopuru bikoitiko koerlazio-funtzioak  $\langle \xi(t_1)\xi(t_2)\rangle_{\xi}$  biko biderkaduren baturen funtzioan adieraz daitezkeela; esaterako, honako adierazpen hauen bidez:

$$\langle \xi(t_1)\xi(t_2)\xi(t_3)\xi(t_4)\rangle_{\xi} = \langle \xi(t_1)\xi(t_2)\rangle_{\xi}\langle \xi(t_3)\xi(t_4)\rangle_{\xi} + \langle \xi(t_1)\xi(t_3)\rangle_{\xi}\langle \xi(t_2)\xi(t_4)\rangle_{\xi} + \langle \xi(t_1)\xi(t_4)\rangle_{\xi}\langle \xi(t_2)\xi(t_3)\rangle_{\xi}$$

(5.76) eta (5.77) ekuazioak modu nahiko errazean ebatz daitezke. Onar dezagun partikula browndarraren abiadura eta posizioa, t aldiunean,  $v(0) = v_0$  eta  $x(0) = x_0$  direla, hurrenez hurren. Ondorioz, (5.76) eta (5.77) ekuazioen ebazpenak honako hauek dira:

$$v(t) = v_0 e^{-(\frac{\gamma}{m})t} + \frac{1}{m} \int_0^t ds \ e^{-(\frac{\gamma}{m})(t-s)} \xi(s)$$
 (5.79)

$$x(t) = x_0 + \frac{\gamma}{m} \left( 1 - e^{-\left(\frac{\gamma}{m}\right)t} \right) v_0 + \frac{1}{\gamma} \int_0^t ds \left( 1 - e^{-\left(\frac{\gamma}{m}\right)(t-s)} \right) \xi(s)$$
 (5.80)

(5.79) eta (5.80) ekuazioek v(t) eta x(t) ematen dituzte,  $\xi(t)$  aldagai estokastikoaren balio posible bakarrerako. Esan bezala,  $\xi(t)$  aldagai estokastikoa denez, v(t) eta x(t) ere aldagai estokastikoak dira eta horien propietateak  $\xi(t)$  aldagiak finkatzen ditu.  $v(0) = v_0$  baldintza betetzen duen batez besteko abiadura  $\langle v(t) \rangle_{\xi} = v_0 e^{-(\gamma/m)t}$  da; eta batez besteko desplazamendua,  $\langle (x(t) - x_0) \rangle_{\xi} = \frac{m}{\gamma} \left( 1 - e^{-(\gamma/m)t} \right)$ .

(5.78), (5.79) eta (5.80) ekuazioetatik koerlazio-funtzioak ere lor ditzakegu.  $\langle v_0 \xi(t) \rangle_{\xi} = 0$  betetzen dela kontuan hartzen badugu, honakoa hau idatz dezakegu:

$$\langle v(t_2)v(t_1)\rangle_{\xi} = v_0^2 e^{-\frac{\gamma}{m}(t_2+t_1)}$$

$$= +\frac{g}{m^2} \int_0^{t_2} ds_2 \int_0^{t_1} ds_1 \delta(s_2-s_1) e^{\frac{\gamma}{m}(s_1-t_1)} e^{\frac{\gamma}{m}(s_2-t_2)}$$
(5.81)

Adierazpen horretan dagoen integrala era errazean ebatz daiteke eta honako hau lortu:

$$\langle v(t_2)v(t_1)\rangle_{\xi} = \left(v_0^2 - \frac{g}{2m\gamma}\right)e^{-\frac{\gamma}{m}(t_2 + t_1)} + \frac{g}{2m\gamma}e^{-\frac{\gamma}{m}(t_2 - t_1)}$$
(5.82)

Berebat, desplazamenduaren bariantza ere lor dezakegu. (5.78) eta (5.80) ekuazioekin batera  $\langle x_0 \xi(t) \rangle_{\xi} = 0$  betetzen dela kontuan hartuz, honako hau idatz dezakegu:

$$\langle (x(t) - x_0)^2 \rangle_{\xi} = \frac{m^2}{\gamma^2} \left( v_0^2 - \frac{g}{2m\gamma} \right) \left( 1 - e^{-(\gamma/m)t} \right)^2 + \frac{g}{\gamma^2} \left[ t - \frac{m}{\gamma} (1 - e^{-(\gamma/m)t}) \right]$$
(5.83)

Beraz, denbora luzearen ondoren, bariantzaren denborako eboluzioa, zenbait atal konstante baztertuz, honako hau da:  $\langle (x(t)-x_0)^2\rangle_\xi=\left(\frac{g}{\gamma^2}\right)t$ . Horixe da 4. gaian aztertu genuen zorizko ibiltariak erakusten duen portaera berbera,  $D=\frac{g}{2\gamma^2}$  difusio-koefizientea aukeratzen badugu.

Jariakin batean orekan dagen partikula browndar baten g-ren balioa lortzeko, trikimailu sinplea erabil daiteke. Onar dezagun partikula browndarra jariakinarekin orekan dagoela eta kalkula dezagun  $v_0$  hasierako abiadura posible guztiekiko batez bestekoa. Batez besteko "termiko" hori  $\langle \rangle_T$  ikurraren bidez adierazten dugu. Ekipartizio-teoremaren arabera, askatasun-graduek  $\frac{1}{2}k_BT$  atal bana ematen dute orekan dagoen partikula baten batez besteko energia zinetikoan:  $\frac{1}{2}m\langle v_0^2\rangle_T = \frac{1}{2}k_BT$ ; horretan,  $k_B$  Boltzmann-en konstantea da eta T, tenperatura (kelvinetan). Partikula browndarra orekan badago, haren abiaduraren koerlazio-funtzioak geldikor izan behar du. Ondorioz,  $v_0^2 = \frac{g}{2m\gamma}$  izan behar dugu eta, beraz, (5.82) ekuazioko lehen atala desagertzen da. (5.82) ekuazioaren batez besteko termikoa kalkulatzen badugu,  $g = 2\gamma k_B T$  lortzen dugu. Koerlazio-funtzioa honako era honetan idatz daiteke:

$$\langle \langle v(t_2)v(t_1)\rangle_{\xi}\rangle_T = \frac{k_B T}{m} e^{-(\gamma/m)|t_2 - t_1|}$$
(5.84)

Diferentziaren balio absolutuaren bidez ziurtatuta dago koerlazioak desagertuko direla denbora-diferentziak gora egiten duen heinean. Partikula browndarraren hasierako abiadurari buruzko informazioa esponentzialki txikituz doa.

Partikula browndarra jariakinarekin orekan dagoen kasuan, desplazmenduaren bariantzak honako eite hau hartzen du:

$$\langle \langle (x(t) - x_0)^2 \rangle_{\xi} \rangle_T = \frac{2k_B T}{\gamma} \left[ t - \frac{m}{\gamma} (1 - e^{-(\gamma/m)t}) \right]$$
 (5.85)

Adierazpen horretan,  $\langle x_0 \rangle_T = \langle v_0 \rangle_T = 0$  betetzen dela onartu dugu eta, berebat,  $x_0$  eta  $v_0$  estatistikoki independenteak direla, beraz, honako hau betez:  $\langle x_0 v_0 \rangle = 0$ . Orduan, denbora luzearen buruan  $\langle \langle (x(t)-x_0)^2 \rangle_\xi \rangle_T = \frac{2k_BT}{\gamma}t$  izango dugu eta difusio-koefizientea  $D = \frac{k_BT}{\gamma}$  izango da.  $\gamma$  marruskadura-koefizientea jariakinaren eta hidrodinamikaren propietateak erabiliz lor daiteke ere bai. Partikula browndar esferiko handien kasuan, jariakina azalean itsatsita geratzen dela onar dezakegu. Orduan, marruskadura-koefizientea Stokes-en marruskadura da, hots:  $\gamma = 6\pi \eta R$ , non  $\eta$  zeharkako likatasuna den eta R, partikula browndarraren erradioa. Partikula browndar oso txikien kasuan, itsatzeko itxidura-baldintzak agian ez dira aplikagarriak eta  $\gamma$  marruskadura-koefizientea ezberdina izan daiteke.

### 5.4.2 Dentsitate espektrala (Potentzia-espektroa)

Prozesu estokastiko geldikorrak aztertzen direnean, garrantzi handiko kantitatea dentsitate espektrala (edo potentzia-espektroa) da. Aldagai estokastiko batekin,  $\psi(t)$ , lotutako informazio esprimentala dugunean –hots, $\psi(t)$ -rako denbora-segida badugu–, orduan, erabilgarria da potentzia-espektroa kalkulatzea, horretan, prozesu estokasti-koari buruzko informazio handia baitago, aurrerago ikusiko dugun moduan.

Praktikan, esperimentuetako datuak aztertzen ditugunean, luzera finituko denborasegida dugu esku artean lan egiteko. Onar dezagun T luzerako denbora-segida bat dugula. Hori adierazteko  $\psi(t;T)$  ikurra erabiliko dugu;  $\psi(t;T)=\psi(t)$  da,  $-\frac{T}{2}\leqslant t\leqslant \frac{T}{2}$  betetzen denean eta  $\psi(t;T)=0$  da, beste edozein kasutan. Honako hau ere betetzen da:  $\lim_{T\to\infty}\psi(t;T)=\psi(t)$ . Honako hau da  $\psi(t;T)$ -ren Fourier-en transformatua:

$$\tilde{\psi}(\omega;T) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt \psi(t;T) e^{i\omega t}$$
(5.86)

 $\psi(t;T)$  erreala denez,  $\tilde{\psi}(\omega;T)=\tilde{\psi^*}(\omega;T)$  betetzen da. Adierazpen horretan, \* ikurrak konjugazio konplexua adierazten du.

Honako hau da dentsitate espektralaren definizioa:

$$S_{\psi,\psi}(\omega) \equiv \lim_{T \to \infty} \frac{1}{T} \tilde{\psi}^*(\omega; T) \tilde{\psi}(\omega; T)$$
 (5.87)

(5.86) ekuazioa (5.87) ekuazioan ordezkatzen badugu, honako hau lortzen da:

$$S_{\psi,\psi}(\omega) = \lim_{T \to \infty} \frac{1}{T} \int_{-\infty}^{+\infty} dt_2 \int_{-\infty}^{+\infty} dt_1 \psi(t_2; T) \psi(t_1; T) e^{-i\omega(t_2 - t_1)}$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau e^{-i\omega(\tau)} \lim_{T \to \infty} \frac{1}{T} \int_{-\infty}^{+\infty} dt_1 \psi(t_1 + \tau; T) \psi(t_1; T)$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau e^{-i\omega(\tau)} \langle \psi(t_1 + \tau; T) \psi(t_1; T) \rangle_{\bar{t}}$$

$$(5.88)$$

Adierazpen horretan,  $\langle \psi(t_1 + \tau; T)\psi(t_1; T)\rangle_{\overline{t}}$  da denborako batez bestekoa; hots,

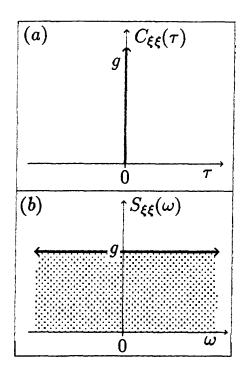
$$\langle \psi(t_1 + \tau; T)\psi(t_1) \rangle_{\overline{t}} \equiv \lim_{T \to \infty} \frac{1}{T} \int_{-\infty}^{+\infty} dt_1 \psi(t_1 + \tau; T)\psi(t_1; T)$$
 (5.89)

(5.89) ekuazioak adierazten du zenbakien biderkaduraren  $(\psi(t_1 + \tau; T)\psi(t_1; T))$  batez bestekoa,  $\psi(t)$  denbora-seriearen puntu bakoitzean. Prozesu estokastikoa geldikorra dela onartu dugunez, denbora-seriaren propietate estokastikoak ez dira aldatzen denbora-seriean desplazatzen bagara. Ondorioz,  $\langle \psi(t_1+\tau;T)\psi(t_1;T)\rangle_{\overline{t}}$  denborako batez bestekoa eta  $\langle \psi(t_1+\tau;T)\psi(t_1;T)\rangle_{\psi}$  batez besteko estatistikoa berdinak izatea espero dugu. Azken horretan,  $\psi(t_1+\tau;T)\psi(t_1;T)$  biderkaduraren batez bestekoa kalkulatzen dugu,  $t=t_1$  puntu jakin batean eta denbora-seriaren balio posibleen kopuru infinituko multzoan. Horrela, beraz, prozesu geldikorraren kasuan honako hau lortzea espero dugu:

$$C_{\psi,\psi} \equiv \langle \psi(t_1 + \tau; T)\psi(t_1) \rangle_{\psi} = \langle \psi(t_1 + \tau)\psi(t_1) \rangle_{\bar{t}}$$
(5.90)

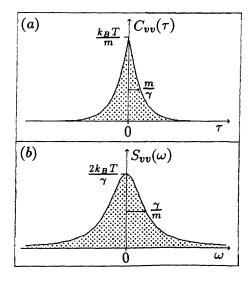
(5.89) eta (5.90) ekuazioak elkarrekin konbinatzen baditugu, dentsitate espektralaren honako adierazpena lortzen da:

$$S_{\psi,\psi}(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau e^{-i\omega(\tau)} \langle \psi(t_1 + \tau)\psi(t_1) \rangle_{\psi} = \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau e^{-i\omega(\tau)} C_{\psi,\psi}(\tau)$$
 (5.91)



Irudia 5.1:

5.E.1 atalean deskribatutako higidura browndarrari dagozkion dentsitate espektralak kalkulatzea interesantea da. Azter dezagun jariakin batekin orekan dagoen partikula browndarraren kasua eta onar dezagun prozesua geldikorra dela. (5.78) ekuaziotik ondorioztatu daiteke zarata zuriaren dentsitate espektrala honako hau dela:



Irudia 5.2:

$$S_{\xi,\xi}(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau e^{-i\omega(\tau)} \langle \xi(t_1 + \tau)\xi(t_1) \rangle_{\xi} = g = 2\gamma k_B T$$
 (5.92)

Hortaz, zarata zuriko prozesu baten maiztasun guztiak haztapen berekoak dira. Koerlazio-funtzioa,  $C_{\psi,\psi}(t)$ , eta dentsitate espektrala,  $S_{\psi,\psi}(\omega)$ , alboko irudia adierazten dira.

Abiaduraren denbora-seriaren dentsitate espektrala honako hau da:

$$S_{v,v}(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau e^{-i\omega(\tau)} \langle v(t_1 + \tau)v(t_1) \rangle_{\xi} = \frac{2\gamma k_B T}{m^2 \omega^2 + \gamma^2}$$
 (5.93)

Abiaduraren koerlazio-funtzioa eta dentsitate espektralaren grafikoak, partikula browndarraren kasuan, alboko irudian adierazten dira.

Zarata "zuria" ez denean, dentsitate espektrala oraindik ere esperimentuarekin bat etor dadila egin daiteke.

## 5.5 Denboran periodikoa den Markov-en katea

 $Trantsizio-probabilitatea\ denboraren\ funtzioa\ periodikoa\ da$ 

Azter dezagun, orain, trantsizio-probabilitatea denboraren funtzioa periodikoa den kasua, N periodoarekin. Hots,  $Q_{n,m}(s) \equiv P_{1|1}(n,s|m,s+1) = P_{1|1}(n,s+N|m,s+1)$ 

N+1) betetzen da. Trantsitzio-probabilitatearen pediodo baten ostean, probabilitatebektorea honako era honetan idatz daiteke:

$$\langle \mathbf{P}(N) | = \langle \mathbf{P}(0) | \mathbf{Q}(0) \mathbf{Q}(1) \times \dots \times \mathbf{Q}(N-1) \equiv \langle \mathbf{P}(0) | \mathbf{U}$$
 (5.94)

Adierazpen horretan,  $\mathbf{U} = \mathbf{Q}(0)\mathbf{Q}(1) \times \cdots \times \mathbf{Q}(N-1)$  da hasierako  $\langle \mathbf{P}(0)|$  egoeratik periodo baten ondorengo  $\langle \mathbf{P}(N)|$  bukaerako egoerara sistema eramaten duen trantsizio-probabilitatea. Orokorrago, trantsizio-matrizearen l periodo iragan ondorengo probabilitate-bektorea honako hau da:

$$\langle \mathbf{P}(lN)| = \langle \mathbf{P}(0)|\mathbf{U}^l \tag{5.95}$$

 $\langle \mathbf{P}(lN)|$  probabilitate-bektorea  $\mathbf{U}$  trantsizio-matrizearen ezkerrreko eta eskuine-ko autobektorean funtzioan gara dezakegu. Onar dezagun  $\Lambda_{\alpha}$  dela  $\mathbf{U}$  matrizearen  $\alpha$ -garren autobalioa eta, berebat, onar dezagun  $\mathbf{U}$  matrizearen ezkerreko eta eskuineko autobektore normalizatuak  $\langle \chi_{\alpha}|$  eta  $|\psi_{\alpha}\rangle$  direla, hurrenez hurren;  $\alpha=1,\ldots,M$  betetzen da. Orduan,  $\mathbf{U}|\psi_{\alpha}\rangle=\Lambda_{\alpha}|\psi_{\alpha}\rangle$  eta  $\langle \chi_{\alpha}|\mathbf{U}=\langle \chi_{\alpha}|\Lambda_{\alpha}$  izango ditugu. Orain, 5.C.1 atalean egin genuena egin behar dugu.  $\mathbf{U}$  matrizea  $M\times M$  dimentsioko matrizea bada, orduan haren deskoposaketa espektrala honako hau da:

$$\mathbf{U} = \sum_{\alpha=1}^{M} \Lambda_{\alpha} |\psi_{\alpha}\rangle \langle \chi_{\alpha}| \tag{5.96}$$

Trantsizio-matrizearen  $\boldsymbol{l}$ periodo iragan ondorengo probabilitate-bektorea honako hau da:

$$\langle \mathbf{P}(lN)| = \sum_{\alpha=1}^{M} \Lambda_{\alpha}^{l} \langle \mathbf{P}(0)|\psi_{\alpha}\rangle \langle \chi_{\alpha}|$$
 (5.97)

Honako hau da Y aldagai estokastikoaren s = lN aldiuneko n-garren balio posiblea:

$$P(n,lN) = \sum_{m=1}^{M} \sum_{\alpha=1}^{M} \Lambda_{\alpha}^{l} P(m,0) \psi_{\alpha}(m) \chi_{\alpha}(n)$$
(5.98)

Ekuazio horien guztien erabilgarritasuna 5.7 ariketan erakutsiko dugu.