



БРОУНОВСКАЯ ДИФFUЗИЯ В СИММЕТРИЧНОМ БИМОДАЛЬНОМ ПОТЕНЦИАЛЕ: КУМУЛЯНТНЫЙ ПОДХОД

О.В. Музычук

Рассмотрена релаксация вероятностных характеристик координат одномерного броуновского движения в симметричном потенциальном профиле с двумя устойчивыми равновесными состояниями. Для анализа использован кумулянтный подход, основанный на замыкании цепочки уравнений релаксации моментов (или кумулянтов) координат частиц в пренебрежении кумулянтами высших порядков.

Численным образом исследована релаксация первых трех кумулянтов вероятностного распределения. Выяснена зависимость времен релаксации среднего значения и дисперсии распределения от интенсивности шума, глубины потенциальных ям, начальных условий.

Изучение вероятностных характеристик неравновесного броуновского движения актуально для ряда проблем статистической радиофизики, радиоэлектроники, физической химии (см., например, [1]). Соответствующим математическим аппаратом является теория марковских процессов и процессов диффузионного типа [2,3]. В нелинейных задачах найти решения нестационарных уравнений Фоккера - Планка для вероятностных распределений не удастся, поэтому аналитических результатов здесь очень мало. Следует отметить существенную работу [4] (см. также библиографию в ней), где предложен довольно общий подход для оценки времени релаксации частиц в ряде потенциальных профилей. Некоторые аспекты эволюции средних значений броуновских частиц рассмотрены в [5].

Большой интерес для приложений представляют проблемы, связанные с диффузией через потенциальный барьер. Одна из таких задач решается в настоящей работе аналитико-численным образом.

1. Рассмотрим релаксацию вероятностных характеристик координат одномерного броуновского движения в симметричном потенциальном профиле¹

$$U(x) = -x^2/2 + \gamma x^4/4 \quad (1)$$

¹Использованный ниже кумулянтный подход позволяет, в принципе, рассмотреть и иной профиль, описываемый полиномом небольшой степени.

с двумя устойчивыми равновесными состояниями $x = \pm 1/\gamma^{1/2}$. Соответствующее уравнение Ланжевена:

$$T\dot{x} - x + \gamma x^3 = \xi(t), \quad (2)$$

где T - постоянная времени, $\xi(t)$ - дельта-коррелированный гауссов шум с нулевым средним и спектральной мощностью $D_\xi/2\pi$. Уравнение Фоккера - Планка для вероятностного распределения $W(x;t)$ имеет вид

$$\partial W/\partial \theta = \partial/\partial x [U'(x)W] + D\partial^2 W/\partial x^2 \quad (3)$$

и аналитически не решается. Здесь и ниже используем безразмерное время $\theta = t/T$; $D = D_\xi/2T$ - эффективная мощность шума $\xi(t)$. Стационарная плотность вероятности представляет собой распределение Больцмана

$$w(x) = C \exp[-U(x)/D]. \quad (4)$$

Стандартным образом запишем уравнения релаксации моментов координат²

$$\langle x^n \rangle' / n = \langle x^n \rangle - \gamma \langle x^{n+2} \rangle + (n-1)D \langle x^{n-2} \rangle, \quad n = 1, 2, \dots \quad (5)$$

Соответствующие уравнения для кумулянтов распределения имеют вид

$$\langle x \rangle' = \langle x \rangle - \gamma (\alpha_3 + 3\langle x \rangle \alpha_2 + \langle x \rangle^3), \quad (6)$$

$$\alpha_n' / n = \alpha_n - \gamma \langle x^{[n-1]}, x^3 \rangle, \quad n = 2, 3, \dots$$

(Здесь и ниже используем принятые в монографии [7] обозначения кумулянтных скобок.) Естественно, последнее среднее в (6) должно быть выражено через кумулянты α_n , но сделать это для произвольного n затруднительно. В силу нелинейности исходного уравнения (2) цепочки (5), (6) не замкнуты.

2. Поскольку в уравнении (2) линейные потери отрицательны, применять для анализа методы, основанные на малости нелинейности (в частности, замыкать цепочки уравнений релаксации в соответствии с цепными дробями для стационарных значений моментов [8]), здесь нельзя. Для замыкания систем (5) или (6) используем развитый в монографии [7] кумулянтный подход. А именно, в разложении старших моментов в (5) или смешанной моментно-кумулянтной скобки в (6) по кумулянтам опустим старшие кумулянты, описывающие статистические связи высших порядков (в уравнении для n -го кумулянта - кумулянты $(n+1)$ -го и $(n+2)$ -го порядков). Отметим, что, если ограничиться приближением невысокого порядка, например, эксцессным (полагая $\alpha_n = 0$ для $n = 5, 6, \dots$), удобнее работать с кумулянтами, исходя из системы (6), а для построения высших приближений - с системой для моментов (5), используя «бескумулянтное» разложение старших моментов, приведенное в Приложении.

Система уравнений эксцессного приближения для рассматриваемой задачи, записанная для кумулянтов, имеет вид

² На основании (1) и (3) можно выразить стационарные моменты координат через функции параболического цилиндра $D_\alpha(z)$ [6]

$$\langle x^{2n} \rangle_{ст} = \Gamma(n+1/2) \pi^{-1/2} (2D/\gamma)^{n/2} D_{-(n+1/2)}(-1/(2\gamma D)^{1/2}) D_{-1/2}^{-1}(-1/(2\gamma D)^{1/2})$$

(здесь Γ - гамма-функция), практически же удобнее искать их численным интегрированием.

$$\begin{aligned} \bar{x}_1' &= \bar{x}_1 - \gamma(\bar{x}_3 + 3\bar{x}_1\bar{x}_2 + \bar{x}_1^3), \\ 1/2 \bar{x}_2' &= \bar{x}_2 - \gamma(\bar{x}_4 + 3\bar{x}_1\bar{x}_3 + 3\bar{x}_2^2 + 3\bar{x}_1^2\bar{x}_2) + D, \\ 1/3 \bar{x}_3' &= \bar{x}_3 - \gamma(3\bar{x}_1\bar{x}_4 + 9\bar{x}_2\bar{x}_3 + 3\bar{x}_1^2\bar{x}_3 + 6\bar{x}_1\bar{x}_2^2), \\ 1/4 \bar{x}_4' &= \bar{x}_4 - \gamma(12\bar{x}_2\bar{x}_4 + 3\bar{x}_1^2\bar{x}_4 + 9\bar{x}_2^3 + 18\bar{x}_1\bar{x}_2\bar{x}_3 + 6\bar{x}_2^3). \end{aligned} \quad (7)$$

Напомним, что $\bar{x}_1 = \langle x(t) \rangle$, $\bar{x}_2 = D_x(t)$ - соответственно, среднее значение и дисперсия координат; третий кумулянт характеризует асимметрию вероятностного распределения. Начальные условия задаем детерминированными ($\langle x(0) \rangle = x_0$, $\bar{x}_n(0) = 0$, $n=2,3,\dots$) либо гауссовыми, когда отлична от нуля и начальная дисперсия D_0 , а высшие кумулянты равны нулю.

Корректность используемой численной процедуры контролируем путем сравнения стационарного значения дисперсии, найденного из уравнений релаксации³, с соответствующим результатом, полученным интегрированием больцмановского распределения (4). Как показывает численный анализ, основанный на «бескумулянтном» разложении высших моментов (П.4), (П.5), система эксцессного приближения (7) адекватно описывает релаксацию нескольких первых кумулянтов при выполнении условия

$$\gamma \geq 1/4, \quad \gamma D \geq 1, \quad (8)$$

то есть если потенциальный барьер не слишком высокий, а шум достаточно интенсивный.

3. Проанализируем теперь результаты, полученные указанным образом. Рис. 1, а иллюстрирует зависимость релаксации первых трех кумулянтов от нелинейности γ , которая в данном случае характеризует координату и глубину потенциальных ям. Здесь и ниже вместо дисперсии приведены графики для $\sigma = D_x^{1/2}$. Поскольку $\bar{x}_3 < 0$, для компактности рисунков используем модуль $|\bar{x}_3|$. На рис. 1, б показан соответствующий потенциальный профиль. На всех рисунках буквенные индексы обозначают: $\langle x \rangle$ - среднее значение координат, σ - среднеквадратичное отклонение, \bar{x} - третий кумулянт. Начальное распределение частиц полагаем

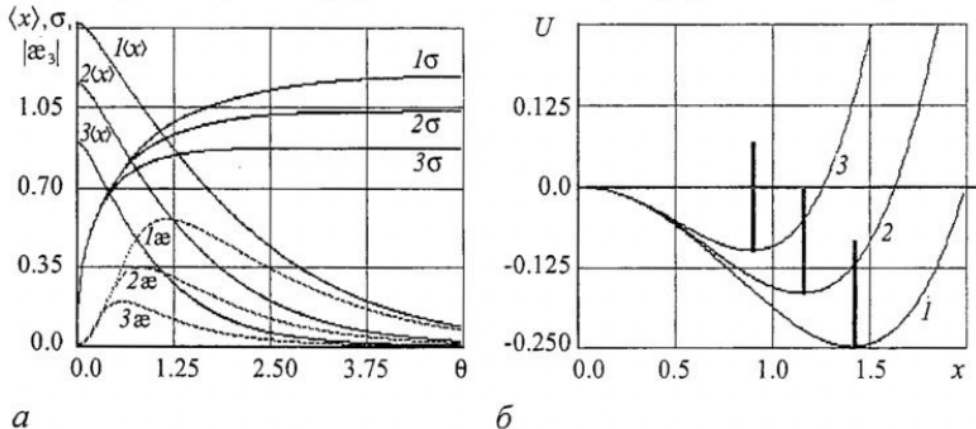
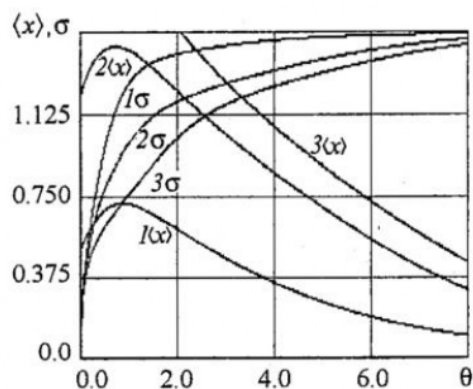
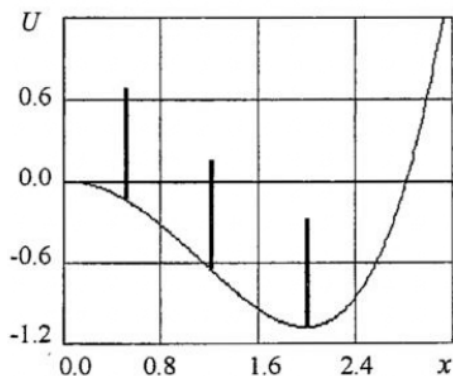


Рис. 1, а - Влияние нелинейности на процесс релаксации при $D=1$ для следующих значений γ : 1 - 0.5; 2 - 0.75; 3 - 1.25. б - Потенциальный рельеф для приведенных кривых; вертикальные прямые - начальное распределение частиц

³В эксцессном приближении стационарное значение дисперсии есть действительный корень кубического уравнения $D_x^3 - D_x^2/(2\gamma) + D_x(1-12\gamma D)/30 + D/30 = 0$.



a



б

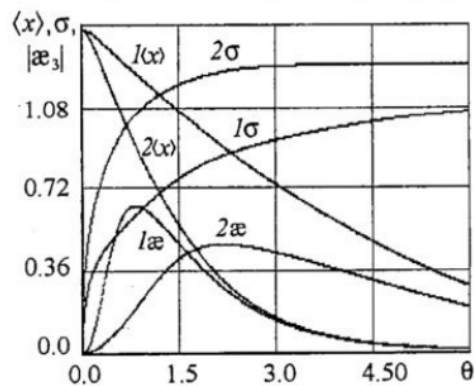
Рис. 2, *a* - Зависимость релаксации от начальной координаты частиц x_0 : 1 - 0.5; 2 - 1.25; 3 - 2.0. $D=0.75, \gamma=0.25$. *б* - Потенциальный рельеф и начальное распределение для приведенных кривых

дельта-функций в правом минимуме потенциала. В силу симметрии кривые для потенциала и стационарного вероятностного распределения на рис. 1, *б*, рис. 2, *б*, рис. 3, *б* построены только для положительных значений x .

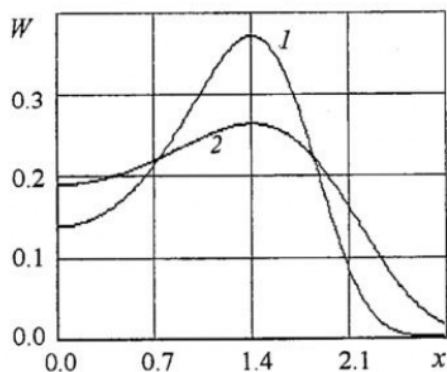
С ростом γ (то есть с уменьшением потенциального барьера) релаксация идет быстрее, что вполне естественно. Отметим, что дисперсия устанавливается быстрее, чем среднее значение и третий кумулянт, причем асимптотика последних одинакова. Таким образом, временем релаксации вероятностного распределения или временем преодоления потенциального барьера здесь следует считать время установления симметрии распределения, то есть время релаксации среднего значения и третьего кумулянта, которые отличаются весьма мало.

Рис. 2, *a* показывает зависимость релаксации среднего значения и среднеквадратичного отклонения от выбора начальной координаты частиц x_0 . Отметим, что при задании x_0 на склоне барьера среднее значение релаксирует немонотонно (кривые 1, 2), то есть сначала частицы, в основном, скатываются в ближний потенциальный минимум. На кривой 3, соответствующей начальному распределению в минимуме потенциала, как и при выборе x_0 правее, максимума нет.

На рис. 3 показана зависимость релаксации кумулянтов от интенсивности шума D и приведены соответствующие стационарные вероятностные распределения (начальное дельта-распределение по-прежнему задаем в минимуме



a



б

Рис. 3, *a* - Зависимость релаксации от интенсивности шума при $\gamma=0.5$ для следующих значений D : 1 - 0.5; 2 - 1.5. *б* - Стационарное вероятностное распределение для приведенных кривых

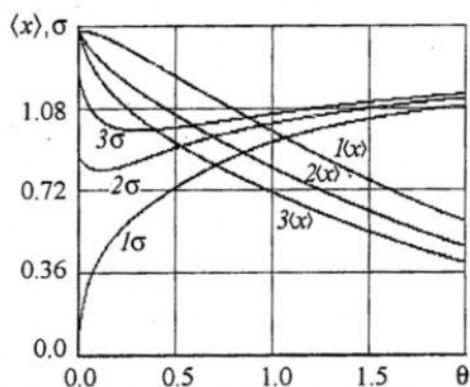


Рис. 4. Влияние начального распределения частиц на процесс релаксации при $D=1.0$, $\gamma=0.5$ для следующих значений D_0 : 1 - 0.0; 2 - 0.75; 3 - 1.5

потенциала). Видно, что с ростом шума установление кумулянтов (особенно дисперсии) происходит быстрее.

Зададим теперь гауссовы начальные условия с отличной от нуля дисперсией D_0 и средним значением в минимуме потенциала. На рис. 4 показано влияние ширины начального распределения частиц на процесс релаксации. Отметим наличие минимума в процессе установления дисперсии, означающего «группировку» частиц на начальной стадии. Заметим также, что релаксация в случае гауссова начального распределения идет несколько быстрее, чем в случае дельта-распределения.

4. Попытаемся установить количественную зависимость времени релаксации вероятностного распределения координат от интенсивности шума D и параметра γ . Заметим, что если ввести переменную $y=\gamma^{1/2}x$, то уравнения релаксации моментов (5) примут вид

$$\langle y^n \rangle' / n = \langle y^n \rangle - \langle y^{n+2} \rangle + (n-1)\gamma D \langle y^{n-2} \rangle, \quad n = 1, 2, \dots \quad (9)$$

Отсюда ясно, что времена релаксации всех моментов, а значит и время установления вероятностного распределения, определяются произведением $\beta=\gamma D$.

Определим безразмерное время релаксации τ_z некоторой вероятностной характеристики $z(\theta)$ как промежуток времени, после которого величина этой характеристики, нормированная на максимум, отлична от соответствующего стационарного значения менее чем на заданную величину ϵ .

Зависимости времен релаксации среднего значения $\tau_{\langle x \rangle}$ и дисперсии τ_D от параметра β показаны в таблице. Первая цифра в каждой клетке соответствует начальному дельта-распределению частиц в минимуме потенциала (и может рассматриваться как время преодоления потенциального барьера), а вторая - распределению в точке $x=0$. Как и на рис. 1 и 3, видно уменьшение времени релаксации с ростом β , то есть с увеличением интенсивности шума и уменьшением потенциального барьера.

Видно также, что изменение координаты начальной локализации частиц практически не влияет на время установления среднего значения, хотя существенно влияет (особенно при $\beta < 1$) на время релаксации дисперсии распределения.

Таблица

Зависимость времени релаксации среднего значения $\tau_{\langle x \rangle}$ и дисперсии τ_{D_x} от параметра β ($\epsilon=0.1$)

β	0.25	0.5	1.0	1.5	2.0	3.0	4.0
$\tau_{\langle x \rangle}$	7.4, 7.0	4.2, 4.2	2.5, 2.5	1.9, 1.9	1.6, 1.6	1.2, 1.2	1.0, 1.0
τ_{D_x}	5.1, 1.0	2.5, 0.8	1.4, 0.5	1.0, 0.4	0.8, 0.4	0.6, 0.3	0.5, 0.3

Численный анализ показывает, что в области значений параметров (8) время релаксации среднего значения хорошо аппроксимируется выражением

$$\tau_{(x)} = C / (\gamma D)^{2/3}, \quad (10)$$

где величина константы C зависит от ϵ (например, для $\epsilon=0.1$ значение $C=2.5$). Это иллюстрирует рис. 5, где прямые линии соответствуют формуле (10), а кружки - расчетным значениям $\tau_{(x)}$. Естественно, эмпирическая формула (10) не универсальна, а характеризует процесс броуновской диффузии под действием достаточно интенсивного шума в потенциальном профиле с «неглубокими ямами».

Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант 02-02-17517, и Ведущих научных школ РФ, грант НШ-1729.2003.2.

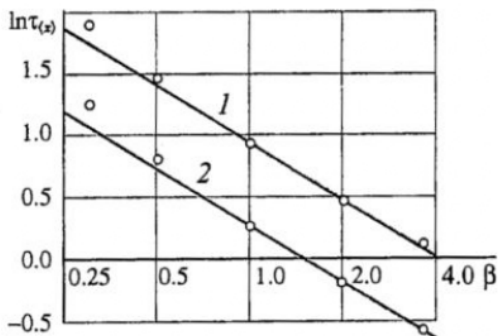


Рис. 5. Время релаксации среднего значения для $\epsilon=0.1$ (кривая 1) и $\epsilon=1/\epsilon$ (кривая 2)

шума в потенциальном профиле с

Приложение

«Бескумулянтное» разложение моментов

При решении стохастических дифференциальных уравнений со степенной или полиномиальной нелинейностью возникают иерархические цепочки уравнений для моментов выходных переменных, например (5) (или, в общем случае, для совместных моментов совокупности случайная сила - выходные переменные). Для замыкания таких цепочек в n -м приближении, не прибегая к существенно более сложной цепочке для кумулянтов, например (7), нужно разложить $(n+1)$ -й момент по моментам порядков $1, 2, \dots, n$. Эти разложения нетрудно найти, исходя из известной формулы, связывающей моменты $m_n = \langle x^n \rangle$ и кумулянты α_n произвольного вероятностного распределения [7]

$$m_n = \sum_{k=1}^n C_{n-1}^{k-1} m_{n-k} \alpha_k. \quad (\text{П.1})$$

Запишем ее в следующих эквивалентных формах

$$m_{n+1} = \alpha_{n+1} + \sum_{s=0}^{n-1} C_n^s m_{n-s} \alpha_{s+1}, \quad (\text{П.2})$$

$$\alpha_{k+1} = m_{k+1} - \sum_{s=0}^{k-1} C_k^s m_{k-s} \alpha_{s+1}. \quad (\text{П.3})$$

Затем последовательно заменяем старшие кумулянты в сумме (П.2) моментами с помощью (П.3). Таким образом приходим к разложению вида

$$m_{n+1} = \alpha_{n+1} + \sum_{k=1}^n A_{n,k} (m_1, \dots, m_k) m_{n-k+1}, \quad (\text{П.4})$$

где «коэффициенты» A определяются рекуррентной формулой

$$A_{n,k} = C_n^k m_k - \sum_{i=1}^{k-1} m_{k-i} C_{n-i}^{k-i} A_{n,i}. \quad (\text{П.5})$$

Опустив старший кумулянт в (П.4), приходим к «бескумулянтным» разложениям моментов, замыкающим указанные выше цепочки в n -м кумулянтном приближении. В частности,

$$\begin{aligned}\langle r^3 \rangle &\approx 3\langle r \rangle \langle r^2 \rangle - 2\langle r \rangle^3, \quad \langle r^4 \rangle \approx 4\langle r \rangle \langle r^3 \rangle + 3\langle r^2 \rangle^2 - 12\langle r \rangle^2 \langle r^2 \rangle + 6\langle r \rangle^4, \\ \langle r^5 \rangle &\approx 5\langle r \rangle \langle r^4 \rangle + 10\langle r^2 \rangle \langle r^3 \rangle - 20\langle r \rangle^2 \langle r^3 \rangle - 30\langle r \rangle \langle r^2 \rangle^2 + 60\langle r \rangle^3 \langle r^2 \rangle - 24\langle r \rangle^5.\end{aligned}\tag{П.6}$$

Для высших моментов указанная процедура легко реализуется на компьютере. Нетрудно также обобщить приведенные здесь соотношения на совместные моменты совокупности статистически связанных случайных величин.

Библиографический список

1. Хорстхемке В., Лефевр Р. Индуцированные шумом переходы: теория и применение в физике, химии и биологии. М.: Мир, 1987.
2. Дынкин Е.Б. Марковские процессы. М.: Физматгиз, 1963.
3. Кляцкин В.И. Стохастические уравнения и волны в случайно-неоднородных средах. М.: Наука, 1980.
4. Malakhov A.N. Time scales overdamped nonlinear Brownian motion in arbitrary potential profiles // Chaos. 1997. Vol. 7, № 3. P. 488.
5. Pankratov A.L. Time evolution of averages in dynamical systems driven by noise // Physics Letters A. 1999. Vol. 255. P. 17.
6. Градштейн И.С., Рыжик И.М. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. М.: Физматгиз, 1962.
7. Малахов А.Н. Кумулянтный анализ негауссовых случайных процессов и их преобразований. М.: Сов. радио, 1978.
8. Музычук О.В. Прямой метод численного анализа релаксации вероятностных характеристик броуновского движения // Изв. вузов. Радиофизика. 1999. Т. 42, № 9. С. 922.

Нижегородский
архитектурно-строительный
университет

Поступила в редакцию 31.07.02
после доработки 30.05.03

BROWNIAN DIFFUSION IN THE SYMMETRICAL BIMODAL POTENTIAL: CUMULANT APPROACH

O.V. Muzychuk

The relaxation of one-dimensional Brownian motion's probability characteristics of coordinates at the symmetrical potential profile having two stable states is considered. We used for the analysis cumulant approach based on breaking the chain of relaxation equations for moments (or cumulants) of partial's coordinates by the higher cumulants negligence.

The relaxation of three first cumulants is investigated by numerical way. The dependence of relaxation times of mean value and variance on the noise intensity, potential pit depth, initial conditions are obtained.



Музычук Олег Владимирович - родился в 1947 году. Окончил радиофизический факультет Горьковского университета (1970). Работал на кафедре бионики и статистической радиофизики ГГУ. Защитил кандидатскую диссертацию в области исследования линейных стохастических систем (1978). С 2001 года - доктор физико-математических наук. С 1978 года работает на кафедре физики Нижегородского архитектурно-строительного университета. Круг интересов - статистическая радиофизика, нелинейная динамика, вероятностное описание динамических систем, находящихся под воздействием интенсивных случайных сил. Автор более 40 статей в центральных научных журналах.

E-mail: physics @ bi-zed.da.ru