

## ЗАМКНЕНИЙ ОПИС НЕАВТОНОМНИХ ДИНАМІК АБСОРБУВАЛЬНОГО ЛАНЦЮГА МАРКОВА ІЗ ТРЬОМА СТАНАМИ ТА ВИПАДКОВИМИ ЙМОВІРНІСТЯМИ ПЕРЕХОДУ

В. І. Тесленко<sup>1</sup>, О. Л. Капітанчук<sup>2</sup>

*Інститут теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова, Національна академія наук України,  
вул. Метрологічна, 14-б, Київ, 03680, Україна  
e-mails: <sup>1</sup>vtes@bitp.kiev.ua; <sup>2</sup>alkapt@bitp.kiev.ua*

(Отримано 26 лютого 2019 р.; в остаточному вигляді — 01 травня 2019 р.)

Метод проекційного оператора Токуяма–Морі для замкненого опису усереднених динамік нерівноважної підсистеми, яка слабо взаємодіє з рівноважним оточенням, застосовано до неавтономного абсорбувального ланцюга Маркова з трьома станами та стохастичними ймовірностями переходів. Розв'язок задачі про поведінку в часі усередненої заселеності проміжного стану ланцюга зроблено у двох випадках, коли симетричний дихотомічний стохастичний процес додано до прямої або до зворотної ймовірностей переходу з його початкового у проміжний стан. Показано, що обидва знайдені розв'язки описуються загальнорізними диференціальними рівняннями четвертого порядку, які доповнюють одне одного. У границі великої частоти стохастичного процесу в прямій або зворотній ймовірностях переходу, а також у випадку одностадійного оборотного ланцюга обидва розв'язки стають двоекспоненційними й накладаються один на один. Але є різниця між прикладанням цих розв'язків до замкненого опису динамік двостадійного абсорбувального ланцюга Маркова за малих частот стохастичного процесу, коли перший розв'язок проявляє себе як чотириекспоненційний, тоді як другий демонструє свою ефективну двоекспоненційну поведінку. Це свідчить про взаємну незвідність двох розв'язків один до одного загалом.

**Ключові слова:** нерівноважні системи, неавтономні динаміки, стохастичні процеси, абсорбувальний ланцюг Маркова, випадкові ймовірності переходу.

DOI: <https://doi.org/10.30970/jps.23.3002>

PACS number(s): 02.50.Wp, 05.40.Ca, 05.70.Ln

### І. ВСТУП

Ланцюг Маркова — точний математичний об'єкт, який водночас є предметом загальної теорії, що постійно розвивається та розширюється, і ефективним методом, що інтенсивно застосовується на практиці. Теорія елементарних ланцюгів Маркова добре відома, що дозволяє будувати математичні моделі стохастичних процесів у різних фізичних, хімічних, біологічних, інформаційних, економічних та соціальних системах, які характеризуються випадковим розвиненням у часі (див., напр., [1, 2]). Залежно від складності розглянутих систем ланцюги Маркова розрізняються за своїм порядком і типом. Так, ланцюг Маркова нульового порядку співвідноситься з еволюцією деякої скінченної нерівноважної квантової системи, яка слабо взаємодіє з навколишнім середовищем в одночастинковому наближенні за умови, що динаміка системи є Марковським стохастичним процесом (див. [3]). Такий ланцюг Маркова відповідає процесові випадкового блукання деякої броунівської частинки по станах системи, якій бракує пам'яті. При цьому для довільних двох станів системи — поточному та наступному — величина ймовірності переходу з першого в другий стан залежить тільки від параметрів взаємодії між станами та локальних характеристик першого стану, але не звід способу, яким частинка потрапила в цей стан. Коли ж ймовірність переходу є функ-

цією й попередніх станів, стохастична динаміка системи залежить також від передісторії процесу [1, 2]. Це вимагає застосування моделей ланцюгів Маркова першого та вищих порядків, потреба в яких виникає, наприклад, у низці складних багаточастинкових систем, як-от: багатокомпонентні і багатоагентні середовища та засоби інформаційно-комунікаційного зв'язку (див. [4–10]).

Узагалі, переважна більшість процесів, які здійснюються в реальних складних системах, є багаточастинковими [11–15]. Тому послідовний підхід до їх опису ґрунтується на законах статистичної механіки й спирається на ймовірнісні уявлення про спостережні величини, пов'язані з фізичними властивостями цієї багаточастинкової системи і її поведінкою в різних станах. При цьому здебільшого, зокрема у випадках, коли визначаються, скажімо, миттєві (не усереднені) положення рівнів енергії мікроскопічних станів системи або ефективні (усереднені) ймовірності переходів між макроскопічними її станами, додатково припускається, що спостережні величини підпорядковуються також стохастичним флуктуаціям, які відбуваються в околі деяких математично очікуваних або фізично зумовлених середніх значень. Це значно ускладнює висхідні динамічні рівняння Ліувілля–фон Ноймана для еволюції повної матриці густини багаточастинкової системи і робить пошук їх точного розв'язку безперспективним. Але виявляється, що за належ-



ного застосування одночастинкового наближення, у якому ціла багаточастинкова система розділяється на певну скінченну квантову (одночастинкову) систему, що слабо взаємодіє з її нескінченим (багаточастинковим) оточенням, ці рівняння в обох флуктуаційних випадках вдається звести до деякого лінійного ланцюга Маркова нульового порядку (див., напр., [3] та розділи II і III цієї роботи). Це спрощує задачу і дозволяє далі вести мову лише про такі ланцюги.

Іншою ознакою, характерною для ланцюгів Маркова, є їх належність до ланцюгів певного типу — так званих однорідних або неоднорідних ланцюгів. Наприклад, в однорідному ланцюзі як імовірності кожного стану, так і ймовірності переходів між різними станами покладаються добре визначеними. Однак надання точної фіксації можливим величинам ймовірностей часто не є таким насправді. Це потребує додаткового припущення щодо випадкової невизначеності, притаманної цим величинам, але за існування для них певних привнесених зовні ймовірнісних розподілів у деяких інтервалах. Унаслідок цього виникає проблема неоднорідного (начебто неавтономного) ланцюга Маркова, яка полягає в пошукові розв'язку деякого лінійного диференціального рівняння для випадкового вектора ймовірностей станів зі стохастично невизначеною матрицею швидкостей переходу за наявності додаткового шуму з відомими моментами розподілу. Оскільки взагалі цю проблему не можна розв'язати в замкненому вигляді, то необхідно обмежуватися пошуком лише наближених її розв'язків. Наприклад, суттєве спрощення задачі досягається за рахунок її замикання через деякі наближені співвідношення між кореляційними функціоналами першого чи другого порядків, параметри яких вважаються відомими, та кореляційними функціоналами вищих порядків, які невідомі [16, 17]. Зазвичай це робиться через перехід від матричного стохастичного диференціального рівняння до інтегрального рівняння Вольтерра зі стохастичним ядром, що містить згортку стосовно додаткового шуму. Замкнений розв'язок рівняння Вольтерра далі знаходимо за допомогою наближених методів розкладання, таких, як ітераційні чи асимптотичні методи або методи ієрархічного відсікання (див., напр., [18–20]).

Водночас існує також інший спосіб для значного спрощення задачі. Він використовує ту обставину, що стохастичний процес, притаманний ланцюгу Маркова як такому, щодо фізичної системи, еволюція якої співвідноситься з тим ланцюгом, може розглядатися як деяке випадкове зовнішнє поле, стохастичні динаміки якого не залежать від еволюції системи. Але, своєю чергою, зовнішнє поле впливає на енергію системи. Тому щодо поля стохастичні динаміки системи стають неавтономними, а ланцюг еволюції станів, що належить до системи, формує тип справді неавтономних ланцюгів Маркова. У такій постановці задачі виникає можливість замикання вихідної системи стохастичних диференціальних рівнянь першого порядку з випадковими коефіцієнтами через підняття їхнього порядку та дальшого використання відомих

формул диференціювання для моментів функціоналів від експоненціально корельованих стохастичних процесів [21]. Унаслідок цього задача зводиться до одного однорідного лінійного диференціального рівняння вищого порядку з редукованими постійними коефіцієнтами, причому для симетричного дихотомічного процесу таке замикання проводиться точно (див. [22–24]). Однак, маючи на увазі отримання кінцевого розв'язку диференціального рівняння, його порядок при цьому не може бути надто високим. Справді, добре відомо, що розв'язок диференціальних рівнянь третього і вище порядків вдається безпосередньо отримати лише чисельними методами. Але їх застосування вимагає зворотного зведення задачі до системи диференціальних рівнянь першого порядку, яка погано визначена, оскільки їй бракує всієї інформації стосовно вихідних даних. Це потребує додаткових припущень щодо введення для певних параметрів системи апріорних співвідношень, які зарані були невідомими але такими, що трансформували б задачу в добре визначену та не суперечили б початковим і граничним умовам [25, 26].

Отже, підняття порядку системи стохастичних диференціальних рівнянь як спосіб замкненого опису неавтономних динамік ланцюга Маркова показує свою недостатність як загального методу. Та попри це, такий спосіб дозволяє проводити аналітичний розгляд динамік неавтономного ланцюга за умови, що кількість його станів не перебільшує трьох, один з яких є абсорбувальним. Але навіть й у цьому простому випадку відповідний аналіз не повний (див., напр., [22, 27] та посилання звідти). Так, у [22, 27] введено обмеження, що стохастичний процес входить тільки в пряму ймовірність переходу ланцюга Маркова. Однак наявність аналогічного процесу в його зворотній ймовірності, а також задачу про узгодженість неавтономних динамік, що виникають у цих двох випадках, та їх зводимість одна до одної, не досліджували. Крім того, залишилися нерозв'язаними питання стосовно чіткішого розділення у підходах до опису стохастичних процесів, що відповідають за формування мікроскопічних та макроскопічних флуктуацій у фізичній системі як на рівні енергії її станів, так і ймовірностей переходу між станами. Наприклад, у працях [22, 27] використано єдиний мікроскопічний підхід до розгляду обох типів флуктуацій — як мікроскопічних, так і макроскопічних, а розмежування їх опису ґрунтувалось на наявності в системі релаксаційних і випадкових процесів, що були добре розділеними за шкалою часу.

Окрім цього, надання можливості ланцюгу Маркова бути неавтономним ставить важливе питання щодо стійкості цього ланцюга стосовно до зовнішніх випадкових збурень у динамічних та кінетичних параметрах його еволюції. Відомо, що необхідні та достатні умови для стійкої поведінки автономного ланцюга Маркова повністю характеризуються набором власних значень його інваріантного за часом оператора переходу [4, 5]. Однак ці ж умови для неавтономного ланцюга Маркова, оператор переходу якого є певною

явною функцією часу, не можуть бути описаними в такий же загальний спосіб [17, 28, 29]. Але для абсорбувального неавтономного ланцюга Маркова зі скінченною кількістю станів та випадковими ймовірностями переходу між ними проблему стійкості ланцюга розв'язують тривіально однозначно. Справді, в необоротних системах узагалі і в абсорбувальному ланцюзі Маркова з постійними чи випадковими ймовірностями переходу зокрема всі стани мають рухатись до єдиного стаціонарного, асимптотично та стохастично стійкого абсорбувального стану, в який вони мусять остаточно абсорбуватись без жодної можливості полишити його за відсутності відповідних збурень [30]. Тому після появи за часом у такому стійкому, стабільному абсорбувальному стані система буде і далі залишатись у ньому. Проте перехідні стани абсорбувального ланцюга Маркова, у яких він може з'являтися лише кілька разів і які всі мають потім загасати до нуля без жодних осциляцій, поведуться метастабільно, демонструючи виключно свою тимчасову появу [31]. Однак, незважаючи на те, що такі перехідні стани можуть характеризуватися немонотонною заселеністю, її зміна за часом ніколи не буває осцилююча і може характеризуватися тільки поодиноким піком, величина амплітуди якого ніколи не перевищує одиниці. Фактично, це робить застосоване вище припущення, що неавтономний ланцюг Маркова водночас є абсорбувальним ланцюгом, як необхідною, так і достатньою умовами для його локальної асимптотичної стабільності щодо можливих збурень у початковому та перехідних станах, заселеність яких не може бути більшою за одиницю в будь-який час за цих початкових і граничних умов.

Метою цієї праці є замкнений опис неавтономних динамік ланцюга Маркова у зображенні цих динамік як сукупності стохастичних релаксаційних переходів, що можуть здійснюватися з випадковими ймовірностями між трьома станами — початковим, перехідним і абсорбувальним — в одночастинковому наближенні стосовно їхніх нормованих заселеностей. У розділі II як загальний підхід до розв'язання проблеми використано метод проєкційного оператора Токуями–Морі [32], який дає змогу спроектувати еволюцію неавтономної фізичної системи із залежним від часу гамільтоніаном на еволюцію тільки нерівноважних (значущих) компонент її повної матриці густини, усереднюючи в такий спосіб поведінку системи за всіма статистично не значущими процесами. Розділи III і IV зосереджують увагу на відповідності запропонованого методу наявним автономним і неавтономним моделям для ланцюгів Маркова, зокрема таким, що мають лише три стани, один з яких є абсорбувальним. У розділах V і VI отримано точний розв'язок цієї задачі у відповідних випадках, коли ймовірності прямого і зворотного переходів є стохастичними величинами. Це потребує усереднення системи вихідних диференціальних рівнянь для не усереднених заселеностей за наявними в ній стохастичними процесами з подальшим проведенням її замикання. Нарешті, у розділі VII отримані в цих двох випадках результа-

ти обговорюються та порівнюються з поглядом їхньої можливої незвідності один до одного.

## II. СТОХАСТИЧНИЙ ГАМІЛЬТОНІАН І ВИХІДНІ КЕРУВАЛЬНІ РІВНЯННЯ

Добре відомо, що максимальне скорочення опису динаміки багаточастинкової системи досягається за допомогою редукції вихідних рівнянь Ліувілля–фон Ноймана для еволюції її повної матриці густини до відповідних рівнянь для еволюції деякої ефективної матриці густини, яка залежить від щонайменшої кількості ступенів вільності системи, визначених щодо її найсуттєвіших багаточастинкових конфігурацій [15]. Однак така ефективна матриця густини не завжди добирає певного фізичного змісту і необов'язково збігається з нерівноважною матрицею густини, яку знаходимо, наприклад, за умови статистичного усереднення повної матриці густини багаточастинкової системи за станами рівноважного оточення деякої відкритої нерівноважної підсистеми [33]. Щобільше, ефективна матриця густини може взагалі бути не одночастинковою, а дво- чи тричастинковою. Ситуація ще більше ускладнюється, коли нерівноважна підсистема підпорядковується стохастичному процесу, бо вимагає додаткового усереднення за всіма його випадковими реалізаціями. Це потребує низки наближень до розв'язку проблеми, які викладено в цьому розділі.

Зважаючи на сказане, розгляньмо деяку складну систему, яка впродовж її еволюції розділяється на дві частини, які взаємодіють між собою: малу частину, що є нерівноважною підсистемою, стани якої залежать від часу, і велику частину, що оточує малу частину й становить для неї рівноважне середовище, яке можна зобразити у вигляді нескінченного набору гармонічних осциляторів з нормальними модами  $\omega_\lambda$ , урівноваженими щодо температури  $T$  згідно з розподілом Бозе для коливальних чисел  $n_\lambda = [\exp(\omega_\lambda/k_B T) - 1]^{-1}$ , де  $k_B$  — постійна Больцмана (постійна Планка  $\hbar \equiv 1$ ). Це є основним наближенням задачі, яке дозволяє спрощено вважати незалежними від часу як матрицю густини середовища  $\rho_B = \exp(-H_B/k_B T)/\text{tr}_B \exp(-H_B/k_B T)$ , де слід береться за станами середовища, так і гамільтоніан середовища

$$H_B = \sum_\lambda \omega_\lambda (\beta_\lambda^+ \beta_\lambda + 1/2). \quad (1)$$

Тут  $\beta_\lambda^+$  і  $\beta_\lambda$  — оператори народження і знищення в середовищі відповідного фонуна з енергією  $\omega_\lambda$ , що перебуває в одночастинковому наближенні не взаємодіючих фонунов. У результаті, залежний від часу гамільтоніан складної системи  $H(t)$  в деякій довільній стохастичній його реалізації має вигляд

$$H(t) = H_0(t) + H_B + V, \quad (2)$$

де  $H_0(t)$  — стохастичний гамільтоніан нерівноважної підсистеми, а  $V$  — оператор її взаємодії з рівноваж-

ним середовищем. Останній визначається параметрами взаємодії  $|\chi_{jj'\lambda}|$  і з точністю до другого порядку малості щодо їхньої величини покладається достатньо слабим. Таке наближення означає, що незалежно від положень  $j$ -го і  $j'$ -го енергетичних рівнів у нерівноважній підсистемі, які є випадковими величинами в кожній стохастичній реалізації гамільтоніана  $H_0(t)$ , величинам параметрів взаємодії підсистеми із середовищем не вистачає, щоб хоч якось впливати як на положення рівнів власної енергії підсистеми, так і на розподіл одночастинкових збуджень коливальних квантів (фононів) середовища.

Як вихідне рівняння динаміки системи (2) будемо розглядати рівняння Ліувілля–фон Ноймана

$$\dot{\rho}(t) = -L(t)\rho(t) \quad (3)$$

для еволюції повної матриці густини складної системи  $\rho(t)$ . Вона за наближеннями факторизується на матрицю густини нерівноважної підсистеми  $\rho_0(t)$  та матрицю густини рівноважного середовища  $\rho_V$  як  $\rho(t) = \rho_0(t)\rho_V$ , де  $L(t) = i[H(t), \dots]$  є стохастичним супероператором Ліувілля для кожної такої випадкової реалізації гамільтоніана системи (2). Застосуємо до (3) метод Токуями–Морі [32] з використанням проекційного оператора  $\hat{P} \dots = \rho_V \text{tr}_V \dots$ , який, за означенням, зберігає гільбертів простір середовища як  $\hat{P}\rho_V = \rho_V$  або  $\hat{P} \exp(-H_V/k_B T) = \exp(-H_V/k_B T)$  й факторизує гільбертів простір складної системи як  $\hat{P}\rho(t) = \rho_V \otimes \rho_0(t) = \rho_0(t)\rho_V$ . При цьому тензорний добуток просторів нерівноважної підсистеми й рівноважного середовища наближено спрощується до їхнього простого добутку. Фактично це спричиняє деяке обмеження для розв'язання проблеми, оскільки примушує всі залежні від часу процеси, що підпорядковані аналізу в складній системі, відносити до таких, що відбуваються виключно в її нерівноважній частині, практично не торкаючись рівноважної частини. Таке обмеження може бути послабленим, якщо вважати, що починає діяти від деякого часу хаотизація  $\tau_{0,V}^{\text{ch}}$ , що є достатньо коротким, щоб за нього могло відбуватися формування рівнів власних енергій у відповідних діагональних гамільтоніанах  $H_0(t)$  (2) і  $H_V$  (1). Тому в наближенні Борна–Маркова, типовому для розгляду таких задач, це не призводить до негативних наслідків щодо змісту очікуваних результатів (див., напр., [23, 24, 34] та розділ III цієї роботи).

З метою подальшого аналізу запишемо рівняння (3) в зображенні взаємодії

$$\dot{\tilde{\rho}}(t) = -\tilde{L}_V(t)\tilde{\rho}(t) \quad (4)$$

за допомогою відомих співвідношень  $\tilde{\rho}(t) = U^{-1}(t, t_0)\rho(t)$  і  $\tilde{L}_V(t) = U^{-1}(t, t_0)L_V U(t, t_0)$ , де

$$U(t, t_0) = \exp_{\leftarrow} \left\{ - \int_{t_0}^t d\tau [L_0(\tau) + L_B] \right\} \quad (5)$$

— двочасовий супероператор еволюції,  $\exp_{\leftarrow}$  — експоненціал упорядкування операторів за спадним часом, а  $L_0(t) = i[H_0(t), \dots]$ ,  $L_V = i[V, \dots]$ , та  $L_B = i[H_B, \dots]$

— супероператори Ліувілля, які задовольняють рівняння:  $\hat{P}L_0(t) = L_0(t)\hat{P}$ ;  $\hat{P}L(t)\hat{P} = L_0(t)\hat{P}$ ;  $\hat{P}L_B = L_B\hat{P} = 0$ .

Для розв'язку рівняння (4) треба подіяти на нього проекційними операторами  $\hat{P}$  і  $1 - \hat{P}$ , а потім частково усереднити результат за рівноважною матрицею густини  $\rho_V$ . Відтак можна в борнівському наближенні знехтувати кубічним і вище членами щодо  $V$ , залишивши тільки члени другого порядку малости за  $V$ . Крім того, маючи на увазі незалежність  $V$  від часу, лінійні за  $V$  члени, а також осциляції у членах нульового порядку можна не розглядати. Позбавляючись від невідомої величини  $(1 - \hat{P})\tilde{\rho}(t)$  у стандартний спосіб [35] за методом Токуями–Морі [32], отримуємо локальне за часом керувальне рівняння

$$\dot{\tilde{\rho}}_0(t) = -\tilde{K}(t)\tilde{\rho}_0(t). \quad (6)$$

Тут  $\tilde{K}(t) = \text{tr}_V \left\{ \tilde{L}_V(t)[1 - \tilde{\Sigma}(t)]^{-1} \rho_V \right\}$  — ядро швидкості рівняння (6), яке позбавлене пам'яті, з локальним за часом оператором  $\tilde{\Sigma}(t) = \int_{t_0}^t d\tau \tilde{Z}_P(t, \tau)(P - 1)\tilde{L}_V(\tau)\tilde{Z}^{-1}(t, \tau)$ , що, своєю чергою, є функціоналом від його нелокальних за часом ядер  $\tilde{Z}_P(t, \tau) = \exp_{\leftarrow} \left[ \int_{\tau}^t ds (P - 1)\tilde{L}_V(s) \right]$  та  $\tilde{Z}(t, \tau) = \exp_{\leftarrow} \left[ - \int_{\tau}^t ds \tilde{L}_V(s) \right]$ .

Оскільки рівнянню (6) бракує пам'яті, воно є прикладом стохастичної реалізації певного неавтономного марковського процесу, який, за означенням, є неавтономним ланцюгом Маркова нульового порядку [1, 2, 17, 28, 29]. Тому, повертаючись у (6) до зображення за Шредінґером, маємо неавтономне керувальне рівняння для цього марківського процесу

$$\dot{\rho}_0(t) = -K(t)\rho_0(t), \quad (7)$$

у якому  $K(t) = U_0(t, t_0)\tilde{K}(t)U_0^{-1}(t, t_0)$  відповідає його залежному від часу ядру швидкості, а  $U_0(t, t_0) = \exp_{\leftarrow} \left\{ \int_{t_0}^t d\tau L_0(\tau) \right\}$  — зведений двочасовий оператор, який співвідноситься з (5) як  $U_0(t, t_0) \exp[L_B(t_0 - t)] = U(t, t_0)$ . Оскільки ядро  $K(t)$  є супероператором (або тензором), то загалом рівняння (7) читається як локальний за часом, безконволюційний неавтономний керувальний закон вигляду

$$(\dot{\rho}_0(t))_{ij} = - \sum_{k,l} (K(t))_{ijkl} (\rho_0(t))_{kl}, \quad (8)$$

згідно з яким еволюція діагональних ( $i = j$ ) і недіагональних ( $i \neq j$ ) компонент матриці густини нерівноважної підсистеми  $(\rho_0(t))_{ij}$  змішується з еволюцією всіх інших компонент з вагою  $(K(t))_{ijkl}$ .

Отже, унаслідок низки певних безконволюційних і конволюційних перетворень з проекційними операторами, що діють на вихідні рівняння Ліувілля–фон Ноймана (3) для еволюції повної матриці густини складної системи  $\rho(t)$  та спричиняють проведення в них відповідних локальних і нелокальних за часом

усереднень стосовно до їхніх ядер, ці рівняння зводяться до неавтономного марківського процесу нульового порядку щодо компонент матриці густини нерівноважної підсистеми (7) (що в борнівському наближенні слабо взаємодіє з її рівноважним оточенням) і з деяким неоднорідним локальним за часом кінетичним коефіцієнтом (ядром тензора швидкості)  $K(t)$ , який описує взаємні перетворення між діагональними і недіагональними компонентами нерівноважної матриці густини  $\rho_0(t)$  у супероператорному зображенні (8).

Зауважимо, що загальний вигляд  $K(t)$  невідомий. Але його вдається знайти в деяких простих випадках. Наприклад, якщо гамільтоніан як складної системи  $H(t) \equiv H = \text{const}$ , так і нерівноважної підсистеми  $H_0(t) \equiv H_0 = \text{const}$  не залежать від часу, матриця густини, що описує еволюцію цілої системи згідно з вихідним рівнянням (3), є  $\rho(t) = \widehat{U}(t)\rho(0)$ , де  $\widehat{U}(t) \equiv \widehat{U}(t, 0) = \exp(-Lt)$  і  $L(t) \equiv L$  є пропагатором і постійним генератором, які за умови  $t_0 = 0$  (без втрати загальності) діють як:  $\widehat{U}(t) \dots = \exp(-Lt) \dots = \exp(iHt) \dots \exp(-iHt)$ . При цьому для еволюції матриці густини нерівноважної підсистеми  $\rho_0(t)$  маємо

$$\rho_0(t) = \hat{P}\rho(t) = \text{tr}_B\{\widehat{U}(t)\rho_0(0)\rho_B\} = U_0(t)\rho_0(0). \quad (9)$$

Повертаючи в (9) розвиток за часом у зворотному напрямку і диференціюючи результат, отримуємо  $\dot{\rho}_0(t) = \dot{U}_0(t)\rho_0(0) = \dot{U}_0(t)U_0^{-1}(t)\rho_0(t)$ . Це прямо відповідає рівнянню (7) із  $K(t) = -\dot{U}_0(t)U_0^{-1}(t)$ , яке, своєю чергою, обертається на тотожність, бо за  $H(t) \equiv H$  збігається з рівнянням Ліувілья-фон Ноймана (3) й тому описує лише оборотну автономну динаміку цілої системи за тривіальної умови, що у (2) взаємодія  $V$  між підсистемою  $H_0$  і її оточенням  $H_B$  відсутня. Очевидно, що в складніших випадках, наприклад, у таких, де гамільтоніан нерівноважної підсистеми є стохастичним, треба поряд з усередненням за матрицею густини рівноважного середовища також усереднювати за випадковим процесом у нерівноважній підсистемі. В результаті виникає низка задач про замикання керувальних неавтономних рівнянь (7), асоційованих зі стохастичними ланцюгами Маркова, що розглянуті в розділах III, IV і V цієї роботи.

### III. ЛАНЦЮГ МАРКОВА ЗІ СТОХАСТИЧНИМИ ЕНЕРГІЯМИ СТАНІВ

Перш ніж почати конкретні підрахунки, надамо рівнянням (7) вигляду, типового для ланцюгів Маркова нульового порядку (тобто ланцюгів без пам'яті). Для цього введемо в нерівноважну підсистему квантові стани  $|j = 0, 1, \dots, N\rangle$ , а її стохастичний гамільтоніан запишемо як

$$H_0(t) = \sum_j E_j(t)|j\rangle\langle j|, \quad (10)$$

де  $E_j(t) = \bar{E}_j + \varepsilon_j(t)$  — рівні власної енергії підсистеми, чий миттєві положення формують енергетичний

спектр. Цей спектр підпорядковується стаціонарному рівнянню Шредингера [13] із залежним від часу гамільтоніаном (10) і енергіями  $E_j(t)$  за довільних, зокрема випадкових збурень  $\varepsilon_j(t)$  в околі їхніх стохастично-усереднених величин  $\langle\langle E_j(t) \rangle\rangle = \bar{E}_j$  (позначаються як  $\langle\langle \dots \rangle\rangle$  чи  $\overline{(\dots)}$  за  $\langle\langle \varepsilon_j(t) \rangle\rangle = 0$ ), які відповідають мінімумам адіабатичної енергії підсистеми в квантових станах  $|j\rangle$ . Випадкові зміщення у величинах середньої енергії станів можуть виникати за рахунок різних чинників, які діють у межах системи. Формально це може бути стохастичне поле, симетрія якого відрізняється від симетрії одночастинкової нерівноважної підсистеми. При цьому треба припускати, що підсистема ніяк не в змозі вплинути на параметри поля, які, однак, можуть адіабатично залежати від параметрів середовища, тоді як поле має змінювати енергію кожного зі станів підсистеми згідно з формулою в (10). Отже, стосовно до середовища, яке покладається рівноважним з температурою  $T$ , кожний стан нерівноважної підсистеми виступає в ролі деякого зведеного гармонічного осцилятора з виділеною частотою  $\varpi_j$  в одномодовому наближенні, енергія якого підпорядковується стохастичним флуктуаціям в околі її середнього значення  $\bar{E}_j$  із середньою частотою зміщень  $\bar{\nu}_j$  від цього значення, рівною середній енергії зведеного осцилятора. Останню за  $\hbar \equiv 1$  знаходимо як

$$\bar{\nu}_j = \bar{\varepsilon}_j = \varpi_j(\bar{n}_j + 1/2), \quad (11)$$

де  $\bar{n}_j = [\exp(\varpi_j/k_B T) - 1]^{-1}$  — функція розподілу Бозе на виділеній частоті  $\varpi_j$ . При цьому відповідні вирази для середньоквадратичної амплітуди флуктуацій, рівної, за означенням, дисперсії енергії осцилятора  $\bar{\sigma}_j^2$ , і для середньої інтенсивності флуктуацій  $\bar{\gamma}_j = \bar{\sigma}_j^2/\bar{\varepsilon}_j$ , є такими (див. [3, 24, 36]):

$$\bar{\sigma}_j^2 = \varpi_j^2 \bar{n}_j(\bar{n}_j + 1) \text{ та } \bar{\gamma}_j = 2\varpi_j \bar{n}_j(\bar{n}_j + 1)(2\bar{n}_j + 1)^{-1}. \quad (12)$$

Цікаво, що у випадку квазікласичної моди  $\varpi_{qc} \ll k_B T$ , яка асоціюється з флуктуаціями в підсистемі за рахунок її зв'язку з деякою допоміжною молекулою, що осцилює із частотою гігагерцового діапазону за кімнатної температури, всі наведені вище величини (11), (12) спрощуються до одного й того ж значення

$$\bar{\nu}_{qc} = \sqrt{\bar{\sigma}_{qc}^2} = \bar{\gamma}_{qc} = k_B T \approx 4 \cdot 10^{13} \text{ s}^{-1}. \quad (13)$$

Це означає, що завдяки квазікласичним флуктуаціям відбувається ефективне термічне розширення енергетичних рівнів квантової підсистеми з мікроскопічним гамільтоніаном (10) до однакової напівширини (13). Але навіть у такому разі послідовна постановка задачі має виходити з мікроскопічного гамільтоніана взаємодії підсистеми із середовищем у вигляді

$$V = \sum_{j,j'} (1 - \delta_{jj'}) \chi_{jj'\lambda} (\beta_\lambda^+ + \beta_\lambda) |j\rangle\langle j'|, \quad (14)$$

в якому кожний релаксаційний перехід підсистеми з енергетичного рівня  $E_j(t)$  на рівень  $E_{j' \neq j}(t)$  повинен

в однофоновому наближенні співвідноситися з народженням або знищенням у середовищі відповідного фонуна  $\omega_\lambda$ . Тому закон збереження енергії для цілої системи  $\omega_\lambda = |E_j(t) - E_{j' \neq j}(t)| = |\bar{E}_j - \bar{E}_{j' \neq j} + \varepsilon_j(t) - \varepsilon_{j' \neq j}(t)| \equiv |\bar{E}_{jj'} + \varepsilon_{jj'}(t)|$  є в кожний момент часу також і в цьому випадку.

Сказане дозволяє застосувати до рівняння (7) борнівське наближення щодо малості в (14) параметра взаємодії  $|\chi_{jj'\lambda}|/\omega_\lambda \ll 1$  для всіх можливих релаксаційних переходів і в такий спосіб знехтувати описом еволюції недіагональних елементів матриці густини підсистеми  $\rho_0^{(nd)}(t)$ , вважаючи її набагато швидше від еволюції діагональних елементів підсистеми  $\rho_0^{(d)}(t)$ . Покажімо це, скориставшись загальним методом, викладеним, наприклад, у [37]. За цим методом потрібно ввести діагональний і недіагональний оператори  $\hat{T}_d$  і  $\hat{T}_{nd} = I - \hat{T}_d$  згідно з їхньою дією на діагональну  $\rho^{(d)}(t) = \hat{T}_d \rho(t)$  та недіагональну  $\rho^{(nd)}(t) = \hat{T}_{nd} \rho(t)$  частини матриці густини цілої системи  $\rho(t) = \rho^{(d)}(t) + \rho^{(nd)}(t)$ , подіяти цими операторами на ліву і праву частини рівняння Ліувілля-фон Ноймана (3), отримати для нього таку систему диференціальних рівнянь:

$$\begin{cases} \dot{\rho}^{(d)}(t) = -i\hat{T}_d L_V \rho^{(nd)}(t), \\ \dot{\rho}^{(nd)}(t) = -i\hat{T}_{nd} [L_S(t) + L_V] \rho^{(nd)}(t) - iL_V \rho^{(d)}(t) \end{cases},$$

вилучити з них невідому  $\rho^{(nd)}(t)$  й нарешті прийти до інтегро-диференціального рівняння конволюційного типу в шуканому вигляді

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_0^{(d)}(t) = & - \int_0^t d\tau \text{tr}_B \\ & \times \left\{ \hat{T}_d \hat{D}_- [V, U(t, \tau)] [V, \rho_0^{(d)} \rho_B] U^+(t, \tau) \right\}, \end{aligned} \quad (15)$$

де  $\hat{D}_-$  — оператор хронологічного впорядкування Дайсона ( $t_0 = 0$ ). Вводячи стохастичну заселеність  $p_j(t)$  для кожного стану  $|j\rangle$  нерівноважної підсистеми

$$p_j(t) = \langle j | (\rho_0(t))_{jj} | j \rangle \quad (16)$$

і маючи на увазі, що  $\langle j | (\rho_0(t))_{jj} | j \rangle \equiv \langle j | \rho_0^{(d)} | j \rangle$ , рівняння (15) перетворюється як

$$\begin{aligned} \dot{p}_j(t) = & - \sum_{j' \neq j} \int_{t_0}^t d\tau [\Phi_{jj'}(\tau) p_j(t - \tau) \\ & - \Phi_{j'j}(\tau) p_{j'}(t - \tau)], \end{aligned} \quad (17)$$

де  $\Phi_{jj'}(t) = \sum_\lambda \chi_{jj'\lambda}^2 f_{jj'}(t) R_\lambda(t) \exp(it \bar{E}_{jj'})$  — усереднене за статистичним ансамблем ядро стохастичної реалізації заселеностей для станів  $|j\rangle$  і  $|j'\rangle$ ,  $f_{jj'}(t) = \exp[i \int_0^t d\tau \varepsilon_{jj'}(\tau)]$  — кореляційний функціонал від стохастичних зміщень величин відносної енергії цих станів,  $R_\lambda(t) = \exp(-i\omega_\lambda t) + n_\lambda [\exp(-i\omega_\lambda t) + \exp(i\omega_\lambda t)]$  — кореляційна функція для рівноважного середовища в однофоновому наближенні.

Остаточне спрощення отриманого рівняння (17) для еволюції стохастичних заселеностей нерівноважної підсистеми досягається за врахування тієї обставини, що завдяки дуже швидким зміщенням рівнів енергії кожного зі станів  $|j\rangle$  (10) ядро  $\Phi_{jj'}(\tau)$  заважає на шкалі дуже малих часів, характерних для стохастичних флуктуацій  $\tau_j^{\text{st}} \sim (\bar{\nu}_j)^{-1}$ . Своєю чергою, ці флуктуації зазвичай здійснюються набагато швидше від релаксаційних переходів між станами  $|j\rangle$  і  $|j'\rangle$ , що відбуваються з набагато повільнішою характерною швидкістю

$$(\tau_{jj'}^{\text{rel}})^{-1} \ll \bar{\nu}_j, \quad (18)$$

де

$$\tau_{jj'}^{\text{rel}} \cong (2\pi \sum_\lambda |\chi_{jj'\lambda}|^2 / \omega_\lambda)^{-1} \quad (19)$$

— характерні часи релаксації в нерівноважній підсистемі. При цьому взаємодія підсистеми із середовищем  $V$  (14) вважається досить слабкою, щоб можна було обмежуватись її врахуванням тільки у членах другого порядку мализни (15). У результаті, використовуючи в (17) формальне розкладення для  $p_j(t - \tau) = \exp[-\tau(d/dt)] p_j(t)$  та застосовуючи до нього наближення Борна-Маркова у вигляді:  $\exp[-\tau(d/dt)] p_j(t) \approx \exp(-\tau/\tau_{jj'}^{\text{rel}}) p_j(t) \approx p_j(t)$ , що добре виправдовується принаймні для малих часів  $\tau \sim \tau_j^{\text{st}} \ll \tau_{jj'}^{\text{rel}}$ , досягаємо можливості винести заселеність  $p_j(t)$  з-під знака інтеграла за змінною  $\tau$  і тим самим перетворити нелокальне за часом, конволюційне рівняння (17) у локальне за часом, безконволюційне, але неавтономне керувальне рівняння вигляду

$$\dot{p}_j(t) = -p_j(t) \sum_{j' \neq j} W_{jj'}(t) + \sum_{j' \neq j} p_{j'}(t) W_{j'j}(t), \quad (20)$$

де

$$W_{jj'}(t) = \int_0^t \Phi_{jj'}(\tau) d\tau \quad (21)$$

— залежна від часу ймовірність цієї стохастичної реалізації для релаксаційного переходу зі стану  $|j\rangle$  у стан  $|j'\rangle$  в усередненій за ансамблем нерівноважній підсистемі.

Зазначимо, що стосовно до наближення, пов'язаного з редукцією матриці густини повної системи до матриці густини її підсистеми, та наближення Борна-Маркова щодо малості взаємодії між підсистемою й оточенням, метод отримання рівняння (20) є цілком аналогічним тому, що застосував Редфілд для виведення рівнянь Блоха з рівняння Ліувілля. Однак отримане таким способом локальне в часі рівняння, яке в теорії відкритих квантових систем названо рівнянням Редфілда [33], спрямовувалось для аналізу когерентних та релаксаційних процесів за еволюції недіагональних елементів матриці густини електронної підсистеми і, як наслідок, мало складніший, хоча й безконволюційний вигляд. Але за розгляду процесу тривалої еволюції безспінових частинок це рівняння перетворювалося на просте кінетичне рівняння балансового типу (20), відоме як рівняння Паулі, для релаксаційних переходів у нерівноважній підсистемі між різними одночастинковими станами.

Очевидно, що рівняння (20) є наслідком простого прикладання до загального рівняння (8) діагональних базисів як для матриці густини  $(\rho_0(t))_{jj}$  (16) нерівноважної підсистеми, так і для тензора швидкості  $(K(t))_{jj'j'}$  (8), що виражається через імовірність переходу (21) як

$$W_{jj'}(t) = - (K(t))_{jj'j'} + \delta_{jj'} \sum_{k=0}^N (K(t))_{jjkk}. \quad (22)$$

Важливо, що при цьому використовується наближення, у якому відповідні недиагональні елементи або вважаються несуттєвими, або покладаються загасаючими до нуля за дуже коротку тривалість хаотизації фаз [24, 34]. Це разом з наближеннями (3), (18), (19) приводить до таких співвідношень щодо ієрархії характерних часів еволюції системи:

$$\tau_j^{\text{ch}} \ll \tau_j^{\text{st}} \ll \tau_{jj'}^{\text{rel}}. \quad (23)$$

Отже, доходимо загального висновку, що ієрархія часів релаксації, яку вперше запропонував та впровадив М. М. Боголюбов [11] для скороченого опису кінетичного етапу еволюції нерівноважної багаточастинкової системи у формалізмі статистичного ансамблю, може бути доповнена співвідношеннями щодо розгляду також процесів стохастизації та хаотизації, які значно розділяються за ієрархію часів (23). Це слугує достатньою основою для того, щоб у цій праці обмежуватися тільки кінетичним аналізом стохастично усередненої еволюції станів нерівноважної підсистеми й лише щодо розгляду поведінки за часом відповідних усереднених заселеностей

$$P_j(t) = \langle \langle p_j(t) \rangle \rangle, \quad (24)$$

нехтуючи можливим недиагональним зв'язком між станами, визначаючим їх когеренцію, а також позбавляючись від всіх стохастично не усереднених, зазвичай невідомих величин, які з необхідністю виникають під час загальної постановки задачі.

Зауважимо, що надкороткі часи хаотизації  $\tau_j^{\text{ch}}$  у співвідношенні (23) не достатньо добре визначені взагалі. Це пов'язано з тим, що розділення сили, яка діє на окрему частинку в багаточастинковій системі, на регулярні та випадкові складники є доволі традиційним, але дещо умовним. За такого розділення покладається, що регулярні сили визначають детерміновану еволюцію системи на дуже коротких часах її розвинення, коли в системі відбувається формування швидких коливальних режимів (власних осциляцій), які під дією періодичних поштовхів з боку середовища чи зовнішньої сили можуть стати непередбаченими. Унаслідок цього виникають складні нелінійні процеси, наприклад, взаємодія осциляційних мод, які призводять до того, що рух частинок починає відбуватися за їхніми хаотичними орбітами, тобто відбувається хаотизація в системі. При цьому вважається, що під дією саме регулярних сил система приходить до стану її динамічної рівноваги, коли повна сукупність власних станів покладається для неї сформованою. Зазвичай, цей процес відбувається за деякий час

хаотизації  $\tau_j^{\text{ch}}$ , але за умови, що згенерована в такий спосіб динаміка системи може бути описаною діагональним гамільтоніаном  $H_0(t)$  (2), кожний стан якого  $|j\rangle$  характеризуватиметься певним рівнем середньої енергії  $\bar{E}_j$  системи. Однак сили, що діють у системі, мають також випадковий складник. Тому кожен з рівнів має підпорядковуватися стохастичним флуктуаціям, наприклад, завдяки випадковим зіткненням із квазічастинками власних коливань зовнішнього середовища (фононами) за умови, що квантовий стан системи внаслідок таких зіткнень не змінюється. Із цього погляду випадкове збурення середньої енергії рівнів вважається квазікласичним, бо призводить до її адитивного зміщення на величину  $\varepsilon_j(t)$  без жодної зміни у стані системи за типом того, як має діяти квазікласичне стохастичне поле (10). Оскільки інтенсивність регулярних сил помітно перевищує таку для випадкових сил, тривалість стохастизації  $\tau_j^{\text{st}}$  звичайно є набагато більшою від часу хаотизації  $\tau_j^{\text{ch}}$  (23). При цьому, на відміну від хаотизації, процес стохастизації покладається добре визначеним і наділяється певною статистикою. Наприклад, якщо флуктуації енергії пов'язуються з флуктуаціями температури, то, аби не вносити непотрібних ускладнень, ці флуктуації розуміються у вигляді білого гауссівського шуму з постійною спектральною густиною та інтенсивністю  $(\tau_j^{\text{st}})^{-1}$ . В інших ситуаціях, коли флуктуації виникають за рахунок випадкового поля, яке безпосередньо діє на багаторівневу систему [23], або випадкової сили, що безпосередньо генерується в середовищі [3], доцільно використати моделі кольорового шуму на основі дихотомічних або трихотомічних стохастичних процесів, статистичні властивості яких добре відомі, але універсальніші. Зокрема, у класичній границі інтенсивність таких процесів збігається з гауссівською, яка згідно з (13) пропорційна температурі, тоді як у квантовій границі вона прямує до нуля, відповідаючи нульовому розширенню рівнів ізольованої квантової системи (для детальнішого обговорення див. [24]).

Узагалі, керувальне рівняння (20) у вигляді ймовірнісного балансу у випадкових заселеностях  $p_j(t)$  скінченної кількості  $N + 1$  станів  $|j\rangle$  прямо відповідає рівнянню Колмогорова, яке, своєю чергою, асоціюється зі скінченим ланцюгом Маркова [38]. Останній зображується у вигляді графа станів за умови, що в кожний момент часу величини ймовірностей переходу між станами  $W_{jj'}(t)$  (21), які задають укладений неавтономний ланцюг, не можуть сягати негативних значень. На жаль, загальний розв'язок системи рівнянь (20) є невідомим уже за  $N \geq 3$ . Але після усереднення (20) за стохастичними флуктуаціями в енергії станів з урахуванням ієрархії часів (23) замикання задачі та отримання її точного розв'язку легко досягається звичайними методами навіть за доволі великих  $N$  [39–41]. Це пов'язано з тим, що завдяки наближенню

$$\langle \langle p_j(t) W_{jj'}(t) \rangle \rangle \approx \langle \langle p_j(t) \rangle \rangle \langle \langle W_{jj'}(t) \rangle \rangle \equiv P_j(t) \bar{W}_{jj'}, \quad (25)$$

справедливому в ергодичній межі  $\tau \sim \tau_j^{\text{st}} \ll t \rightarrow \infty$ , усереднені ймовірності переходу між станами обертаються на сталі

$$\bar{W}_{jj'} = \lim_{t \rightarrow \infty} \langle \langle \int_0^t \Phi_{jj'}(\tau) d\tau \rangle \rangle = \int_0^\infty d\tau \sum_\lambda \chi_{jj'\lambda}^2 \langle \langle f_{jj'}(\tau) \rangle \rangle R_\lambda(\tau) \exp(i\tau \bar{E}_{jj'}). \quad (26)$$

Тому усереднене у спосіб (25) рівняння (20), а також відповідний йому ланцюг Маркова стають автономними

$$\dot{P}_j(t) = -P_j(t) \sum_{j' \neq j} \bar{W}_{jj'} + \sum_{j' \neq j} P_{j'}(t) \bar{W}_{j'j} \quad (27)$$

Навіть більше, для простих моделей сталі (26) легко підраховувати з достатньою точністю. Так, у моделі дихотомічних флуктуацій для енергії зведеного осцилятора (11), (12) стохастичне усереднення кореляцій-

ного функціонала в (26) з точністю до (23) оцінюється як [24, 37, 39]

$$\langle \langle f_{jj'}(\tau) \rangle \rangle \approx \exp(-\bar{\gamma}_{jj'} \tau), \quad (28)$$

де  $\bar{\gamma}_{jj'}$  — ефективна напівширина двох рівнів, відносна енергія яких  $\varepsilon_{jj'}$  випадково флуктує за дихотомічним законом з частотою  $\bar{\nu}_{jj'}$  і амплітудою  $\bar{\sigma}_{jj'}$ . Це дозволяє явно обчислити в (26) інтеграл за часом  $\tau$  і отримати

$$\bar{W}_{jj'} = 2\bar{\gamma}_{jj'} \sum_\lambda |\chi_{jj'\lambda}|^2 \left[ \frac{n_\lambda}{\bar{\gamma}_{jj'}^2 + (\omega_\lambda + \Delta \bar{E}_{jj'})^2} + \frac{1 + n_\lambda}{\bar{\gamma}_{jj'}^2 + (\omega_\lambda + \Delta \bar{E}_{j'j})^2} \right]. \quad (29)$$

Результатом сказаного є висновок, що наявність швидких стохастичних флуктуацій у рівнях енергій станів неавтономного ланцюга Маркова (20) не змінює структури їхнього графа. Однак усереднення цього ланцюга за цими флуктуаціями перетворює його на автономний ланцюг (27) зі сталими ймовірностями переходу між станами — так званими постійними швидкостей переходу (26), які починають явно залежати від інтенсивностей флуктуацій  $\bar{\gamma}_{jj'}$  (29).

Зазначимо, що в узагальненому вигляді неавтономний ланцюг Маркова (20) може також підпорядковуватися додатковим стохастичним флуктуаціям у ймовірностях переходів. На жаль, статистика відповідних процесів невідома. Це вимагає розглядати такого роду неоднорідні стохастичні процеси безпосередньо, починаючи з постановки задачі, з подальшим отриманням і дослідженням її належно усередненого й замкненого розв'язку. При цьому потрібно брати до уваги ймовірності переходу між певним чином урівноваженими сукупностями станів, що характеризуються своєю незалежною стохастичною динамікою, а не сталими ймовірностями переходу між різними квантовими станами (29). Тобто можна вести мову про флуктуації параметрів  $W_{jj'}(t)$  в ланцюзі (20), де під кожним станом  $|j\rangle$  системи розуміється не її мікроскопічний стан, а квазістаціонарно флуктуюча сукупність деяких станів  $\{|i\rangle\}$ , які формують у системі так званий мезоскопічний стан або ж навіть її макроскопічний стан у термодинамічній межі. Конкретні приклади побудови моделей таких флуктуацій за допомогою рівнянь (20) наведені в роботах [22, 27]. Тому в цій праці мезоскопічна структура станів  $|j\rangle$ , яка може виникати в не-

автономному ланцюзі Маркова (20) та приводить до стохастичних флуктуацій у ймовірностях переходів, далі приймається як така, що не потребує детального обговорення.

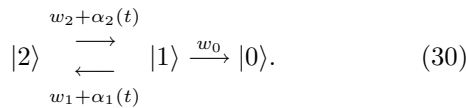
#### IV. ЛАНЦЮГ МАРКОВА З ВИПАДКОВИМИ ЙМОВІРНОСТЯМИ ПЕРЕХОДІВ

У попередньому розділі усереднений опис еволюції неавтономного ланцюга Маркова (20) проведено за допомогою замикального наближення (25). Це уможливило зведення задачі до автономного ланцюга Маркова (27), розв'язок для якого є добре відомим завдяки тому факту, що стохастичні флуктуації в енергії станів цього ланцюга звичайно відбуваються набагато швидше від релаксаційних переходів між його станами за ієрархії часів (23).

Однак у багатьох випадках, наприклад, у задачах просторової динаміки з неоднорідними кінетичними коефіцієнтами [34, 42, 43], треба усереднити добутки, залежних від часу стохастичних концентрацій та ймовірностей одночастикових станів, виниклих у наближенні середнього поля, коли умова (25) не передувє усередненню. У результаті стає актуальною задача побудови замкненого опису для усередненої динаміки неавтономного ланцюга Маркова без використання цього наближення. Як уже сказано у вступі до цієї роботи, такого опису можна досягти тільки в дуже коротких ланцюгах Маркова, кількість станів у яких не перевищує трьох (наприклад, стани  $|2\rangle$ ,  $|1\rangle$  і  $|0\rangle$ ), причому один із станів (скажімо, стан  $|0\rangle$ ) має бути абсор-



бувальним. При цьому за нормування неусереднених заселеностей станів стохастична стійкість абсорбувального ланцюга Маркова забезпечується вимогою, щоб неусереднена сумарна заселеність  $p_2(t) + p_1(t)$  його висхідного  $|2\rangle$  та проміжного  $|1\rangle$  станів загасала б за детермінованим законом у часі зі сталою швидкістю, яка не мала б стохастичного компонента. Отже, у спрощеній постановці задачі, що розглядатиметься в цьому та наступних розділах, процес загасання абсорбувального ланцюга Маркова, який складається із трьох станів та містить стохастичні процеси у ймовірностях переходів, можна записати у вигляді такої кінетичної схеми



Тут для простоти позначено  $w_2 \equiv \bar{W}_{21}$ ;  $w_1 \equiv \bar{W}_{12}$ ;  $w_0 \equiv \bar{W}_{10}$  ( $\bar{W}_{01} = 0$ ) і покладено, що  $\alpha_{i=1,2}(t)$  є симетричними дихотомічними стохастичними процесами з нульовим середнім  $\overline{\alpha_i(t)} = 0$  (тут і нижче середнє позначається ризикою зверху), які здійснюють у випадкові моменти часу  $t$  стрибки між двома значеннями  $\pm\sigma_i$  із середніми частотами  $\nu_i$ , залишаючись у різні моменти часу  $0$  і  $t$  експоненціально автокорельованими (або, відповідно, взаємно некорельованими) згідно з законом

$$\overline{\alpha_i(0)\alpha_{i'}(t)} = \sigma_i^2 \exp(-2\nu_i t) \delta_{ii'}. \quad (31)$$

Таке наближення не обов'язкове (див. обговорення цього питання, напр., в [24, 44]), але спрощує розв'язок задачі, бо дозволяє користуватися точними формулами

$$\begin{aligned}
 (a) \quad & [\alpha(t)]^2 = \sigma^2; \\
 (b) \quad & \frac{d}{dt}[\alpha(t)] = -2\nu\alpha(t); \\
 (c) \quad & \frac{d}{dt}[\overline{\alpha(t)p_j(t)}] = -2\nu\overline{\alpha(t)p_j(t)} + \overline{\alpha(t)\dot{p}_j(t)},
 \end{aligned} \quad (32)$$

які описують властивості довільного симетричного дихотомічного стохастичного процесу  $\alpha(t)$  та похідної за часом від моменту певного функціонала від цього процесу, наприклад, заселеності  $j$ -го стану  $p_j(t) = p_j[\alpha(t)]$  [21, 36].

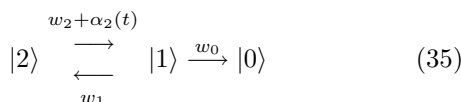
Поведінка в часі неавтономного абсорбувального ланцюга Маркова (30) описується такими стохастичними диференціальними рівняннями:

$$\begin{cases} \dot{p}_1(t) = -[w_1 + \alpha_1(t) + w_0]p_1(t) + [w_2 + \alpha_2(t)]p_2(t); \\ \dot{p}_2(t) = [w_1 + \alpha_1(t)]p_1(t) - [w_2 + \alpha_2(t)]p_2(t). \end{cases} \quad (33)$$

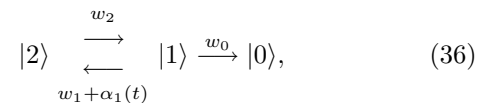
Щоб проінтегрувати ці рівняння, треба провести їх усереднення за обома стохастичними процесами  $\alpha_{1,2}(t)$  і потім розв'язати рівняння, що виникають, відносно невідомих середніх. Але просто усереднення рівнянь (33) з урахуванням  $P_j(t) = \overline{p_j(t)}$ , що еквівалентно (24), не дає бажаного результату, оскільки приводить до рівнянь

$$\begin{cases} \dot{P}_1(t) = -(w_1 + w_0)P_1(t) + w_2P_2(t) - \overline{\alpha_1(t)p_1(t)} + \overline{\alpha_2(t)p_2(t)}, \\ \dot{P}_2(t) = w_1P_1(t) - w_2P_2(t) + \overline{\alpha_1(t)p_1(t)} - \overline{\alpha_2(t)p_2(t)} \end{cases}, \quad (34)$$

які містять невідомі моменти  $\overline{\alpha_1(t)p_1(t)}$  і  $\overline{\alpha_2(t)p_2(t)}$ . Це не дає змоги знайти замкненого розв'язку щодо середніх заселеностей  $P_{1,2}(t)$  без підвищення порядку системи (34) та подальшої конкретизації диференціальних рівнянь для моментів у вигляді співвідношень (32(c)). Останні, однак, можуть виявитися складними. Зокрема, для підрахунку моментів похідної від заселеностей, що стоять у другому доданку правої частини (32(c)), треба усереднити праві частини вихідних рівнянь (33), помножених на  $\alpha_i(t)$ . Це, своєю чергою, призводить до появи складніших моментів виду  $\overline{\alpha_1(t)\alpha_2(t)p_i(t)}$ , які потребують окремого підрахунку. Тому, щоб не обтяжувати текст статті громіздкими формулами, обмежимося далі розглядом для неавтономного абсорбувального ланцюга Маркова із трьома станами (30) тільки двох граничних випадків, а саме таких:



та



які відповідають покладанню в кінетичній схемі (30) або  $\alpha_1(t) = 0$ , або  $\alpha_2(t) = 0$ .

## V. ДВОСТАДІЙНИЙ ЛАНЦЮГ МАРКОВА З ВИПАДКОВОЮ ЙМОВІРНІСТЮ ПРЯМОГО ПЕРЕХОДУ

Оскільки проблему замкненого опису неавтономної еволюції абсорбувального двостадійного ланцюга Маркова у випадку (35), що була поставлена у [22], вже детально розглядали у [27], обмежимося лише стислим викладом її розв'язку. Передусім, помноживши ліву і праву частини другого рівняння в (33) на  $\alpha_2(t)$  та враховуючи (32) і (34) за  $\alpha_1(t) = 0$ , отримуємо

$$\begin{cases} \dot{P}_2(t) = -\dot{P}_1(t) - w_0 P_1(t); \\ \overline{\alpha_2(t) \dot{p}_2(t)} = \overline{w_1 \alpha_2(t) p_1(t)} - w_2 \dot{P}_1(t) - w_2(w_1 + w_0) P_1(t) + (w_2^2 - \sigma_2^2) P_2(t); \end{cases} \quad (37)$$

Фактично перше рівняння в (37) є достатньою умовою стійкості для ланцюга (35). Далі, беручи похідну від першого рівняння (34) за  $\alpha_1(t) = 0$  з урахуванням (32), (37), маємо

$$\begin{aligned} & \ddot{P}_1(t) + (2w_2 + w_1 + w_0 + 2\nu_2) \dot{P}_1(t) + [w_2(w_1 + 2w_0) + 2\nu_2(w_1 + w_0)] P_1(t) \\ & = \overline{w_1 \alpha_2 p_1(t)} + [w_2(w_2 + 2\nu_2) - \sigma_2^2] P_2(t). \end{aligned} \quad (38)$$

Відтак подальше диференціювання рівняння (38) з урахуванням першого рівняння в (37) перетворює його на таке

$$\begin{aligned} & \ddot{P}_1(t) + (2w_2 + w_1 + w_0 + 2\nu_2) \dot{P}_1(t) + [(w_2 + w_1)(w_2 + 2\nu_2) + 2w_0(w_2 + \nu_2) - \sigma_2^2] \dot{P}_1(t) \\ & + w_0 [w_2(w_2 + 2\nu_2) - \sigma_2^2] P_1(t) = \overline{w_1 \alpha_2(t) p_1(t)}. \end{aligned} \quad (39)$$

Нарешті, використовуючи для невідомої похідної від моменту, що стоїть у правій частині (39), допоміжне рівняння, яке є наслідком рівнянь (33) і (37), у вигляді

$$\begin{aligned} & \overline{\alpha_2(t) p_1(t)} + (w_1 + w_0 + 2\nu_2) \overline{\alpha_2(t) p_1(t)} = a \ddot{P}_1(t) + [w_2(w_2 + w_1 + w_0) - \sigma_2^2] \dot{P}_1(t) \\ & + w_0(w_2^2 - \sigma_2^2) P_1(t). \end{aligned} \quad (40)$$

й беручи ще раз похідну від лівої частини рівняння (39), що необхідно для її підстановки в рівняння (40), отримуємо шукане диференціальне рівняння для усередненої заселеності

$$\left\{ \frac{d}{dt} \left[ \left( \frac{d}{dt} + 2\nu_2 \right) D_2^{(2)} \right] + w_0 R_2^{(3)} \right\} P_1(t) = w_0 Q_2^{(2)} P_1(t) \quad (41)$$

Тут для скорочення запису у випадку (35) введено відповідні диференціальні оператори другого (з верхніми індексами (2)) та третього (з верхнім індексом (3)) порядків як

$$D_2^{(2)} = \frac{d^2}{dt^2} + 2(w_2 + w_1 + \nu_2) \frac{d}{dt} + [(w_2 + w_1)(w_2 + w_1 + 2\nu_2) - \sigma_2^2]; \quad (42)$$

$$Q_2^{(2)} = 2(w_2 + \nu_2) \frac{d^2}{dt^2} + \sigma_2^2 \left( 2 \frac{d}{dt} + w_0 + 2\nu_2 \right); \quad (43)$$

та

$$\begin{aligned} R_2^{(3)} &= 2 \frac{d^3}{dt^3} + [2(w_2 + w_1 + 2\nu_2) + w_0] \frac{d^2}{dt^2} + 2 [(w_2 + w_1)(w_2 + 2\nu_2) + 2(w_2 + \nu_2)(w_0 + \nu_2) - \sigma_2^2] \frac{d}{dt} \\ &+ w_2 [w_0(w_2 + 2\nu_2) + 2\nu_2(w_2 + w_1 + 2\nu_2)]. \end{aligned} \quad (44)$$

Суттєво, що отримане рівняння (41) є замкненим стосовно усередненої заселеності  $P_1(t)$ , бо не містить явної залежності як від стохастичного процесу  $\alpha_2(t)$ , так і не усереднених стохастичних функціоналів  $p_j(t) = p_j[\alpha(t)]$  від цього процесу. З точністю до перепозначень у вихідній схемі (35) воно збігається з аналогічними рівняннями праць [25, 27] і відрізняється від них лише зручнішою формою. Його загальний розв'язок добре відомий і має вигляд лінійної комбі-

нації чотирьох експонент

$$P_1(t) = \sum_{j=1}^4 c_j \exp(\lambda_j t) \quad (45)$$

де  $\lambda_j$  характеризують різні показники експонент для власних розв'язків (мод) диференціального рівняння четвертого порядку (41),  $c_j$  — відповідають коефіцієнтам, що знаходимо з початкових умов. Згідно з теоремою Гурвіца [45], експоненти  $\lambda_j$  в (41) є непози-

тивними. Тому усереднений абсорбувальний ланцюг Маркова (35) буде стійким за Ляпуновим, а його динаміка — надкритично загашеною або загашеною критично за умови збігу значень  $\lambda_j$ .

На жаль, велика кількість параметрів, які формують схему (35) та входять до відповідних рівнянь (41)–(44), не дозволяє досягти конкретного вигляду для загального розв'язку (45). Але в деяких граничних випадках, які викладено нижче для певної початкової умови  $P_2(0) = 1$  (інші початкові умови, наприклад,  $P_2(0) = 0$ , можуть бути розглянуті аналогічно і тут не аналізуються), цей розв'язок вдається отримати в явному вигляді.

По-перше, у межі нескінченно великої частоти стохастичного процесу  $\nu_2 \rightarrow \infty$  рівняння (41) зводиться до

$$\ddot{P}_1(t) + (w_2 + w_1 + w_0)\dot{P}_1(t) + w_2 w_0 P_1(t) = 0. \quad (46)$$

Це просте рівняння описує загасання безрозмірної амплітуди  $P_1(t)$  ефективного гармонічного осцилятора за двоекспоненціальним законом

$$P_1(t) = \frac{w_2}{\lambda_1 - \lambda_2} [\exp(\lambda_1 t) - \exp(\lambda_2 t)] \quad (47)$$

з двома власними модами  $\lambda_{1,2} = (1/2)[-(w_2 + w_1 + w_0) \pm \sqrt{(w_2 + w_1 + w_0)^2 - 4w_2 w_0}]$ , які не залежать від наявності стохастичного процесу  $\alpha(t)$  ні в прямій  $w_2$  (35), ні в оберненій  $w_1$  (36) швидкостях переходу в ланцюзі Маркова (30). Зауважимо, що до такого ж рівняння (46) зводяться рівняння (27) для автономного ланцюга Маркова, розглянутого в розділі 3, якщо тільки застосувати для нього наближення двох кінетичних стадій — оборотної стадії між станами  $|2\rangle$  і  $|1\rangle$  та необоротної (абсорбувальної) стадії із стану  $|1\rangle$  в стан  $|0\rangle$ . При цьому у границі надшвидких флуктуацій  $\bar{\nu}_{jj'} \rightarrow \infty$  у відносних енергіях рівнів  $\varepsilon_{jj'}(t)$  відповідні інтенсивності флуктуацій, а значить, ефективні напівширини цих рівнів у (28), мають прямувати до

нуля:  $\bar{\gamma}_{jj'} = \bar{\sigma}_{jj'}^2 / \bar{\nu}_{jj'} \rightarrow 0$ . Тому з (29) для ймовірностей переходів між дуже швидко флуктуючими рівнями отримуємо відповідні параметрам  $w_{2,1,0}$  величини

$$\bar{W}_{jj'} = \frac{2\pi \operatorname{sgn}(\bar{E}_{jj'})}{\exp(\bar{E}_{jj'}/k_B T) - 1} \sum_{\lambda} |\chi_{jj'\lambda}|^2 \delta(\omega_{\lambda} - |\bar{E}_{jj'}|), \quad (48)$$

які характеризують динаміку двостадійного абсорбувального автономного ланцюга Маркова (30) у квантовій межі  $|\bar{E}_{jj'}| \approx \omega_{\lambda} \gg \bar{\gamma}_{jj'} \approx k_B T$  [37].

По-друге, за  $w_0 = 0$ , коли двостадійний абсорбувальний неавтономний ланцюг Маркова (35) перетворюється на одностадійний оборотний неавтономний ланцюг вигляду

$$|2\rangle \xrightleftharpoons[w_1]{w_2 + \alpha_2(t)} |1\rangle, \quad (49)$$

рівняння (41) перетворюється на

$$D^{(2)} P_1(t) = \ddot{P}_1(0). \quad (50)$$

Тут початкова умова

$$\ddot{P}_1(0) = w_2(w_2 + w_1 + 2\nu_2) \quad (51)$$

має зміст сталої сили, яка весь час діє на заселеність  $P_1(t)$ , щоб забезпечувати встановлення і підтримання для неї рівноважного стаціонарного значення

$$P_1^{\infty} \equiv P_1(t \rightarrow \infty) = \ddot{P}_1(0) [\ddot{P}_1(0) + \ddot{P}_2(0)]^{-1}, \quad (52)$$

де  $\ddot{P}_2(0) = w_1(w_2 + w_1 + 2\nu_2) - \sigma_2^2$  — відповідна початкова умова для заселеності  $P_2(t)$ . Ця сила збуджує одностадійний неавтономний ланцюг Маркова (49) так, що навіть за відсутності початкового зміщення  $P_1(0) = 0$  і початкової швидкості  $\dot{P}_1(0) = 0$  у ньому виникає динаміка, пов'язана з прямуюванням до рівноваги (52) за двоекспоненціальним законом

$$P_1(t) = \frac{\ddot{P}_1(0)}{\ddot{P}_1(0) + \ddot{P}_2(0)} \left[ 1 - \frac{\lambda_1 \exp(\lambda_2 t) - \lambda_2 \exp(\lambda_1 t)}{\lambda_1 - \lambda_2} \right], \quad (53)$$

де  $\lambda_{1,2} = -(w_2 + w_1 + \nu_2) \mp \sqrt{\nu_2^2 + \sigma_2^2}$ .

По-третє, при  $w_1 = 0$  виникає задача двостадійного стохастичного загасання ланцюга Маркова (35), яка після диференціювання рівняння (38) з урахуванням умови стійкості ланцюга (37) зводиться до рівняння

$$\ddot{P}_1(t) + [2(w_2 + \nu_2) + w_0]\dot{P}_1(t) + [w_2(w_2 + 2w_0 + 2\nu_2) + 2w_0\nu_2 - \sigma_2^2]\dot{P}_1(t) + k[w_2(w_2 + 2\nu_2) - \sigma_2^2]P_1(t) = 0. \quad (54)$$

Це рівняння має надкритично загасаючий триекспоненціальний розв'язок

$$P_1(t) = [w_2(w_2 + 2\nu_2) - \sigma_2^2] \left[ \frac{\exp(\lambda_1 t)}{(\lambda_1 - \lambda_2)(\lambda_1 - \lambda_3)} + \frac{\exp(\lambda_2 t)}{(\lambda_2 - \lambda_1)(\lambda_2 - \lambda_3)} + \frac{\exp(\lambda_3 t)}{(\lambda_3 - \lambda_1)(\lambda_3 - \lambda_2)} \right], \quad (55)$$

показники експонент якого задовольняють характеристичне рівняння

$$\lambda^3 + [2(w_2 + \nu_2) + w_0]\lambda^2 + [w_2(w_2 + 2w_0 + 2\nu_2) + 2w_0\nu_2 - \sigma_2^2]\lambda + [w_2(w_2 + 2\nu_2) - \sigma_2^2]k = 0. \quad (56)$$

**VI. ДВОСТАДІЙНИЙ ЛАНЦЮГ МАРКОВА  
З ВИПАДКОВОЮ ЙМОВІРНІСТЮ  
ЗВОРТНОГО ПЕРЕХОДУ**

У попередньому розділі під час розв'язання проблеми замикання усередненого опису еволюції неавтономного абсорбувального двостадійного ланцюга Маркова з випадковою ймовірністю прямого переходу (35) у наближенні адитивного дихотомічного стохастичного процесу (31), (32) показано, що в цьому випадку динаміки ланцюга Маркова підпорядковуються чотириекспоненціальному закону (45), який слу-

гує розв'язком диференціального рівняння четвертого порядку (41)–(44). У граничних випадках це рівняння зводиться до відповідних рівнянь третього (54) та другого (46), (50) порядків з три- (55) та двоекспоненціальними (47), (53) розв'язками відповідно.

Розгляньмо тепер задачу замикання опису динамік такого ж ланцюга Маркова для схеми (36), коли в тому ж наближенні (31), (32) випадковою є ймовірність зворотного переходу. Покладаючи в системі вихідних стохастичних рівнянь (34)  $\alpha_2(t) = 0$ , усереднюючи їх і диференціюючи з використанням співвідношень (32), маємо

$$\begin{aligned} \ddot{P}_1(t) + (w_2 + 2w_1 + 2w_0 + 2\nu_1)\dot{P}_1(t) + [w_2w_0 + (w_1 + w_0 + 2\nu_1)(w_1 + w_0) - \sigma_1^2]P_1(t) \\ = w_2(w_1 + w_0 + 2\nu_1)P_2(t) - \overline{w_2\alpha_1 p_2(t)}. \end{aligned} \quad (57)$$

Двічі беручи по чергово рази похідну від рівняння (57) із проведенням необхідних проміжних перетворень і застосовуючи допоміжне рівняння для  $\overline{\alpha_1(t)p_2(t)}$  у вигляді

$$\overline{\alpha_1(t)p_2(t)} + (w_2 + 2\nu_1)\overline{\alpha_1(t)p_2(t)} = -w_1\ddot{P}_1(t) - [w_2w_1 + w_1(w_1 + w_0) - \sigma_1^2]\dot{P}_1(t) - w_2w_1w_0P_1(t), \quad (58)$$

отримуємо остаточне рівняння для  $P_1(t)$

$$\left\{ \frac{d}{dt} \left[ \left( \frac{d}{dt} + 2\nu_1 \right) D_1^{(2)} \right] + w_0 R_1^{(2)} \right\} P_1(t) = 0, \quad (59)$$

у якому

$$D_1^{(2)} = \frac{d^2}{dt^2} + 2(w_2 + w_1 + \nu_1)\frac{d}{dt} + [(w_2 + w_1)(w_2 + w_1 + 2\nu_1) - \sigma_1^2]; \quad (60)$$

і

$$\begin{aligned} R_1^{(3)} = 2\frac{d^3}{dt^3} + [2(w_2 + w_1 + 2\nu_1) + w_0]\frac{d^2}{dt^2} + 2[(w_2 + w_1)(w_2 + 2\nu_1) + 2(w_2 + \nu_1)(w_0 + \nu_1) - \sigma_1^2]\frac{d}{dt} \\ + w_2[w_0(w_2 + 2\nu_1) + 2\nu_1(w_2 + w_1 + 2\nu_1)] \end{aligned} \quad (61)$$

є відповідними диференціальними операторами для (36).

Як бачимо, з точністю до перепозначень  $\nu_1 \leftrightarrow \nu_2$  і  $\sigma_1 \leftrightarrow \sigma_2$  для стохастичних процесів  $\alpha_1(t)$  і  $\alpha_2(t)$  у відповідних випадках (36) і (35) диференціальні рівняння (59) і (41), які надають замкненого опису автономним динамікам усередненої заселеності проміжного стану абсорбувального ланцюга Маркова з випадковою зворотною і прямою ймовірністю переходу, мають повністю однакові ліві частини, але принципово різні праві частини. При цьому за вказаних вище перепозначень граничні випадки нескінченно великих частот  $\nu_{1,2} \rightarrow \infty$  стохастичного процесу (46), (47) та відсутності абсорбувальної стадії  $w_0 = 0$  (49)–(53) для обох диференціальних рівнянь (41) і (59) збі-

гаються, бо вільний член рівняння (59) стає нехтівно малим порівняно з членами, пропорційними  $\nu_{1,2}^2$  або ж нульовим за  $w_0 = 0$ . Щобільше, наявність у рівнянні (41) ненульової правої частини порівняно з її відсутністю в рівнянні (59) означає, що динаміки відповідних ланцюгів Маркова (35) і (36) можуть суттєво відрізнитися як за своєю модальністю (амплітудним внеском експонент, що визначають моди, які здаються значущими), так і за своєю залежністю від амплітудних  $\sigma_{1,2}$  і частотних  $\nu_{1,2}$  параметрів стохастичного процесу  $\alpha_{1,2}(t)$ . Зокрема, великий інтерес викликає запитання, як і наскільки збільшення частоти  $\nu$  може впливати на зміну чотириекспоненціального характеру динаміки (45), що притаманно загальному опису часової поведінки для усередненої заселеності

проміжного стану абсорбувального ланцюга Маркова із трьома станами та випадковою ймовірністю переходу (35), (36) за допомогою диференціальних рівнянь четвертого порядку (41), (59), на двоєкспоненціальний характер динаміки (47), властивий для процесів загасання або розпаду багатьох дворівневих систем з низькоамплітудними високочастотними флуктуаціями в їхніх рівнях енергії, розширенням яких можна знехтувати у квантовій межі (див. [24, 37, 46]).

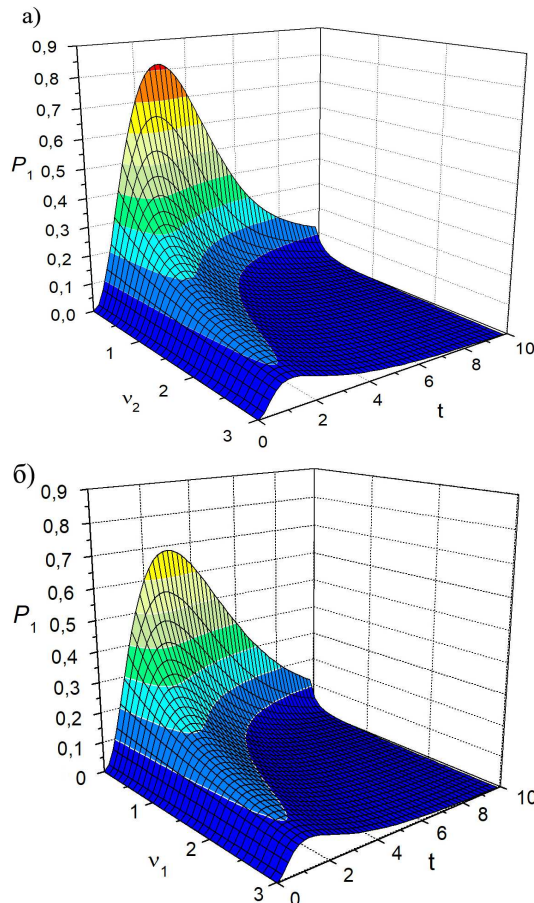


Рис. 1. Тривимірне зображення динамік усередненої заселеності проміжного стану  $P_1(t; \nu_{1,2})$  двостадійного абсорбувального ланцюга Маркова (30) як функції часу  $t$  (в одиницях часу) та частоти  $\nu_{1,2}$  (у зворотних до часу одиницях) стохастичного процесу  $\alpha_{1,2}(t)$ , отриманої в результаті розв'язку відповідних диференціальних рівнянь (41) (варіант (а)) і (59) (варіант (б)) за початкових умов (62), (63) та певних значень для кінетичних параметрів  $w_2 = 2.0; w_1 = 0.2; w_0 = 0.5; \sigma_{1,2} = 0.6$  (у зворотних до часу одиницях), що входять до схем (35) і (36) та формул (31), (32).

Для відповіді на поставлене запитання необхідно знайти точний розв'язок рівнянь (41) і (59), принаймні у числовому вигляді. При цьому можна зосередити свою увагу лише на одному зі станів (скажімо, проміжному стані  $|1\rangle$ ) двостадійного абсорбувального ланцюга Маркова, задавши в ньому початкові умови для усередненої заселеності цього стану  $P_1(0)$  і трьох її похідних:  $\dot{P}_1(0); \ddot{P}_1(0); \dddot{P}_1(0)$ . Зауважимо, що початкові значення для заселеності  $P_1(0)$  та її першої похід-

ної  $\dot{P}_1(0)$  чи "швидкості" її зміни, фізичний зміст яких у вихідних керувальних рівняннях (20) добре визначений, можуть для простоти покладатися нульовими

$$P_1(0) = \langle\langle p_1(t) \rangle\rangle_{t \rightarrow 0} = 0; \tag{62}$$

$$\dot{P}_1(0) = \langle\langle \dot{p}_1(t) \rangle\rangle_{t \rightarrow 0} = 0.$$

Проте, якщо користуватись існуючою термінологією з кінематики механічного руху (див. [47]), відповідні початкові значення для "прискорення" заселеності  $\ddot{P}_1(0)$  та її "тремтіння" або "тряски"  $\dddot{P}_1(0)$  потребують свого до визначення як фізичних величин, що виникають за усереднення відповідних керувальних рівнянь. Тому, щоб уникнути ускладнень, пов'язаних з таким до визначенням  $\ddot{P}_1(0)$  та  $\dddot{P}_1(0)$ , і маючи намір досягнути числового розв'язку, який потребує їх визначення лише щодо кінетичних коефіцієнтів, що варіюються, достатнім виглядає задання тільки знака у відповідних членах диференціальних рівнянь, наприклад, за допомогою простих початкових умов

$$\ddot{P}_1(0) = \frac{d^2}{dt^2} \langle\langle p_1(t) \rangle\rangle_{t \rightarrow 0} = 1; \tag{63}$$

$$\dddot{P}_1(0) = \frac{d^3}{dt^3} \langle\langle p_1(t) \rangle\rangle_{t \rightarrow 0} = -1.$$

Ці умови фактично індексують процеси, що описуються диференціальними рівняннями (41) і (59), за джерелом — внутрішнім чи зовнішнім — їх походження, відмічаючи процес внутрішнього інерційного прискорення заселеності як автономний, що характеризується додатним знаком у лівій частині рівнянь, а процес зовнішнього випадкового тремтіння заселеності як неавтономний, що індексується від'ємним знаком у лівій частині рівнянь.

Виконуючи числовий розв'язок диференціальних рівнянь (41), (59) за початкових умов (62), (63) із фіксацією величин кінетичних параметрів  $w_2; w_1; w_0; \sigma_1 = \sigma_2$  на деяких певних значеннях, відповідно, 2.0; 0.2; 0.5; 0.6, та варіацією величин параметрів  $\nu_{1,2}$  у межах від 0.01 до 5.0 (у довільних одиницях, зворотних одиницям часу), набуваємо можливості надати для розвинення в часі заселеностей  $P_1(t)$  залежно від величин  $\nu_{1,2}$  вигляду тривимірних графіків, зображених на рис. 1(а,б). Як видно, ці графіки загалом відрізняються один від одного, особливо за своєю амплітудою за малих  $\nu_{1,2}$ . Та найпомітніше це проявляється на графіках для диференціалів логарифма заселеностей  $d[\log P_1(t)]/dt$ , поданих на рис. 2(а,б). Як відомо, кількість складок, які виникають на поперечних розрізах таких графіків за часом, свідчить про число експоненціальних компонент для загального розв'язку (45) диференціальних рівнянь (41), (59), збільшене на одиницю [27]. Трискладчата структура, показана на графіку рис. 2(а) за малих  $\nu_2$  еволюціонує через двоскладчату структуру, помітну за помірних  $\nu_2$ , до односкладчатої структури, яку видно за великих  $\nu_2$ . Це прямо вказує на зміну модальності в динаміці заселеності  $P_1(t)$  з чотирьохекс-

попенціального її розвитку в часі, через триекспоненціальний розвиток, до двоекспоненціального її розвитку за значного збільшення  $\nu_2$ . Але на рис. 2(б), де структура графіка залишається односкладчатою навіть за дуже малих  $\nu_1$ , зазначена закономірність виявляється повністю відсутньою. Це вказує на те, що у випадку, коли стохастичний процес  $\alpha_1(t)$  додається до зворотної ймовірності переходу  $w_1$  в двостадійному неавтономному абсорбувальному ланцюзі Маркова (36), цей ланцюг може з самого початку розглядатися як ефективно автономний, підпорядкований двоекспоненціальній кінетиці усередненої заселеності його проміжного стану (47). На відміну від цього, однак, якщо ж відповідний стохастичний процес  $\alpha_2(t)$  з'являється у прямій ймовірності переходу  $w_2$  двостадійного неавтономного абсорбувального ланцюга Маркова (35), то такий ланцюг, навіть стаючи автономним після усереднення його динаміки, перестає бути ефективно двостадійним з двоекспоненціальною кінетикою (47) заселеності проміжного стану  $P_1(t)$ . Навпаки, цей ланцюг демонструє відхилення від двоекспоненціальної кінетики до трьохекспоненціальної та чотирьохекспоненціальної кінетик, характерних для  $w_1 = 0$  (55) і загального розв'язку (45) диференціальних рівнянь (41) за помірних і малих  $\nu_2$ .

Загалом, чотирьохекспоненціальна поведінка розв'язку диференціальних рівнянь (41), (59) четвертого порядку у двох граничних випадках  $\alpha_1(t) = 0; \alpha_2(t) \neq 0$  і  $\alpha_1(t) \neq 0; \alpha_2(t) = 0$  для відповідних абсорбувальних ланцюгів Маркова (35) і (36) ніяк не означає, що й у загальному випадку  $\alpha_1(t) \neq 0; \alpha_2(t) \neq 0$  ланцюга (30), навіть за умови  $\alpha_1(t) = \alpha_2(t) \equiv \alpha(t)$ , замикання його неавтономних динамік також можна досягти за допомогою пошуку аналогічного багатоекспоненціального розв'язку диференціального рівняння вищого порядку. Такий сценарій розв'язання проблеми, на жаль, не видається можливим, принаймні за такого рівня розвитку аналітичних методів розв'язку диференціальних рівнянь з неоднорідними коефіцієнтами [17,28]. Теж саме стосується проблеми розв'язку цих рівнянь у критичних ділянках, особливо в області стохастичного резонансу, де два чи більше коренів відповідних характеристичних рівнянь збігаються або входять парами комплексних взаємно спряжених величин. Тому аналіз цих важливих, але слабо розроблених питань перебував поза увагою у поданому матеріалі.

## VII. ОБГОВОРЕННЯ І ВИСНОВКИ

У цій праці підхід стохастичного гамільтоніана використано для замкненого опису багатоекспоненціальних динамік деякої малої нерівноважної підсистеми великої складної системи, яка включає також рівноважне середовище, що слабо взаємодіє з підсистемою. Із застосуванням методу проєкційного оператора Токуяма–Морі до рівняння Ліувілья–фон Ноймана (3) для еволюції матриці густини всієї системи за усереднення за статистичним ансамблем під час певної реалізації вихідного стохастичного гамільтоніана (2) отримано редуковане рівняння (7) для матриці густини нерівноважної підсистеми, відтак спрощене до стохастичного рівняння для заселеностей станів неавтономного ланцюга Маркова (20) із залежними від часу ймовірностями переходу між станами (21). Далі, із використанням у ланцюзі Маркова наближення трьох станів — початкового, проміжного і абсорбувального — усереднено відповідні рівняння для двох випадків, коли стохастичний процес додається до прямої (35) або зворотної (36) ймовірностей переходу з початкового у проміжний стани. Для дихотомічного стохастичного процесу таке усереднення привело до двох різних, за їх правого частиную, диференціальних рівнянь четвертого порядку, (41) та (59), замкнених відносно усередненої заселеності проміжного стану  $P_1(t)$ . Числовий розв'язок отриманих рівнянь показав, що у другому випадку ланцюг Маркова, незважаючи на усереднення його неавтономної динаміки (36) за стохастичним процесом, залишався ефективно двостадійним, тобто таким, що мав двоекспоненціальну кінетику (47) для  $P_1(t)$ . Навпаки, у першому випадку це ж усереднення неавтономної динаміки ланцюга Маркова (35) призводило до суттєво складнішої поведінки заселеності проміжного ста-

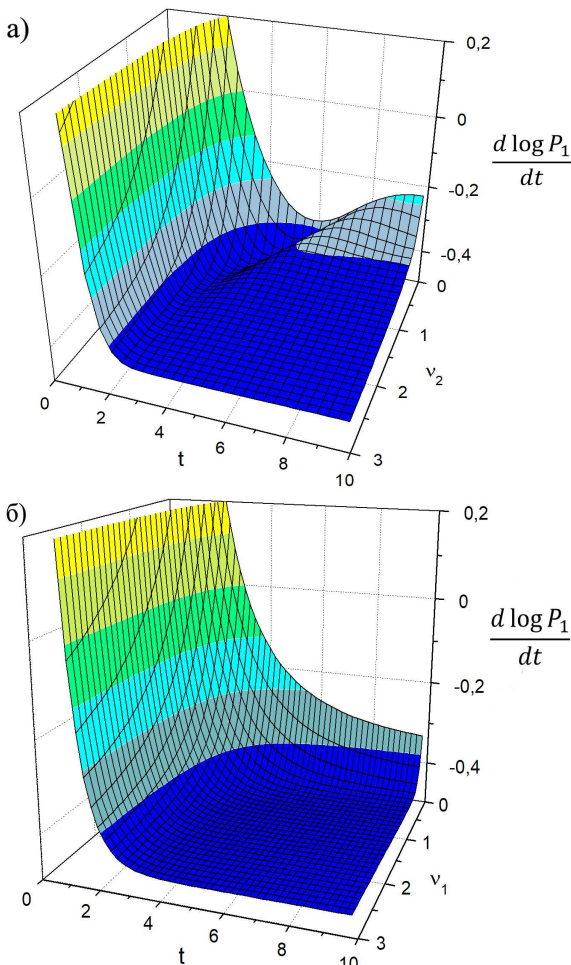


Рис. 2. Диференціально-логірифічне зображення для графіків на рис. 1(а) і рис. 1(б).



ну  $P_1(t)$ , яка описувалась уже чотириекспоненціальною кінетикою в межах рівнянь (41) з відмінною від нуля правою частиною. Наявність додатних членів у правій частині (41) вказувало на те, що попри стохастичне усереднення в неавтономному ланцюзі Маркова (35), який завдяки цьому ставав автономним, у правій частині (41) мали зберігатися певні залишкові процеси, які б продовжували викликати додаткові збурення як в інерційному (пропорційному  $\dot{P}_1(t)$ ), так і в дисипаційному ( $\sim \dot{P}_1(t)$ ) і пружньому ( $\sim P_1(t)$ ) її складниках. При цьому важливо, що за відсутності абсорбувальної стадії  $w_0 = 0$  обидва випадки збіглися й описувались одним і тим же диференціальним рівнянням другого порядку (50), розв'язок якого для  $P_1(t)$  був двоекспоненціальним (47). Однак за  $w_0 \neq 0$  ці випадки доповнювали один одного в тому сенсі, що відповідні їм динаміки усереднених заселеностей проміжних станів  $P_1(t)$  неавтономних ланцюгів Маркова (35) і (36) ставали взаємно незвідними, бо за скін-

ченної частоти  $\nu$  стохастичного процесу  $\alpha(t)$  описувались чотириекспоненціальним і двоекспоненціальним розв'язками (див. відповідні графіки на рис. 1(а,б) та рис. 2(а,б)).

Отже, можна зробити висновок, що, маючи на увазі досягнення замкненого опису динамік деякого неавтономного ланцюга Маркова з попередньо невідомою кількістю станів і випадковими ймовірностями переходу між ними, неможливо передбачити ні топології ланцюга, ні порядку системи диференціальних рівнянь для еволюції заселеностей станів без урахування явного впливу на них імовірнісних розподілів для стохастичних процесів, що розглядаються.

### Подяка

Ця праця була частково підтримана Програмою фундаментальних досліджень відділення фізики та астрономії Національної академії наук України (проект № 0117U000240).

- 
- [1] J. R. Norris, *Markov Chains* (Cambridge University Press, Cambridge, 1997); <https://doi.org/10.1017/CB09780511810633>.
- [2] S. N. Ethier, T. G. Kurtz, *Markov Processes: Characterization and Convergence* (Wiley and Sons, New York, 1986); <https://doi.org/10.1002/9780470316658>.
- [3] O. L. Kapitanchuk, O. M. Marchenko, V. I. Teslenko, *Chem. Phys.* **472**, 249 (2016); <https://doi.org/10.1016/j.chemphys.2016.03.007>.
- [4] W. J. Anderson, *Continuous-Time Markov Chains: An Applications-Oriented Approach* (Springer-Verlag, New York, 1991); <https://doi.org/10.1007/978-1-4612-3038-0>.
- [5] M. Iosifescu, *Finite Markov Processes and Their Applications* (Wiley, Chichester, New York, 1980).
- [6] G. W. Milton, *Theory of Composites* (Cambridge University Press, Cambridge, 2002); <https://doi.org/10.1017/CB09780511613357>.
- [7] S. Torquato, *Random Heterogeneous Materials: Microstructure and Macroscopic Properties* (Springer-Verlag, Berlin, 2002); <https://doi.org/10.1007/978-1-4757-6355-3>.
- [8] C. Leopold, *Parallel and Distributed Computing: A survey of Models, Paradigms and approaches* (John Wiley & Sons, Inc., New York, 2001).
- [9] G. Bolch, S. Greiner, H. de Meer, K. Trivedi, *Queueing Networks and Markov Chains: Modeling and Performance Evaluation with Computer Science Applications* (Wiley-Interscience, New York, 2006); <https://doi.org/10.1002/0471791571>.
- [10] A. Bassi et al., *Enabling Things to Talk: Designing IoT solutions with the IoT Architectural Reference Model* (Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 2013); <https://doi.org/10.1007/978-3-642-40403-0>.
- [11] Н. Н. Боголюбов, *Избранные труды, т. 2* (Наукова думка, Киев, 1969).
- [12] І. О. Вакарчук, *Вступ до проблем багатьох тіл* (ЛНУ ім. Івана Франка, Львів, 1999).
- [13] І. О. Вакарчук, *Квантова механіка* (ЛНУ ім. Івана Франка, Львів, 2007).
- [14] І. О. Vakarchuk, O. I. Hryhorchak, *J. Phys. Stud.* **13**, 3004 (2009).
- [15] A. L. Kuzemsky, *Statistical Mechanics and the Physics of Many-Particle Model Systems* (World Scientific, Singapore, 2017); [https://doi.org/10.1142/9789813145641\\_0001](https://doi.org/10.1142/9789813145641_0001).
- [16] G. Adomian, T. E. Lynch, *J. Math. Anal. Appl.* **61**, 216 (1977); [https://doi.org/10.1016/0022-247X\(77\)90156-1](https://doi.org/10.1016/0022-247X(77)90156-1).
- [17] G. Adomian, L. H. Sibul, *J. Math. Anal. Appl.* **83**, 611 (1981); [https://doi.org/10.1016/0022-247X\(81\)90144-X](https://doi.org/10.1016/0022-247X(81)90144-X).
- [18] G. Adomian, in *Differential Equations and Mathematical Physics*; edited by I. W. Knowles, Y. Saito, (Springer-Verlag, Berlin, 1987), p. 1; <https://doi.org/10.1007/BFb0080575>.
- [19] А. В. Скороход. *Асимптотические методы теории стохастических дифференциальных уравнений* (Наукова думка, Киев, 1987).
- [20] G. Adomian, *Solving Frontier Problems of Physics: The Decomposition Method* (Springer Science+Business Media, Dordrecht, 1994); <https://doi.org/10.1007/978-94-015-8289-6>.
- [21] V. E. Shapiro, V. M. Loginov, *Physica A* **91**, 563 (1978); [https://doi.org/10.1016/0378-4371\(78\)90198-X](https://doi.org/10.1016/0378-4371(78)90198-X).
- [22] V. I. Teslenko, *Ukr. J. Phys.* **62**, 349 (2017); <https://doi.org/10.15407/ujpe62.04.0351>.
- [23] E. Petrov, V. Teslenko, in *Nanobiophysics: Fundamentals and Applications*, edited by V. A. Karachevtsev (Pan Stanford Publishing Pte. Ltd., Singapore, 2016), p. 267; <https://doi.org/10.1201/b20480>.
- [24] V. I. Teslenko, E. G. Petrov, *Ukr. J. Phys.* **61**, 627 (2016); <https://doi.org/10.15407/ujpe61.07.0627>.
- [25] S. N. Atluri, *Methods of Computer Modeling in Engineering & The Sciences. Vol. I* (Tech Science Press, Forsyth, 2005).
- [26] L. Dong, A. Alotaibi, S. A. Mohiuddine, S. N. Atluri, *Computer Modeling Eng. Sci.* **99**, 1 (2014); <https://doi.org/10.1080/15230407.2014.938888>.

- doi.org/10.3970/cmcs.2014.099.001.
- [27] V. I. Teslenko, O. L. Kapitanchuk, *Acta Phys. Polon. B* **49**, 1581 (2018); <https://doi.org/10.5506/APhysPolB.49.1581>.
- [28] S. P. Meyn, R. L. Tweedie, *Markov Chains and Stochastic Stability* (Springer, London, 1993); <https://doi.org/10.1007/978-1-4471-3267-7>.
- [29] W. J. Rugh, *Linear System Theory* (Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ, 1993).
- [30] H. Hinrichsen, *Adv. Phys.* **49**, 815 (2000); <https://doi.org/10.1080/00018730050198152>.
- [31] A. Fiasconaro, B. Spagnolo, S. Boccaletti, *Phys. Rev. E* **72**, 061110 (2005); <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.72.061110>.
- [32] M. Tokuyama, H. Mori, *Progr. Theor. Phys.* **56**, 1073 (1976); <https://doi.org/10.1143/PTP.55.411>.
- [33] H. P. Breuer, F. Petruccione, *The Theory of Open Quantum Systems* (Oxford University Press, Oxford, 2006); <https://doi.org/10.1093/acprof:oso/9780199213900.001.0001>.
- [34] А. И. Ахиезер, С. В. Пелетминский, *Методы статистической физики* (Наука, Москва, 1977).
- [35] S. Chaturvedi, F. Shibata, *Z. Phys. B* **35**, 297 (1979); <https://doi.org/10.1007/BF01319852>.
- [36] V. I. Teslenko, E. G. Petrov, V. Verkhratsky, O. A. Kri-shtal, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 178105 (2010); <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.104.178105>.
- [37] V. I. Teslenko, O. L. Kapitanchuk, *J. Phys. Stud.* **19**, 1001 (2015).
- [38] A. N. Gorban, *Entropy* **16**, 2408 (2014); <https://doi.org/10.3390/e16052408>.
- [39] Y. Levy, J. Jortner, R. S. Berry, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **4**, 5052 (2002); <https://doi.org/10.1039/B203534K>.
- [40] D. M. Nicol, W. H. Sanders, K. S. Trivedi, *IEEE Trans. Depend. Secure Comput.* **1**, 48 (2004); <https://doi.org/10.1109/TDSC.2004.11>.
- [41] W. J. Bruno, J. Yang, J. E. Pearson, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **102**, 6326 (2005); <https://doi.org/10.1073/pnas.0409110102>.
- [42] W. T. Coffey, Y. P. Kalmykov, *The Langevin Equation: With Applications to Stochastic Problems in Physics, Chemistry, and Electrical Engineering* (World Scientific, Singapore, 2012); <https://doi.org/10.1142/8195>.
- [43] H. Risken, *The Fokker-Planck Equation* (Springer-Verlag, Berlin, 2nd edition, 1989).
- [44] Э. Г. Петров, В. И. Тесленко, *Теор. мат. физ.* **84**, 446 (1990); <https://doi.org/10.1007/BF01017358>.
- [45] A. Hurwitz, *Math. Ann.* **46**, 273 (1895).
- [46] E. A. Moelwyn-Hughes, in *Physical Chemistry, App. 9* (University Press, Cambridge, 1940), p. 633.
- [47] J. V. Hollerbach, C. G. Atkeson, *J. Neurosci. Meth.* **21**, 181 (1987); [https://doi.org/10.1016/0165-0270\(87\)90115-4](https://doi.org/10.1016/0165-0270(87)90115-4).

**A CLOSED DESCRIPTION OF THE NON-AUTONOMOUS DYNAMICS  
FOR AN ABSORBING MARKOV CHAIN WITH THREE STATES  
AND RANDOM TRANSITION PROBABILITIES**

V. I. Teslenko, O. L. Kapitanchuk  
*Bogolyubov Institute for Theoretical Physics, NAS of Ukraine,  
14-B, Metrologichna St., Kyiv, UA-03680, Ukraine*

The Tokuyama–Mori projection operator method for a closed description of averaged dynamics of a nonequilibrium subsystem weakly interacting with an equilibrium surrounding medium is applied to a non-autonomous absorbing Markov chain with three states and stochastic transition probabilities. The solution to the problem of the temporal behavior of the transient state’s population is carried out in two cases for this chain, where a symmetric dichotomous stochastic process is added either to forward, or to backward transition probabilities between its states. It is shown that both solutions found are described by the generally different differential equations of the fourth order, which are complementary to each other. In the limit of the very high frequency of a stochastic process in forward/backward transition probabilities as well as in the case of a one-stage recurrent Markov chain both solutions are two-exponential and superimposed on each other. However, there is a distinction between using those solutions for the closed description of the dynamics of a two-stage absorbing Markov chain at low stochastic frequencies, in which case the former solution reveals itself as four-exponential, whereas the latter displays its effective two-exponential behavior. This indicates the existence of mutual irreducibility between the different solutions of two differential equations obtained in the general case.