

УДК 537.86:519.2

ВЕРОЯТНОСТНОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ КООРДИНАТЫ БРОУНОВСКОЙ ЧАСТИЦЫ, ДИФФУНДИРУЮЩЕЙ В НАКЛОННЫХ ПЕРИОДИЧЕСКИХ ПОТЕНЦИАЛАХ

© 2011 г.

Д.А. Куликов, Н.В. Азудов

Нижегородский госуниверситет им. Н.И. Лобачевского

dm.kulikov@gmail.com

Поступила в редакцию 04.04.2011

Рассмотрено сверхвязкое одномерное броуновское движение в наклонных периодических потенциалах. В приближении высоких потенциальных барьеров по сравнению с интенсивностью флуктуаций получено аналитическое выражение, моделирующее нестационарную плотность вероятности координаты броуновской частицы на всем временном масштабе. Проведено сравнение с результатами численного моделирования. Определены ограничения применимости модельного распределения.

Ключевые слова: броуновская диффузия, уравнение Фоккера–Планка, марковский случайный процесс, нестационарное распределение.

Введение

Модель неравновесной броуновской диффузии в периодических структурах возникает при анализе различных систем [1–3], таких как джозефсоновские переходы [4], системы фазовой автоподстройки частоты [5–8], межклеточный транспорт и молекулярные моторы [9] и пр. Одной из наиболее часто встречающихся моделей является одномерная диффузия в периодическом потенциале с «наклоном». Эта модель также используется при анализе теоретических основ статистической механики и при проверке фундаментальных неравновесных соотношений, предложенных в [10].

Основная и наиболее исчерпывающая характеристика системы – нестационарное вероятностное распределение координаты броуновской частицы, которое является предметом теоретического и численного анализа в ряде работ на протяжении десятков лет. К настоящему времени известно асимптотическое (при $t \rightarrow \infty$) нестационарное распределение для произвольного наклонного периодического потенциального профиля [5,11]. Получены точные аналитические выражения для эффективного коэффициента диффузии и средней скорости дрейфа [11,12]. Обнаружен и исследован эффект ускорения диффузии [11–13]. Получено стационарное распределение фазы, и подробно исследованы его параметры [5,10]. Тем не менее точное нестационарное распределение координаты броуновской частицы на сегодняшний день получить не удается в силу математических трудностей, связанных с решением уравнения Фок-

кера–Планка (УФП). Поэтому актуальны приближенные выражения для нестационарных распределений. В частности, в работе [14] было предложено новое приближенное выражение для нестационарного распределения координаты броуновской частицы, диффундирующей в наклонных периодических потенциальных профилях. Путем сопоставления с результатами численного моделирования броуновского движения показано, что предложенное выражение удовлетворительно описывает нестационарное распределение броуновской диффузии в гармонических потенциалах с большими (околопороговыми) и малыми наклонами. Однако данное выражение достаточно трудно использовать при аналитических расчетах величин, основанных на плотности вероятности, поскольку оно содержит параметрические функции, которые также необходимо подбирать и вычислять численно в каждом конкретном случае.

С другой стороны, броуновская диффузия в приближении высоких барьеров хорошо изучена применительно к бистабильным и метастабильным системам [15], а результаты анализа бистабильных систем можно обобщить и на мультистабильные. В настоящей работе предложено модельное распределение, аппроксимирующее нестационарное вероятностное распределение координаты броуновской частицы, диффундирующей в периодическом наклонном потенциале, полученное путем использования подходов, развитых ранее для бистабильных систем и работающих при малой интенсивности флуктуационной силы по сравнению с высотой потенциальных барьеров. Случай малых флук-

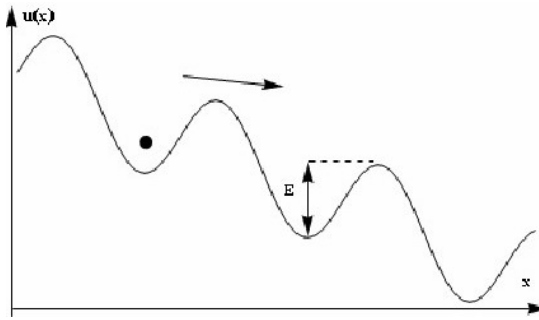


Рис. 1. Периодический потенциальный профиль с наклоном. Направление дрейфа броуновских частиц указано стрелкой

туаций является актуальным, например, для систем ФАПЧ, работающих в режиме синхронизации при наличии флуктуаций фазы.

Постановка задачи и решение

Рассмотрим уравнение Ланжевена, описывающее одномерное броуновское движение в сверхвязкой среде:

$$\frac{dx(t)}{dt} = a - F(x) + \xi(t), \quad x(0) = x_0, \quad (1)$$

где $x(t)$ – координата броуновской частицы, a – сила, вызывающая направленный дрейф броуновских частиц, $F(x)$ – периодическая функция $F(x+2\pi) = F(x)$, $\xi(t)$ – белый гауссов шум, $\langle \xi(t) \rangle = 0$, $\langle \xi(t)\xi(t+\tau) \rangle = 2N\delta(\tau)$, N – интенсивность шума. Регулярной силе удобно поставить в соответствие потенциальный профиль:

$$u(x) = -\int (a - F(x))dx = -ax + \int F(x)dx. \quad (2)$$

Вид такого потенциала представлен на рис.1. Далее для определенности будем считать, что минимумы потенциального профиля находятся в точках m_i , где $i = \pm 1, \pm 2, \dots$ и $2\pi(i-1) < m_i < 2\pi i$.

В отсутствие флуктуаций ($\xi=0$) и при ненулевой высоте барьеров E частица будет находиться в минимуме бесконечно долго. При наличии случайной силы $\xi(t) \neq 0$ частица может преодолевать потенциальный барьер. В этом случае с течением времени будет наблюдаться дрейф частицы вниз по склону потенциального профиля.

Как известно (см., напр., [16,17]), уравнению Ланжевена (1) соответствует уравнение Фоккера–Планка для плотности вероятности координаты частицы:

$$\frac{\partial W(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{du(x)}{dx} W(x,t) \right) + N \frac{\partial^2 W(x,t)}{\partial x^2} \quad (3)$$

с начальным условием $W(x,0) = \delta(x-x_0)$ и граничными условиями $W(\pm\infty, t) = 0$. Плотность вероятности переходов $W(x,t)$ содержит полную информацию о марковском процессе $x(t)$,

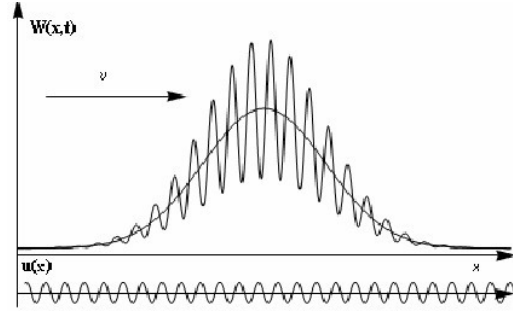


Рис. 2. Качественный вид асимптотического нестационарного распределения для произвольного наклонного потенциального профиля $u(x)$ при $t \rightarrow \infty$

но на сегодняшний день точное решение УФП (3) для какой-либо периодической функции $F(x)$ неизвестно. В работах [5,11] получено асимптотическое решение УФП, справедливое при $t \rightarrow \infty$:

$$W_{as}(x,t) = W_{st}(x) e^{-\frac{(x-x_0-vt)^2}{4D_{eff}t}}, \quad (4)$$

здесь v – средняя скорость дрейфа частицы, а D_{eff} – эффективный коэффициент диффузии:

$$v = \left\langle \frac{dx}{dt} \right\rangle = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\langle x(t) - x_0 \rangle}{t}, \quad (5)$$

$$D_{eff} = \frac{1}{2} \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\langle [x(t) - \langle x(t) \rangle]^2 \rangle}{t},$$

$W_{st}(x)$ – периодически продолженное стационарное распределение с нормировкой 2π :

$$\int_{2\pi(k-1)}^{2\pi k} W_{st}(x) dx = 2\pi,$$

которое является стационарным решением УФП (3) при периодических граничных условиях: $W_{st}(x) = W_{st}(x+2\pi)$. Отметим, что нахождению такого стационарного решения посвящено значительное количество работ (см. [10, 16]). Для произвольного наклонного периодического потенциального профиля (2) стационарное распределение имеет следующий вид:

$$W_{st}(x) = c e^{-\frac{u(x)}{N}} \int_x^{x+2\pi} e^{\frac{u(y)}{N}} dy, \quad (6)$$

где c – нормировочная константа.

Таким образом, согласно (4) нестационарное распределение при $t \rightarrow \infty$ имеет гауссову огибающую и движется в направлении наклона потенциального профиля со скоростью дрейфа v , а $W_{st}(x)$ определяет локальную структуру: минимумы и максимумы распределения, соответствующие потенциальным барьерам и ямам. Пример подобного распределения качественно изображен на рис. 2 (см. также [11]). В общем случае распределение внутри каждой потенциальной ямы будет несимметричным.

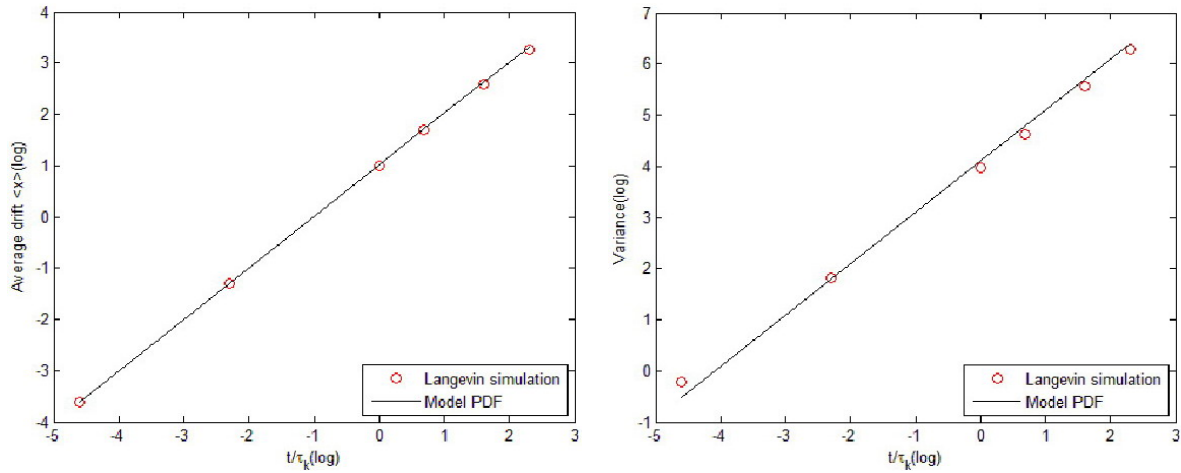


Рис. 3. Среднее значение и дисперсия в логарифмическом масштабе. Кругами указаны значения, полученные численными методами для различных времен моделирования t . Параметры $R=10$, $a=0.2$, $N=2$, $E/N \sim 10$. Линии соответствуют теоретическим прямым $\langle x \rangle = vt$ и $\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = 2D_{eff} t$.

Задачей настоящей работы является построение модельного выражения для плотности вероятности при $0 \leq t \leq \infty$ в приближении высоких барьеров потенциального профиля $E/N \gg 1$. Подобное приближение было впервые использовано для решения УФП в работе Крамерса [15] для бистабильных систем, но аналогичный подход можно использовать и для мультистабильной системы, рассматриваемой в данной работе. При $E/N \gg 1$ стационарное распределение будет локализовано вблизи точек минимума потенциального профиля, поэтому выражение (6) можно упростить. Рассмотрим точку, соответствующую k -му минимуму потенциального профиля: $x=m_k$. Разложим $u(x)$ в ряд Тейлора вблизи точки максимума L_k , следующего за точкой минимума m_k , $u(x) \approx u(L_k) - |u''(L_k)| (x-L_k)^2 / 2$, где $u''(L_k) < 0$. Тогда нетрудно показать, что при $N \ll E$ стационарное распределение в k -й потенциальной яме, для $2\pi(k-1) < x < 2\pi k$, будет иметь следующий вид:

$$W_{st}(x) = \sqrt{\frac{2\pi}{\sigma^2}} e^{-\frac{(x-m_k)^2}{2\sigma^2}}, \quad (7)$$

где дисперсия распределения равна $\sigma^2 = N/|u''(m_k)|$. При $E/N \gg 1$ хвосты этого распределения спадают настолько быстро, что в точках, соответствующих вершинам потенциальных барьеров, распределение (7) практически равно нулю: $\sigma \ll 2\pi$. Периодически продолженное стационарное распределение, которое входит в выражение (4), будет представлять собой набор гауссовых распределений (7) с максимумами, соответствующими точкам минимумов потенциального профиля $m_k = m_1 \pm \pm 2\pi(k-1)$. Данное распределение удобно представить в виде ряда Фурье:

$$W_{st}(x) = 1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\frac{n^2 \sigma^2}{2}} \cos(nx). \quad (8)$$

Рассмотрим теперь нестационарное распределение $W(x, t)$. Точные выражения для средней скорости дрейфа и эффективного коэффициента диффузии, определенные согласно (5), известны для любых видов функций $F(x)$ [5, 12, 18]. В частности, если в качестве периодической функции взять синусоиду $F(x) = R \sin(x - m_1)$, где $m_1 = \arcsin(a/R)$ – координата 1-го минимума потенциального профиля (2), то выражения для средней скорости дрейфа и эффективного коэффициента диффузии будут следующими (см. [12, 13]):

$$v = N \frac{\text{sh}(\pi \frac{a}{N})}{\pi} [I_{\frac{a}{N}}(\frac{R}{N})]^{-2} \approx 2\pi \frac{(1 - e^{-\frac{2\pi a}{N}})}{\tau_k}, \quad (9)$$

$$D_{eff} \approx \frac{2\pi^2}{\tau_k} (1 + e^{-\frac{2\pi a}{N}}),$$

где $I_{ij}(x)$ – функция Бесселя, τ_k – время Крамерса (см. [5, 15]):

$$\tau_k = \tau_0 e^{\frac{E}{N}} = \frac{2\pi}{\sqrt{R^2 - a^2}} e^{\frac{E}{N}},$$

а высота барьера определяется соотношением:

$$E = 2\sqrt{R^2 - a^2} - 2a \arccos(\frac{a}{R}).$$

Выше приведены точное и приближенное выражения для средней скорости дрейфа v , а для D_{eff} приведено только приближенное выражение, справедливое при $E/N \gg 1$. На рис. 3 сплошными линиями изображены среднее значение $\langle x \rangle = vt$ и дисперсия координаты броуновских частиц $\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = 2D_{eff} t$, где v и D_{eff} получены согласно выражениям (9), а кру-

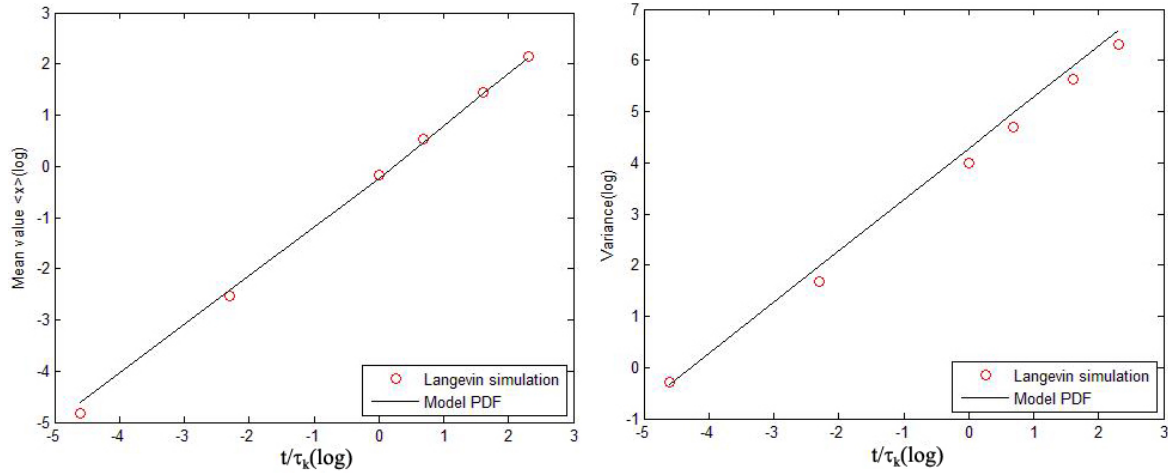


Рис. 4. Среднее значение и дисперсия в логарифмическом масштабе. Кругами указаны значения, полученные численными методами для различных времен моделирования t . Параметры $R=10$, $a=0.2$, $N=6.6$, $E/N \sim 3$. Линии соответствуют теоретическим прямым $\langle x \rangle = vt$ и $\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = 2D_{eff}t$.

гами показаны результаты численного моделирования уравнения (1) в различные моменты времени при $E/N = 10$. Для моделирования использовался метод Рунге–Кутты, подробно описанный в [18], с шагом интегрирования 0.01 и усреднением по 10000 реализаций. Из этих графиков следует, что при $E/N \gg 1$ определения среднего и дисперсии (5) справедливы не только при $t \rightarrow \infty$, но и на временах много меньших характерного времени перехода через барьер τ_k . Как видно из аналогичных графиков, изображенных на рис. 4, это совпадение начинает нарушаться при увеличении интенсивности шума, когда $E/N \approx 3$. Данное наблюдение позволяет нам предположить, что при $E/N \gg 1$ в качестве модельного распределения мы можем использовать то, которое приводит к тем же величинам среднего значения $\langle x \rangle = vt$ и дисперсии $\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = 2D_{eff}t$.

Поскольку в выражении (4) множителем является гауссова огибающая с теми же значениями среднего и дисперсии, то для распределения (4) это условие выполняется практически всегда (а не только при $t \rightarrow \infty$), за исключением лишь достаточно малых t , когда характерная ширина гауссовой огибающей становится порядка размера одной потенциальной ямы $\sqrt{2D_{eff}t} < 2\pi$. Поэтому для того чтобы асимптотическое распределение (4) стало модельным при $0 \leq t \leq \infty$, его необходимо скорректировать лишь для малых t .

Рассмотрим, как будет изменяться распределение $W(x, t)$ на малых временах, когда все частицы сосредоточены внутри одной потенциальной ямы. Предположим, что в начальный момент времени система находилась в произвольной точке x_0 между двумя барьерами по-

тенциального профиля: $2\pi(k-1)\langle x_0 \rangle < 2\pi k$. Как известно (см., напр., [15]), при высоких потенциальных барьерах $E/N \gg 1$ плотность вероятности $W(x, t)$ релаксирует внутри потенциальной ямы к стационарному распределению (7) намного раньше, чем начинается сколь угодно заметный процесс перехода через потенциальный барьер, который протекает намного медленнее. Другими словами, при $E/N \gg 1$ можно считать, что стационарное распределение внутри потенциальной ямы в окрестности точки $x = m_k$ устанавливается мгновенно. Это свойство распределения позволяет нам скорректировать асимптотическое решение (4) для малых времен при помощи условия: при $t \rightarrow 0$ распределение $W(x, t)$ должно совпадать со стационарным (7) в соответствующей потенциальной яме, деленным на 2π . Стационарное распределение уже входит в распределение (4) в виде множителя, поэтому чтобы удовлетворить вышеописанному условию, достаточно потребовать, чтобы гауссова огибающая в выражении (4) стремилась к равномерному распределению $W_0(x_0)$ на участке от вершины до вершины соседних барьеров $[2\pi(k-1), 2\pi k]$ при $t \rightarrow 0$. Это приведет к следующей функции огибающей:

$$W_G(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} W_0(x_0) \frac{e^{-\frac{(x-x_0-vt)^2}{4D_{eff}t}}}{\sqrt{4\pi D_{eff}t}} dx_0 =$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int_{2\pi(k-1)}^{2\pi k} \frac{e^{-\frac{(x-x_0-vt)^2}{4D_{eff}t}}}{\sqrt{4\pi D_{eff}t}} dx_0 = \frac{1}{4\pi} \left[\text{Erf} \left(\frac{x-vt+2\pi k}{2\sqrt{D_{eff}t}} \right) - \right. \quad (10)$$

$$\left. - \text{Erf} \left(\frac{-(x-vt)+2\pi(k-1)}{2\sqrt{D_{eff}t}} \right) \right],$$

где $\text{Erf}(x)$ – функция ошибок.

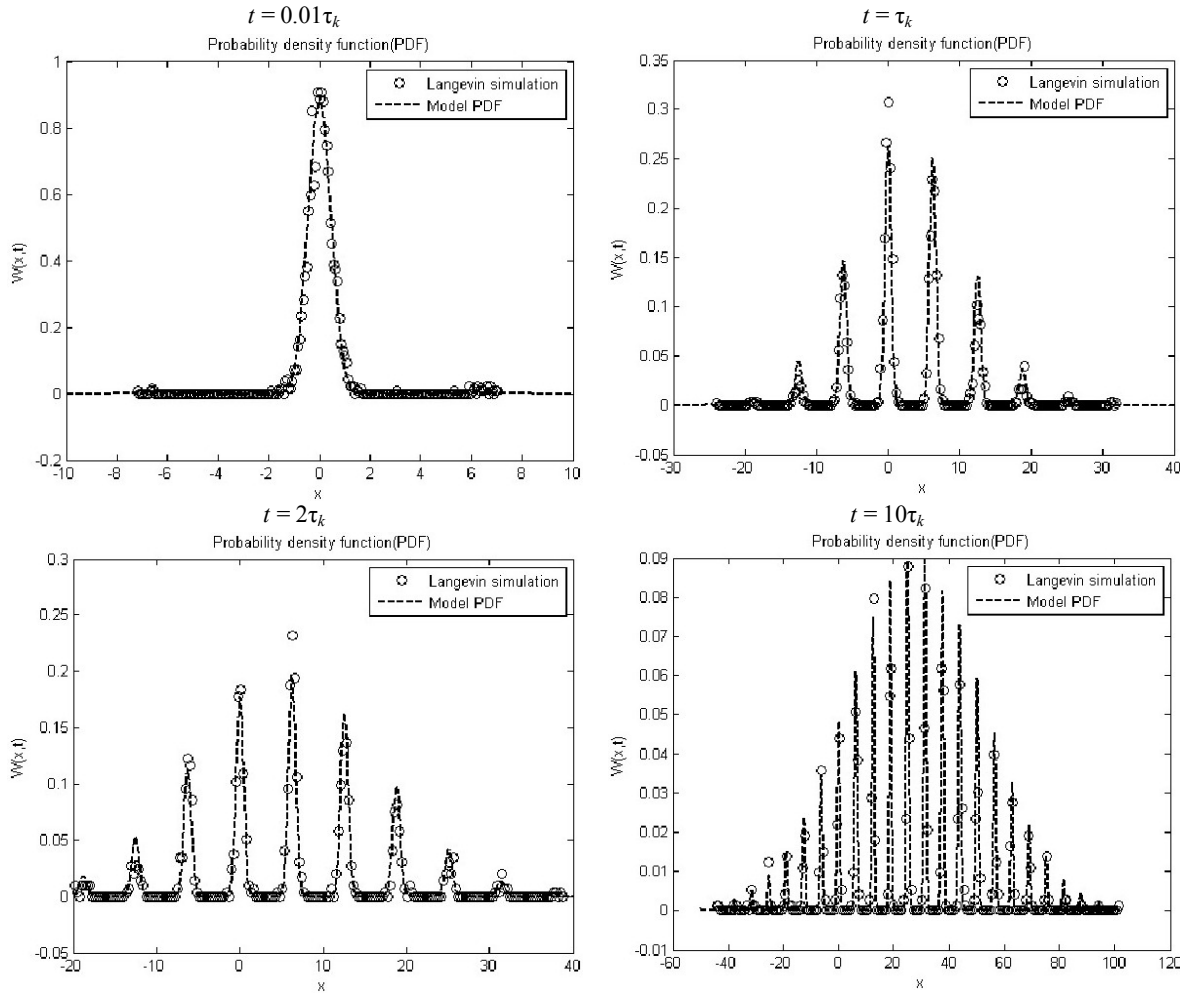


Рис. 5. Модельное распределение (11) (пунктирная линия) и распределение, полученное численными методами (круги) для различных времен моделирования t . Параметры $R=10$, $a=0.2$, $N=2$, $E/N \sim 10$

Таким образом, модельное нестационарное распределение примет следующий вид:

$$W(x,t) = W_{st}(x)W_G(x,t), \quad (11)$$

где $W_{st}(x)$ определяется согласно (8), а $W_G(x,t)$ – согласно (10).

В данной работе модельное распределение (11) сопоставлено с результатами численного эксперимента, описанного выше. На рис. 5 и 6 изображены графики модельных распределений и распределений, полученных при помощи численного моделирования уравнения (1) в различные моменты времени t для двух различных интенсивностей шума. Интенсивности шума выбраны следующие: $N=2$ соответствует высокому барьеру $E/N=10$, а $N=6.6$ – низкому барьеру $E/N=3$. В начальный момент времени броуновская частица находится в точке $x=0$, при этом минимум потенциальной ямы находится в точке $x=0.02$. Модельное распределение $W(x,t)$, вычисленное согласно (11), изображено пунктирной линией. Из сопоставления графиков на рис. 5 и 6 следует, что распределение (11) довольно точно соответствует

реальному и может быть использовано как модельное для решения различных прикладных задач.

Тем не менее различия имеются, и они проанализированы ниже. При $t = 0.01\tau_k$ распределение хорошо совпадает с численными результатами, что подтверждает правильность описания внутриямной динамики модельным распределением (11). Также хорошее совпадение наблюдается при $t \rightarrow \infty$. Максимальные отличия модельного распределения от результатов численного моделирования имеют место при $t \sim \tau_k$. При временах порядка τ_k начинается диффузия через потенциальные барьеры. Время Крамерса – это характерное время перехода броуновской частицы через потенциальный барьер. Это время, когда начальное распределение, состоящее из одного пика, начинает расширяться, соответственно появляется несколько новых соседних пиков. Исходя из графиков, изображенных на рис. 5 и рис. 6, может быть отмечено, что при $t \sim \tau_k$ модельное распределение предполагает более быстрое уширение,

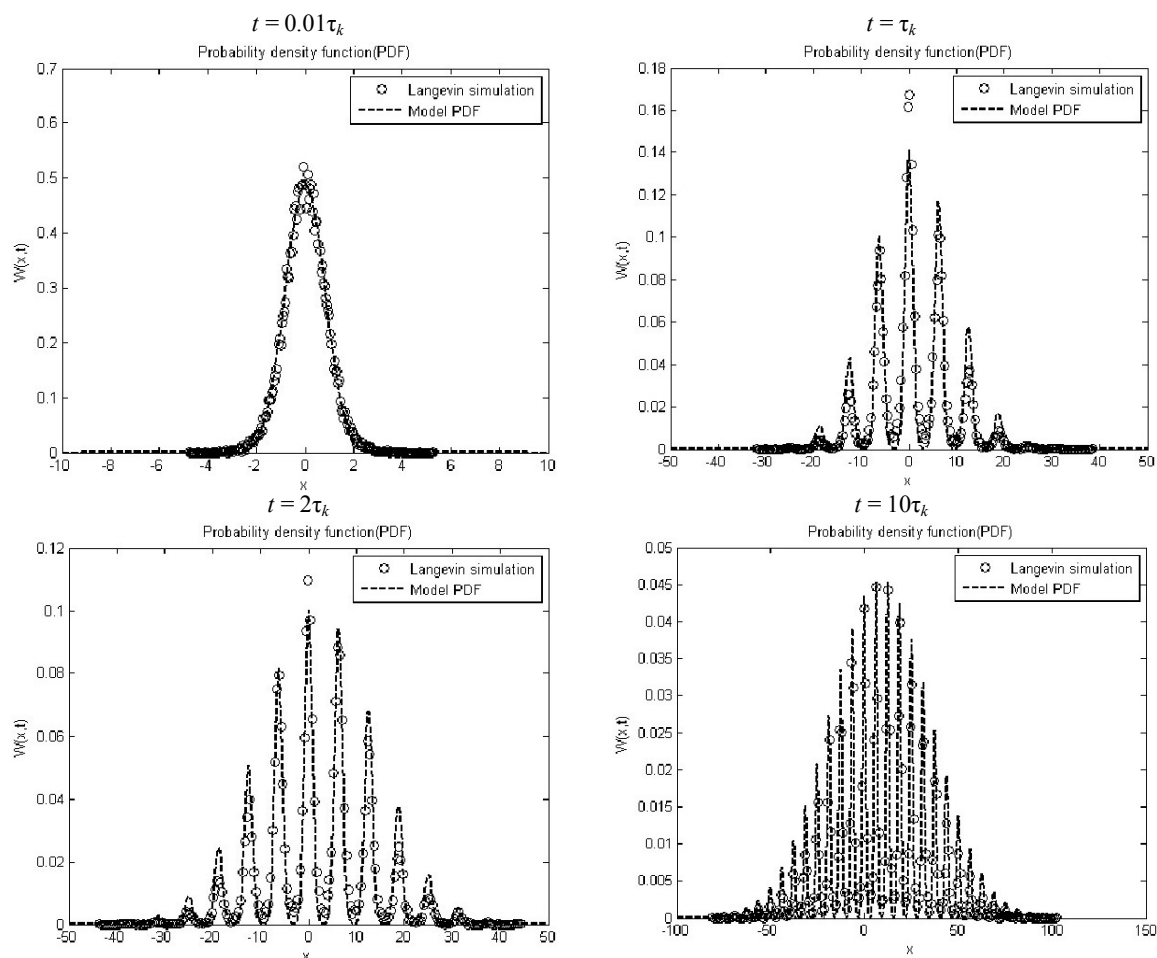


Рис. 6. Модельное распределение (11) (пунктирная линия) и распределение, полученное численными методами (круги) для различных времен моделирования t . Параметры $R=10$, $a=0.2$, $N=6.6$, $E/N \sim 3$

нежели численный эксперимент. Различие особенно заметно для обратного направления диффузии, которое противоположно направлению общего дрейфа (на графиках общий дрейф направлен вправо). Высота пиков, находящихся левее $x=0$, в численном эксперименте ниже, чем в модельном распределении. В соответствии с условием нормировки, высота пиков, отвечающих вероятности нахождения внутри ям, находящихся правее, в численном эксперименте оказалась, наоборот, выше той, что предполагается в модельном распределении. Это различие слабо заметно при $E/N=10$ и становится более явным при увеличении шума. Фактически, такой же вывод можно сделать и из анализа графиков дисперсии, изображенных на рис. 3 и 4. Действительно, дисперсия, вычисленная как $2D_{eff}t$, незначительно превышает дисперсию, определенную численно при $E/N=10$ (рис. 3), а при $E/N=3$ различия становятся уже более значительными (рис. 4).

В целом, при уменьшении отношения E/N модельное распределение начинает отличаться

от реального сильнее. Это говорит о том, что предложенное в данной работе модельное распределение справедливо при $E/N \gg 1$.

Заключение

В работе рассмотрено сверхвязкое одномерное броуновское движение в наклонных периодических потенциалах. Получено модельное выражение, описывающее нестационарную плотность вероятности координаты броуновской частицы в приближении высоких потенциальных барьеров по сравнению с интенсивностью флуктуаций. Проведено сравнение с результатами численного моделирования уравнения Ланжевена, и показано, что при интенсивности шума $N=0.3E$ и менее (где E – минимальная высота потенциальных барьеров) предложенное выражение удовлетворительно моделирует нестационарное распределение. Однако данное модельное распределение не лишено недостатков, что выражается в неточном описании реального распределения при временах порядка времени Крамерса.

Существенным преимуществом предложенного модельного распределения является его достаточно простой вид, что позволяет использовать его для аналитического решения различных прикладных задач, например для получения и анализа выражений спектра фазовых флуктуаций в системах ФАПЧ.

Работа выполнена при поддержке Федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009–2013 гг., государственный контракт № П457 от 31.07.2009 г.

Список литературы

1. Усатенко О.В. // Электромагнитные явления. 1998. Т.1. С. 338.
2. Costantini G., Marchesoni F. // Europhys. Lett. 1999. V.48. P. 491.
3. Reimann P. et al. // Phys. Rev. Lett. 2001. V.87. P. 010602.
4. Pankratov A. Form and width of the spectral line of a Josephson flux-flow oscillator // Phys. Rev. B. 2002. V. 65. P. 054504.
5. Stratonovich R.L. Topics in the Theory of Random Noise. Vols. I and II. Gordon and Breach Science Publishers Ltd., 1981.
6. Малахов А.Н. Флуктуации в автоколебательных системах. М.: Наука, 1968. 660 с.
7. Линдсей В. Системы синхронизации в связи и управлении. М.: Сов. радио, 1978. 600 с.
8. Тихонов В.И., Кульман Н.К. Нелинейная фильтрация и квазикогерентный прием сигналов. Сов. радио, 1975.
9. Reimann P. Brownian motors: noisy transport far from equilibrium // Physics Reports. 2002. **361**. P. 57–265.
10. Gardiner W. Handbook of stochastic methods. Berlin: Springer, 1990.
11. Linder B., Kostur M., Schimansky-Geier L. Optimal diffusive transport in a tilted periodic potential // Fluctuation and Noise Letters. 2001. Vol. 1. No. 1.
12. Reimann P., Van den Broeck C., Linke H. et. al. // Phys. Rev. E. 2002. 031104.
13. Agudov N.V., Safonov A.V. Acceleration of diffusion in subcritically tilted periodic potentials // Fluct. Noise Lett. 2005.
14. Salgado-García R., Leyvraz F., Martínez-Mekler G. // Phys. Rev. E. 2008. 061101.
15. Kramers H. Brownian motion in a field of force and the diffusion model of chemical reactions // Physica. 1940. V. 7. № 4. P. 284–304.
16. Risken H. The Fokker-Planck Equation: Methods of Solution and Applications. Berlin: Springer-Verlag, 1984.
17. Малахов А.Н. Кумулянтный анализ случайных негауссовых процессов и их преобразований. М.: Сов. радио, 1978. 376 с.
18. Reimann P. Giant Acceleration of Free Diffusion by Use of Tilted Periodic Potentials // Phys. Rev. Lett. 2001. V.87.
19. Никитин Н.Н., Первачев С.В., Разевиг В.Д. О решении на ЦВМ стохастических дифференциальных уравнений следящих систем // Автоматика и телемеханика. 1975. №4. С. 133–137.

COORDINATE PROBABILITY DISTRIBUTION OF A BROWNIAN PARTICLE DIFFUSING IN TILTED PERIODIC POTENTIALS

D.A. Kulikov, N.V. Agudov

One-dimensional overdamped Brownian particle motion in tilted periodic potentials is considered. Assuming high potential barriers in comparison with the noise intensity, an analytical expression is obtained which simulates the non-stationary probability density of the Brownian particle coordinate over the whole timescale. Theoretical results are compared with numerical simulations. The limitations of the model analytical expression are determined.

Keywords: Brownian diffusion, Fokker-Planck equation, Markov random process, non-stationary probability distribution.